

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΑΣ

Διπλωματική Εργασία

**ΕΠΙΛΥΣΗ ΑΡΑΙΟΠΟΙΗΜΕΝΗΣ ΡΟΗΣ ΣΕ ΚΟΙΛΟΤΗΤΑ ΜΕ ΤΗ
ΜΕΘΟΔΟ ΑΠΕΥΘΕΙΑΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΜΟΝΤΕ CARLO ΣΕ
ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ ΟΡΕΝΦΟΑΜ**

ΥΠΟ

ΧΡΗΣΤΟΥ ΤΑΝΤΟΥ

Υπεβλήθη για την εκπλήρωση μέρους των
απαιτήσεων για την απόκτηση του
Διπλώματος Μηχανολόγου Μηχανικού Βιομηχανίας

2011



**ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ & ΚΕΝΤΡΟ ΠΛΗΡΟΦΟΡΗΣΗΣ
ΕΙΔΙΚΗ ΣΥΛΛΟΓΗ «ΓΚΡΙΖΑ ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ»**

Αριθ. Εισ.: 9732/1
Ημερ. Εισ.: 18-07-2011
Δωρεά: Συγγραφέα
Ταξιθετικός Κωδικός: ΠΤ – ΜΜ
2011
ΤΑΝ

© 2011 Χρήστος Τάντος

Η έγκριση της διπλωματικής εργασίας από το Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών Βιομηχανίας 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 Καθηγητής Δημήτριος Βαλουγεώργης
(Επιβλέπων)

Δεύτερος Εξεταστής Καθηγητής Βασίλης Μποντόζογλου

Τρίτος Εξεταστής Διδάκτωρ Νάρης Στέργιος

Ευχαριστίες

Πρώτα απ' όλα, θέλω να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα της διπλωματικής εργασίας μου, καθηγητή Δρ. Δημήτριο Βαλουγεώργη, για την πολύτιμη βοήθεια και καθοδήγησή του κατά τη διάρκεια της δουλειάς μου. Επίσης, είμαι ευγνώμων στα άλλα δύο μέλη της εξεταστικής επιτροπής της διπλωματικής εργασίας μου.

Επίσης, ευχαριστώ θερμά τον υποψήφιο διδάκτορα Σαράντη Πανταζή για την ενεργό υποστήριξη και συνεχή βοήθεια στη διάρκεια της διπλωματικής εργασίας μου. Ευχαριστώ τον συναδέλφό μου Αναστάσιο Ποτέα και τη Βαλίλα Γιαννουτάκη για τη συμπαράστασή τους και την κατανόησή τους κατά τη διάρκεια εκπόνησης της διπλωματικής μου εργασίας.

Πάνω απ' όλα, είμαι ευγνώμων στους γονείς μου, Θεόδωρο και Παναγιώτα Τάντου για την ολόψυχη αγάπη και υποστήριξή τους όλα αυτά τα χρόνια. Αφιερώνω αυτή την εργασία στην μητέρα μου και στον πατέρα μου.

Χρήστος Τάντος

ΕΠΙΛΥΣΗ ΑΡΑΙΟΠΟΙΗΜΕΝΗΣ ΡΟΗΣ ΣΕ ΚΟΙΛΟΤΗΤΑ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΑΠΕΥΘΕΙΑΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ MONTE CARLO (DSMC) ΣΕ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ OPENFOAM

ΧΡΗΣΤΟΥ ΤΑΝΤΟΥ

Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών Βιομηχανίας, 2011

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

Περίληψη

Τα τελευταία χρόνια παρατηρείται μια στροφή της επιστημονικής κοινότητας για τον τομέα της δυναμικής των αραιοποιημένων αερίων. Το γεγονός αυτό οφείλεται στην εμφάνιση νέων εξελίξεων στους τομείς της αεροδιαστημικής, στην τεχνολογία κενού και στη νανοτεχνολογία. Η αραιοποίηση του αερίου ορίζεται από τον αδιάστατο ορισμό Knudsen (Kn), ο οποίος ορίζεται ως το πηλίκο της μέσης ελεύθερης διαδρομής προς το χαρακτηριστικό μήκος του εκάστοτε προβλήματος. Για τιμές του αριθμού Knudsen μεγαλύτερες του 0.1 η θεωρία του συνεχούς μέσου καταρρέει και οι γνωστές υδροδυναμικές εξισώσεις Navier-Stokes παύουν να ισχύουν. Στις περιπτώσεις αυτές η αντιμετώπιση του προβλήματος βασίζεται στην κινητική θεωρία των αερίων η οποία περιλαμβάνει δύο βασικές προσεγγίσεις. Η πρώτη στηρίζεται στην εύρεση της συνάρτησης πυκνότητας – πιθανότητας της εξίσωσης Boltzmann. Η δεύτερη που αποτελεί και το αντικείμενο της παρούσας διπλωματικής είναι η μέθοδος Direct Simulation Monte Carlo(DSMC). Στο πλαίσιο αρχικά παρουσιάζεται η μέθοδος DSMC μέσα από την επίλυση του προβλήματος ροή θερμότητας ανάμεσα σε δύο παράλληλες πλάκες. Στη συνέχεια, γίνεται η παρουσίαση της υπολογιστικής πλατφόρμας OpenFOAM καθώς και του λύτη dsmcFoam που φιλοξενείται σε αυτή μοντελοποιώντας το πρόβλημα ροής σε κοιλότητα με κοινούμενο τοίχωμα. Τέλος, γίνεται ο έλεγχος της ορθότητας των αποτελεσμάτων του λύτη dsmcFoam, καθώς και η παράξη αποτελεσμάτων για ένα ευρύ φάσμα των αριθμών Knudsen και Mach (Ma).

Πίνακας Περιεχομένων

| | |
|--|----|
| _Toc297915068 | |
| Ευρετήριο Σχημάτων..... | 8 |
| Ευρετήριο Εικόνων..... | 11 |
| Ευρετήριο Πινάκων..... | 12 |
| Κεφάλαιο 1: Εισαγωγή..... | 13 |
| 1.1 Βασικές Έννοιες..... | 13 |
| 1.2 Περιεχόμενο διπλωματικής εργασίας..... | 15 |
| Κεφαலைο 2: Βιβλιογραφική ανασκόπηση..... | 17 |
| Κεφάλαιο 3: Περιγραφή της μεθόδου DSMC..... | 20 |
| 3.1 Εισαγωγή..... | 20 |
| 3.2 Περιγραφή πρότυπου προβλήματος..... | 20 |
| 3.3 Σύντομη περιγραφή του αλγορίθμου DSMC..... | 21 |
| 3.4 Το κύριο τμήμα του προγράμματος..... | 24 |
| 3.5 Βασικές υπορουτίνες..... | 26 |
| 3.5.1 Υπορουτίνα INIT..... | 26 |
| 3.5.2 Υπορουτίνα MOVE..... | 32 |
| 3.5.3 Υπορουτίνα INDE..... | 35 |
| 3.5.4 Υπορουτίνα COLL..... | 38 |
| 3.5.5 Υπορουτίνα SAMPLE..... | 43 |
| 3.5.6 Υπορουτίνα INIT2..... | 46 |
| 3.5.7 Υπορουτίνα INIT1..... | 47 |
| Κεφάλαιο 4: Περιβάλλον dsmcFoam μέσα από την επίλυση του προβλήματος ροής σε κοιλότητα..... | 48 |
| 4.1 Εισαγωγή..... | 48 |
| 4.2 Περιγραφή του προβλήματος..... | 48 |
| 4.3 Τα αρχεία του λύτη dsmcFoam..... | 48 |
| 4.3.1 Δημιουργία πλέγματος και καθορισμός ιδιοτήτων (φάκελος «constant»..... | 49 |
| 4.3.2 Προσδιορισμός αρχικών ποσοτήτων (φάκελος «0»)..... | 54 |
| 4.3.3 Προσδιορισμός συμπληρωματικών ποσοτήτων (φάκελος «system»)..... | 57 |
| Κεφάλαιο 5: Αποτελέσματα και σχολιασμός..... | 68 |
| 5.1 Εισαγωγή..... | 68 |
| 5.2 Αποτελέσματα στη γραμμική περιοχή..... | 68 |

| | |
|--|-----|
| 5.3 Αποτελέσματα στη μη γραμμική περιοχή..... | 73 |
| 5.4 Αντιπροσωπευτικά αποτελέσματα σε μεγάλο εύρος του αριθμού Mach..... | 76 |
| Κεφάλαιο 6: Συμπεράσματα και προτάσεις για μελλοντική δουλειά | 106 |
| Αναφορές..... | 107 |
| Παράρτημα Α: Επιπρόσθετες συναρτήσεις και υπορουτίνες..... | 108 |
| Παράρτημα Β: Εγκατάσταση του OpenFOAM..... | 110 |
| Παράρτημα Γ: Αρχεία OpenFOAM..... | 112 |
| Γ.1 Αρχεία φακέλου "0"..... | 112 |
| Γ.2 Τμήματα αρχείου "controlDict"..... | 117 |
| Γ.3 Αρχεία φακέλου "system"..... | 118 |
| Γ.3 Αρχεία ελέγχου προγράμματος OpenFOAM..... | 120 |

Ευρετήριο Σχημάτων

| | |
|---|----|
| Σχήμα 3.1: Ροή ρευστού σε παράλληλες πλάκες..... | 21 |
| Σχήμα 3.2: Διάγραμμα ροής..... | 23 |
| Σχήμα 3.3: Εύρεση της θέσης του σωματιδίου x | 31 |
| Σχήμα 3.4: Τελική θέση σωματιδίου..... | 34 |
| Σχήμα 3.5: Απεικόνιση του παραδείγματος 3 | 37 |
| Σχήμα 3.6: Απεικόνιση του παραδείγματος 3 | 41 |
| Σχήμα 3.8: Αντιστοιχία σωματιδίων στο διπλασιασμό..... | 46 |
| Σχήμα 4.1: Γεωμετρία κοιλότητας | 66 |
| Σχήμα 4.2: Υπολογιστικό πλέγμα..... | 66 |
| Σχήμα 4.3: Αντιστοιχία πλευρών πλέγματος..... | 67 |
| Σχήμα 4.4: Διαχυτική ανάκλαση..... | 67 |
| Σχήμα 4.5: Κατοπτρική ανάκλαση..... | 67 |
| Σχήμα 5.2.1: Γραμμές ροής ταχύτητας για Α) $\delta=1$ και $A=1$ πάνω και 0.5 κάτω, Β) $\delta=5$ και $A=1$ και 0.5, Γ) $\delta=10$ και $A=1$ πάνω και 0.5 κάτω..... | 83 |
| Σχήμα 5.2.2: Γραμμές ροής ταχύτητας με βάση το άρθρο [10] Α) $\delta=1$ και $A=1$ και 0.5, Β) $\delta=5$ και $A=1$ και 0.5, Γ) $\delta=10$ και $A=1$ και 0.5 | 84 |
| Σχήμα 5.2.3: Θέση του κέντρου της δίνης για διάφορες τιμές των δ και A | 85 |
| Σχήμα 5.2.4: Θέση του κέντρου της δίνης για διάφορες τιμές των δ και A από το άρθρο [10]..... | 85 |
| Σχήμα 5.2.5: Κατακόρυφη συνιστώσα της ταχύτητας για $\delta=0.1, 0.01, 1, 10$ και για $A=1$, όπως προκύπτουν από τον solver <code>dsmcFoam</code> | 86 |
| Σχήμα 5.2.6: Κατακόρυφη συνιστώσα της ταχύτητας για $\delta=0.1, 0.01, 1, 10$ και για $A=1$ όπως προκύπτουν από το άρθρο [10] | 86 |
| Σχήμα 5.2.8: Κατακόρυφη συνιστώσα της ταχύτητας για $\delta=0.1, 0.01, 1, 10$ και για $A=0.5$ όπως προκύπτουν από το άρθρο [10] | 86 |
| Σχήμα 5.2.7: Κατακόρυφη συνιστώσα της ταχύτητας $\delta=0.1, 0.01, 1, 10$ και για $A=0.5$ όπως προκύπτουν από τον solver <code>dsmcFoam</code> | 86 |
| Σχήμα 5.2.10: Οριζόντια συνιστώσα της ταχύτητας για $\delta=0.01, 1$ και για $A=0.5$ όπως προκύπτουν από το άρθρο [10] | 87 |
| Σχήμα 5.2.9: Οριζόντια συνιστώσα της ταχύτητας για $\delta=0.01, 1$ και για $A=0.5$ όπως προκύπτουν από τον solver <code>dsmcFoam</code> | 87 |
| Σχήμα 5.2.11: Οριζόντια συνιστώσα της ταχύτητας για $\delta=0.01, 1$ και για $A=1$ όπως προκύπτουν από τον solver <code>dsmcFoam</code> | 87 |

| | |
|---|----|
| Σχήμα 5.2.12: Οριζόντια συνιστώσα της ταχύτητας $\delta= 0.01, 1$ και για $A=1$ όπως προκύπτουν από το άρθρο [10]..... | 87 |
| Σχήμα 5.3.1: Η μεταβολή της οριζόντιας συνιστώσας της ταχύτητας κατά μήκος της γραμμής που διαπερνά το κέντρο του cavity με το OpenFOAM..... | 88 |
| Σχήμα 5.3.2: Η μεταβολή της οριζόντιας συνιστώσας της ταχύτητας κατά μήκος της γραμμής που διαπερνά το κέντρο του cavity με βάση το [11]..... | 88 |
| Σχήμα 5.3.3: Μεταβολή της κατακόρυφης συνιστώσας της ταχύτητας κατά μήκος της γραμμής που διέρχεται από το κέντρο του cavity με βάση Α) το OpenFOAM και Β) το άρθρο [11]..... | 89 |
| Σχήμα 5.3.4: Μεταβολή της κατακόρυφης συνιστώσας της ταχύτητας κατά μήκος της γραμμής που διέρχεται από το κέντρο του cavity με βάση Α) το OpenFOAM και Β) το άρθρο [11]..... | 89 |
| Σχήμα 5.3.5: Μεταβολή της οριζόντιας συνιστώσας της ταχύτητας κατά μήκος της γραμμής που διέρχεται από το κέντρο του cavity με βάση Α) το OpenFOAM και Β) το άρθρο [11]..... | 90 |
| Σχήμα 5.3.6: Ροϊκές γραμμές πάνω στο προφίλ της ταχύτητας στην κατακόρυφη κατεύθυνση για $Kn=1$ και Α) $U_w=10$ m/s, Β) $U_w=50$ m/s, Γ) $U_w=100$ m/s και Δ) $U_w=200$ m/s | 91 |
| Σχήμα 5.3.7: Μεταβολές της θερμοκρασίας κατά μήκος της ευθείας που διέρχεται από το κέντρο της κοιλότητας για ταχύτητα κινούμενου τοιχώματος $U_w=50$ m/s και αριθμούς $Kn=0.5,1,2,8$ με το Α) OpenFOAM και Β) το άρθρο [11]..... | 92 |
| Σχήμα 5.3.8: Μεταβολές της πίεσης κατά μήκος της ευθείας που διέρχεται από το κέντρο της κοιλότητας για ταχύτητα κινούμενου τοιχώματος $U_w=50$ m/s και αριθμούς $Kn=0.5,1,2,8$ με το Α) OpenFOAM και Β) το άρθρο [11]. | 92 |
| Σχήμα 5.4.1: Ροϊκές γραμμές για $U_{wall}/u_0 = 0.2, A=1$ και Α) για $\delta=0.1$, Β) για $\delta=1$ και Γ) για $\delta=10$ | 93 |
| Σχήμα 5.4.2: Ροϊκές γραμμές για $U_{wall}/u_0 = 1 A=1$ και Α) για $\delta=0.1$, Β) για $\delta=1$ και Γ) για $\delta=10$ | 94 |
| Σχήμα 5.4.3: Ροϊκές γραμμές για $U_{wall}/u_0 = 4, A=1$ και Α) για $\delta=0.1$, Β) για $\delta=1$ και Γ) για $\delta=10$ | 94 |
| Σχήμα 5.4.4: Ροϊκές γραμμές για $U_{wall}/u_0 = 0.2, A=0.5$ και Α) για $\delta=0.1$, Β) για $\delta=1$ και Γ) για $\delta=10$ | 95 |
| Σχήμα 5.4.5: Ροϊκές γραμμές για $U_{wall}/u_0 = 1 A=0.5$ και Α) για $\delta=0.1$, Β) για $\delta=1$ και Γ) για $\delta=10$ | 96 |
| Σχήμα 5.4.6: Ροϊκές γραμμές για $U_{wall}/u_0=4, A=0.5$ και Α) για $\delta=0.1$, Β) για $\delta=1$ και Γ) για $\delta=10$ | 96 |

| | |
|--|-----|
| Σχήμα 5.4.7: Θέση του κέντρου της κύριας δίνης για διάφορες τιμές δ και για Α) $A=1$ και Β) $A=0.5$ | 97 |
| Σχήμα 5.4.8: Μεταβολή της οριζόντιας συνιστώσας u και της κάθετης συνιστώσας v της ταχύτητας κατά μήκος της ευθείας που διέρχεται από το κέντρο της κοιλότητας για $A=1$ και για Α) $U_{wall}/u_0 = 0.2$, Β) $U_{wall}/u_0 = 1$ και Γ) $U_{wall}/u_0 = 4$...98 | 98 |
| Σχήμα 5.4.9: Μεταβολή της οριζόντιας συνιστώσας u και της κάθετης συνιστώσας v της ταχύτητας κατά μήκος της ευθείας που διέρχεται από το κέντρο της κοιλότητας για $A=0.5$ και για Α) $U_{wall}/u_0 = 0.2$, Β) $U_{wall}/u_0 = 1$ και Γ) $U_{wall}/u_0 = 4$ | 99 |
| Σχήμα 5.4.10: Θερμοκρασιακό πεδίο για $U_{wall}/u_0 = 0.2$ $A=1$ και Α) για $\delta=0.1$, Β) για $\delta=1$ και Γ) για $\delta=10$ | 100 |
| Σχήμα 5.4.11: Θερμοκρασιακό πεδίο για $U_{wall}/u_0 = 1$, $A=1$ και Α) για $\delta=0.1$, Β) για $\delta=1$ και Γ) για $\delta=10$ | 100 |
| Σχήμα 5.4.12: Θερμοκρασιακό πεδίο για $U_{wall}/u_0 = 4$, $A=1$ και Α) για $\delta=0.1$, Β) για $\delta=1$ και Γ) για $\delta=10$ | 101 |
| Σχήμα 5.4.13: Μεταβολή της θερμοκρασίας κατά μήκος της οριζόντιας γραμμής που διέρχεται από το κέντρο της κοιλότητας για $A=1$ και Α) για $U_{wall}/u_0 = 0.2$, Β) για $U_{wall}/u_0 = 1$ και Γ) για $U_{wall}/u_0 = 4$ | 102 |
| Σχήμα 5.4.14: Θερμοκρασιακό πεδίο για $A=0.1$ και Α) για $\delta=0.1$, Β) για $\delta=1$ και Γ) για $\delta=10$ | 103 |
| Σχήμα 5.4.15: Θερμοκρασιακό πεδίο για $A=1$ και Α) για $\delta=0.1$, Β) για $\delta=1$ και Γ) για $\delta=10$ | 104 |
| Σχήμα 5.4.16: Θερμοκρασιακό πεδίο για $A=4$ και Α) για $\delta=0.1$, Β) για $\delta=1$ και Γ) για $\delta=10$ | 104 |
| Σχήμα 5.4.17: Μεταβολή της πίεσης κατά μήκος της οριζόντιας γραμμής που διέρχεται από το κέντρο της κοιλότητας για $A=1$ και Α) για $U_{wall}/u_0 = 0.2$, Β) για $U_{wall}/u_0 = 1$ και Γ) για $U_{wall}/u_0 = 4$ | 105 |

Ευρετήριο Εικόνων

| | |
|--|----|
| Εικόνα 3.1: Όρια κελιών | 28 |
| Εικόνα 4.1: Δημιουργία πλέγματος ("blockMeshDict") | 60 |
| Εικόνα 4.2: Προσδιορισμός ποσοτήτων πλέγματος στα όρια του προβλήματος ("boundary") | 61 |
| Εικόνα 4.3: Παράμετροι αλγορίθμου ("dsmcProperties") | 62 |
| Εικόνα 4.4: Προσδιορισμός θερμοκρασίας στα όρια του προβλήματος ("boundaryT") | 63 |
| Εικόνα 4.6: Κοινό μέρος αρχείων | 64 |
| Εικόνα 4.7: Χρονικοί παράμετροι του αλγορίθμου ("controlDict") | 64 |
| Εικόνα 4.8: Παράμετροι αλγορίθμου ("dsmcInitialiseDict") | 65 |

Ευρετήριο Πινάκων

| | |
|--|----|
| Πίνακας 4.1: Καθορισμός μονάδων μέτρησης στο dimensions..... | 53 |
| Πίνακας 4.2: Επεξήγηση αρχείων..... | 55 |
| Πίνακας 4.3: Επεξήγηση Μονάδων των αρχείων..... | 56 |
| Πίνακας 5.1: Αποτελέσματα του flow rate για διάφορες τιμές του δ και A..... | 71 |
| Πίνακας 5.2: Αποτελέσματα του Drag coefficient για διάφορες τιμές του δ και A..... | 72 |
| Πίνακας 5.3.1: Το κέντρο της δίνης για A) για $Kn=8$ και B) για $Kn=0.1$ | 73 |
| Πίνακας 5.4.1: Θέσεις των κέντρων των δινών για A=1 και για διάφορες περιπτώσεις του δ και του U_{wall} / u_0 | 80 |
| Πίνακας 5.4.2: Θέσεις των κέντρων των δινών για A=0.5 και για διάφορες περιπτώσεις του δ και του U_{wall} / u_0 | 80 |
| Πίνακας 5.4.3: Τιμές για παροχή και οπίσθελξη για όλες τις εξεταζόμενες περιπτώσεις..... | 81 |

Κεφάλαιο 1 Εισαγωγή

1.1 Βασικές Έννοιες

Η τεχνολογία κενού, η μικρορευστοδυναμική και η αεροδιαστημική αποτελούν μερικά από τα νέα εξελισσόμενα επιστημονικά πεδία [1]. Τα τελευταία χρόνια παρατηρείται η ανάγκη ανάπτυξης των τεχνολογικών εφαρμογών στα προαναφερθέντα επιστημονικά πεδία. Πρόκειται για δύσκολο εγχείρημα αφού υπάρχει η δυσκολία της πλήρους κατανόησης των φυσικών φαινομένων που εμφανίζονται στο σχεδιασμό και στην παραγωγή συσκευών. Κοινό χαρακτηριστικό των εμφανιζόμενων φαινομένων ροής είναι ότι βρίσκονται εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας. Όμως, την τελευταία δεκαετία παρατηρείται μια σημαντική προσπάθεια κατανόησης και μοντελοποίησης των φαινομένων αυτών που στοχεύει στη βελτίωση του σχεδιασμού, της παραγωγής και της χρήσης των συσκευών [2].

Είναι χρήσιμο να εισαχθεί ο ορισμός ενός συστήματος που βρίσκεται εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας καθώς και η διαφοροποίηση του από ένα σύστημα σε θερμοδυναμική ισορροπία. Για τα αέρια ορίζεται ως μέση ελεύθερη διαδρομή λ η μέση απόσταση που διανύουν τα μόρια ανάμεσα σε δύο συγκρούσεις. Υποθέτοντας ότι τα μόρια συμπεριφέρονται σαν σκληρές σφαίρες [2] η μέση ελεύθερη διαδρομή ορίζεται από τη σχέση:

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}n\pi d^2 \sqrt{\frac{4}{\pi}}} \approx \frac{1}{\sqrt{2}n\pi d^2} \quad (1.1)$$

όπου n η αριθμητική πυκνότητα (αριθμός μορίων ανά μονάδα όγκου) και d η μοριακή διάμετρος .

Η υπόθεση του συνεχούς μέσου ισχύει όταν η μέση ελεύθερη διαδρομή λ είναι πολύ μικρότερη από ένα χαρακτηριστικό μήκος L ($\lambda \ll L$). Όταν η υπόθεση αυτή παραβιάζεται, τότε θεωρείται ότι το σύστημα βρίσκεται εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας και οι καταστατικές εξισώσεις Newton και Fourier καθώς και οι συνθήκες μη ολίσθησης παύουν να ισχύουν.

Ο λόγος της μέσης ελεύθερης διαδρομής προς ένα χαρακτηριστικό μήκος L ορίζει τον αριθμό Knudsen (Kn).

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \quad (1.2)$$

Η προσέγγιση του συνεχούς μέσου με χρήση των εξισώσεων Navier Stokes ισχύει για $Kn < 10^{-3}$. Για τις περιπτώσεις που ο αριθμός Kn κυμαίνεται από 10^{-3} έως 10^{-1} η προσέγγιση του συνεχούς μέσου ισχύει κάνοντας ταυτόχρονα χρήση οριακών συνθηκών ολίσθησης και άλματος. Η μελέτη των φαινομένων μεταφοράς και των ρευστών εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας $Kn > 0.1$ έχει δυσκολία, επειδή αυτά τα φαινόμενα δεν καλύπτονται από τις γνωστές μεθόδους επίλυσης εξισώσεων Euler και Navier-Stokes. Υπάρχει η ανάγκη μιας άλλης προσέγγισης που πηγάζει από το γεγονός, ότι η θεωρία του συνεχούς μέσου δεν επαρκεί σε αυτές τις περιπτώσεις. Υπάρχει βέβαια, η προσπάθεια εξέλιξης της θεωρίας του συνεχούς μέσου εφαρμόζοντας τις οριακές συνθήκες ολίσθησης στις εξισώσεις Navier-Stokes και άλλες εξισώσεις πιο γενικές, όπως οι εξισώσεις Burnett που παρουσιάζουν ιδιαίτερο πρόβλημα επίλυσης. Όμως οι πλέον αποτελεσματικές προσεγγίσεις είναι η κινητική θεωρία [3] και η απευθείας προσομοίωση Monte Carlo (Direct Simulation Monte Carlo: DSMC) [4].

Η κινητική θεωρία έχει σαν στόχο τον προσδιορισμό της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας, η οποία υπακούει στην εξίσωση Boltzmann και από την οποία μπορούν να υπολογιστούν τα μακροσκοπικά μεγέθη που ενδιαφέρουν στην εκάστοτε περίπτωση. Η εξίσωση του Boltzmann περιγράφεται από την ακόλουθη εξίσωση [5]:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_1 \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \mathbf{F} \nabla_{\boldsymbol{\xi}_1} \right) f_1 = \iiint (f_1' f_2' - f_1 f_2) g b d b d \varphi d \boldsymbol{\xi}_2 \quad (1.3)$$

όπου $f_1(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}_1, t)$ είναι η άγνωστη συνάρτηση κατανομής η οποία εκφράζει την πιθανότητα που έχει ένας ορισμένος αριθμός σωματιδίων με διάνυσμα θέσης \mathbf{r} να έχει ταχύτητα $\boldsymbol{\xi}_1$ την χρονική στιγμή t . Η ποσότητα $g = |\boldsymbol{\xi}_1 - \boldsymbol{\xi}_2|$ εκφράζει τη σχετική ταχύτητα των μορίων, ενώ η ποσότητα b ονομάζεται παράμετρος σύγκρουσης. Η παράμετρος φ εκφράζει τη στερεά γωνία σύγκρουσης των δύο σωματιδίων. Το αριστερό μέλος της εξίσωσης Boltzmann εκφράζει την ελεύθερη κίνηση των σωματιδίων κάτω από την επίδραση πιθανού πεδίου εξωτερικών δυνάμεων \mathbf{F} . Το

δεξί μέλος της εξίσωσης (1.3) που είναι ένα πενταπλό ολοκλήρωμα αντιπροσωπεύει τον όρο των συγκρούσεων και είναι μια μη γραμμική έκφραση. Λόγω της παρουσίας αυτού του όρου η λύση της εξίσωσης του Boltzmann είναι μη εφικτή. Για την αριθμητική επίλυση της εξίσωσης (1.3) σε καταστάσεις εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας γίνεται η χρήση κάποιων μοντέλων που σαν στόχο έχει την απλοποίηση των όρων των συγκρούσεων. Τα κυριότερα κινητικά μοντέλα είναι το Bhatnagar-Gross-Krook (BGK model) και το Shakhov (S model).

Η μέθοδος DSMC προτάθηκε από τον G.A. Bird το 1963 [4], και έχει στατιστικό χαρακτήρα. Βασίζεται στην απ' ευθείας προσομοίωση συγκεκριμένου αριθμού σωματιδίων που είναι πολύ μικρότερος από τον πραγματικό αριθμό μορίων της ροής. Οι συγκρούσεις που γίνονται είναι δυαδικές με αποτέλεσμα την αλλαγή των αρχικών ταχυτήτων των μορίων. Οι δυαδικές συγκρούσεις γίνονται μέσα από μια στατιστική διαδικασία. Σαν αποτέλεσμα αυτής της διαδικασίας, είναι η φυσική και στατιστική προσομοίωση της αλληλεπίδρασης πάρα πολλών πραγματικών μορίων. Η μέθοδος DSMC εφαρμόζεται σε μη γραμμικά προβλήματα και το κύριο χαρακτηριστικό της είναι η απλότητά της, ενώ ένα από τα μειονεκτήματά της είναι ο στατιστικός θόρυβος που παρουσιάζει σε έρπουσες ροές. Σε κάθε χρονική στιγμή και σε κάθε κελί του αριθμητικού πλέγματος με βάση τις θέσεις και τις ταχύτητες των υπολογιστικών μορίων υπολογίζονται τα μακροσκοπικά μεγέθη (ταχύτητα, θερμοκρασία κ.τ.λ). Μετά από ικανοποιητικό αριθμό χρονικών βημάτων (samples) η μέθοδος συγκλίνει. Τα τελευταία χρόνια η μέθοδος DSMC με την ανάπτυξη της υπολογιστικής ισχύος έχει βρεθεί στο επίκεντρο των επιστημονικών συζητήσεων.

1.2 Περιεχόμενο διπλωματικής εργασίας

Το περιεχόμενο της παρούσας διπλωματικής εργασίας επικεντρώνεται στην περιγραφή της μεθόδου DSMC και στην επίλυση του προβλήματος αραιοποιημένης ροής σε κοιλότητα με τη μέθοδο DSMC σε περιβάλλον OpenFOAM με το λύτη dsmcFoam.

Η όλη προσπάθεια περιγράφεται επιγραμματικά ως εξής:

- Αναλυτική περιγραφή της μεθόδου DSMC με την εφαρμογή αυτής στο πρόβλημα μεταφορά θερμότητας ανάμεσα σε πλάκες.

- Παρουσίαση της δομής του προγράμματος OpenFOAM και συγκεκριμένα του λύτη dsmcFoam επιλύοντας το πρόβλημα ροής σε κοιλότητα με κοινούμενο τοίχωμα.
- Έλεγχος ορθότητας των αποτελεσμάτων του dsmcFoam τόσο στη γραμμική όσο και στη μη γραμμική περιοχή δηλαδή σε μικρούς και μεγάλους αριθμούς Mach, όπως επίσης και σε μεγάλο εύρος του αριθμού Knudsen.
- Εξαγωγή αποτελεσμάτων που αφορούν το πρόβλημα ροής σε κοιλότητα για υπο- διη- και υπερ-ηχητική ροή.

Κεφαλαίο 2 Βιβλιογραφική ανασκόπηση

Τα τελευταία χρόνια η επιστημονική κοινότητα δείχνει έντονο ενδιαφέρον για την επίλυση φαινομένων ροής και μεταφοράς στη μεταβατική περιοχή. Όπως έχει αναφερθεί, στη συγκεκριμένη περιοχή η μέση ελεύθερη διαδρομή είναι συγκρίσιμη με το χαρακτηριστικό μήκος του κάθε προβλήματος με αποτέλεσμα, η θεωρία του συνεχούς μέσου να καταρρέει και να χρειάζονται εναλλακτικές μεθοδολογίες επίλυσης.

Μεταξύ της δεκαετίας του 60 και του 70 τον 19^ο αιώνα ο Boltzmann διατύπωσε μια ολοκληρωδιαφορική εξίσωση, η οποία περιγράφει την εξέλιξη της συνάρτησης κατανομής των μοριακών ταχυτήτων στο χώρο και το χρόνο. Η συγκεκριμένη ολοκληρωδιαφορική εξίσωση ονομάστηκε εξίσωση Boltzmann. Η λύση της συγκεκριμένης εξίσωσης, λόγω της απαίτησης μεγάλης υπολογιστικής ισχύος είναι ιδιαίτερα δύσκολη ακόμα και σήμερα και έχουν αναπτυχθεί εναλλακτικές προσεγγίσεις.

Αρχικά, αναπτύχθηκε η στοχαστική μέθοδος Test Particle Monte Carlo που εφαρμόζεται για την μοντελοποίηση ροών χωρίς ενδομοριακές συγκρούσεις. Αυτή η μέθοδος αναπτύχθηκε για την μοντελοποίηση ροών σε πολύπλοκες γεωμετρίες. Σε αυτή μοντελοποιείται ένας μεγάλος αριθμός μοριακών τροχιών και υπολογίζεται ο λόγος των σωματιδίων που εξέρχεται από το πεδίο προς το σύνολο των μοντελοποιημένων σωματιδίων που ονομάζεται και transmission probability. Αυτή η μοντελοποίηση των τροχιών είναι ανεξάρτητη του χρόνου και λαμβάνονται υπόψη μόνο οι αλληλεπιδράσεις αερίου-τοιχώματος. Με την εισαγωγή της παραμέτρου του χρόνου και τη μοντελοποίηση των μοριακών τροχιών στο ίδιο χρονικό διάστημα με τη χρήση του υπολογιστή εμφανίζεται μια νέα εναλλακτική μέθοδος, που είναι γνωστή ως Direct Simulation Monte Carlo. Αυτή χρησιμοποιείται για την μοντελοποίηση αραιών αερίων.

Το κύριο χαρακτηριστικό της μεθόδου DSMC είναι ο διαχωρισμός της μοριακής κίνησης από τις μοριακές συγκρούσεις κατά τη διάρκεια του χρόνου Δt . Όλα τα σωματίδια διανύουν μια συγκεκριμένη απόσταση που αντιστοιχεί στο χρονικό βήμα και ακολουθεί η μοντελοποίηση της σύγκρουσης μεταξύ δύο τυχαία επιλεγμένων σωματιδίων που ανήκουν στο ίδιο κελί. Το χρονικό βήμα Δt πρέπει να είναι

μικρότερο από το μέσο χρόνο σύγκρουσης. Η μοριακή κίνηση γίνεται με απλές εξισώσεις κίνησης και είναι απαραίτητη η ταξινόμηση των σωματιδίων σε κελιά και υποκελιά ώστε οι συγκρούσεις να γίνονται μεταξύ γειτονικών μορίων. Επιπλέον, το μέγεθος κάθε κελιού δεν πρέπει να ξεπερνάει μια μέση ελεύθερη διαδρομή ώστε να εξασφαλιστεί μια φυσικά αποδεκτή προσομοίωση σύγκρουσης. Η πιθανότητα να πραγματοποιηθεί μια σύγκρουση ενός ζεύγους σωματιδίων είναι ανάλογη με το γινόμενο της σχετικής ταχύτητας c_r και της συνολικής ενεργούς διατομής σ_T . Σε κάθε κελί του πεδίου υπολογίζεται η μέση και η μέγιστη τιμή του γινομένου $c_r \sigma_T$ και η σύγκρουση μεταξύ των μορίων γίνεται με τη μέθοδο αποδοχής-απόρριψης. Με αυτή τη μέθοδο, για κάθε ζευγάρι σωματιδίων υπολογίζεται η πιθανότητα σύγκρουσης, που ισούται με το λόγο του γινομένου $c_r \sigma_T$ προς τη μέγιστη τιμή του γινομένου αυτού στο κάθε κελί. Επισημαίνεται ότι, οι μοριακές συγκρούσεις αντιμετωπίζονται ως φαινόμενα τριών διαστάσεων. Τονίζεται ότι, υπάρχει μια συνεχή μεταβλητότητα των χωρικών συντεταγμένων και των μοριακών ταχυτήτων, ενώ η διατήρηση της ορμής, της μάζας και της ενέργειας επιβάλλονται κατά τη διάρκεια των μοριακών αλληλεπιδράσεων. Οι μακροσκοπικές ποσότητες προκύπτουν από τις αναθεωρημένες τιμές των μεταβλητών που αφορούν το πλήθος και τις ταχύτητες των σωματιδίων σε κάθε κελί. Η στοχαστική διαδικασία επιλογής αντιπροσωπευτικού ζεύγους σωματιδίων για την μοντελοποίηση των μοριακών συγκρούσεων βασίζεται σε σχέσεις που πηγάζουν από την κινητική θεωρία. Για τον λόγο αυτό, η μέθοδος DSMC εμφανίζει τους ίδιους περιορισμούς με την εξίσωση Boltzmann [6].

Η μέθοδος DSMC, όπως και η εξίσωση Boltzmann είναι δυνατό να χρησιμοποιηθεί σε ρευστά όταν ο λόγος της μέσης ελεύθερης διαδρομής λ προς τη μοριακή διάμετρο είναι τουλάχιστον $\lambda/d \geq 10$ [4]. Η απόδοση της μεθόδου αυξάνει καθώς αυξάνει ο αριθμός Kn . Παρόλα αυτά η μέθοδος DSMC εξακολουθεί να ισχύει και για μικρότερες τιμές του αριθμού Kn με αυξημένο όμως υπολογιστικό κόστος.

Τα τελευταία χρόνια με την ραγδαία αύξηση της υπολογιστικής ισχύος η εφαρμογή της μεθόδου DSMC σε προβλήματα ροής γίνεται ολοένα και πιο έντονη. Ενδιαφέρον παρουσιάζει η ενσωμάτωση της μεθόδου DSMC σε ένα γενικότερο εμπορικό υπολογιστικό πακέτο, που σκοπό έχει την εύκολη αντιμετώπιση οποιουδήποτε προβλήματος ροής από τον χρήστη, εφαρμόζοντας την μέθοδο DSMC. Το OpenFOAM αποτελεί μια υπολογιστική πλατφόρμα που συμπεριλαμβάνει ένα σύνολο από λύτες, που στοχεύουν στην επίλυση διαφόρων προβλημάτων της μηχανικής. Η αρχική ανάπτυξη του OpenFOAM ξεκίνησε στα

τέλη της δεκαετίας του 1980 στο Imperial College του Λονδίνου στην προσπάθεια του πανεπιστημίου να αναπτύξει μια πιο ισχυρή και ευέλικτη γενική πλατφόρμα προσομοίωσης [7, 8]. Αυτό οδηγεί στην επιλογή της C++ ως γλώσσα προγραμματισμού, λόγω του υψηλού αντικειμενοστραφή προγραμματισμού της. Αρχικά, το πρόγραμμα FOAM πωλήθηκε από την βρετανική εταιρεία Nabla πριν κυκλοφορήσει ως ελεύθερο λογισμικό, το 2004 [7, 8, 9]. Το OpenFOAM υπήρξε ένα από τα πρώτα μεγάλα επιστημονικά πακέτα γραμμένο σε C++, που σε μεγάλο βαθμό χρησιμοποιεί τις δυνατότητες αυτής της γλώσσας και προσφέρει ένα εύχρηστο περιβάλλον εργασίας.

Το τελευταίο χρονικό διάστημα στους λύτες της υπολογιστικής πλατφόρμας προστέθηκε ο λύτης με τίτλο dsmcFoam οποίος επιλύει προβλήματα ροής με τη μέθοδο DSMC. Στην παρούσα διπλωματική εργασία μοντελοποιείται το πρόβλημα ροής σε κοιλότητα στο OpenFoam χρησιμοποιώντας το λύτη dsmcFoam. Επιπρόσθετα, ελέγχονται τα αποτελέσματα του λύτη dsmcFoam για το μοντελοποιημένο πρόβλημα σε σύγκριση με τα αποτελέσματα των [10] και [11].

Κεφάλαιο 3 Περιγραφή της μεθόδου DSMC

3.1 Εισαγωγή

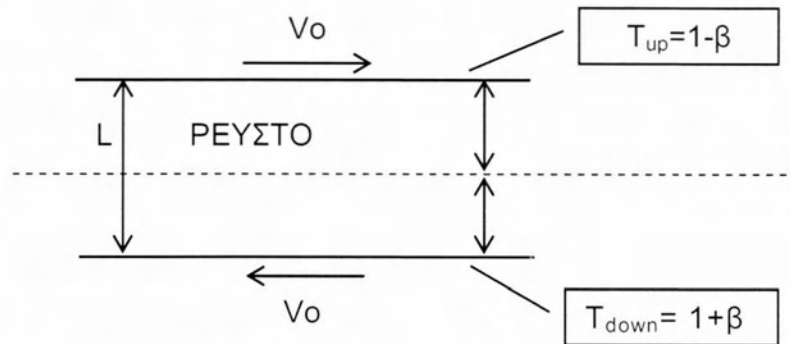
Στο παρόν κεφάλαιο γίνεται η περιγραφή της μεθόδου DSMC μέσα από την επίλυση ενός προβλήματος μεταφοράς θερμότητας ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες, οι οποίες βρίσκονται σε διαφορετική θερμοκρασία. Αρχικά, περιγράφεται λεπτομερώς το πρόβλημα και οι παράμετροι του, που έχει επιλεγεί για την παρουσίαση της μεθόδου. Έπειτα γίνεται η συνοπτική παρουσίαση του αλγορίθμου DSMC και στη συνέχεια πραγματοποιείται η πλήρης περιγραφή της μεθόδου μέσα από την λεπτομερή εξέταση της κάθε υπορουτίνας του προγράμματος που έχει αναπτυχθεί σε γλώσσα προγραμματισμού Fortran 90/95 για το συγκεκριμένο πρόβλημα που διατυπώθηκε στην αρχή του κεφαλαίου.

3.2 Περιγραφή πρότυπου προβλήματος

Θεωρείται ότι υπάρχουν δύο παράλληλες πλάκες άπειρου μήκους, οι οποίες απέχουν απόσταση L και ανάμεσα σε αυτές εμπεριέχεται ρευστό. Η κάτω πλάκα διατηρείται σε θερμοκρασία $T_{down}=T_0 +\Delta T/2$ και η πάνω πλάκα σε θερμοκρασία $T_{up}=T_0-\Delta T/2$, όπου T_0 η θερμοκρασία αναφοράς. Έπειτα, ο λόγος των θερμοκρασιών των δύο πλακών, υπολογίζεται ως $T_{down} /T_{up}=(1+\beta)/(1-\beta)$, όπου β $\Delta T/2T_0$. Επισημαίνεται ότι ο αλγόριθμος της Fortran ο οποίος παρουσιάζεται λεπτομερώς στην υποενότητα 3.4 έχει διαμορφωθεί με τέτοιο τρόπο ώστε να επιλύει το ίδιο πρόβλημα όταν έχουμε επιπρόσθετα κίνηση των δύο πλακών προς αντίθετη κατεύθυνση με το ίδιο μέτρο ταχύτητας V_0 . Στη συγκεκριμένη περίπτωση όπου ο στόχος μας είναι η παρουσίαση της μεθόδου και όχι η επίλυση του προβλήματος, εμείς θεωρούμε τις πλάκες ακίνητες και μελετάμε το πρόβλημα εύρεσης του θερμοκρασιακού πεδίου ανάμεσα σε αυτές. Τα παραπάνω φαίνονται στο Σχήμα 3.1.

Τέλος, μία βασική παράμετρος του προβλήματος είναι η παράμετρος αραιοποίησης δ που ορίζεται ως

$$\delta = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{Kn} \quad (3.1)$$



Σχήμα 3.1: Ροή ρευστού σε παράλληλες πλάκες.

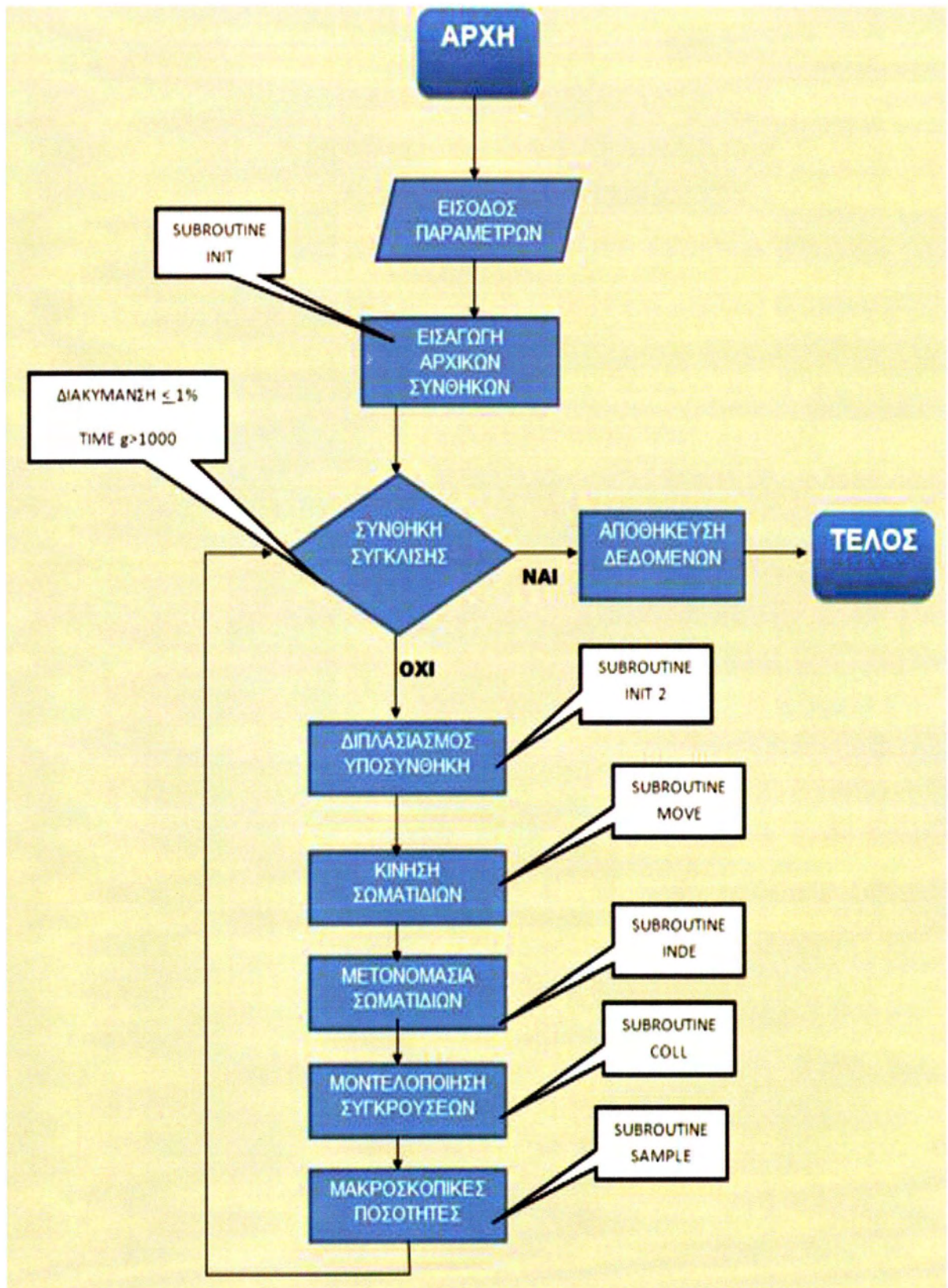
3.3 Σύντομη περιγραφή του αλγορίθμου DSMC

Το πρώτο βήμα του αλγορίθμου είναι ο καθορισμός του συνολικού αριθμού σωματιδίων, του χρονικού βήματος Δt και των βασικών παραμέτρων του εκάστοτε προβλήματος που επιλύεται όπως π.χ. η παράμετρος αραιοποίησης δ και το β για το προαναφερθέν πρόβλημα. Το βήμα αυτό εμπεριέχεται στο τμήμα με ονομασία «Είσοδος παραμέτρων» του διαγράμματος ροής που παρουσιάζεται στο Σχήμα 3.2. Το δεύτερο βήμα είναι η κατασκευή του υπολογιστικού πλέγματος το οποίο αποτελείται από κελιά και υποκελιά καθώς και η εφαρμογή αρχικών συνθηκών όπου τα σωματίδια κατανέμονται τυχαία μέσα στο πλέγμα και ανατίθενται σε αυτά οι τρεις συνιστώσες της μοριακής ταχύτητας c . Η παραπάνω διαδικασία πραγματοποιείται στην υπορουτίνα INIT. Το τρίτο βήμα είναι η κίνηση σωματιδίων. Όλα τα σωματίδια κινούνται σε κάθε χρονικό βήμα Δt σύμφωνα με τη σχέση

$$y_{new} = y_{old} + c\Delta t \quad (3.2)$$

Από την οποία προκύπτει η νέα θέση του σωματιδίου y_{new} . Εάν κατά την κίνηση των σωματιδίων παρατηρηθεί σύγκρουση με τα στερεά τοιχώματα (πλάκες) τότε καλείται η υπορουτίνα αλληλεπίδρασης αερίου-τοιχώματος, που επιστρέφει τη νέα συνιστώσα της ταχύτητας του σωματιδίου μετά την σύγκρουση. Τέλος, στον εναπομείναντα χρόνο υπολογίζεται η θέση και το υποκελί στα οποία θα βρεθεί το σωματίδιο. Όλη η παραπάνω διαδικασία συμπεριλαμβάνεται στην υπορουτίνα

MOVE. Στη συνέχεια, ακολουθεί το στάδιο του εντοπισμού και μετονομασίας των σωματιδίων, των οποίων οι αρχικές χωρικές συντεταγμένες έχουν μεταβληθεί. Σε αυτό το στάδιο δημιουργούνται πίνακες που περιέχουν τον αριθμό των σωματιδίων σε κάθε κελί και υποκελί. Οι πίνακες αυτοί οι οποίοι δημιουργούνται στην υπορουτίνα INDE θα χρησιμοποιηθούν κατάλληλα στο στάδιο υπολογισμού των συγκρούσεων και της τυχαίας επιλογής ζεύγους σωματιδίων. Το πέμπτο βήμα είναι ο υπολογισμός των μοριακών συγκρούσεων. Σε κάθε χωρικό κελί του πεδίου υπολογίζεται, συμφωνά με το μοντέλο Non Time Counter scheme (NTC) [4], ο πιθανός αριθμός συγκρούσεων που θα συμβεί σε αυτό σε κάθε χρονικό βήμα Δt . Ο αριθμός των πιθανών ζευγαριών που θα συγκρουστούν είναι συνάρτηση του αριθμού των σωματιδίων στο κελί, του όγκου του κελιού καθώς και του χρονικού βήματος Δt . Επιλέγεται ένα τυχαίο ζευγάρι σωματιδίων που ανήκουν στο ίδιο κελί και υποκελί. Η πιθανότητα ή μη της σύγκρουσης είναι ανάλογη της σχετικής ταχύτητας και της ενεργούς διατομής τους. Όταν γίνεται η σύγκρουση τα σωματίδια ανακτούν την ταχύτητα που διέπει την αρχή διατήρησης της ορμής και της ενέργειας. Αυτό συμβαίνει με την υπορουτίνα COLL. Έπειτα, υπολογίζονται οι μακροσκοπικές ποσότητες του αερίου συναρτήσει των μικροσκοπικών ιδιοτήτων των σωματιδίων στο γεωμετρικό μέσο κάθε κελιού. Οι μακροσκοπικές ποσότητες υπολογίζονται στην υπορουτίνα SAMPLE. Ακολούθως, πραγματοποιείται χρονικός έλεγχος για τον διπλασιασμό του αρχικού αριθμού των σωματιδίων, ο οποίος εκφράζεται στην υπορουτίνα INIT2. Το τελευταίο βήμα του αλγόριθμου είναι το κριτήριο τερματισμού αυτού. Σαν κριτήριο τερματισμού μπορεί να χρησιμοποιηθεί ο έλεγχος της στατιστικής διακύμανσης αν είναι μικρότερη από ένα συγκεκριμένο αριθμό που επιθυμεί ο χρήστης ή η διακοπή της εκτέλεσης του προγράμματος σε μια ορισμένη χρονική στιγμή. Εάν η συνθήκη είναι αληθής τότε ο αλγόριθμος τερματίζεται. Σε περίπτωση που η συνθήκη είναι ψευδής τότε αυτός επιστρέφει στο βήμα τρία. Όλα τα παραπάνω απεικονίζονται στο Σχήμα 3.2



Σχήμα 3.2: Διάγραμμα ροής

3.4 Το κύριο τμήμα του προγράμματος

Ο κώδικας DSMC αποτελείται από ένα κυρίως πρόγραμμα μέσα στο οποίο καλούνται οι αντίστοιχες υπορουτίνες για την επιβολή των αρχικών συνθηκών, την προσομοίωση της κίνησης των σωματιδίων, τη μοντελοποίηση των συγκρούσεων, τη μετονομασία των σωματιδίων και τον υπολογισμό των μακροσκοπικών ποσοτήτων. Το κυρίως πρόγραμμα αποτελείται από δυο τμήματα το A και B. Αρχικά, στο τμήμα A γίνεται η δήλωση όλων των μεταβλητών που θα χρησιμοποιηθούν τόσο στο κυρίως σώμα του προγράμματος, όσο και στις υπορουτίνες. Οι βασικές ποσότητες ορίζονται ως εξής:

Omega: δείκτης ιξώδους

DEL: παράμετρος αραιοποίησης

U0: διαφορά των ταχυτήτων των δύο πλακών /2

b0: το β που χρησιμοποιήθηκε στη διατύπωση του προβλήματος

DTM0: το χρονικό διάστημα Δt

NDBL: ο αριθμός των διπλασιασμών (στο πρόγραμμα είναι 2)

INM0: ο αριθμός των σωματιδίων μετά από τους διπλασιασμούς

NCO: ο αριθμός των κελιών

NSCY: ο αριθμός των υποκελιών σε ένα κελί (στο πρόγραμμα είναι 2)

INM: ο αριθμός των σωματιδίων στην αρχή

NSCELL: ο αριθμός των υποκελιών

```
Program DSMC_plates
Implicit None
Real(8)::TIME,DTM,PI,TIMEg,Time_init,Time_fin,VCELL,CBD(2),Volume,P,DENM
Real(8)::VRR,CW,RNMCL,ANMCL,VX,A,B,ASEL,VM,SIGVR,VR,RML,RMM,C
Integer::NSMP,NWT,MC,JJJ,I,J,K,L,M,N,NM, NSG,INC
Integer::INM,NSCELL,MX,MY,NC,NMCL,MSCY,MSC,NSEL,ISEL,NCOL,NATT,NST,&
Real(8),Allocatable, Dimension(:) ::CC,PPY,PVX,PVY,PVZ,ANUDE,UX,UY,UZ,TEMP
Real(8), Allocatable, Dimension(:,:)::CS,CG,CCG
Integer, Allocatable, Dimension(:) ::ISC,IPL,IR
Integer, Allocatable, Dimension(:,:)::IC,ISCG
Real(8):: Omega=81d-2 ! the viscosity temperature power law
Real(8):: DEL=15d-1 ! rarefaction parameter
Real(8):: U0=0 ! Plate velocity difference / 2
Real(8):: b0=5d-1 ! Plate temperature difference / 2
Real(8):: DTM0=7425d-10 ! time incremen
Integer:: NDBL=2 ! number of doubling
Integer:: INM0=30*10**6 ! average number of particles after all doublings
Integer:: NCO=400 ! number of cell across the height of the duct, multiple of 2
Integer:: NSCY=2 ! NSCY**2 is number of sub-cells in one cell.
INM=INM0/2**NDBL ! initial number of particles
NSCELL=NCO*NSCY ! number of sub-cells
ALLOCATE(CC(NCO),CCG(2,NCO),CG(2,NCO),CS(7,NCO), &
PPY(INM0),PVX(INM0),PVY(INM0),PVZ(INM0), &
ANUDE(NCO),UX(NCO),UY(NCO),UZ(NCO),TEMP(NCO),&
IC(2,NCO),ISC(NSCELL),IPL(INM0),IR(INM0),ISCG(2,NSCELL))
```

Κυρίως πρόγραμμα: Τμήμα A

Στη συνέχεια, στο τμήμα Β του κυρίως προγράμματος πραγματοποιείται η επιβολή των αρχικών συνθηκών καλώντας την υπορουτίνα INIT, η οποία περιλαμβάνει τα εξής στάδια: την κατασκευή πλέγματος, την τοποθέτηση σωματιδίων και ανάθεση των μοριακών ταχυτήτων σε αυτά καθώς και τον υπολογισμό βασικών ποσοτήτων που χρησιμοποιούνται στην επαναληπτική διαδικασία. Λεπτομερής περιγραφή της υπορουτίνας INIT θα πραγματοποιηθεί στην επόμενη παράγραφο. Στη συνέχεια ξεκινάει η επαναληπτική διαδικασία, όπου καλούνται οι υπορουτίνες MOVE, INDE, COLL και SAMPLE. Επιπλέον σε συγκεκριμένες στιγμές καλούνται οι υπορουτίνες INIT2 και INIT1 στις οποίες πραγματοποιείται διπλασιασμός των αρχικών σωματιδίων για την μείωση του στατιστικού σφάλματος, καθώς και για την αποσύζευξη της αρχικής από την τελική κατάσταση. Τέλος, όταν γίνει η επαλήθευση της συνθήκης σύγκλισης γίνεται ο τερματισμός του προγράμματος

```

OPEN(1,FILE="INFO.txt") ! intermediate data are saved in this file
Call cpu_time(Time_init) !Computational time
TIME =0d0                !DSMC time since last reset
TIMEg=0d0                !DSMC time from the beginning
NCOL=0
CALL INIT ! generation of initial distribution
DO JJJ=1,1000000 ! iterations
  TIME =TIME+DTM
  TIMEg=TIMEg+DTM
  CALL MOVE ! free motion of particles
  CALL INDE ! re-indexation of particles
  CALL COLL ! simulation of collisions
  CALL SAMPLE ! calculation of macroscopic quantities
  ! Information about current iteration
  WRITE(*,3)jjj,timeg,NWT,NCOL,NM/1e6,(Time_fin-Time_init)
  WRITE(1,3)jjj,timeg,NWT,NCOL,NM/1e6,(Time_fin-Time_init)
  CALL FLUSH (1)
  NCOL=0
3  format(I6,1x,f11.7,1x,I1,1x,I8,1x,F8.3,1x,E13.6)
  IF(mod(JJJ,50)==0)then
    CALL OUT ! field flow is saved
    Call cpu_time(Time_fin)
  End if
  IF(TIMEg > 10..AND.NWT==0) CALL INIT2 ! reset with doubling of particles
  IF(TIMEg > 30..AND.NWT==1) CALL INIT2 ! reset with doubling of particles
  IF(TIMEg > 40..AND.NWT==2) CALL INIT1 ! reset without doubling
  IF(TIMEg > 1e3) STOP
END DO

```

Κυρίως πρόγραμμα: Τμήμα Β

3.5. Βασικές υπορουτίνες

3.5.1. Υπορουτίνα INIT

Στην υπορουτίνα INIT αρχικά πραγματοποιείται η δήλωση ορισμένων ποσοτήτων που έχουν ορισθεί στην παράγραφο 3.4 και συγκεκριμένα στο τμήμα A του κυρίως προγράμματος ως μεταβλητές. Οι ποσότητες αυτές είναι οι εξής:

PI: είναι η σταθερά $\pi=3,14$
PPY: η θέση στον άξονα ψ
PVX, PVY, PVZ: μικροσκοπικές ταχύτητες
ANUDE: αριθμητική πυκνότητα
UX, UY, UZ: μακροσκοπικές ταχύτητες
TEMP: θερμοκρασία
IPL: αριθμός υποκελίου
IR: ονομασία του σωματιδίου
DTM: προσαύξηση του χρόνου
Volume: ο όγκος μιας περιοχής του σωλήνα
DENM: η πυκνότητα ισοροπίας των υπολογιστικών σωματιδίων η οποία υπολογίζεται αν διαιρέσουμε τον αρχικό αριθμό σωματιδίων(INM) με τον συνολικό αδιάστατο όγκο του πεδίου ροής
TIME: έναρξη του χρόνου
NM: δείκτης του σωματιδίου
NSMP: δείκτης του αριθμού των δειγμάτων
CW: το μέγεθος του κελιού

Θα πρέπει να επισυμανθεί ότι σε αυτό το τμήμα της INIT εκτός από τη δήλωση αυτών των σταθερών γίνεται έλεγχος, αν ο αριθμός των κελιών είναι μεγαλύτερος απο τον αριθμό των σωματιδίων στην αρχή. Στην περίπτωση εγκυρότητας της συνθήκης, το πρόγραμμα τερματίζεται, αφού αυτό συνεπάγεται την ύπαρξη κενών κελιών. Κλείνοντας το τμήμα A της υπορουτίνας INIT ορίζεται το μέγεθος των κελίων ως

$$CW = \frac{1}{NCO} \quad (3.3)$$

Στη συνέχεια, δίνονται το τμήμα A και B της υπορουτίνας INIT που υλοποιεί όλα τα παραπάνω.

```
SUBROUTINE INIT
PI=DACOS(-1D0)
PPY=0D0 ; PVX=0D0 ; PVY=0D0 ; PVZ=0D0
ANUDE=0D0 ; UX=0D0 ; UY=0D0 ; UZ=0D0 ; TEMP=0D0
IPL=0 ; IR=0
DTM=DTM0*(2d0**NDBL)
Volume=1d0
```

Υπορουτίνα INIT: Τμήμα A

```

DENM=INM/volume
IF(NCO.GT.INM) THEN
  WRITE(* ,*) 'Number of cells exceeds particle number'
  STOP
END IF
TIME=0d0
NM=0
NSMP=1
CW=1d0/NCO

```

Υπορουτίνα INIT: Τμήμα Β

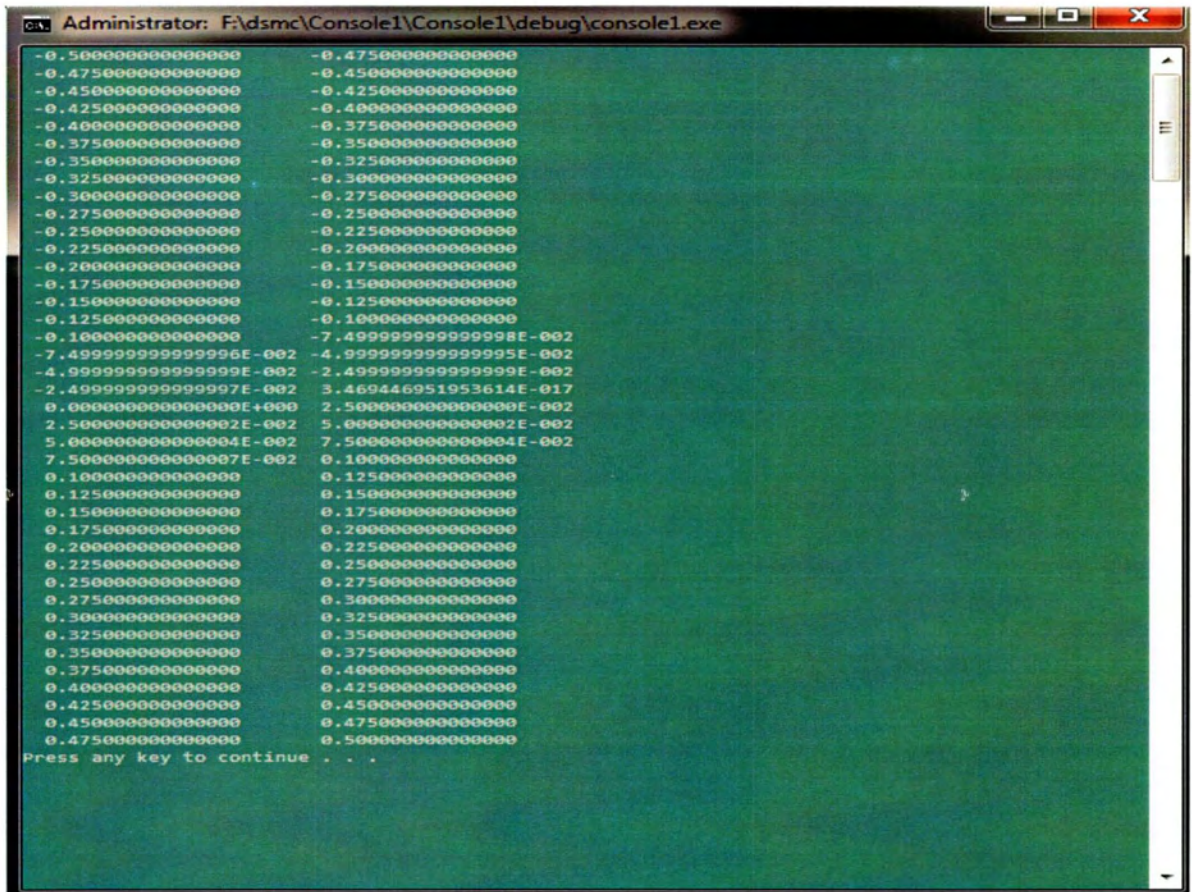
Έπειτα, ορίζεται το κάτω όριο και το άνω όριο του υπολογιστικού πλέγματος με την εισαγωγή σταθερών τιμών στις μεταβλητές CBD(1) και CBD(2) αντίστοιχα. Τα όρια αυτά από την εκφώνηση είναι γνωστό ότι είναι το $-1/2$ και το $1/2$ αντίστοιχα. Παρακάτω δημιουργούνται τα όρια των κελιών. Ο πίνακας CG(1,M) περιέχει την πληροφορία για τα κάτω όρια των κελιών και ο πίνακας CG(2,M) περιέχει την πληροφορία για τα άνω όρια των κελιών. Επίσης, είναι γνωστό το μήκος του κάθε υποκελιού το οποίο δηλώνεται από τη μεταβλητή CW(0.025 στο παρόν πρόβλημα). Ακολουθεί το τμήμα Β της υπορουτίνας INIT όπως επίσης και το εχε που προκύπτει αν εκτελεστεί ξεχωριστά το συγκεκριμένο τμήμα του κώδικα. Το αποτέλεσμα που παριστάνεται στην εικόνα 3.1 περιέχει τα όρια των κελιών όπου η αριστερή στήλη είναι τα κάτω όρια και η δεξιά τα πάνω όρια των κελιών.

```

!Boundary definition
CBD(1)=-5d-1    !y min
CBD(2)=5d-1    !y max
M=0 !Cell counter
DO MY=1,NCO
  M=M+1
  CG(1,M)=CBD(1)+CW*(MY-1)
  CG(2,M)=CG(1,M)+CW
END DO

```

Υπορουτίνα INIT: τμήμα Β



Εικόνα 3.1: Όρια κελιών

Μετά τον καθαρισμό των ορίων των κελιών στο τμήμα Γ της υπορουτίνας INIT πραγματοποιείται ο υπολογισμός της ποσότητας CC σε κάθε κελί. Η ποσότητα CC χρησιμοποιείται στην υπορουτίνα COLL για τον υπολογισμό των πιθανών συνολικών συγκρούσεων σε κάθε κελί σύμφωνα με το μοντέλο NTC. Ο αριθμός των πιθανών συνολικών συγκρούσεων ορίζεται σύμφωνα με το μοντέλο NTC ως

$$\frac{1}{2} N \bar{N} F_N (\sigma_T c_r) \Delta t / V_{cell} \quad (3.4)$$

όπου N ο αριθμός των μοντελοποιημένων σωματιδίων, \bar{N} ο χρονικός μέσος αριθμός σωματιδίων, σ_T η ενεργός διατομή, c_r η σχετική ταχύτητα, Δt το χρονικό βήμα και V_{cell} ο όγκος του κελιού. Εισάγοντας την αδιαστατοποίηση

$$(\sigma_T c_r) = \frac{(\sigma_T c_r)'}{\pi d^2 u_0}, \quad \Delta t = \frac{\Delta t'}{L / u_0}, \quad V_{cell} = \frac{V_{cell}'}{L} \quad \text{και κάνοντας χρήση των σχέσεων}$$

$$\delta = \frac{\sqrt{\pi} L}{2\lambda}, \quad \lambda = \frac{1}{\sqrt{2\pi} d^2 n_0} \quad \text{και} \quad F_N = \frac{n_0 L}{DENM} \quad \text{η εξίσωση (3.4) γίνεται}$$

$$N_{coll} = N \bar{N} (\sigma_T c_r)_{\max} \frac{\delta \Delta t}{\sqrt{2\pi} (DENM) V_{cell}} \quad (3.5)$$

$$\eta \quad N_{coll} = N \bar{N}(\sigma_T c_r)_{\max}(CC) \quad (3.6)$$

$$\text{όπου} \quad CC = \frac{\delta \Delta t}{\sqrt{2\pi} (DENM) V_{cell}} \quad (3.7)$$

Στη συνέχεια στο ίδιο τμήμα της υπορουτίνας γίνεται η ταξινόμηση των υποκελιών στα κελιά. Υπενθυμίζεται ότι ένα κελί περιέχει δύο υποκελιά. Η γραμμή που περιέχει την προαναφερθείσα πληροφορία είναι αυτή που ορίζεται ο πίνακας ISC, τα στοιχεία του οποίου καθορίζουν το κελί στο οποίο βρίσκεται το κάθε υποκελί π.χ. ISC (2)=1 σημαίνει ότι το υποκελί 2 ανήκει στο κελί 1. Στην εικόνα 3.2 φαίνεται μέρος του αποτελέσματος που προκύπτει αν εκτελεστεί το τμήμα Γ της INIT. Στην εικόνα 3.2 η αριστερή στήλη είναι τα υποκελιά και η δεξιά είναι τα κελιά. Αναλυτικότερα οι δύο πρώτες γραμμές της εικόνας 3.2 περιγράφονται ως εξής :

Υποκελί 1 → κελί 1
 Υποκελί 2 → κελί 1 κ.τ.λ

```
VCELL=CW
CC=DTM*DEL/(VCELL*DENM*DSQRT(2d0*PI))
DO NC=1,NCO
  CCG(2,NC)=RF() ! remainder
  CCG(1,NC)=4d0 ! maximum value of relative velocity
  DO M=1,NSCY
    L=(NC-1)*NSCY+M
    ISC(L)=NC ! cell in which subcell L lies
  END DO
END DO
```

Υπορουτίνα INIT: Τμήμα Γ

| Subcell | Cell |
|---------|------|
| 1 | 1 |
| 2 | 1 |
| 3 | 2 |
| 4 | 2 |
| 5 | 3 |
| 6 | 3 |
| 7 | 4 |
| 8 | 4 |
| 9 | 5 |
| 10 | 5 |
| 11 | 6 |
| 12 | 6 |
| 13 | 7 |
| 14 | 7 |
| 15 | 8 |
| 16 | 8 |
| 17 | 9 |
| 18 | 9 |
| 19 | 10 |

Εικόνα 3.2: Αντιστοιχία υποκελιού στο κελί

Στο τμήμα Δ της υπορουτίνας INIT ορίζονται οι αρχικές συνθήκες, οι οποίες περιλαμβάνουν την τυχαία κατανομή των σωματιδίων σε κάθε κελί καθώς και τον καθορισμό των τριών συνιστωσών της μοριακής ταχύτητας. Οι ποσότητα PPY είναι η χωρική συντεταγμένη του κάθε σωματιδίου ενώ οι PVX, PVY και PVZ είναι οι τρεις συνιστώσες της μοριακής ταχύτητας. Στην αρχή του τμήματος Δ γίνεται ο υπολογισμός του τυχαίου αριθμού των σωματιδίων που θα τοποθετηθούν σε κάθε κελί και στη συνέχεια καθορίζονται οι ποσοτητες PPY, PVX, PVY και PVZ για κάθε σωματίδιο με τυχαίο τρόπο χρησιμοποιώντας υπορουτίνα random number (Παράρτημα Α) η οποία παράγει έναν τυχαίο αριθμό στο διάστημα [0,1]. Ο καθορισμός των ταχυτήτων λαμβάνει χώρα στο τμήμα Ε της INIT.

Ο αριθμός των σωματιδίων που θα τοποθετηθεί σε κάθε κελί παριστάνεται με την μεταβλητή ANMCL και ορίζεται ως

$$ANMCL = \frac{INMV_{cell}}{V_{total}} \quad (3.8)$$

Στο τέλος του τμήματος Ε της INIT υπολογίζεται ο αριθμός του υποκελιού στο οποίο βρίσκεται το κάθε σωματίδιο, ύστερα από την τυχαία θέση που έχει δοθεί στα σωματίδια. Ο πίνακας IPL περιέχει σαν στοιχεία τον αριθμό του υποκελιού στο οποίο βρίσκεται το κάθε σωματίδιο, π.χ. το πρώτο στοιχείο δείχνει τον αριθμό του υποκελιού που βρίσκεται το σωματίδιο 1 και το δεύτερο στοιχείο του πίνακα, φανερώνει τον αριθμό του υποκελιού που βρίσκεται το σωματίδιο 2 κοκ. Ακολουθεί το τμήμα του κώδικα όπως και ένα παράδειγμα, που για λόγους ευκολίας, θεωρούμε σαν όρια το -2 στη θέση του -1/2 και το 2 στη θέση 1/2 (Σχήμα 3.3.). Επιπλέον, σε αυτό το παράδειγμα θεωρείται ότι υπάρχουν 4 κελιά και 8 υποκελιά και ότι το σωματίδιο βρίσκεται στη θέση -0.3. Το αποτέλεσμα είναι να υπολογιστεί ότι το χ σωματίδιο βρίσκεται στο υποκελί με τον αριθμό 4.

```

NM=0
RNMCL=RF()
DO NC=1,NCO
  ANMCL=INM*VCELL/volume+RNMCL
  NMCL=ANMCL
  RNMCL=ANMCL-NMCL
  DO I=1,NMCL
    NM=NM+1
    PPY(NM)=CG(1,NC)+RF()*(CG(2,NC)-CG(1,NC))
    Do
      VX=8d0*RF()-4d0
      If (dexp(-VX**2)>=RF()) exit
    End do
  End do

```

Υπορουτίνα INIT: Τμήμα Δ

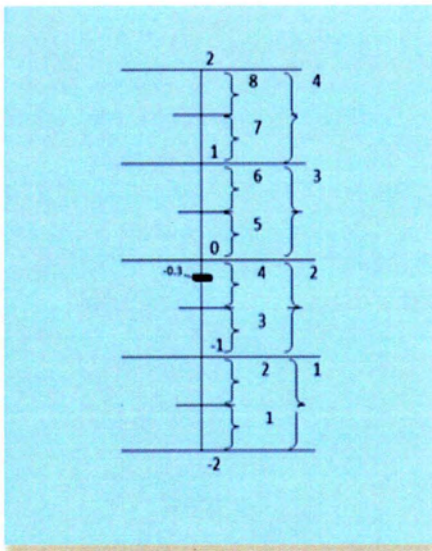
```

PVX(NM)=VX
A=DSQRT(-DLOG(RF()))
B=2d0*PI*RF()
PVY(NM)=A*DSIN(B)
PVZ(NM)=A*DCOS(B)
MSC=(PPY(NM)-CG(1,NC))*(NSCY)/CW+1
IPL(NM)=(NC-1)*NSCY+MSC
END DO
END DO
NWT=0
CS(1,:)=1D-6 ; CS(2:7,:)=0d0
NCOL=0
RETURN
END SUBROUTINE

```

Υπορουτίνα INIT: Τμήμα Δ

Παράδειγμα 1



$$MSC = \frac{(-0,3 - (-1))^2}{1} + 1 = 2.4 = 2$$

$$IPL(x) = 2 + 2 = 4$$

Σχήμα 3.3: Εύρεση της θέσης του σωματιδίου x

Συνοψίζοντας στην INIT έχουν γίνει τα εξής:

1. Κατασκευή πλέγματος.
2. Εισαγωγή κελιών και υποκελιών στο πλέγμα.
3. Τυχαία ταξινόμηση σωματιδίων στο πλέγμα.
4. Ανάθεση τυχαίων αρχικών ταχυτήτων στα σωματίδια.
5. Εύρεση υποκελιών στα οποία ανήκουν τα σωματίδια.

3.5.2. Υπορουτίνα MOVE

Στην προηγούμενη υποενότητα, με την υπορουτίνα INIT, δημιουργήθηκε αρχικά το υπολογιστικό πλέγμα μας το οποίο αποτελείται από κελιά (40) και από υποκελιά (80). Στη συνέχεια, τοποθετήθηκε μέσα σε αυτά τα κελιά σωματίδια δίνοντάς τους θέση και ταχύτητα. Το επόμενο βήμα είναι η μοντελοποίηση της ελεύθερης κίνησης καθώς και της αλληλεπίδρασης των μορίων με τα στερεά τοιχώματα. Αυτό πραγματοποιείται με την υπορουτίνα MOVE, η οποία καλείται σε κάθε χρονική στιγμή η οποία διαφέρει από την προηγούμενη κατά DTM.

Αρχικά, γίνεται η αντίστροφη διαδικασία που έγινε στο τέλος της INIT. Δηλαδή, βρίσκεται το κάθε σωματίδιο (συνολικά είναι NM) και αφού πρώτα βρεθεί το υποκελί (κάθε φορά το MSC είναι το υποκελί στο οποίο ανήκει το συγκεκριμένο μόριο που μελετάται μέσα στη Do While) στο οποίο ανήκει. Στη συνέχεια, αναγνωρίζεται το κελί που ανήκει αυτό το υποκελί (κάθε φορά το MC είναι το κελί που ανήκει το συγκεκριμένο μόριο που μελετάται). Ακολούθως, βρίσκεται η απόσταση DY που θα κινηθεί το μόριο στο χρονικό διάστημα DTM, και προστίθεται στη θέση Y που έχει δοθεί να έχει το μόριο στην υπορουτίνα INIT. Έπειτα, ακολουθεί έλεγχος αν το μόριο (αυτό γίνεται για όλα τα μόρια NM) θα συγκρουστεί με τα στερεά τοιχώματα (πλάκες). Προτού περιγραφεί ο τρόπος που γίνονται αυτές οι συγκρούσεις παρατίθεται το τμήμα A της MOVE που πραγματοποιεί την ελεύθερη κίνηση των σωματιδίων.

```
SUBROUTINE MOVE
Real(8)::X0,Y0,at,atr,dy,dx,XS,YS,XI,YI,X,Y
Integer::MCX,MCY
  N=0
  Do while (N<NM)
    N=N+1
    at=dtm
    MSC=IPL(N)
    MC=ISC(MSC)
    YI=PPY(N)
  ! write(*,'(I4,x,f6.3,x,f5.2,x,f4.2,x,f7.4,x,I2,x,I3)') N,YI,PVY(N),AT,DY,MC,MSC
    DY=PVY(N)*AT
    Y=YI+DY
      Y0=YI
      ATR=AT
  ! write(*,'(I4,x,f6.3,x,f5.2,x,f4.2,x,f7.4,x,I2,x,I3)') N,Y,PVY(N),ATR,DY,MC,MSC
```

Υπορουτίνα MOVE: Τμήμα A

Στη συνέχεια, στο τμήμα Β της υπορουτίνας MOVE γίνεται ο έλεγχος σύγκρουσης του κάθε σωματιδίου με τα στερεά τοιχώματα. Πρώτα, ελέγχεται η σύγκρουση με το πάνω τοίχωμα και ύστερα ακολουθεί ο έλεγχος για το κάτω. Εάν διαπιστωθεί σύγκρουση με τα στερεά τοιχώματα καλούνται οι υπορουτίνες DIFFUSE UP και DIFFUSE DOWN (Παράρτημα Α) για το πάνω και για το κάτω τοίχωμα αντίστοιχα, οι οποίες μετά την εκτέλεσή τους επιστρέφουν τις τρεις νέες συνιστώσες της μοριακής ταχύτητας. Αφού επιστραφούν αυτές στη συνέχεια ακολουθεί ο υπολογισμός της τελικής θέσης του σωματιδίου, που στον αλγόριθμο παριστάνεται με την μεταβλητή Y .

```

IF(Y > CBD(2))THEN    !upper wall
  ATR=(1d0-(CBD(2)-Y0)/dy)*ATR
  CALL DIFFUSE_UP(PVY(N),PVX(N),PVZ(N))
  PVY(N)=-PVY(N)
  Y0=CBD(2)
  Y=CBD(2)+PVY(N)*ATR
END IF

IF(Y < CBD(1))THEN    !lower wall
  ATR=(1d0-(CBD(1)-Y0)/dy)*ATR
  CALL DIFFUSE_DOWN(PVY(N),PVX(N),PVZ(N))
  Y0=CBD(1)
  Y=CBD(1)+PVY(N)*ATR
END IF

```

Υπορουτίνα MOVE: Τμήμα Β

Το τελευταίο βήμα της MOVE είναι ο υπολογισμός του κελιού MC στο οποίο θα βρεθεί το σωματίδιο αν αλλάξει κελί καθώς και ο υπολογισμός του τελικού υποκελιού στο οποίο θα βρεθεί. Ακολουθεί το τμήμα Γ καθώς και ένα παράδειγμα στο οποίο φαίνεται πως γίνεται ο υπολογισμός του τελικού κελιού και υποκελιού στο οποίο μεταπήδησε το σωματίδιο.

```

IF ( Y<CG(1,MC).OR.Y>CG(2,MC) ) THEN
  MC=(Y+0.5)/CW+1
END IF
MSCY=((Y-CG(1,MC))/CW)*(NSCY)+1
MSC=MSCY+NSCY*(MC-1)      !MSC is the new sub-cell number
IPL(N)=MSC
PPY(N)=Y
! write*,'(I4,x,f6.3,x,f5.2,x,f4.2,x,f7.4,x,I2,x,I3)' N,Y,PVY(N),ATR,DY,MC,MSC
! pause
END DO
Return
END SUBROUTINE

```

Υπορουτίνα MOVE: Τμήμα Γ

Παράδειγμα 2

Θεωρούνται τα δεδομένα του Παραδείγματος 1 με τα όρια του υπολογιστικού πλέγματος να είναι από -2 έως 2 . Επίσης, θεωρείται ότι το σωματίδιο βρίσκεται στο κελί 4 και θα βρεθεί σε ποιο κελί έχει τελικά μεταπηδήσει. Πρέπει να επισημανθεί σε αυτό το σημείο ότι το κελί στο οποίο βρίσκεται αρχικά το σωματίδιο καθώς και η απόσταση Y που έχει διανύσει στο χρονικό διάστημα DTM είναι γνωστά από την ανάλυση που έχει προηγηθεί.

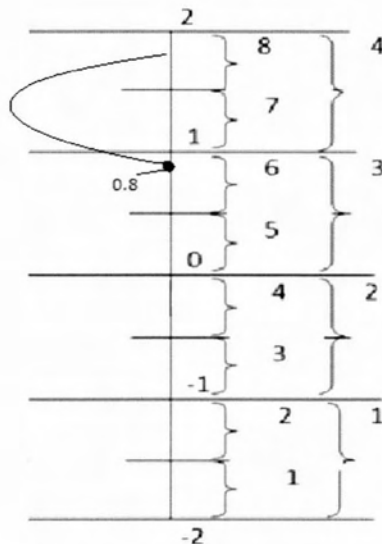
Επιστρέφοντας στο παράδειγμα: θεωρείται επίσης, ότι εκτός του ότι βρίσκεται στο κελί 4 αρχικά έστω, ότι η νέα θέση που έχει υπολογιστεί είναι 0.8. Στην αρχή του τμήματος Γ γίνεται ο έλεγχος της νέας θέσης του σωματιδίου σε σχέση με τα όρια του κελιού στο οποίο άνηκε πριν την κίνηση :

```
IF ( Y<CG(1,MC).OR.Y>CG(2,MC) ) THEN  
  MC=(Y+0.5)/CW+1  
END IF
```

Έχουμε $0.8 < 1$ άρα επαληθεύεται η συνθήκη της IF, επομένως βρίσκεται το νέο κελί στο οποίο έχει βρεθεί το σωματίδιο ως εξής:

$$MC=(0.8+2)/1+1=3.8$$

$$MC=3.$$



Σχήμα 3.4: Τελική θέση σωματιδίου

Στο τέλος του τμήματος Γ υπολογίζεται το υποκελί στο οποίο βρέθηκε το σωματίδιο και ανανεώνονται τα μητρώα IPL και PPY. Άρα από τις γραμμές του τμήματος Γ.

```
MSCY=((Y-CG(1,MC))/CW)*(NSCY)+1
MSC=MSCY+NSCY*(MC-1)      !MSC is the new sub-cell number
IPL(N)=MSC
PPY(N)=Y
```

έχουμε για το παράδειγμα 2:

$$MSCY=((0.8-0)/1)*(2)+1=2.6=2$$

$$MSC=2+2*(3-1)=6$$

$$IPL(X)=6$$

$$PPY(X)=0.8.$$

Συνοψίζοντας στην MOVE έχουν γίνει τα εξής:

1. Μετακίνηση των σωματιδίων.
2. Εύρεση νέας θέσης των σωματιδίων.
3. Έλεγχος σύγκρουσης των σωματιδίων με τις πλάκες.
4. Σε περίπτωση σύγκρουσης έλεγχος των νέων θέσεων και ταχυτήτων.
5. Εύρεση του υποκελίου στο οποίο έχει βρεθεί το σωματίδιο στο τέλος της

κίνησης του.

3.5.3. Υπορουτίνα INDE

Μετά την υπορουτίνα MOVE καλείται η υπορουτίνα INDE από το κυρίως πρόγραμμα. Σκοπός αυτής είναι η μετονομασία των σωματιδίων του πεδίου ροής, αφού πρώτα υπάρχει η ελεύθερη κίνησή τους στην υπορουτίνα MOVE. Πριν την ανάλυση της INDE θα πρέπει να δηλωθεί η σημασία ορισμένων πινάκων που χρησιμοποιούνται σε αυτή.

ISCG(2,MSC): αριθμός σωματιδίων στο υποκελί MSC.

IC(2,MC): αριθμός σωματιδίων στο κελί MC.

ISCG(1,N): αριθμός σωματιδίων συνολικά ως το υποκελί N-1.

IC(1,N): αριθμός σωματιδίων συνολικά ως το κελί N-1.

Αυτοί οι πίνακες δημιουργούνται στα τμήματα A και B της INDE που ακολουθούν:

```
SUBROUTINE INDE
integer::M1
IC=0 ; ISCG=0
DO N=1,NM
MSC=IPL(N)
```

Υπορουτίνα INDE: Τμήμα A

```

    ISCG(2,MSC)=ISCG(2,MSC)+1
    MC=ISC(MSC)
    IC(2,MC)=IC(2,MC)+1
  END DO
  M=0
  DO N=1,NCO
    IC(1,N)=M
    M=M+IC(2,N)
  END DO
  M=0
  DO N=1,NSCELL
    ISCG(1,N)=M
    M=M+ISCG(2,N)
    ISCG(2,N)=0
  END DO

```

Υπορουτίνα INDE: Τμήμα Β

Στη συνέχεια, στο τμήμα Γ πραγματοποιείται η δημιουργία του μητρώου IR το οποίο αναπαριστά τη διάταξη του ονόματος των σωματιδίων με βάση την αρίθμηση των υποκελιών. Στο παράδειγμα 3 περιγράφεται ο τρόπος λειτουργίας της υπορουτίνας INDE.

```

DO N=1,NM
  MSC=IPL(N)
  ISCG(2,MSC)=ISCG(2,MSC)+1
  K=ISCG(1,MSC)+ISCG(2,MSC)
  IR(K)=N
END DO
RETURN
END SUBROUTINE

```

Υπορουτίνα INDE: τμήμα Γ

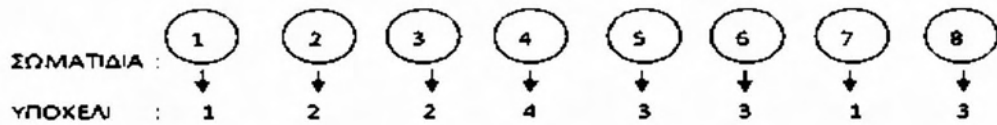
Παράδειγμα 3

Έστω ότι υπάρχουν τα σωματίδια 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8 κ.τ.λ. Θεωρείται επίσης ότι ανήκουν στα εξής υποκελιά αντίστοιχα 1, 2, 2, 4, 3, 3, 1, 3 κ.τ.λ. Στη συνέχεια κατασκευάζονται οι πίνακες ISCG και IC.

Ο ISCG αποτελείται από 2 γραμμές και N στήλες. Στο παράδειγμα είναι ως εξής, το πρώτο στοιχείο σειράς και στήλης είναι πάντα το 0. Το δεύτερο στοιχείο της πρώτης γραμμής είναι ίσο με το άθροισμα όλων των στοιχείων της δεύτερης γραμμής που προηγούνται πριν από τη στήλη στην οποία βρίσκεται, στην

προκείμενη περίπτωση δεύτερη στήλη. Όμοια, το τρίτο στοιχείο της πρώτης γραμμής είναι ίσο με το άθροισμα του πρώτου και του δεύτερου στοιχείου της δεύτερης γραμμής κ.ο.κ. Έτσι δημιουργείται η πρώτη γραμμή του πίνακα. Το κάθε στοιχείο της δεύτερης γραμμής του πίνακα μας δείχνει τον αριθμό των σωματιδίων που υπάρχουν στο υποκελί με αρίθμηση ίδια με την αρίθμηση της αντίστοιχης στήλης του πίνακα. Δηλαδή, το πρώτο 2 που βρίσκεται στην δεύτερη γραμμή του πίνακα ISCG δηλώνει ότι στο υποκελί 1 (όπου σημειώνουμε εδώ το 1 είναι η αρίθμηση της στήλης στην οποία βρίσκεται το στοιχείο) υπάρχουν 2 σωματίδια κ.ο.κ. Με παρόμοια σκέψη κατασκευάζεται και ο πίνακας IC με την προϋπόθεση πάντα όμως ότι 2 υποκελιά συνεχόμενα βρίσκονται σε ένα κελί, δηλαδή το υποκελί 1, 2 βρίσκεται στο κελί 1, τα υποκελιά 3, 4 βρίσκονται στο κελί 2 κ.ο.κ.

Τελικά υπολογίζεται ο πίνακας IR όπου κάθε στοιχείο του είναι ένα σωματίδιο το οποίο έχει τοποθετηθεί σε αυτή τη θέση με βάση την αύξουσα σειρά του ονόματός του και της θέσης του και με βάση τον αριθμό του υποκελιού στο οποίο βρίσκεται. Ακολουθεί το Σχήμα 3.5 που συμπεριλαμβάνει όλο αυτό το παράδειγμα:



$$ISCG = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 4 & 7 & \dots \\ 2 & 2 & 3 & 1 & \dots \end{bmatrix}$$

$$IC = \begin{bmatrix} 0 & 4 & 8 & \dots & \dots \\ 4 & 4 & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

- IR(1)=1
- IR(2)=7

- IR(3)=2
- IR(4)=3

- IR(5)=5
- IR(6)=6
- IR(7)=8

- IR(8)=4

Σχήμα 3.5: Απεικόνιση του παραδείγματος 3

Τα στοιχεία του IR προκύπτουν ως εξής: όπως φαίνεται απο το σχήμα που έχει προηγηθεί το $IR(1)=1$ σημαίνει ότι το πρώτο στοιχείο είναι το σωματίδιο που υπάρχει στο υποκελί 1 και η αρχική του ονομασία έχει το μικρότερο αριθμό. Το $IR(2)=7$ δηλώνει ότι το δεύτερο στοιχείο του πίνακα IR είναι το σωματίδιο που βρίσκεται στο υποκελί με τον αριθμό 1 και έχει την αμέσως επόμενη μεγαλύτερη αρίθμηση (αρχική) δηλαδή το σωματίδιο με τον αριθμό 7.

3.5.4. Υπορουτίνα COLL

Η υπορουτίνα COLL καλείται για την μοντελοποίηση των μοριακών συγκρούσεων και βασίζεται στο μοντέλο NTC. Αρχικά στο τμήμα A της COLL υπολογίζεται η ποσότητα ASEL η οποία περιγράφει τον αριθμό των πιθανών συγκρούσεων σε ένα κελί και περιγράφεται από την σχέση (3.6). Επισημαίνεται ότι κατά τον υπολογισμό της ASEL χρησιμοποιείται η ποσότητα CC που υπολογίστηκε στην υπορουτίνα INIT.

```

SUBROUTINE COLL
  DO N=1,NCO
    IF (NWT < NDBL-1) THEN
      ASEL=IC(2,N)**2*CCG(1,N)*CC(N)+CCG(2,N)
    ELSE
      ASEL=IC(2,N)*CCG(1,N)*CC(N)*CS(1,N)/NSMP+CCG(2,N)
    END IF
    NSEL=ASEL
    CCG(2,N)=ASEL-NSEL
  
```

Υπορουτίνα COLL: Τμήμα A

Στη συνέχεια, για κάθε αριθμό πιθανών συγκρούσεων και με την προϋπόθεση ότι ο αριθμός των μορίων στο κελί είναι μεγαλύτερος του 2, καλείται η υπορουτίνα SELECT, η οποία μας επιστρέφει τη σχετική ταχύτητα δύο σωματιδίων που έχουν επιλεγεί (στο παράδειγμα 4 γίνεται κατανοητός ο τρόπος με τον οποίο γίνεται η επιλογή των σωματιδίων). Η κλήση της SELECT πραγματοποιείται στο τμήμα B της COLL. Το επόμενο βήμα είναι ο υπολογισμός της ποσότητας SIVGR. Στην περίπτωση που έχουμε μοντέλο σκλήρων σφαιρών η ποσότητα εξισώνεται με το γινόμενο $\sigma_T c_r$ όπου σ_T η ενεργός διατομή και c_r η σχετική ταχύτητα. Όμοια για την περίπτωση του μοντέλου Variable Hard Sphere (VHS) ισχύει ότι το γινόμενο $\sigma_T c_r$ σε αδιάστατη μορφή ισούται με

$$\sigma_T c_r = c_r^{2(1-\omega)} \frac{2^{\omega-\frac{1}{2}}}{\Gamma(\frac{5}{2}-\omega)} \quad (3.9)$$

όπου ω είναι ένας συντελεστής που εξαρτάται από το αέριο. Τιμές του συντελεστή ω υπάρχουν στον Πίνακα A1 (σελ 408) του παραρτήματος A του βιβλίου [14]. Έπειτα, εφαρμόζεται η διαδικασία αποδοχής-απόρριψης των δυο τυχαία επιλεγμένων σωματιδίων της υπορουτίνας SELECT. Για κάθε ζεύγος επιλεγμένων σωματιδίων υπολογίζεται η πιθανότητα

$$\frac{\sigma_T c_r}{(\sigma_T c_r)_{\max}} \quad (3.10)$$

και ελέγχεται αν είναι μεγαλύτερη από έναν τυχαίο αριθμό. Αν η πιθανότητα είναι μεγαλύτερη από έναν τυχαίο αριθμό τότε καλείται η υπορουτίνα ELASTIC (Παράρτημα A) η οποία μας επιστρέφει τις τελικές ταχύτητες των δύο σωματιδίων. Στην υπορουτίνα ELASTIC οι ταχύτητες των σωματιδίων μετά τη σύγκρουση υπολογίζονται με βάση τις σχέσεις που διατυπώνονται στο [14] (σελ.31). Για μονοατομικό αέριο αυτές διατυπώνονται ως εξής:

$$c_1^* = c_m + \frac{1}{2} c_r$$

$$c_2^* = c_m - \frac{1}{2} c_r$$

όπου c_1^*, c_2^* οι ταχύτητες είναι τα διανύσματα μετά την σύγκρουση, c_m είναι το διάνυσμα της ταχύτητας του κέντρου μάζας και c_r είναι η σχετική ταχύτητα των σωματιδίων. Η διαδικασία αποδοχής-απόρριψης της σύγκρουσης εκφράζεται στο τμήμα Γ της υπορουτίνας COLL.

```

IF(NSEL.GT.0) THEN
  IF (IC(2,N).LT.2) THEN
    CCG(2,N)=CCG(2,N)+NSEL
  ELSE
    VM=CCG(1,N)
    DO ISEL=1,NSEL
      CALL SELECT
    
```

Υπορουτίνα COLL: Τμήμα Β


```

        SIGVR=VR
        IF (SIGVR.GT.VM) VM=SIGVR
        IF (RF().LT.SIGVR/CCG(1,N)) Then
            NCOL=NCOL+1
            CALL ELASTIC
        END IF
    END DO
    CCG(1,N)=VM
END IF
END IF
END DO
RETURN
END SUBROUTINE

```

Υπορουτίνα COLL: Τμήμα Γ

Τα τμήματα A και B της υπορουτίνας SELECT καθώς και το παράδειγμα που επεξηγεί τον τρόπο με τον οποίο γίνεται η επιλογή των σωματιδίων στη SELECT δίνονται στην συνέχεια.

```

SUBROUTINE SELECT
    K=INT(RF()*(IC(2,N)-0.001))+IC(1,N)+1
    L=IR(K)
    !first molecule L has been chosen at random in cell
    NATT=0
100 NATT=NATT+1
    !second molecule M is chosen at random that are in the sub-cell MSC
    MSC=IPL(L)
    IF (ISCG(2,MSC).EQ.1) THEN
        !If MSC has no molecule find the nearest sub-cell
        NST=1
        NSG=1
150 INC=NSG*NST
        NSG=-NSG
        NST=NST+1
        MSC=MSC+INC
        IF (MSC.LT.1.OR.MSC.GT.NSCELL) GO TO 150
        IF (ISC(MSC).NE.N.OR.ISCG(2,MSC).LT.1) GO TO 150
    END IF

```

Υπορουτίνα SELECT: Τμήμα A

!The second molecule M is now chosen at random from the group of

!molecules that are in the sub-cell MSC

$K = \text{INT}(\text{RF}() * (\text{ISCG}(2, \text{MSC}) - 0.001)) + \text{ISCG}(1, \text{MSC}) + 1$

$M = \text{IR}(K)$

IF(L.EQ.M) GO TO 100

!Choose a new second molecule if the first is again chosen

$\text{VRR} = (\text{PVX}(L) - \text{PVX}(M))^{**2} + (\text{PVY}(L) - \text{PVY}(M))^{**2} + (\text{PVZ}(L) - \text{PVZ}(M))^{**2}$

$\text{VR} = \text{DSQRT}(\text{VRR})$

IF(VR < 1.D-10.AND.NATT < 100) GO TO 100

RETURN

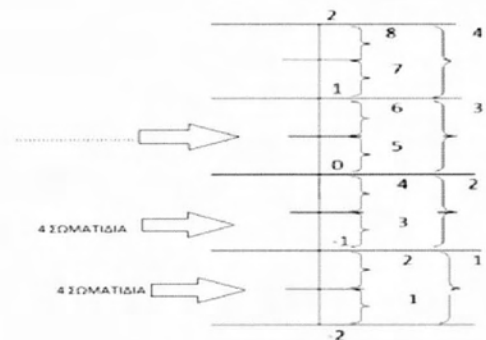
END SUBROUTINE

Υπορουτίνα SELECT: Τμήμα Β

Παράδειγμα 4

Σαν δεδομένα αυτού του παραδείγματος θα χρησιμοποιηθούν τα στοιχεία που έχουν χρησιμοποιηθεί στα προηγούμενα παραδείγματα. Στο (σχήμα 3.6) παρουσιάζονται τα στοιχεία του παραδείγματος:

| | | | | | | | | |
|-------------|---|---|---|---|---|---|---|---|
| ΣΩΜΑΤΙΔΙΑ : | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 |
| ΥΠΟΚΕΛΙ : | ↓ | ↓ | ↓ | ↓ | ↓ | ↓ | ↓ | ↓ |
| | 1 | 2 | 2 | 4 | 3 | 3 | 1 | 3 |



$$ISCG = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 4 & 7 & \dots \\ 2 & 2 & 3 & 1 & \dots \end{bmatrix}$$

$$IC = \begin{bmatrix} 0 & 4 & 8 & \dots & \dots \\ 4 & 4 & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

Σχήμα 3.6: Απεικόνιση του παραδείγματος 3

Έστω ότι είμαστε στο κελί ένα, άρα από τον πίνακα IC γνωρίζοντας ότι το πρώτο στοιχείο της δεύτερης σειράς είναι 4 ξέρουμε ότι περιέχει 4 σωματίδια. Από την πρώτη γραμμή της υπορουτίνας SELECT υπολογίζεται το K

$$K = \text{INT}[\text{RF}() * \frac{4 - 0.001}{3.999}] + 3$$

Επειδή, η υπορουτίνα RF μας επιστρέφει τιμές από το 0 ως το 1. Άρα, το K παίρνει τιμές από το 3 μέχρι το 6, επομένως οι δυνατοί συνδυασμοί του IR άρα και του L είναι οι εξής:

IR (3), IR(4), IR(5), IR(6). Οι τιμές των προηγούμενων τεσσάρων ποσοτήτων είναι γνωστές και έχουν υπολογιστεί στο προηγούμενο παράδειγμα.

$$\text{APA } L = \text{IR}(3) = 2, L = \text{IR}(4) = 3$$

$$L = \text{IR}(5) = 5, L = \text{IR}(6) = 6.$$

Έστω ότι επιλέγεται το L=2. Άρα συνεχίζοντας στον κώδικα:

$$\text{MSC} = \text{IPL}(L) = \text{IPL}(2) = 2$$

$$K = \text{INT}[\text{RF}() * \frac{\text{ISCG}(2,2) - 0.001}{2}] + \frac{\text{ISCG}(1,2)}{2} + 1.$$

Οι τιμές των ISCG(2,2) και ISCG(1,2) είναι γνωστές όπως φαίνεται και στο Σχήμα 3.6. Επειδή η υπορουτίνα RF μας επιστρέφει τιμές από το 0 ως το 1, το K παίρνει τιμές από το 3 μέχρι το 4. Άρα οι δυνατοί συνδυασμοί του IR άρα και του M είναι οι εξής:

$$M = \text{IR}(4) = 3$$

$$M = \text{IR}(3) = 2.$$

Επιλέγεται το M=3 και απορρίπτεται το M=2 γιατί από τη γραμμή του τμήματος A της υπορουτίνας SELECT που είναι σκιασμένο το L πρέπει να είναι διάφορο του M. Άρα, επιλέχθηκαν τα σωματίδια 2 και 3, τα οποία ανήκουν στο ίδιο υποκελί.

Συνοψίζοντας στην COLL έχουν γίνει τα εξής:

1. Μοντελοποίηση των μοριακών συγκρούσεων
2. Υπολογισμός ταχυτήτων των σωματιδίων μετά την σύγκρουση

3.5.5. Υπορουτίνα SAMPLE

Στην υπορουτίνα SAMPLE γίνεται ο υπολογισμός των αδιάστατων μακροσκοπικών ποσοτήτων. Στο συγκεκριμένο πρόβλημα υπολογίζεται η αριθμητική πυκνότητα ANUDE, η θερμοκρασία TEMP και οι τρεις συνιστώσες της μακροσκοπικής ταχύτητας UX, UY, UZ. Αρχικά σε κάθε κελί υπολογίζονται αθροίσματα που περιγράφουν:

1. Τον συνολικό αριθμό σωματιδίων που έχουν υπέρξη στο κελί N. Η ποσότητα αυτή αποθηκεύεται στο μητρώο CS(1,N).
2. Τις συνολικές συνιστώσες της μοριακής ταχύτητας των σωματιδίων που υπήρξαν στο κελί N. Οι ποσότητες αυτές αποθηκεύονται στα μητρώα CS(2,N), CS(3,N), CS(4,N) για την x, y, z κατεύθυνση αντίστοιχα.
3. Τις συνολικές τιμές των τετραγώνων της μοριακής ταχύτητας των σωματιδίων που υπήρξαν στο κελί N. Οι ποσότητες αυτές αποθηκεύονται στα μητρώα CS(5,N), CS(6,N), CS(7,N) για την x, y, z κατεύθυνση αντίστοιχα.

Τα παραπάνω αθροίσματα υπολογίζονται στα τμήματα A και B της SAMPLE όπως φαίνεται παρακάτω:

```
SUBROUTINE SAMPLE
  NSMP=NSMP+1
  DO N=1,NCO
    L=IC(2,N)
    IF (L.GT.0) THEN
      DO J=1,L
        K=IC(1,N)+J
        M=IR(K)
        CS(1,N)=CS(1,N)+1
        CS(2,N)=CS(2,N)+PVX(M)
        CS(3,N)=CS(3,N)+PVY(M)
```

Υπορουτίνα SAMPLE: Τμήμα A

```

CS(4,N)=CS(4,N)+PVZ(M)
  CS(5,N)=CS(5,N)+PVX(M)**2
  CS(6,N)=CS(6,N)+PVY(M)**2
  CS(7,N)=CS(7,N)+PVZ(M)**2
END DO
END IF
END DO

```

Υπορουτίνα SAMPLE: Τμήμα Β

Στη συνέχεια για κάθε κελί πραγματοποιείται ο υπολογισμός της αριθμητικής πυκνότητας n'_j , η οποία ορίζεται ως

$$n'_j = \int f d\xi = \frac{1}{V'_{cell,j}} F_N \frac{\Delta t}{t_f} \sum_{t=1}^{t_f} N'_j = \frac{1}{V'_{cell,j}} F_N \bar{N}_j \quad (3.11)$$

όπου $V'_{cell,j}$ ο διαστατός όγκος του κελιού j , F_N ο αριθμός των πραγματικών σωματιδίων που αντιστοιχούν σε ένα υπολογιστικό σωματίδιο, \bar{N}_j είναι ο χρονικός μέσος αριθμός σωματιδίων που υπήρξαν στο κελί j και t_f ο συνολικός χρόνος. Η (3.11) εισάγοντας την αδιαστατοποίηση της παραγράφου 3.5.1 γίνεται

$$n'_j = \frac{n'_j}{n_0} = \frac{\bar{N}_j}{V'_{cell,j} DENM} \quad (3.12)$$

Το διάνυσμα της μακροσκοπικής ταχύτητας στο κελί j για την x, y, z κατεύθυνση ωρίζεται ως

$$u'_{x,j} = \frac{1}{n} \int f \xi_x d\xi = \frac{1}{V'_{cell,j}} F_N \frac{1}{n} \frac{\Delta t}{t_f} \sum_{t=1}^{t_f} N'_j \xi_x = \frac{\sum_{t=1}^{t_f} N'_j \xi_x}{\sum_{t=1}^{t_f} N'_j} \quad (3.13)$$

$$u'_{x,j} = \frac{1}{n} \int f \xi_x d\xi = \frac{1}{V'_{cell,j}} F_N \frac{1}{n} \frac{\Delta t}{t_f} \sum_{t=1}^{t_f} N'_j \xi_x = \frac{\sum_{t=1}^{t_f} N'_j \xi_x}{\sum_{t=1}^{t_f} N'_j} \quad (3.14)$$

$$u'_{z,j} = \frac{1}{n} \int f \xi_z d\xi = \frac{1}{V'_{cell,j}} F_N \frac{1}{n} \frac{\Delta t}{t_f} \sum_{i=1}^{t_f} N'_j \xi_z = \frac{\sum_{i=1}^{t_f} N'_j \xi_z}{\sum_{i=1}^{t_f} N'_j} \quad (3.16)$$

σε αδιάστατη μορφή οι (3.13),(3.14) και (3.15) γίνονται

$$u_{x,j} = \frac{\sum_{i=1}^{t_f} N'_j c_x}{\sum_{i=1}^{t_f} N'_j} \quad (3.17)$$

$$u_{y,j} = \frac{\sum_{i=1}^{t_f} N'_j c_y}{\sum_{i=1}^{t_f} N'_j} \quad (3.18)$$

$$u_{z,j} = \frac{\sum_{i=1}^{t_f} N'_j c_z}{\sum_{i=1}^{t_f} N'_j} \quad (3.19)$$

όπου c_x, c_y, c_z οι αδιάστατες μικροσκοπικές ταχύτητες. Η διαστατή θερμοκρασία για το κελί j ορίζεται από την σχέση

$$\frac{3}{2} kT'_j = \frac{m}{2n} \int f(\xi - u')^2 d\xi = \sum_i \frac{m(\xi^2 - u'^2)_i}{2} \quad (3.20)$$

όπου i ο αριθμός των σωματιδίων στο κελί j . Αδιαστατοποιώντας τη θερμοκρασία προκύπτει

$$T'_j = \frac{T'_j}{T_0} = \frac{2}{3} \sum_i \left(\frac{c^2}{N_j} - u'^2 \right)_i \quad (3.21)$$

Στη συνέχεια ακολουθεί το τμήμα Γ της SAMPLE όπου γίνεται ο υπολογισμός των μακροσκοπικών ποσοτήτων μέσα από τις σχέσεις (3.12),(3.17-18-19) και (3.21).

```

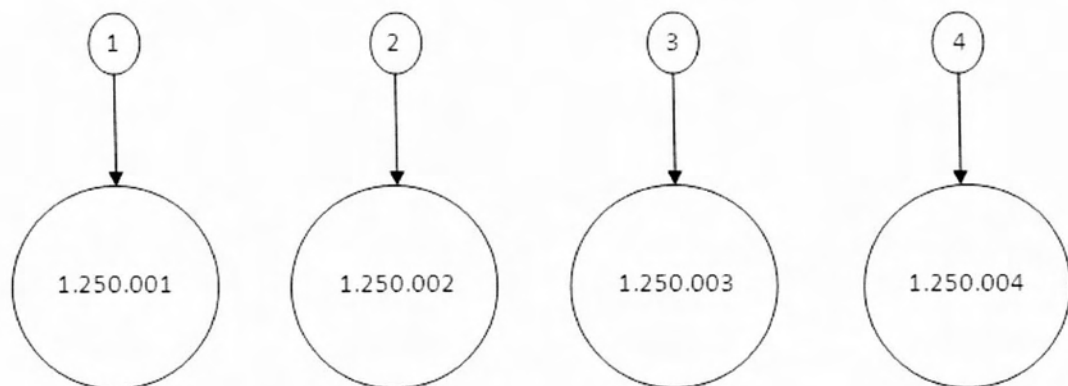
DO MC=1,NCO
  ANUDE(MC)=CS(1,MC)*DTM/(TIME*DENM*VCELL)      !calculation of density
  IF(CS(1,MC).GT.1.E-5) THEN
    UX(MC)=CS(2,MC)/CS(1,MC)                    !calculation of velocity components
    UY(MC)=CS(3,MC)/CS(1,MC)
    UZ(MC)=CS(4,MC)/CS(1,MC)
    TEMP(MC)=2./3.*((CS(5,MC)+CS(6,MC)+CS(7,MC))/CS(1,MC)- &
      (UX(MC)**2+UY(MC)**2+UZ(MC)**2))
  END IF
END DO
RETURN
END SUBROUTINE

```

Υπορουτίνα SAMPLE: Τμήμα Γ

3.5.6. Υπορουτίνα INIT2

Στην INIT2 γίνεται ο διπλασιασμός των σωματιδίων. Καλείται μετά από κάποιο συγκεκριμένο χρονικό διάστημα (η επιλογή του χρόνου είναι εμπειρική) 2 φορές με αποτέλεσμα τα σωματίδια να διπλασιάζονται δύο φορές. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα ενώ αρχικά υπήρχαν 1.250.000 σωματίδια τελικά έγιναν 5.000.000 σωματίδια. Ο διπλασιασμός γίνεται ως εξής: Στη θέση του σωματιδίου 1 δημιουργείται το σωματίδιο 1.250.001. Στη θέση 2 δημιουργείται το σωματίδιο 1.250.002. Αυτό βέβαια, συμβαίνει στον πρώτο διπλασιασμό. Στο (Σχήμα 3.8) παριστάνεται ο διπλασιασμός των σωματιδίων. Στη συνέχεια παρουσιάζεται η υπορουτίνα INIT2.



Σχήμα 3.8: Αντιστοιχία σωματιδίων στο διπλασιασμό

SUBROUTINE INIT2**DO** I=1,NM

PPY(NM+I)=PPY(I)

PVX(NM+I)=PVX(I)

PVY(NM+I)=PVY(I)

PVZ(NM+I)=PVZ(I)

IPL(NM+I)=IPL(I)

END DO

NM=2*NM

DENM=2*DENM ! doubling of density

DTM=DTM/2d0 ! decreasing time increment each time

TIME=0d0 ! reset of current time

NSMP=1 ! reset of sample counter

DO NC=1,NCO

CC(NC)=CC(NC)/4d0 ! changing the weight of each cell

END DO

NWT=NWT+1

CS(1,:)=1D-6 ; CS(2:7,:)=0d0

NCOL=0

WRITE(* ,99000)99000 **FORMAT**(120('-'))**RETURN****END SUBROUTINE**

Υπορουτίνα INIT2

3.5.7. Υπορουτίνα INIT1

Στην υπορουτίνα INIT1 η οποία καλείται από το κυρίως πρόγραμμα σε συγκεκριμένες χρονικές στιγμές (η επιλογή των οποίων είναι εμπειρική), γίνεται μηδενισμός των μακροσκοπικών ποσοτήτων χωρίς διπλασιασμό σωματιδίων.

SUBROUTINE INIT1

TIME=0.

NSMP=1

NWT=NWT+1

CS(1,:)=1D-6 ; CS(2:7,:)=0d0

NCOL=0

RETURN**END SUBROUTINE**

Υπορουτίνα INIT1

Κεφάλαιο 4 Περιβάλλον dsmcFoam μέσα από την επίλυση του προβλήματος ροής σε κοιλότητα

4.1 Εισαγωγή

Στο κεφάλαιο αυτό περιγράφεται λεπτομερώς η διαδικασία της εγκατάστασης και διαμόρφωσης των αρχείων του λύτη dsmcFoam που αποτελεί μέρος της υπολογιστικής πλατφόρμας του OpenFOAM, με κύριο στόχο την εισαγωγή ενός χρήστη στις βασικές διαδικασίες του dsmcFOAM. Η περιγραφή του λύτη dsmcFOAM επιτυγχάνεται μέσα από την μοντελοποίηση του προβλήματος ροής σε κοιλότητα στο περιβάλλον του λύτη. Αρχικά, γίνεται η εγκατάσταση του προγράμματος OpenFOAM σε περιβάλλον Linux (Ubuntu 10.10) όπως περιγράφεται στο Παράρτημα Β. Στη συνέχεια, δημιουργείται ο φάκελος με το όνομα OpenFOAM στο φάκελο με το όνομα του διαχειριστή και αντιγράφεται μέσα σε αυτό ο φάκελος Tutorials που βρίσκεται στο `/opt/OpenFOAM171/`. Ο κατάλογος Tutorials περιέχει πολλές περιπτώσεις, που καταδεικνύουν τη χρήση όλων των λυτών (solvers). Θα περιγραφεί η χρήση και η λειτουργία του solver dsmcFoam. Αντίγραφα όλων των tutorials είναι διαθέσιμα από τον κατάλογο tutorials του OpenFOAM στον κατάλογο εγκατάστασης του προγράμματος. Μέσα στον υποκατάλογο dsmcFoam του καταλόγου OpenFOAM βρίσκονται διαθέσιμα tutorials για την εμπέδωση της λειτουργίας του λύτη dsmcFoam. Συμβουλευτικά, προτείνεται να κρατάται αντίγραφο του καταλόγου, ο οποίος κάθε φορά βρίσκεται σε επεξεργασία. Μέσα στο φάκελο dsmcFoam δημιουργείται ένας κατάλογος με την ονομασία "cavity", μέσα στον οποίο αντιγράφονται οι φακέλοι "0", "constant", "system" και τα "Allrun", "Allclean". Στο κεφάλαιο που ακολουθεί, αφού περιγραφούν τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του προβλήματος που θα επιλυθεί, στη συνέχεια θα παρουσιάσει λεπτομερώς όλη η επεξεργασία των προαναφερθέντων αρχείων που πρέπει να γίνει για την επίλυση του προβλήματος.

4.2 Περιγραφή του προβλήματος

Η γεωμετρία του προβλήματος που επιλύεται με το solver DSMCFoam φαίνεται στο Σχήμα 4.1. Οι σκούρες πλευρές του τετραγώνου είναι τα ακίνητα τοιχώματα, ενώ το πάνω τμήμα του τετραγώνου είναι το κινούμενο τοίχωμα με ταχύτητα U

(m/sec). Το ύψος του τετραγώνου είναι $H(m)$ και το πλάτος του είναι $W(m)$. Στο παράδειγμα που επιλέχθηκε να περιγραφεί η τιμή για την ταχύτητα είναι $U=17.6635\text{m/sec}$. Η θερμοκρασία στις πλευρές της κοιλότητας θεωρείται ίση με 300K όπως και στο εσωτερικό του, αρχικά. Θεωρείται για αυτή την περίπτωση ότι το ύψος H είναι ίσο με το πλάτος W και ισούται με 0.1m έκαστο. Το αέριο που έχει επιλεγεί είναι το Αργό (Ar) το οποίο έχει δυναμικό ιξώδες $2.2175 \cdot 10^{-5} \text{ kg/m}^2 \cdot \text{s}$ και σταθερά $R^*=208\text{m}^2 / \text{s}^2 \cdot \text{K}$.

4.3 Τα αρχεία του λύτη dsmcFoam

Στον κατάλογο "cavity" υπάρχουν συνολικά πέντε αρχεία εκ των οποίων τα δυο το "Allrun" και το "Allclean" χρησιμεύουν καθαρά για την εκτέλεση του προγράμματος και την εκκαθάριση των δεδομένων-αποτελεσμάτων που προκύπτουν μετά από κάθε εκτέλεση όποτε το επιθυμεί ο χρήστης. Στη συνέχεια, αναπτύσσεται η διαμόρφωση των τριών φακέλων "0", "constant", "system" που απαιτείται για την επίλυση του προβλήματος στην παράγραφο 4.1

4.3.1 Δημιουργία πλέγματος και καθορισμός ιδιοτήτων (φάκελος «constant»)

Η OpenFOAM λειτουργεί πάντοτε σε ένα τρισδιάστατο καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων και όλες οι γεωμετρίες που παράγονται είναι σε τρεις διαστάσεις. Η OpenFOAM επιλύει την υπόθεση σε τρεις διαστάσεις από προεπιλογή, αλλά μπορεί να διαταχτεί κατάλληλα και να λύσει σε δύο διαστάσεις. Αυτό είναι εφικτό θεωρώντας τις οριακές συνθήκες στην τρίτη διάσταση ως "empty". Ο τομέας του cavity αποτελείται από ένα τετράγωνο μήκους πλευράς $H=W=0.1\text{m}$ στο επίπεδο XY. Θα χρησιμοποιηθούν 200 κελιά στην κατεύθυνση X και άλλα 200 κελιά στην κατεύθυνση Y, σύνολο 40.000 κελιά σε όλο το πλέγμα. 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 4,1.

Στις σειρές από 1 έως 7 περιέχονται κάποιες πρώτες πληροφορίες, ειδικότερα για το FoamFile υπάρχουν τα δεδομένα που βρίσκονται μέσα στις αγκύλες({..}). Στη σειρά 24 με τη λέξη convertToMeters εισάγεται ένας αριθμός, ο οποίος επιτρέπει να μετατραπούν οι αποστάσεις των γωνιών του πλέγματος που βρίσκονται στις γραμμές 28 έως 35, από την αρχή των αξόνων σε μέτρα. Η πρώτη γωνία με τον

αριθμό 0 του πλέγματος βρίσκεται στη θέση -5 στον άξονα των X, -5 στον άξονα των Y και -0.5 στον άξονα των Z (πολύ μικρή διάσταση σε σχέση με τις άλλες δύο). Η δεύτερη γωνία του πλέγματος με τον αριθμό 1 βρίσκεται στη θέση 5 στον άξονα των X, στη θέση -5 στον άξονα των Y και -0.5 στον άξονα των Z κ.ο.κ. Σε πραγματικές αποστάσεις όμως, η γωνία 0 βρίσκεται σε απόσταση $-5 \cdot 0.01 = -0.05\text{m}$ στον X, $-5 \cdot 0.01 = -0.05\text{m}$ στον άξονα Y και -0.005m στον Z, ενώ η γωνία 1 βρίσκεται σε απόσταση $5 \cdot 0.01 = 0.05\text{ m}$ στον X, $-5 \cdot 0.01 = -0.05\text{m}$ στον άξονα Y και -0.005m στον Z κ.ο.κ. Όπως γίνεται αντιληπτό η αρχή των αξόνων O (0,0) έχει τοποθετηθεί στο κέντρο του σχήματος που ακολουθεί (σχήμα 4.2). Επιπλέον, στη σειρά 39 ορίζεται με το hex ότι το σχήμα έχει 6 έδρες και στη συνέχεια με την παρένθεση (0 1 2 3 4 5 6 7) δηλώνεται η αρίθμηση των γωνιών του εξάεδρου ως εξής: η 0 γωνία είναι η συντεταγμένη της γωνίας που περιγράφεται στη σειρά 28, η 1 γωνία είναι η συντεταγμένη της γωνίας που περιγράφεται στη σειρά 29 κ.ο.κ. Στη συνέχεια, στη σειρά 39 στην παρένθεση (200 200 1) κατοχυρώνεται ο αριθμός των κελιών στην κατεύθυνση X (που είναι ο πρώτος αριθμός, 200), στην κατεύθυνση Y (που είναι ο δεύτερος αριθμός, 200) και στην κατεύθυνση Z (που είναι ο τρίτος αριθμός, 1). Τέλος, στην ίδια σειρά με το simpleGrading (1 1 1) δηλώνεται, ότι η κατανομή των κελιών του πλέγματος είναι ισόποση.

Κλείνοντας το αρχείο blockMeshDict, στις σειρές 45 έως 62 κατασκευάζονται οι πλευρές της γεωμετρίας μας με βάση τις γωνίες που έχουμε δημιουργήσει στις προηγούμενες σειρές. Στη σειρά 47 με τη λέξη "wall movingWall" αντιστοιχεί το κινούμενο τοίχωμα με την πλευρά που σχηματίζουν οι γωνίες που βρίσκονται στην παρένθεση της σειράς 49. Στη συνέχεια, στη σειρά 51 με την ονομασία "wall fixedWalls" περιγράφονται οι τρεις πλευρές της γεωμετρίας που αντιστοιχούν στα ακίνητα τοιχώματα της κοιλότητας. Πιο συγκεκριμένα οι τρεις πλευρές είναι οι εξής: η πλευρά με γωνίες (0 4 7 3), η πλευρά με γωνίες (2 6 5 1) και η πλευρά με γωνίες (1 5 4 0). Τέλος, στη σειρά 57 με τον τίτλο "empty frontAndBack" περιγράφονται οι πλευρές που είναι στην κατεύθυνση όπου έχουν επιλεγεί οι οριακές συνθήκες ως "empty" ώστε, να υπάρχει λύση σε δύο διαστάσεις. Οι πλευρές αυτές είναι οι: πίσω πλευρά (0 3 2 1), μπροστά πλευρά (4 5 6 7). Η μορφή του πλέγματος φαίνεται στο σχήμα 4.2 ενώ οι διαμόρφωση των πλευρών παρουσιάζεται στο σχήμα 4.3.

Κλείνοντας τον κατάλογο PolyMesh ορίζεται ο κατάλογος boundary, που η μορφή του φαίνεται στην εικόνα 4.2. Στο συγκεκριμένο αρχείο οριοθετείται ο αριθμός των επιφανειών που βρίσκονται στις οριακές επιφάνειες του πλέγματος. Αρχικά, με την

λέξη "movingWall" ορίζεται ο αριθμός των επιφανειών στο κινούμενο τοίχωμα. Στις επόμενες τρεις σειρές ορίζονται ο τύπο της οριακής επιφάνειας που είναι τοίχος (wall), ο αριθμός των επιφανειών-προσώπων στο κινούμενο τοίχος ίσο με 200, αφού υπάρχουν 200 κελιά στην κατεύθυνση X και 1 κελί στην κατεύθυνση Z, με συνέπεια να δημιουργούνται 200 επιφάνειες, μεγέθους η κάθε μια ίσο με $W/200$. Επιπρόσθετα, παρέχεται και ένας δείκτης ο οποίος χρησιμοποιείται για την συγκεκριμενοποίηση των επιφανειών, αυτός ο αριθμός επιλέγεται ίσος με 79600. Στη συνέχεια, ορίζονται οι επιφάνειες-πρόσωπα που υπάρχουν στα ακίνητα τοιχώματα, όπως και προηγουμένως σημειώνονται αρχικά, ο τύπο της επιφάνειας που είναι τοίχος (wall) και στη συνέχεια ο αριθμό των επιφανειών. Σε αυτή την περίπτωση ο αριθμός των επιφανειών είναι 600, αυτό προκύπτει από το γεγονός ότι τα ακίνητα τοιχώματα είναι τρία και ο αριθμός των προσώπων σε κάθε ένα από αυτά είναι 200. Ιδιαίτερη προσοχή χρήζει ο δείκτης startface σε αυτή την περίπτωση, αφού πλέον αυτή η τιμή δεν είναι αυθαίρετη αλλά έχει άμεση σχέση με την προηγούμενη startface του κινούμενου τοιχώματος. Αφού οριστεί ως startface του κινούμενου τοιχώματος την τιμή 79600 και ο συνολικός αριθμός των προσώπων στο κινούμενο τοίχωμα είναι 200 αναγκαστικά, ο αντίστοιχος δείκτης για τα ακίνητα τοιχώματα θα ξεκινήσει από 79800. Αυτή είναι και η τιμή που επιλέγεται σαν startface για τα ακίνητα τοιχώματα. Κλείνοντας την περιγραφή του αρχείου "boundary" ορίζουμε και τις επιφάνειες των πλευρών που είναι κάθετες στο άξονα των Z στο Σχήμα 4.2, οι επιφάνειες (0 3 2 1) πίσω πλευρά και μπροστά πλευρά (4 5 6 7). Για αυτές τις δύο επιφάνειες ορίζεται σαν τύπο "empty" και ο λόγος είναι ότι η επίλυση του προβλήματος γίνεται σε δύο διαστάσεις. Ο αριθμός των προσώπων επιλέγεται 80000 κάτι που είναι αναμενόμενο. Ο αριθμός των κελιών κατά την X και Y κατεύθυνση είναι 200 και αυτό έχει σαν αποτέλεσμα $200*200$ πρόσωπα-επιφάνειες για την πίσω πλευρά και άλλα τόσα για την μπροστινή πλευρά. Σαν δείκτης μέτρησης (startface) για τις δύο πλευρές βάζουμε την τιμή 80400, αφού ο δείκτης εκκίνησης για τα ακίνητα τοιχώματα ήταν 79800 και ο αριθμός των επιφανειών συνολικά για τα ακίνητα τοιχώματα ήταν 600, άρα το άθροισμα τους μας δίνει τον δείκτη εκκίνησης για τις πλευρές μπροστά και πίσω (frontandback).

Έως αυτό το σημείο έχει καθοριστεί το υπολογιστικό πλέγμα πλήρως. Στη συνέχεια, θα εισάχθούν στο πρόγραμμα κάποιες ιδιότητες που είναι αναγκαίες για την επίλυση του προβλήματος (ροή σε κοιλότητα με DSMC στο OpenFOAM). Αυτές οι ιδιότητες αφορούν τα σωματίδια και το αέριο που βρίσκεται μέσα στην

κοιλότητα. Όλα αυτά τα δεδομένα εισάγονται στο αρχείο `dsmcProperties` που βρίσκεται και αυτό μέσα στον κατάλογο "constant". Τυπική μορφή του αρχείου μετά από την εισαγωγή των δεδομένων για το συγκεκριμένο πρόβλημα που επιλύουμε παρατίθεται στην εικόνα 4.3.

Στις σειρές 9-19 δίνονται γενικές πληροφορίες για το αρχείο στις αγκύλες του `Foamfile` (`{...}`). Έπειτα, ορίζεται ο μέσος αριθμός πραγματικών σωματιδίων που αντιστοιχούν σε ένα μόριο της DSMC. Αυτός ο αριθμός για τις συγκεκριμένες τιμές των παραμέτρων $\delta=0.1$ και του λόγου $U/u_0=0.05$, όπου U η ταχύτητα του τοιχώματος και u_0 η πιο πιθανή ταχύτητα, έτσι όπως ορίζεται από την κινητική θεωρία, προκύπτει από την σχέση

$$F_N = \frac{n_0 V}{\text{αριθμός σωματιδίων } dsmc} \quad (4.1)$$

Έχοντας την παράμετρο αραιοποίησης δ , το δυναμικό ιξώδες μ_0 , την ταχύτητα u_0 , τη θερμοκρασία αναφοράς T_0 και το πλάτος W από τα δεδομένα του προβλήματος, είναι εύκολο να υπολογιστεί η αριθμητική πυκνότητα n_0 ως εξής: Αρχικά, θεωρώντας ότι η παράμετρος αραιοποίησης δ είναι ανάλογη της πίεσης λόγω του ορισμού $\delta = \frac{P_0 W}{\mu u_0}$ και γνωρίζοντας ότι $P_0 = n_0 k_B T_0$ προκύπτει

$$\delta = \frac{P_0 W}{\mu u_0} = \frac{n_0 k_B T_0 W}{\mu u_0} \Rightarrow n_0 = \frac{\delta \mu u_0}{k_B T_0 W} \quad (4.2)$$

όπου $k_B = 1.38065 * 10^{-23} \text{ J / K}$ η σταθερά Boltzmann, οπότε

$$n_0 = \frac{0.1 \cdot 2.217 * 10^{-23} \sqrt{2 \cdot 208 \cdot 300}}{1.38065 * 10^{-23} \cdot 300 * 0.1} = 1.8909 * 10^{18} \text{ m}^{-3}.$$

Επιπλέον, λόγω του $\frac{U}{u_0} = 0.05$ βρίσκεται η ταχύτητα του πάνω τοιχώματος

$$U = 0.05 \sqrt{2 \cdot 208 \cdot 300} = 17.6635 \text{ m / s}.$$

Τέλος, έχοντας υπολογίσει την αριθμητική πυκνότητα n_0 υπολογίζεται και η ποσότητα F_N από τη σχέση (4.1) ως

$$F_N = \frac{1.8909 * 10^{18} * 0.0001}{10^6} = 1.8909 * 10^8$$

Αυτή είναι η τιμή που υπάρχει στο αρχείο `dsmcProperties` σαν ο μέσος αριθμός πραγματικών σωματιδίων που αντιστοιχούν σε ένα σωματίδιο DSMC. Στις επόμενες σειρές του αρχείου `dsmcProperties` 26 έως 32 εισάγεται το μοντέλο σύγκρουσης με τα τοιχώματα. Το μοντέλο που επιλέγεται στο συγκεκριμένο πρόβλημα είναι η Maxwell διαχυτική ανάκλαση. Ο τρόπος σύγκρουσης απεικονίζεται στο Σχήμα 4.4.

Ενδεικτικά αναφέρεται ότι υπάρχουν και άλλα διαθέσιμα μοντέλα που μπορεί να χρησιμοποιήσει ο χρήστης και ένα τέτοιο παράδειγμα αποτελεί το "SpecularReflectionCoeffs" που αποτελεί την κατοπτρική ανάκλαση, η οποία απεικονίζεται στο Σχήμα 4.5.

Στις σειρές 38 έως 44 περιγράφεται ο τρόπος αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων και στο συγκεκριμένο πρόβλημα επιλέγεται το μοντέλο "Larsen Borgnakke Variable Hard Sphere". Επιπλέον, το OpenFOAM παρέχει, όπως και προηγουμένως έτσι και εδώ, και άλλα μοντέλα συγκρούσεων μεταξύ των μορίων όπως το Variable Hard Sphere (VHS). Στη πορεία, στις σειρές 46 έως 52 υπάρχει η δυνατότητα να περιγραφεί η εισερχόμενη ροή του ρευστού όταν τα όρια του πεδίου είναι ανοιχτά. Στο πρόβλημα που αναλύεται, έχει επιλεγεί "NoInflow" αφού τα όρια του πεδίου είναι κλειστά. Κλείνοντας το αρχείο "dsmcProperties" οι σειρές 53 έως 69, πληροφορούν το πρόγραμμα για τις ιδιότητες του αερίου που κυκλοφορεί μέσα στην κοιλότητα, η μάζα ενός σωματιδίου είναι $66.3 \cdot 10^{-27}$ kg, η διάμετρος του είναι $4.17 \cdot 10^{-10}$ m, το δυναμικό ιξώδες είναι $2.117 \cdot 10^{-5}$ kg/m*s και η παράμετρος ω 0.81 [4].

Με όλα τα παραπάνω ολοκληρώθηκε ο φάκελος "constant", κατασκευάστηκε το υπολογιστικό πλέγμα (κελιά) και εισήχθησαν πληροφορίες σχετικά με το ρευστό που υπάρχει στην κοιλότητα αλλά και πληροφορίες που αφορούν τις αλληλεπιδράσεις των μορίων.

4.3.2 Προσδιορισμός αρχικών ποσοτήτων την αρχική χρονική στιγμή (φάκελος «0»)

Ο φάκελος «0» βρίσκεται μέσα στο φάκελο "cavity". Εδώ συναντώνται τα εξής αρχεία "boundaryT", "boundaryU", "DSMCRhoN", "fD", "iDof", "internalE", "linearKE", "momentum", "q", "rhoM" και "rhoN".

Στο αρχείο "boundaryT", περιγράφεται η θερμοκρασία των ορίων. Θα πρέπει να επισημανθεί, ότι αυτή η θερμοκρασία δεν αλλάζει με το χρόνο. Επιπλέον, σε αυτό το αρχείο περιγράφεται η θερμοκρασία στο εσωτερικό του υπολογιστικού πλέγματος τη χρονική στιγμή $t=0$ sec. Πριν την ανάλυση του αρχείου παρατείθεται στο Σχήμα 4.4 το εσωτερικό του. Στις γραμμές 9 έως 16 δίνονται γενικές πληροφορίες για το αρχείο. Στη σειρά 18 εισάγονται οι μονάδες μεγέθους που περιγράφεται στο συγκεκριμένο αρχείο. Ο τρόπος με τον οποίο εισάγονται αυτές για τα διάφορα μεγέθη που περιγράφονται στο φάκελο "0" είναι ο ίδιος και αυτός είναι ο εξής: οι τιμές μέσα στην αγκύλη της σειράς 18 δηλώνουν τις τιμές των εκθετών των μονάδων. Κάθε αριθμός μέσα στην αγκύλη περιγράφει τον εκθέτη μιας συγκεκριμένης μονάδας μέτρησης. Ο πρώτος αριθμός περιγράφει τον εκθέτη της μονάδας της μάζας σε χιλιόγραμμα (kg), ο δεύτερος αριθμός περιγράφει τον εκθέτη της μονάδας του μήκους σε μέτρα (m) κ.ο.κ. Πρέπει να επισημανθεί, βέβαια, όταν υπάρχει ο αριθμός 0, δηλώνει, ότι η συγκεκριμένη μονάδα δεν συμμετέχει στο αρχείο που εξετάζεται στην εξαγωγή της μονάδας μέτρησης για το συγκεκριμένο μέγεθος που μελετάται στο αρχείο την εκάστοτε φορά. Στη συνέχεια, βρίσκεται ένας πίνακας, ο οποίος εξηγεί τον κάθε αριθμό της αγκύλης σε τι ιδιότητα, και κατ'επέκταση, σε ποια μονάδα αντιστοιχεί.

| | | | | | | | | | |
|--------------------------|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Dimensions | [| 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 |] |
| | | ↑ | ↑ | ↑ | ↑ | ↑ | ↑ | ↑ | |
| | | ↓ | ↓ | ↓ | ↓ | ↓ | ↓ | ↓ | |
| Νούμερο στον πίνακα 4.1: | | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | |

Πίνακας 4.1 Καθορισμός μονάδων μέτρησης στο dimensions

| Νούμερο Αριθμού στο Dimensions | Ιδιότητες | Μονάδες (S.I.) |
|--------------------------------|-----------------|-----------------------|
| 1 | Μάζα | Kilogram (kg) |
| 2 | Μήκος | Meter (m) |
| 3 | Χρόνος | Second (s) |
| 4 | θερμοκρασία | Kelvin (K) |
| 5 | Ποσότητα | Kilogram-mole (kgmol) |
| 6 | Ένταση ρεύματος | Ampere (A) |
| 7 | Ένταση φωτός | Candela (cd) |

Σύμφωνα με τον παραπάνω πίνακα στο αρχείου "boundaryT" το οποίο μελετάται στη σειρά 18 ο μόνος αριθμός που είναι μη μηδενικός έχει το νούμερο 4. Από τον πίνακα 4.1 παρατηρείται ότι ο αριθμός 4 αντιστοιχεί στη θερμοκρασία, άρα η μονάδα της θερμοκρασίας είναι $K^1 = K$.

Αφού ορίστηκε η μονάδα μέτρησης του μεγέθους που μελετάται, στη συνέχεια, στη γραμμή 20, η θερμοκρασία στο εσωτερικό του υπολογιστικού πλέγματος θα έχει την τιμή 0, τη χρονική στιγμή $t=0s$. Αυτό επιτυγχάνεται δίνοντας "uniform 0". Ο χρήστης θα μπορούσε να δώσει οποιαδήποτε τιμή επιθυμούσε συμβαδίζοντας πάντα με τη φυσική υπόσταση του προβλήματος το οποίο περιγράφει.

Στις σειρές 22 έως 38 ορίζονται οι θερμοκρασίες που αντιστοιχούν στις οριακές επιφάνειες. Πιο συγκεκριμένα, στις σειρές 25 έως 28 η θερμοκρασία του κινούμενου τοιχώματος είναι ίση με 300K. Πιο κάτω στις σειρές 31 έως 34 εισάγονται οι θερμοκρασίες στα ακίνητα τοιχώματα, δίνοντας και πάλι την τιμή 300K στο συγκεκριμένο παράδειγμα. Κλείνοντας το αρχείο "boundaryT" στις σειρές 36 έως 40 με τον όρο "empty" απαλείφεται η τρίτη διάσταση αφού το πρόβλημα μελετάται σε δυο διαστάσεις. Στη συνέχεια, στο αρχείο "boundaryU" περιγράφεται η ταχύτητα των ορίων του υπολογιστικού πλέγματος. Τυπική μορφή αυτού του αρχείου παρατίθεται στην Εικόνα 4.5.

Όπως έχει προαναφερθεί, πάντα στην αρχή αυτών των αρχείων δίνονται κάποιες γενικές πληροφορίες. Πιο κάτω, στη σειρά 17 εισάγονται οι μονάδες της ταχύτητας " $m s^{-1}$ ". Ο τρόπος εξαγωγής των μονάδων φαίνεται στον πίνακα 4.1. Στη σειρά 19 ορίζεται η ταχύτητα των εσωτερικών πεδίων να έχει την τιμή «0» και στις τρεις κατευθύνσεις X, Y και Z. Αυτό γίνεται με την εισαγωγή του "uniform (0 0 0)". Στις

σειρές 21 έως 38 αναφέρεται η ταχύτητα που θα έχουν τα οριακά πεδία του υπολογιστικού πλέγματος. Συγκεκριμένα, τα πεδία που ανήκουν στην επιφάνεια ((3 4 6 2), Σχήμα 4.2,) η οποία κινείται παράλληλα με τον άξονα των X, ορίζουμε να έχουν ταχύτητα 17.6635 m/s στον X και 0 στον Z,Y όπως φαίνεται στις σειρές 23 έως 27. Η ταχύτητα των ακίνητων πλευρών ((0 4 7 3) (2 6 5 1) (1 5 4 0) Σχήμα 4.2) ορίζεται ως 0 στην κατεύθυνση X, Y και Z με την εισαγωγή του "uniform (0 0 0)" στην ενότητα των "fixedWalls". Το πρόγραμμα αντιστοιχεί τις πλευρές (0 4 7 3) (2 6 5 1) (1 5 4 0) στην ενότητα "fixedWalls" αυτόματα, αφού κατά την κατασκευή του πλέγματος στο αρχείο "blockMeshDict" αντιστοιχίσει τις πλευρές αυτές σαν ακίνητα τοιχώματα με το όνομα "fixedWalls". Τέλος, επαναλαμβάνεται για την μπροστά (4 5 6 7) και την πίσω πλευρά (0 3 2 1) η συνθήκη "empty".

Τέλος, στο αρχείο "0" υπάρχουν ακόμα εννέα αρχεία που παρουσιάζουν την ίδια βασική δομή. Στον πίνακα 4.2 που ακολουθεί καταγράφονται τα ονόματα και η σημασία τους.

Πίνακας 4.2 Επεξήγηση αρχείων

| Όνομα αρχείου | Σημασία |
|------------------|--|
| DSMCRhoN | Αριθμητική πυκνότητα υπολογιστικών σωματιδίων DSMC |
| fD | Διάνυσμα τάσης |
| iDof | Εσωτερικοί βαθμοί ελευθερίας |
| internalE | Εσωτερική ενέργεια |
| linearKE | Γραμμική κινητική ενέργεια |
| Momentum | Ορμή |
| q | θερμοροή |
| rhoM | Πυκνότητα μάζας |
| rhoN | Αριθμητική πυκνότητα |

Το κοινό τμήμα της μορφής των αρχείων παρουσιάζεται στην Εικόνα 4.6. Παρατηρούμε, ότι δίνουμε σε όλα τα αρχεία να έχουν την τιμή 0 για τα εσωτερικά πεδία, ενώ, για τα οριακά πεδία δίνουμε την τιμή " zeroGradient". Αυτό συμβαίνει έτσι ώστε όταν απεικονίσουμε γραφικά τα αποτελέσματα να έχουμε τη δυνατότητα να κάνουμε παρεμβολή των τιμών του κάθε κελιού του πλέγματος. Εάν ο χρήστης επιθυμεί να εισάγει τιμές στα όρια, τότε πρέπει να προσέξει, ότι κατά τη γραφική απεικόνιση των αποτελεσμάτων δε θα έχει τη δυνατότητα της παρεμβολής, αλλά

θα πρέπει σε κάθε κελί να κυριαρχεί η μέση τιμή για το αντίστοιχο μέγεθος που εξετάζει κάθε φορά, ώστε τα αποτελέσματα να είναι ομαλά

Το μέρος των αρχείων που διαφέρει είναι η σειρά που γίνεται η εισαγωγή των μονάδων για την εκάστοτε ποσότητα. Αφού περιγράφηκε ο τρόπος εισαγωγής των μονάδων, με την εισαγωγή “dimensions”, παρατιθεται ο Πίνακας 4.3 με τις μονάδες, ώστε ο χρήστης να μπορεί να εισάγει τις κατάλληλες μονάδες στα αντίστοιχα αρχεία.

Πίνακας 4.3 επεξήγηση Μονάδων των αρχείων

| Όνομα αρχείου | Μονάδες |
|------------------|--|
| DSMCRhoN | m^{-3} |
| fD | $Pa (N m^{-2})$ |
| iDof | m^{-3} |
| internalE | $J m^{-3}$ |
| linearKE | $J m^{-3}$ |
| Momentum | $(kg m sec^{-1})m^{-3}$ |
| q | $(kg sec^{-3})=[(kg m sec^{-2}) (m^{-1} sec^{-1})]=[N (m^{-1} sec^{-1})]=W m^{-2}$ |
| rhoM | $kg m^{-3}$ |
| rhoN | m^{-3} |

Η πλήρης περιγραφή όλων των αρχείων που περιέχει ο Πίνακας 4.3. παρατίθεται στο Παράρτημα Γ1.

Ως αυτό το σημείο με το φάκελο “constant”, έχει εισαχθεί το υπολογιστικό πλέγμα, οι ιδιότητες που αφορούν τον τρόπο σύγκρουσης των σωματιδίων καθώς και γενικές ιδιότητες για το αέριο. Στη συνέχεια, με το φάκελο “0” έχουν ορισθεί οι οριακές συνθήκες που αφορούν τη θερμοκρασία και την ταχύτητα και τέλος, έχουν εισαχθεί ορισμένες ποσότητες. Το επόμενο στάδιο είναι η περιγραφή του φακέλου “system” που στόχο έχει τη ρύθμιση των παραμέτρων του χρόνου.

4.3.3 Προσδιορισμός συμπληρωματικών ποσοτήτων (φάκελος “system”)

Σε αυτό το φάκελο υπάρχουν πέντε αρχεία με τις εξής ονομασίες: “controlDict”, “decomposeParDict”, “DSMCIInitialiseDict”, “fvSchemes”, “fvSolution”.

Το αρχείο “controlDict” έχει ως ρόλο του τη ρύθμιση των χρόνων επανάληψης, του χρόνου εγγραφής των δεδομένων καθώς και του χρόνου τερματισμού, όπως

φαίνεται στην Εικόνα 4.7. Στην αρχή βρίσκονται τα γενικά χαρακτηριστικά του αρχείου και από τη σειρά 22 και έπειτα γίνονται οι κατάλληλες ρυθμίσεις που αφορούν το χρόνο. Στη σειρά 24 ορίζεται σαν τιμή εκκίνησης του χρόνου $t=0\text{sec}$. Στη σειρά 28 σαν χρόνο τερματισμού της εκτέλεσης του προγράμματος ορίζεται η στιγμή $t=0,1\text{ sec}$. Το χρονικό βήμα των επαναλήψεων ορίζεται στη γραμμή 30 σαν $\Delta t=10^{-6}\text{ sec}$. Τέλος, σαν χρόνο εγγραφής των δεδομένων ώστε να μπορεί ο χρήστης να τα επεξεργαστεί ορίζεται στη σειρά 34 ως $t_{\text{write}} = 10^{-3}\text{ sec}$. Στο τελευταίο κομμάτι του αρχείου "controlDict" εισάγεται με ένα συγκεκριμένο τρόπο καταγραφής ο υπολογισμός των μέσων τιμών για τα εννέα αρχεία του πίνακα 4.2. Ο τρόπος αυτός παρουσιάζεται αναλυτικά στο Παράρτημα Γ 2.

Στο αρχείο "DSMCIinitialiseDict" ορίζεται η αριθμητική πυκνότητα που υπολογίστηκε με την σχέση 4.2. Πρέπει να επισημάνθει, ότι αυτή η ποσότητα εξαρτάται από το αέριο που υπάρχει στο εκάστοτε πρόβλημα. Ο τρόπος με τον οποίο γίνεται η εισαγωγή αυτής της ποσότητας στο OpenFOAM, παρουσιάζεται στην Εικόνα 4.8, στις σειρές 19 έως 22.

Τα αρχεία "fvSchemes", "fvSolution" δεν έχουν ιδιαίτερο σκοπό στο συγκεκριμένο solver (dsmcFoam) για το λόγο αυτό παρατηρείται όπως φαίνεται στο παράρτημα Γ 3 - από την εικόνα των αρχείων που δίνεται - ότι οι επιλογές είναι απενεργοποιημένες. Στο τελευταίο αρχείο με το όνομα "decomposeParDict", παρέχονται πληροφορίες για τον τρόπο επεξεργασίας των δεδομένων από τους επεξεργαστές όταν θελήσουμε να τρέξουμε τον κώδικα παράλληλα. Στη περίπτωση που περιγράφεται, η μορφή του αρχείου παρουσιάζεται στο Παράρτημα Γ 3, όπου στην ουσία δε έγινε κάποια παρέμβαση στο αρχικό αρχείο.

Κλείνοντας, αφού κατασκευάστηκε ο φάκελο "cavity" εισάγοντας τα κατάλληλα δεδομένα για την επίλυση του προβλήματος που παρουσιάστηκε στην παράγραφο 4.1 στους υποφακέλους "constant", "0" και "system" είναι δυνατόν να εκτελεστεί ο solver "dsmcFoam", όπως περιγράφεται στο Παράρτημα Β και να εξαχθούν τα αποτελέσματα, η ορθότητα των οποίων θα εξετασθεί στο επόμενο κεφάλαιο. Όταν εκτελείται ο κώδικας μέσα στον φάκελο "cavity" δημιουργούνται αρχεία με όνομα το χρονικό βήμα καταγραφής δηλαδή 0.001, 0.002 κ.ο.κ. μέσα στα οποία υπάρχει η πληροφορία των μέσων τιμών των μακροσκοπικών ποσοτήτων για κάθε κελί και δύο επιπλέον αρχεία με την ονομασία "log.blockMesh" και "log.DSMCFoam". Στο αρχείο "log.blockMesh" ο χρήστης μπορεί να δει πληροφορίες σχετικά με τη

δημιουργία του πλέγματος και τη δημιουργία των κελιών κατά την εκτέλεση του προγράμματος. Εικόνα αυτού του αρχείου παρουσιάζεται στο Παράρτημα Γ. Στο "log.DSMCFoam" ο χρήστης μπορεί να δει όλες τις επαναλήψεις του προγράμματος όπως επίσης και πληροφορίες που αφορούν την κάθε επανάληψη, όπως ο αριθμός συγκρούσεων, ο αριθμός σωματιδίων DSMC που παραμένει σταθερός και ίσος με 106, η μάζα του συστήματος που υπολογίζεται από τον αριθμό των σωματιδίων επί τη μάζα του ενός σωματιδίου, η μέση ορμή και η μέση κινητική ενέργεια. Μέρος του αρχείου που εκτείνεται από τη χρονική στιγμή $t=0$ sec και εκτείνεται ως τη χρονική στιγμή $t=0.001$ sec που σ' αυτό το διάστημα γίνεται η πρώτη καταγραφή βρίσκεται στο Παράρτημα Γ.

ΕΙΚΟΝΕΣ

```
8     FoamFile
9     {
10    version      2.0;
11    format       ascii;
12
13    root         ""';
14    case         ""';
15    instance     ""';
16    local        ""';
17
18    class        dictionary;
19    object        blockMeshDict;
20    }
21
22 // ***** //
24 convertToMeters 0.01;
26 vertices
27 (
28 (-5 -5 -0.5)
29 (5 -5 -0.5)
30 (5 5 -0.5)
31 (-5 5 -0.5)
32 (-5 -5 0.5)
33 (5 -5 0.5)
34 (5 5 0.5)
35 (-5 5 0.5)
36 );
37 blocks
38 (
39 hex (0 1 2 3 4 5 6 7) (200 200 1) simpleGrading (1 1 1)
40 );
41 edges
42 (
43 );
45 patches
46 (
47 wall movingWall
48 (
49 (3 7 6 2)
50 )
51 wall fixedWalls
52 (
53 (0 4 7 3)
54 (2 6 5 1)
55 (1 5 4 0)
56 )
57 empty frontAndBack
58 (
59 (0 3 2 1)
60 (4 5 6 7)
61 )
62 );
64 mergePatchPairs
65 (
66 );
69 // ***** //
```

Εικόνα 4.1: Δημιουργία πλέγματος ("blockMeshDict")

```

9   FoamFile
10  {
11    version  2.0;
12    format   ascii;
13    class    polyBoundaryMesh;
14    location "constant/polyMesh";
15    object   boundary;
16  }
17  // ***** //
18  3
19  (
20  (
21    movingWall
22    {
23      type      wall;
24      nFaces    200;
25      startFace 79600;
26    }
27    fixedWalls
28    {
29      type      wall;
30      nFaces    600;
31      startFace 79800;
32    }
33    frontAndBack
34    {
35      type      empty;
36      nFaces    80000;
37      startFace 80400;
38    }
39  )
40  )
41  // ***** //

```

Εικόνα 4.2: Προσδιορισμός ποσοτήτων πλέγματος στα όρια του προβλήματος ("boundary")

```

9   FoamFile
10  {
11    version 2.0;
12    format  ascii;
13    class   dictionary;
14    location "constant";
15    object  DSMCProperties;
16  }
17  // ***** //
20  // General Properties
21  // ~~~~~
23  nEquivalentParticles 1.8909e8;
26  // Wall Interaction Model
27  // ~~~~~
29  WallInteractionModel MaxwellianThermal;
32  MaxwellianThermalCoeffs {}
35  // Binary Collision Model
36  // ~~~~~
38  BinaryCollisionModel LarsenBorgnakkeVariableHardSphere;
40  LarsenBorgnakkeVariableHardSphereCoeffs
41  {
42    Tref 273;
43    relaxationCollisionNumber 5.0;
44  }
46  // Inflow Boundary Model
47  // ~~~~~
48  InflowBoundaryModel NoInflow;
50  NoInflowCoeffs {}
53  // Molecular species
54  // ~~~~~
56  typeIdList (Ar);
58  moleculeProperties
59  {
60    Ar
61    {
62      mass 66.3e-27;
63      diameter 4.17e-10;
64      internalDegreesOfFreedom 0;
65      viscosityCoefficient 2.117e-5;
66      omega 0.81;
67    }
68  }
71  // ***** //

```

Εικόνα 4.3: Παράμετροι αλγορίθμου (“dsmcProperties”)

```

9 FoamFile
10 {
11 version 2.0;
12 format ascii;
13 class volScalarField;
14 object boundaryT;
15 }
16 // ***** //
17 dimensions [0 0 0 1 0 0 0];
18 internalField uniform 0;
19 boundaryField
20 {
21 movingWall
22 {
23 type fixedValue;
24 value uniform 300;
25 }
26 fixedWalls
27 {
28 type fixedValue;
29 value uniform 300;
30 }
31 frontAndBack
32 {
33 type empty;
34 }
35 }
36 // ***** //

```

Εικόνα 4.4: Προσδιορισμός θερμοκρασίας στα όρια του προβλήματος ("boundaryT")

```

9 FoamFile
10 {
11 version 2.0;
12 format ascii;
13 class volVectorField;
14 object boundaryU;
15 }
16 // ***** //
17 dimensions [0 1 -1 0 0 0 0];
18 internalField uniform (0 0 0);
19 boundaryField
20 {
21 movingWall
22 {
23 type fixedValue;
24 value uniform (17.6635 0 0);
25 }
26 fixedWalls
27 {
28 type fixedValue;
29 value uniform (0 0 0);
30 }
31 frontAndBack
32 {
33 type empty;
34 }
35 }
36 // ***** //

```

Εικόνα 4.5: Προσδιορισμός ταχύτητας στα όρια του προβλήματος ("boundaryU")


```

internalField uniform (0 0 0);

boundaryField
{
    movingWall
    {
        type        zeroGradient;
    }
    fixedWalls
    {
        type        zeroGradient;
    }
    frontAndBack
    {
        type        empty;
    }
}
//***** //

```

Εικόνα 4.6: Κοινό μέρος αρχείων

```

9     FoamFile
10    {
11        version  2.0;
12        format   ascii;
13        class    dictionary;
14        location "system";
15        object   controlDict;
16    }
17    //***** //
19    application  DSMCFoam;
22    startFrom    startTime;
24    startTime    0;
26    stopAt      endTime;
28    endTime     1e-1;
30    deltaT      1e-6;
32    writeControl runTime;
34    writeInterval 1e-3;
36    purgeWrite   0;
38    writeFormat  ascii;
40    writePrecision 10;
42    writeCompression uncompressed;
44    timeFormat   general;
46    timePrecision 6;
48    runTimeModifiable yes;
50    adjustTimeStep no;
52    functions

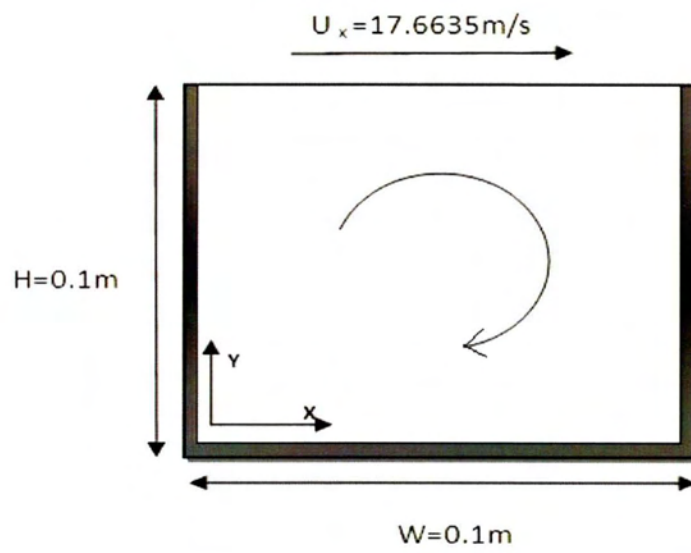
```

Εικόνα 4.7: Χρονικοί παράμετροι του αλγορίθμου ("controlDict")

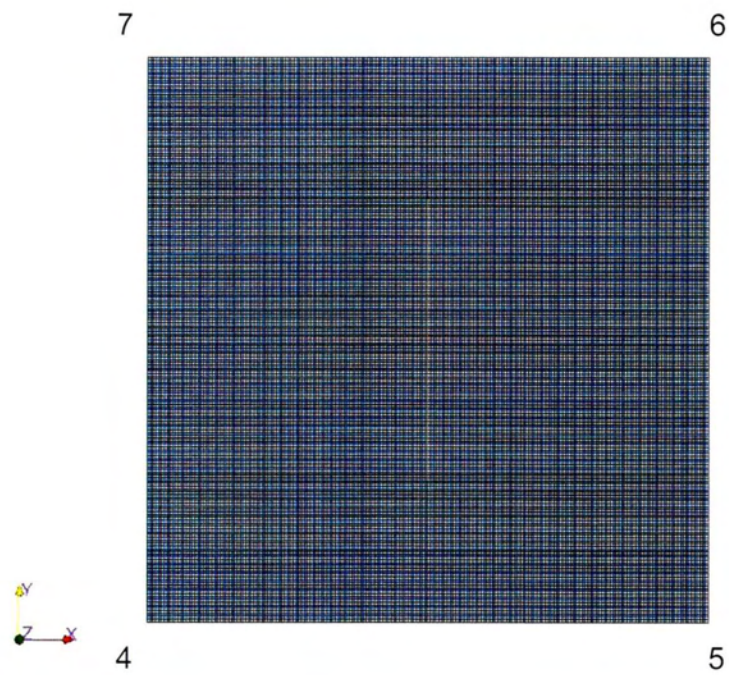
```
9   FoamFile
10  {
11  version 2.0;
12  format  ascii;
13  class   dictionary;
14  location "system";
15  object  DSMCInitialiseDict;
16  }
17  // ***** //
19  numberDensities
20  {
21  Ar      1.8909e18;
22  };
24  temperature 300;
26  velocity    (0 0 0);
27  // ***** //
```

Εικόνα 4.8 Παράμετροι αλγορίθμου ("dsmcInitialiseDict")

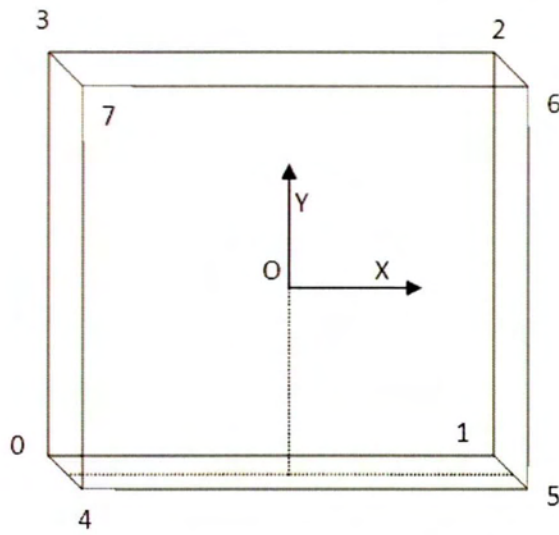
Σχήματα



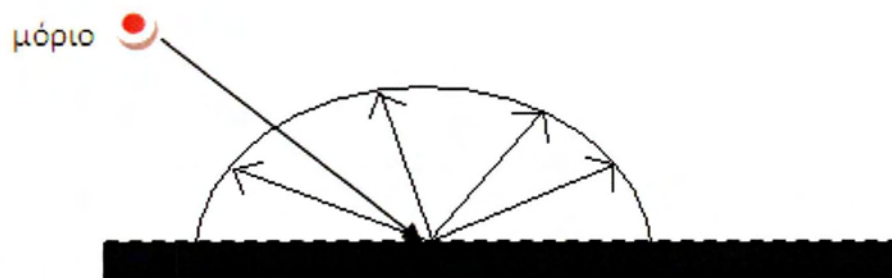
Σχήμα 4.1: Γεωμετρία κοιλότητας.



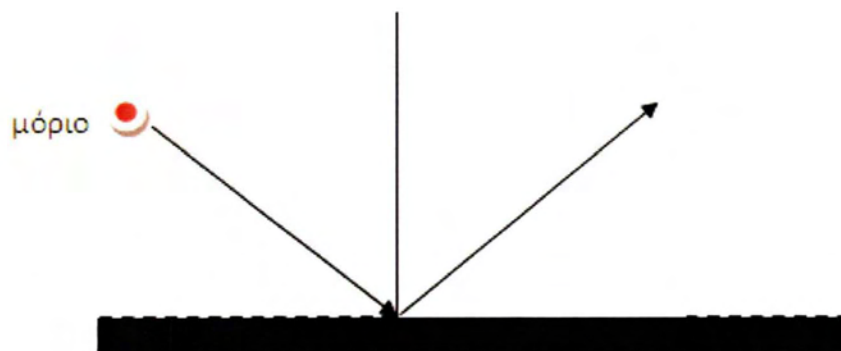
Σχήμα 4.2: Υπολογιστικό πλέγμα.



Σχήμα 4.3: Αντιστοιχία πλευρών πλέγματος.



Σχήμα 4.4: Διαχυτική ανάκλαση.



Σχήμα 4.5: Κατοπτρική ανάκλαση.

Κεφάλαιο 5 Αποτελέσματα και σχολιασμός

5.1 Εισαγωγή

Στο κεφάλαιο αυτό γίνεται αρχικά, η επαλήθευση του κώδικα, η περιγραφή του οποίου πραγματοποιήθηκε στο κεφάλαιο 4, συγκρίνοντας τα αποτελέσματα που παράγει ο κώδικας του OpenFOAM σε σχέση με τα αποτελέσματα που βρίσκονται στα [10], [11]. Στο άρθρο [10], επιλύεται το πρόβλημα της ροής σε κοιλότητα (cavity) χρησιμοποιώντας το γραμμικό μοντέλο Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) με τη μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων με συνοριακές συνθήκες Maxwell diffuse-specular boundary conditions, που αποτελεί ένα μοντέλο γραμμικού συνδυασμού της κατοπτρικής και της διαχυτικής ανάκλασης. Το άρθρο [11] αφορά την επίλυση του προβλήματος ροής μέσα σε κοιλότητα με τη μέθοδο απευθείας προσομοίωσης Monte Carlo (DSMC). Στην υποενότητα 5.1 γίνεται η σύγκριση με το πρώτο άρθρο παράγοντας αποτελέσματα για την ταχύτητα στην κατεύθυνση y και στην κατεύθυνση x , για τις θέσεις των κέντρων δινών από τη βάση της κοιλότητας έως την κορυφή, τον συντελεστή οπισθέλκουσας (drag coefficient) και του ρυθμού ροής του ρευστού (flow rate). Η υποενότητα 5.2 παρουσιάζει σύγκριση αποτελεσμάτων με το δεύτερο άρθρο, όπου παράγονται αποτελέσματα που αναφέρονται σε οριζόντιες και κάθετες ταχύτητες, θερμοκρασία και πίεση. Τέλος, στην υποενότητα 5.3 έχοντας ολοκληρώσει τις συγκρίσεις και πιστοποιώντας την ορθότητα του κώδικα εξετάζονται ορισμένες περιπτώσεις έξω από το φάσμα των συγκρίσεων και για υψηλές ταχύτητες του κινούμενου τοιχώματος. Σε όλες τις περιπτώσεις θεωρούμε ότι έχουμε μονατομικό αέριο και συγκεκριμένα Αργό (Ar).

5.2 Αποτελέσματα στη γραμμική περιοχή

Η πλήρης περιγραφή του προβλήματος με τις γεωμετρικές παραμέτρους έχει πραγματοποιηθεί στο κεφάλαιο 4 και συγκεκριμένα στην υποενότητα 4.1. Για να είμαστε συμβατοί με τις τιμές του άρθρου εξετάζουμε τις περιπτώσεις για τους λόγους πλευρών H προς W ($A=H/W$) 0.5, 1, θερμοκρασία αναφοράς $T_0= 300K$ και τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης $\delta=0.01, 0.1, 1, 5, 10$. Επίσης παρατηρείται ότι ο αριθμός Kn με βάση τη σχέση

$$Kn = \frac{\sqrt{\pi}}{2\delta} \quad (5.1)$$

είναι μεγαλύτερος του 0.1 για όλες τις περιπτώσεις που εξετάζονται, περιοχή στην οποία εφαρμόζεται η μέθοδος των διακριτών ταχυτήτων και η DSMC με μεγάλη αποτελεσματικότητα. Ακόμη, θεωρείται ότι σε κάθε κελί τοποθετούνται 200 υπολογιστικά σωματίδια (DSMC particles) και λόγος ταχύτητας, U_{wall} / u_0 ίσος με 0.1, όπου $u_0 = \sqrt{2RT_0}$ η πιο πιθανή ταχύτητα, όπως ορίζεται από την κινητική θεωρία. Επιπρόσθετα, μέσα από τον ορισμό του αριθμού Knudsen,

$$Kn = \frac{\lambda}{W} \quad (5.2)$$

όπου λ η μέση ελεύθερη διαδρομή (mean free path) και W το χαρακτηριστικό μήκος, μπορούμε να υπολογίσουμε τις τιμές του λ για τις προαναφερθείσες περιπτώσεις $\lambda = 8.862, 0.886, 0.089, 0.018, 0.009$. Θεωρείται, βέβαια, ένας ελάχιστος αριθμός κελιών στην κατεύθυνση x , στην κατεύθυνση y και ένα μέγιστο χρονικό βήμα Δt ως εξής: με έναν συντελεστή ασφάλειας ίσο με 0.3 και το γεγονός ότι η γραμμική διάσταση του κελιού στην κατεύθυνση x και y πρέπει να είναι μικρότερη από τη μέση ελεύθερη διαδρομή, υπολογίζεται ο ελάχιστος αριθμός κελιών στην κατεύθυνση x και y μέσα από τις σχέσεις:

$$\text{Minimum } x \text{ cells} = \frac{W}{\lambda * 0.3} \quad \text{Minimum } y \text{ cells} = \frac{H}{\lambda * 0.3}$$

αντίστοιχα. Από τα παραπάνω προκύπτει ότι η μικρότερη διάσταση κελιού ορίζεται ως $\frac{W}{\text{Minimum } x \text{ cells}}, \frac{H}{\text{Minimum } y \text{ cells}}$ δηλαδή $\lambda * 0.3$. Συνακόλουθα το μέγιστο χρονικό βήμα προκύπτει ως

$$\Delta t_{\max} = \frac{\lambda * 0.3}{\sqrt{2RT_0}} \quad (5.3)$$

Το χρονικό βήμα Δt επανάληψης του κώδικα ορίζεται ως

$$\Delta t = 2 \left(\frac{\text{διάσταση κελιού}}{u_0} \right) \quad (5.4)$$

όπου σε κάθε περίπτωση την οποία εκτελέσαμε ίσχυε η ανισότητα $\Delta t < \Delta t_{\max}$. Επιπλέον, θεωρήσαμε ότι έχουμε 80 κελιά κατά το πλάτος W της κοιλότητας και ότι τα κελιά είναι τετραγωνικά. Τέλος, με βάση τις σχέσεις 4.1 και 4.2 υπολογίζονται οι τιμές των παραμέτρων F_N και n_0 που συμβολίζουν τον αριθμό των πραγματικών σωματιδίων που αντιστοιχούν σε ένα σωματίδιο DSMC και την αριθμητική πυκνότητα αντίστοιχα.

Στο Σχήμα 5.2.1 παρουσιάζονται οι γραμμές ροής της ταχύτητας για $\delta=1, 5, 10$ και για $A = 0.5, 1$ με βάση τα αποτελέσματα του OpenFOAM αντιπαραβάλλοντάς τα με το Σχήμα 5.2.2 του άρθρου [10]. Παρατηρείται για όλες τις περιπτώσεις η δημιουργία μιας δίνης. Η δίνη δημιουργείται στον άξονα συμμετρίας της κοιλότητας ανεξάρτητα από την τιμή του λόγου A . Επιπλέον, είναι φανερή η ομοιότητα των αποτελεσμάτων της OpenFOAM με τα αποτελέσματα του Σχήματος 5.2.2 του άρθρου [10]. Ακόμη, στα αποτελέσματα του OpenFOAM για τις περιπτώσεις όπου $A=0.5$ παρατηρείται μια μετατόπιση του κέντρου της δίνης, από την ευθεία που διέρχεται από το κέντρο της κοιλότητας και είναι παράλληλη με τον άξονα y , σε σχέση με τα αποτελέσματα του άρθρου. Η θέση του κέντρου της δίνης κατά το ύψος της κοιλότητας φαίνεται στο Σχήμα 5.2.3 για τις διάφορες τιμές των παραμέτρων A και δ , ενώ στο Σχήμα 5.2.4 φαίνονται οι αντίστοιχες τιμές με βάση το άρθρο [10].

Είναι φανερή η ταύτιση των αποτελεσμάτων για όλες τις τιμές δ και A . Στη συνέχεια γίνεται σύγκριση της τιμής της κατακόρυφης συνιστώσας της ταχύτητας στην οριζόντια γραμμή που περνά από το κέντρο της δίνης. Στο Σχήμα 5.2.5 παρουσιάζεται η κατακόρυφη συνιστώσα της ταχύτητας για τις εξής τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης $\delta = 0.1, 0.01, 1, 10$ και για $A = 1$ όπως προκύπτουν από τον solver dsmcFOAM ενώ στο 5.2.6 φαίνονται τα αντίστοιχα αποτελέσματα για τις ίδιες τιμές των παραμέτρων δ, A με βάση το άρθρο [10].

Στα Σχήματα 5.2.7 και 5.2.8 συγκρίνεται η τιμή της κατακόρυφης συνιστώσας της ταχύτητας για τις ίδιες τιμές δ αλλά για $A=0.5$. Όπως και για την περίπτωση $A=1$ έτσι και για την περίπτωση $A=0.5$ και για $\delta=0.1, 0.01$ και 1 υπάρχει ταύτιση των αποτελεσμάτων ενώ όταν $\delta=10$ υπάρχει μία απόκλιση για τον ίδιο λόγο που περιγράφηκε παραπάνω. Ακολούθως, παρουσιάζονται οι απεικονίσεις της οριζόντιας συνιστώσας της ταχύτητας κατά μήκος της οριζόντιας γραμμής που

περνά από το κέντρο της δίνης για τις περιπτώσεις $\delta=0.01$ και $\delta=1$. Στο Σχήμα 5.1.9 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα του solver dsmcFoam ενώ στο 5.2.10 τα αποτελέσματα του [10] για $A=0.5$. Ενώ στο Σχήμα 5.2.11 βρίσκονται τα αποτελέσματα για $A=1$ για τον solver DSMCFoam και στο 5.2.12 του άρθρου [10]. Σε όλες τις περιπτώσεις παρατηρείται η πλήρης ταύτιση των αποτελεσμάτων. Επιπλέον, όντας το δ μικρότερο της μονάδας σε όλες τις περιπτώσεις που παρουσιάζονται στα σχήματα η απαίτηση για να είναι η γραμμικοποίηση σωστή είναι πλέον $U_{wall} / u_0 \ll 1$, η οποία ικανοποιείται αφού $U_{wall} / u_0 = 0.1$.

Τέλος, γίνεται ο υπολογισμός του flow rate και του drag coefficient για τις περιπτώσεις $\delta=0.01, 0.1, 1, 5, 10$ και $A= 1, 0.5$. Επίσης, πραγματοποιείται και η σύγκριση των αποτελεσμάτων της DSMC για τις προαναφερθείσες ποσότητες σε σχέση με τα αποτελέσματα του άρθρου [10]. Το flow rate ορίζεται ως το ολοκλήρωμα της ποσότητας $\rho'u'$ από το κέντρο της δίνης ως το κινούμενο τοίχωμα, όπου ρ' η διαστατή πυκνότητα και u' η διαστατή ταχύτητα. Από τα παραπάνω προκύπτει

$$\dot{M} = \int_{cv}^H (\rho'u') dy' = \frac{1}{2} \int_0^H |\rho'u'| dy' = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^j |\rho'u'| \Delta y \quad (5.5)$$

όπου cv και j είναι το κέντρο της δίνης στην κατεύθυνση y και ο αριθμός των κελιών στην κατεύθυνση y αντίστοιχα. Οι ποσότητες ρ', u' τυπώνονται για κάθε χρονική στιγμή στα αρχεία rhoMMean και UMean αντίστοιχα για κάθε περίπτωση δ και A μετά την εκτέλεση του προγράμματος OpenFOAM για τις αντίστοιχες περιπτώσεις. Για να είναι όμως εφικτή η σύγκριση με τα αποτελέσματα του άρθρου είναι αναγκαία η αδιαστατοποίηση της ποσότητας \dot{M} . Η αδιαστατοποίηση γίνεται ως εξής :

$$G = \frac{\dot{M}}{\frac{P_0 W U_{wall}}{u_0^2}} \quad (5.6)$$

Όπου $P_0 = n_0 k_B T_0$ και $u_0 = \sqrt{2RT_0}$. Στη συνέχεια, παραθέτουμε ύστερα από κατάλληλη μαθηματική επεξεργασία τα αποτελέσματα του OpenFOAM σε σχέση με το άρθρο [10] που αφορούν το flow rate.

Πίνακας 5.1: Αποτελέσματα του flow rate για διάφορες τιμές του δ και A.

| FLOW RATE | | | FLOW RATE | | |
|-----------------|----------|----------|-----------------|----------|----------|
| A=1 | | | A=0.5 | | |
| | OpenFOAM | [10] | | OpenFOAM | [10] |
| $\delta = 0.01$ | 0.97(-1) | 0.97(-1) | $\delta = 0.01$ | 0.53(-1) | 0.53(-1) |
| $\delta = 0.1$ | 0.97(-1) | 0.97(-1) | $\delta = 0.1$ | 0.54(-1) | 0.54(-1) |
| $\delta = 1$ | 0.10 | 0.10 | $\delta = 1$ | 0.61(-1) | 0.62(-1) |
| $\delta = 5$ | 0.13 | 0.13 | $\delta = 5$ | 0.83(-1) | 0.84(-1) |
| $\delta = 10$ | 0.14 | 0.14 | $\delta = 10$ | 0.97(-1) | 0.99(-1) |

Για τον υπολογισμό του drag coefficient αρκεί να ολοκληρωθεί η διατμητική τάση κατά μήκος του κινούμενου τοιχώματος. Με βάση τα παραπάνω προκύπτει :

$$F = \int_0^w P_{xy} dx' = \sum_{i=1}^i (P_{xy}) \Delta x \quad (5.7)$$

Όπου i ο αριθμός των κελιών στην κατεύθυνση y . Η ποσότητα P_{xy} τυπώνεται για κάθε χρονική στιγμή στο αρχείο με τίτλο fdMean, ύστερα από την εκτέλεση του προγράμματος OpenFOAM για τις εξεταζόμενες τιμές των παραμέτρων δ , A. Για να είναι εφικτή η σύγκριση των αποτελεσμάτων με αυτά του άρθρου [10] είναι αναγκαία η αδιαστατοποίηση της (5.7). Η αδιαστατοποίηση πραγματοποιείται ως εξής :

$$D = \frac{F}{WP_0} \left(\frac{u_0}{U_{wall}} \right) \quad (5.8)$$

Ύστερα από κατάλληλη μαθηματική επεξεργασία παρουσιάζουμε τα αποτελέσματα σε σχέση με αυτά του άρθρου [10].

Πίνακας 5.2: Αποτελέσματα του Drag coefficient για διάφορες τιμές του δ και A .

| Drag coefficient | | | Drag coefficient | | |
|------------------|----------|------|------------------|----------|------|
| A=1 | | | A=0.5 | | |
| | OpenFOAM | [10] | | OpenFOAM | [10] |
| $\delta = 0.01$ | 0.68 | 0.68 | $\delta = 0.01$ | 0.72 | 0.73 |
| $\delta = 0.1$ | 0.68 | 0.68 | $\delta = 0.1$ | 0.72 | 0.73 |
| $\delta = 1$ | 0.64 | 0.63 | $\delta = 1$ | 0.68 | 0.68 |
| $\delta = 5$ | 0.52 | 0.51 | $\delta = 5$ | 0.55 | 0.55 |
| $\delta = 10$ | 0.43 | 0.42 | $\delta = 10$ | 0.46 | 0.45 |

Όπως παρατηρείται από τους πίνακες 5.1 και 5.2 υπάρχει η συμφωνία των αποτελεσμάτων. Η μικρή διαφορά στις τιμές που παρατηρείται για τιμές του $\delta > 1$ οφείλεται στη μη ικανοποίηση της συνθήκης γραμμικοποίησης $U_w / u_0 \ll 0.1$. Ειδικότερα όταν το δ πάρει την τιμή 10 η συνθήκη γραμμικοποίησης $\delta U_w / u_0 \ll 1$ παύει να ισχύει.

5.3 Αποτελέσματα στη μη γραμμική περιοχή

Στην υποενότητα αυτή θα συγκρίνουμε τα αποτελέσματα του OpenFOAM σε σχέση με αποτελέσματα που έχουν προκύψει από την επίλυση του προβλήματος ροής σε κοιλότητα με τη μέθοδο DSMC και για υψηλές τιμές ταχύτητας του πάνω τοιχώματος. Τα αποτελέσματα θα αφορούν τετραγωνική γεωμετρία $H=W$, τιμές ταχύτητας του κινούμενου τοιχώματος 10, 100, 50 και 200 m/sec και τιμές του αριθμού $Kn = 0.1, 0.5, 1, 2, 8$. Επιπλέον τοποθετήθηκαν 200 σωματίδια ανά κελί για να έχουμε μειωμένο στατιστικό θόρυβο. το αέριο που τοποθετήθηκε στην κοιλότητα ήταν Αργό (Ar). Τέλος, όσον αφορά το χρονικό βήμα και τον αριθμό των κελιών στην κατεύθυνση x και y χρησιμοποιήθηκαν οι ίδιοι περιορισμοί που περιγράφηκαν στην υποενότητα 5.2.

Στα Σχήματα 5.3.1 και 5.3.2 παρατίθενται η μεταβολή της ταχύτητας στην οριζόντια κατεύθυνση καθώς και η μεταβολή της ταχύτητας στην κατακόρυφη κατεύθυνση κατά μήκος της γραμμής που διέρχεται από το κέντρο της κοιλότητας, αντίστοιχα. Υπάρχει πλήρης ταύτιση των αποτελεσμάτων. Επιπλέον, παρατηρείται μία μείωση της ταχύτητας κατά την οριζόντια κατεύθυνση με την αύξηση του αριθμού Kn κάτι το οποίο είναι αναμενόμενο αφού πλησιάζοντας τη συνεχή περιοχή $Kn \ll 1$ αναμένεται η αδιάστατη οριζόντια ταχύτητα u/U_w να πάρει την τιμή 1. Στη συνέχεια, ακολουθεί η κατανομή της κατακόρυφης συνιστώσας της ταχύτητας κατά μήκος της ευθείας που διέρχεται από το κέντρο της κοιλότητας για διάφορες τιμές του αριθμού Kn . Στο σχήμα 5.3.3 φαίνονται τα αποτελέσματα του OpenFOAM και του άρθρου [11].

Όπως φαίνεται και από το Σχήμα υπάρχει η πλήρης ταύτιση των αποτελεσμάτων. Επιπρόσθετα, αναφέρουμε το κέντρο της δίνης για τις περιπτώσεις $Kn=8$ και $Kn = 0.1$

Πίνακας 5.3.1 Το κέντρο της δίνης για A) για $Kn=8$ και B) για $Kn=0.1$

A)

| $Kn = 8$ | OpenFOAM | [11] |
|----------|----------|-------|
| x/H | 0.510 | 0.511 |
| y/H | 0.685 | 0.684 |

B)

| $Kn = 0.1$ | OpenFOAM | [11] |
|------------|----------|-------|
| x/H | 0.511 | 0.511 |
| y/H | 0.704 | 0.741 |

Επιπρόσθετα, για τις περιπτώσεις της οριζόντιας και της κάθετης συνιστώσας της ταχύτητας όπου το Kn έχει την τιμή 0.1 παρατηρείται η εμφάνιση μικρού στατιστικού θορύβου στα αποτελέσματα του OpenFOAM σε σχέση με τα αποτελέσματα του άρθρου [11]. Αυτό οφείλεται ενδεχομένως, στο πυκνότερο υπολογιστικό πλέγμα καθώς και στο μεγαλύτερο αριθμό επαναλήψεων που περιλαμβάνει το άρθρο [11]. Αυτός είναι και ο λόγος της μικρής διαφοράς της θέσης της δίνης κατά τον άξονα του y που δίνει το OpenFOAM σε σχέση με τη θέση που δίνει το άρθρο [11].

Στην συνέχεια, πραγματοποιείται η σύγκριση των αποτελεσμάτων του OpenFOAM με τα αποτελέσματα του άρθρου [11] για την οριζόντια και την κάθετη ταχύτητα για $K_{II}=1$ και ταχύτητες του κινούμενου τοιχώματος $U_w=50, 10, 100, 200$ m/sec.

Από τα Σχήματα 5.3.5 και 5.3.6 αποδεικνύεται η ορθότητα των αποτελεσμάτων του OpenFOAM για ένα ευρύ φάσμα υψηλών ταχυτήτων του πάνω τοιχώματος. Είναι ενδιαφέρον να σημειωθεί ότι η αδιάστατη ταχύτητα ολίσθησης σε μεγάλο βαθμό επηρεάστηκε από τη σημαντική αλλαγή στην ταχύτητα του πάνω τοιχώματος. Από το Σχήμα 5.3.5, παρατηρείται ότι με ταχύτητα πάνω τοιχώματος 10 m/s, το προφίλ της κάθετης συνιστώσας της ταχύτητας είναι συμμετρικό γύρω από την κάθετη γραμμή που διασχίζει το κέντρο της κοιλότητας. Ωστόσο, σε υψηλότερες ταχύτητες καπακιού, η ταχύτητα v δεν είναι πλέον συμμετρική και μετατοπίζεται προς τα δεξιά. Αυτό επιβεβαιώνεται και από το Σχήμα 5.3.7 όπου φαίνονται οι γραμμές ροής πάνω στο προφίλ της ταχύτητας στην κατακόρυφη κατεύθυνση. Από το Σχήμα 5.3.7 φαίνεται ότι για ταχύτητα του πάνω τοιχώματος 10 m/s υπάρχει πλήρης συμμετρία και η δίνη σχηματίζεται στο μέσο του πλάτους της κοιλότητας, ενώ καθώς αυξάνεται η ταχύτητα το κέντρο μετατοπίζεται προς τα δεξιά. Το αποτέλεσμα της μετατόπισης της δίνης προς τα αριστερά είναι πλήρως συναφές με τα αποτελέσματα του [11].

Τέλος, ολοκληρώνοντας την σύγκριση των αποτελεσμάτων του OpenFOAM με τα αποτελέσματα του άρθρου [11] ελέγχουμε την ορθότητα των αποτελεσμάτων του OpenFOAM για την θερμοκρασία και την πίεση. Στα Σχήματα 5.3.8 και 5.3.9 παρουσιάζονται οι μεταβολές της θερμοκρασίας και της πίεσης κατά μήκος της ευθείας που διέρχεται από το κέντρο της κοιλότητας για ταχύτητα κινούμενου τοιχώματος $U_w=50$ m/s και αριθμούς $K_{II}=0.5, 1, 2, 8$ αντίστοιχα. Παρατηρείται η ταύτιση των αποτελεσμάτων τόσο για τη θερμοκρασία όσο και για την πίεση. Επιπλέον, οι μορφές των καμπυλών για διάφορους αριθμούς K_{II} είναι πανομοιότυπες όπως και η εξέλιξη της διακύμανσης τόσο της πίεσης όσο και της θερμοκρασίας. Ωστόσο παρατηρείται ότι με την αύξηση του αριθμού K_{II} που συνεπάγεται μείωση της παραμέτρου αραιοποίησης και της αριθμητικής πυκνότητας φαίνεται να πλήττεται περισσότερο η πίεση σε σχέση με την θερμοκρασία. Επίσης, από την μορφή της καμπύλης για $K_{II}=0.5$ συμπεραίνεται ότι όσο μειώνεται ο αριθμός K_{II} και προσεγγίζουμε την συνεχή περιοχή τόσο αυξάνει ο στατιστικός θόρυβος, ο οποίος γίνεται έντονα αντιληπτός στην απεικόνιση της

μεταβολής της θερμοκρασίας αφού η θερμοκρασία αποτελεί τη δεύτερη ροπή της συνάρτησης κατανομής των σωματιδίων.

Από τα παραπάνω γίνεται αντιληπτό ότι τα αποτελέσματα του OpenFOAM δίνουν ικανοποιητικά αποτελέσματα τόσο σε χαμηλές όσο και σε υψηλές ταχύτητες. Σε κάθε περίπτωση οι τιμές είχαν πολύ μικρές αποκλίσεις σε σχέση με τις τιμές προς σύγκριση από τα άρθρα [10] και [11]

5.4 Αντιπροσωπευτικά αποτελέσματα σε μεγάλο εύρος του αριθμού Mach

Έχοντας ολοκληρώσει τον έλεγχο της ορθότητας των αποτελεσμάτων του OpenFOAM τόσο σε χαμηλές ταχύτητας (υποενότητα 5.2) όσο και σε υψηλές (υποενότητα 5.3) είμαστε σε θέση να εξετάσουμε ορισμένες περιπτώσεις έξω από το φάσμα των συγκρίσεων. Οι περιπτώσεις που εξετάζονται είναι για υψηλούς αριθμούς Mach. Συγκεκριμένα, εξετάζονται οι περιπτώσεις για λόγο $U_{wall} / u_0 = 0.2, 1, 4$ - όπου u_0 η πιο πιθανή ταχύτητα- και τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης 0.1, 1 και 10. Οι παραπάνω περιπτώσεις επιλύονται για τετραγωνική γεωμετρία ($A=1$) και για ορθογωνική γεωμετρία όπου το ύψος είναι το μισό του πλάτους $A=0.5$, η θερμοκρασία στην οποία επιλύεται το πρόβλημα ορίζεται στους 273 K και το αέριο που χρησιμοποιείται είναι το Αργό (Ar). Για τις εξεταζόμενες περιπτώσεις $U_{wall} / u_0 = 0.2, 1, 4$ έχουμε αριθμό Mach 0.22, 1.1, 4.380 αντίστοιχα, αντιπροσωπεύοντας υποηχητική, διηχητική και υπερηχητική ροή αντίστοιχα. Σε όλες τις περιπτώσεις θεωρήθηκε δεδομένο ότι υπάρχουν 200 σωματίδια ανά κελί θεωρώντας παράλληλα αριθμό κελιών κατά το πλάτος της κοιλότητας ίσο με 80. Οι διαστάσεις της γεωμετρίας για $A=1$ είναι αυτές που περιγράφονται στην υποενότητα 4.1. Οι χρονικοί παράμετροι του προβλήματος είναι οι ίδιοι με εκείνες της ενότητας 5.2. Για την κάθε προαναφερθείσα περίπτωση εξετάστηκε η θέση του κέντρου της δίνης, η κατανομή της θερμοκρασίας, η κατανομή της πίεσης η οριζόντια και η κάθετη ταχύτητα κατά μήκος της γραμμής που διέρχεται από το κέντρο της δίνης, η οπίσθελξη και η παροχή.

Αρχικά, παραθέτουμε τις ροϊκές γραμμές για όλες τις περιπτώσεις της ταχύτητας καθώς και του λόγου πλευρών A . Ξεκινώντας για την περίπτωση των δινών με $A=1$, παρατηρούμε ότι όταν η ταχύτητα του πάνω τοιχώματος έχει χαμηλή τιμή και

συγκεκριμένα όταν ο αριθμός Mach είναι μικρότερος της μονάδας το κέντρο της δίνης βρίσκεται σχεδόν στο κέντρο της κοιλότητας, ενώ αυξάνεται η ταχύτητα και ο αριθμός Mach ξεπερνά τη μονάδα όπου η ροή μας είναι υπερηχητική, το κέντρο της δίνης παρουσιάζει μια μετατόπιση προς τα δεξιά. Επιπλέον παρατηρείται ότι για τη μικρότερη τιμή της παραμέτρου αραιοποίησης $\delta=0.1$ όπου ο αριθμός Kn έχει τη μεγαλύτερη τιμή, καθώς αυξάνει η ταχύτητα το κέντρο της δίνης μετατοπίζεται προς τα δεξιά κατά τον οριζόντιο άξονα και προς τα πάνω κατά τον κάθετο άξονα και όταν η ταχύτητα πάρει τη μεγαλύτερη τιμή δημιουργείται στο κάτω δεξί άκρο της κοιλότητας μια δεύτερη δίνη. Ενώ για τιμές του δ 1 και 10, καθώς αυξάνει η ταχύτητα, παρατηρείται η μετατόπιση της δίνης από τον άξονα συμμετρίας της κοιλότητας αλλά δεν παρατηρείται η δημιουργία δεύτερης δίνης.

Για την περίπτωση όπου το ύψος της κοιλότητας είναι το μισό του πλάτους καθώς αυξάνει η ταχύτητα του πάνω κινούμενου τοίχους παρατηρείται μια μετατόπιση του κέντρου της δίνης προς τα δεξιά ως προς τον κατακόρυφο άξονα και προς τα πάνω ως προς τον οριζόντιο. Επιπλέον, δεν υπάρχει σε καμία περίπτωση η δημιουργία δεύτερης δίνης ακόμα και όταν ο αριθμός Kn έχει πάρει τη μεγαλύτερη τιμή. Ακόμη, όπως και στην περίπτωση για $A=1$ έτσι και στη περίπτωση $A=0.5$ όταν η ταχύτητα του πάνω τοιχώματος είναι μικρή και ο αριθμός Mach είναι μικρότερος της μονάδας το κέντρο της δίνης είναι μετατοπισμένο ελάχιστα από το κέντρο της κοιλότητας.

Έχοντας παρουσιάσει την απεικόνιση της ροής για όλες τις εξεταζόμενες περιπτώσεις προχωρώντας περιγράφεται η ακριβής θέση του κέντρου της δίνης, για την κάθε περίπτωση, από το κέντρο της κοιλότητας. Οι παραπάνω τιμές συγκεντρώνονται σε ένα γράφημα Σχήμα 5.4.7 της παραμέτρου αραιοποίησης δ και της ποσοστιαίας θέσης σε σχέση με το ύψος της κοιλότητας. Γίνεται αντιληπτό ότι όσο η ταχύτητα του πάνω τοιχώματος αυξάνει τόσο η θέση της κύριας δίνης προσεγγίζει το πάνω τοίχωμα. Τέλος, για όλες τις περιπτώσεις παρατηρείται ότι όταν μειωθεί το ύψος της κοιλότητας αυτό έχει ως συνέπεια την μετατόπιση της δίνης προς τα κάτω κατά τον κατακόρυφο άξονα. Ενδιαφέρον παρουσιάζει η μεταβολή της οριζόντιας (u) και της κάθετης (v) συνιστώσας της ταχύτητας, αδιαστατοποιημένες ως προς την ταχύτητα του κινούμενου τοιχώματος, κατά μήκος της ευθείας που διέρχεται από το κέντρο της δίνης που παρουσιάζεται στους πίνακες 5.4.1 και 5.4.2.

Από το Σχήμα 5.4.8 παρατηρείται ότι η κάθετη συνιστώσα της ταχύτητας v παρουσιάζει μία συμμετρία ως προς τον κατακόρυφο άξονα της κοιλότητας για χαμηλές ταχύτητες του πάνω τοιχώματος, ενώ φαίνεται μία μετατόπιση του σημείου μηδενισμού της κάθετης συνιστώσας της ταχύτητας προς τα δεξιά καθώς αυξάνεται ο λόγος U_{wall}/u_0 κάτι που είναι σε πλήρη αρμονία με τη μετατόπιση του κέντρου της δίνης, που παρατηρήθηκε, μετά τη μελέτη των γραμμών ροής. Συμπληρωματικά, παρατηρείται ότι, για κάθε περίπτωση U_{wall}/u_0 οι τιμές της κάθετης συνιστώσας αυξάνονται καθώς αυξάνεται η παράμετρος της αραιοποίησης. Επίσης, φαίνεται ότι καθώς αυξάνεται η ταχύτητα του πάνω τοιχώματος, οι τιμές της κάθετης συνιστώσας της ταχύτητας ανεξάρτητα από την παράμετρο αραιοποίησης παρουσιάζουν μία μείωση. Ακόμη, όσον αφορά την οριζόντια συνιστώσα της ταχύτητας παρατηρείται για κάθε περίπτωση U_{wall}/u_0 ότι καθώς η παράμετρος αραιοποίησης αυξάνεται και κινούμαστε προς τη συνεχή περιοχή ο λόγος u/U_{wall} τείνει προς τη μονάδα, παρατήρηση που είναι σύμφωνη με τη θεωρία.

Για υψηλές τιμές ταχύτητας του πάνω τοιχώματος όπου έχουμε υπερηχητική ροή $Ma > 1$ η οριζόντια συνιστώσα της ταχύτητας παρουσιάζει σχεδόν μηδενική τιμή καθώς κινούμαστε από τη βάση της κοιλότητας προς το κινούμενο τοίχωμα, ενώ λίγο πριν το κινούμενο τοίχωμα παρουσιάζει ραγδαία αύξηση. Όταν όμως, το δ πάρει μεγάλη τιμή φαίνεται ότι η πληροφορία για τη μεταβολή της οριζόντιας συνιστώσας της ταχύτητας περνάει από το κινούμενο τοίχωμα ως τη βάση της κοιλότητας.

Στη συνέχεια, στον πίνακα 5.4.3 παρουσιάζονται οι τιμές της παροχής και της οπίσθελξης για όλες τις εξεταζόμενες περιπτώσεις. Από τον πίνακα 5.4.3 παρατηρείται η επίδραση της γεωμετρίας στην παροχή. Στην κοιλότητα με την τετράγωνη διατομή υπάρχει για όλες τις περιπτώσεις μεγαλύτερη παροχή σε σχέση με την κοιλότητα με ορθογωνική διατομή. Επιπλέον, παρατηρείται η αύξηση της παροχής με την αύξηση της παραμέτρου αραιοποίησης. Τέλος, είναι ολοφάνερο ότι η οπίσθελξη είναι σχεδόν ανεπηρέαστη με την αλλαγή της γεωμετρίας.

Στη συνέχεια, παρατίθενται τα αποτελέσματα που αφορούν την κατανομή θερμοκρασίας στην κοιλότητα. Αρχικά, στο Σχήμα 5.4.10 φαίνεται η κατανομή

θερμοκρασίας για όλες τις εξεταζόμενες περιπτώσεις για $A=1$ της υποενότητας αυτής.

Από τα θερμοκρασιακά προφίλ 5.4.10, 5.4.11, 5.4.12 γίνεται αντιληπτή η μείωση της θερμοκρασίας με την αύξηση της ταχύτητας του κινούμενου τοιχώματος. Επιπλέον, παρατηρείται ότι με την αύξηση της ταχύτητας του πάνω τοιχώματος προκαλείται μια αύξηση της θερμοκρασίας κοντά στην περιοχή του πάνω τοιχώματος και διαχέεται κατά μήκος του πάνω τοιχώματος. Επίσης, για μεγάλες τιμές του αριθμού Kn φαίνεται ότι ενώ η περιοχή κοντά στο κινούμενο τοίχωμα έχει μεγαλύτερη θερμοκρασία με την αύξηση της ταχύτητας η περιοχή κοντά στη βάση της κοιλότητας βρίσκεται σε χαμηλότερα θερμοκρασιακά επίπεδα. Ακόμη, γίνεται αντιληπτή η απότομη αύξηση της θερμοκρασιακής βαθμίδας στο εσωτερικό της κοιλότητας με την αύξηση της ταχύτητας του πάνω τοιχώματος. Επιπρόθετα, στο Σχήμα 5.4.13 παριστάνεται η μεταβολή της θερμοκρασίας κατά μήκος της ευθείας που διέρχεται από το κέντρο της κοιλότητας για όλες τις περιπτώσεις της τετραγωνικής διατομής. Στην ίδια εικόνα φαίνεται ότι για μεγάλες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης καθώς αυξάνει η ταχύτητα του κινούμενου τοιχώματος η θερμοκρασία στο εσωτερικό της κοιλότητας αυξάνεται. Για μικρές τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης φαίνεται ότι η κατανομή της θερμοκρασίας είναι συμμετρική ως προς τον κάθετο άξονα που διέρχεται από το κέντρο της κοιλότητας όταν η ταχύτητα του πάνω τοιχώματος είναι μικρή, ενώ όταν αυτή πάρει υψηλές τιμές παρατηρείται μια σταθεροποίηση της θερμοκρασίας καθώς κινούμαστε από αριστερά προς τα δεξιά καθώς και μια απότομη αύξηση κοντά στην περιοχή του δεξιού τοιχώματος.

Κλείνοντας τη μελέτη της επίδρασης των υψηλών ταχυτήτων του κινούμενου τοιχώματος θα παρουσιαστεί η μεταβολή της πίεσης στο εσωτερικό της κοιλότητας. Από τα Σχήματα 5.4.14, 5.4.15 και 5.4.16 παρατηρείται ότι για μικρές τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης προκαλείται μείωση της πίεσης στο εσωτερικό της κοιλότητας καθώς αυξάνει η ταχύτητα του κινούμενου τοιχώματος. Επιπλέον παρατηρείται ότι για χαμηλές ταχύτητες το προφίλ της κατανομής της πίεσης είναι σχεδόν συμμετρικό ως προς τον κατακόρυφο άξονα που διέρχεται από το κέντρο της κοιλότητας, ενώ αυτή η συμμετρία χάνεται καθώς αυξάνει η ταχύτητα του πάνω τοιχώματος. Αξιοσημείωτο είναι, ότι η τιμή της πίεσης αποκτά σχεδόν μια σταθερή τιμή στο εσωτερικό της κοιλότητας και μια υψηλή τιμή στην πάνω δεξιά γωνία της κοιλότητας. Επιπρόσθετα, για κάθε εξεταζόμενη περίπτωση ταχύτητας του πάνω

τοιχώματος παρατηρείται αύξηση της πίεσης με την αύξηση της παραμέτρου αραιοποίησης δ . Τέλος, στο Σχήμα 5.4.17 φαίνεται η μεταβολή της πίεσης κατά μήκος της ευθείας που διέρχεται από το κέντρο της κοιλότητας. Παρατηρείται ότι για μεγάλες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης η πίεση αυξάνει με την αύξηση της ταχύτητας του κινούμενου τοιχώματος κάτι που είναι πλήρως σύμφωνο με τα Σχήματα 5.4.14, 5.4.15 και 5.4.16. Επιπλέον, για μικρές τιμές ταχύτητας του πάνω τοιχώματος υπάρχει μια συμμετρία ως προς το κέντρο της κοιλότητας η οποία χάνεται με την αύξηση της ταχύτητας του πάνω τοιχώματος. Ανεξάρτητα της ταχύτητας του πάνω τοιχώματος παρατηρείται μείωση της πίεσης με τη μείωση της παραμέτρου αραιοποίησης, που και αυτό είναι εναρμονισμένο με τα παραπάνω.

Πίνακας 5.4.1: Θέσεις των κέντρων των δινών για $A=1$ και για διάφορες περιπτώσεις του δ και του U_{wall}/u_0 .

| | | | |
|--------------------------------------|--------------|------------|-------------|
| $U_{wall}/u_0=0.2$ | $\delta=0.1$ | $\delta=1$ | $\delta=10$ |
| X (m) | 0.001 | 0.001 | 0.002 |
| Y (m) | 0.019 | 0.020 | 0.024 |
| $U_{wall}/u_0=1$ | | | |
| X (m) | 0.0059 | 0.006 | 0.007 |
| Y (m) | 0.023 | 0.024 | 0.024 |
| $U_{wall}/u_0=4$ | | | |
| X (m) | 0.013 | 0.014 | 0.014 |
| Y (m) | 0.037 | 0.036 | 0.029 |
| Second Vortex | $\delta=0.1$ | $\delta=1$ | $\delta=10$ |
| X (m) | 0.036 | - | - |
| Y (m) | -0.022 | - | - |

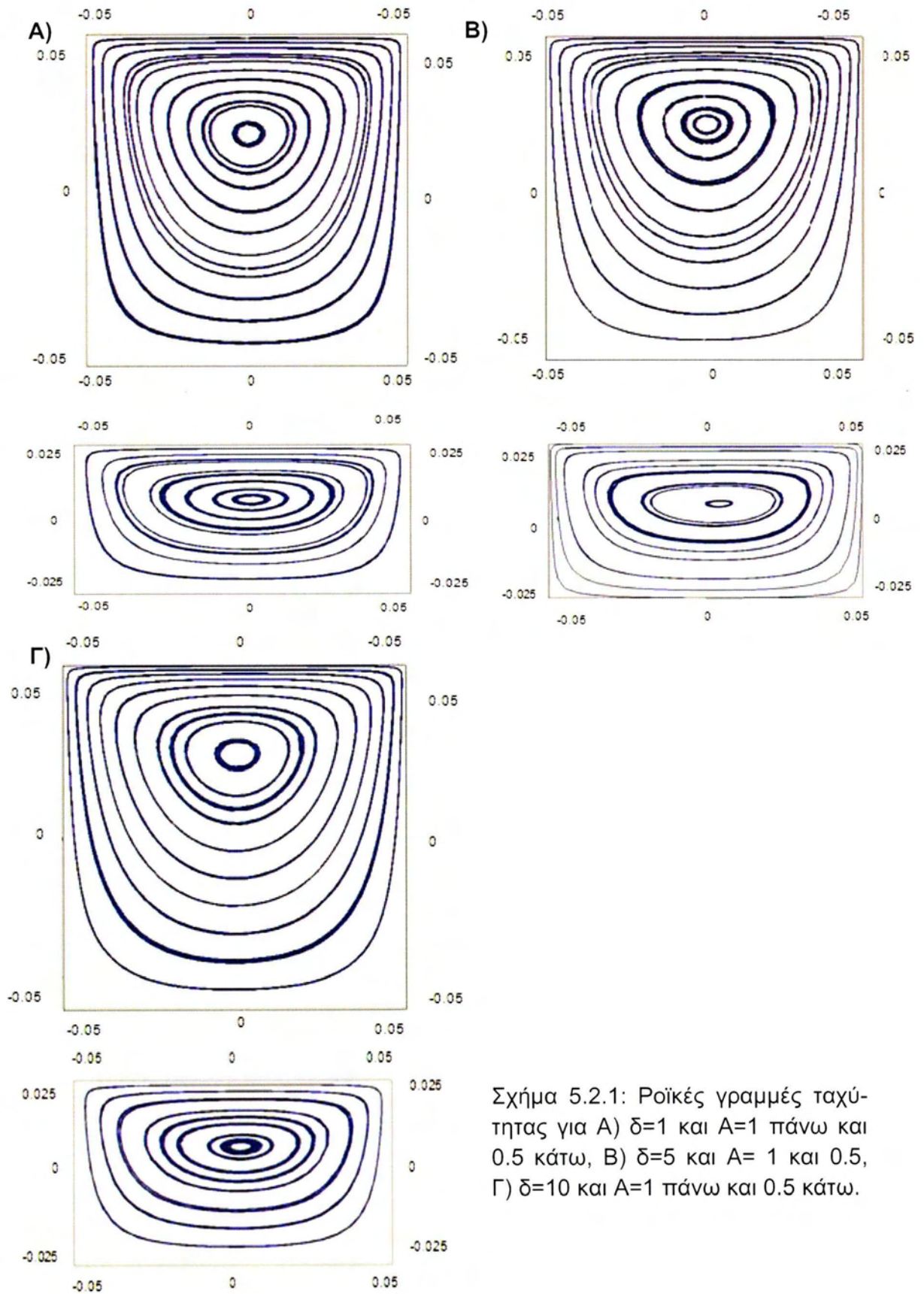
Πίνακας 5.4.2: Θέσεις των κέντρων των δινών για $A=0.5$ και για διάφορες περιπτώσεις του δ και του U_{wall}/u_0

| | | | |
|--------------------------------------|--------------|------------|-------------|
| $U_{wall}/u_0=0.2$ | $\delta=0.1$ | $\delta=1$ | $\delta=10$ |
| x (m) | 0.009 | 0.007 | 0.005 |
| y (m) | 0.006 | 0.005 | 0.007 |
| $U_{wall}/u_0=1$ | | | |
| x (m) | 0.015 | 0.015 | 0.015 |
| y (m) | 0.007 | 0.007 | 0.007 |
| $U_{wall}/u_0=4$ | | | |
| x (m) | 0.014 | 0.0167 | 0.022 |
| y (m) | 0.011 | 0.008 | 0.010 |

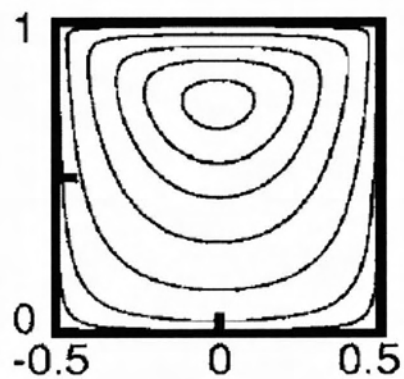
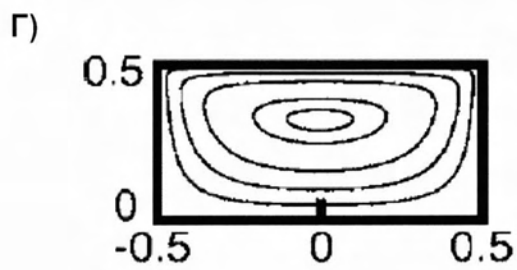
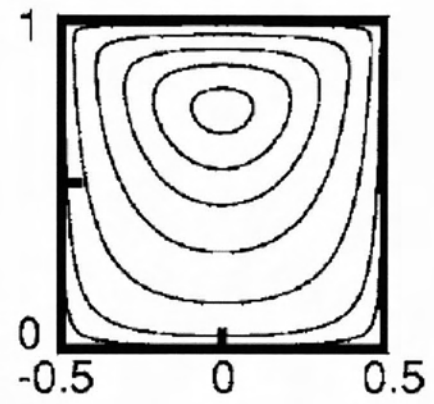
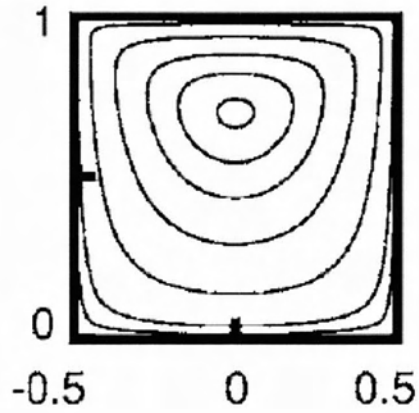
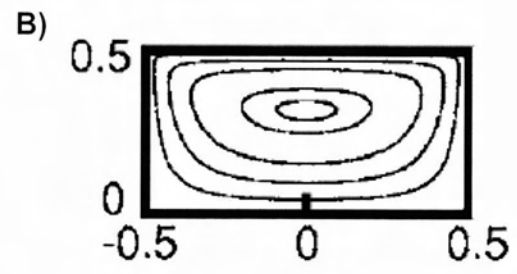
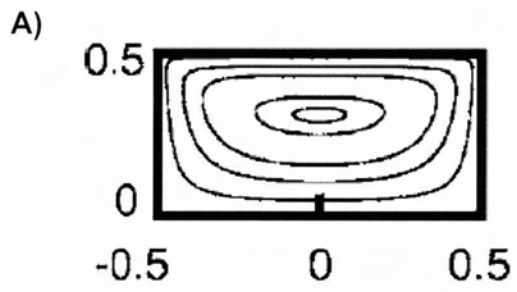
Πίνακας 5.4.3: Τιμές για παροχή και οπίσθελξη για όλες τις εξεταζόμενες περιπτώσεις

| | | ΠΑΡΟΧΗ(kg/ms) | ΟΠΙΣΘΕΛΞΗ(N/m) |
|----------------------------|----------------|-----------------------|-----------------------|
| A=1 | | | |
| U/u₀=0.2 | $\delta = 0.1$ | 4.28×10^{-8} | 1.02×10^{-4} |
| | $\delta = 1$ | 4.58×10^{-7} | 9.58×10^{-4} |
| | $\delta = 10$ | 6.38×10^{-6} | 6.30×10^{-3} |
| U/u₀=1 | $\delta = 0.1$ | 1.85×10^{-7} | 5.61×10^{-4} |
| | $\delta = 1$ | 2.05×10^{-6} | 5.33×10^{-3} |
| | $\delta = 10$ | 2.85×10^{-5} | 3.60×10^{-2} |
| U/u₀=4 | $\delta = 0.1$ | 3.83×10^{-7} | 2.87×10^{-3} |
| | $\delta = 1$ | 4.50×10^{-6} | 3.04×10^{-2} |
| | $\delta = 10$ | 6.21×10^{-5} | 2.81×10^{-1} |
| A=0.5 | | | |
| U/u₀=0.2 | $\delta = 0.1$ | 2.22×10^{-8} | 1.03×10^{-4} |
| | $\delta = 1$ | 2.63×10^{-7} | 9.77×10^{-4} |
| | $\delta = 10$ | 4.14×10^{-6} | 6.59×10^{-3} |
| U/u₀=1 | $\delta = 0.1$ | 1.09×10^{-7} | 5.34×10^{-4} |
| | $\delta = 1$ | 1.24×10^{-6} | 5.21×10^{-3} |
| | $\delta = 10$ | 1.92×10^{-5} | 3.74×10^{-2} |
| U/u₀=4 | $\delta = 0.1$ | 3.27×10^{-7} | 2.42×10^{-3} |
| | $\delta = 1$ | 3.81×10^{-6} | 2.68×10^{-2} |
| | $\delta = 10$ | 5.58×10^{-5} | 2.86×10^{-1} |

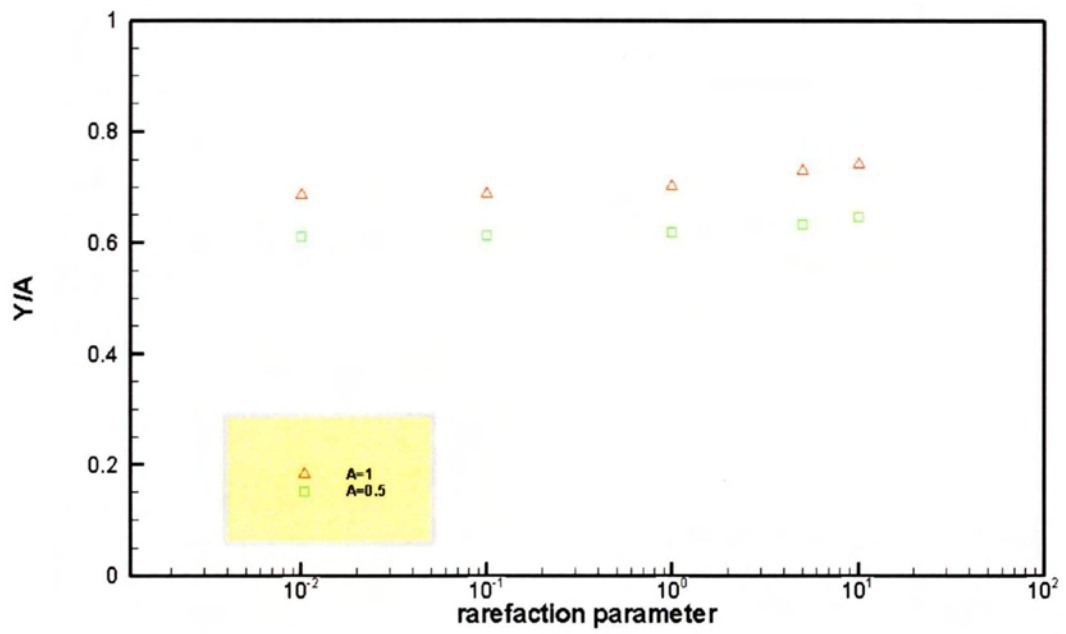
Σχήματα



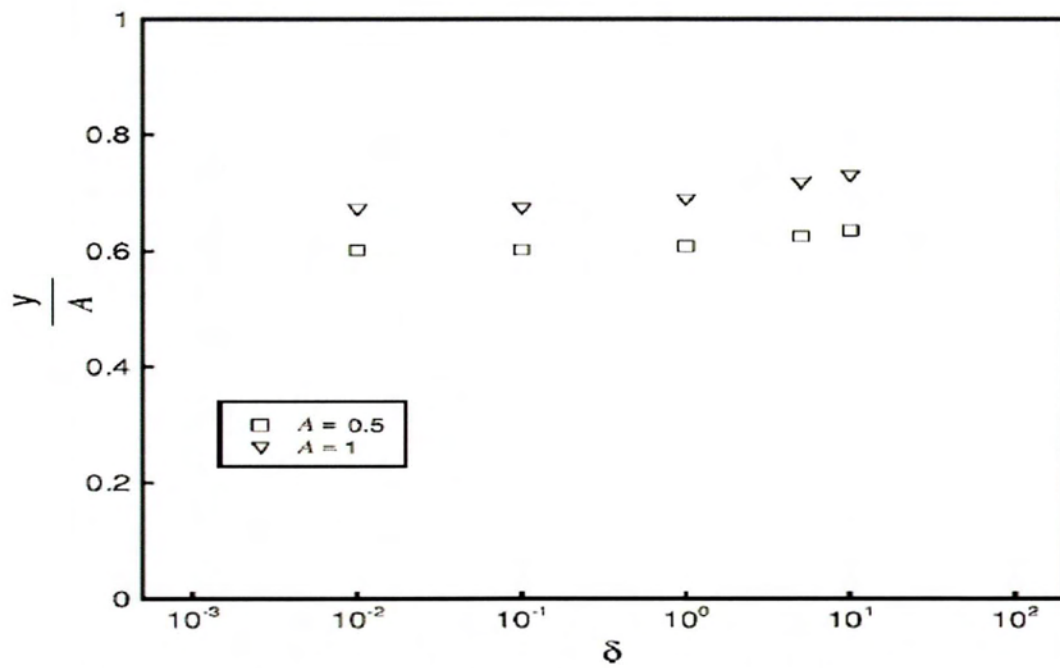
Σχήμα 5.2.1: Ροϊκές γραμμές ταχύτητας για A) $\delta=1$ και $A=1$ πάνω και 0.5 κάτω, B) $\delta=5$ και $A= 1$ και 0.5 , Γ) $\delta=10$ και $A=1$ πάνω και 0.5 κάτω.



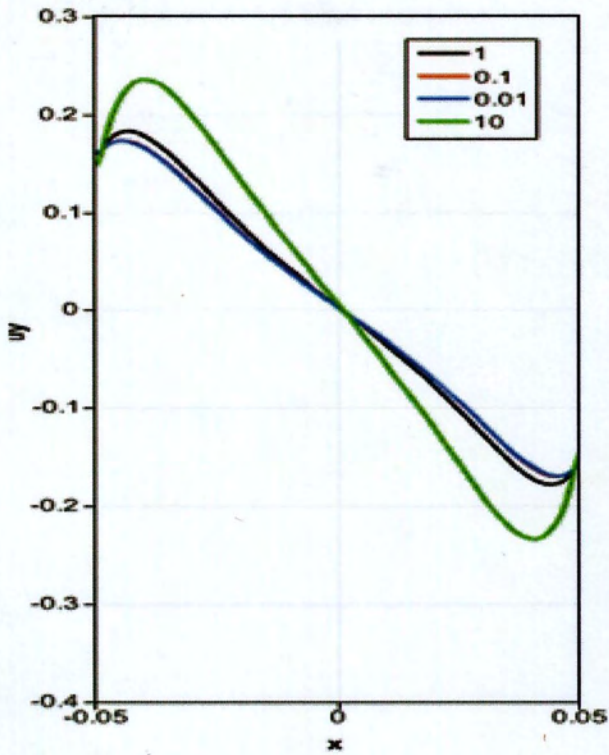
Σχήμα 5.2.2: Ροϊκές γραμμές ταχύτητας με βάση το άρθρο [10] A) $\delta=1$ και $A=1$ και 0.5 , B) $\delta=5$ και $A=1$ και 0.5 , Γ) $\delta=10$ και $A=1$ και 0.5 .



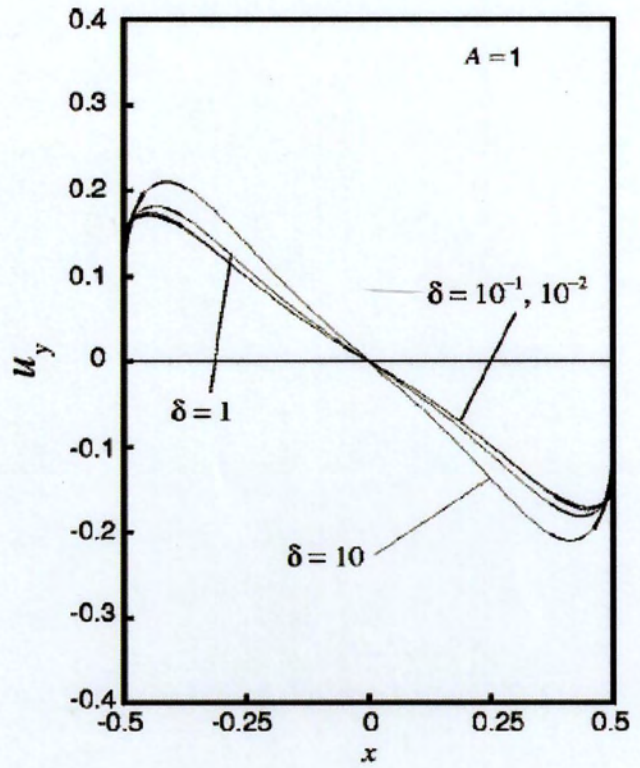
Σχήμα 5.2.3: Θέση του κέντρου της δίνης για διάφορες τιμές των δ και A .



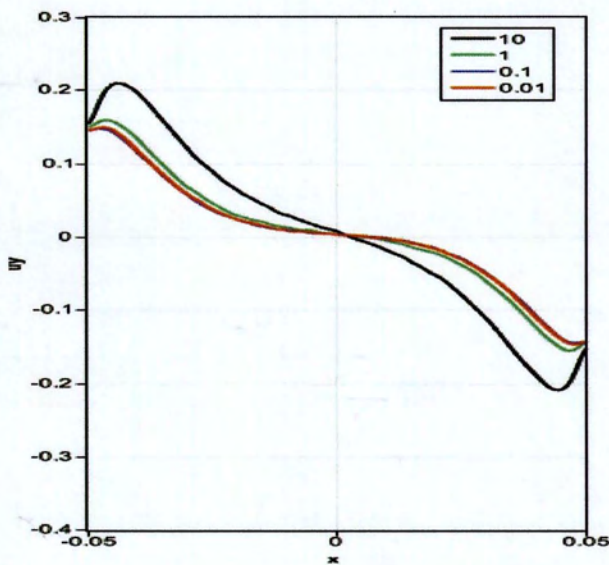
Σχήμα 5.2.4: Θέση του κέντρου της δίνης για διάφορες τιμές του δ και A από το άρθρο [10].



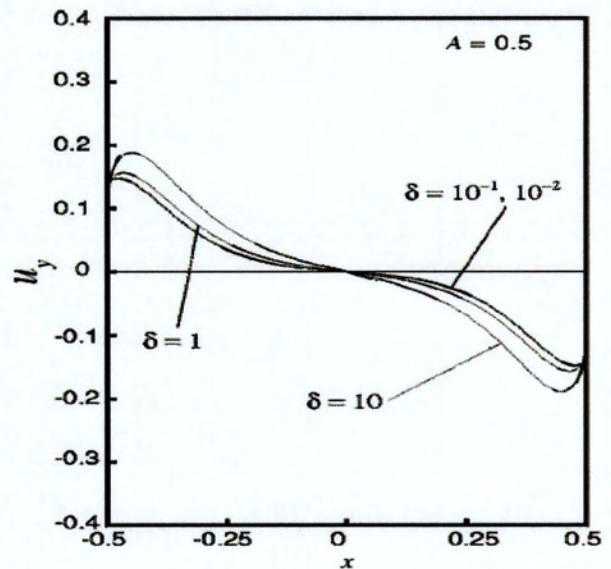
Σχήμα 5.2.5: Κατακόρυφη συνιστώσα της ταχύτητας για $\delta=0.1, 0.01, 1, 10$ και για $A= 1$, όπως προκύπτουν από τον solver dsmcFoam.



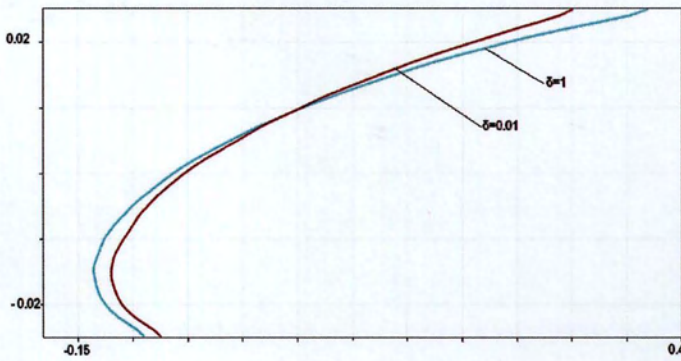
Σχήμα 5.2.6: Κατακόρυφη συνιστώσα της ταχύτητας για $\delta= 0.1, 0.01, 1, 10$ και για $A= 1$ όπως προκύπτουν από το άρθρο [10].



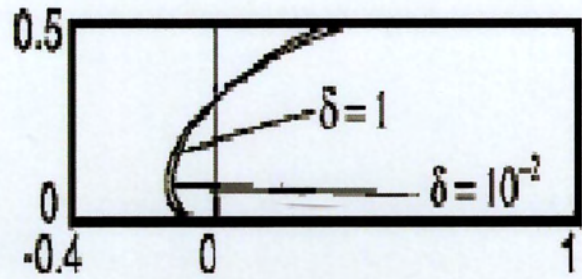
Σχήμα 5.2.7: Κατακόρυφη συνιστώσα της ταχύτητας $\delta= 0.1, 0.01, 1, 10$ και για $A= 0.5$ όπως προκύπτουν από τον solver dsmcFoam.



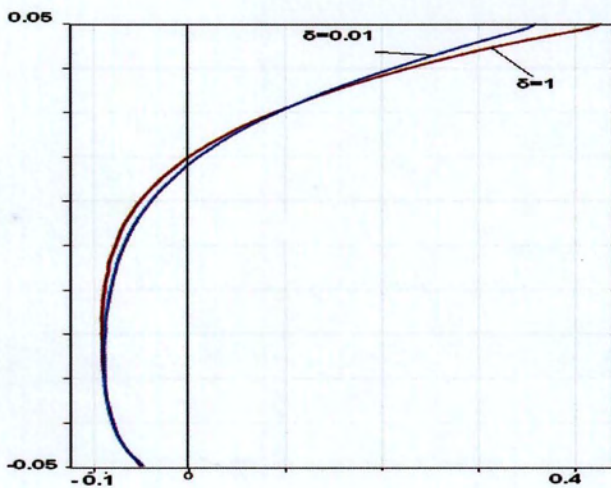
Σχήμα 5.2.8: Κατακόρυφη συνιστώσα της ταχύτητας για $\delta= 0.1, 0.01, 1, 10$ και για $A= 0.5$ όπως προκύπτουν από το άρθρο [10].



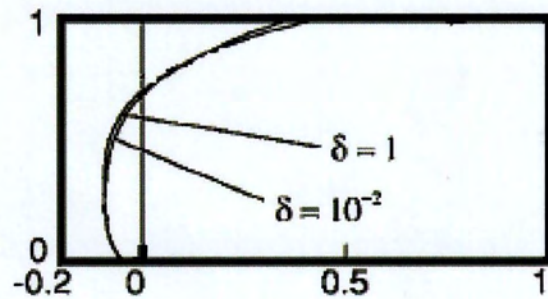
Σχήμα 5.2.9: Οριζόντια συνιστώσα της ταχύτητας για $\delta = 0.01, 1$ και για $A = 0.5$ όπως προκύπτουν από τον solver dsmcFoam.



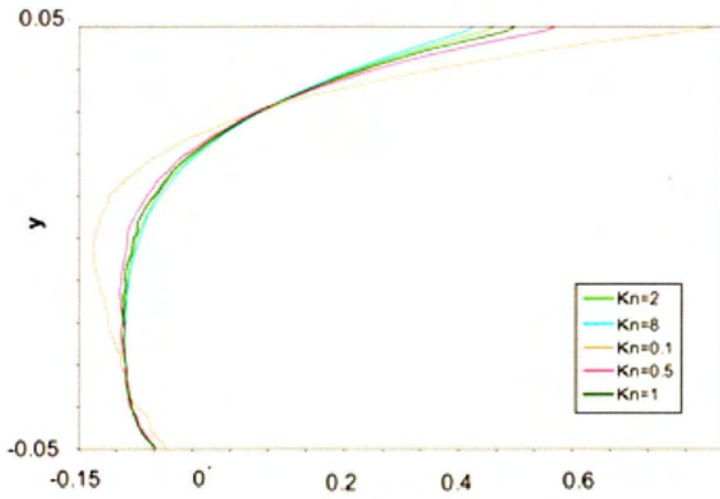
Σχήμα 5.2.10: Οριζόντια συνιστώσα της ταχύτητας για $\delta = 0.01, 1$ και για $A = 0.5$ όπως προκύπτουν από το άρθρο [10].



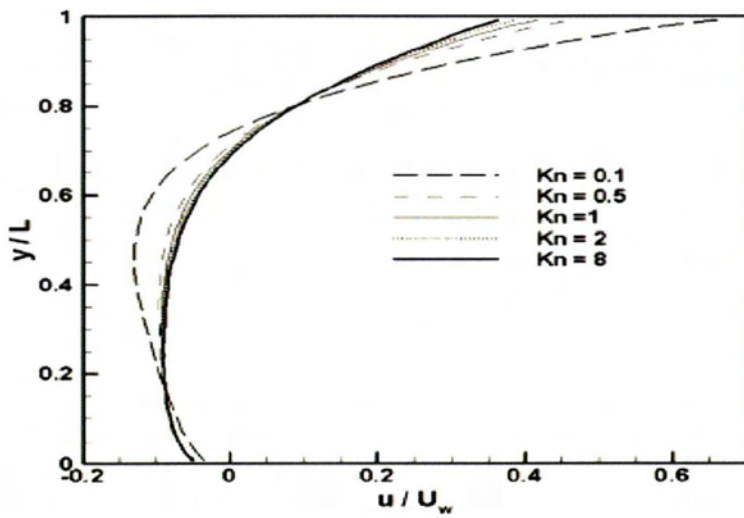
Σχήμα 5.2.11: Οριζόντια συνιστώσα της ταχύτητας για $\delta = 0.01, 1$ και για $A = 1$ όπως προκύπτουν από τον solver dsmcFoam.



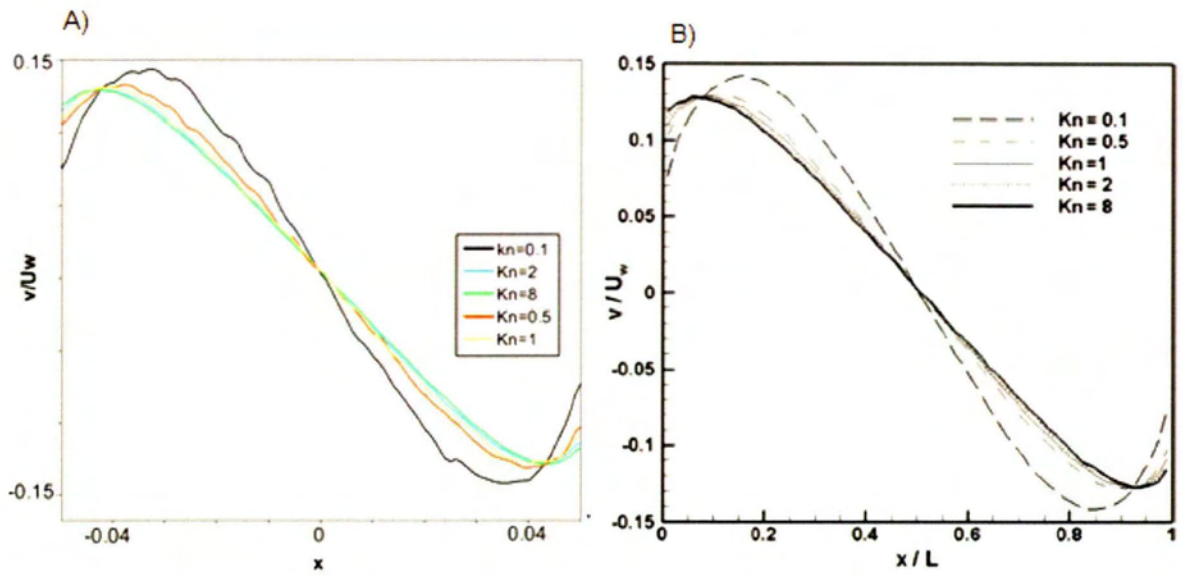
Σχήμα 5.2.12: Οριζόντια συνιστώσα της ταχύτητας $\delta = 0.01, 1$ και για $A = 1$ όπως προκύπτουν από το άρθρο [10].



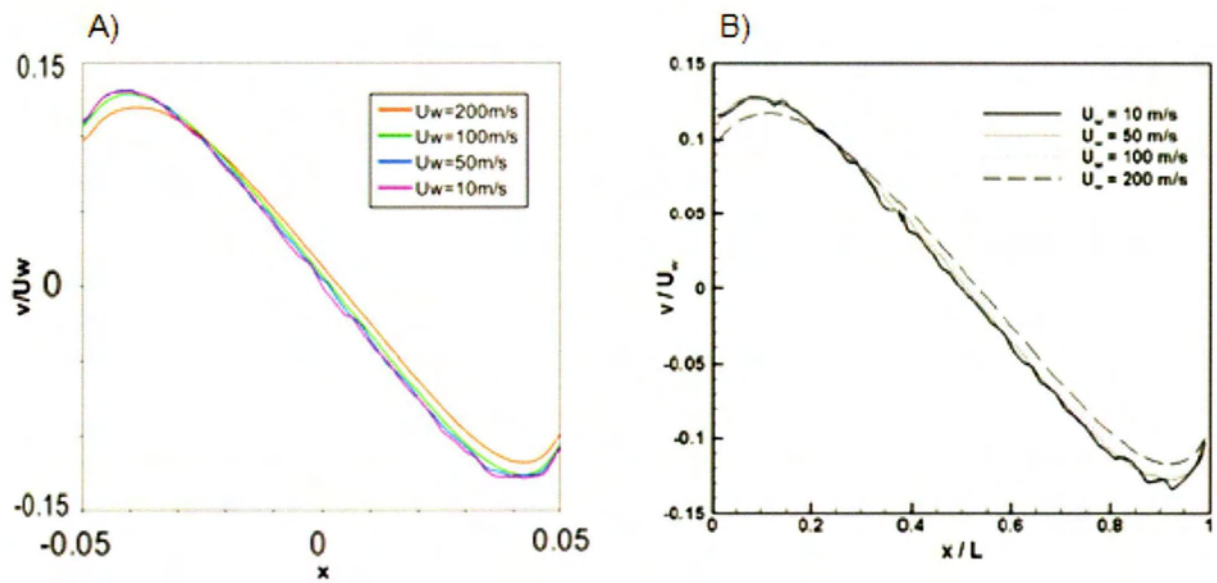
Σχήμα 5.3.1: Η μεταβολή της οριζόντιας συνιστώσας της ταχύτητας κατά μήκος της γραμμή που διαπερνά το κέντρο του cavity με το OpenFOAM.



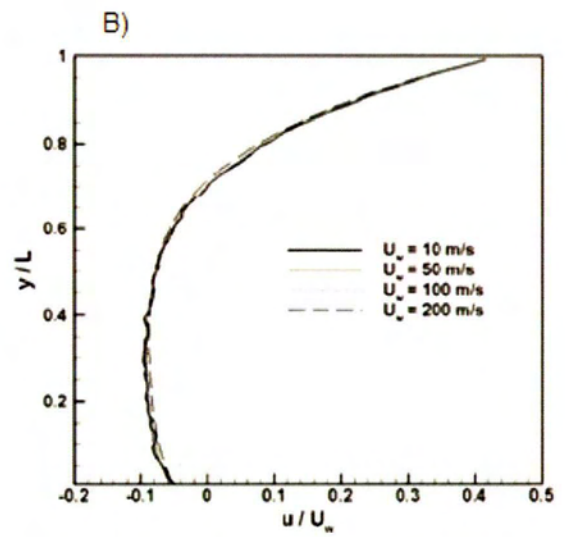
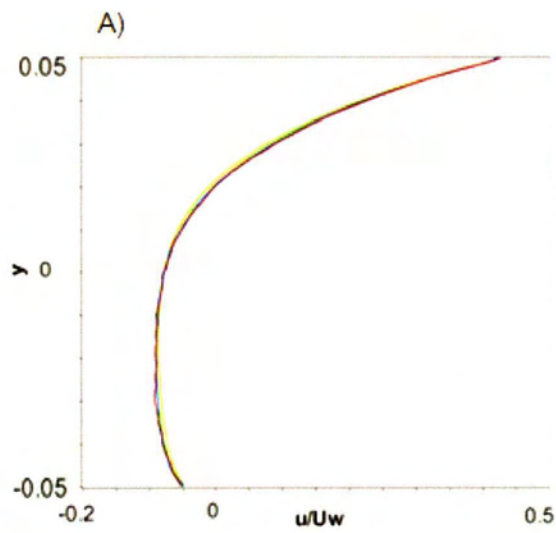
Σχήμα 5.3.2: Η μεταβολή της οριζόντιας συνιστώσας της ταχύτητας κατά μήκος της γραμμή που διαπερνά το κέντρο του cavity με βάση το [11].



Σχήμα 5.3.3: Μεταβολή της κατακόρυφης συνιστώσας της ταχύτητας κατά μήκος της γραμμής που διέρχεται από το κέντρο του cavity με βάση A) το OpenFOAM και B) το άρθρο [11].

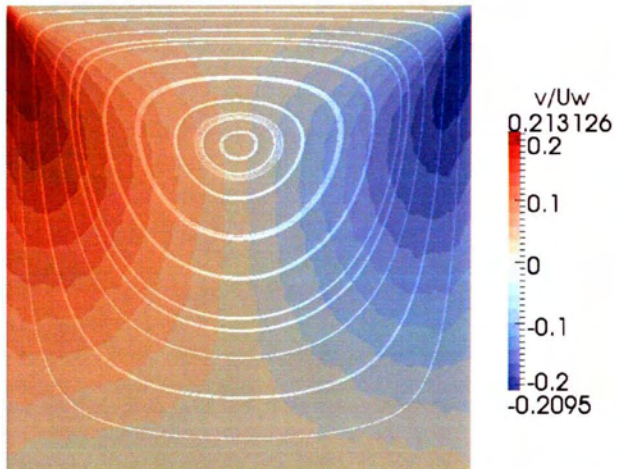


Σχήμα 5.3.4: Μεταβολή της κατακόρυφης συνιστώσας της ταχύτητας κατά μήκος της γραμμής που διέρχεται από το κέντρο του cavity με βάση A) το OpenFOAM και B) το άρθρο [11]

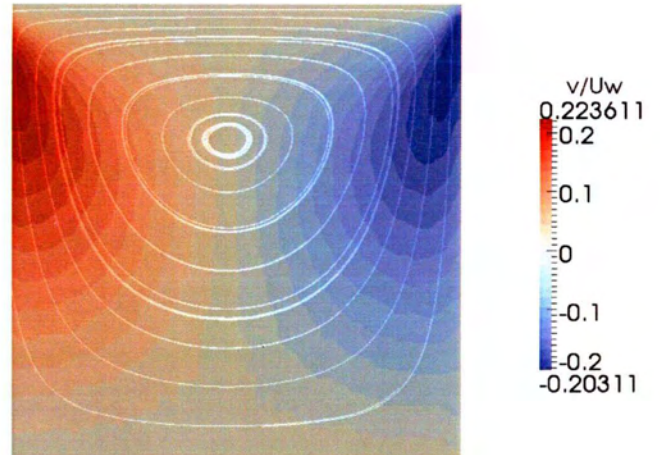


Σχήμα 5.3.5: Μεταβολή της οριζόντιας συνιστώσας της ταχύτητας κατά μήκος της γραμμής που διέρχεται από το κέντρο του cavity με βάση A) το OpenFOAM και B) το άρθρο [11].

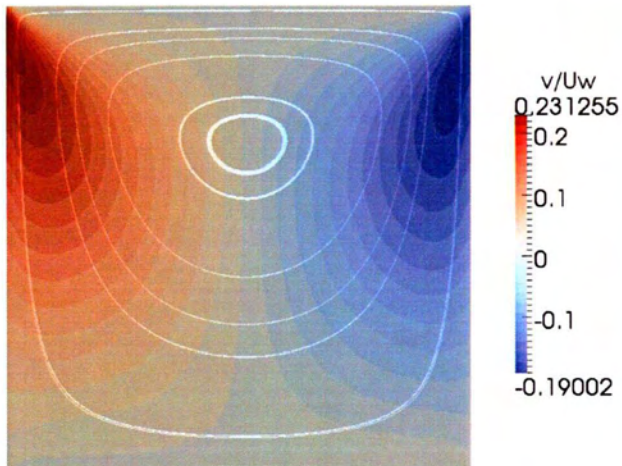
A)



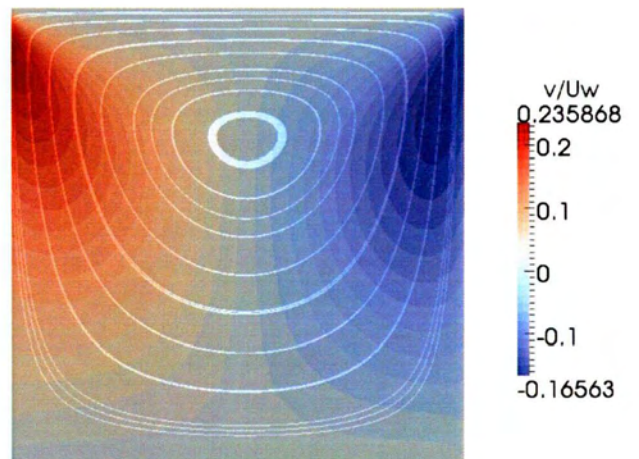
B)



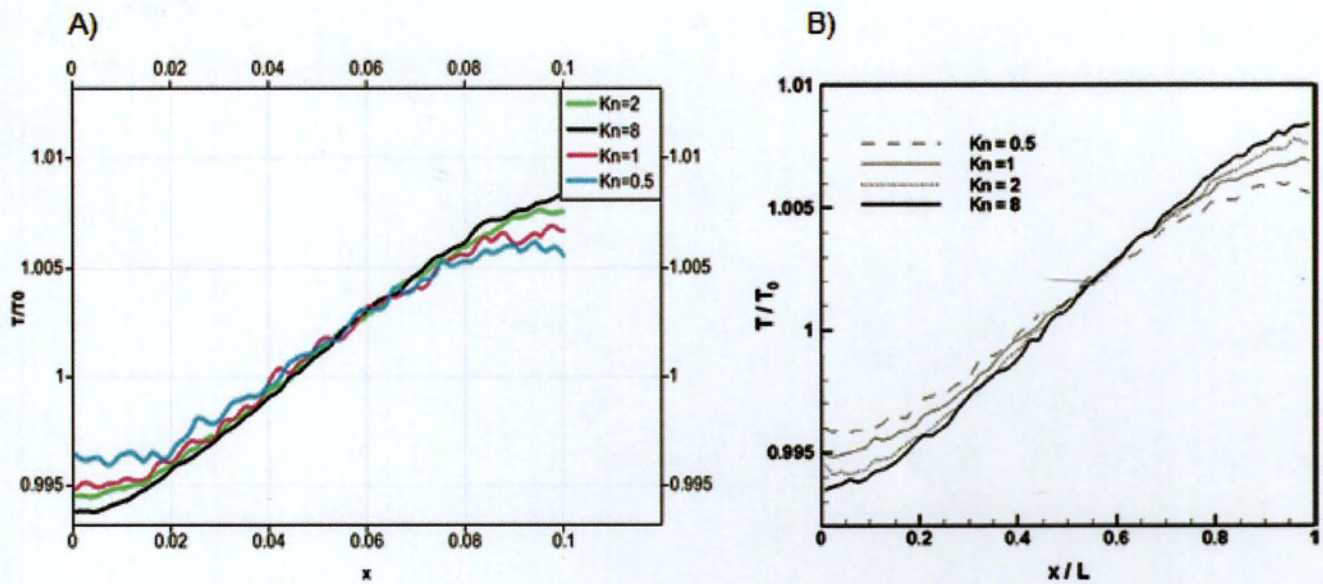
Γ)



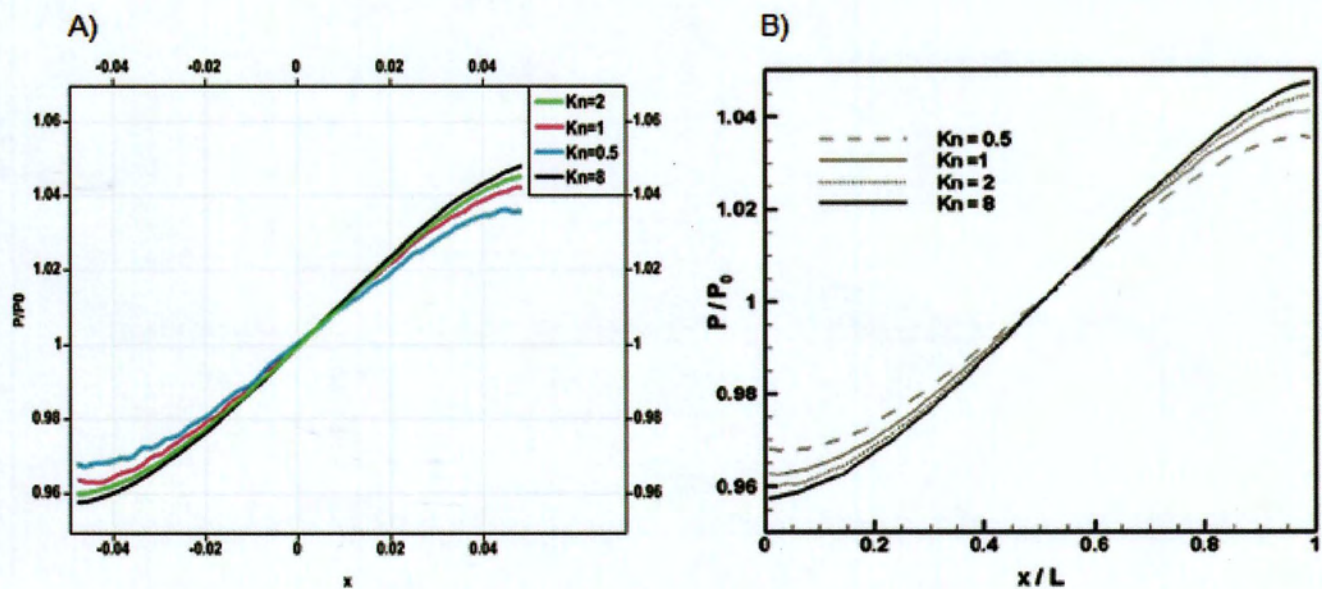
Δ)



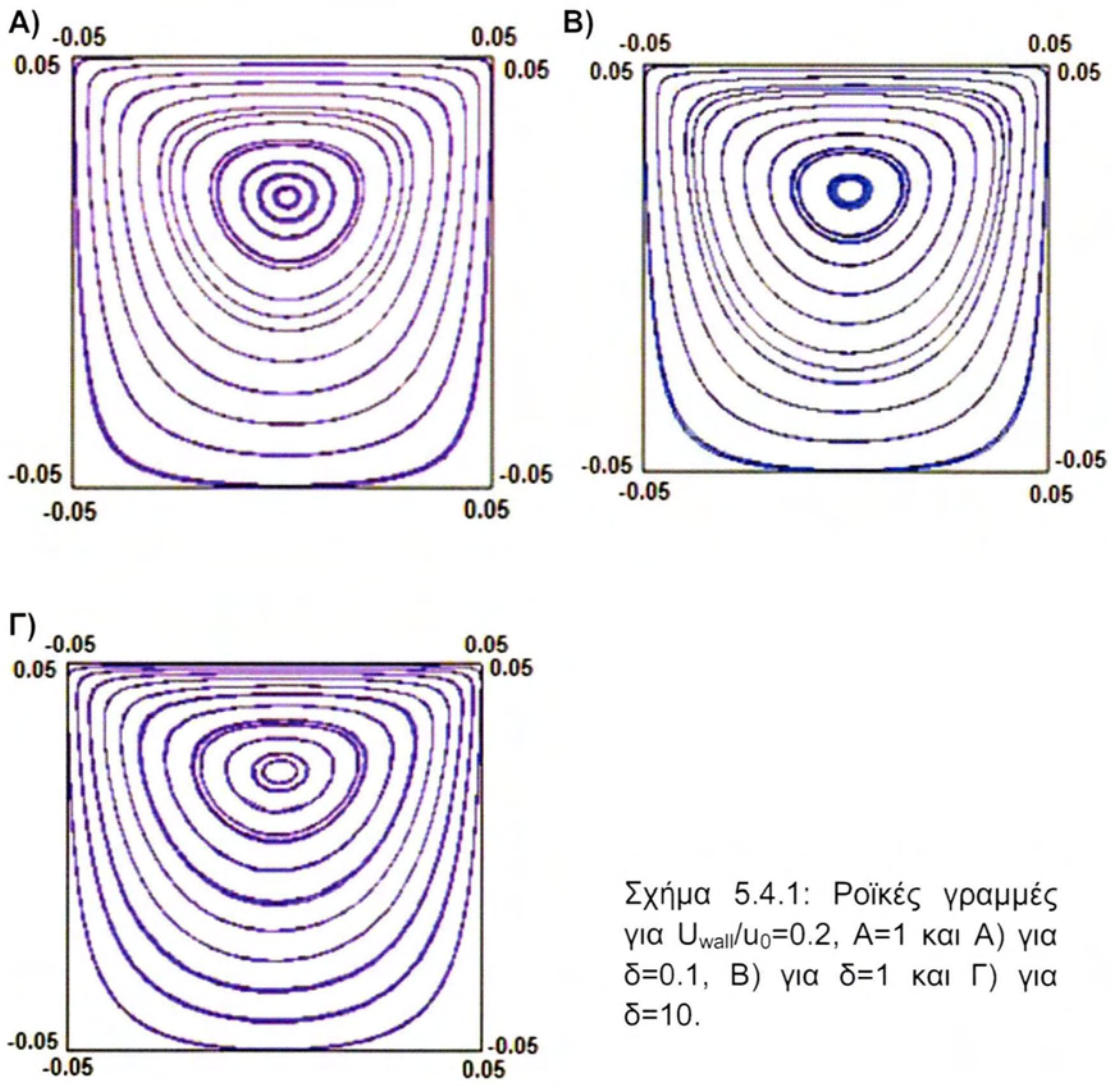
Σχήμα 5.3.6: Ροϊκές γραμμές πάνω στο προφίλ της ταχύτητας στην κατακόρυφη κατεύθυνση για $Kn=1$ και A) $U_w=10$ m/s, B) $U_w=50$ m/s, Γ) $U_w=100$ m/s και Δ) $U_w=200$ m/s



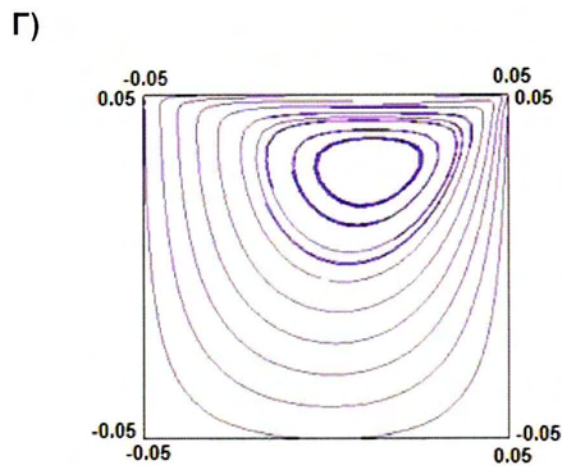
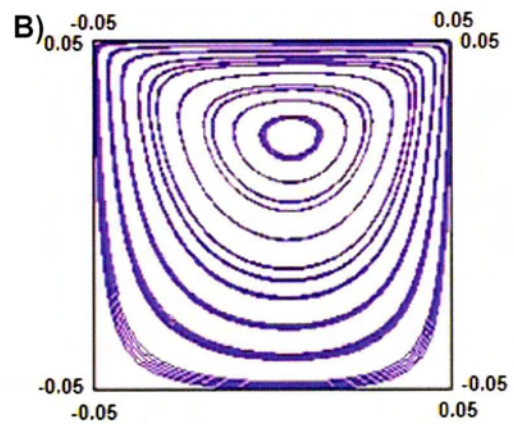
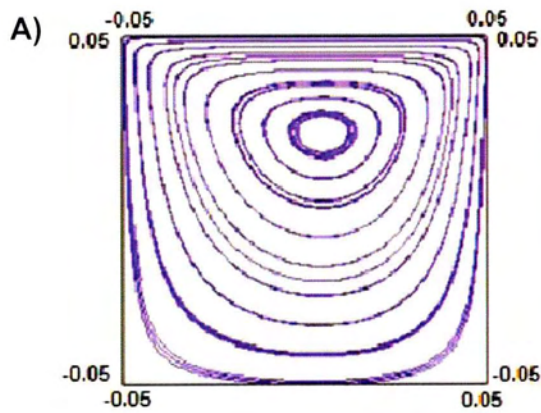
Σχήμα 5.3.7: Μεταβολές της θερμοκρασίας κατά μήκος της ευθείας που διέρχεται από το κέντρο της κοιλότητας για ταχύτητα κινούμενου τοιχώματος $U_w=50$ m/s και αριθμούς $Kn=0.5, 1, 2, 8$ με το A) OpenFOAM και B) το άρθρο [11].



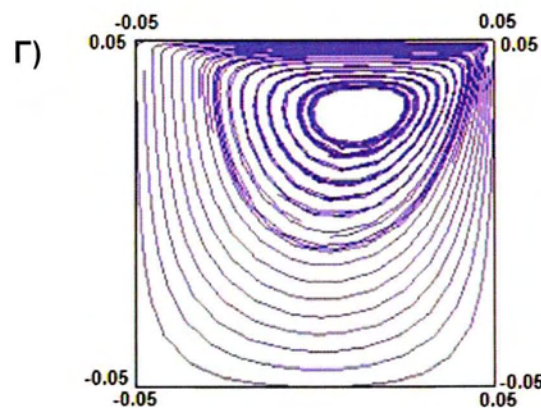
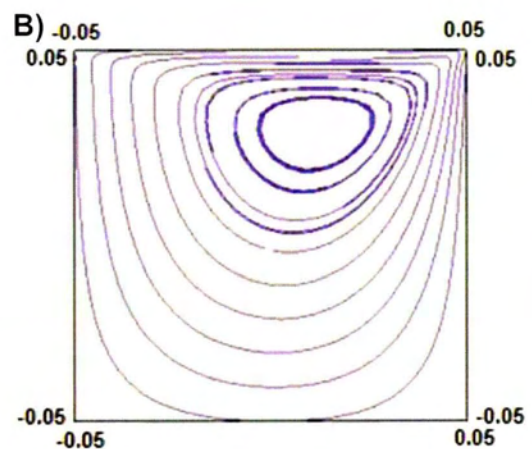
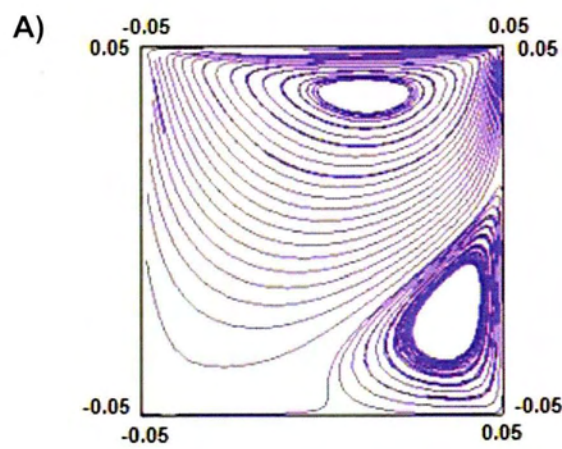
Σχήμα 5.3.8: Μεταβολές της πίεσης κατά μήκος της ευθείας που διέρχεται από το κέντρο της κοιλότητας για ταχύτητα κινούμενου τοιχώματος $U_w=50$ m/s και αριθμούς $Kn=0.5, 1, 2, 8$ με το A) OpenFOAM, και B) το άρθρο [11].



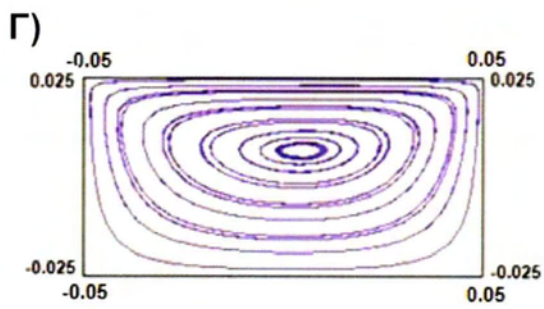
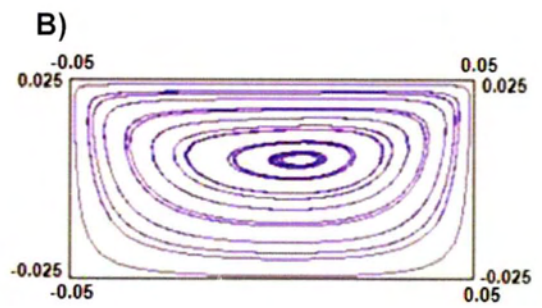
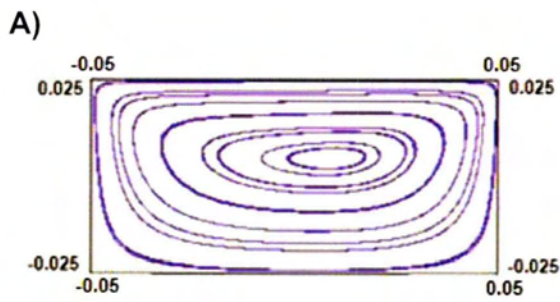
Σχήμα 5.4.1: Ροϊκές γραμμές για $U_{\text{wall}}/u_0=0.2$, $A=1$ και A) για $\delta=0.1$, B) για $\delta=1$ και Γ) για $\delta=10$.



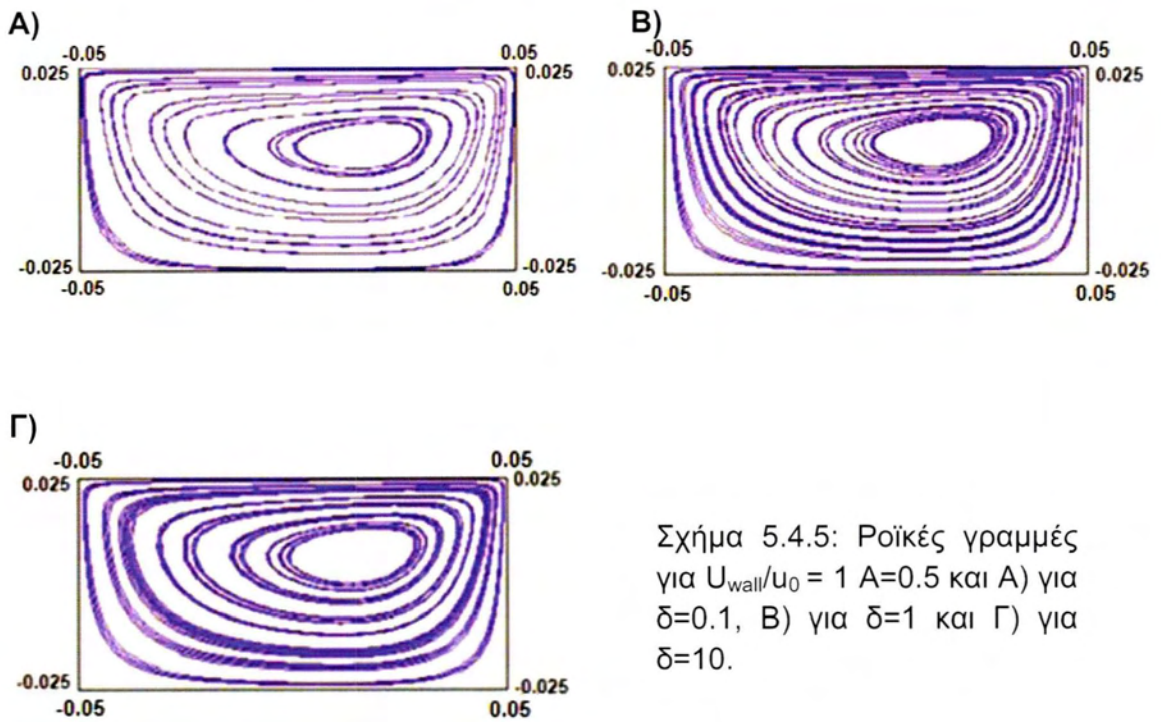
Σχήμα 5.4.2: Ροϊκές γραμμές για $U_{wall}/u_0 = 1$, $A=1$ και A) για $\delta=0.1$, B) για $\delta=1$ και Γ) για $\delta=10$.



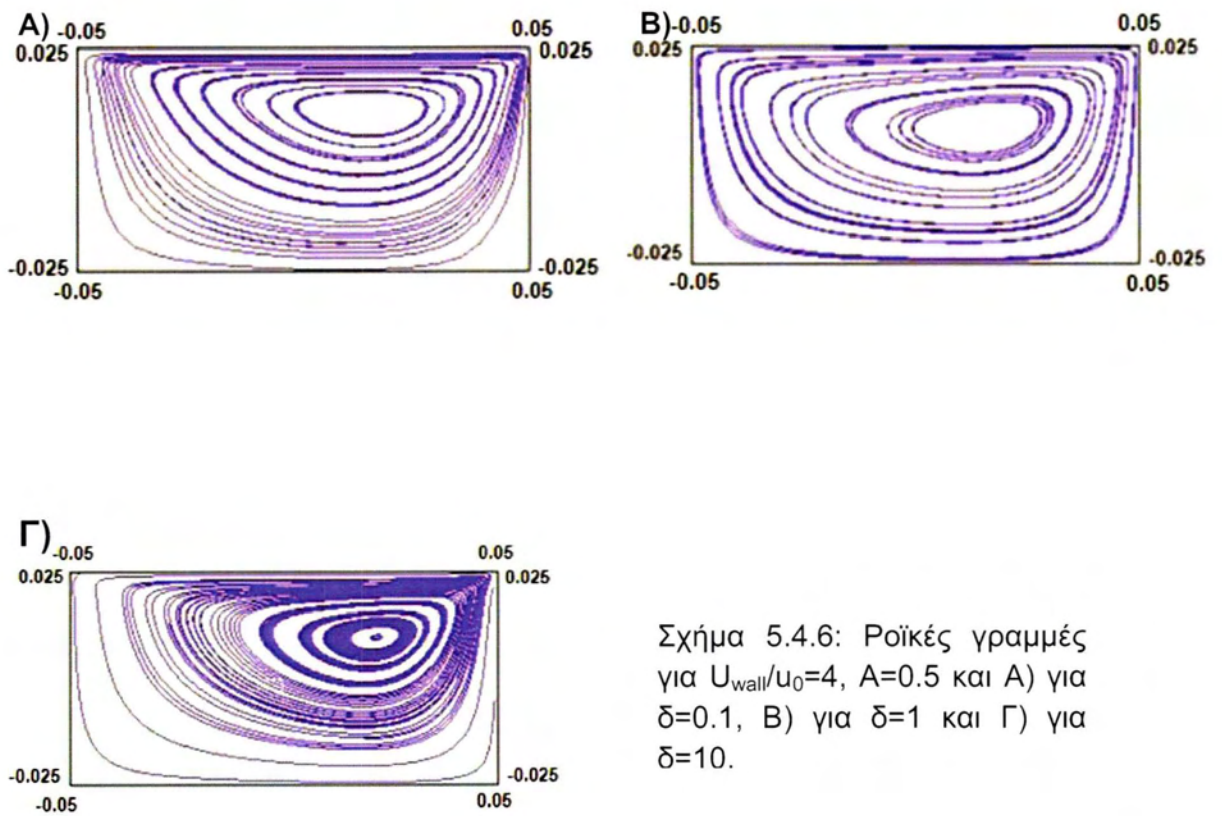
Σχήμα 5.4.3: Ροϊκές γραμμές για $U_{wall}/u_0 = 4$, $A=1$ και A) για $\delta=0.1$, B) για $\delta=1$ και Γ) για $\delta=10$.



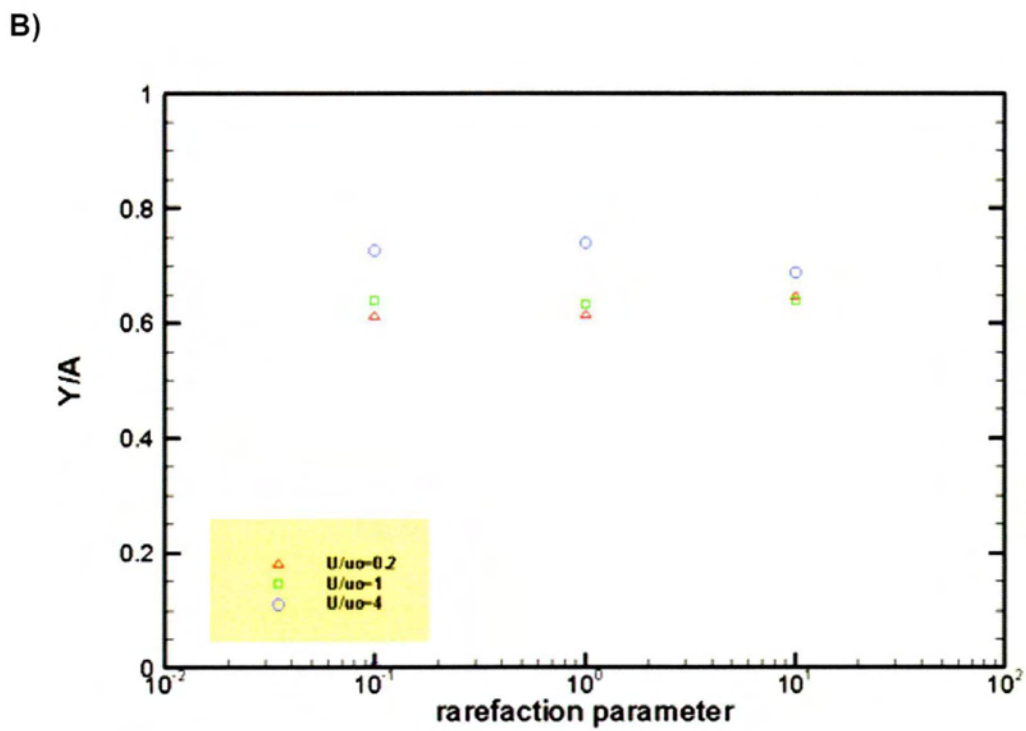
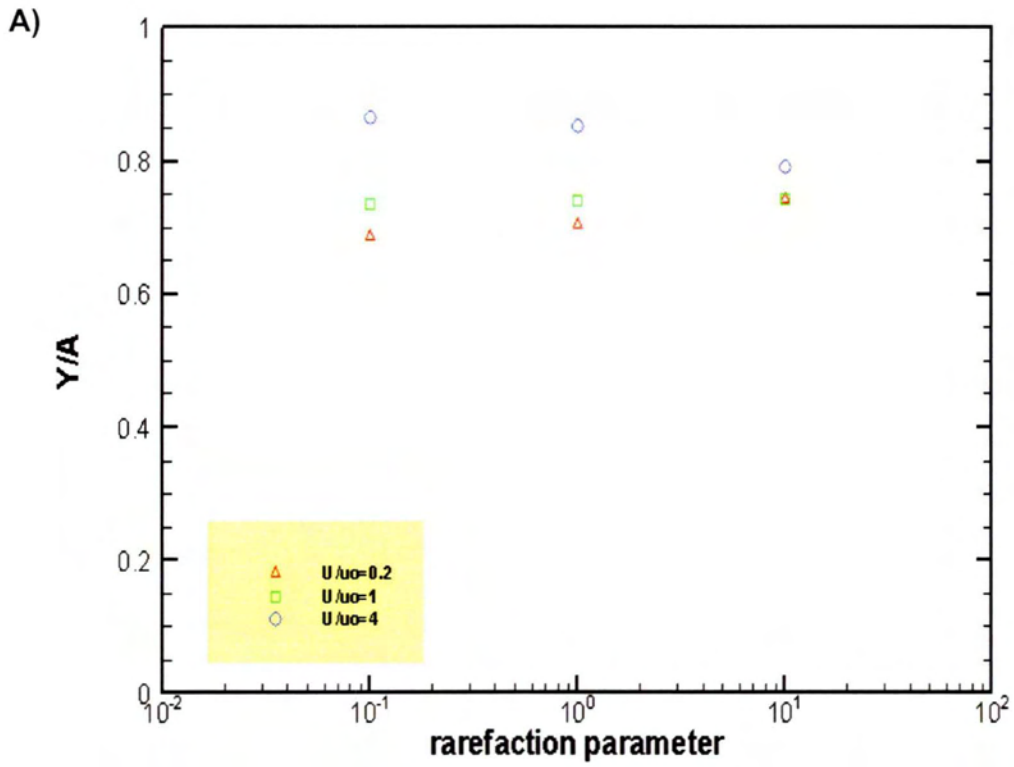
Σχήμα 5.4.4: Ροϊκές γραμμές για $U_{wall}/u_0 = 0.2$, $A=0.5$ και A) για $\delta=0.1$, B) για $\delta=1$ και Γ) για $\delta=10$.



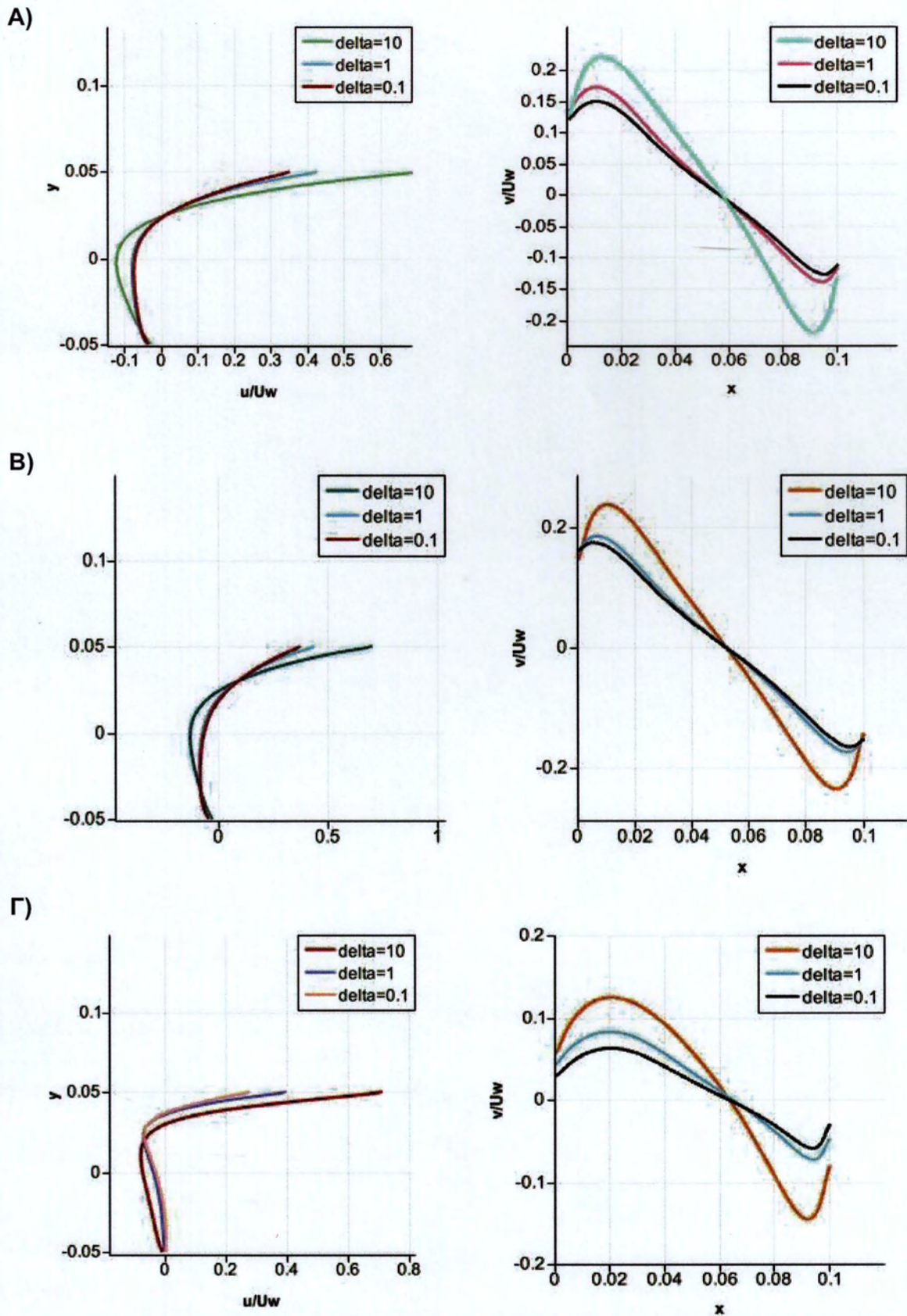
Σχήμα 5.4.5: Ροϊκές γραμμές για $U_{wall}/u_0 = 1$, $A = 0.5$ και Α) για $\delta = 0.1$, Β) για $\delta = 1$ και Γ) για $\delta = 10$.



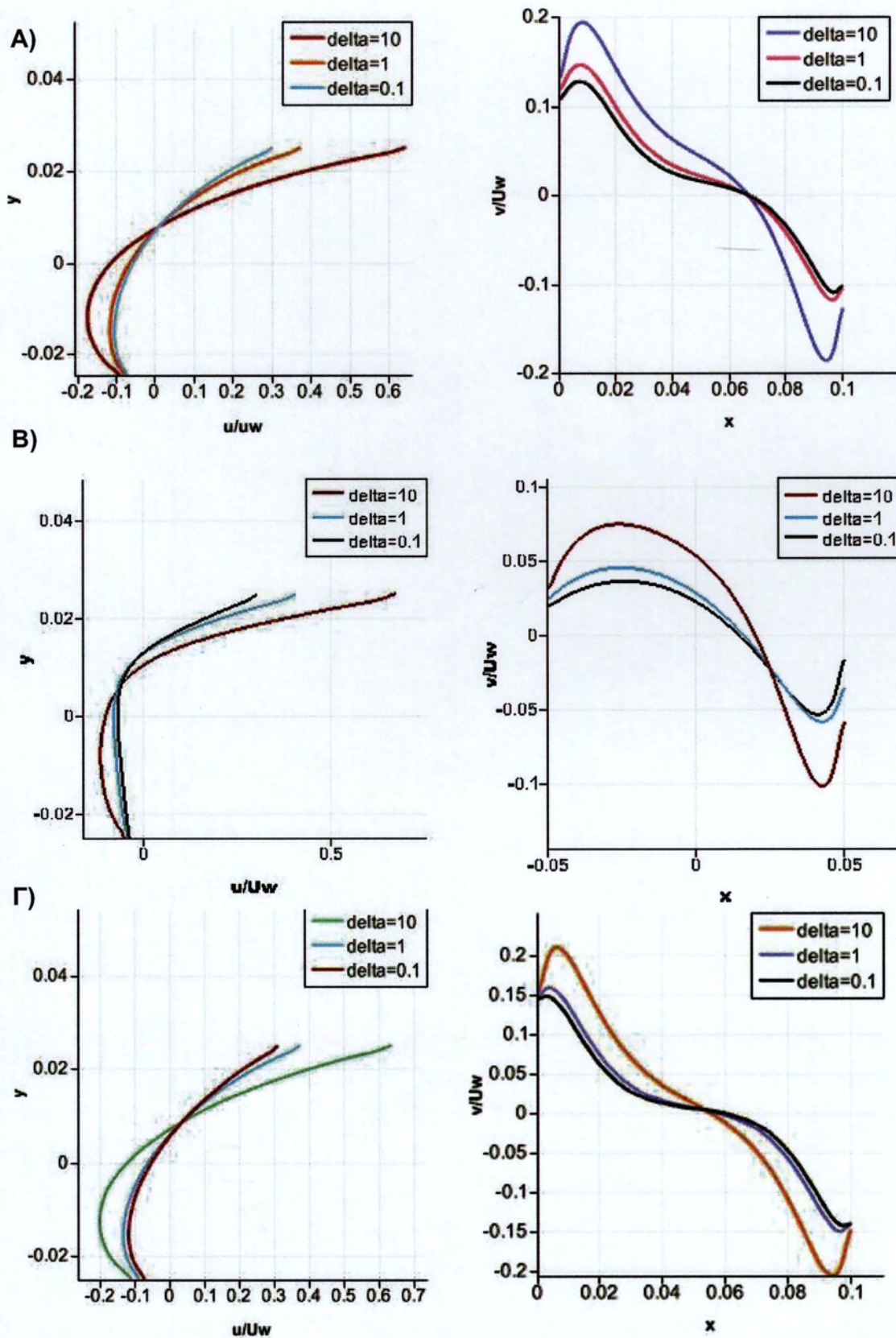
Σχήμα 5.4.6: Ροϊκές γραμμές για $U_{wall}/u_0 = 4$, $A = 0.5$ και Α) για $\delta = 0.1$, Β) για $\delta = 1$ και Γ) για $\delta = 10$.



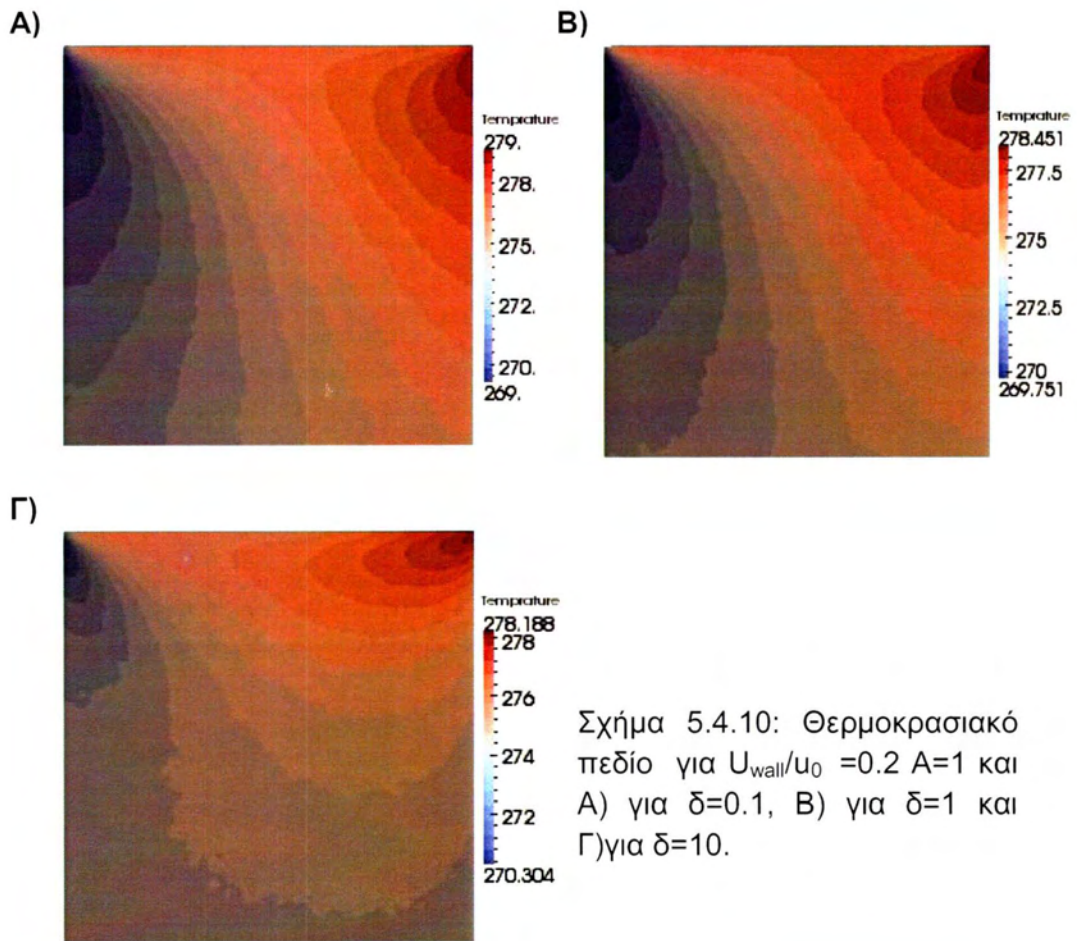
Σχήμα 5.4.7: Θέση του κέντρου της κύριας δίνης για διάφορες τιμές δ και για A) $A=1$ και B) $A=0.5$.



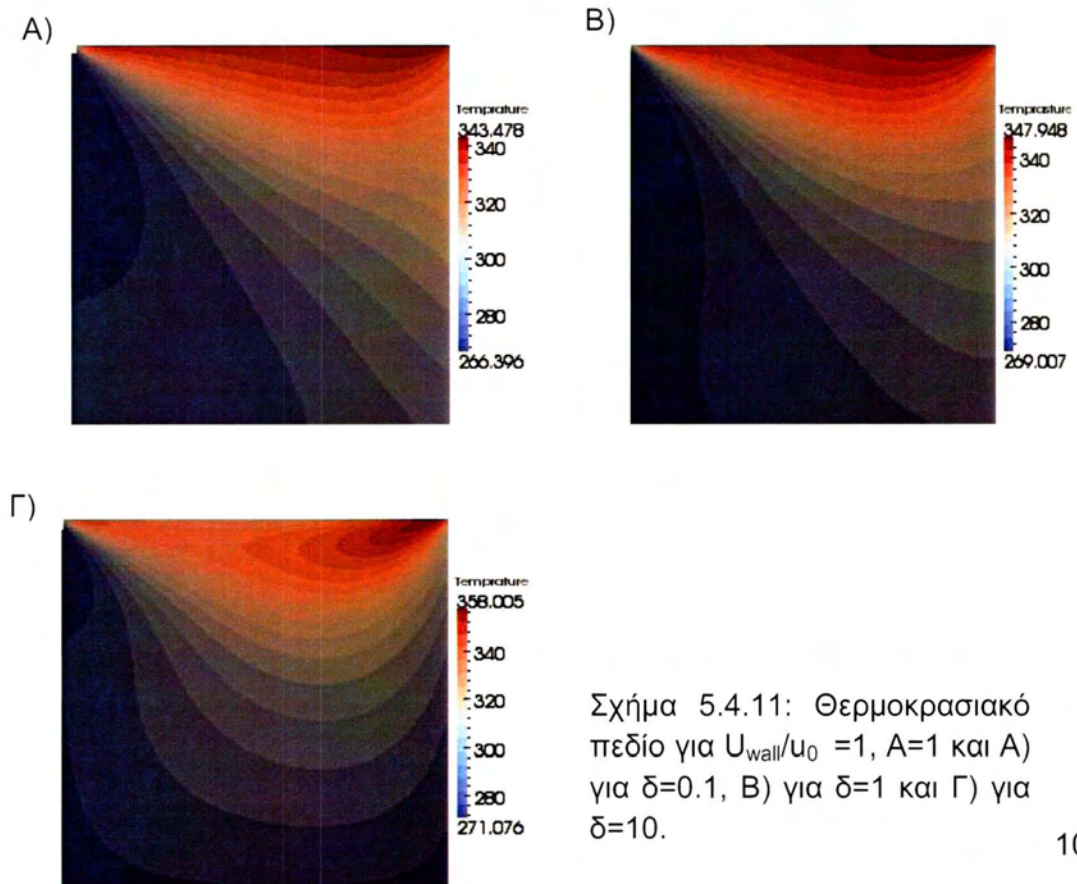
Σχήμα 5.4.8: Μεταβολή της οριζόντιας συνιστώσας u και της κάθετης συνιστώσας v της ταχύτητας κατά μήκος της ευθείας που διέρχεται από το κέντρο της κοιλότητας για $A=1$ και για A) $U_{wall}/u_0 = 0.2$, B) $U_{wall}/u_0 = 1$ και Γ) $U_{wall}/u_0 = 4$.



Σχήμα 5.4.9: Μεταβολή της οριζόντιας συνιστώσας u και της κάθετης συνιστώσας v της ταχύτητας κατά μήκος της ευθείας που διέρχεται από το κέντρο της κοιλότητας για $A=0.5$ και για Α) $U_{wall}/u_0=0.2$, Β) $U_{wall}/u_0=1$ και Γ) $U_{wall}/u_0=4$.

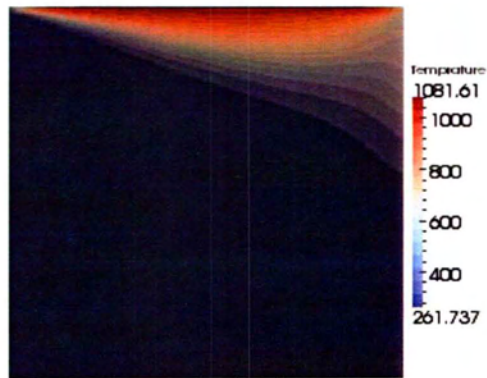


Σχήμα 5.4.10: Θερμοκρασιακό πεδίο για $U_{wall}/u_0 = 0.2$, $A=1$ και A) για $\delta=0.1$, B) για $\delta=1$ και Γ) για $\delta=10$.

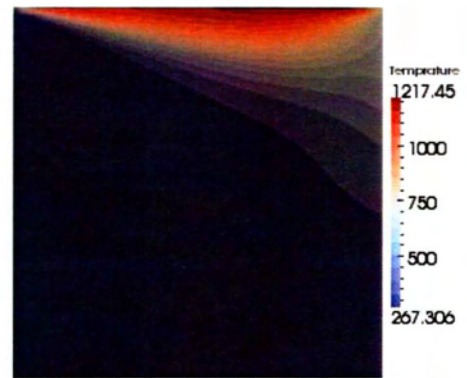


Σχήμα 5.4.11: Θερμοκρασιακό πεδίο για $U_{wall}/u_0 = 1$, $A=1$ και A) για $\delta=0.1$, B) για $\delta=1$ και Γ) για $\delta=10$.

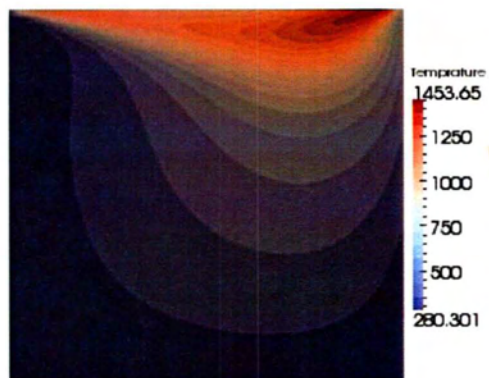
A)



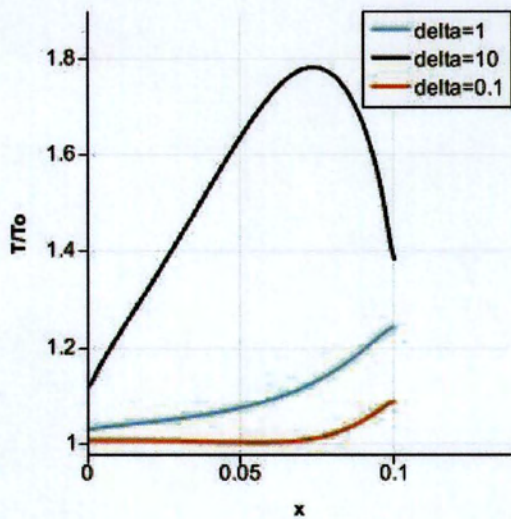
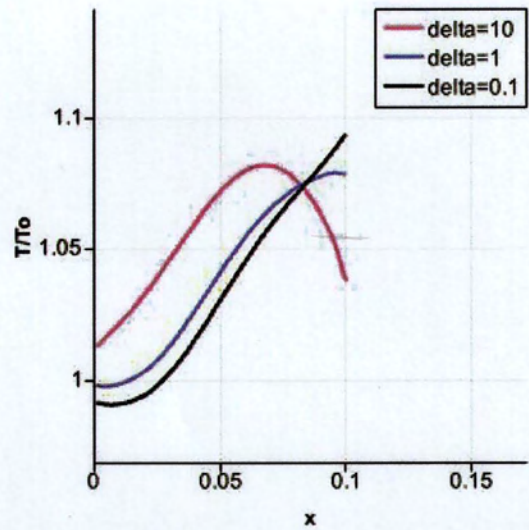
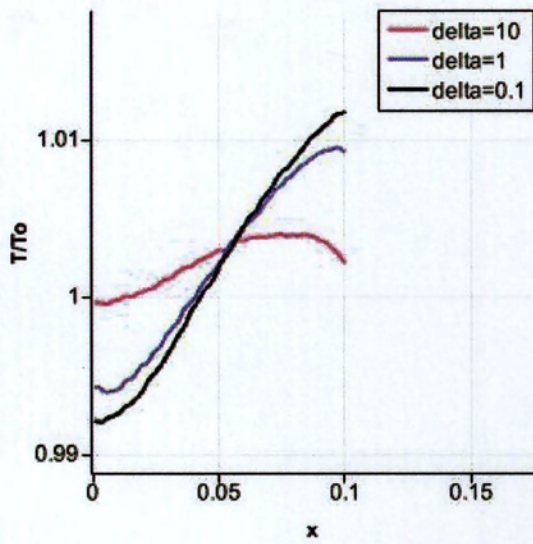
B)



Γ)

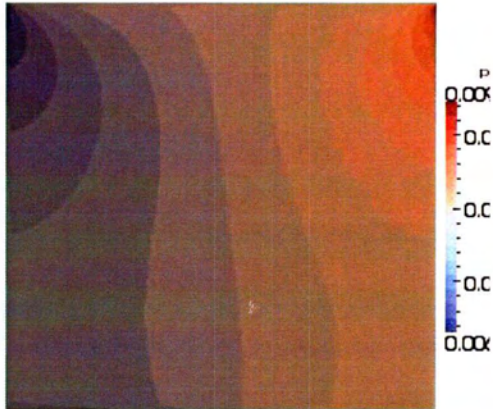


Σχήμα 5.4.12: Θερμοκρασιακό πεδίο για $U_{wall}/u_0 = 4$, $A=1$ και A) για $\delta=0.1$, B) για $\delta=1$ και Γ) για $\delta=10$.

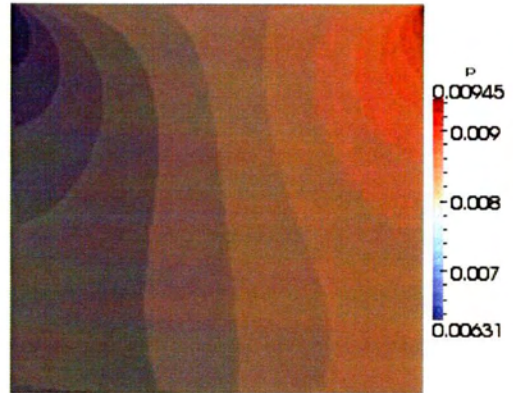


Σχήμα 5.4.13: Μεταβολή της θερμοκρασίας κατά μήκος της οριζόντιας γραμμής που διέρχεται από το κέντρο της κοιλότητας για $A=1$ και Α) για $U_{wall}/u_0=0.2$, Β) για $U_{wall}/u_0 = 1$ και Γ) για $U_{wall}/u_0 = 4$.

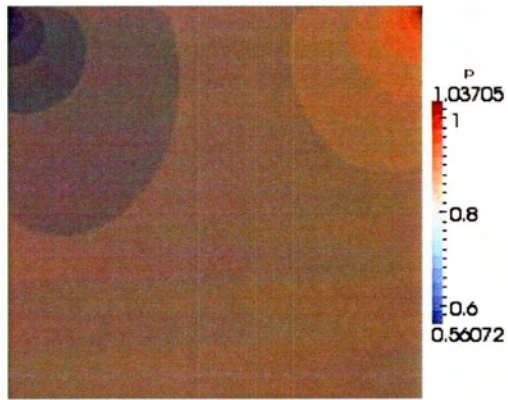
A)



B)

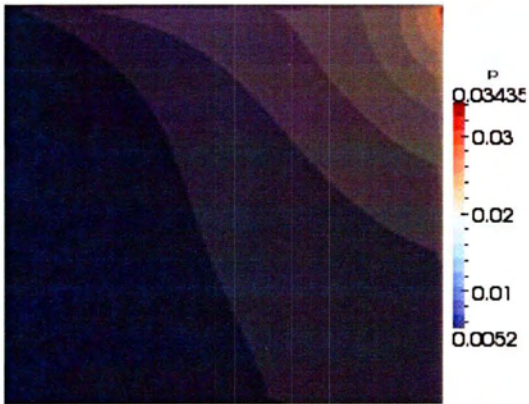


Γ)

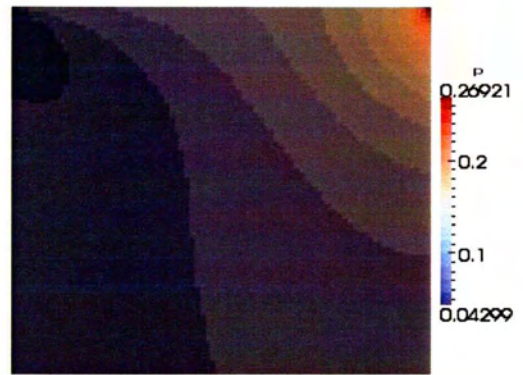


Σχήμα 5.4.14: Θερμοκρασιακό πεδίο για $A=0.1$ και A) για $\delta=0.1$, B) για $\delta=1$ και Γ) για $\delta=10$.

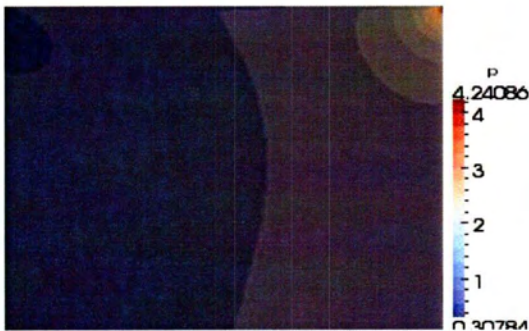
A)



B)

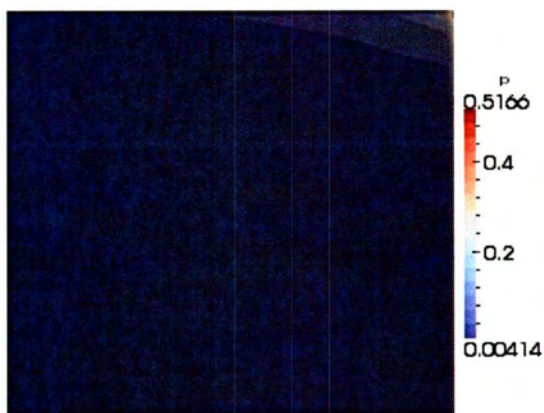


Γ)

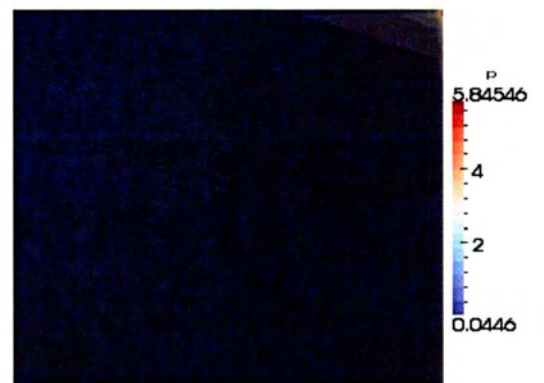


Σχήμα 5.4.15: Θερμοκρασιακό πεδίο για $A=1$ και A) για $\delta=0.1$, B) για $\delta=1$ και Γ) για $\delta=10$.

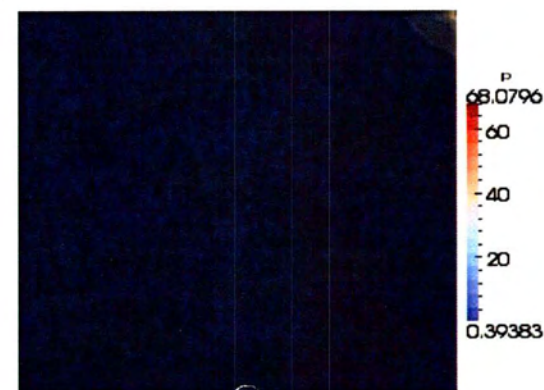
A)



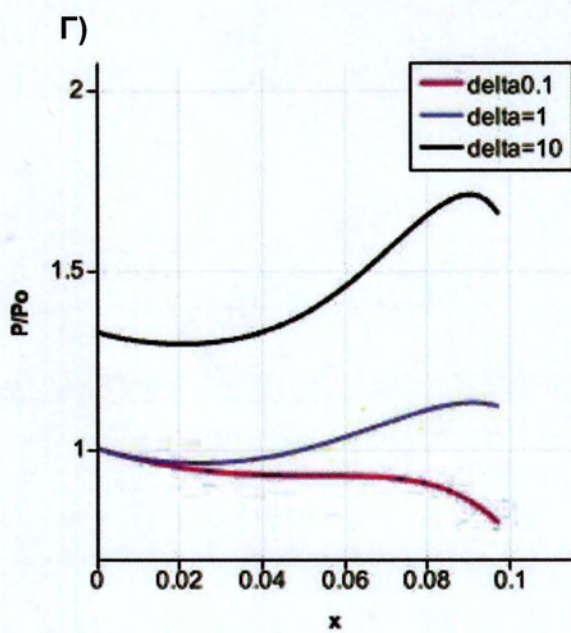
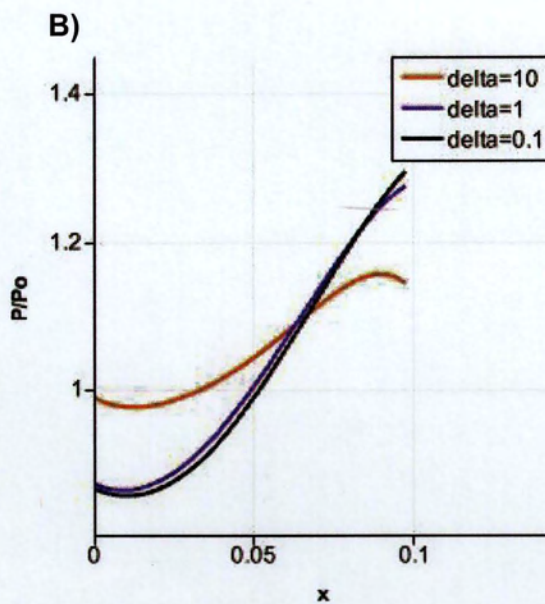
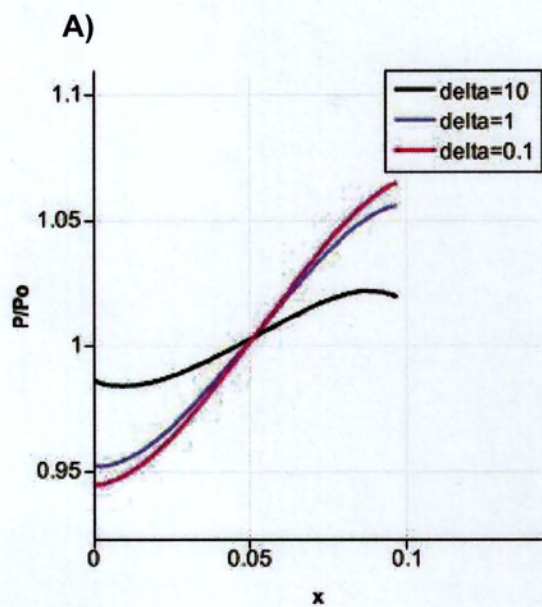
B)



Γ)



Σχήμα 5.4.16: Θερμοκρασιακό πεδίο για $A=4$ και A) για $\delta=0.1$, B) για $\delta=1$ και Γ) για $\delta=10$.



Σχήμα 5.4.17: Μεταβολή της πίεσης κατά μήκος της οριζόντιας γραμμής που διέρχεται από το κέντρο της κολόνη για $A=1$ και A) για $U_{wall}/u_0 = 0.2$, B) για $U_{wall}/u_0 = 1$ και Γ) για $U_{wall}/u_0 = 4$.

Κεφάλαιο 6 Συμπεράσματα και προτάσεις για μελλοντική δουλειά

Το αντικείμενο της παρούσας διπλωματικής είναι η κατανόηση του αλγορίθμου «Απευθείας Προσομοίωση Monte Carlo» (DSMC), η χρήση και εξοικείωση της πλατφόρμας OpenFOAM και τέλος η εφαρμογή του λύτη `dsmcFoam` στην επίλυση του πρότυπου προβλήματος ροής σε κοιλότητα με κινούμενο τοίχωμα. Στο Κεφάλαιο 3 εξετάζεται αναλυτικά η δομή και η λειτουργία του αλγορίθμου DSMC, ενώ στο Κεφάλαιο 4 παρουσιάζεται η εφαρμογή της μεθόδου DSMC με τη χρήση του λύτη `dsmcFoam` στην υπολογιστική πλατφόρμα OpenFOAM. Για το σκοπό αυτό, επιλύονται τα πρότυπα προβλήματα μετάδοση θερμότητας ανάμεσα σε πλάκες και ροή σε κοιλότητα με κινούμενο τοίχωμα σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen και ακολουθεί σύγκριση των αποτελεσμάτων με αντίστοιχα διαθέσιμα στη βιβλιογραφία. Μετά την πιστοποίηση του αλγορίθμου τα δύο χαρακτηριστικά προβλήματα επιλύονται για διάφορες γεωμετρικές παραμέτρους και παραμέτρους ροής. Σημειώνεται ότι η μέθοδος DSMC χρησιμοποιείται για την επίλυση ροών που συναντώνται σε πολλές τεχνολογικές εφαρμογές.

Στο εγγύς μέλλον προβλέπεται η εφαρμογή του αλγορίθμου σε σύνθετες γεωμετρίες κάτι που αποτελεί ένα από τα πλεονεκτήματα του περιβάλλοντος OpenFOAM με σκοπό την επίλυση τεχνολογικών προβλημάτων. Παραδείγματα εφαρμογών είναι μεταξύ άλλων τα μικροηλεκτρομηχανολογικά συστήματα, οι αντλίες κενού και οι συσκευές – αισθητήρες σε υψόμετρα μεγαλύτερα των 50 km.

Αναφορές

- [1] Chr. Day, A. Antipenkov, M. Dremel, H. Haas, V. Hauer, A. Mack, D. Murdoch and M. Wykes, Research, development and design for the cryogenetic and mechanical vacuum pumping systems of ITER, *Vaccum*, 81 (6) 802-809, 2002.
- [2] M. Gad-el Hak, *The MEMS Handbook*, CRC Press, Florida, USA, 2002.
- [3] F. Sharipov and V. Seleznev, Data on internal rarefied gas flows, *Physics Chem. Ref. Data*, 27(3) 657-706, 1998.
- [4] G. A. Bird, *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*, Oxford University Press, Oxford, 1994.
- [5] J. H. Ferziger and H. G. Kaper, *Mathematical theory of transport processes in gases*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1972.
- [6] W. Wagner, *Stochastic models in kinetic theory*, No.1536, Berlin, 2010.
- [7] <http://www.sciencedaily.com/releases/2010/05/100513162755.htm>
- [8] http://en.wikipedia.org/wiki/OpenFOAM#cite_note-17
- [9] <http://www.OpenFOAM.com/download/history.php>
- [10] S. Naris and D. Valougeorgis, The driven cavity flow over the whole range of the Knudsen number, *Phys. Fluids*, 17, 2005.
- [11] J. Benzi, Xiao-Jun και D. R. Emerson, Investigation of heat and mass transfer in a lid-driven cavity under nonequilibrium flow conditions, *Numerical Heat Transfer, Part B*, 58, 287–303, 2010.

Παράρτημα Α: Επιπρόσθετες συναρτήσεις και υπορουτίνες

Σε αυτή την ενότητα παρατίθενται οι δευτερεύουσες υπορουτίνες οι οποίες καλούνται από τις βασικές και εκτελούν επιμέρους διεργασίες. Η χρήση των ακόλουθων συναρτήσεων έχει περιγραφεί κατά την ανάπτυξη των βασικών υπορουτίνων.

```
SUBROUTINE ELASTIC  
REAL(8),DIMENSION(3)::VRCP,VCCM  
!VRCP(3) are the post-collision components of the relative velocity  
!VCCM(3) are the components of the centre of mass velocity  
RML=5d-1  
RMM=5d-1  
VCCM(1)=RML*PVX(L)+RMM*PVX(M)  
VCCM(2)=RML*PVY(L)+RMM*PVY(M)  
VCCM(3)=RML*PVZ(L)+RMM*PVZ(M)  
!VRCP(3) are the post-collision components of the relative velocity  
B=2d0*RF()-1d0  
A=DSQRT(1d0-B*B)  
VRCP(1)=B*VR  
C=6.2831853071796*RF()  
VRCP(2)=A*DCOS(C)*VR  
VRCP(3)=A*DSIN(C)*VR  
PVX(L)=VCCM(1)+VRCP(1)*RMM  
PVY(L)=VCCM(2)+VRCP(2)*RMM  
PVZ(L)=VCCM(3)+VRCP(3)*RMM  
PVX(M)=VCCM(1)-VRCP(1)*RML  
PVY(M)=VCCM(2)-VRCP(2)*RML  
PVZ(M)=VCCM(3)-VRCP(3)*RML  
RETURN  
END SUBROUTINE
```

```
SUBROUTINE OUT  
OPEN (10,FILE="FIELD.txt")  
REWIND 10  
DO MC=1,NCO  
WRITE(10,99002) 5d-1*(CG(1,MC)+CG(2,MC)),ANUDE(MC),TEMP(MC), &  
ANUDE(MC)*TEMP(MC),UX(MC),UY(MC),UZ(MC),CS(1,MC)/(NSMP-1)  
END DO  
CALL FLUSH (10) ; CALL FLUSH (30)  
99002 FORMAT( (1X,F8.4),9(2X,E11.4))  
RETURN  
END SUBROUTINE
```

```
SUBROUTINE DIFFUSE_UP (VN,VT1,VT2)  
Real(8)::VN,VT1,VT2,A,B  
VN=DSQRT(-(1d0-b0)*DLOG(RF()))  
A=DSQRT(-(1d0-b0)*DLOG(RF()))  
B=6.283185308*RF()  
VT1=A*DSIN(B)+U0  
VT2=A*DCOS(B)  
RETURN  
END SUBROUTINE
```

```

SUBROUTINE DIFFUSE_DOWN(VN,VT1,VT2)
Real(8)::VN,VT1,VT2,A,B
  VN=DSQRT(-(1d0+b0)*DLOG(RF()))
  A=DSQRT(-(1d0+b0)*DLOG(RF()))
  B=6.283185308*RF()
  VT1=A*DSIN(B)-U0
  VT2=A*DCOS(B)
RETURN
END SUBROUTINE

```

```

!generator of random number
Real(8) FUNCTION RF()
Real(8)::RR1,RR2
Integer::IX1,IX2,IX3,IX4,IX5,IX6
data IX1,IX2,IX3,IX4,IX5,IX6/1500419,1400159,1364,1528,1,3/
  RR1=1d0/DFLOTJ(IX1)
  RR2=1d0/DFLOTJ(IX2)
  IX5=MOD(IX5*IX3,IX1)
  IX6=MOD(IX6*IX4,IX2)
  RF=RR1*IX5+RR2*IX6
  IF(RF.GE.1d0)RF=RF-1d0
RETURN
END FUNCTION

```

```

!calculates the Gamma function of X.
FUNCTION GAM(X)
IMPLICIT DOUBLEPRECISION (A-H, O-Z)
  A=1d0
  Y=X
  IF (Y.LT.1d0) THEN
    A=A/Y
  ELSE
50  Y=Y-1
    IF (Y.GE.1d0) THEN
      A=A*Y
      GO TO 50
    END IF
  END IF
  GAM=A*(1d0-0.5748646*Y+0.9512363*Y**2-0.6998588*Y**3+&
    0.4245549*Y**4-0.1010678*Y**5)
RETURN
END FUNCTION

```

Παράρτημα Β: Εγκατάσταση του OpenFOAM

Για την εγκατάσταση του OpenFOAM, βασική προϋπόθεση είναι να υπάρχει εγκατεστημένο στον υπολογιστή λειτουργικό Linux. Εμείς εκτελέσαμε τις διεργασίες σε Linux-Ubuntu 10.10.

Αρχικά, ανοίγουμε το terminal με Ctrl-Alt-T και πληκτρολογούμε

```
VERS=`lsb_release -cs`  
sudo sh c "echo deb http://www.OpenFOAM.com/download/ubuntu maverick main  
>> /etc/apt/sources.list"
```

Στη συνέχεια πληκτρολογούμε:

```
sudo apt-get update
```

Έπειτα πληκτρολογούμε:

```
sudo apt-get install OpenFOAM171
```

Τέλος, αν θέλουμε να οπτικοποιήσουμε τα αποτελέσματα με τη χρήση του Paraview, όπως επιλέξαμε εμείς μπορούμε στη συνέχεια να πληκτρολογήσουμε-χωρίς να είναι απαραίτητο-

```
sudo apt-get install paraviewOpenFOAM381
```

για την εγκατάστασή του Paraview.

Μετά πληκτρολογούμε

```
gedit ~/.bashrc
```

Και στο αρχείο που ανοίγει προσθέτουμε στο τέλος την εντολή

```
source /opt/OpenFOAM171/etc/bashrc
```

Η εγκατάσταση ολοκληρώθηκε και για να είμαστε σίγουροι ότι πέτυχε πληκτρολογούμε

```
icoFoam -help
```

και θα πρέπει να εμφανιστεί στην οθόνη

```
Usage: icoFoam [-parallel] [-case dir] [-help] [-doc] [-srcDoc]
```

Αφού σιγουρευτούμε ότι η εγκατάσταση πέτυχε αντιγράφουμε το φάκελο που βρίσκεται στην τοποθεσία `/opt/OpenFOAM171/tutorials` σε μία τοποθεσία της επιλογής μας, μέσα στην οποία θα δουλεύουμε.

Αν θέλουμε να εκτελέσουμε κάποιο solver όπως ο DSMCFoam δεν έχουμε παρά να ανοίξουμε το terminal με Ctrl-Alt-T, να πάμε στην περιοχή που έχουμε αντιγράψει το φάκελο tutorial και στο φάκελο "cavity", που βρίσκεται μέσα σε αυτό και να πληκτρολογήσουμε ./Allrun. Ενώ αν θέλουμε να διαγράψουμε τα αποτελέσματα από κάποια συγκεκριμένη εκτέλεση ώστε να ξαναεκτελέσουμε το αρχείο με άλλα δεδομένα εισόδου όπως π.χ. η ταχύτητα πληκτρολογούμε ./Allclean.

Παράρτημα Γ: Αρχεία του OpenFOAM

Γ.1 Αρχεία φακέλου "0"

fD

```
FoamFile
{
  version 2.0;
  format  ascii;
  class   volVectorField;
  object  fD;
}
//***** //

dimensions [1 -1 -2 0 0 0];

internalField uniform (0 0 0);

boundaryField
{
  movingWall
  {
    type zeroGradient;
  }

  fixedWalls
  {
    type zeroGradient;
  }

  frontAndBack
  {
    type empty;
  }
}
//***** //
```

DSMCRhoN

```
FoamFile
{
  version 2.0;
  format  ascii;
  class   volScalarField;
  object  DSMCRhoN;
}
//***** //

dimensions [0 -3 0 0 0 0];

internalField uniform 0;

boundaryField
{
  movingWall
  {
```

```

        type    zeroGradient;
    }

    fixedWalls
    {
        type    zeroGradient;
    }

    frontAndBack
    {
        type    empty;
    }
}
// ***** //

```

iDof

```

FoamFile
{
    version    2.0;
    format     ascii;
    class      volScalarField;
    object     iDof;
}
// ***** //

```

```

dimensions    [0 -3 0 0 0 0 0];
internalField uniform 0;

```

```

boundaryField
{
    movingWall
    {
        type    zeroGradient;
    }

    fixedWalls
    {
        type    zeroGradient;
    }

    frontAndBack
    {
        type    empty;
    }
}
// ***** //

```

linearKE

```

FoamFile
{
    version    2.0;
    format     ascii;
    class      volScalarField;
    object     linearKE;
}
// ***** //

```

```

dimensions    [1 -1 -2 0 0 0 0];

```

```

internalField uniform 0;

boundaryField
{
    movingWall
    {
        type        zeroGradient;
    }

    fixedWalls
    {
        type        zeroGradient;
    }

    frontAndBack
    {
        type        empty;
    }
}
//*****//

```

q

```

FoamFile
{
    version 2.0;
    format  ascii;
    class  volScalarField;
    object q;
}
//*****//
dimensions [1 0 -3 0 0 0];
internalField uniform 0;
boundaryField
{
    movingWall
    {
        type        zeroGradient;
    }

    fixedWalls
    {
        type        zeroGradient;
    }

    frontAndBack
    {
        type        empty;
    }
}
//*****//

```

rhoN

```

FoamFile
{
    version 2.0;
    format  ascii;
    class  volScalarField;
    object rhoN;
}

```

```

// ***** //
dimensions [0 -3 0 0 0 0];

internalField uniform 0;

boundaryField
{
  movingWall
  {
    type zeroGradient;
  }

  fixedWalls
  {
    type zeroGradient;
  }

  frontAndBack
  {
    type empty;
  }
}
// ***** //

```

DSMCSigmaTcRM

```

FoamFile
{
  version 2.0;
  format ascii;
  class volScalarField;
  location "0";
  object DSMCSigmaTcRMax;
}
// ***** //
dimensions [0 3 -1 0 0 0];

internalField uniform 1.93100183203375e-16;

boundaryField
{
  movingWall
  {
    type zeroGradient;
  }
  fixedWalls
  {
    type zeroGradient;
  }
  frontAndBack
  {
    type empty;
  }
}
// ***** //

```

internalE

```
FoamFile
{
  version 2.0;
  format  ascii;
  class   volScalarField;
  object  internalE;
}
//*****//

dimensions [1 -1 -2 0 0 0];

internalField uniform 0;

boundaryField
{
  movingWall
  {
    type zeroGradient;
  }

  fixedWalls
  {
    type zeroGradient;
  }

  frontAndBack
  {
    type empty;
  }
}
//*****//
```

momentum

```
FoamFile
{
  version 2.0;
  format  ascii;
  class   volVectorField;
  object  momentum;
}
dimensions [1 -2 -1 0 0 0];
internalField uniform (0 0 0);
boundaryField
{
  movingWall
  {
    type zeroGradient;
  }

  fixedWalls
  {
    type zeroGradient;
  }

  frontAndBack
  {
    type empty;
  }
}
//*****//
```

rhoM

```
FoamFile
{
  version 2.0;
  format  ascii;
  class  volScalarField;
  object  rhoM;
}
//*****//

dimensions  [1 -3 0 0 0 0];

internalField  uniform 0;

boundaryField
{
  movingWall
  {
    type  zeroGradient;
  }

  fixedWalls
  {
    type  zeroGradient;
  }

  frontAndBack
  {
    type  empty;
  }
}
//*****//
```

Γ.2 Τα τμήματα του αρχείου “controlDict”

```
        rhoN
    {
        mean on;
        prime2Mean off;
        base time;
    }
    rhoM
    {
        mean on;
        prime2Mean off;
        base time;
    }
    DSMCRhoN
    {
        mean on;
        prime2Mean off;
        base time;
    }
    momentum
    {
        mean on;
        prime2Mean off;
        base time;
    }
}
```

```

        linearKE
        {
            mean on;
            prime2Mean off;
            base time;
        }
        internalE
        {
            mean on;
            prime2Mean off;
            base time;
        }
        iDof
        {
            mean on;
            prime2Mean off;
            base time;
        }
        q
        {
            mean on;
            prime2Mean off;
            base time;
        }
        fD
        {
            mean on;
            prime2Mean off;
            base time;
        }
    };
};
//***** //

```

Γ.3 Αρχεία φακέλου “system”

fvSchemes

```

FoamFile
{
    version 2.0;
    format ascii;
    class dictionary;
    location "system";
    object fvSchemes;
}
//***** //

```

```

ddtSchemes
{
    default none;
}

```

```

gradSchemes
{
    default none;
}

```

```

divSchemes
{
    default none;
}

```

```

}

laplacianSchemes
{
    default    none;
}

interpolationSchemes
{
    default    none;
}

snGradSchemes
{
    default    none;
}

fluxRequired
{
    default    no;
}
//***** //

```

fvSolution

```

FoamFile
{
    version    2.0;
    format     ascii;
    class      dictionary;
    location   "system";
    object     fvSolution;
}
//***** //

solvers
{
}
//***** //

```

decomposeParDict

```

\*-----*/
FoamFile
{
    version    2.0;
    format     ascii;
    class      dictionary;
    location   "system";
    object     decomposeParDict;
}
//***** //

numberOfSubdomains 4;

method        simple;

```



```

simpleCoeffs
{
  n      ( 1 2 2 );
  delta  0.001;
}

hierarchicalCoeffs
{
  n      ( 1 1 1 );
  delta  0.001;
  order  xyz;
}

metisCoeffs
{
  processorWeights ( 1 1 1 1 );
}

manualCoeffs
{
  dataFile  "";
}

distributed  no;

roots      ( );
// ***** //

```

Γ.4 Αρχεία ελέγχου προγράμματος OpenFOAM

log.blockMesh

```

Build : 1.7.x-4bbf33160caf
Exec  : blockMesh
Date  : Apr 04 2011
Time  : 02:36:48
Host  : chris-System-Product-Name
PID   : 2684
Case  : /home/chris/OpenFOAM/chris-1.7.1/run/tutorials/discreteMethods/DSMCFoam/hgh
nProcs : 1
SigFpe : Enabling floating point exception trapping (FOAM_SIGFPE).

```

```
// ***** //
```

Create time

```

Creating block mesh from
"/home/chris/OpenFOAM/chris-
1.7.1/run/tutorials/discreteMethods/DSMCFoam/hgh/constant/polyMesh/blockMeshDict"

```

Creating blockCorners

Creating curved edges

Creating blocks

Creating patches

Creating block mesh topology

Default patch type set to empty

Check block mesh topology

Basic statistics

Number of internal faces : 0
Number of boundary faces : 6
Number of defined boundary faces : 6
Number of undefined boundary faces : 0

Checking patch -> block consistency

Creating block offsets

Creating merge list .

Creating points with scale 0.01

Creating cells

Creating patches

Creating mesh from block mesh

Default patch type set to empty

Writing polyMesh

End

log.DSMCFoam

Build : 1.7.x-4bbf33160caf
Exec : DSMCFoam
Date : Apr 04 2011
Time : 02:37:01
Host : chris-System-Product-Name
PID : 2700
Case : /home/chris/OpenFOAM/chris-1.7.1/run/tutorials/discreteMethods/DSMCFoam/hgh
nProcs : 1
SigFpe : Enabling floating point exception trapping (FOAM_SIGFPE).

//*****//

Create time

Create mesh for time = 0

Constructing DSMCCloud
Selecting BinaryCollisionModel LarsenBorgnakkeVariableHardSphere
Selecting WallInteractionModel MaxwellianThermal
Selecting InflowBoundaryModel NoInflow

Constructing constant properties for
Ar

Starting time loop

Reading/calculating field rhoNMean

Reading/calculating field rhoMMean

Reading/calculating field DSMCRhoNMean

Reading/calculating field momentumMean

Reading/calculating field linearKEMean

Reading/calculating field internalEMean

Reading/calculating field iDofMean

Reading/calculating field qMean

Reading/calculating field fDMean

fieldAverage: starting averaging at time 0

Time = 1e-06

Collisions = 185
Acceptance rate = 1

Cloud name: DSMC

Number of DSMC particles = 1000000
Number of molecules = 1.8909e+14
Mass in system = 1.2536667e-11
Average linear momentum = (-1.4043618e-26 2.323624441e-27 1.699436877e-26)
|Average linear momentum| = 2.216824321e-26
Average linear kinetic energy = 6.216108013e-21
Average internal energy = 0
Average total energy = 6.216108013e-21

ExecutionTime = 9.3 s ClockTime = 9 s

Calculating averages

Time = 2e-06

Collisions = 208
Acceptance rate = 1

Cloud name: DSMC

Number of DSMC particles = 1000000
Number of molecules = 1.8909e+14
Mass in system = 1.2536667e-11
Average linear momentum = (-1.333495085e-26 6.538195378e-27 1.734008286e-26)
|Average linear momentum| = 2.283084288e-26
Average linear kinetic energy = 6.216481012e-21
Average internal energy = 0
Average total energy = 6.216481012e-21

ExecutionTime = 11.15 s ClockTime = 11 s

Calculating averages

Time = 3e-06

Collisions = 189
Acceptance rate = 0.9947368421

Cloud name: DSMC

Number of DSMC particles = 1000000
Number of molecules = 1.8909e+14
Mass in system = 1.2536667e-11
Average linear momentum = (-1.279457238e-26 6.879804875e-27 1.8376012e-26)
|Average linear momentum| = 2.342457288e-26

Average linear kinetic energy = 6.2163782e-21
Average internal energy = 0
Average total energy = 6.2163782e-21

ExecutionTime = 13.01 s ClockTime = 13 s

Calculating averages

Time = 4e-06

Collisions = 201
Acceptance rate = 1

Cloud name: DSMC

Number of DSMC particles = 1000000
Number of molecules = 1.8909e+14
Mass in system = 1.2536667e-11
Average linear momentum = (-8.321103737e-27 1.507975726e-27 2.108341316e-26)
|Average linear momentum| = 2.271618517e-26
Average linear kinetic energy = 6.216960318e-21
Average internal energy = 0
Average total energy = 6.216960318e-21

ExecutionTime = 14.89 s ClockTime = 15 s

Calculating averages

Time = 5e-06

Collisions = 168
Acceptance rate = 0.9940828402

Cloud name: DSMC

Number of DSMC particles = 1000000
Number of molecules = 1.8909e+14
Mass in system = 1.2536667e-11
Average linear momentum = (-1.063708397e-26 6.840733114e-27 2.277805747e-26)
|Average linear momentum| = 2.605346593e-26
Average linear kinetic energy = 6.217705889e-21
Average internal energy = 0
Average total energy = 6.217705889e-21

ExecutionTime = 16.79 s ClockTime = 17 s

Calculating averages

Time = 6e-06

Collisions = 174
Acceptance rate = 0.9942857143

Cloud name: DSMC

Number of DSMC particles = 1000000
Number of molecules = 1.8909e+14
Mass in system = 1.2536667e-11
Average linear momentum = (-1.150656545e-26 4.626485159e-27 2.453337552e-26)
|Average linear momentum| = 2.748985136e-26
Average linear kinetic energy = 6.216863477e-21
Average internal energy = 0
Average total energy = 6.216863477e-21

ExecutionTime = 18.71 s ClockTime = 19 s

Calculating averages

Time = 7e-06

Collisions = 179
Acceptance rate = 0.9944444444

Cloud name: DSMC

Number of DSMC particles = 1000000
Number of molecules = 1.8909e+14
Mass in system = 1.2536667e-11
Average linear momentum = (-1.053294728e-26 -1.550740261e-28 2.463811044e-26)
|Average linear momentum| = 2.679558756e-26
Average linear kinetic energy = 6.216156496e-21
Average internal energy = 0
Average total energy = 6.216156496e-21

ExecutionTime = 20.65 s ClockTime = 21 s

Calculating averages

Time = 8e-06

Collisions = 193
Acceptance rate = 1

Cloud name: DSMC

Number of DSMC particles = 1000000
Number of molecules = 1.8909e+14
Mass in system = 1.2536667e-11
Average linear momentum = (-8.229162305e-27 1.89490601e-27 2.635267112e-26)
|Average linear momentum| = 2.767260479e-26
Average linear kinetic energy = 6.216513625e-21
Average internal energy = 0
Average total energy = 6.216513625e-21

ExecutionTime = 22.61 s ClockTime = 22 s

Calculating averages

Time = 9e-06

Collisions = 215
Acceptance rate = 1

Cloud name: DSMC

Number of DSMC particles = 1000000
Number of molecules = 1.8909e+14
Mass in system = 1.2536667e-11
Average linear momentum = (-4.011329046e-27 1.821418787e-27 2.928913268e-26)
|Average linear momentum| = 2.961860261e-26
Average linear kinetic energy = 6.215512606e-21
Average internal energy = 0
Average total energy = 6.215512606e-21

ExecutionTime = 24.6 s ClockTime = 24 s

Calculating averages

Time = 1e-05

Collisions = 187
Acceptance rate = 1

Cloud name: DSMC

Number of DSMC particles = 1000000
Number of molecules = 1.8909e+14
Mass in system = 1.2536667e-11
Average linear momentum = (-4.87300708e-27 -1.190686311e-27 2.867594432e-26)
|Average linear momentum| = 2.91114018e-26
Average linear kinetic energy = 6.216095599e-21
Average internal energy = 0
Average total energy = 6.216095599e-21

ExecutionTime = 26.58 s ClockTime = 26 s
Calculating averages



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ



004000106336