



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ  
ΤΜΗΜΑ ΠΟΛΙΤΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ  
ΤΟΜΕΑΣ ΥΔΡΑΥΛΙΚΗΣ ΚΑΙ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ

# Μελέτη Τυρβόδους ροής σε ανοιχτό αγωγό με πορώδη πυθμένα μέσω της μεθόδου SPH

---

Διπλωματική εργασία.

**ΧΑΤΖΟΓΛΟΥ ΕΥΣΤΑΘΙΟΣ**

**Επιβλέπων Καθηγητής:**  
Καθηγητής, Αντώνιος Λιακόπουλος

Βόλος, 2019



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ  
ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ  
ΤΜΗΜΑ ΠΟΛΙΤΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

Διπλωματική Εργασία

**ΜΕΛΕΤΗ ΤΥΡΒΩΔΟΥΣ ΡΟΗΣ ΣΕ ΑΝΟΙΧΤΟ ΑΓΩΓΟ ΜΕ  
ΠΟΡΩΔΗ ΠΥΘΜΕΝΑ ΜΕΣΩ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ SPH**

υπό

**ΕΥΣΤΑΘΙΟΣ ΧΑΤΖΟΓΛΟΥ**

Υπεβλήθη για την εκπλήρωση μέρους των  
απαιτήσεων για την απόκτηση του  
Διπλώματος Πολιτικού Μηχανικού

2019



© Copyright υπό Χατζόγλου Ευστάθιος, Βόλος 2019

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

**“Intentionally blank”**

### *Ευχαριστίες*

Με το πέρας της παρούσας διπλωματικής εργασίας θα ήθελα να ευχαριστήσω από καρδιάς τον Καθηγητή Αντώνιο Λιακόπουλο για την εμπιστοσύνη που μου έδειξε με την ανάθεση της, για την καθοδήγηση, την πλήρη κατανόηση και την αμέριστη στήριξή του καθ' όλη την διάρκεια της συγκεκριμένης εργασίας αλλά και των ακαδημαϊκών μου χρόνων. Όλα τα παραπάνω δεν συνέβαλαν καθοριστικά μόνο στην εκπόνηση της παρούσας διπλωματικής αλλά και στην μετάδοση ενός μικροβίου, αυτού της ακόρεστης δίψας για μάθηση η οποία πρέπει να είναι απλή και αέναη όπως ο κύκλος του νερού που τόσο πολύ έμαθα να θαυμάζω.

Εν συνεχεία θα ήθελα να ευχαριστήσω των Δρ. Φίλιππο Σοφό του οποίου η βοήθεια ήταν καθοριστική στην δυσκολία και τα προβλήματα που προέκυψαν κατά την κατάστρωση του κώδικα.

Τέλος θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένειά μου για την στήριξη όλα αυτά τα χρόνια καθώς δεν θα ήμουν ο ίδιος χωρίς την πολύτιμη αγάπη και υποστήριξή τους.

Βόλος, 2019

Χατζόγλου Ευστάθιος.

## **ΜΕΛΕΤΗ ΤΥΡΒΩΔΟΥΣ ΡΟΗΣ ΣΕ ΑΝΟΙΧΤΟ ΑΓΩΓΟ ΜΕ ΠΟΡΩΔΗ ΠΥΘΜΕΝΑ ΜΕΣΩ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ SPH.**

ΕΥΣΤΑΘΙΟΣ ΧΑΤΖΟΓΛΟΥ

Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών, 2019

Επιβλέπων Καθηγητής: Λιακόπουλος Αντώνιος, Καθηγητής

### **ΠΕΡΙΛΗΨΗ**

Στην παρούσα εργασία γίνεται μελέτη των υδραυλικών χαρακτηριστικών μιας ροής που λαμβάνει χώρα σε έναν ανοιχτό αγωγό. Ειδικότερα γίνεται μια προσπάθεια της μελέτης του προφίλ των ταχυτήτων σε διαφορετικές θέσεις για έναν ανοιχτό αγωγό με πορώδες υπόστρωμα. Δεδομένο ότι σχεδόν όλοι οι ανοιχτοί αγωγοί που συναντώνται στην φύση έχουν πορώδη πυθμένα η μελέτη του φαινομένου χαρακτηρίζεται ως ιδιαίτερα σημαντική. Εξετάζεται η περίπτωση της τυρβώδους ροής, όπου τύρβη είναι το φαινόμενο που δημιουργείται μέσω της αστάθειας (instability) που αναπτύσσεται σε μία στρωτή ροή όταν αυξάνεται η ταχύτητα. Θεωρούνται ασυμπίεστα Νευτώνεια ρευστά (νερό), καθώς και σταθερές τιμές για την περίπτωση της πυκνότητας και του ιξώδους.

Για την ορθότερη προσέγγιση του φαινομένου γίνεται χρήση της μεθόδου Smoothed Particle Hydrodynamic (SPH). Η μέθοδος εισήχθη από τον Monahan 1977 για την μελέτη προβλημάτων αστροφυσικής. Παρόλα αυτά, γνωρίζει σχετικά πρόσφατη εφαρμογή σε προβλήματα ρευστομηχανικής καθώς υπάρχουν κάποια προβλήματα στον καθορισμό των οριακών συνθηκών της ροής (boundary conditions), τα οποία είναι ακόμα μεγαλύτερα στην περίπτωση που το άνω όριο είναι αυτό της ελεύθερης επιφάνειας.

Αρχικά γίνεται μία προσπάθεια για την δημιουργία μοντέλου SPH με την βοήθεια ενός υπάρχοντα ανοιχτού κώδικα του LAMMPS στον οποίο μπορεί να ενταχθεί η βιβλιοθήκη του SPH. Μετά την εγκατάσταση του SPH στον κώδικα LAMMPS έγινε μία σειρά δοκιμών για την αξιολόγηση της μεθόδου SPH στο αναφερθέν περιβάλλον και το κατά πόσο μπορεί να αποδώσει με πιστότητα παραδείγματα στρωτής και τυρβώδους ροής σε κλειστό και ανοιχτό αγωγό αντίστοιχα. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων συγκρίνονται και αξιολογούνται ως προς την ορθότητα και την φυσική τους σημασία έναντι αναλυτικών λύσεων και προϊόντων υπάρχουσας βιβλιογραφίας. Σχεδόν όλα τα μοντέλα ακόμα και σε μικρές διαστάσεις έδειξαν να προσεγγίζουν αρκετά καλά το φυσικό πρόβλημα, πράγμα που μπορεί να αξιοποιηθεί

σε μελέτες μεγάλων ανοιχτών καναλιών αλλά και ιδιαίτερα σε περιπτώσεις προβλημάτων που χαρακτηρίζονται από εξαιρετικά μικρές διαστάσεις.

Λέξεις κλειδιά : Ροή σε ανοιχτό αγωγό, Προφίλ ταχυτήτων, πορώδης πυθμένας, SPH,LAMMPS, Προσομοίωση.



## **SPH BASED STUDY OF TURBULENT OPEN CHANNEL FLOW WITH PERMEABLE BED**

CHATZOGLU EFSTATHIOS

University of Thessaly, Civil Engineering Department, 2019

Supervisor: Prof. Liakopoulos Antonios

### **Abstract**

In this study analytical solution, conclusions of previous studies and numerical simulations of Poiseuille flow and flow in an open channel with permeable and impermeable bed are presented and compared. For the numerical simulations of Poiseuille flow, sudden increase and decrease of the flow areas are studied and discussed. For the open channel flow, a model of impermeable bed and a model of permeable bed are evaluated. Due to the demand of vast computational power, geometry of the tests concerns dimensions of centimeters and millimeters. In order to accomplish accuracy the models are extracted with the state of the art technology of Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) method. Basic concepts of this method such as the integral interpolation method, the discretization of partial differential equations (PDEs) based on distributed nodal points (particles), and the choice of interpolation kernel functions are reviewed. In order to run SPH simulation an implementation to LAAMPS is to be done with the results to be visualized in OVITO. In almost all cases there is a good agreement between the numerical results and analytical solutions.

Key words: Open channel flow, Velocity distribution, Permeable bed, SPH, LAMMPS, Simulation.

## 1 Πίνακας περιεχομένων

ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ ΕΙΚΟΝΩΝ .....	12
ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ ΠΙΝΑΚΩΝ .....	13
ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ ΣΧΗΜΑΤΩΝ .....	13
ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΩΝ .....	14
ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ ΑΚΡΩΝΥΜΙΩΝ .....	15
1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ .....	16
1.1 Εισαγωγικές έννοιες για την ροή σε ανοιχτό αγωγό. ....	16
1.2 Περιγραφή του προβλήματος. ....	18
1.3 Βιβλιογραφική ανασκόπηση. ....	20
1.4 Σκοπός της διπλωματικής. ....	21
1.5 Συνοπτική παρουσίαση. ....	21
2. ΒΑΣΙΚΕΣ ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ-ΘΕΩΡΗΤΙΚΗ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ .....	24
2.1 Διαφορικές εξισώσεις που διέπουν την ροή σε αγωγό με ελεύθερη επιφάνεια και πορώδες υπόστρωμα. ....	24
2.1.1 Μακροσκοπική θεώρηση. ....	24
2.1.2 Μικροσκοπική θεώρηση. ....	25
2.2 Οι εξισώσεις Navier-Stokes για ασυμπίεστα ρευστά. ....	26
2.3 Εξισώσεις RANS. ....	30
3 Η ΜΕΘΟΔΟΣ SPH .....	32
3.1 Εισαγωγή στη μέθοδο Smooth Particle Hydrodynamics (SPH) .....	32
3.1.1 Ιστορική αναφορά. ....	32
3.1.2 Ορισμός της μεθόδου. ....	32
3.1.3 Η μέθοδος SPH για την μελέτη ρευστών. ....	34
3.2 Θεμελιώδεις αρχές και παραδοχές της μεθόδου. ....	34
3.3 Μαθηματική περιγραφή της μεθόδου. ....	35
3.3.1 Ολοκληρωματική διατύπωση .....	35
3.3.2 Ολοκληρωματική διατύπωση της πρώτης παραγώγου μίας συνάρτησης. ....	37
3.3.3 Σωματιδιακή προσέγγιση. ....	38
3.3.4 Συνάρτηση εξομάλυνσης $W(\text{kernel})$ . ....	40
3.4 Εξισώσεις Navier-Stokes για τη προσέγγιση των SPH. ....	43
3.4.1 Διακριτοποιημένες εξισώσεις Navier-Stokes κατά Lagrange. ....	43
3.4.2 Διακριτοποιημένες εξισώσεις Navier-Stokes κατά SPH. ....	44

3.5	Οριακές συνθήκες. ....	46
3.6	Αλγόριθμοι και βήμα επίλυσης στο χρόνο.....	48
4	Ο ΚΩΔΙΚΑΣ LAMMPS ΓΙΑ ΤΗΝ ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ SPH.....	50
4.1	Βασικές αρχές και παραδείγματα εφαρμογής. ....	50
4.1.1	Ιστορική αναφορά. ....	50
4.1.2	Περιγραφή του Κώδικα. ....	50
4.1.3	Ενσωμάτωση του SPH στο LAMMPS. ....	51
4.1.4	Παράδειγμα «Poiseuille flow» with SI & LJ units. ....	53
4.2	Το πρόβλημα της Ροής σε κλειστό αγωγό με μεταβολή της διατομής . ....	62
4.2.1	Απότομη αύξηση διατομής. ....	62
4.2.2	Απότομη μείωση διατομής. ....	70
5	ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΚΑΙ ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΕΛΕΥΘΕΡΗΣ ΕΠΙΦΑΝΕΙΑΣ. ....	78
5.1	Προσομοίωση ροής με ελεύθερη επιφάνεια και αδιαπέρατο πυθμένα. ....	78
5.2	Προσομοίωση ροής με ελεύθερη επιφάνεια και πορώδες υπόστρωμα. ....	85
6	ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ.....	94
7	ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ ΓΙΑ ΠΕΡΕΤΑΙΡΟ ΕΡΕΥΝΑ. ....	96
	Βιβλιογραφία. ....	98
	Παράρτημα.....	100

## ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ ΕΙΚΟΝΩΝ

Εικόνα 1, Τυρβώδης ροή σε ανοιχτό αγωγό με πορώδες υπόστρωμα (Michalolias et al., 2018) .....	19
Εικόνα 2, Αποτύπωση του πειράματος ροής σε ανοιχτό αγωγό με πορώδη πυθμένα (Keramaris, 2001) .....	25
Εικόνα 3, Μικροσκοπική ανάλυση μέσω κυλινδρικών ράβδων κάθετους στην διεύθυνση της ροής (Keramaris, 2001).....	26
Εικόνα 4, Σωματιδιακή προσέγγιση μέσω του αθροίσματος των σωματιδίων που βρίσκονται στην περιοχή επίδρασης του πυρήνα. Η περιοχή επίδρασης είναι σφαιρική με ακτίνα $kh$ (Papadopoulos, 2009) .....	38
Εικόνα 5, Σχηματική αναπαράσταση των προσεγγίσεων πυρήνα εξομάλυνσης για σωματίδια σε επαφή με το στερεό όριο (αριστερά), καθώς και της αποκοπής του πεδίου υποστήριξης σε πρόβλημα 2 διαστάσεων (δεξιά), (Makris, 2014).....	46
Εικόνα 6, Σωματίδια τοιχώματος που ασκούν αποστικές δυνάμεις.....	47
Εικόνα 7, Ghost particles (Papadopoulos, 2009).....	47
Εικόνα 8, Εικονικά σωματίδια με καθορισμένη θέση (frictitious particles) (Papadopoulos, 2009).....	48
Εικόνα 9, Παράδειγμα κώδικα σε περιβάλλον Lammpr. ....	51
Εικόνα 10, Παράδειγμα αναπαράστασης παραγόμενου αρχείου από το Lammpr σε περιβάλλον Onito.....	51
Εικόνα 11, Ανάπτυξη προφίλ ταχύτητας σε ροή εντός σωλήνα. Το πρώτο προφίλ στα αριστερά αντιστοιχεί στα αρχικά στάδια ανάπτυξης της ροής. Η διατμητική τάση στα τοιχώματα είναι υψηλή και ένα μεγάλο μέρος της ροής εξακολουθεί να έχει ομοιόμορφη ταχύτητα. Καθώς το υγρό κινείται, η επίδραση της διατμητικής τάσης του τοιχώματος απλώνεται προς την κεντρική γραμμή του σωλήνα και τελικά η ροή φτάνει σε ένα ομαλό, αμετάβλητο προφίλ που είναι παραβολικό για Νευτώνεια ρευστά (Microfluidics: Modelling, Mechanics and Mathematics, 2017).....	55
Εικόνα 12, Ροή Poiseuille με δυνάμεις $I_j$ .....	55
Εικόνα 13, Στιγμιότυπα ροής Poiseuille (1 cm * 1cm ) για διαφορετικές χρονικές στιγμές.....	59
Εικόνα 14, Χρωματισμός της ροής ανάλογα με την οριζόντια ταχύτητα των σωματιδίων. ....	59
Εικόνα 15, Στιγμιότυπα Ροής Poiseuille για διάταξη 1.5mm * 1mm.....	61
Εικόνα 16, Στιγμιότυπα ροής για απότομη αύξηση της διατομής .....	66
Εικόνα 17, Στιγμιότυπα της ροής σε κλειστό αγωγό με απότομη αύξηση της διατομής και λόγο εμβαδών 0.2 .....	68
Εικόνα 18, Στιγμιότυπα της ροής μέσα από απότομη μείωση της διατομής.....	72
Εικόνα 19, Στιγμιότυπο κοντά στο σημείο της στένωσης για περίπτωση μείωσης της διατομής κατά 25%.....	72
Εικόνα 20, Στιγμιότυπα της ροής σε κλειστό αγωγό με απότομη μείωση της διατομής στο 50% της αρχικής.....	75
Εικόνα 21, Ζώνες ανακυκλοφορίας και vena contracta σε περίπτωση ροής με απότομη μείωση της διατομής στο 50%.....	75

Εικόνα 22, Trajectory Lines για την περίπτωση μείωσης της διατομής με λόγο εμβαδών 0.84 (1η περίπτωση) .....	77
Εικόνα 23, Διάταξη προβλήματος ροής σε ανοιχτό αγωγό με αδιαπέρατο πυθμένα. .	78
Εικόνα 24, Στιγμιότυπα της ροής σε ανοιχτό αγωγό με αδιαπέρατο πυθμένα. ....	79
Εικόνα 25 , Ομοιόμορφη ροή ανοιχτού αγωγού(Morishita, 2008).....	80
Εικόνα 26, Στιγμιότυπα τυρβώδους ροής σε ανοιχτό αγωγό.....	84
Εικόνα 27, Γεωμετρία για το πορώδες υπόστρωμα μέσω γεωμετρίας που χρησιμοποιήθηκε για την επιρροή της τραχύτητας (Yuan et al., 2018) .....	86
Εικόνα 28,Οι βασικές στρεπτικές δομές σε διάφορες περιοχές μιας φυτικής ζώνης σε ένα ευρύ κανάλι με την βλάστηση να είναι πλήρως βυθισμένη (Wang et al., 2019)..	86
Εικόνα 29, Διάταξη προβλήματος ροής σε ανοιχτό αγωγό με πορώδες υπόστρωμα..	87
Εικόνα 30, Στιγμιότυπα της ροής σε κανάλι με πορώδη υπόστρωμα. ....	88
Εικόνα 31, Στιγμιότυπο αποκόλλησης ροής εξαιτίας της ύπαρξης του πορώδους πυθμένα. ....	88
Εικόνα 32, Στιγμιότυπα τυρβώδους ροής σε ανοιχτό αγωγό με πορώδες υπόστρωμα. ....	93

## ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ ΠΙΝΑΚΩΝ

Πίνακας 1, Χαρακτηρισμός της ροής (Flow Classification) με βάση τον αριθμό Re.	17
Πίνακας 2, Τροποποιήσεις μεγεθών για την περιγραφή ρευστού με την χρήση του νόμου ελαστικότητας. ....	29
Πίνακας 3, Διάταξη μοντέλου ροής Poiseuille σε μονάδες lj.....	56
Πίνακας 4, Χαρακτηριστικά κώδικα για ροή Poiseuille με διάταξη 1cm*1cm. ....	58
Πίνακας 5, Χαρακτηριστικά κώδικα για ροή Poiseuille σε διάταξη 1.5mm*1mm...	60
Πίνακας 6, Διάταξη προβλήματος απότομης αύξησης διατομής. ....	63
Πίνακας 7, Διάταξη προβλήματος απότομης στένωσης διατομής. ....	70
Πίνακας 8, Διάταξη προβλήματος προσομοίωσης ροής με ελεύθερη επιφάνεια και αδιαπέρατο πυθμένα. ....	78
Πίνακας 9, Περίληψη πειραματικών δεδομένων από μετρήσεις στον ποταμό Milwaukee (Jin & Liao, 2019).....	82
Πίνακας 10, Διάταξη προβλήματος ροής σε κανάλι με πορώδες υπόστρωμα. ....	87
Πίνακας 11, Αποτελέσματα μέσης ταχύτητας για διαφορετικά βάθη και παροχές από πειραματική ανάλυση ροής σε ανοιχτό αγωγό με πορώδη πυθμένα (Keramarie et al., 2016) .....	91

## ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ ΣΧΗΜΑΤΩΝ

Σχήμα 1, Ανάλυση των όρων Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH).....	33
Σχήμα 2, Καμπανοειδής συνάρτηση πυρήνα εξομάλυνσης (Fihlo, 2017) .....	40
Σχήμα 3, Μορφή και γραφική αναπαράσταση της συνάρτησης Gauss (Papadopoulos, 2009) .....	41

Σχήμα 4, Μορφή κυβικής Spline συνάρτησης (Papadopoulos 2009). ....	42
Σχήμα 5, Όπου (a) η καμπανοειδής αναπαράσταση του Lucy και (b) η κυβική spline προσέγγιση.....	42
Σχήμα 6, Μορφή της συνάρτησης spline τέταρτης τάξης (Papadopoulos, 2009). ....	43
Σχήμα 7, Μορφή spline 5ης τάξης, (Papadopoulos, 2009).....	43
Σχήμα 8, Τιμές του συντελεστή τοπικών απωλειών K συναρτήσει του λόγου των εμβαδών σε περίπτωση αύξησης της διατομής του αγωγού (Eclass.upatras.gr, 2017). ....	64
Σχήμα 9, Συντελεστής τοπικών απωλειών K συναρτήσει του λόγου των εμβαδών των δύο διατομών στην περίπτωση της απότομης μείωσης της διατομής.....	71
Σχήμα 10 , Προφίλ ταχύτητας για ροή σε ανοιχτό αγωγό με πορώδες υπόστρωμα (Padhi et al., 2018).....	91

## ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΩΝ

Διάγραμμα 4.1-1, Προφίλ ταχυτήτων για προσομοίωση ροής Poiseuille με δυνάμεις $I_j$ . ....	57
Διάγραμμα 4.1-2, Προφίλ ταχυτήτων για πλήρως αναπτυγμένη ροή Poiseuille.....	60
Διάγραμμα 4.1-3, Προφίλ ταχυτήτων για περίπτωση ροής Poiseuille με διάταξη 1.5*1mm. ....	62
Διάγραμμα 4.2-1, Προφίλ των ταχυτήτων για ροή με απότομη αύξηση της διατομής. ....	67
Διάγραμμα 4.2-2, Τιμές ταχύτητας των σωματιδίων ανάλογα με την θέση της ροής κατά τον άξονα X.....	67
Διάγραμμα 4.2-3, Κατανομή των ταχυτήτων για ροή σε κλειστό αγωγό με απότομη αύξηση της διατομής και λόγου εμβαδών 0.2 ....	69
Διάγραμμα 4.2-4, Ταχύτητα σωματιδίων συναρτήσει της θέσης που καταλαμβάνουν στον άξονα της ροής. Περίπτωση ροής σε κλειστό αγωγό με απότομη αύξηση διατομής και λόγο εμβαδών 0.2.....	69
Διάγραμμα 4.2-5, Προφίλ ταχυτήτων σε ροή κλειστού αγωγού με απότομη μείωση της διατομής.....	73
Διάγραμμα 4.2-6, Ταχύτητα σωματιδίων συναρτήσει της θέσης στον οριζόντιο άξονα X. Ροή σε κλειστό αγωγό με απότομη μείωση της διατομής. ....	73
Διάγραμμα 4.2-7, Κατανομή των ταχυτήτων για ροή σε κλειστό αγωγό με απότομη μείωση της διατομής στο 50% ....	76
Διάγραμμα 5.1-1, Κατανομή των ταχυτήτων για την περίπτωση ομοιόμορφης ροής σε ανοιχτό αγωγό με αδιαπέρατο πυθμένα. ....	83
Διάγραμμα 5.1-2, Κατανομή των ταχυτήτων κάθε σωματιδίου συναρτήσει της θέσης του στον οριζόντιο άξονα. ....	84
Διάγραμμα 5.1-3, Κατανομή των ταχυτήτων για κάθε σωματίδιο στην περίπτωση της τυρβώδους ροής σε ανοιχτό αγωγό.....	85
Διάγραμμα 5.2-1, Κατανομή των ταχυτήτων σε ροή ανοιχτού αγωγού με πορώδη πυθμένα. ....	89

Διάγραμμα 5.2-2, Κατανομή των ταχυτήτων σε κανάλι με πορώδη πυθμένα (Michaloliias et al., 2018) .....89  
Διάγραμμα 5.2-3, Κατανομή των εκάστοτε ταχυτήτων κάθε σωματιδίου συναρτήσει της θέσης τους στην κατεύθυνση της ροής.....90  
Διάγραμμα 5.2-4, Κατανομή ταχυτήτων για ροή σε κανάλι με πορώδες υπόστρωμα.93

## ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ ΑΚΡΩΝΥΜΙΩΝ

---

SPH	<i>Smoothed Particle Hydrodynamics</i>
NS	Navier-Stokes
RANS	<i>Reynolds Averaged Navier-Stokes</i>
LAMMPS	Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator
Re	Reynolds
Fr	Froude
lj	Lennard-Jones
PDEs	<i>Partial Differential Equations</i>
PIV	Particle Image Velocimetry
CFX	Computational Field Exercise
$D_a$	Darcy
ΜΔΕ	Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις
ΣΔΕ	Συνήθεις Διαφορικές Εξισώσεις
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy
GRADA	Cooperative Research & Development Agreement
MD	Molecular Dynamics
GNU	General Public License
SI	Systeme Internationale

---

## 1.ΕΙΣΑΓΩΓΗ

### 1.1 Εισαγωγικές έννοιες για την ροή σε ανοιχτό αγωγό.

Η περιγραφή και τα υδραυλικά χαρακτηριστικά της ροής σε έναν ανοιχτό αγωγό είναι ένα ερώτημα του ταλάνισε την ανθρώπινη ύπαρξη από τα πρώιμα χρόνια της ιστορίας της. Χαρακτηριστικά παραδείγματα αυτού του προβληματισμού και κατ' επέκταση της ενασχόλησης του ανθρώπου γύρω από την μελέτη της ροής σε κλειστούς και ανοιχτούς αγωγούς αποτελούν τα Ρωμαϊκά υδραγωγεία καθώς και τα κανάλια που συναντήθηκαν σε Αίγυπτο, Ινδία και Ελλάδα (Πρίνος, 2009).

Η διαφοροποίηση ενός αγωγού σε κλειστό ή ανοιχτό έγκειται στον τρόπο με τον οποίο λαμβάνει χώρα η ροή. Κλειστός θεωρείται οι αγωγός στον οποίο το νερό αναπτύσσει και κινείται υπό πίεση. Αντίστοιχα ως ανοιχτός αγωγός ορίζεται οποιοσδήποτε αγωγός επιτρέπει στην ροή να αναπτύσσει ελεύθερη επιφάνεια. Ο εν λόγω αγωγός μπορεί να είναι είτε κλειστός, στον οποίο το νερό δεν ρέει υπό πίεση αλλά έχει μία επιφάνεια της οποίας η εξωτερική πίεση ισούται με την ατμοσφαιρική, είτε κάποιο κανάλι (ποτάμι ρυάκι κτλ.), που κατά το μήκος της ροής του ο παρατηρητής μπορεί να διακρίνει την ελεύθερη επιφάνεια. Τα βασικά χαρακτηριστικά ενός τέτοιου αγωγού επιγραμματικά είναι:

- Η διατομή του αγωγού,  $A$ .
- Η Υγρή διατομή του αγωγού.
- Βρεχόμενη περίμετρος,  $R_h$ .
- Υδραυλική ακτίνα, η οποία ορίζεται ως το πηλίκο του εμβαδού διατομής προς την βρεχόμενη περίμετρο.
- Βάθος ροής.
- Υδραυλικό ή μέσο βάθος.

Τα παραπάνω χαρακτηριστικά μεγέθη βρίσκουν εφαρμογή τόσο στην αναλυτική επίλυση του εκάστοτε προβλήματος ροής όσο και στην κατάταξη-χαρακτηρισμό της ροής, ένα εξαιρετικά σημαντικό βήμα προκειμένου ο χρήστης να μπορεί να κρίνει τα παραγόμενα αποτελέσματα ως προς την ορθότητα και την φυσική τους σημασία. Όσον αφορά την ροή σε ανοιχτούς αγωγούς ένας εξαιρετικά σημαντικός παράγοντας για την κατηγοριοποίησή της είναι ο αριθμός Reynolds. Βάση της τιμής του αριθμού  $Re$  (Reynolds) η ροή κατηγοριοποιείται ως στρωτή μεταβατική ή τυρβώδης.

Όπου  $Re = \frac{U L}{\nu}$ , με  $L$  να θεωρείται το χαρακτηριστικό μήκος και να υπολογίζεται ως το πηλίκο της επιφάνειας προς την βρεχόμενη περίμετρο, αποτελώντας όπως ορίστηκε παραπάνω την υδραυλική ακτίνα (hydraulic radius) της ροής. Στον Πίνακα 1 αποτυπώνεται η κατηγοριοποίηση βάση του αριθμού  $Re$ .



<b>Re &lt; 500</b>	Στρωτή Ροή (Laminar Flow)
<b>500 &lt; Re &lt; 12,500</b>	Μεταβατική Ροή (Transitional Flow)
<b>Re &gt; 12,500</b>	Τυρβώδης Ροή (Turbulent Flow)

Πίνακας 1, Χαρακτηρισμός της ροής (Flow Classification) με βάση τον αριθμό Re.

Ένας δεύτερος παράγοντας που καθορίζει το είδος της ροής (αφορά μόνο ανοιχτούς αγωγούς) είναι ο αριθμός Froude. Βάση της τιμής του η ροή χαρακτηρίζεται ως υποκρίσιμη (τιμές μικρότερες του 1), κρίσιμη ( $Fr=1$ ) και υπερκρίσιμη (τιμές μεγαλύτερες του 1). Ο τύπος υπολογισμού του Fr (Froude) είναι :

$$Fr = \frac{U}{\sqrt{g \cdot L}}$$

Στην παρούσα μελέτη το προς μελέτη υγρό θα είναι το νερό που είναι ένα Νευτώνειο μη συμπιεστό ρευστό. Δεδομένου αυτού η ταχύτητα και η πίεση περιγράφονται από τις εξισώσεις Navier-Stokes (NS), οι οποίες απορρέουν διαμέσων των εξισώσεων ορμής(εξ.1.1.2) και συνέχειας (εξ. 1.1.1) ενός καρτεσιανού συστήματος συντεταγμένων.

Όπου η εξίσωση συνέχειας:

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0$$

Εξίσωση 1.1.1, Εξίσωσης συνέχειας

Και η εξίσωση ορμής:

$$\rho \left( \frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i$$

Εξίσωση 1.1.2, Εξίσωση διατήρησης της ορμής

Όπου  $U_i$  είναι η στιγμιαία ταχύτητα και  $x_i$  η στιγμιαία θέση, πάντα με αναφορά στο καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων και  $g_i$  είναι το διάνυσμα την επιτάχυνσης της βαρύτητας το οποίο παίρνει την ανάλογη μορφή βάση επιλογής των αξόνων. Τέλος το  $\sigma_{ij}$  περιγράφει των τανυστή των τάσεων που σε περίπτωση ασυμπίεστου ρευστού παίρνει την μορφή που φαίνεται στην εξίσωση 1.1.3. Όπου P είναι η δυναμική πίεση  $\delta$  το δ-Kroneker,  $d_{ij}$  το διατμητικό τμήμα του τανυστή των τάσεων.

$$\delta(x - x') = \begin{cases} \delta = 0 & \text{για } x \neq x' \\ \delta = 1 & \text{για } x = x' \end{cases}$$

$$\sigma_{ij} = -P\delta_{ij} + d_{ij}$$

**Εξίσωση 1.1.3, Τανυστής των τάσεων για την περίπτωση ασυμπίεστου ρευστού.**

Βάση των παραπάνω εξισώσεων οι εξισώσεις ορμής παίρνουν την μορφή που φαίνεται στην εξίσωση 1.1.4.

$$\rho \left( \frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right) + \rho g_i$$

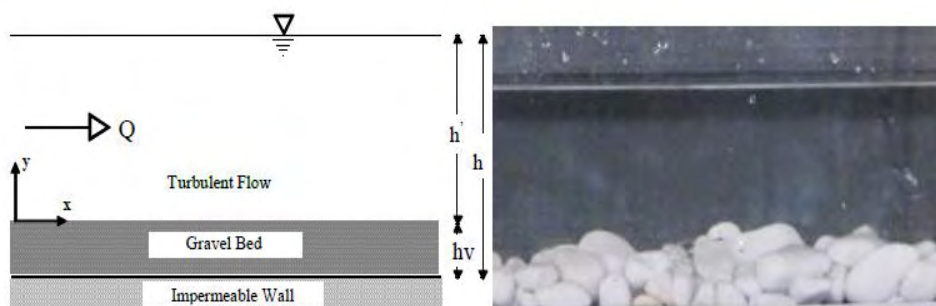
**Εξίσωση 1.1.4**

Επιπρόσθετα έναν νέο βαθμό δυσκολίας στην μελέτη μίας ροής σε έναν ανοιχτό αγωγό έρχεται να προσδώσει η έννοια του πορώδους πυθμένα. Ως πορώδες ορίζεται οποιοδήποτε σώμα δίνει την δυνατότητα στο ρευστό (νερό στην προς μελέτη περίπτωση) να περάσει μέσω των πόρων του στερεού στο εσωτερικό του. Η περιγραφή της ροής πάνω και μέσα από ένα πορώδες υπόστρωμα είναι ακόμα σε πρώιμο στάδιο με πολλούς ερευνητές να προσπαθούν να δημιουργήσουν μοντέλα για την μελέτη και τον ακριβή προσδιορισμό κάποιων εκ των βασικών χαρακτηριστικών της ροής όπως είναι η ταχύτητα και η κατανομή της πίεσης.

## **1.2 Περιγραφή του προβλήματος.**

Το πρόβλημα για το οποίο θα γίνει λόγος στην εν λόγω εργασία είναι η μελέτη της ροής σε έναν ανοιχτό αγωγό με πορώδες υπόστρωμα. Για την μελέτη του φαινομένου επιστρατεύεται η μέθοδος SPH η οποία αξιολογείται ως προς την ορθότητα των αποτελεσμάτων της μέσα από μία σειρά δοκιμών σε κλειστό και ανοιχτό αγωγό αντίστοιχα, με απώτερο στόχο την ποιοτική και ποσοτική ταύτιση του φαινομένου όπως αυτό συναντάται στη φύση και σε πειραματικά αποτελέσματα. Ανάλογα με την ευκολία που το ρευστό ρέει εντός του στερεού, το δεύτερο χαρακτηρίζεται με την ανάλογη τιμή. Χαμηλό πορώδες συνεπάγεται αργή ροή και αντίστοιχα στερεά που χαρακτηρίζονται από υψηλό πορώδες, επιτρέπουν ευκολότερα την διέλευση του ρευστού. Στην παρούσα εργασία γίνεται λόγος για την αλληλεπίδραση της ροής και την μεταφορά ορμής στην διεπιφάνεια που αποτελείται από ένα ομοιογενές ρευστό και ένα πορώδες υπόστρωμα (Εικόνα 1). Βάση του (Κεραμάρης, 2001) η υδροδυναμική συμπεριφορά αυτής της περιοχής επηρεάζει σημαντικά τα ποιοτικά χαρακτηριστικά της ροής.

Είναι σαφές ότι το πρόβλημα της ροής σε έναν ανοιχτό αγωγό του οποίου ο πυθμένας είναι πορώδης είναι πολύ σημαντικό. Αφενός διότι το είδος του πυθμένα επηρεάζει τα υδραυλικά χαρακτηριστικά της ροής και συνεπώς πρέπει να υπάρχουν διαφορετικές προσεγγίσεις ανάλογα με τον λόγο της μελέτης και την χρήση του καναλιού. Αφετέρου διότι σχεδόν όλοι οι ανοιχτοί αγωγοί που συναντώνται στη φύση έχουν ή αναπτύσσουν πορώδες υπόστρωμα είτε λόγω απόθεσης στερεών είτε λόγω της φυσικής τους θέσης.



Εικόνα 1, Τυρβώδης ροή σε ανοιχτό αγωγό με πορώδες υπόστρωμα (Michalolias et al., 2018)

Το είδος του πορώδους υποστρώματος επηρεάζει σημαντικά τα χαρακτηριστικά της τυρβώδους ροής στον ανοιχτό αγωγό. Ένα παράδειγμα είναι οι κατακόρυφη μεταφορά μάζας και ορμής (Liakopoulos et al., 2018). Αυτή η μεταφορά και η αλληλεπίδραση έχει επίπτωση και στην ταχύτητα του ρευστού ακριβώς στο σημείο της διεπιφάνειας. Η ταχύτητα αυτή που για πολλά προβλήματα λαμβάνεται μηδενική, έχει κάποια τιμή που εξαρτάται από το είδος του ρευστού, τα χαρακτηριστικά της ροής και φυσικά από το είδος του πορώδους πυθμένα. Σε μία άλλη έρευνα του (Keramaris, 2016) εισάγεται η έννοια της βλάστησης στο υπόστρωμα του αγωγού. Η βλάστηση λοιπόν είναι ένας από τους πιο σημαντικούς παράγοντες που μπορούν να επηρεάσουν την μορφή της ροής. Η ύπαρξη υδρόφιλων φυτών έχει ως αποτέλεσμα να αυξάνεται η αντίσταση στην ροή και κατά συνέπεια να μειώνεται η ταχύτητα συναρτήσει του βάθους, πάντα σε σύγκριση με ένα αγωγό του οποίου ο πυθμένας θεωρείται αδιαπέρατος. Για την εκπόνηση της μελέτης χρησιμοποιήθηκαν πειραματικά δεδομένα με χρήση 2D PIV καθώς και η δημιουργία ενός αριθμητικού μοντέλου CFX. Για την προσομοίωση του πορώδους στρώματος χρησιμοποιήθηκε βλάστηση χαμηλού ύψους μηδικού τύπου και έγινε μέτρηση ταχυτήτων για διάφορες παροχές και σε διαφορετικά βάθη ροής. Να σημειωθεί ότι μετρήσεις πάρθηκαν και στην διεπιφάνεια ροής και πορώδους υποστρώματος καθώς και αδιαπέρατου-διαπερατού στρώματος. Τελικά υπήρξε συμφωνία πειραματικών και αριθμητικών αποτελεσμάτων σε καλό ποσοστό (σφάλματα της τάξης 11.21 %).

Παρόμοιο πρόβλημα ταλάνισε και τους (Guo & Zhang , 2016) με την διαφοροποίηση ότι επιλέχθηκε βλάστηση υψηλότερου υψομέτρου, πράγμα που χρήζει την μελέτη της ροής ανάμεσα στην βλάστηση. Αρχικά έγινε επίλυση των Navier-Stokes-Forchleimer (NSF) για την περίπτωση ομαλής και τυρβώδους ροής. Μετρήθηκαν οι ταχύτητες για την περίπτωση της ομαλής ροής (laminar flow) και τα αποτελέσματα χρησιμοποιήθηκαν τροποποιημένα για την περίπτωση της τυρβώδους ροής. Αποδεικνύεται ότι για ροές μέσα από αναδύομενη καθώς και βυθισμένης βλάστησης η ομαλή κατανομή των ταχυτήτων εκφράζεται από την Ιακωμβιανή ελλειπτική συνάρτηση για την οποία ο παραβολικός νόμος ταυτίζεται με την περίπτωση της ροής σε κανάλι με μηδενική βλάστηση. Για την περίπτωση της ροής διαμέσου αναδύομενης βλάστησης και στην περίπτωση της ομαλής ροής (laminar flow) η κατανομή των ταχυτήτων παρουσιάζει μία τυπική boundary layer profile μορφή. Το

τυρβώδες μέρος παρουσιάζει ομοιομορφία. Για την δεύτερη περίπτωση της βυθισμένης βλάστησης και τα δύο είδη ροής (laminar and turbulent flow) είναι όμοια με αυτά της συνήθους ροής σε ανοιχτό αγωγό όπως αυτά θεωρούνται στην περίπτωση του μηχανικού (μακροσκοπική θεώρηση).

### 1.3 Βιβλιογραφική ανασκόπηση.

Το πρόβλημα της ροής σε έναν ανοιχτό αγωγό έχει μελετηθεί κατά κόρων από πολλούς ερευνητές. Αρκετές είναι και οι δημοσιεύσεις που έχουν γίνει σχετικά με την μελέτη της κίνησης πάνω και μέσα από πορώδες πυθμένα. Σε όλες τις μελέτες γίνεται εξαγωγή των συμπερασμάτων μετά από πειραματική προσέγγιση, αριθμητική λύση μέσω μοντέλων προσομοίωσης ή συνδυασμός των δύο παραπάνω μεθόδων. Αναλυτικότερα όσον αφορά την μελέτη του προβλήματος με την χρήση της μεθόδου SPH είναι περιορισμένη πράγμα που κυρίως οφείλεται στην δυσκολία που παρουσιάζει η προσομοίωση των ορίων και οι αλληλεπίδραση μεταξύ των σωματιδίων.

Η πρώτη και πληρέστερη μελέτη που έγινε γύρω από την τυρβώδη ροή και τα χαρακτηριστικά που την διέπουν έγινε το 1992 από τους Mendoza και Zhou. Μέσα από την έρευνά τους παρουσίασαν αναλυτικά αποτελέσματα περιγραφής της τυρβώδους ροής. Το στοιχείο που κάνει ιδιαίτερη την μελέτη τους είναι ότι έδειξαν ότι οι τυρβώδεις συνιστώσες δεν αποσβένονται έξω από τον πορώδη πυθμένα. Εν αντιθέσει η παρουσία του πορώδη πυθμένα λειτουργεί ως αίτιο παραγωγής τύρβης, πράγμα που εξαρτάται πάντα από την μεταβολή του αριθμού Re.

Ειδικότερα όσον αφορά το προφίλ των ταχυτήτων σε ροή καναλιού με πορώδες υπόστρωμα, η έρευνα των Zhou και Mendoza το 1993 έδειξε ότι η κατανομή των ταχυτήτων ελαττώνεται εκθετικά από την τιμή της ταχύτητας ολίσθησης στη διεπιφάνεια στην τιμή που έχει η ταχύτητα Darcy εντός του πορώδους πυθμένα.

Στην μελέτη των Prinios και Keramaris το 1998 έγινε μία ολοκληρωμένη πειραματική έρευνα περί της ροής πάνω από ένα πορώδες υπόστρωμα. Μελετήθηκε η ροή πάνω από 2 στρώματα με διαφορετικό πορώδες της τάξης πορώδους 0.71 και 0.90 αντίστοιχα και πάχους από 0.35 έως 0.65 αντίστοιχα. Για την πειραματική διάταξη όσον αφορά το πορώδη πυθμένα χρησιμοποιήθηκαν 2 διαφορετικοί τύποι, ένα στρώμα από μεμβράνες (φίλτρα) και ένα στρώμα που αποτελείται από διαφορετικές ράβδους. Προέκυψε ότι για τον πρώτο τύπο πορώδους στρώματος που, αύξηση του σχετικού πορώδους πάχους από 0.375 σε 0.5 οδήγησε σε αύξηση της αδιάστατης ταχύτητας  $U / U^*$  πάνω από τον πορώδη πυθμένα για αμφότερα τα πορώδη με υψηλές διαπερατότητες. Για ένα σχετικό πορώδες πάχους ίσο με 0.5 η κλίση της κατανομής ταχύτητας (σε συντεταγμένες τοιχώματος) είναι μεγαλύτερη και συνεπώς η σταθερά vonKarman είναι μικρότερη από 0.41. Με τη μείωση του σχετικού πορώδους πάχους η σταθερά προσεγγίζει την τιμή του 0.41 που παρατηρείται στις ροές πάνω από αδιαπέρατο στρώμα. Για τον δεύτερο τύπο πορώδους η οπισθέλκουσα δύναμη (drag force) που προσδίδεται στη ροή λόγω των ράβδων είχε ως αποτέλεσμα οι ταχύτητες πάνω από τις ράβδους να μειώνονται σημαντικά.

#### **1.4 Σκοπός της διπλωματικής.**

Σε αυτή την εργασία γίνεται αριθμητική ανάλυση ομαλής και τυρβώδους ροής σε ανοιχτό κανάλι με σκοπό την προσέγγιση της ταχύτητας στην διεπιφάνεια μεταξύ του πορώδους πυθμένα και της κύριας ροής ενός τυχαίου ανοιχτού αγωγού. Για την μελέτη του προβλήματος, επιστρατεύεται μία σχετικά πρόσφατη μέθοδος προσομοίωσης η μέθοδος Smooth Particle Hydrodynamic (SPH), που τεμαχίζει την ροή σε  $n$  σωματίδια νερού (particles) κάθε ένα εκ των οποίων έχει τα δικά του χαρακτηριστικά. Τα δεδομένα που προκύπτουν από την αριθμητική επίλυση συγκρίνονται με πειραματικά δεδομένα και αναλυτικές λύσεις με σκοπό την αξιολόγηση του μοντέλου, της μεθόδου SPH ως μέθοδο υπολογιστικής επίλυσης πολύπλοκων προβλημάτων ροής, καθώς και της προσέγγισης μίας εκτιμώμενης ταχύτητας που αναπτύσσεται στην βάση στο πυθμένα ενός ανοιχτού αγωγού, είτε με σκοπό την τέρψη επιστημονικού ενδιαφέροντος είτε προς πρακτική χρήση για οποιαδήποτε εργασία σχετίζεται με τον πυθμένα καναλιού και μπορεί να επηρεαστεί ακόμα και από μικρές τιμές ταχύτητας της ροής, για παράδειγμα κάποια καλλιέργεια που απαιτεί παρουσία νερού πάνω από την επιφάνεια του φυτού (ρύζι).

Επίσης κρίνεται σκόπιμη η αξιολόγηση της μεθόδου SPH καθώς και πώς ο κώδικας συνεργάζεται με το LAMMPS για την περιγραφή και άλλων πολύπλοκων φαινομένων που συναντώνται στη φύση καθότι δίνει το μεγάλο πλεονέκτημα της οπτικής αποτύπωσης (visualization) του προβλήματος ακόμα και σε εξαιρετικά μικρή κλίμακα και ίσως μπορεί να λύσει προβλήματα που δεν δύναται να μελετηθούν πειραματικά.

#### **1.5 Συνοπτική παρουσίαση.**

Αρχικά έγινε βιβλιογραφική έρευνα που αφορά τα υδραυλικά χαρακτηριστικά και τα μεγέθη που περιγράφουν την ροή σε οποιονδήποτε ανοιχτό αγωγό. Μεγάλη έμφαση δίνεται στον τρόπο που προσεγγίζεται η επίλυση του εκάστοτε προβλήματος με πειραματικά αποτελέσματα και αναλυτικά ή αριθμητικά μοντέλα επίλυσης.

Για την μελέτη του προβλήματος επιστρατεύθηκε η ως μέθοδος προσομοίωσης η λεγόμενη προσομοίωση ρεόντων σωματιδίων (SPH), που αποτυπώνει το οποιοδήποτε μέσω ως ένα «πακέτο» σωματιδίων με τις ανάλογες ιδιότητες. Με γνώση των θεωρητικών εξισώσεων που περιγράφουν την ροή καθώς και τον εξισώσεων που αποτελούν τον προγραμματιστικό κώδικα SPH έγινε η κατάστρωση του μοντέλου σε περιβάλλοντα κώδικα LAMMPS. Τα αποτελέσματα που προκύπτουν από τον κώδικα μπορούν να μελετηθούν είτε με την χρήση προγραμμάτων οπτικοποίησης της ροής, είτε μέσω παραγόμενων αρχείων που συνεργάζονται με υπολογιστικά προγράμματα όπως το Excel και το MatLab.

Για την αξιολόγηση της μεθόδου μελετήθηκαν προβλήματα ροής Poiseuille και για περίπτωση ροής στο εσωτερικό παράλληλων πλακών αλλά και για περιπτώσεις ροής σε κλειστό αγωγό με απότομη αύξηση και στένωση της διατομής. Λόγω μεγάλου υπολογιστικού φόρτου οι διαστάσεις των μοντέλων επιλέγονται σε μικρή κλίμακα παρόλα αυτά δείχνουν να περιγράφουν ικανοποιητικά το πρόβλημα καθώς

συγκρίνονται μέσω κριτηρίων ομοιότητας και ανάγονται σε μεγαλύτερη θεωρητικά κλίμακα. Όλα τα παραδείγματα γίνονται σε μικρή κλίμακα (τάξης χιλιοστών και εκατοστών) καθότι απαιτείται υπερβολικά μεγάλος υπολογιστικός φόρτος προκειμένου να παραχθούν μοντέλα που να προσεγγίζουν σε ένα βαθμό το φυσικό πρόβλημα. Αυτό είναι και ένα από τα μειονεκτήματα της μεθόδου καθώς η προσπάθεια για αύξηση των διαστάσεων μέσα σε περιβάλλον Lammps δημιουργεί μία σειρά προβλημάτων τα οποία οφείλονται είτε στην πολυπλοκότητα των μαθηματικών σχέσεων προκειμένου να επιλεγθούν οι βέλτιστες τιμές για κάθε εντολή, είτε εξαιτίας της φύσης της μεθόδου που αποτελείται από έναν πεπερασμένο αριθμό σωματιδίων ο οποίος πρέπει να είναι βέλτιστος διότι προβλήματα με λιγότερα ή και περισσότερα σωματίδια δεν δίνουν ικανοποιητικά αποτελέσματα.



## 2. ΒΑΣΙΚΕΣ ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ-ΘΕΩΡΗΤΙΚΗ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ

Η θεωρητική προσέγγιση και η αναλυτική επίλυση της ροής σε έναν ανοιχτό αγωγό προϋποθέτει την περιγραφή και κατανόηση των βασικών εξισώσεων που διέπουν το πεδίο ροής. Όπως αναφέρθηκε στην εισαγωγή, αυτό επιτυγχάνεται με την βοήθεια των εξισώσεων διατήρησης μάζας (εξίσωση συνέχειας) και ορμής. Για την περίπτωση ομαλών ροών τα πράγματα είναι απλούστερα, όμως όταν πρόκειται για τυρβώδεις ροές, που είναι και το είδος που χαρακτηρίζει την πλειονότητα των ροών στη φύση τα πράγματα είναι πιο πολύπλοκα και σε συνδυασμό με την περιγραφή ροής πάνω από ένα πορώδες υπόστρωμα, κρίνεται ορθό να γίνει μία μακροσκοπική και μία μικροσκοπική θεώρηση για την καλύτερη περιγραφή και κατανόηση του προβλήματος. Αυτό που αλλάζει στον τρόπο που γίνονται οι διαφορετικές προσεγγίσεις (μακροσκοπικά ή μικροσκοπικά) είναι οι εξισώσεις που περιγράφουν την ροή μέσα και πάνω από το πορώδες.

### 2.1 Διαφορικές εξισώσεις που διέπουν την ροή σε αγωγό με ελεύθερη επιφάνεια και πορώδες υπόστρωμα.

#### 2.1.1 Μακροσκοπική θεώρηση.

Η εξίσωση της ροής στην περίπτωση της μακροσκοπικής θεώρησης γίνεται μέσω των εξισώσεων Navier-Stokes, ενώ για την περίπτωση του πορώδους υποστρώματος χρησιμοποιείται η επεκταμένη εξίσωση Darcy-Brinkman-Forchheimer (εξίσωση 2.1.1.). (Keramaris, 2001).

$$U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} - \varepsilon \frac{\nu}{K} U_i - \varepsilon^2 \frac{c_f}{K^{1/2}} [(U_j U_j)^{\frac{1}{2}} U_i + \frac{U_j}{(U_j U_j)^{\frac{1}{2}}} u_i u_j] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ J_v \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - u_i u_j \right]$$

Εξίσωση 2.1.1, Εξίσωση Darcy-Brinkman-Forchheimer για την περιγραφή της ροής στην περιοχή του πορώδους (Κεραμάρης, 2001)

Όπου  $U_i$  η μέση ταχύτητα,  $P$ = ενεργός πίεση,  $u_i u_j$  οι τάσεις του Reynolds,  $\rho$  η πυκνότητα του ρευστού,  $\nu$  το κινηματικό ιξώδες,  $K$  η διαπερατότητα του πυθμένα,  $c_f$  ο συντελεστής αδράνειας κατά Forchheimer,  $J$  η αναλογία ενεργού και κινηματικού ιξώδους η οποία βάση των (Gilver and Altobelli, 1994) μπορεί να ληφθεί ίση με την μονάδα για πορώδες στρώματα με υψηλό  $\varepsilon$ .

Οι τάσεις Reynolds που εμφανίζονται στην εξίσωση 2.1.1 πρέπει να υπολογιστούν με μοντέλα τυρβωδών ροών k- $\varepsilon$  (Keramaris, 2001).

Οι Poulykakos and Kazmierczak, 1987 χρησιμοποίησαν τις παραπάνω εξισώσεις λαμβάνοντας τιμή 0 για τους τυρβώδεις όρους (κάνοντας ουσιαστικά την ροή στρωτή), βρήκαν αναλυτικές περιγραφές για την κατανομή της ταχύτητας και για την περιοχή του ρευστού αλλά και για την περιοχή του πορώδους (εξισώσεις 2.1.2,3)



Για την περιοχή του ρευστού ( $0 < y < s$ ) :

$$u = \frac{1}{2}(y^2 - s^2) - Da^{1/2} s \tanh \left[ (1 - s) Da^{-\frac{1}{2}} \right] + Da \left[ \frac{1}{\cosh \left[ (1 - s) Da^{-\frac{1}{2}} \right]} \right]$$

Εξίσωση 2.1.2, Κατανομή των ταχυτήτων για την περιοχή του ρευστού

Αντίστοιχα για το πορώδες στρώμα  $s < y < 1$  :

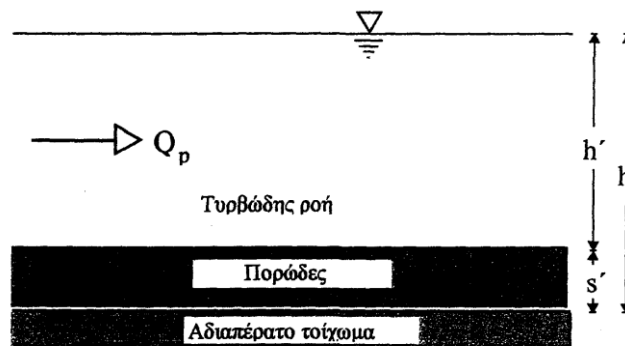
$$u = \frac{Da \cosh \left[ (s - y) Da^{-\frac{1}{2}} \right] - Da^{1/2} s \sinh \left[ (1 - y) Da^{-\frac{1}{2}} \right]}{\cosh \left[ (1 - s) Da^{-\frac{1}{2}} \right]} - Da$$

Εξίσωση 2.1.3, Κατανομή ταχυτήτων για την περιοχή του πορώδους

Όπου  $u$  η αδιάστατη ταχύτητα,  $y$  η αδιάστατη απόσταση από το κέντρο του καναλιού,  $H$  το μισό ύψος του καναλιού,  $s$  αδιάστατο πάχος πορώδους και  $Da$  αριθμός Darcy που δίνεται από την εξίσωση 2.1.4. Τα παραπάνω χαρακτηριστικά μεγέθη φαίνονται με ακρίβεια στην Εικόνα 2.

$$Da = \frac{K}{H^2}$$

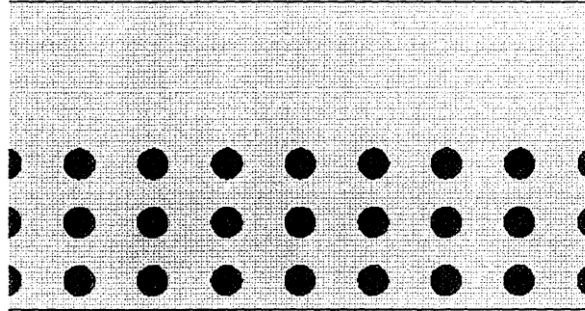
Εξίσωση 2.1.4, Τύπος Darcy



Εικόνα 2, Αποτύπωση του πειράματος ροής σε ανοιχτό αγωγό με πορώδη πυθμένα (Keramaris, 2001)

### 2.1.2 Μικροσκοπική θεώρηση.

Η μικροσκοπική ανάλυση είναι αυτή που ταιριάζει καλύτερα στη μέθοδο που εφαρμόζεται στην παρούσα εργασία. Σε προηγούμενες μελέτες επιτυγχάνονταν μέσω της προσομοίωσης του πορώδους στρώματος με ράβδους (Εικόνα 3) και την μελέτη της ροής να επιτυγχάνεται με την βοήθεια του μοντέλου  $k-\epsilon$  για χαμηλούς αριθμούς Reynolds.



Εικόνα 3, Μικροσκοπική ανάλυση μέσω κυλινδρικών ράβδων κάθετους στην διεύθυνση της ροής (Keramaris, 2001)

Στη συγκεκριμένη μελέτη το πορώδες θα αποτελείται από μία ομάδα σωματιδίων κατανομημένα στο χώρο έτσι ώστε να επιτρέπουν την διέλευση σωματιδίων που θα αποτελούν το σώμα του ρευστού, επιτυγχάνοντας έτσι την μελέτη της ροής και των χαρακτηριστικών της πάνω από το πορώδες στρώμα. Αναλυτική μαθηματική περιγραφή της μεθόδου θα γίνει στην ενότητα 3 όπου και αναλύεται η μέθοδος μοντελοποίησης SPH με μαθηματικές εξισώσεις.

## 2.2 Οι εξισώσεις Navier-Stokes για ασυμπίεστα ρευστά.

Το νερό είναι ένα ρευστό που ακολουθεί τους νόμους του Νεύτωνα. Οι εξισώσεις που περιγράφουν την κίνηση ενός νευτώνειου ρευστού είναι οι εξισώσεις Navier-Stokes. Η επίλυση των παραπάνω εξισώσεων είναι εξαιρετικά δύσκολη ειδικά όταν πρόκειται για την μελέτη οριακών συνθηκών, είτε αυτά αποτελούν στερεά τοιχώματα, είτε αποτελούν την προσομοίωση της ελεύθερης επιφάνειας (Harlow&Welch, 1965). Αρχικά εκφράζεται η εξίσωση διατήρησης της μάζας σε ένα τρισδιάστατο πρόβλημα ροής.

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0$$

Εξίσωση 2.2.1, Εξίσωση συνέχειας ασυμπίεστου ρευστού.

Εν συνεχεία εκφράζεται η διαφορική μορφή των εξισώσεων διατήρησης της ορμής για πρόβλημα 3 διαστάσεων.

$$\rho g_x + \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} = \rho \left( \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right)$$

**Εξίσωση 2.2.2**

$$\rho g_y + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} = \rho \left( \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right)$$

**Εξίσωση 2.2.3**

$$\rho g_z + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} = \rho \left( \frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right)$$

**Εξίσωση 2.2.4**

Δεδομένου ότι στις τρεις παραπάνω εξισώσεις άγνωστοι είναι η πυκνότητα, οι τρεις συνιστώσες της ταχύτητας και οι εννέα τάσεις για κάθε χρονική και χωρική στιγμή, είναι επιθυμητό να εισαχθούν επιπλέον εξισώσεις για τον προσδιορισμό των τάσεων. Από την έρευνα της Tzedaki A. (2015) προκύπτει ότι οι ζητούμενες εξισώσεις προτάθηκαν από τον Stokes μέσω της επέκτασης της θεωρίας ελαστικότητας που ισχύει για στερεά για την εφαρμογή της σε ρευστά. Η θεώρηση που πρότείνει βασίζεται στο γεγονός ότι ένα στοιχείο ρευστού που βρίσκεται σε κίνηση διέπεται από σχέσεις τάσεων-ρυθμού παραμορφώσεων ταυτόσημες με αυτές των τάσεων-παραμορφώσεων ενός ισότροπου ελαστικού στερεού. Προκειμένου να εισαχθεί και να γίνει ο παραπάνω συσχετισμός θεωρείτε ισότροπο ελαστικό μέσο με μέτρο ελαστικότητας  $E$ , λόγο Poisson  $1/m$  και μέτρο διάτμησης  $G$  (Tzedaki A., 2015). Από την θεωρία ελαστικότητας προκύπτει η εξίσωση 2.2.5.

$$G = \frac{m}{2(m+1)} E$$

**Εξίσωση 2.2.5**

Οι σχέσεις που συνδέουν ορθές τάσεις και παραμορφώσεις ανάλογα με την διεύθυνση για την περίπτωση ενός συστήματος τριών διαστάσεων λαμβάνουν τις σχέσεις 2.2.6, 2.2.7 και 2.2.8 αντίστοιχα.

$$E \cdot \varepsilon_x = \sigma_{xx} - \frac{1}{m}(\sigma_{yy} + \sigma_{zz})$$

**Εξίσωση 2.2.6**

$$E \cdot \varepsilon_y = \sigma_{yy} - \frac{1}{m}(\sigma_{zz} + \sigma_{xx})$$

**Εξίσωση 2.2.7**

$$E \cdot \varepsilon_z = \sigma_{zz} - \frac{1}{m}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})$$

**Εξίσωση 2.2.8**

Μετά από πρόσθεση κατά μέλη των παραπάνω εξισώσεων προκύπτει η κατά όγκο παραμόρφωση του στερεού (εξ. 2.2.9)

$$E \cdot \varepsilon = \frac{m-2}{m}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})$$

**Εξίσωση 2.2.9**

Η μέση ορθή τάση στο στοιχείο του ρευστού ορίζεται ο μέσος όρος των ορθών τάσεων για τις τρεις κατευθύνσεις του προβλήματος (εξίσωση 2.2.10). Μέσω των παραπάνω σχέσεων λοιπόν απορρέουν η σχέσεις που συνδέουν τις ορθές τάσεις και τις παραμορφώσεις (εξ. 2.2.11-2.2.13)

$$\sigma = \frac{1}{3}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})$$

**Εξίσωση 2.2.10**

$$\sigma_{xx} = \sigma + 2G\varepsilon_x - \frac{2}{3}G\varepsilon$$

**Εξίσωση 2.2.11**

$$\sigma_{yy} = \sigma + 2G\varepsilon_y - \frac{2}{3}G\varepsilon$$

**Εξίσωση 2.2.12**

$$\sigma_{zz} = \sigma + 2G\varepsilon_z - \frac{2}{3}G\varepsilon$$

**Εξίσωση 2.2.13.**

Εν συνεχεία γίνεται αντικατάσταση της κατ' όγκο παραμόρφωσης με τον ρυθμό διόγκωσης, το μέτρο διάτμησης με την δυναμική συνεκτικότητα και οι γραμμικές παραμορφώσεις με τον ρυθμό γραμμικών παραμορφώσεων (Πίνακας 2).

Μεγέθη που αφορούν στερεά	Μεγέθη που αφορούν ρευστά
E	divc
G	μ
ε <sub>x</sub>	$\frac{\partial u}{\partial x}$
ε <sub>y</sub>	$\frac{\partial v}{\partial y}$
ε <sub>z</sub>	$\frac{\partial w}{\partial z}$

Πίνακας 2, Τροποποιήσεις μεγεθών για την περιγραφή ρευστού με την χρήση του νόμου ελαστικότητας.

Μέσω των παραπάνω τροποποιήσεων οι εξισώσεις που αφορούν τον υπολογισμό των τάσεων για την περίπτωση του ρευστού παίρνουν την παρακάτω μορφή για οποιαδήποτε από τις τρεις κατευθύνσεις.

$$\sigma_{xx} = \sigma + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu \nabla c$$

Εξίσωση 2.2.14

$$\sigma_{yy} = \sigma + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3}\mu \nabla c$$

Εξίσωση 2.2.15

$$\sigma_{zz} = \sigma + 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{2}{3}\mu \nabla c$$

Εξίσωση 2.2.16

Επιπρόσθετα άξιο σχολιασμού είναι ότι η μέση ορθή τάση προέρχεται από την κλίση της πίεσης (-P) η οποία είναι και η κινητήριος δύναμη της ροής όταν δεν υπάρχει η επίδραση της βαρύτητας (ελεύθερη επιφάνεια παράλληλη με τον σχεδόν μηδενικής κλίσης πυθμένα). Η δε σύνδεση των διατμητικών τάσεων με τις αντίστοιχες διατμητικές παραμορφώσεις γίνονται υπό την ακολουθία του νόμου Νεύτωνα περί συνεκτικότητας.

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)$$

Εξίσωση 2.2.17.

$$\tau_{yz} = \tau_{zy} = \mu \left( \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)$$

Εξίσωση 2.2.18.

$$\tau_{zx} = \tau_{xz} = \mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)$$

**Εξίσωση 2.2.19.**

Εν συνεχεία γίνεται αντικατάσταση των σχέσεων που περιγράφουν τις ορθές και διατμητικές τάσεις αντίστοιχα, στις εξισώσεις που περιγράφουν το ρευστό, παράγοντας έτσι τις εξισώσεις Navier-Stokes που φαίνονται στις εξισώσεις (2.2.20-22).

$$\rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \Delta u + \frac{\mu}{3} \frac{\partial \nabla c}{\partial x} = \rho \left( \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right)$$

**Εξίσωση 2.2.20.**

$$\rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \Delta v + \frac{\mu}{3} \frac{\partial \nabla c}{\partial y} = \rho \left( \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right)$$

**Εξίσωση 2.2.21.**

$$\rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \Delta w + \frac{\mu}{3} \frac{\partial \nabla c}{\partial z} = \rho \left( \frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right)$$

**Εξίσωση 2.2.22.**

Όπου ο όρος  $\Delta$  εκφράζει την αντίστοιχη Laplace (άθροισμα των δεύτερων παραγώγων για κάθε κατεύθυνση). Στην περίπτωση τώρα που το προς μελέτη ρευστό είναι ασυμπιεστό, ο τρίτος όρος στο πρώτο μέρος των εξισώσεων 2.2.20-22 ισούται με το μηδέν και οι εξισώσεις N-S παίρνουν την παρακάτω μορφή.

$$\rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \Delta u = \rho \left( \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right)$$

**Εξίσωση 2.2.23.**

$$\rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \Delta v = \rho \left( \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right)$$

**Εξίσωση 2.2.24.**

$$\rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \Delta w = \rho \left( \frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right)$$

**Εξίσωση 2.2.25.**

### 2.3 Εξισώσεις RANS

Όπως είναι γνωστό η αναλυτική επίλυση των εξισώσεων Navier-Stokes για περιπτώσεις μελέτης τυρβωδών ροών παρουσιάζει εξαιρετική δυσκολία. Αυτό κάνει επιτακτική την ανάγκη για την χρήση εξισώσεων που περιγράφουν τις μέσες τιμές των ποσοτήτων που μελετούνται. Μέσω των εξισώσεων (2.2.6) , (2.2.7) και μέσω απλοποιητικών παραδοχών όπως η παράλειψη του όρου των δυνάμεων πεδίου ( $\rho g_i$ ),

δεδομένου ότι δεν επηρεάζεται από την διαδικασία του μέσου όρου, η εξίσωση που περιγράφει την ορμή παίρνει την ακόλουθη έκφραση (εξ. 2.3.2).

$$\frac{\partial \mathbf{U}_i}{\partial x_i} = 0$$

Εξίσωση 2.3.1., Νέα μορφή της εξισώσεως συνέχειας.

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{U}_i}{\partial t} + \mathbf{U}_j \frac{\partial \mathbf{U}_i}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ij} - \rho \mathbf{u}_i \mathbf{u}_j)$$

Εξίσωση 2.3.2, Μορφή εξισώσεως ορμής κατόπιν απλοποίησης.

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{U}_i}{\partial t} + \mathbf{U}_j \frac{\partial \mathbf{U}_i}{\partial x_j} \right) = -\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu \frac{\partial \mathbf{U}_i}{\partial x_j} - \rho \mathbf{u}_i \mathbf{u}_j \right)$$

Εξίσωση 2.3.3, Μορφή που περιγράφει την εξίσωση Ορμής.

Οι εξισώσεις (2.3.1) και (2.3.3) αποτελούν τις Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) εξισώσεις. Ο όρος  $\rho \mathbf{u}_i \mathbf{u}_j$  συμπεριφέρεται στην εξίσωση της ορμής ως μία επιπλέον τάση που δρα στο πεδίο ροής εκτός της μέσης τάσης  $\sigma_{ij}$ . Ονομάζεται τανυστής των τάσεων Reynolds. Σε αντίθεση με τις Navier-Stokes οι RANS δεν αποτελούν κλειστό σύστημα εξισώσεων δεδομένου ότι δεν υπάρχει ευθεία σχέση που να συνδέει τον τανυστή τάσεων Reynolds με τις συνιστώσες της ταχύτητας και πίεσης. Μέσω της απλούστερης μορφής των βασικών εξισώσεων που περιγράφουν τα φαινόμενα της ρευστομηχανικής που θα μελετηθούν, γίνεται η προσπάθεια εισαγωγή και αποκωδικοποίησής τους στον κώδικα SPH προκειμένου να επιτευχθεί μία όσον το δυνατόν πιο ρεαλιστική ποιοτικά και ποσοτικά ανάλυση.

## 3 Η ΜΕΘΟΔΟΣ SPH

### 3.1 Εισαγωγή στη μέθοδο Smooth Particle Hydrodynamics (SPH)

#### 3.1.1 Ιστορική αναφορά.

Πολλά προβλήματα στη φύση μπορούν να περιγραφούν μέσω αλγεβρικών διαφορικών ή ολοκληρωματικών εξισώσεων. Σε ιδανικές συνθήκες θα μπορούσαν να περιγραφούν μέσω αναλυτικών λύσεων πράγμα που πρακτικά είναι αδύνατο για πραγματικά προβλήματα. Αναλυτικές λύσεις θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν σε ελάχιστες περιπτώσεις και αυτό λόγω της πολυπλοκότητας των φυσικών φαινομένων. Έτσι στις περισσότερες των περιπτώσεων οι ερευνητές επιδιώκουν όσο των δυνατό ακριβέστερες προσεγγίσεις μέσω αριθμητικών μοντέλων.

Η κύρια ιδέα της προσομοίωσης είναι η μετατροπή ενός πολύπλοκου προβλήματος σε απλή διακριτή μορφή μέσω της μαθηματικής περιγραφής του. Για να επιτευχθεί η επίλυση γίνεται διακριτοποίηση του χώρου στον οποίο λαμβάνει χώρα το προς μελέτη φαινόμενο. Δύο είναι τα είδη αυτής της διακριτοποίησης που διαφέρουν στον τρόπο με τον οποίο προσεγγίζουν το πρόβλημα. Αρχικά βάση του Παπαδόπουλου (2009) υπάρχουν μέθοδοι που κάνουν χρήση ενός υπολογιστικού πλέγματος και ονομάζονται Πλεγματικές μέθοδοι, καθώς και οι δεύτερες που κάνουν χρήση αντιπροσωπευτικών σημείων του μέσου, οι μη Πλεγματικές μέθοδοι.

Μία μέθοδος μη πλεγματικής διακριτοποίησης είναι και η μέθοδος SPH, με την ιδέα της να συλλαμβάνεται από τον Monaghan (1997) και να χρησιμοποιείται για προβλήματα αστροφυσικής. Τα τελευταία βέβαια χρόνια η μέθοδος χρησιμοποιείται κατά κόρων και σε προβλήματα ρευστομηχανικής και υδροδυναμικής. Κατά τους Zhang et al., (2018) η μέθοδος SPH είναι μία Lagrangian (Λανγκρατζιανή) μη πλεγματική μέθοδος. Σε μία προσομοίωση SPH τα σωματίδια του μέσου διακριτοποιούνται μέσω κινούμενων σημείων στα οποία έχουν εισαχθεί ιδιότητες του πεδίου ροής όπως η πυκνότητα η πίεση και η ταχύτητα. Ο Morris (2015) αναφέρει ότι ένα μεγάλο πλεονέκτημα της μεθόδου είναι η σχετική ευκολία με την οποία νέες μέθοδοι και σχέσεις μπορούν να εισαχθούν στην διαμόρφωση του μοντέλου. Δίνει έτσι την δυνατότητα στον χρήστη αφενός να δίνει διαφορετικές συνθήκες σε οποιαδήποτε υποομάδα του προς μελέτη μέσου, δεδομένου ότι κάθε σωματίδιο έχει τα δικά του στοιχεία, και αφετέρου να μπορεί να επέμβει εκ νέου στο μοντέλο για να το βελτιώνει.

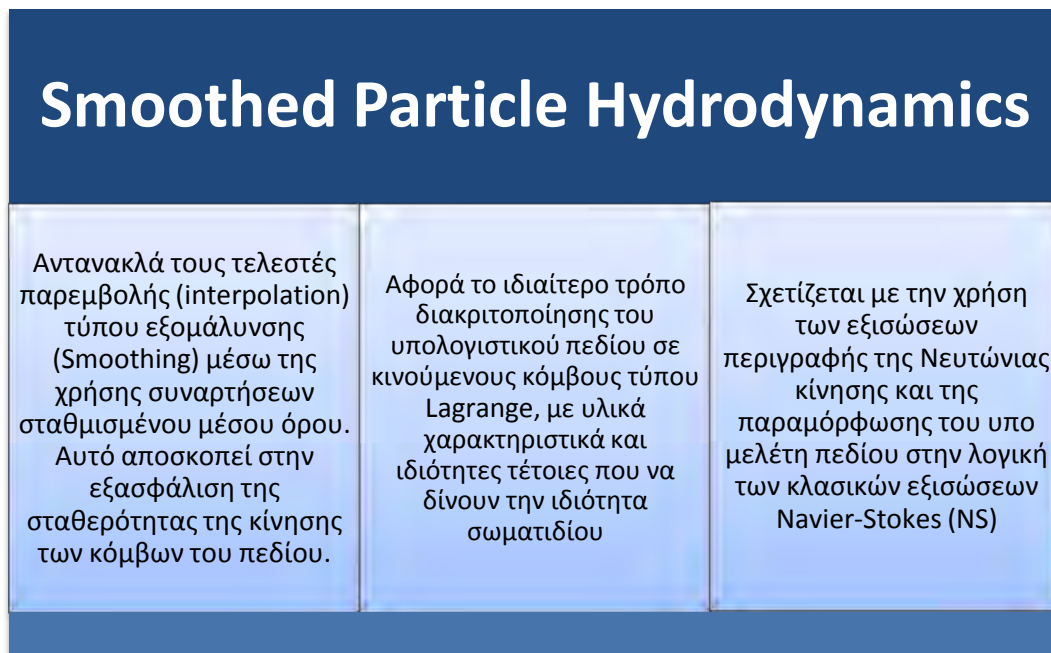
#### 3.1.2 Ορισμός της μεθόδου.

Η μέθοδος Υδροδυναμικής Ρεόντων Σωματιδίων (Smoothed Particle Hydrodynamics – SPH) είναι μια μη-πλεγματική Λανγκρατζιανή (Lagrangian) μέθοδος στην οποία το εξεταζόμενο μέσο διακριτοποιείται από ένα πεπερασμένο αριθμό σωματιδίων. Αυτά τα σωματίδια αλληλεπιδρούν μεταξύ τους, κινούνται σύμφωνα με την κίνηση του μέσου και μεταφέρουν μαζί τους όλες τις φυσικές πληροφορίες-ιδιότητες που περιγράφουν το μέσο. Η τεχνική είναι σχετικά καινούρια αφού παρουσιάστηκε πρώτη φορά από τους Monaghan και Gingold (1977) και Lucy (1977) για μοντελοποίηση



αστροφυσικών προβλημάτων. Σύντομα όμως έγινε αντιληπτό ότι η μέθοδος αυτή μπορεί να εφαρμοστεί και στα υδροδυναμικά φαινόμενα όπου το ρευστό μπορεί να αντιμετωπιστεί ως ένας πεπερασμένος αριθμός σωματιδίων. Τα προβλήματα που αφορούν την υδροδυναμική περιγράφονται κυρίως από μερικές διαφορικές εξισώσεις (ΜΔΕ) μεταβλητών όπως πυκνότητα, ταχύτητα, ενέργεια, κτλ. Η αναλυτική λύση αυτών των εξισώσεων είναι εφικτή σε ελάχιστες απλές περιπτώσεις και με αρκετές παραδοχές, πράγμα που οδήγησε σε προσπάθειες που έχουν στραφεί προς την εύρεση των κατάλληλων μεθόδων για αριθμητική επίλυση των εξισώσεων. Για να επιλυθούν αριθμητικά τέτοιας μορφής προβλήματα πρέπει πρώτα να διαφοροποιηθεί η περιοχή του προβλήματος όπου ορίζονται οι ΜΔΕ. Κατόπιν πρέπει να εφαρμοστεί μια μέθοδος με την οποία θα είναι δυνατή η προσέγγιση των τιμών των μεταβλητών και των παραγών αυτών σε κάθε σημείο, δημιουργώντας μια προσεγγιστική συνάρτηση. Αυτή η συνάρτηση τότε εφαρμόζεται στις ΜΔΕ για να παράγει ένα σύστημα Συνήθων Διαφορικών Εξισώσεων (ΣΔΕ) σε διακριτοποιημένη μορφή στις οποίες οι μεταβλητές παραγωγίζονται μόνο ως προς τον χρόνο. Έτσι το σύστημα μπορεί να επιλυθεί χρησιμοποιώντας κάποιες από τις τυποποιημένες ρουτίνες αριθμητικής ολοκλήρωσης, δίνοντας αποτελέσματα αρκετά κοντά στο πραγματικό φαινόμενο.

Το όνομα της μεθόδου κατά τον Makris (2014) υποδηλώνει και τον τρόπο με τον οποίο η μέθοδος προσεγγίζει την προσομοίωση (Σχήμα 1). Οι τρεις βασικοί πυλώνες που αποτελούν και το ακρωνύμιο της μεθόδου είναι η διακριτοποίηση του προβλήματος σε έναν πεπερασμένο αριθμό σωματιδίων (Particles), τα οποία κινούνται και αλληλεπιδρούν σε έναν χώρο που ονομάζεται πυρήνας εξομάλυνσης (Smoothed) και περιγράφουν προβλήματα που σχετίζονται με τις εξισώσεις N-S.



Σχήμα 1, Ανάλυση των όρων Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH).

### 3.1.3 Η μέθοδος SPH για την μελέτη ρευστών.

Κατά των Monaghan (1992) υπάρχουν 2 τρόποι μέσω των οποίων η SPH μπορεί να επεκταθεί για την μελέτη ασυμπίεστων ή σχεδόν ασυμπίεστων ρευστών. Αρχικά μπορεί να γίνει απευθείας μελέτη με τον περιορισμό της πυκνότητας. Τέτοιου είδους περιορισμούς μπορεί κανείς να τους εφαρμόσει χρησιμοποιώντας την εξίσωση Gibbs-Appell, που είναι μια γενική μορφή της αρχής ελαχίστων περιορισμών του Gauss. Μια άλλη παρατήρηση αφορά πραγματικά ρευστά όπως και το νερό που είναι συμπίεστα. Σε αυτήν την περίπτωση γίνεται η παραδοχή της ταχύτητας του ήχου στο οποιοδήποτε ρευστό το οποίο στη πραγματικότητα χαρακτηρίζεται από πολύ μικρότερες τιμές ταχύτητας. Σήμερα η μέθοδος συναντά μεγάλη εφαρμογή σε προβλήματα ρευστομηχανικής που αφορούν κυματισμούς και υδροδυναμικά φαινόμενα (προβλήματα μεγάλης κλίμακας), προβλήματα αγωγών που χρήζουν λεπτομέρειας όσον αφορά τις οριακές συνθήκες και προβλήματα πολύ μικρής κλίμακας όπως ροή σε νανοσωλήνες που δεν γίνεται να μελετηθούν πειραματικά και άλλες αριθμητικές μέθοδοι υστερούν στον ακριβή προσδιορισμό και μελέτη φαινομένων που απαιτούν τόσο μικρή κλίμακα.

### 3.2 Θεμελιώδεις αρχές και παραδοχές της μεθόδου.

Η διατύπωση του SPH συχνά χωρίζεται σε 2 κύρια μέρη. Αρχικά γίνεται μία ολοκληρωματική διατύπωση των συναρτήσεων που περιγράφουν το πεδίο ροής και εν συνεχεία γίνεται η σωματιδιακή προσέγγιση αυτών των συναρτήσεων. Σε πρώτο μέρος γίνεται η προσέγγιση της συνάρτησης μέσω της ολοκλήρωσης του γινομένου μια τυχαίας συνάρτησης πολλαπλασιασμένης με μία συνάρτηση εξομάλυνσης πυρήνα (Παπαδόπουλος, 2009). Ως πυρήνας εξομάλυνσης ορίζεται μια συνάρτηση που συνηθέστερα προσεγγίζει την Gauss (Monaghan, 1992). Πληρέστερη αναφορά γίνεται στην παράγραφο 3.3.4. Έπειτα η παραγόμενη ολοκληρωματική διατύπωση προσεγγίζεται μέσω του αθροίσματος των τιμών των πλησιέστερων γειτονικών σωματιδίων δημιουργώντας την σωματιδιακή προσέγγιση της συνάρτησης σε ένα σωματίδιο ή διακριτό σημείο στο χώρο. Οι ΜΔΕ που αποτελούν το μαθηματικό υπόβαθρο της μεθόδου περιγράφουν την εξέλιξη της πυκνότητας  $\rho$  (density), των συντεταγμένων  $\mathbf{r}$  (coordinates), της ταχύτητας  $\mathbf{v}$  (velocity) και της ενέργειας ανά μονάδα μάζας  $e$  σε όρους ανάδελτα (gradients) της ταχύτητας, της τάσης πίεσης  $P$  και του διανύσματος της θερμικής αγωγιμότητας (heat-flux vector),  $Q = \kappa \nabla T$  όπου  $\kappa$  η θερμική αγωγιμότητα (thermal conductivity) και  $T$  η θερμοκρασία (Ganzemuller & Steinhauser, 2011).

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v}$$

Εξίσωση 3.2.1

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{P}$$

Εξίσωση 3.2.2

$$\frac{de}{dt} = -\frac{1}{\rho} \mathbf{P} : \nabla \mathbf{v} - \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{Q}$$

Εξίσωση 3.2.3

Η μέθοδος SPH παρεμβάλει (interpolates) το πεδίο των μεταβλητών  $\{\rho, v, e, P, Q\}$  μέσω ενός πυρήνα (kernel), ως μία οποιαδήποτε συνάρτηση  $f(\mathbf{r})$  βάση του τοπικού μέσου όρου και κάθε συντεταγμένη βάση της εξίσωσης 3.2.4

$$f(\mathbf{r}_i) = \sum_j m_j \frac{f_j}{\rho_j} W(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$$

Εξίσωση 3.2.4

Όπου  $m_j$  και  $f_j$  είναι η μάζα του σωματιδίου  $j$  και η τιμή του πεδίου  $f(\mathbf{r})$  στη θέση  $\mathbf{r}_j$ .

### 3.3 Μαθηματική περιγραφή της μεθόδου.

#### 3.3.1 Ολοκληρωματική διατύπωση

Αρχικό στάδιο στην μαθηματική περιγραφή της μεθόδου βάση των Liakopoulos et al., (2018) είναι η ολοκληρωματική διατύπωση της συνάρτησης  $f(x)$  όπως αυτή δίνεται από τον τύπο στην Εξίσωση 3.3.1.

$$f(x) = \int_{\Omega} f(x') \delta(x - x') dx'$$

Εξίσωση 3.3.1, Συνάρτηση ολοκληρωματικής προσέγγισης.

Όπου  $\delta(x-x')$  ορίζεται η συνάρτηση  $\delta$ -Dirac που δύνεται από την παρακάτω σχέση:

$$\delta(x - x') = \begin{cases} \delta = 0 & \text{για } x \neq x' \\ \delta = 1 & \text{για } x = x' \end{cases}$$

Εξίσωση 3.3.2, Ορισμός  $\delta$ -Dirac.

Όπου  $\Omega$  αντιπροσωπεύει τον όγκο στον οποίο γίνεται η ολοκληρωματική προσέγγιση. Προκειμένου να μπορεί να χρησιμοποιηθεί η ολοκληρωματική συνάρτηση που δίνεται από την σχέση 3.3.1, σε μία διακριτοποιημένη μορφή ορίζεται μία νέα συνάρτηση εξομάλυνσης ή πυρήνας εξομάλυνσης (Kernel Function) που αντικαθιστά το  $\delta$  του Dirac. Έτσι η νέα μορφή υπολογισμού φαίνεται στην εξίσωση 3.3.3. Όπου  $h$  αντιπροσωπεύει το μήκος εξομάλυνσης το οποίο ορίζει την περιοχή επιρροής της συνάρτησης εξομάλυνσης  $W$ .

$$f(x) = \int_{\Omega} f(x')W(x - x'; h) dx'$$

### Εξίσωση 3.3.3

Κατά Monaghan (1992) η συνάρτηση εξομάλυνσης πρέπει να υπακούει σε ορισμένους περιορισμούς. Επιπρόσθετα ο Papadopoulos (2009) υπογραμμίζει ότι συνήθως επιλέγεται άρτια συνάρτηση.

Αναλυτικότερα όσον αφορά τους περιορισμούς η πρώτη συνθήκη ονομάζεται μοναδιαία και δίνεται από την Εξίσωση 3.3.4.

$$\int_{\Omega} W(x - x', h) dx' = 1$$

### Εξίσωση 3.3.4, Μοναδιαία συνθήκη πυρήνα (Kernel) εξομάλυνσης

Η δεύτερη συνθήκη δίνει την δυνατότητα στην συνάρτηση  $W$  να μετατρέπεται σε συνάρτηση  $\delta$ -Dirac όταν το μήκος τείνει στο μηδέν.

$$\lim_{h \rightarrow 0} (W|x - x', h|) = \delta(x - x')$$

### Εξίσωση 3.3.5, Περιορισμός πυρήνα εξομάλυνσης για μήκος εξομάλυνσης $h$ τείνει στο μηδέν.

Τέλος ο πυρήνας  $W$  πρέπει να είναι συμπαγής μέσα στην ακτίνα επίδρασης και μηδενικός εκτός:

$W(x-x',h)=0$  για  $|x-x'| > \kappa \cdot h$ , όπου  $\kappa$  ορίζεται σταθερά που σχετίζεται με την συνάρτηση εξομάλυνσης και καθορίζει την περιοχή επίδρασης της (Papadopoulos, 2009).

Κατά Monaghan (1992) ο πυρήνας εξομάλυνσης έχει ακρίβεια 2<sup>ης</sup> τάξης ως προς το μήκος εξομάλυνσης πράγμα που προκύπτει αν γίνει επέκταση της συνάρτησης  $f(x')$  σε σειρά Taylor. Αναλυτικότερα:

$$f(x') = f(x) + f'(x)(x' - x) + r(x' - x)^2$$

Όπου  $r$  να είναι το υπόλοιπο του αναπτύγματος και αν αντικαταστήσουμε την παραπάνω σχέση στον τύπο 3 προκύπτει η εξίσωση 3.3.6:

$$\begin{aligned} f(x) &= \int_{\Omega} [f(x) + f'(x)(x' - x) + r(x' - x)^2] W(x - x', h) dx' \\ &= f(x) \int_{\Omega} w(x - x') dx' + f'(x) \int_{\Omega} (x' - x) W(x - x', h) dx' + r(h^2) \end{aligned}$$

### Εξίσωση 3.3.6

Όπως προαναφέρθηκε ο πυρήνας εξομάλυνσης είναι άρτια συνάρτηση του  $x$  πράγμα που σημαίνει ότι  $(x-x')W(x-x',h)$  είναι μία περιττή συνάρτηση και το ολοκλήρωμά της ισούται με το μηδέν. Έχοντας ως δεδομένο το παραπάνω και εκμεταλλευόμενοι τον τύπο 4 προκύπτει ότι η συνάρτηση  $f$  στην ολοκληρωματική της μορφή ισούται με  $f(x)+r(h^2)$ , πράγμα που αποδεικνύει ότι στην μέθοδο SPH η ολοκληρωματική αναπαράσταση ή ο προσεγγιστικός πυρήνας μιας οποιασδήποτε συνάρτησης έχει ακρίβεια δεύτερης τάξης.

### 3.3.2 Ολοκληρωματική διατύπωση της πρώτης παραγώγου μίας συνάρτησης.

Αν κανείς αντικαταστήσει την συνάρτηση στην εξίσωση 14 τον με το ανάδελτα  $\nabla f(x)$ , δίνει την προσέγγιση της πρώτης χωρικής παραγώγου (Papadopoulos, ). Έτσι εισάγεται η έννοια της πρώτης παραγώγου που φαίνεται στην εξίσωση 3.3.7.

$$\nabla f(x) = \int_{\Omega} [\nabla f(x')W(x-x',h)] dx'$$

Εξίσωση 3.3.7, Προσέγγιση της χωρικής παραγώγου συνάρτησης  $f(x)$

Και με εφαρμογή της κατά γινόμενο παραγώγισης προκύπτει η εξίσωση 3.3.8.

$$\nabla f(x) = \int_{\Omega} \nabla [f(x')W(x-x',h)] dx' - \int_{\Omega} f(x') * \nabla W(x-x',h) dx'$$

#### Εξίσωση 3.3.8

Ο πρώτος όρος στο δεύτερο μέρος της εξίσωσης 3.3.8 μπορεί να αντικατασταθεί μέσω του θεωρήματος απόκλισης σε επιφανειακό ολοκλήρωμα με  $S$  να αντιπροσωπεύει την επιφάνεια του περικλειόμενου χώρου  $\Omega$ . Δίνοντας έτσι την σχέση που φαίνεται στην εξίσωση 3.3.9.

$$\nabla f(x) = \int_S f(x')W(x-x',h) \cdot \vec{n} dS - \int_{\Omega} f(x') \cdot \nabla W(x-x',h) dx'$$

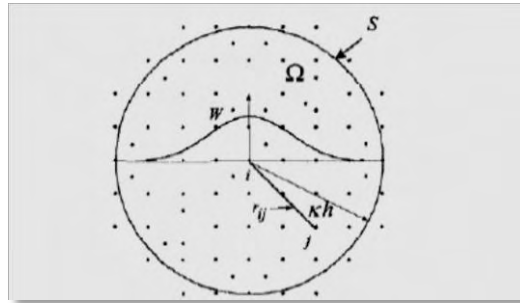
#### Εξίσωση 3.3.9

Όπου  $\vec{n}$  είναι το μοναδιαίο κάθετο στην επιφάνεια  $S$  διάνυσμα.

Δεδομένου ότι η συνάρτηση εξομάλυνσης (kernel)  $W$  ορίστηκε συμπαγής, όταν η περιοχή του πυρήνα ορίζεται μέσα στην ευρύτερη περιοχή του προβλήματος, το επιφανειακό ολοκλήρωμα που προκύπτει ισούται με το μηδέν. Αυτό απλοποιεί την σχέση 3.3.9 αφαιρώντας τον πρώτο όρο του δεύτερου μέρους. Η νέα απλοποιημένη μορφή που βρίσκεται μέσα στα όρια του προβλήματος δίνει την δυνατότητα αναπαράστασης της πρώτης παραγώγου μια συνάρτησης λαμβάνοντας το γινόμενο της συνάρτησης πολλαπλασιασμένο με την παράγωγο του πυρήνα εξομάλυνσης (Kernel)  $W$ .

### 3.3.3 Σωματιδιακή προσέγγιση.

Άλλη μια σημαντική ιδιότητα της μεθόδου SPH είναι αυτή της σωματιδιακής προσέγγισης. Συγκεκριμένα αυτό σημαίνει ότι όλο το σύστημα που περιγράφει το πρόβλημα απαρτίζεται από έναν αριθμό σωματιδίων, καθένα από τα οποία έχει την δική του μάζα, κατέχει την δική του θέση στον χώρο και έχει τις δικές του ιδιότητες. Σωματιδιακή προσέγγιση λοιπόν είναι η διαδικασία με την οποία διακριτοποιείται το ολοκλήρωμα που αναπαριστά την συνάρτηση και μετατρέπεται σε ένα άθροισμα σωματιδίων τα οποία βρίσκονται μέσα στην περιοχή επίδρασης του πυρήνα (Εικόνα 4).



Εικόνα 4, Σωματιδιακή προσέγγιση μέσω του αθροίσματος των σωματιδίων που βρίσκονται στην περιοχή επίδρασης του πυρήνα. Η περιοχή επίδρασης είναι σφαιρική με ακτίνα  $kh$  (Papadopoulos, 2009).

Παρακάτω περιγράφεται η διαδικασία της σωματιδιακής προσέγγισης μέσω μαθηματικών εξισώσεων.

Αρχικά ο στοιχειώδης όγκος  $d\mathbf{x}'$  που περιέχεται ως σταθερά ολοκλήρωσης στα αντίστοιχα ολοκληρώματα μπορεί να αντικατασταθεί με τον πεπερασμένο όγκο  $\Delta V_j$  του τυχαίου σωματιδίου  $j$ . Επιπρόσθετα από τον ορισμό της πυκνότητας απορρέει η εξίσωση 3.3.8.

$$m_j = \rho_j \cdot \Delta V_j$$

Εξίσωση 3.3.8, Ορισμός της μάζας ενός σωματιδίου  $j$  πυκνότητας  $\rho$ .

Έτσι η εξίσωση 3.3.8 μπορεί να πάρει την εξής μορφή:

$$f(x) \cong \sum_{j=1}^N f(x_j)W(x - x_j, h)\Delta V_j$$

Και πολλαπλασιάζοντας και διαιρώντας με την πυκνότητα, η εξίσωση παίρνει την μορφή που φαίνεται στην σχέση 3.3.9.

$$f(x) = \sum_{j=1}^N f(x_j)W(x - x_j, h)\frac{1}{\rho_j}m_j$$

ή

$$f(x) = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(x_j) W(x - x_j, h)$$

**Εξίσωση 3.3.9, Μορφή σωματιδιακής προσέγγισης για τον υπολογισμό της συνάρτησης  $f(x)$ .**

Η εξίσωση 3.3.9 δηλώνει ότι η τιμή μια συνάρτησης ενός σωματιδίου  $i$ , μπορεί να προσδιοριστεί με την χρήση του μέσου όρου των τιμών της συνάρτησης  $f(x)$  για όλα τα σωματίδια  $j$ , δεδομένου ότι βρίσκονται μέσα στην ακτίνα επιρροής του πυρήνα. Η βαρύτητα που έχει το κάθε σωματίδιο επηρεάζεται από την συνάρτηση ή πυρήνα εξομάλυνσης  $W$ . Η σωματιδιακή προσέγγιση λοιπόν μιας συνάρτησης για ένα σωματίδιο  $i$  παίρνει την εξής μορφή:

$$f(x) = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(x_j) W_{ij}$$

**Εξίσωση 3.3.10, Σωματιδιακή προσέγγιση συνάρτησης ενός σωματιδίου  $i$ .**

Όπου  $W_{ij} = W(x_i - x_j, h)$

**Εξίσωση 3.3.11**

Με όμοια συλλογιστική γίνεται και η σωματιδιακή προσέγγιση της πρώτης παραγώγου μια συνάρτησης όπως αυτή φαίνεται στην εξίσωση 3.3.12. Αν η κλίση ληφθεί ως προς το σωματίδιο  $i$  τότε το αρνητικό πρόσημο μπορεί να παραληφθεί.

$$\nabla f(x) = - \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(x_j) \cdot \nabla W_{ij}$$

**Εξίσωση 3.3.12, Σωματιδιακή προσέγγιση της πρώτης παραγώγου μίας συνάρτησης.**

Όπου  $W_{ij}$ :

$$\nabla W_{ij} = \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_j} = \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \frac{\partial r_{ij}}{\partial x_j} = - \frac{x_{ij}}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}}$$

**Εξίσωση 3.3.13**

Και  $r_{ij} = \sqrt{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2]}$  με  $x, y, z$  τις συντεταγμένες και  $r_{ij}$  την απόσταση μεταξύ των σωματιδίων  $i, j$ .

Αξίζει να σημειωθεί ότι αν ορίσουμε ως  $f(x)$  την συνάρτηση που περιγράφει την πυκνότητα στην εξίσωση 3.3.10 τότε δίνεται η κατά SPH προσέγγιση της πυκνότητας (εξίσωση 3.3.14). Άξιο επίσης σχολιασμού είναι ότι ο πυρήνας εξομάλυνσης έχει μονάδες αντίστροφου όγκου υποδηλώνοντας ότι η πυκνότητα ενός σωματιδίου μέσα στο υπολογιστικό πλαίσιο (ακτίνα επιρροής του πυρήνα), είναι ο σταθμισμένος μέσος όλων των σωματιδίων της περιοχής.

$$\rho_i = \sum_{j=1}^N m_j W_{ij}$$

Εξίσωση 3.3.14, Κατά SPH προσέγγιση της πυκνότητας ενός σωματιδίου  $i$  μέσα στην περιοχή επιρροής του πυρήνα εξομάλυνσης.

### 3.3.4 Συνάρτηση εξομάλυνσης $W(\text{kernel})$ .

Ο πυρήνας ή συνάρτηση εξομάλυνσης είναι η συνάρτηση που χρησιμοποιείται προκειμένου πολλαπλασιασμένη με την συνάρτηση  $f(x)$  να δώσει την απαιτούμενη προσέγγιση. Βάση του Papadopoulos (2009) η συνάρτηση εξομάλυνσης μπορεί να πάρει την μορφή που φαίνεται στη εξίσωση 3.3.15.

$$W_h(r_{ij}) = \frac{1}{h^d} f\left(\frac{r_{ij}}{h}\right)$$

Εξίσωση 3.3.15, Τυπική μορφή πυρήνα εξομάλυνσης

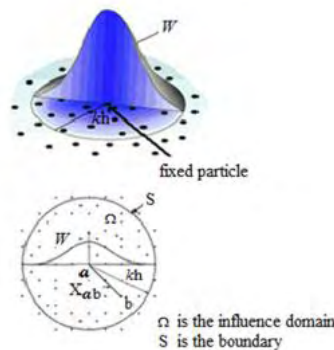
Με  $d$  να συμβολίζει τις διαστάσεις του προβλήματος. Κατά καιρούς έχουν προταθεί διάφορες μορφές της συνάρτησης, με τις επικρατέστερες που συναντώνται στην βιβλιογραφία και αφορούν την μέθοδο SPH να αναφέρονται παρακάτω.

Το 1997 από τον Lucy εισήχθη η καμπανοειδής συνάρτηση (Σχήμα 2) που ως μαθηματική έκφραση ορίζεται μέσω μιας διακλαδισμένης συνάρτησης (εξίσωση 3.3.16).

$$W_h(r_{ij}) = a_d \begin{cases} (1 + 3q)(1 - q)^3, & q \leq 1 \\ 0, & q \geq 1 \end{cases}$$

Εξίσωση 3.3.16, Καμπανοειδής συνάρτηση πυρήνα εξομάλυνσης κατά Lucy 1997

Όπου  $q = \frac{r_{ij}}{h}$  και  $a_d$  να ισούται με τους λόγους  $5/4h$ ,  $5/\pi h^2$  και  $105/\pi h^3$  αντίστοιχα για προβλήματα 1, 2 ή 3 διαστάσεων. Το παραπάνω συμβαίνει έτσι ώστε να ικανοποιείται η συνθήκη της μονάδας που αφορά την συνθήκες συμβιβαστού του πυρήνα για οποιαδήποτε από τις 3 διαστάσεις.



Σχήμα 2, Καμπανοειδής συνάρτηση πυρήνα εξομάλυνσης (Fihlo, 2017)

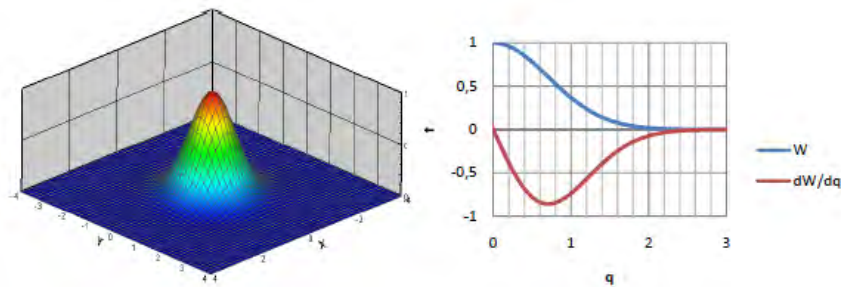


Εν συνεχεία η προσέγγιση κατά Monaghan (1992), υποστηρίζει ότι για να βρεθεί φυσική αναπαράσταση μίας SPH εξίσωσης, πρέπει ο πυρήνας εξομάλυνσης να πάρει την μορφή μίας συνάρτησης Gauss. Για λόγο αυτό και χρησιμοποιήθηκε η παρακάτω εξίσωση (3.3.17) προκειμένου μαζί με τον Gingold 1977, να προσομοιώσουν σφαιρικούς αστερισμούς (Σχήμα 3).

$$W_h(r_{ij}) = a_d e^{-q^2}$$

**Εξίσωση 3.3.17, Συνάρτηση Gauss για την προσέγγιση πυρήνα εξομάλυνσης.**

Όπου  $a_d$  ισούται με τον λόγο  $1/0,5\pi h$ ,  $1/\pi h^2$  και  $1/\pi 1.5h^3$  για χώρο 1,2 και 3 διαστάσεων αντίστοιχα. Αξίζει να σημειωθεί ότι η συνάρτηση είναι ικανοποιητικά λεία ακόμα και σε περιπτώσεις παραγώγων υψηλών τάξεων πράγμα που σε συνδυασμό με την σταθερότητα και ακρίβειά της ακόμα και για ανομοιογενή σωματίδια την καθιστά ως την καλύτερη προσέγγιση. Πρακτικά θεωρείται συμπαγής συνάρτηση ωστόσο αυτό είναι εξολοκλήρου ορθό μόνο για την περίπτωση που το  $q$  τείνει στο άπειρο.



**Σχήμα 3, Μορφή και γραφική αναπαράσταση της συνάρτησης Gauss (Papadopoulos, 2009)**

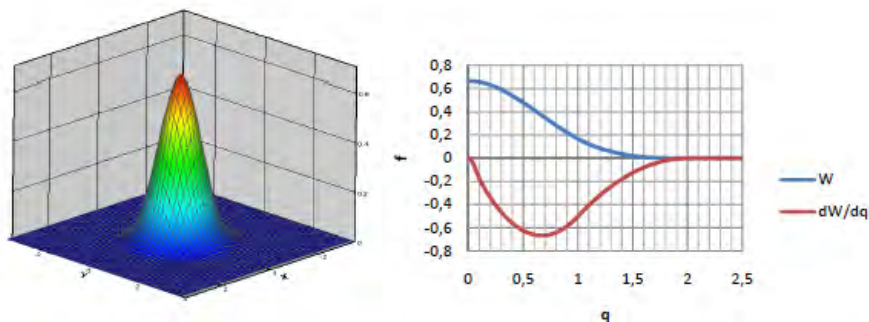
Στην παραπάνω προσέγγιση βέβαια πρέπει να σημειωθεί ότι για να μειωθεί το  $q$  πρέπει είτε να αυξηθεί κατά πολύ η περιοχή επίδρασης του πυρήνα είτε να αυξηθεί ο αριθμός των σωματιδίων. Και στις δύο περιπτώσεις απαιτείται μεγάλο υπολογιστικό κόστος με αποτέλεσμα να επηρεάζει τις διαστάσεις του προβλήματος που προσομοιώνεται.

Εκμεταλλευόμενοι τις συναρτήσεις των κυβικών Spline οι Monaghan και Lattanzio (1985) εισήγαγαν και μία νέα μορφή για την συνάρτηση, αυτή που φαίνεται στην εξίσωση 3.3.18. Το σημαντικό με αυτήν την μορφή είναι ότι ενώ προσομοιάζει την Gauss έχει μικρότερη περιοχή επίδρασης. Το αρνητικό στοιχείο βέβαια, έγκειται στην δεύτερη παράγωγο μια οποιαδήποτε κυβικής spline συνάρτησης που είναι γραμμική συνάρτηση πράγμα που λόγω των συνθηκών σταθερότητας την καθιστά κατώτερη από άλλους πιο ομαλούς πυρήνες. Στο Σχήμα 4 φαίνεται η μορφή της κυβικής spline προσέγγισης. Στο Σχήμα 5 γίνεται μία γραφική αναπαράσταση-σύγκριση μεταξύ της καμπανοειδούς μορφής και του κυβικού spline.

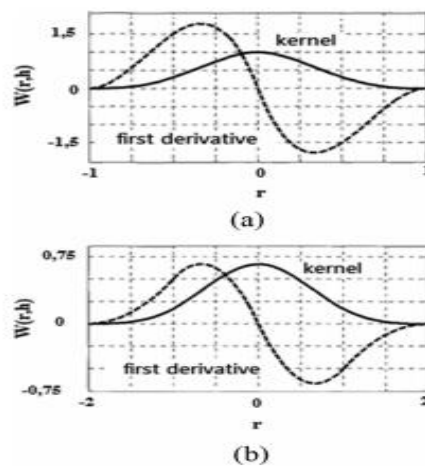
$$W_h r_{ij} = \alpha_d \begin{cases} \frac{2}{3} - q^3 + \frac{1}{2}q^3, & 0 \leq q < 1 \\ \frac{1}{6}(2 - q)^3, & 1 \leq q < 2 \\ 0, & q \geq 2 \end{cases}$$

Εξίσωση 3.3.18, Κυβική Spline συνάρτηση για τον πυρήνα εξομάλυνσης.

Όπου  $\alpha_d$  αντίστοιχα για κάθε πρόβλημα 1,2 ή 3 τάξης να ισούται με τον λόγο  $1/h$ ,  $15/7 h^2$  και  $3/2\pi h^3$ .



Σχήμα 4, Μορφή κυβικής Spline συνάρτησης (Papadopoulos 2009).



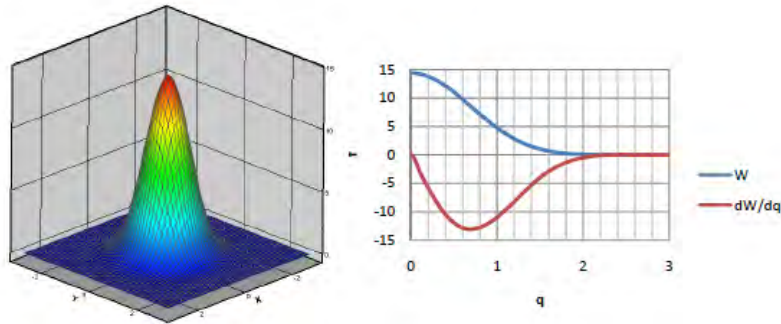
Σχήμα 5, Όπου (a) η καμπανοειδής αναπαράσταση του Lucy και (b) η κυβική spline προσέγγιση.

Τέλος από τον Morris (1996), προτάθηκαν splines υψηλότερης τάξης  $4^{η}$  και  $5^{η}$  (εξίσωση 3.3.19-3.3.20) τα οποία έχουν πάντα ως στόχο να προσεγγίσουν καλύτερα την συνάρτηση Gauss.

$$W_h r_{ij} = a_d \begin{cases} (2.5 - q)^4 - 5(1.5 - q)^4 + 10(0.5 - q)^4, & 0 \leq q < 0.5 \\ (2.5 - q)^4 - 5(1.5 - q)^4, & 0.5 \leq q < 1.5 \\ (2.5 - q)^4, & 1.5 \leq q < 2.5 \\ 0, & q \geq 2.5 \end{cases}$$

Εξίσωση 3.3.19, Spline 4ης Τάξης

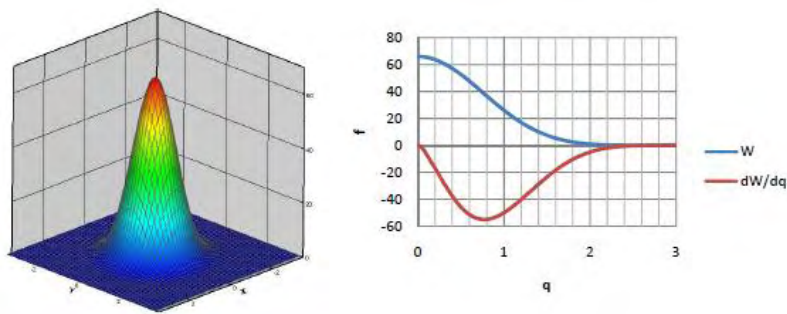
Όπου  $a_d$  να ισούται με  $1/24h$ ,  $96/1199\pi h^2$  και  $1/20\pi h^3$  για χώρο 1,2 και 3 διαστάσεων αντίστοιχα. Η μορφή της καθώς και μία γραφική αναπαράσταση φαίνεται στο Σχήμα 6.



Σχήμα 6, Μορφή της συνάρτησης spline τέταρτης τάξης (Papadopoulos, 2009).

$$W_h r_{ij} = a_d \begin{cases} (3 - q)^5 - 6(2 - q)^5 + 15(1 - q)^5, & 0 \leq q < 1 \\ (3 - q)^5 - 6(2 - q)^5, & 1 \leq q < 2 \\ (3 - q)^5, & 2 \leq q < 3 \\ 0, & q \geq 3 \end{cases}$$

Εξίσωση 3.3.20, Εξίσωση συνάρτησης spline 5ης τάξης.



Σχήμα 7, Μορφή spline 5ης τάξης, (Papadopoulos, 2009)

### 3.4 Εξισώσεις Navier-Stokes για τη προσέγγιση των SPH.

#### 3.4.1 Διακριτοποιημένες εξισώσεις Navier-Stokes κατά Lagrange.

Οι βασικές εξισώσεις που διέπουν οποιοδήποτε πρόβλημα ρευστομηχανικής είναι οι τρεις θεμελιώδεις νόμοι. Ο νόμος διατήρησης της μάζας (ή εξίσωση συνέχειας), ο νόμος διατήρησης της ορμής και ο νόμος διατήρησης της ενέργειας (Makris, 2014). Υπάρχουν δύο μορφές που μπορούν να πάρουν οι παραπάνω εξισώσεις προκειμένου να μελετηθούν και αυτές είναι είτε κατά Euler είτε κατά Lagrange. Η περιγραφή κατά

Euler θεωρείται μία περιγραφή χωρικού τύπου, δηλαδή εξετάζει την χρονική μεταβολή των ιδιοτήτων του ρευστού σε κάποιο συγκεκριμένο σταθερό σημείο στο χώρο. Η δεύτερη θεωρείται υλικού τύπου, δηλαδή ακολουθεί την κίνηση μέρους του ρευστού. Αναλυτικότερα για την κατά Lagrange προσέγγιση χρησιμοποιείται για την περιγραφή της δυναμικής των ρευστών η ολική χρονική παράγωγος  $Df/Dt$ , που αποτελεί συνδυασμό της τοπικής μερικής παραγώγου  $\frac{\partial f}{\partial t}$  με την παράγωγο συνάρτησης (convection derivative)  $\mathbf{u} \cdot \nabla f$ . Για ένα τυχαίο βαθμωτό μέγεθος  $f$  του πεδίου ροής λαμβάνει την εξής έκφραση (εξ.3.4.1).

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla f = \frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} + v \frac{\partial f}{\partial y} + w \frac{\partial f}{\partial z}$$

**Εξίσωση 3.4.1, Έκφραση ενός τυχαίο βαθμωτού μεγέθους  $f$  στο πεδίο ροής με κατά Lagrange προσέγγιση**

Θεωρείται ότι η μάζα του ρευστού παραμένει μέσα στον όγκο ελέγχου κατά μήκος όλης της κίνησής του. Αυτό πρακτικά σημαίνει ότι αν και η ροή του υγρού μπορεί να οδηγήσει σε διόγκωση συμπίεση ή οποιαδήποτε άλλη μορφή παραμόρφωσης του όγκου ελέγχου κατά Lagrange, η μάζα του ρευστού που περιέχεται μέσα σε αυτόν τον όγκο είναι αμετάβλητη. Η εφαρμογή των θεμελιωδών φυσικών νόμων που διέπουν την ροή εφαρμοσμένοι σε πεπερασμένους όγκους μπορούν να οδηγήσουν σε εξισώσεις με ολοκληρωματική μορφή. Οι εξισώσεις της δυναμικής των ρευστών (NS), μπορούν να γραφούν ως ένα σύνολο διαφορικών εξισώσεων με μερικές παραγώγους σε περιγραφή Lagrange.

### 3.4.2 Διακριτοποιημένες εξισώσεις Navier-Stokes κατά SPH.

Εξίσωση συνέχειας.

Ένα καθοριστικό μέγεθος στον υπολογισμό με τη μέθοδο SPH είναι η προσέγγιση και ο υπολογισμός της πυκνότητας. Η πυκνότητα είναι το μέγεθος που καθορίζει την κατανομή των σωματιδίων στον χώρο και κατ' επέκταση την εξέλιξη του μήκους εξομάλυνσης. Συνήθως προσεγγίζεται μέσω του αθροίσματος των διακριτών μαζών προς τον όγκο του πεδίου υποστήριξης (εξίσωση 3.4.2).

$$\rho_i = \sum_{j=1}^N m_j W_{ij}$$

**Εξίσωση 3.4.2, Συνηθέστερη προσέγγιση υπολογισμού της μάζας στη μέθοδο SPH.**

Προσθέτοντας ορισμένους μετασχηματισμούς και ακολουθώντας την λογική της εξίσωσης συνέχειας ο Monaghan (1994) κατέληξε στην εξίσωση διατήρησης της μάζας όπως αυτή αναπαρίσταται στην εξίσωση 3.4.3. Αυτή η προσέγγιση δίνει το πλεονέκτημα συσχέτισης σχετικών ταχυτήτων σωματιδιακών ζευγών, λόγο που την κάνει να καθίσταται προτιμητέα.

$$\frac{d\rho_i}{dt} = \sum_j m_j \mathbf{u}_{ij} \nabla_i W_{ij}$$

**Εξίσωση 3.4.3, Εξίσωση διατήρησης της μάζας Monaghan 1994.**

Όπου  $\mathbf{u}_i$  είναι το διάνυσμα της ταχύτητας του εκάστοτε σωματιδίου  $i$  και  $\mathbf{u}_{ij} = \mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j$ .

Εξίσωση διατήρησης της ορμής.

Σε ένα οποιοδήποτε συνεχές πεδίο η εξίσωση διατήρησης της ορμής δίνεται από την παρακάτω σχέση (εξ.3.4.4):

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla \mathbf{P} + \mathbf{g} + \boldsymbol{\theta}$$

**Εξίσωση 3.4.4, Εξίσωση διατήρησης ορμής σε συνεχές πεδίο.**

Όπου  $\boldsymbol{\theta}$  είναι ο τανυστής των όρων διάχυσης και απόσβεσης. Σε περίπτωση που το ρευστό θεωρηθεί ως μη συνεκτικό τότε για την διατήρηση της ορμής προκύπτει η εξίσωση Euler (Παπαδόπουλος, 2009).

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla \mathbf{P} + \mathbf{g}$$

**Εξίσωση 3.4.5, Εξίσωση Euler για μη συνεκτικό ρευστό.**

Μέσω της σωματιδιακής προσέγγισης για την κλίση της πίεσης στην εξίσωση 3.4.5, προκύπτει ο ρυθμός μεταβολής της ταχύτητας του σωματιδίου  $i$ .

$$\frac{D\mathbf{u}_i}{Dt} = -\sum_{j=1}^N m_j \left[ \frac{p_j}{\rho_j^2} + \frac{p_i}{\rho_i^2} \right] \cdot \nabla_i W_{ij} + \mathbf{g}$$

**Εξίσωση 3.4.6, Ρυθμός μεταβολής της ταχύτητας σωματίδιο  $i$ .**

Από την εξίσωση 3.4.6, γίνεται εμφανές ότι η επιτάχυνση ενός τυχαίου σωματιδίου εντός του όγκου υποστήριξης εξαρτάται από την πίεση και την πυκνότητα του τυχαίου σωματιδίου  $i$ , καθώς και από τις αντίστοιχες τιμές και σχετική θέση των γειτονικών του σωματιδίων  $j$ .

Εξίσωση διατήρησης (θερμικής) ενέργειας.

Ακολουθώντας την ίδια συλλογιστική που ακολουθήθηκε στις παραπάνω εξισώσεις η εξίσωση διατήρησης της ενέργειας μπορεί να πάρει την εξής μορφή (Monaghan, 1994).

$$\frac{de_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_j [m_j \left(\frac{P_i + P_j}{\rho_i \rho_j}\right) u_{ij} \cdot \nabla W_{ij}] + \frac{\mu_i}{2\rho_i} \varepsilon_i^{\alpha\beta} \varepsilon_i^{\alpha\beta}$$

Εξίσωση 3.4.7

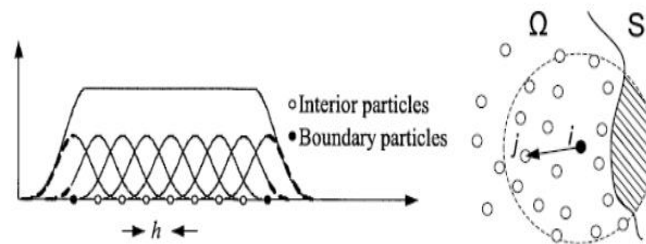
Όπου

$$\varepsilon_i^{\alpha\beta} = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} u_{ji}^{\alpha} \frac{\partial W_{ij}}{\partial x^{\beta}} + \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} u_{ji}^{\beta} \frac{\partial W_{ij}}{\partial x^{\alpha}} - \frac{2}{3} \left( \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} u_{ji} \nabla W_{ij} \right) \delta^{\alpha\beta}$$

Εξίσωση 3.4.8, Ρυθμός μεταβολής της τροπής σε τυποποίηση κατά Einstein.

### 3.5 Οριακές συνθήκες.

Ένα από τα πιο λεπτά σημεία στη μέθοδο ρέοντων σωματιδίων SPH είναι ο χειρισμός των ορίων. Λόγω της φύσης της μεθόδου η οριακή συνθήκη ελεύθερης επιφάνειας ή γενικά οποιοδήποτε ελεύθερο όριο δεν απαιτεί κάποια παραμετροποίηση καθώς τα σωματίδια κινούνται βάση των διαμορφωμένων κατά Lagrange εξισώσεων Navier-Stokes με προσέγγιση SPH. Ιδιαίτερα απαιτητικά είναι τα πράγματα στην περίπτωση που μελετώνται σωματίδια που βρίσκονται κοντά ή αποτελούν στερεά όρια. Το πρόβλημα βάση του (Makris, 2014), προκύπτει εξαιτίας της περικοπής της ολοκλήρωσης ακριβώς λόγω της ύπαρξης του ορίου (Εικόνα 5).



Εικόνα 5, Σχηματική αναπαράσταση των προσεγγίσεων πυρήνα εξομάλυνσης για σωματίδια σε επαφή με το στερεό όριο (αριστερά), καθώς και της αποκοπής του πεδίου υποστήριξης σε πρόβλημα 2 διαστάσεων (δεξιά), (Makris, 2014).

Αναλυτικότερα μόνο τα σωματίδια που βρίσκονται εντός του πεδίου υποστήριξης συμβάλλουν στο άθροισμα προσέγγισης κατά SPH. Επιπρόσθετα στο στερεό όριο ενώ η ταχύτητα θεωρείται μηδενική άλλες τιμές του πεδίου όπως η πυκνότητα δεν μειώνονται απαραίτητα πόσο μάλλον να πάρουν τιμές κοντά στο μηδέν. Παρά την ευρεία εφαρμογή που λαμβάνει η μέθοδος δεν έχει βρεθεί μέχρι πρότινος κάποια βέλτιστη λύση για τον χειρισμό των ορίων. Οι δύο κυρίαρχες μέθοδοι που προκύπτουν από την βιβλιογραφία προτείνουν είτε την άμεση ή έμμεση άσκηση δυνάμεων στο ρευστό που μοντελοποιούν την αλληλεπίδραση του ρευστού με το όριο βάση της γεωμετρίας του, είτε μέσω εικονικών γειτονικών σωματιδίων.

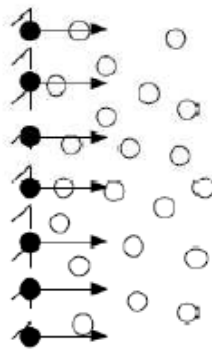
Για να αντιμετωπιστεί το παραπάνω πρόβλημα ο Monaghan (1994) έκανε χρήση μιας σειράς εικονικών (virtual) ψευδοσωματιδίων επί του στερεού ορίου τα οποία ασκούν έντονα αποστικές δυνάμεις στα σωματίδια που αντιστοιχούν σε ρευστό και βρίσκονται κοντά στο όριο(Εικόνα 6). Αυτό στοχεύει στην αποτροπή των σωματιδίων

του ρευστού να κινηθούν «αφύσικα» έξω από το υπολογιστικό πεδίο. Οι ασκούμενες δυνάμεις στα σωματίδια του ρευστού έχουν την λεγόμενη μορφή Lennard-Jones (LJ) και σχέση που φαίνεται στην εξίσωση (3.5.1).

$$F = D \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right] \frac{\mathbf{r}}{r^2}$$

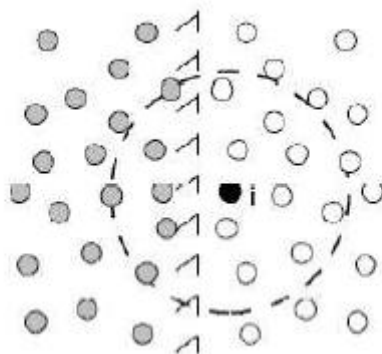
**Εξίσωση 3.5.1, Αποστικές δυνάμεις Lennard-Jones.**

Όπου  $r$  η κάθετη απόσταση του εκάστοτε σωματιδίου από το τοίχωμα,  $r_0$  το μήκος της περιοχής στο οποίο επιδρούν οι αποστικές δυνάμεις και  $D$  συντελεστής που επιλέγεται βάση των δεδομένων του προβλήματος και έχει μονάδες  $m^2/s^2$ . Η παραπάνω τεχνική παρόλο που μπορεί να δώσει λύσεις ακόμα και σε περιπτώσεις πολύπλοκης γεωμετρίας η απουσία συνεκτικών δυνάμεων στα σωματίδια που βρίσκονται κοντά στο τοίχωμα την κάνει να υστερεί σε ακρίβεια.



**Εικόνα 6, Σωματίδια τοιχώματος που ασκούν αποστικές δυνάμεις.**

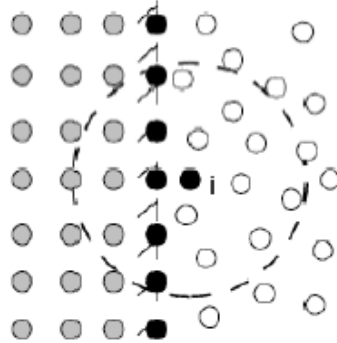
Μια άλλη πρόταση από τους Libersky et al., (1993), είναι η παραγωγή σωματιδίων τοιχώματος συμμετρικά προς τα σωματίδια του ρευστού, ghost particles. Αποτελούν δηλαδή συμμετρικά σωματίδια με γραμμή συμμετρίας το σταθερό όριο (Εικόνα 7).



**Εικόνα 7, Ghost particles (Papadopoulos, 2009)**

Επικουρικά στην προηγούμενη πρόταση προτάθηκε από τους (Issa, 2005), τα υποθετικά νοητά σωματίδια να μην είναι συμμετρικά προς αυτά του ρευστού αλλά να

έχουν μία καθορισμένη θέση και ονομάστηκαν εικονικά σωματίδια (fictitious particles), (Εικόνα 8). Η παραπάνω προτάσεις ενώ προσεγγίζουν καλύτερα το πρόβλημα υστερούν σε ακρίβεια όταν πρόκειται για προβλήματα με πολύπλοκες γεωμετρίες.



Εικόνα 8, Εικονικά σωματίδια με καθορισμένη θέση (fictitious particles) (Papadopoulos, 2009).

Ο συνδυασμός των παραπάνω φαίνεται να είναι η πιο βέλτιστη λύση παρόλα αυτά ο χειρισμός των ορίων στη μελετώμενη μέθοδο χρήζει περαιτέρω μελέτης.

### 3.6 Αλγόριθμοι και βήμα επίλυσης στο χρόνο.

Καθοριστικής σημασίας για την υλοποίηση και την βέλτιστη λειτουργία του μοντέλου πέραν της επιλογής του πυρήνα είναι η ορθή επιλογή του χρονικού βήματος. Συνήθως υπολογίζεται με βάση το κριτήριο CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) το οποίο δίνεται από την παρακάτω σχέση (εξ. 3.6.1).

$$\delta t_{CFL} = C \frac{\delta x}{v}$$

Εξίσωση 3.6.1, Χρονικό βήμα με την μέθοδο CFL.

Όπου C είναι ο αδιάστατος αριθμός Courant με πεδίο ορισμού που συνήθως κυμαίνεται από 0 έως 1. Το  $\delta x$  είναι κάποιο χαρακτηριστικό μήκος και  $v$  μία χαρακτηριστική ταχύτητα για το παραπάνω μήκος. Στη μέθοδο SPH συνηθίζεται ως  $v$  να επιλέγεται η ταχύτητα του ήχου στο ρευστό ενώ ως χαρακτηριστικό μήκος επιλέγεται το μήκος εξομάλυνσης  $h$  ή η ακτίνα των σωματιδίων στο  $\delta x$ . Ποιο συγκεκριμένα κατά την επιλογή του χρονικού βήματος η παραπάνω μέθοδος πρέπει να λαμβάνει υπόψη κάποιους περιορισμούς. Το χρονικό βήμα πρέπει να είναι μικρότερο ή ίσο με το χαρακτηριστικό μήκος εξομάλυνσης. Για την περίπτωση προβλημάτων ρευστομηχανικής όπου  $M \ll 1$  η σχέση 3.6.1 παίρνει την εξής μορφή.

$$\delta t_{CFL} = 0.4 \frac{h}{v}$$

Εξίσωση 3.4.2



Ο συντελεστής 0.4 έχει καθοριστεί πειραματικά από τον Monaghan (1992). Σκοπός της συνθήκης είναι να αποφευχθεί η μετάδοση της τεχνητής πίεσης με την μορφή κυματισμών στην διάρκεια επίλυσης της καταστατικής εξίσωσης.

Ένας ακόμα περιορισμός στην επιλογή του χρονικού βήματος προτάθηκε από τους Morris et al., (1997) και αυτός αφορά την εξάρτηση εξωτερικών και εσωτερικών δυνάμεων, εξασφαλίζοντας με αυτόν τον τρόπο ότι τα σωματίδια δεν θα πλησιάσουν πολύ κοντά μεταξύ τους κατά την διαδικασία της ολοκλήρωσης στο ίδιο χρονικό βήμα. Ο παραπάνω περιορισμός αποτυπώνεται μαθηματικά μέσω της εξίσωσης 3.6.3.

$$\delta_{t_{forces}} = 0.25 \min \left( \sqrt{\frac{h}{\gamma_i}} \right)$$

**Εξίσωση 3.6.3, Περιορισμός στο χρονικό βήμα λόγω δυνάμεων.**

Όπου  $\gamma_i$  είναι η επιτάχυνση του εκάστοτε σωματιδίου που οφείλεται στην επιβολή των εξωτερικών και εσωτερικών δυνάμεων.

Τέλος ένας τρίτος περιορισμός αφορά την συνθήκη της κινηματικής συνεκτικότητας, στοχεύοντας στον περιορισμό του χρονικού βήματος έτσι ώστε να είναι μικρότερο της χρονικής κλίμακας του φαινομένου συνεκτικότητας. Ο παραπάνω περιορισμός απορρέει από την σχέση του κριτηρίου συνεκτικότητας που φαίνεται στην εξίσωση 3.6.4. Όπως είναι εμφανές η παραπάνω χρονική κλίμακα εξαρτάται από το χαρακτηριστικό μήκος εξομάλυνσης  $h$ .

$$\delta_{t_{visc}} = 0.125 \frac{h^2}{\nu}$$

**Εξίσωση 3.6.4, Περιορισμός χρονικού βήματος λόγω της κινηματικής συνεκτικότητας.**

Το τελικό χρονικό βήμα είναι απόρροια των παραπάνω περιορισμών, οι οποίοι πρέπει να ικανοποιούνται έκαστος σε κάθε μοντέλο, λόγος που κάνει την επιλογή της μικρότερης τιμής την βέλτιστη για την επιλογή του χρονικού βήματος σε οποιοδήποτε πρόβλημα.

## 4 Ο ΚΩΔΙΚΑΣ LAMMPS ΓΙΑ ΤΗΝ ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ SPH.

### 4.1 Βασικές αρχές και παραδείγματα εφαρμογής.

#### 4.1.1 Ιστορική αναφορά.

Το όνομά του είναι ακρωνύμιο του Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS). Ιστορικά η εξέλιξη του κώδικα ξεκίνησε το 1990 κάτω από μία ερευνητική συμφωνία (cooperative research & development agreement GRADA). Στην συμφωνία πήραν μέρος δύο ερευνητικά κέντρα αυτό της Sandia και το LLNL καθώς και 3 εταιρείες οι Gray, Bristol Myers Squibb και η Dupont. Στόχος τους ήταν η ανάπτυξη ενός κώδικα για προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής MD μεγάλης κλίμακας. Υπεύθυνος για τον κώδικα ήταν ο Steve Plimpton του ερευνητικού κέντρου Sandia. Το 1997 δημοσιοποιήθηκε μία έκδοση F77 version όπως ονομάστηκε και τέλος το πρώτο μέρος του κώδικα που είναι γνωστός σήμερα ήρθε το 1999 με το τίτλο LAMMPS 99. Έπειτα τερματίστηκε η συνεργασία GRADA και την ανάπτυξη του κώδικα ανέλαβε εξολοκλήρου το ερευνητικό κέντρο της Sandia εκδίδοντας την έκδοση F90 στο Lammps 2001. Ο κώδικας αποτελείται από γλώσσα προγραμματισμού C++ κυκλοφορώντας αρχικά ως open source το 2004 (Lammps.sandia.gov).

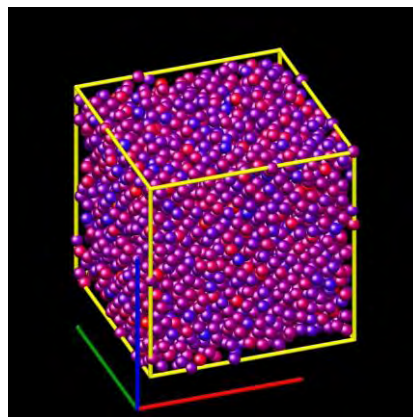
#### 4.1.2 Περιγραφή του Κώδικα.

Ο κώδικας LAMMPS είναι ένας κώδικας που χρησιμοποιείται για την προσομοίωση μέσω της χρήση σωματιδίων (particle simulation code). Ανακαλύφθηκε και επεξεργάστηκε στο Sandia National Laboratories των ΗΠΑ. Αρχικά ο σκοπός της δημιουργίας του ήταν η χρήση του για μελέτη προβλημάτων μοριακής δυναμικής (Molecular Dynamics , MD), ωστόσο μπορεί να παρέχει ένα πλαίσιο για προσομοίωση (particle simulation) που ακολουθούν τις εξισώσεις κίνησης του Newton (Ganzenmuller, 2011). Ουσιαστικά πρόκειται για έναν ανοιχτό (open source) κώδικα που υπόκειται στους όρους ελεύθερης κυκλοφορίας GNU (General Public License) στον οποίο μπορούν να εισαχθούν βιβλιοθήκες όπως αυτή του SPH. Οποιοσδήποτε χρήστης μπορεί να εισάγει φόρμες κώδικα (script) και να τις μοιραστεί. Μέσω εντολών που ήδη υπάρχουν στην βιβλιοθήκη ο χρήστης μπορεί να επιλέξει διαφορετικούς συνδυασμούς προκειμένου να πετύχει το αποτέλεσμα της προσομοίωσης που επιθυμεί. Το λογικό διάγραμμα του αλγορίθμου που ακολουθείται στις διεργασίες που αφορούν την μέθοδο SPH αποτυπώνεται στο Παράρτημα 1. Υπάρχει μια πληθώρα εντολών οι οποίες είναι καταγεγραμμένες με αναλυτική επεξήγηση μέσω της επίσης πλατφόρμας του Lammps. Από τις βασικές αρχές του κώδικα είναι ορισμός των μονάδων και των διαστάσεων που θα γίνει το μοντέλο. Τρέχει σε διαφορετικά περιβάλλοντα Windows, Linux και Ios με προτίμηση για ευκολία της εγκατάστασης της SPH βιβλιοθήκης να γίνει σε Linux. Το παραγόμενο script τρέχει μέσω του terminal στον υπολογιστή και παράγει διαφορετικά αρχεία ανάλογα με την εκάστοτε εντολή που εισάγει ο χρήστης. Σε περίπτωση που ο χρήστης θέλει να δημιουργήσει ένα animation μπορεί να το οπτικοποιήσει (visualize)

μέσω του προγράμματος «Ovito». Αυτό είναι και το πρόγραμμα που επιλέχθηκε στην παρούσα μελέτη (Παράρτημα 2).

```
1 dimension 3
2 boundary p p p
3 atom_style atomic
4
5 ----- VARIABLES -----
6 variable latparam equal 3.61
7 variable material string Cu
8
9 ----- ATOM DEFINITION -----
10
11 lattice fcc ${latparam} orient x 1 0 0 orient y 0 1 0 orient z 0 0 1
12 create_atoms 1 region whole
13
14 ----- INTERATOMIC POTENTIAL -----
15 pair_style meam
16 pair_coeff * * library.meam ${material} ${material}.meam ${material}
17
18 ----- PROPERTY COMPUTES -----
19 compute peratom all pe/atom
20 compute virial all stress/atom NULL
21
22 ##### EQUILIBRATION #####
23
24 # Set timestep
25 reset_timestep 0
26 timestep 0.005
27
28 # Set temperature
29 velocity all create 300 12345 mom yes rot no
30
31 # Assign fixes
32 fix 1 all npt temp 300 300 1 iso 0 0 1 drag 1
33
34 # Set thermo output
35 thermo 400
36 thermo_style custom step lx ly lz press pxx pyy pzz pe temp
37
```

Εικόνα 9, Παράδειγμα κώδικα σε περιβάλλον Lammmps.



Εικόνα 10, Παράδειγμα αναπαράστασης παραγόμενου αρχείου από το Lammmps σε περιβάλλον Ovito.

#### 4.1.3 Ενσωμάτωση του SPH στο LAMMPS.

Βάση των Liakopoulos et al., 2018 όταν γίνεται εισαγωγή του SPH μέσα στο κώδικα LAMMPS οι μεταβλητές του πεδίου είναι η πυκνότητα, η ταχύτητα, η εσωτερική ενέργεια, ο τανυστής των τάσεων και το διάνυσμα ροής της θερμότητας :  $\{\rho, \mathbf{v}, e, \mathbf{P}, \mathbf{Q}\}$ . Οι εξισώσεις για το εκάστοτε στοιχείο περιγράφονται παρακάτω.

*Τοπική πυκνότητα σωματιδίου  $i$ .*

$$\rho_i = \sum_{j=1}^N m_j W_{ij}$$

**Εξίσωση 4.1.1, Περιγραφή τοπικής πυκνότητας σωματιδίου i, "Partion Of Unity".**

*Εξίσωση Διατήρησης της ορμής σωματιδίου i.*

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = -\frac{P_i}{\rho_i^2} \cdot \sum_{j=1}^N m_j \nabla_j W_{ij} - \sum_{j=1}^N m_j \frac{P_j}{\rho_i^2} \nabla_j W_{ij}$$

**Εξίσωση 4.1.2**

Όπου P είναι ο τανυστής των τάσεων που στην παρούσα εργασία αντιπροσωπεύεται από την πίεση. Χρήσιμο είναι να σχολιαστεί ότι οι δυνάμεις του πεδίου στο εκάστοτε σωματίδιο i (pair-wise forces) δίνονται από την παρακάτω σχέση (εξ. 4.1.3).

$$\mathbf{f}_i = m_i \frac{d\mathbf{V}_i}{dt} = - \sum_{j=1}^N m_i m_j \left( \frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_j}{\rho_j^2} \right) \nabla_j W_{ij}$$

**Εξίσωση 4.1.3, Pair-wise forces equation.**

*Εξίσωση συνέχειας.*

Δίνεται από την Εξίσωση 3.4.2.

*Εξίσωση διατήρησης ενέργειας.*

Δίνεται από την Εξίσωση 3.4.7.

*Newman-Richter type τεχνητό ιξώδες (artificial viscosity).*

Προκειμένου να αποφευχθούν οι αστάθειες από την μέθοδο SPH κατά την προσέγγιση των εξισώσεων N-S, ο Monaghan εισήγαγε έναν όρο τεχνητού ιξώδους, πράγμα που υιοθετήθηκε από τον κώδικα LAMMPS και εκφράζεται με την μορφή δύναμης (pair-wise force) που παίρνει την μορφή της εξίσωσης 4.1.4.

$$\mathbf{f}_i = m_i \frac{d\mathbf{V}_i}{dt} = - \sum_{j=1}^N m_i m_j \left( \frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_j}{\rho_j^2} + \Pi_{ij} \right) \nabla_j W_{ij}$$

**Εξίσωση 4.1.4**

Όπου  $\Pi_{ij}$ :

$$\Pi_{ij} = -ah \frac{c_i + c_j}{\rho_i + \rho_j} \frac{\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}^2 + \epsilon h^2}$$

Όπου c είναι η ταχύτητα του ήχου για κάθε ρευστό, το a εκφράζει έναν βοηθητικό συντελεστή για τον έλεγχο της συνέχειας, το ε είναι βοηθητικός συντελεστής για την

αποφυγή ιδιαιτεροτήτων της ροής όταν η απόσταση μεταξύ των σωματιδίων  $r_{ij}$  τείνει στο μηδέν. Επιλέγεται μία τιμή συνήθως περίπου 0.01. Προκειμένου να γίνει κατανοητή η έννοια του τεχνητού ιξώδους οι (Gunzenmuller & Steinhauser, 2011) το συνδέσαν μέσω της σχέσης που φαίνεται στην εξίσωση 4.1.5 με το κινηματικό ιξώδες συναρτήσει του μήκους εξομάλυνσης που έχει επιλεγεί για τον πυρήνα.

$$\nu = \frac{\alpha hc}{8}$$

#### Εξίσωση 4.1.5

Όπου  $\alpha$  είναι η αδιάστατη ποσότητα που ελέγχει την δύναμη απόσβεσης (dissipation strength),  $c$  είναι η ταχύτητα του ήχου που επιλέγεται με κάποια χαρακτηριστική τιμή διάφορη της πραγματικής για την πλειονότητα των προβλημάτων που λαμβάνουν χώρα στον κώδικα και  $h$  είναι το μήκος του πυρήνα εξομάλυνσης.

Πέραν όμως των μαθηματικών εξισώσεων που αποτελούν το υπόβαθρο του κώδικα το LAMMPS παρέχει κάποιες έτοιμες δομές που αφορούν κυρίως τα μεγέθη των δυνάμεων, των συντεταγμένων και των ταχυτήτων. Για να μπορέσει να γίνει μία προσομοίωση με τα χαρακτηριστικά της μεθόδου SPH πρέπει να υπάρχουν τουλάχιστον 4 δομές που ονομάζονται *pair-particle variables*. Αυτές είναι η πυκνότητα, η εσωτερική ενέργειας  $E = m \cdot e$  καθώς και η πρώτη παράγωγός τους ως προς την μονάδα του χρόνου. Για να μπορεί να υποστηριχθεί η παραπάνω απαίτηση εισήχθη στον κώδικα μία νέα δομή (data structure) η οποία αναγνωρίζεται μέσω της εντολής : *atom\_style meso*. Αξίζει να σημειωθεί ότι παρόλο που υπάρχουν διαφορετικές εναλλακτικές που μπορεί να ακολουθούν την εντολή *atom\_style* μόνο η εντολή *meso* είναι ικανοποιητική για ένα πρόβλημα SPH.

Αφού καταστρωθεί ο βασικός κώδικας τρέχει μέσω του απευθείας μέσω του τερματικού (terminal) παράγοντας αρχεία που μπορούν να χρησιμοποιηθούν είτε από προγράμματα οπτικοποίησης είτε από προγράμματα ανάλυσης όπως το MatLab και το Excel. Για την παρούσα εργασία χρησιμοποιήθηκε λογισμικό Linux καθώς ανταποκρίνεται καλύτερα στις εντολές που υπάρχουν στην βιβλιογραφία, παρόλα αυτά μπορεί να τρέξει και σε Windows αφού γίνουν κάποιες απαραίτητες τροποποιήσεις.

#### 4.1.4 Παράδειγμα «Poiseuille flow» with SI & LJ units.

Ως ροή Poiseuille ορίζεται η κίνηση του ρευστού στο χώρο μεταξύ δύο ακίνητων επιπέδων και παράλληλων πλακών οι οποίες έχουν «άπειρη» έκταση. Η ροή λαμβάνει χώρα εξαιτίας της διαφοράς στην πίεση μεταξύ των δύο άκρων δημιουργώντας έτσι μία βαθμίδα πίεσης. Αντίστοιχα στην κίνηση αντιτίθεται μία εσωτερική δύναμη που ονομάζεται τριβή του ρευστού (Liakopoulos, 2016). Η κίνηση περιγράφεται κατά την x-συνιστώσα των εξισώσεων N-S για σταθερή πυκνότητα και ιξώδες. (εξ. 4.1.6)

$$\rho \left( \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) = \rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right)$$

**Εξίσωση 4.1.6, X-συνιστώσα της εξίσωσης Navier-Stokes σε ορθογώνιες καρτεσιανές συντεταγμένες.**

Μέσα από την απλοποίηση λόγω παραδοχών της παραπάνω εξίσωσης μπορούν να παραχθούν διαφορετικά συμπεράσματα με άξιο σχολιασμού για την παρούσα μελέτη, αυτό που περιγράφει την κατανομή των ταχυτήτων. Αρχικά παρατηρείται μέγιστη ταχύτητα στο μέσο επίπεδο μεταξύ των πλακών (το που θα οριστεί το σημείο 0 έγκειται στον εκάστοτε μελετητή αλλά συνήθίζεται να λαμβάνεται στο μέσο του αγωγού). Η σχέση που περιγράφει την κατανομή των ταχυτήτων φαίνεται στην εξίσωση 4.1.7 και τα σχετικά προφίλ στην Εικόνα 11.

$$u = G \frac{h^2}{2\mu} \left( 1 - \frac{y^2}{h^2} \right)$$

**Εξίσωση 4.1.7**

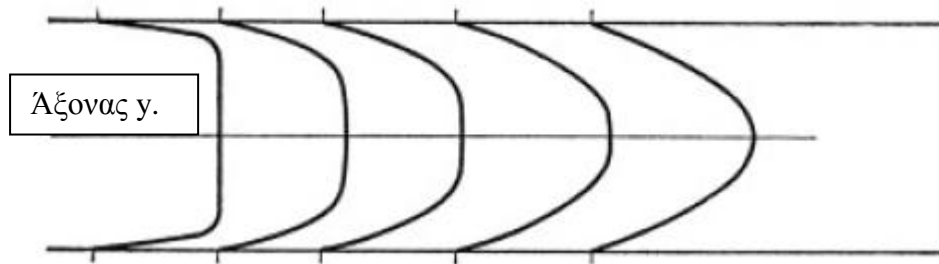
Όπου  $h$  είναι η απόσταση της κάθε πλάκας από το σημείο μηδενισμού του άξονα  $y$  και ο συντελεστής  $G$  περιγράφει την βαθμίδα της πίεσης η οποία είναι και η κινητήριος δύναμη του συστήματος. Δεδομένου ότι η μέγιστη ταχύτητα συναντάται στο σημείο μηδενισμού του  $y$ , εκεί δηλαδή που ορίστηκε η αρχή των αξόνων (στο μέσο της ροής) προκύπτει ότι:

$$u_{max} = -G \frac{h^2}{2\mu}$$

Έτσι προκύπτει η σχέση 4.1.8 που συσχετίζει την τιμή της μέγιστης ταχύτητας με την ταχύτητα της ροής σε οποιοδήποτε σημείο της ροής. Βάση της οποίας (εξ. 4.1.8) γίνεται και η αντιπαραβολή του διαγράμματος με το προφίλ των ταχυτήτων όπως αυτό προκύπτει από την μέθοδο SPH και του προφίλ των ταχυτήτων όπως αυτό προκύπτει από την αναλυτική επίλυση.

$$\frac{u}{u_{max}} = 1 - \frac{y^2}{h^2}$$

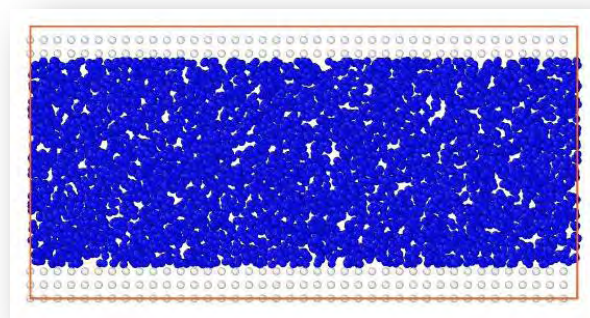
**Εξίσωση 4.1.8, Προφίλ κατανομή των ταχυτήτων συναρτήσει της παραμέτρου  $u_{max}$ .**



Εικόνα 11, Ανάπτυξη προφίλ ταχύτητας σε ροή εντός σωλήνα. Το πρώτο προφίλ στα αριστερά αντιστοιχεί στα αρχικά στάδια ανάπτυξης της ροής. Η διατμητική τάση στα τοιχώματα είναι υψηλή και ένα μεγάλο μέρος της ροής εξακολουθεί να έχει ομοιόμορφη ταχύτητα. Καθώς το υγρό κινείται, η επίδραση της διατμητικής τάσης του τοιχώματος απλώνεται προς την κεντρική γραμμή του σωλήνα και τελικά η ροή φτάνει σε ένα ομαλό, αμετάβλητο προφίλ που είναι παραβολικό για Νευτώνεια ρευστά (Microfluidics: Modelling, Mechanics and Mathematics, 2017).

Γίνεται αντίστοιχα μία προσπάθεια προσομοίωσης του παραπάνω προβλήματος σε περιβάλλον Lammps με στόχο την οπτικοποίηση του προβλήματος και την εξαγωγή συμπερασμάτων. Ως προεπιλογή ο κώδικας ορίζει ως μονάδες lj που μπορούν να αντιστοιχηθούν με τις μονάδες SI. Παρουσιάζονται αποτελέσματα για διαφορετικές χρονικές στιγμές. Τμήμα του κώδικα που χρησιμοποιήθηκε φαίνεται στο (Appendix-1).

Στη Εικόνα 12 φαίνεται απόσπασμα από την οπτικοποίηση μέσω Ονίτο ενώ στον Πίνακα 3 αναφέρονται τα βασικά χαρακτηριστικά του μοντέλου.



Εικόνα 12, Ροή Poiseuille με δυνάμεις lj.

Διαστάσεις	3
Μονάδες	lj
Οριακές συνθήκες	rfr
$\Delta x$	20
$\Delta y$	10
$\Delta z$	10
Μάζα	1
Πυκνότητα	1
Dynamic Viscosity	7.00E-01
h	8.00E+00
dt	0.001
run	1000000

Πίνακας 3, Διάταξη μοντέλου ροής Poiseuille σε μονάδες lj.

Το αντίστοιχο προφίλ της ταχύτητας συναρτήσει του βάθους ροής φαίνεται στο Διάγραμμα 4.1-1. Όπως γίνεται αντιληπτό από την σύγκριση του διαγράμματος με την μορφή που έχει το προφίλ των ταχυτήτων στο στην Εικόνα 11, είτε το πρόβλημα απαιτεί περισσότερες χρονικές επαναλήψεις (run) προκειμένου να αναπτυχθεί η ροή, ή διαφορετική γεωμετρία.

Όσον αφορά την συσχέτιση των μονάδων lj με το σύστημα μονάδων SI, η διαδικασία είναι αρκετά πολύπλοκη και χρήζει επιπλέον ανάλυσης. Αρχικά με την εντολή καθορισμού των μονάδων ως lj, ο χρήστης πρέπει να γνωρίζει ότι όλες οι ποσότητες είναι αδιάστατες (unitless). Χωρίς βλάβη της γενικότητας θεωρείται ότι η θεμελιώδεις ποσότητες της μάζας, των τάσεων (sigma), τροπών (epsilon) και η σταθερά Boltzman είναι σταθερές και ίσες με την μονάδα. Παρακάτω αναφέρονται κάποιες ποσότητες που υπολογίζονται βάση αυτής της αρχής, όπου με αστερίσκο συμβολίζονται οι ποσότητες όπου είναι αδιάστατες (Afs.enea.it, n.d.).

- mass = mass or m
- distance = sigma, where  $x^* = x / \text{sigma}$
- time = tau, where  $\tau = t^* = t (\text{epsilon} / m / \text{sigma}^2)^{1/2}$
- energy = epsilon, where  $E^* = E / \text{epsilon}$
- velocity = sigma/tau, where  $v^* = v \tau / \text{sigma}$
- force = epsilon/sigma, where  $f^* = f \text{sigma} / \text{epsilon}$
- torque = epsilon, where  $t^* = t / \text{epsilon}$
- temperature = reduced LJ temperature, where  $T^* = T K_b / \text{epsilon}$
- pressure = reduced LJ pressure, where  $P^* = P \text{sigma}^3 / \text{epsilon}$
- dynamic viscosity = reduced LJ viscosity, where  $\eta^* = \eta \text{sigma}^3 / \text{epsilon} / \tau$
- charge = reduced LJ charge, where  $q^* = q / (4 \pi \text{perm}0 \text{sigma} \text{epsilon})^{1/2}$
- dipole = reduced LJ dipole, moment where  $\mu^* = \mu / (4 \pi \text{perm}0 \text{sigma}^3 \text{epsilon})^{1/2}$

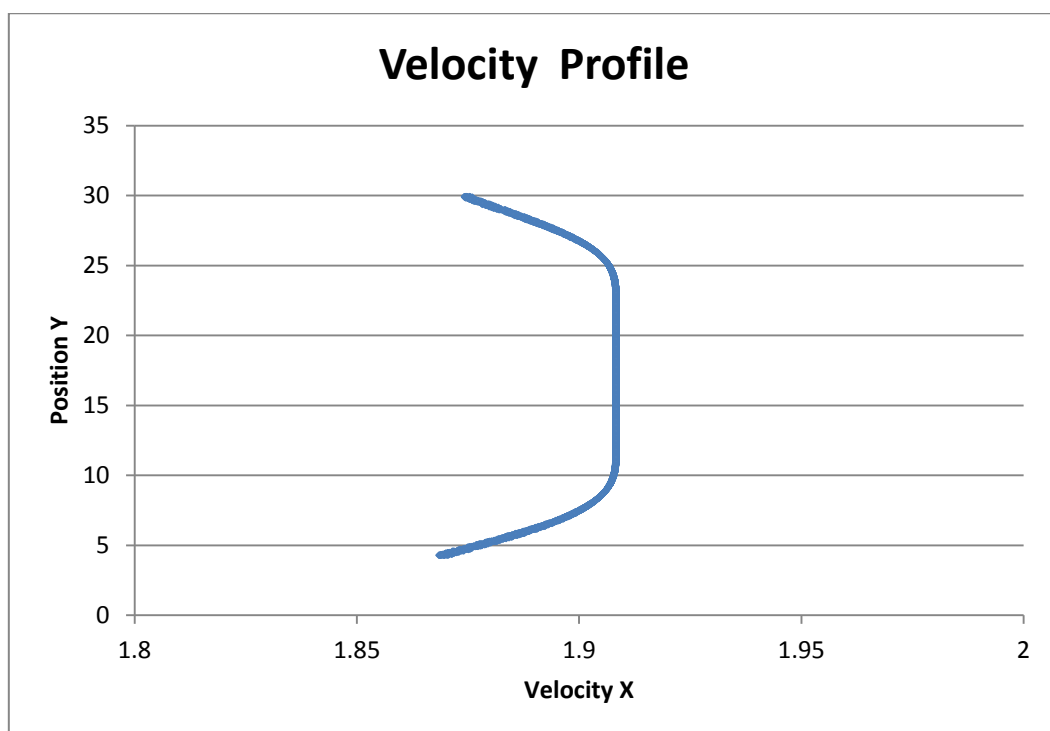


- electric field = force/charge, where  $E^* = E (4 \pi \text{ perm}_0 \text{ sigma epsilon})^{1/2} \text{ sigma} / \text{epsilon}$
- density = mass/volume, where  $\rho^* = \rho \text{ sigma}^{\text{dim}}$

Γενικότερα τα προβλήματα δυναμικής σωματιδίων (MD) βασίζονται στον υπολογισμό αλληλεπίδρασης μεταξύ ορίων και ρευστού μέσω του δυναμικού Lennard-Jones 12-6 που δίνεται από την εξίσωση 4.1.9 (Sofos et al., 2015)

$$u^{LJ}(r_{ij}) = 4\epsilon((\sigma/r_{ij})^{12} - (\sigma/r_{ij})^6)$$

Εξίσωση 4.1.9



Διάγραμμα 4.1-1, Προφίλ ταχυτήτων για προσομοίωση ροής Poiseuille με δυνάμεις lj.

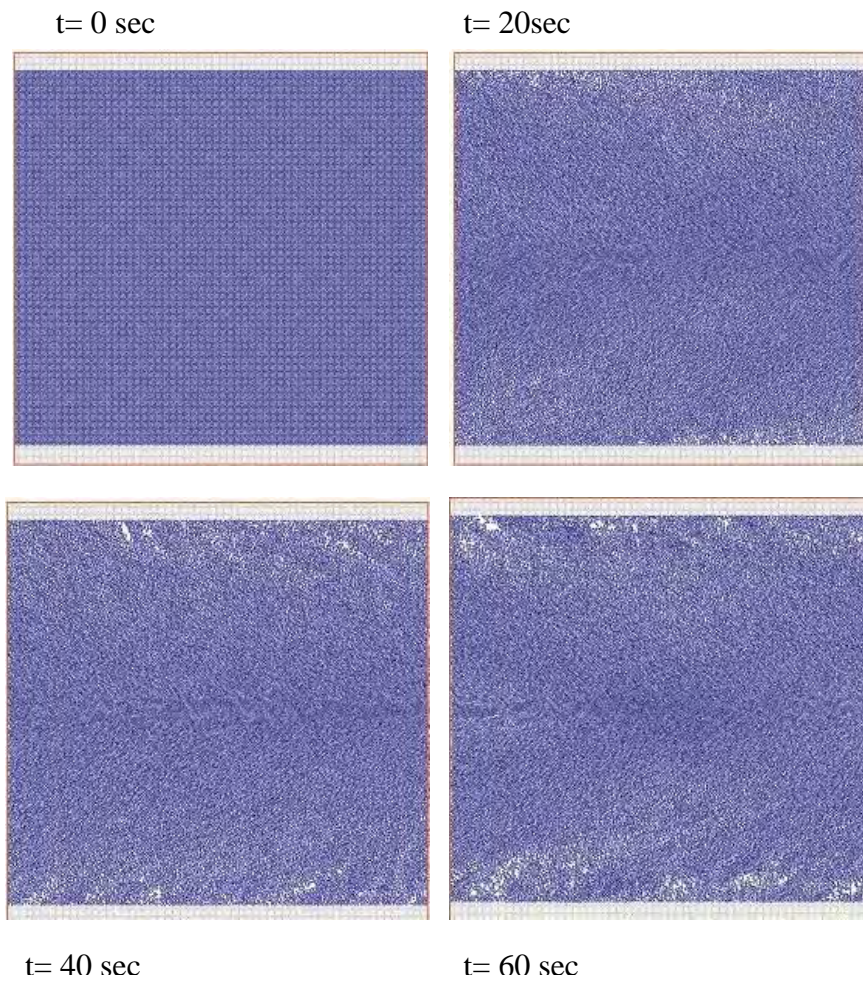
Δεδομένου ότι οι μονάδες lj δεν είναι ιδιαίτερα διαδεδομένες επιλέχθηκε να γίνει μετατροπή σε δυνάμεις si. Η παραπάνω διαδικασία χρήζει ιδιαίτερης προσοχής καθότι δεν αρκεί μόνο η αλλαγή στην εντολή που ελέγχει το σύστημα μονάδων αλλά και κάθε εντολή πρέπει να συμμορφώνεται στο παραπάνω πλαίσιο. Για παράδειγμα στην περίπτωση που οι μονάδες οριστούν ως lj, η εντολή που ελέγχει την πυκνότητα παίρνει την τιμή 1. Όταν τώρα το σύστημα μονάδων οριστεί ως si, πρέπει στην αντίστοιχη εντολή που ελέγχει την πυκνότητα να οριστεί ως 1000 kg/m<sup>3</sup>.

Αντίστοιχα στιγμιότυπα από την ροή φαίνονται για διαφορετικές χρονικές στιγμές στην Εικόνα 13, ενώ το αντίστοιχο διάγραμμα με το προφίλ των ταχυτήτων στο Διάγραμμα 4.1-2. Τα παραπάνω αρχεία είναι προϊόν προσομοίωσης ροής Poiseuille με περιοδικά τοιχώματα (boundary conditions) σε ένα τετράγωνο διαστάσεων

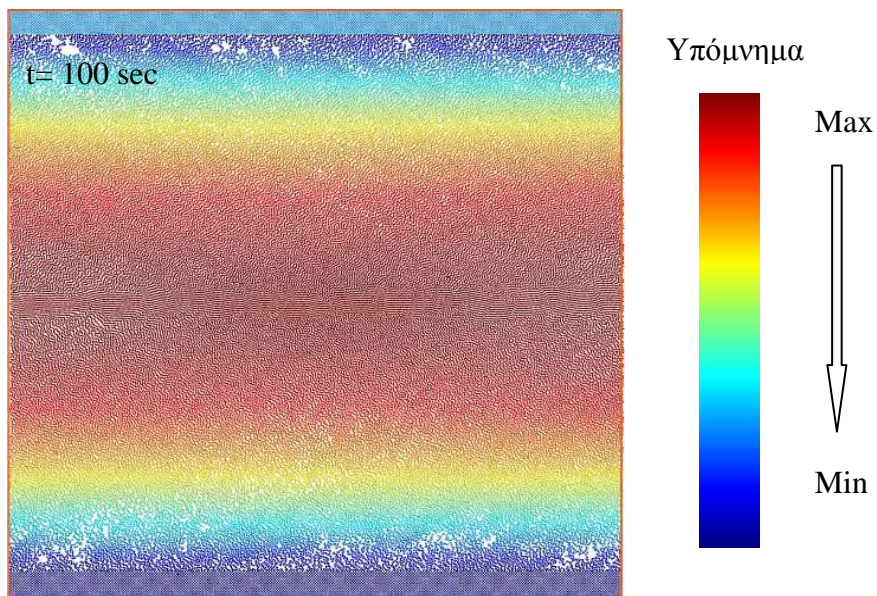
εκατοστού (1cm \* 1cm). Αξίζει να υπογραμμιστεί ότι για να επιτευχθεί η προσομοίωση ακόμα και σε τόσο μικρές διαστάσεις συγκριτικά με πραγματικά προβλήματα ανοιχτών και κλειστών αγωγών που συναντώνται στη φύση απαιτήθηκε υπολογιστική δύναμη για 95.922 σωματίδια (particles). Αναλυτικά η δομή του προβλήματος φαίνεται στον Πίνακα 4. Το σύστημα έφτασε σε ισορροπία (equilibration) μετά από 1,000,000 βήματα (run).

Διάσταση x άξονα	0.01
Διάσταση y άξονα	0.01
Boundary conditions	pfp
c(m/s)	0.1
$\rho(\text{kg/m}^3)$	1000
h(m)	6.50E-05
$\nu(\text{m}^2/\text{s})$	1.00E-06
Particles	95922
dt	5.00E-04
run	3000000

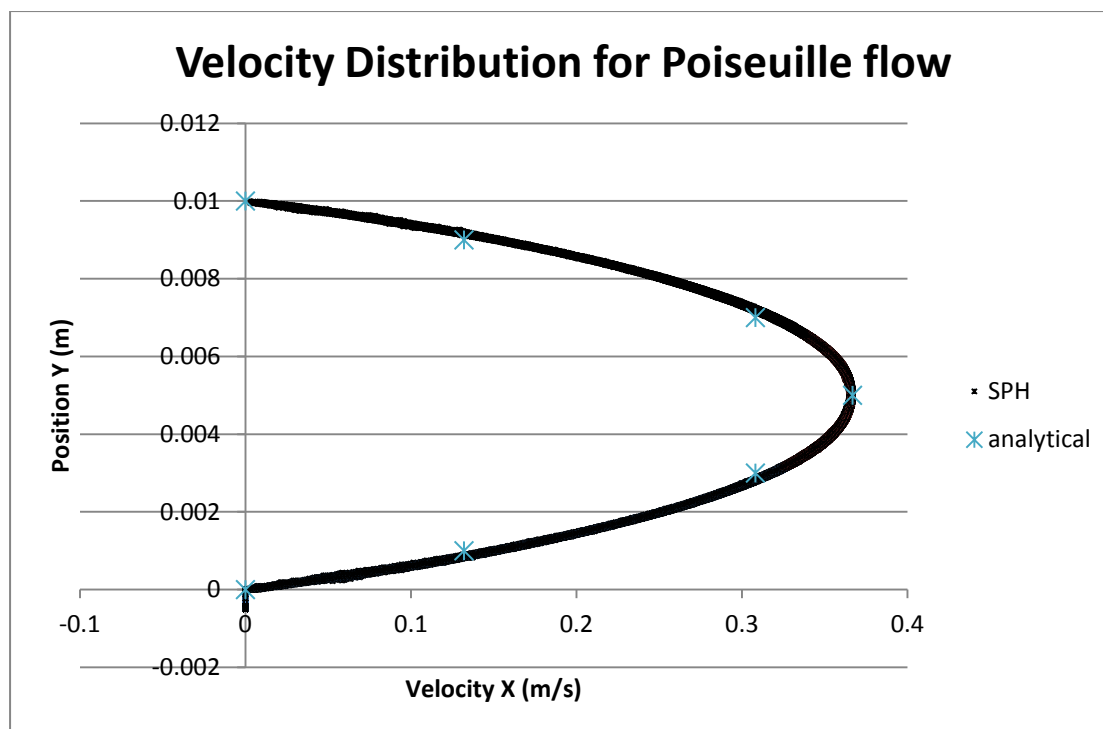
Πίνακας 4, Χαρακτηριστικά κώδικα για ροή Poiseuille με διάταξη 1cm\*1cm.



Εικόνα 13, Στιγμιότυπα ροής Poiseuille ( $1 \text{ cm} * 1 \text{ cm}$ ) για διαφορετικές χρονικές στιγμές.



Εικόνα 14, Χρωματισμός της ροής ανάλογα με την οριζόντια ταχύτητα των σωματιδίων.

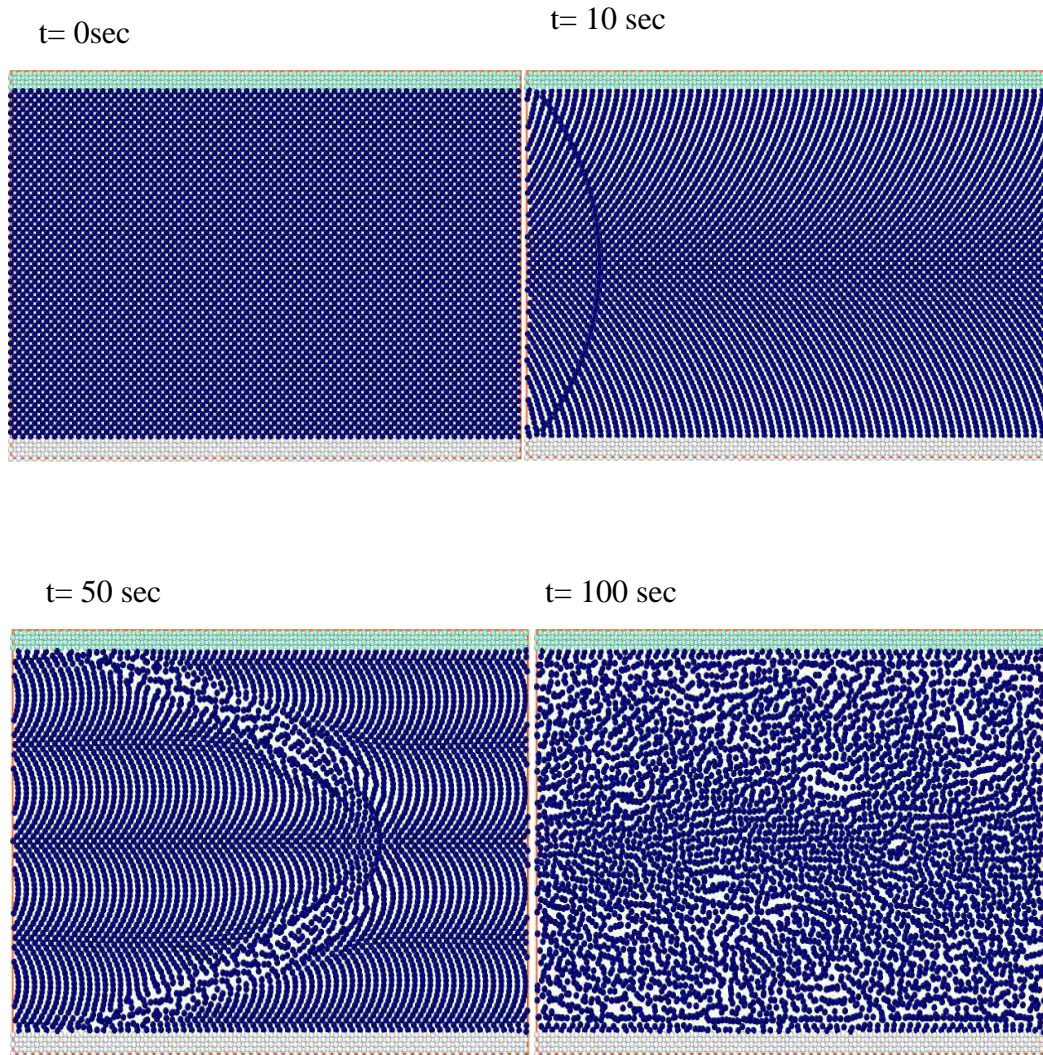


Διάγραμμα 4.1-2, Προφίλ ταχυτήτων για πλήρως αναπτυγμένη ροή Poiseuille.

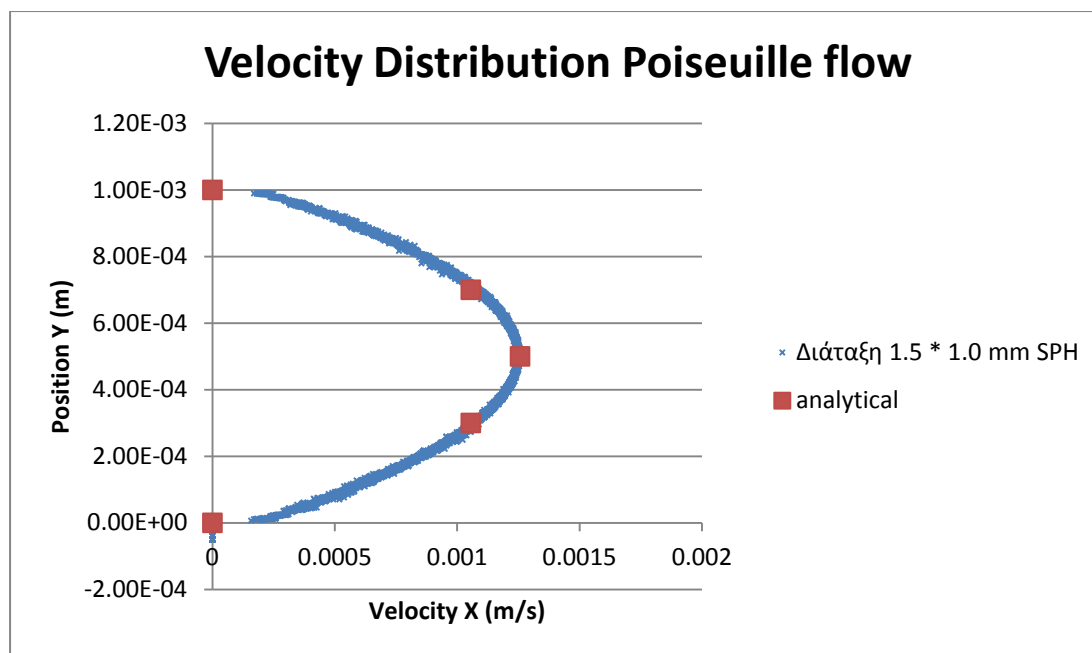
Με βάση το παραπάνω script έγινε τροποποίηση στην γεωμετρία του προβλήματος έτσι ώστε να αποτελείται από ορθογωνική διάταξη 1.5mm \* 1.0 mm. Αναλυτικά τα στοιχεία του μοντέλου φαίνονται στον Πίνακα 5. Σε αυτή την περίπτωση το πείραμα απαιτήσε υπολογιστική δύναμη 5632 σωματιδίων και τα αποτελέσματα συγκρίνονται με αυτά της τετραγωνικής διάταξης. Στην Εικόνα 15 φαίνονται στιγμιότυπα όπως αυτά προκύπτουν από το πρόγραμμα Onito. Όπως και στην προηγούμενη περίπτωση και εδώ το σύστημα έτρεξε 1,000,000 φορές προκειμένου να φτάσει σε ισορροπία.

Διάσταση x άξονα	0.0015
Διάσταση y άξονα	0.001
Boundary conditions	pfp
c(m/s)	0.1
$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	1000
h(m)	6.50E-05
$\nu$ (m <sup>2</sup> /s)	1.00E-06
Particles	5632
dt	5.00E-05
run	3000000

Πίνακας 5, Χαρακτηριστικά κώδικα για ροή Poiseuille σε διάταξη 1.5mm\*1mm



Εικόνα 15, Στιγμιότυπα Ροής Poiseuille για διάταξη 1.5mm \* 1mm



Διάγραμμα 4.1-3, Προφίλ ταχυτήτων για περίπτωση ροής Poiseuille με διάταξη 1.5\*1mm.

Στην δεύτερη περίπτωση συναντάται μία μέγιστη ταχύτητα περίπου 0.0013 m/s (διάταξη χιλιοστών) ενώ στην πρώτη περίπτωση διάταξη εκατοστών η μέγιστη τιμή ανέρχεται στα 0.038 m/s ένα μέγεθος περίπου 30 φορές το προηγούμενο. Ακόμα και μία μεταβολή λοιπόν στην διάταξη μπορεί να δώσει σημαντικές διαφορές στην τιμή των ταχυτήτων.

## 4.2 Το πρόβλημα της Ροής σε κλειστό αγωγό με μεταβολή της διατομής .

Προκειμένου να γίνει περαιτέρω αξιολόγηση της χρήσης του κώδικα LAMMPS για την μελέτη προβλημάτων ρευστομηχανικής και υδραυλικής ανοιχτών και κλειστών αγωγών γίνεται δοκιμή του κώδικα για ροή σε κλειστό αγωγό με απότομη αύξηση και μείωση της διατομής. Λόγω απαίτησης εξαιρετικά μεγάλου υπολογιστικού φόρτου και στις δύο περιπτώσεις επιλέχθηκαν εξαιρετικά μικρές διαστάσεις συγκριτικά με τα προβλήματα που συναντώνται στη φύση.

### 4.2.1 Απότομη αύξηση διατομής.

Η διάταξη του προβλήματος βρίσκεται στον Πίνακα 6. Προκειμένου να ληφθούν αποτελέσματα κοντά σε αυτά που συναντώνται στην βιβλιογραφία απαιτήθηκε υπολογιστικός φόρτος 30972 σωματιδίων (particles) και επιλέχθηκαν περιοδικά όρια κατά των x άξονα (boundary conditions), έτσι ώστε τα σωματίδια που απομακρύνονται από την αυξημένη διατομή (A2) να εισέρχονται με τις ίδιες ιδιότητες στην βασική διατομή του αγωγού.

Διάσταση x άξονα	3mm
Διάσταση y άξονα	3mm
Boundary conditions	p f p
c (m/s)	0.1
$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	1000
h(m)	6.50E-05
$\nu$ (m <sup>2</sup> /s)	1.00E-06
A2/A1	2
Particles	30972
dt (sec)	1.00E-06
run	3.00E+06

Πίνακας 6, Διάταξη προβλήματος απότομης αύξησης διατομής.

Στιγμιότυπα του προβλήματος για διαφορετικές χρονικές στιγμές φαίνονται στην Εικόνα 14.

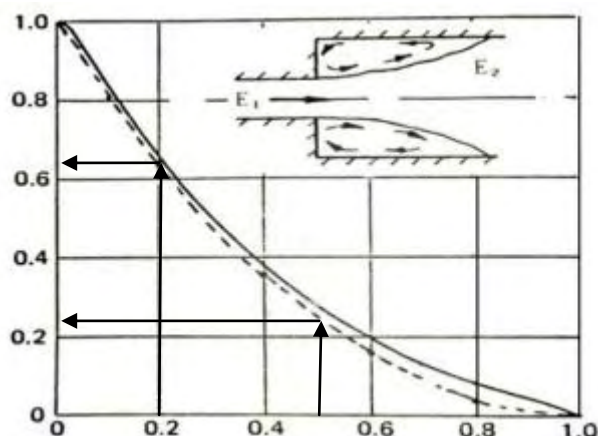
Αναλυτικότερα η απότομη αύξηση της διατομής έχει ως αποτέλεσμα την αποκόλληση της ροής στη διατομή που συναντάται η αναφερθείσα αύξηση. Στο συγκεκριμένο σημείο εμφανίζεται ασυνέχεια που οδηγεί στη δημιουργία στροβιλισμών και ζωνών ανακυκλοφορίας που με την σειρά τους επιφέρουν αύξηση των απωλειών μηχανικής ενέργειας (Λιακόπουλος, 2016). Η σχέση που υπολογίζει τις τοπικές απώλειες σε έναν αγωγό που παρουσιάζει απότομη αύξηση της διατομής φαίνεται στην εξίσωση 4.2.1.. Συγκρίνοντας την παραπάνω σχέση με τον τύπο ορισμού του συντελεστή τοπικών απωλειών K απορρέει μία σχέση υπολογισμού του συντελεστή συναρτήσει των εμβαδών των δύο διαφορετικών διατομών (εξίσωση 4.2.2). Στο Σχήμα 8 φαίνεται η καμπύλη που συνδέει των συντελεστή τοπικών απωλειών K με τον λόγο των δύο διατομών.

$$H_l = \left(1 - \frac{A_1}{A_2}\right)^2 \frac{V_1^2}{2g}$$

4.2.1, Σχέση υπολογισμού των τοπικών απωλειών στην περίπτωση απότομης αύξησης της διατομής. Όπου διατομή 1 η μεγάλη διατομή ανάντη της ροής.

$$K = \left(1 - \frac{A_1}{A_2}\right)^2$$

4.2.2, Συντελεστής τοπικών απωλειών K συναρτήσει του λόγου των δύο εμβαδών.



Σχήμα 8, Τιμές του συντελεστή τοπικών απωλειών  $K$  συναρτήσει του λόγου των εμβαδών σε περίπτωση αύξησης της διατομής του αγωγού (Eclass.upatras.gr, 2017).

Στην περίπτωση που η επαυξημένη διατομή ( $A_2$ ) τείνει στο άπειρο τότε προκύπτει ότι ο συντελεστής τοπικών απωλειών ισούται με την μονάδα. Αυτό το πρόβλημα συναντάται συχνά στην περίπτωση εκροής από αγωγό σε δεξαμενή όπου η δεξαμενή έχει πολύ μεγαλύτερη συγκριτικά διατομή. Από τα δεδομένα του μοντέλου προκύπτει ότι για διατομή  $A_2$  διπλάσια από την διατομή  $A_1$  ο συντελεστής τοπικών απωλειών από την εξίσωση 4.2.3 πρέπει να ισούται με 0.25, συμπέρασμα που φαίνεται να συμφωνεί και με την καμπύλη του διαγράμματος. Εν συνεχεία υπολογίζονται οι μέσες τιμές των ταχυτήτων για θέση που βρίσκεται ανάντη και κατόντη της αύξησης με τιμές  $V_1$  να ανέρχονται στο 0,00072 m/s και  $V_2$  0,00037 αντίστοιχα. Από τον ορισμό του συντελεστή τοπικών απωλειών και την εξίσωση 4.2.2 προκύπτει ότι:

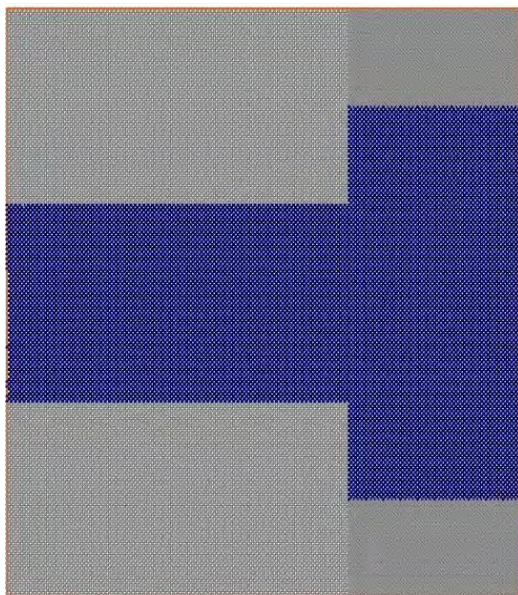
$$K = \left(1 - \frac{V_2}{V_1}\right)^2$$

#### 4.2.3, Σχέση σύνδεση συντελεστή τοπικών απωλειών με τις τιμές των ταχυτήτων στις δύο διατομές.

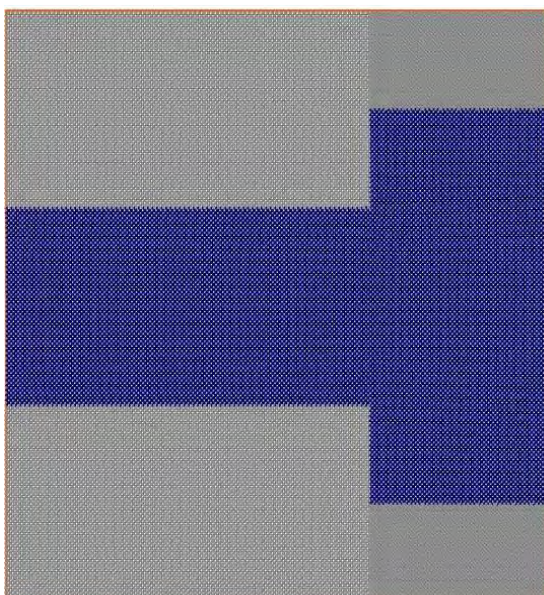
Από αναλυτική επίλυση προκύπτει τιμή του  $K=0.236$  πολύ κοντά στην αρχική εκτίμηση. Συμπερασματικά λοιπόν φαίνεται ότι το μοντέλο ανταποκρίνεται, δεδομένου ότι βρίσκεται σε εξαιρετική συμφωνία με την αναλυτική λύση.



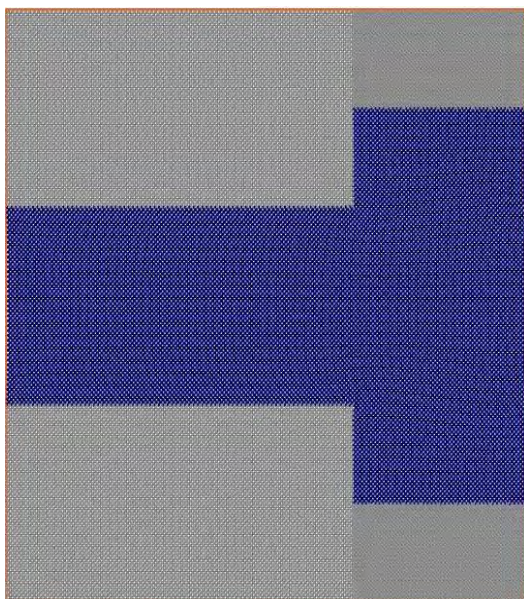
t= 0 sec



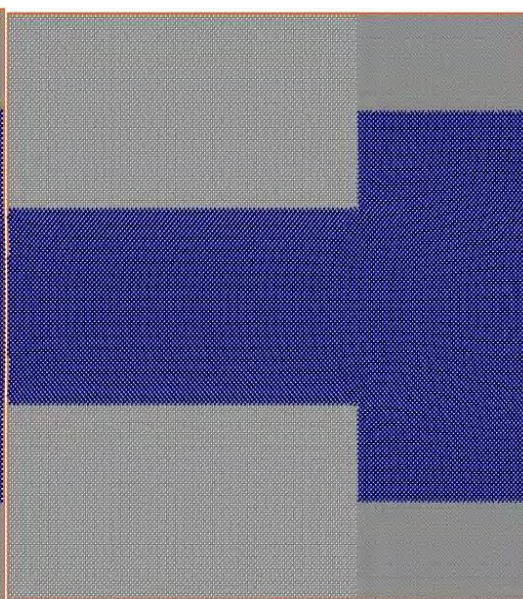
t= 1.0 sec



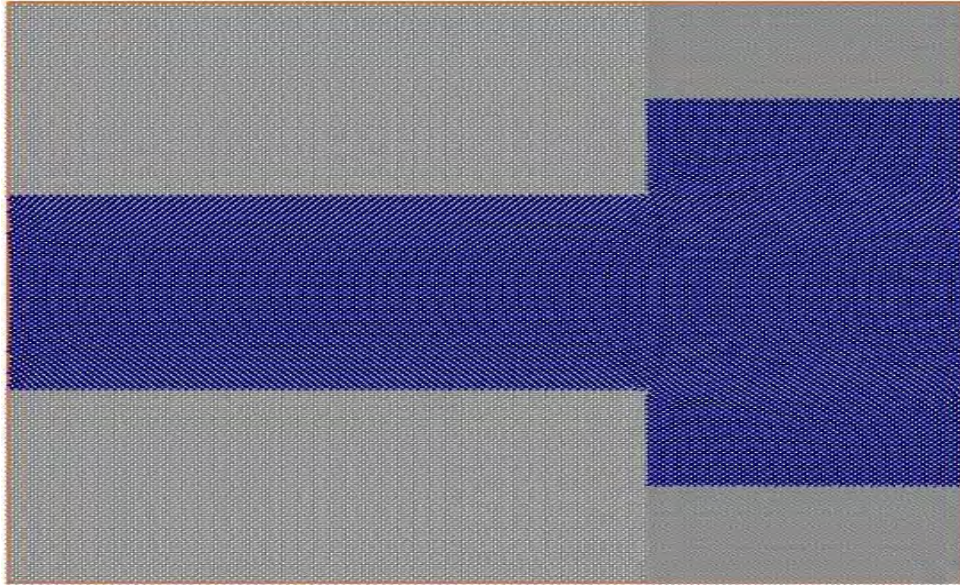
t= 1.5 sec



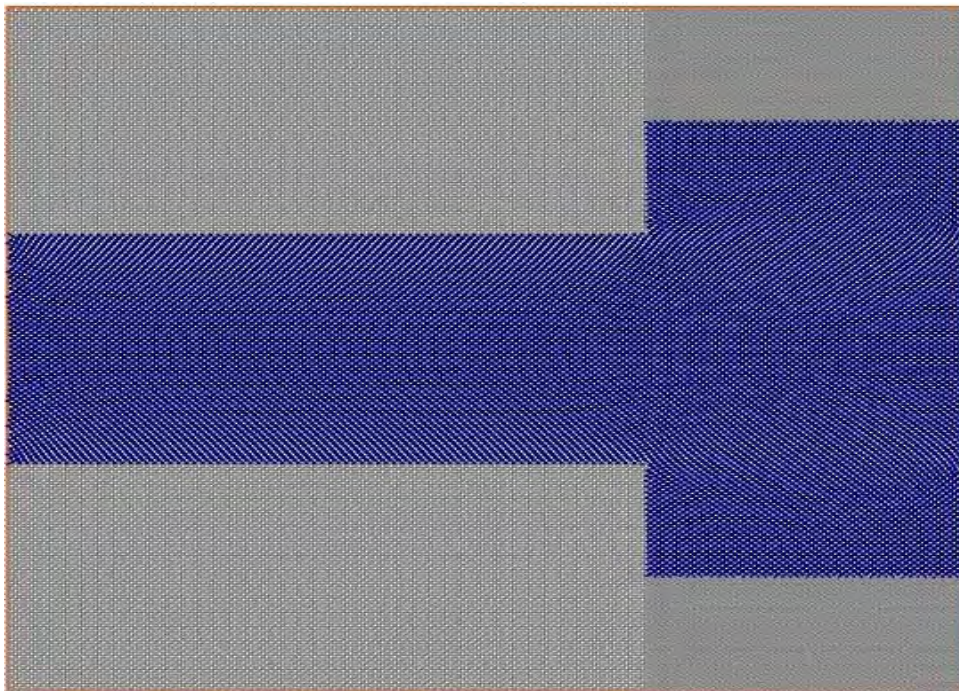
t= 2.0 sec



$t = 2.5 \text{ sec}$

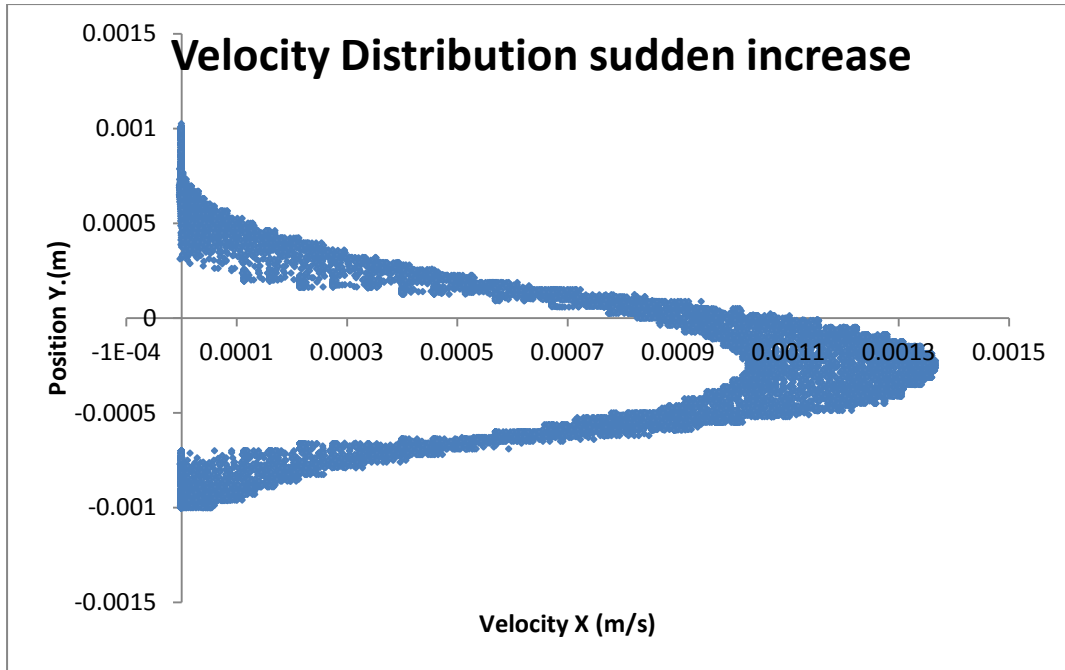


$t = 3.0 \text{ sec}$

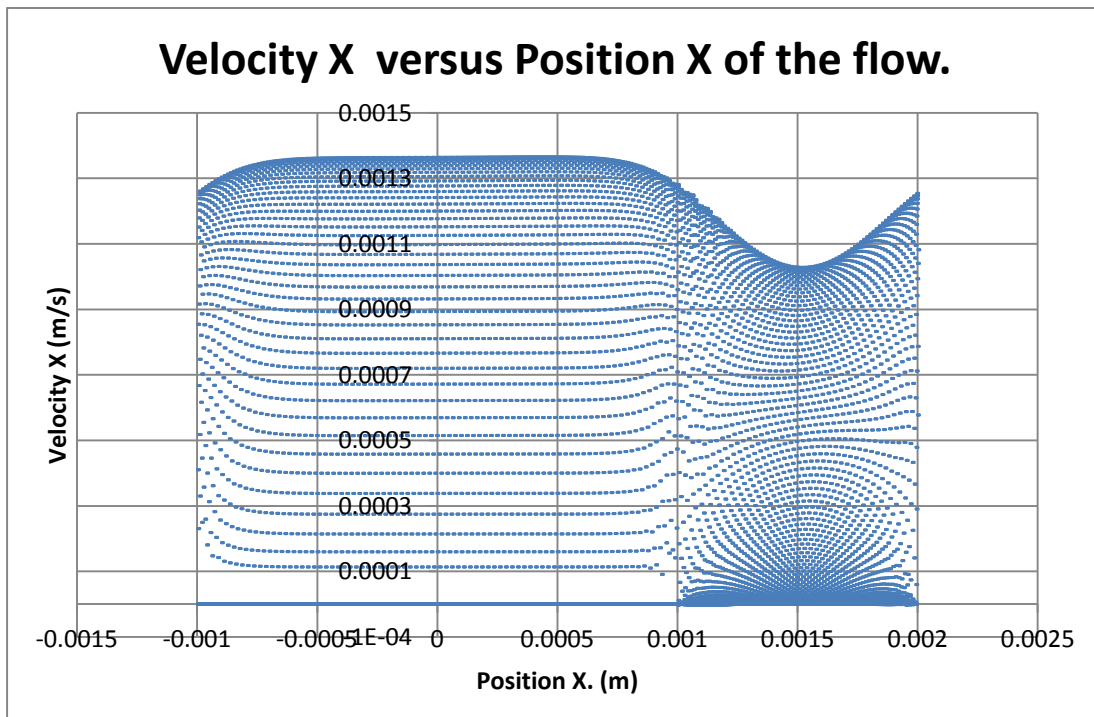


**Εικόνα 16, Στιγμιότυπα ροής για απότομη αύξηση της διατομής.**

Το αντίστοιχο προφίλ των ταχυτήτων φαίνεται στο Διάγραμμα 4.2-1 και αντίστοιχα οι τιμές των ταχυτήτων ανάλογα με την θέση X της ροής φαίνονται στο Διάγραμμα 4.2-2.



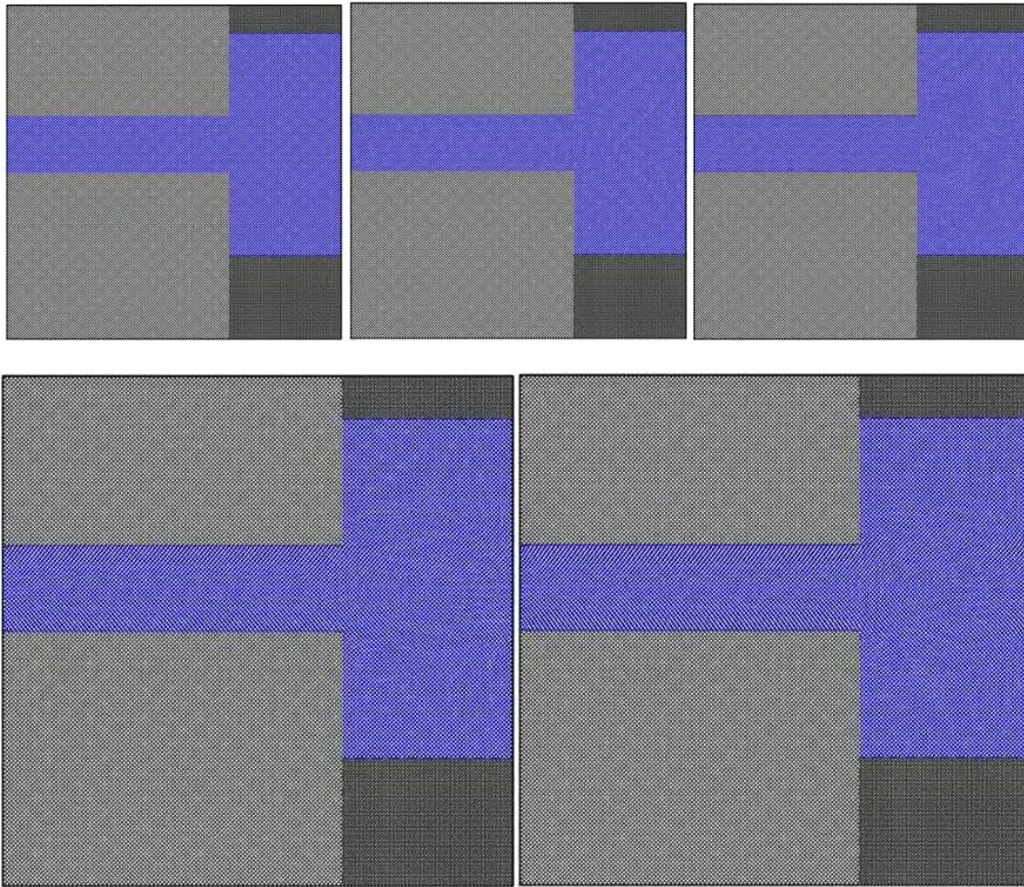
Διάγραμμα 4.2-1, Προφίλ των ταχυτήτων για ροή με απότομη αύξηση της διατομής.



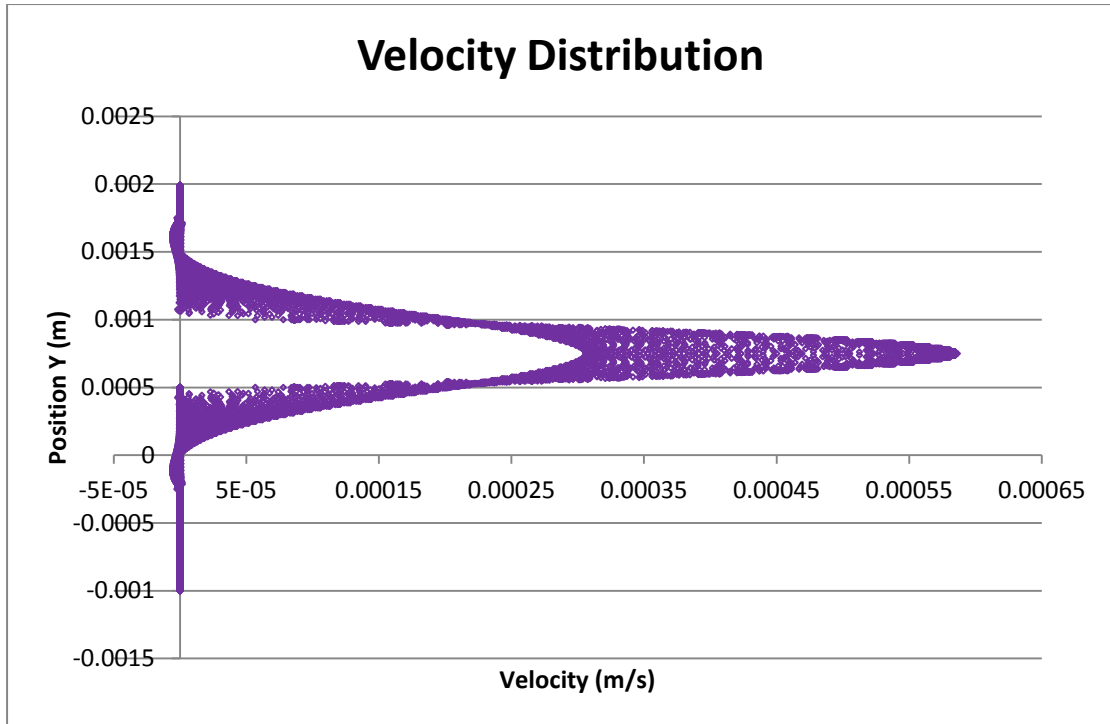
Διάγραμμα 4.2-2, Τιμές ταχύτητας των σωματιδίων ανάλογα με την θέση της ροής κατά τον άξονα X.

Για την πληρέστερη κατανόηση του φαινομένου και την ορθότερη αξιολόγηση της μεθόδου καταστρώνεται εκ νέου ο ίδιος κώδικας με τα ίδια χαρακτηριστικά, έχοντας ως μόνη διαφορά ότι ο λόγος των δύο εμβαδών ( $A_2/A_1$ ) από  $\frac{1}{2}$  γίνεται 0.2. Η επιλογή αυτού του ποσοστού δεν είναι τυχαία καθώς η τιμή 0.2 είναι αρκετά χαρακτηριστική όντας στην αρχή της καμπύλης που δείχνει την σχέση που έχει ο λόγος των δύο

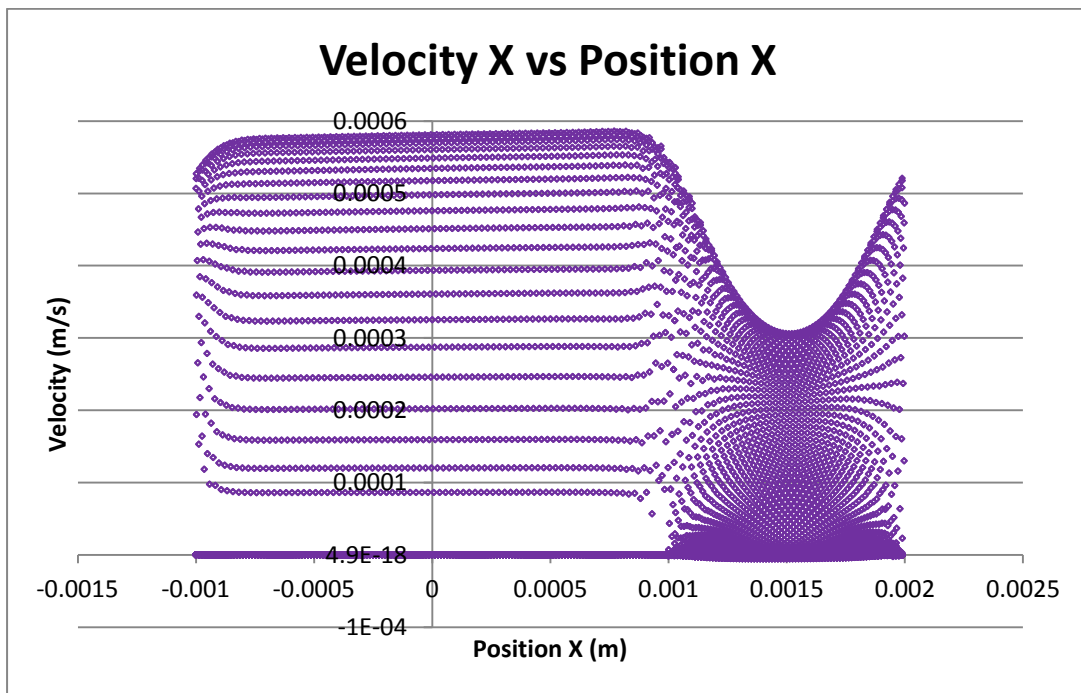
εμβαδών με τον συντελεστή τοπικών απωλειών  $K$  (Σχήμα 8). Στιγμιότυπα της ροής για διαφορετικές χρονικές στιγμές φαίνονται στην Εικόνα 17 και η κατανομή των ταχυτήτων συναρτήσει του βάθους ροής αποτυπώνεται στο Διάγραμμα 4.2-3.



Εικόνα 17, Στιγμιότυπα της ροής σε κλειστό αγωγό με απότομη αύξηση της διατομής και λόγο εμβαδών 0.2



Διάγραμμα 4.2-3, Κατανομή των ταχυτήτων για ροή σε κλειστό αγωγό με απότομη αύξηση της διατομής και λόγο εμβαδών 0.2



Διάγραμμα 4.2-4, Ταχύτητα σωματιδίων συναρτήσει της θέσης που καταλαμβάνουν στον άξονα της ροής. Περίπτωση ροής σε κλειστό αγωγό με απότομη αύξηση διατομής και λόγο εμβαδών 0.2

Όπως ήταν αναμενόμενο ο μικρότερος λόγος στις δύο διατομές έχει οδηγήσει σε μεγαλύτερο συντελεστή τοπικών απωλειών και σε εντονότερες διακυμάνσεις στις τιμές της ταχύτητας μεταξύ των δύο διατομών. Στην περίπτωση της διατομής 1 παρατηρείται μέση ταχύτητα με τιμή που ανέρχεται περίπου στο 0.0005 m/s ενώ στην

περίπτωση της διατομής 2 εξαιτίας της έντονης ανακυκλοφορίας συναντάται μία μέση τιμή που ανέρχεται στο 0.00012 m/s. Από το Σχήμα 8 προκύπτει ένας συντελεστής τοπικών απωλειών  $K$  με τιμή που ανέρχεται στο 0.64. Από την εξίσωση 4.2.3 που συνδέει τον συντελεστή τοπικών απωλειών με τις τιμές των ταχυτήτων στις δύο διατομές προκύπτει ένας συντελεστής τοπικών απωλειών  $K=0.5776$ . Αυτό δείχνει μία καλή συμφωνία με την αναλυτική λύση έχοντας βεβαία σφάλμα της τάξης του 9.75 % το οποίο ανάλογα με τον τύπο του προβλήματος κάποιες φορές δεν είναι αμελητέο. Το σφάλμα μπορεί να οφείλεται ακόμα και σε απλοποιήσεις παραδοχών αλλά φανερώνει ότι για τιμές κοντά στα άκρα της καμπύλης του συντελεστή  $K$  (Σχήμα 8) ο κώδικας αποδίδει με μικρότερη ακρίβεια.

#### 4.2.2 Απότομη μείωση διατομής.

Με σκοπό την πληρέστερη κατανόηση της συμπεριφοράς του κώδικα σε προβλήματα που αφορούν απότομη μεταβολή διατομής, καταστρώθηκε ανάλογος κώδικας με απότομη μείωση. Η διάταξη του προβλήματος παρουσιάζεται στον Πίνακα 7. Ενώ στιγμιότυπα από την ροή φαίνονται στις Εικόνες 18, 19.

Διαστάσεις	2
Διάσταση x άξονα	1.10E-03
Διάσταση y άξονα	1.10E-03
Boundary conditions	ffp
c(m/s)	0.1
$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	1000
h(m)	6.50E-05
v(m <sup>2</sup> /s)	1.00E-06
A <sub>2</sub> /A <sub>1</sub>	0.8356
Particles	3872
dt(sec)	5.00E-05
run	3.00E+04

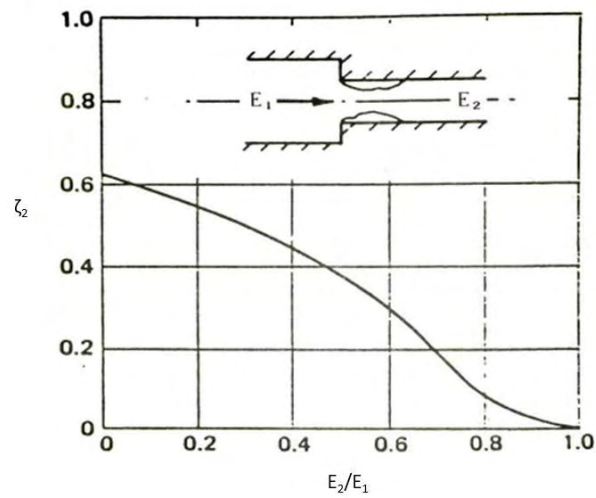
Πίνακας 7, Διάταξη προβλήματος απότομης στένωσης διατομής.

Όπως φαίνεται στην Εικόνα 18 στο σημείο της στένωσης παρατηρείται αποκόλληση της ροής κοντά στο τοίχωμα όπως αναμενόταν από την βιβλιογραφία. Στην επιφάνεια αυτή έχουμε την μέγιστη στένωση (vena contracta). Λόγω αυτής της ιδιομορφίας παρατηρούνται τοπικές απώλειες που οφείλονται στην μεταβολή της ροής από την διατομή 3 στην διατομή 2, δηλαδή σε αύξηση της διατομής (Λιακόπουλος, 2016). Προσεγγιστικά οι απώλειες μηχανικής ενέργειας δίνονται από τον παρακάτω τύπο (εξίσωση 4.2.4) ενώ αντίστοιχα και σε αυτήν την περίπτωση υπάρχει ένα γράφημα που συνδέει τον συντελεστή τοπικών απωλειών με τον λόγο των δύο εμβαδών.

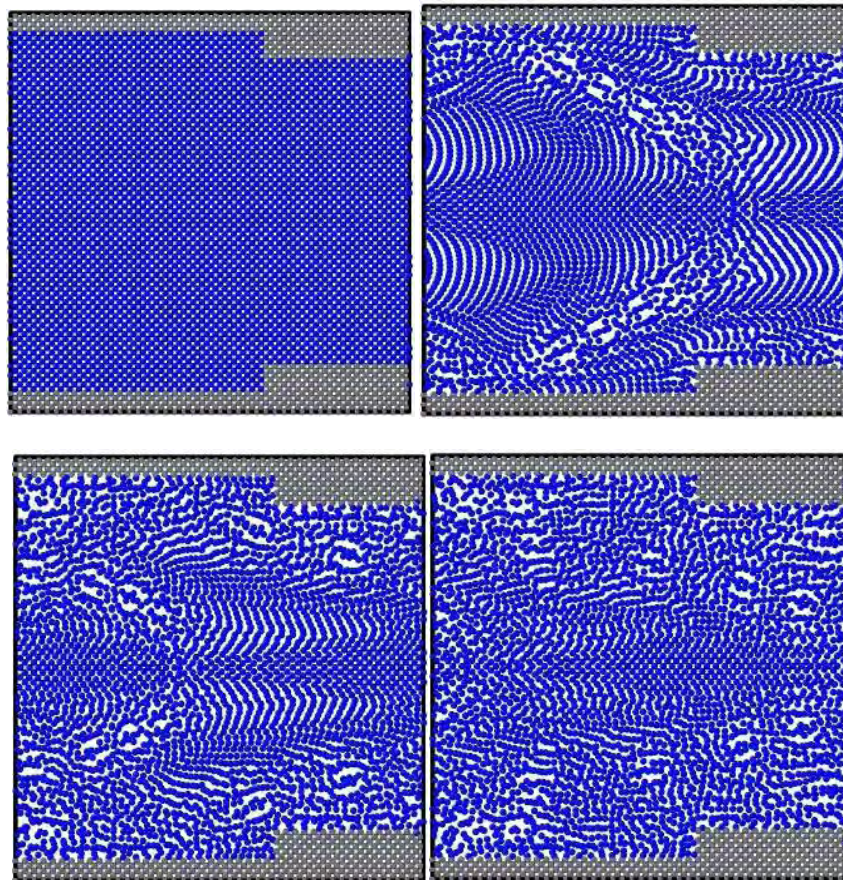
$$H_l = \left(1 - \frac{A_3}{A_2}\right)^2 \frac{V_3^2}{2g}$$

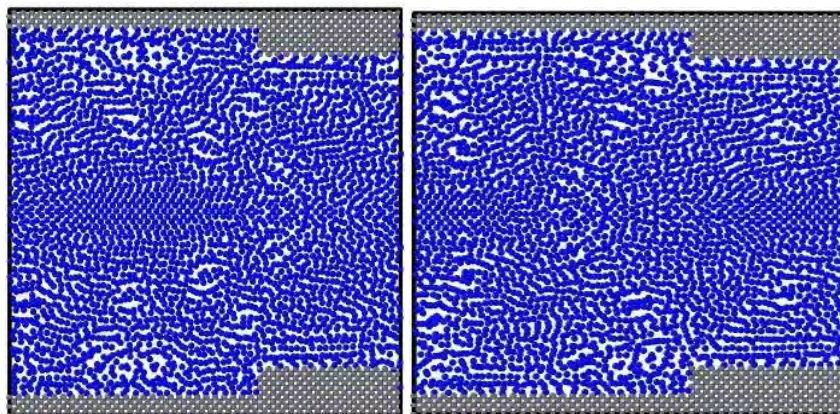
4.2.4, Τύπος υπολογισμού απωλειών μηχανικής ενέργειας στην περίπτωση της απότομης μείωσης της διατομής.

Την τιμή του  $K$  την λαμβάνουμε από το διάγραμμα που βρίσκεται στο Σχήμα 9 και για προς μελέτη μοντέλο με λόγο εμβαδών ίσο περίπου με 0.84 θεωρείται τιμή  $K=0.08$ .

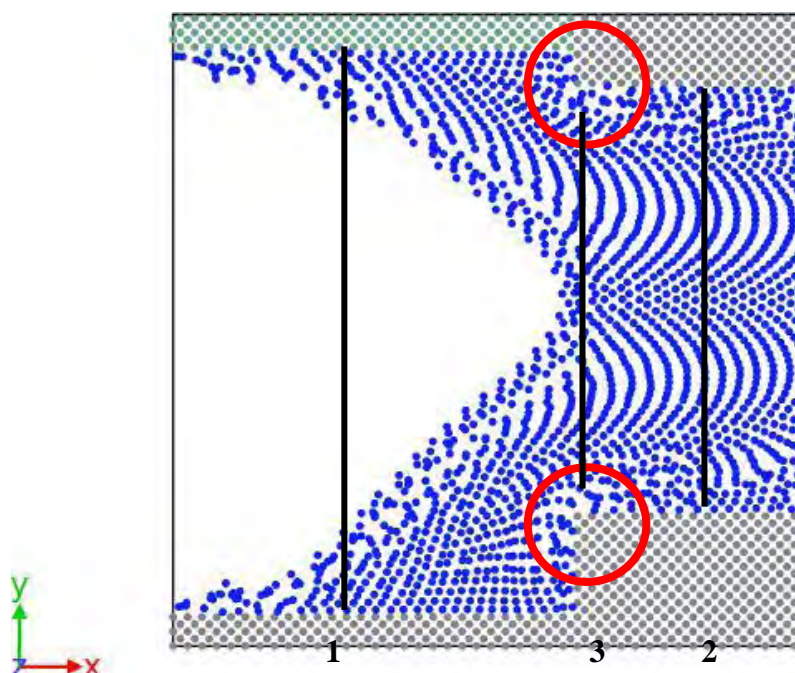


Σχήμα 9, Συντελεστής τοπικών απωλειών  $K$  συναρτήσει του λόγου των εμβαδών των δύο διατομών στην περίπτωση της απότομης μείωσης της διατομής.





Εικόνα 18, Στιγμιότυπα της ροής μέσα από απότομη μείωση της διατομής.



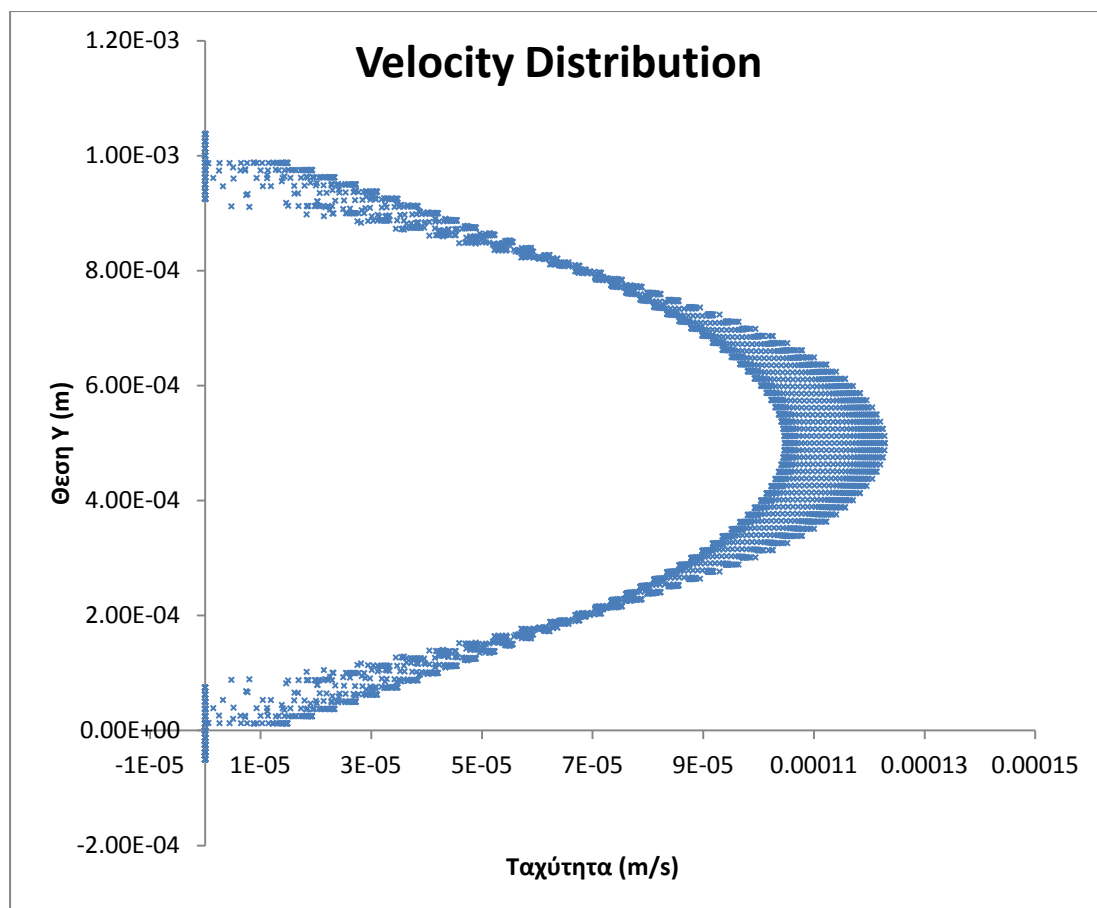
Εικόνα 19, Στιγμιότυπο κοντά στο σημείο της στένωσης για περίπτωση μείωσης της διατομής κατά 25%.

Η κατανομή των ταχυτήτων φαίνεται στο Διάγραμμα 4.2-5 ενώ η ταχύτητα των σωματιδίων συναρτήσει της θέσης  $X$  φαίνεται στο Διάγραμμα 4.2-6. Απο το διάγραμμα προκύπτει ότι η τιμή της ταχύτητας στη θέση 1 ισούται περίπου με  $5.8 \cdot 10^{-5}$  m/s ενώ στη θέση 2 με  $7.1 \cdot 10^{-5}$  m/s. Χρησιμοποιώντας την εξίσωση συνέχειας (εξίσωση 4.2.5) προκύπτει ότι και αυτό το μοντέλο ανταποκρίνεται καλά σε σύγκριση με την αναλυτική επίλυση πράγμα που σημαίνει ότι αναμένονται σχετικά ακριβή προβλήματα και στο βασικό ερώτημα της εργασίας που είναι η μελέτη της ροής σε αγωγό ελεύθερης επιφάνειας με πορώδες υπόστρωμα.

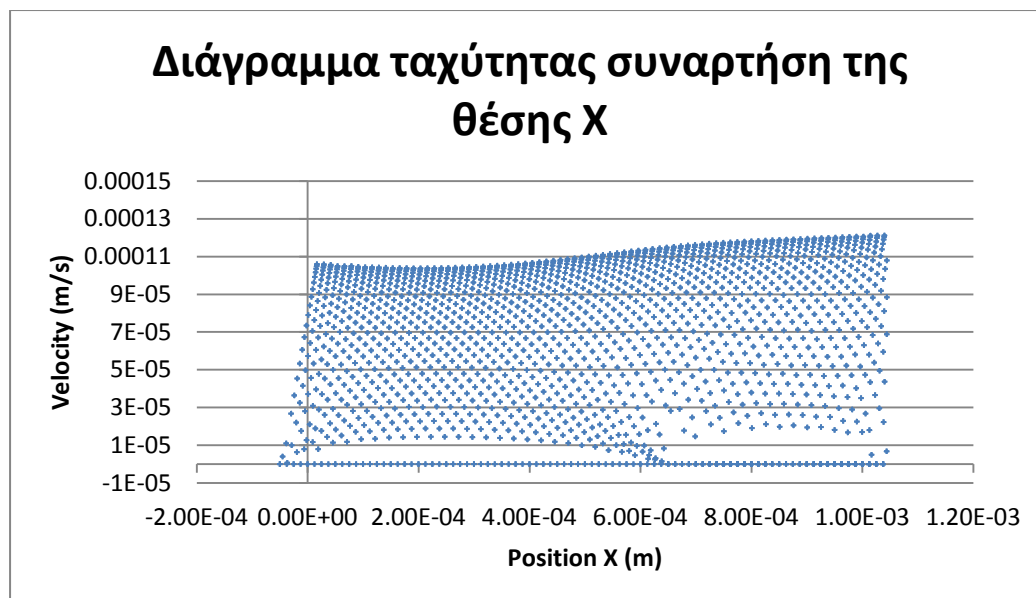
$$A_1 V_1 = A_2 V_2 \leftrightarrow V_1 = 0.8356 V_2$$

#### 4.2.5, Εξίσωση συνέχειας για περίπτωση ροής με απότομη μείωση της διατομής.



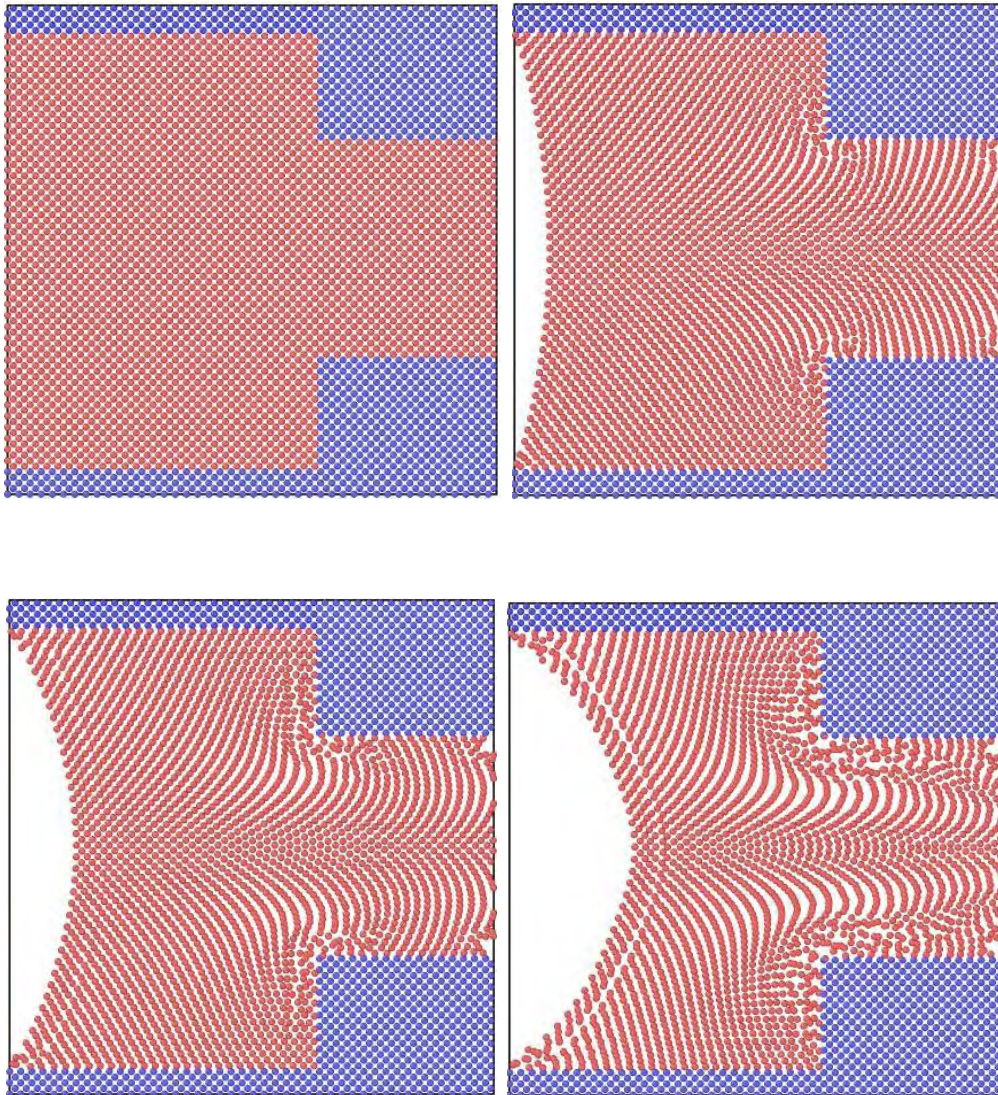


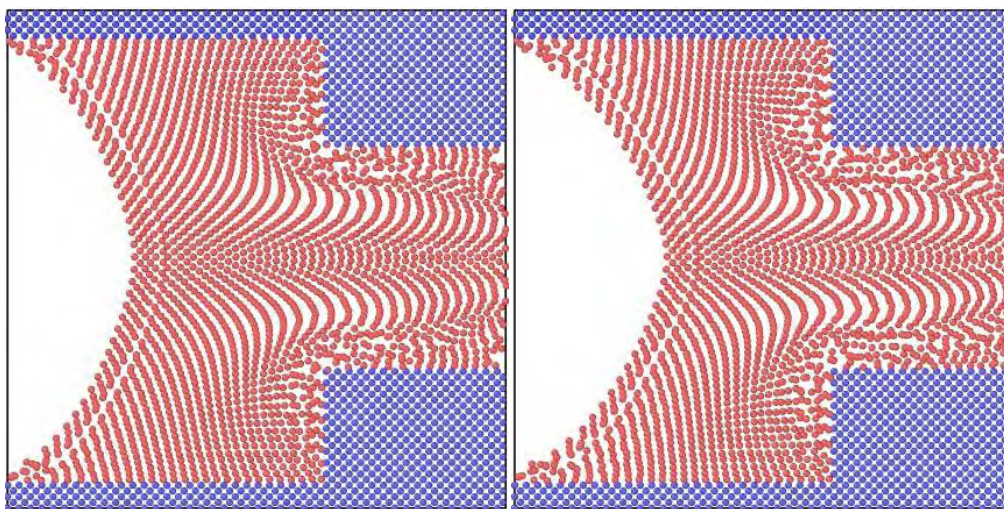
Διάγραμμα 4.2-5, Προφίλ ταχυτήτων σε ροή κλειστού αγωγού με απότομη μείωση της διατομής.



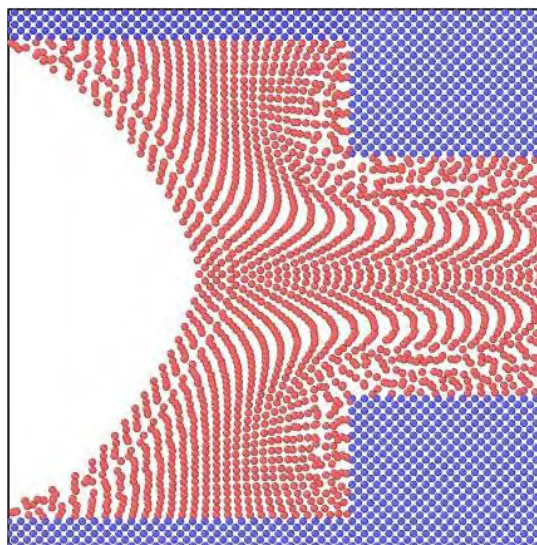
Διάγραμμα 4.2-6, Ταχύτητα σωματιδίων συναρτήση της θέσης στον οριζόντιο άξονα X. Ροή σε κλειστό αγωγό με απότομη μείωση της διατομής.

Με όμοιο σκεπτικό που ακολουθήθηκε στην περίπτωση της απότομης αύξησης της διατομής έτσι και στην περίπτωση της απότομης μείωσης για λόγους πληρότητας δημιουργήθηκε και ένα δεύτερο μοντέλο με μείωση διατομής στο 50% της αρχικής. Όλα τα υπόλοιπα χαρακτηριστικά του κώδικα παρέμεινα ίδια. Στιγμιότυπα της ροής φαίνονται στις Εικόνες 20,21 και το αντίστοιχο προφίλ των ταχυτήτων συναρτήσει του κατακόρυφου άξονα αποτυπώνεται στο Διάγραμμα 4.2-7. Σε αυτήν την περίπτωση εξαιτίας της μεγαλύτερης μείωσης στην διατομή φαίνεται πιο ξεκάθαρα το φαινόμενο της ανακυκλοφορίας και της επιπλέον στένωσης (vena contracta).

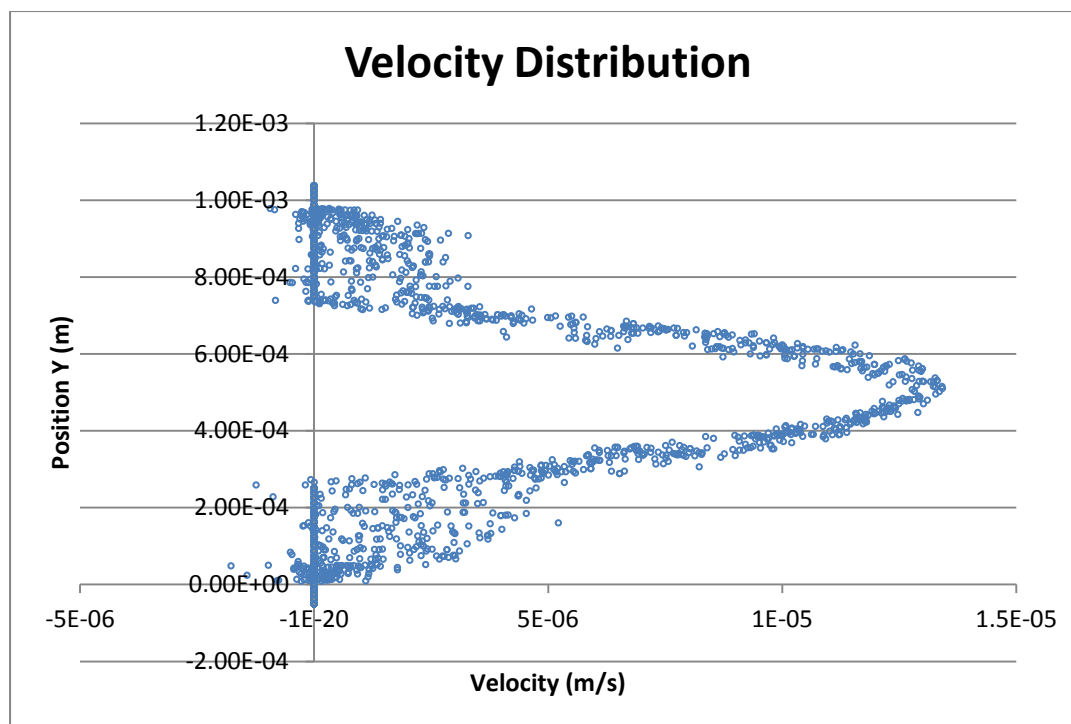




Εικόνα 20, Στιγμιότυπα της ροής σε κλειστό αγωγό με απότομη μείωση της διατομής στο 50% της αρχικής.



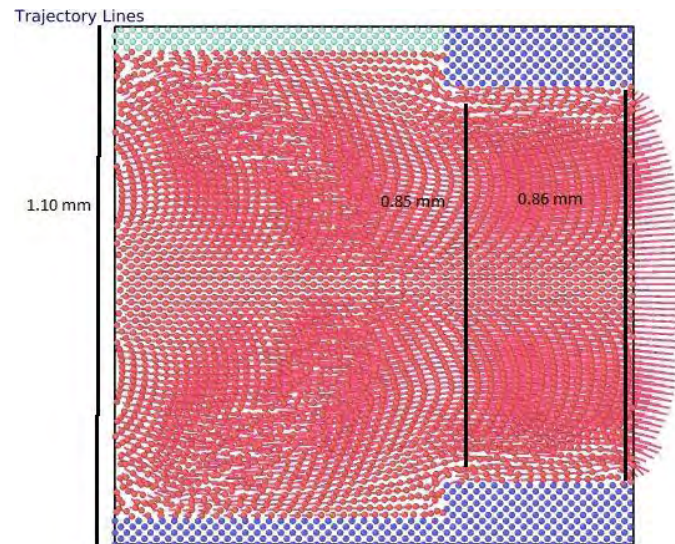
Εικόνα 21, Ζώνες ανακυκλοφορίας και vena contracta σε περίπτωση ροής με απότομη μείωση της διατομής στο 50%



Διάγραμμα 4.2-7, Κατανομή των ταχυτήτων για ροή σε κλειστό αγωγό με απότομη μείωση της διατομής στο 50%

Σε σύγκριση με την περίπτωση όπου η μειωμένη διατομή (A2) ήταν μεγαλύτερη οι μέγιστες τιμές των ταχυτήτων δεν φαίνεται να επηρεάζονται. Αντίθετα αυτό που φαίνεται να μεταβάλλεται είναι η ανακατανομή των σωματιδίων δεδομένου ότι η διατομή με εμβαδό στο μισό της αρχικής ωθεί περισσότερα σωματίδια να κινηθούν αντίθετα από την αρχική κατεύθυνση της ροής δημιουργώντας όλα τα φαινόμενα που περιγράφηκαν παραπάνω, πολλά σωματίδια συγκεντρώνονται σε περιοχές που χαρακτηρίζονται από χαμηλές ταχύτητες.

Σε μία προσπάθεια να γίνει εκτίμηση του συντελεστή τοπικών απωλειών μέσω του μοντέλου, προς σύγκριση με την τιμή που λαμβάνεται από το Σχήμα 9 εισάγονται μέσω του προγράμματος Onito γραμμές ροής (trajectory lines) και θεωρείται χωρίς βλάβη της γενικότητας ότι οι τοπικές απώλειες οφείλονται στην μετάβαση από την μικρή διατομή (διατομή 3) η οποία δημιουργείται εξαιτίας των ζωνών ανακυκλοφορίας, στην μεγαλύτερη διατομή (διατομή 2). Γίνεται μία χονδροειδής εκτίμηση των διατομών όπως αυτή φαίνεται στην Εικόνα 22.



Εικόνα 22, Trajectory Lines για την περίπτωση μείωσης της διατομής με λόγο εμβαδών 0.84 (1η περίπτωση)

Παρατηρείται ότι ο λόγος του εμβαδού μεταξύ της διατομής 3 και 2 που αντιστοιχεί σε μία τιμή  $K$  από το σχήμα 8 (περίπτωση αύξησης διατομής) ισούται με 0.988 το οποίο δίνει μία εξαιρετικά μικρή τιμή για τον υπολογισμό του συντελεστή  $K$  που θεωρείται 0.02 Από το Σχήμα 9 λήφθηκε ως χαρακτηριστική η τιμή 0.08 οπότε η σύγκριση θεωρείται μη ικανοποιητική, παρόλα αυτά αξίζει να σημειωθεί ότι σε κάποιο μοντέλο με μεγαλύτερη γεωμετρία και εντονότερα φαινόμενα η σύγκριση θα έδινε μικρότερο σφάλμα. Για την δεδομένη μελέτη δεν μπορεί να γίνει ακριβής εκτίμηση του συντελεστή τοπικών απωλειών για την περίπτωση της μείωσης στην διατομή, χωρίς την βοήθεια του διαγράμματος που φαίνεται στο Σχήμα 9.

## 5 ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΚΑΙ ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΕΛΕΥΘΕΡΗΣ ΕΠΙΦΑΝΕΙΑΣ.

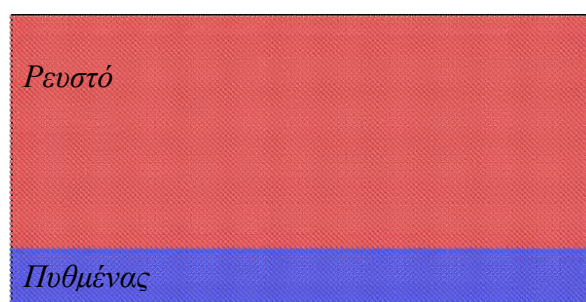
Στην περίπτωση της προσομοίωσης ενός ανοιχτού αγωγού, επιπλέον δυσκολία προστίθεται από την έννοια της ελεύθερης επιφάνειας. Η ελεύθερη επιφάνεια πρέπει να εισαχθεί στον κώδικα ως ένα όριο (boundary), το οποίο όριο δεν μπορεί να είναι σταθερό και να ασκεί αποστικές δυνάμεις στην ροή, όπως στην περίπτωση της ροής Poiseuille.

### 5.1 Προσομοίωση ροής με ελεύθερη επιφάνεια και αδιαπέρατο πυθμένα.

Η διάταξη του προβλήματος φαίνεται στον Πίνακα 8. Έγινε η προσπάθεια για προσομοίωση μοντέλου με μεγαλύτερες διαστάσεις όσον αφορά την γεωμετρία του προβλήματος, όμως λόγω εξαιρετικά μεγάλου υπολογιστικού φόρτου και πολύπλοκων σχέσεων μεταξύ των σωματιδίων είναι εφικτή η «μεγέθυνση» έως και την τάξη εκατοστών. Η διάταξη του προβλήματος όπως αυτή αποτυπώνεται στο περιβάλλον Onito φαίνεται στην Εικόνα 23.

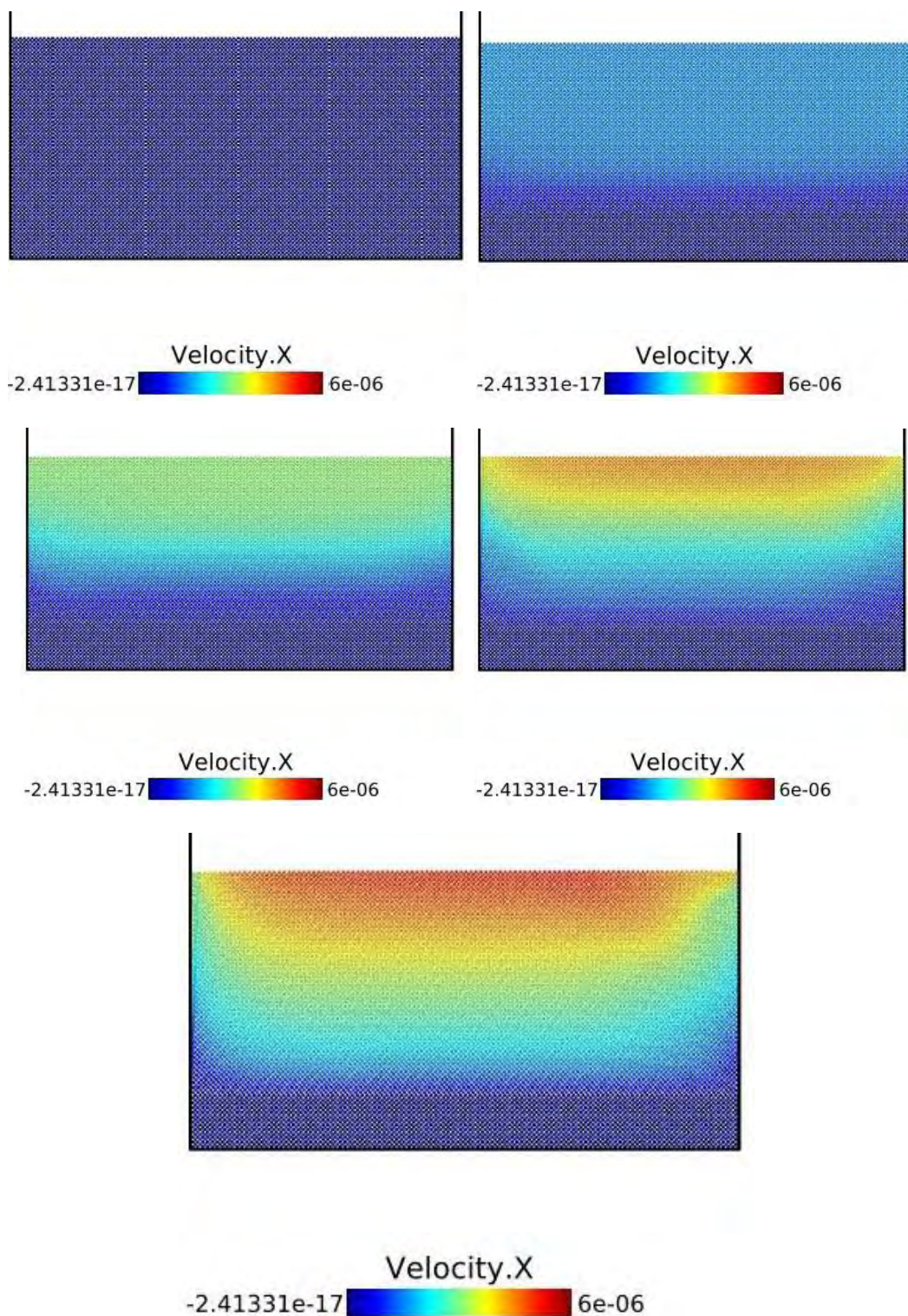
Διαστάσεις	2
Διάσταση x άξονα	0.01
Διάσταση y άξονα	0.005
Boundary conditions	ρfp
c(m/s)	0.1
$\rho(\text{kg/m}^3)$	1000
h(m)	6.50E-05
$\nu(\text{m}^2/\text{s})$	1.00E-06
Particles	12769
dt	5.00E-04
run	3.00E+06

Πίνακας 8, Διάταξη προβλήματος προσομοίωσης ροής με ελεύθερη επιφάνεια και αδιαπέρατο πυθμένα.



Εικόνα 23, Διάταξη προβλήματος ροής σε ανοιχτό αγωγό με αδιαπέρατο πυθμένα.

Αντίστοιχα στιγμιότυπα της ροής για διαφορετικές χρονικές στιγμές φαίνονται στην Εικόνα 24 .



Εικόνα 24, Στιγμιότυπα της ροής σε ανοιχτό αγωγό με αδιαπέρατο πυθμένα.

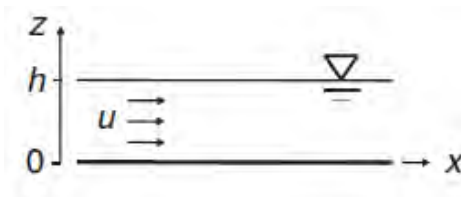
Στα Διαγράμματα 5.1.1 και 5.1.2 φαίνονται τα αντίστοιχα προφίλ των ταχυτήτων συναρτήσει της θέσεις των σωματιδίων στον κατακόρυφο και οριζόντιο άξονα αντίστοιχα. Για την αξιολόγηση των αποτελεσμάτων επιστρατεύονται αναλυτικές λύσεις για το πεδίο της ταχύτητας όπως αυτές προέκυψαν από ανασκόπηση της βιβλιογραφίας.

Κατά τον Morishita (2008) για την περίπτωση της ομοιόμορφης ροής η ταχύτητα θεωρείται σταθερή κατά την διεύθυνση του οριζόντιου άξονα. Η τιμή της ταχύτητας αυτή απορρέει από την εξίσωση Bernoulli (εξίσωση 5.1.1)

$$\frac{u^2}{2g} + \frac{P}{\rho g} + z = \frac{u^2}{2g} + h = h_o$$

#### 5.1.1, Εξίσωση Bernoulli.

Όπου  $h_o$  είναι το ύψος της συνολικής ενέργειας της ροής (total head), στοιχεία που αποτυπώνονται στην Εικόνα 24.  $P$  είναι η στατική πίεση.



Εικόνα 25 , Ομοιόμορφη ροή ανοιχτού αγωγού(Morishita, 2008).

Για ένα δεδομένο ρυθμό ροής (flow rate), με  $q=uh$  η εξίσωση 5.1.1 μπορεί να πάρει την εξής μορφή:

$$\frac{q^2}{2gh^2} + h = h_o$$

#### 5.1.2, Κυβική εξίσωση του $h$ για καθορισμένη τιμή του $h_o$ με δεδομένη παροχή.

Για δεδομένη παροχή χρησιμοποιώντας το πρόγραμμα «Mathematica®» είναι δυνατό να βρεθεί η σχέση που αποτυπώνει την συνάρτηση του  $h$  με το  $h_o$  (εξίσωση 5.1.3).

$$h = \frac{h_o}{3} \left( 1 + C + \frac{1}{C} \right)$$

#### Εξίσωση 5.1.3

Όπου  $h$  περιγράφει το βάθος ροής που στην περίπτωση του προβλήματος που αναλύεται θα ονομάζεται  $y$ . Ο όρος  $C$  είναι μία σταθερά που η σχέση με την οποία υπολογίζεται προκύπτει από την κρίσιμη ροή, εκεί που  $Fr=1$  και η ταχύτητα και το βάθος είναι τα μέσα. Με χρήση των παραπάνω εξισώσεων είναι δυνατό να καταστρωθούν σχέσεις που να δίνουν την τιμή της ταχύτητας συναρτήσει του  $h_o$ , ανάλογα με το αν η ροή είναι κρίσιμη, υποκρίσιμη ή υπερκρίσιμη, κάνοντας έτσι της σχέσεις μη αποδεκτές για την παρούσα μελέτη δεδομένου ότι δεν μπορεί να ειπωθεί με βεβαιότητα το είδος της ροής.

Η κινητήριος δύναμη στο μοντέλο της ροής με ελεύθερη επιφάνεια είναι μία εξωτερική δύναμη η οποία ασκείται σε κάθε σωματίδιο μέσω εντολής που καθορίζει την τιμή της δύναμης σε οποιαδήποτε κατεύθυνση μετρούμενη σε Newton (N). Βάση του παραπάνω σκεπτικό γίνεται η θεώρηση ότι η ροή ταιριάζει με την ροή υμενίου σε κεκλιμένο επίπεδο, με διαφορά ότι στο μοντέλο υπάρχει μία εξαιρετικά μικρή κλίση



του πυθμένα και η επιτάχυνση της βαρύτητας έχει μηδενιστεί. Το αίτιο της ροής είναι η εξωτερική δύναμη που λειτουργεί ως μία βαθμίδα πίεσης. Από την εξίσωση N-S για κατεύθυνση ροής στον  $x$ -άξονα (εξίσωση 2.2.23) και μέσω των απλοποιήσεων που αναφέρθηκαν προκύπτει η εξίσωση:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = -\frac{S}{\mu} \sin \theta = \text{σταθ.}$$

#### Εξίσωση 5.1.4

Όπου  $S$  αντιπροσωπεύει το γινόμενο της βαρύτητας επί την πυκνότητα που στην παρούσα εργασία αντικαθίσταται από την εξωτερική δύναμη. Με σκοπό να γίνει έλεγχος της ορθότητας αυτής της σκέψης ακολουθεί ποσοτική ανάλυση. Στην περίπτωση της ροής στο υμένιο η κινητήριοις δύναμη είναι η συνιστώσα της βαρύτητας  $W \sin \theta$ . Βάση 2<sup>ου</sup> νόμου του Νεύτωνα ισχύει:

$$W \sin \theta = M g \sin \theta$$

#### Εξίσωση 5.1.5

Όπου  $M$  είναι η συνολική μάζα της ροής που απαρτίζεται από  $N$  αριθμό σωματιδίων ( $N_p$ ). Προκύπτει ότι  $M = m_p * N_p$  με τον δείκτη « $p$ » να δείχνει ότι αναφέρεται σε σωματίδια (particles).

$$m_p N_p * g * \sin \theta = \text{addforce} * N_p$$

#### Εξίσωση 5.1.6

Η εξωτερική δύναμη που έχει επιβληθεί είναι της τάξης του  $5 * 10^{-10}$  ενώ η μάζα του εκάστοτε σωματιδίου είναι  $4 * 10^{-6}$ . Από αντικατάσταση στην εξίσωση 5.1.6 προκύπτει μία τιμή κλίσης  $S = \sin \theta = 10^{-5}$  η οποία μπορεί να θεωρηθεί αποδεκτή.

Λαμβάνοντας υπόψη τις συνοριακές συνθήκες του προβλήματος που είναι η συνθήκη μη ολίσθησης στην στερεή επιφάνεια και η αμελητέα διατμητική τάση στην ελεύθερη επιφάνεια (Λιακόπουλος, 2016), προκύπτει η εξίσωση που δίνει τις τιμές των ταχυτήτων συναρτήσει του βάθους ροής (εξ. 5.1.7)

$$u(y) = \frac{g \sin \theta}{\nu} y \left( d - \frac{y}{2} \right)$$

Εξίσωση 5.1.7, Αναλυτικός τύπος υπολογισμού ταχύτητας συναρτήσει του βάθους για ροή σε ανοιχτό αγωγό.

Η παραπάνω λύση εισάγεται στο Διάγραμμα 5.1-1 για αξιολόγηση των αποτελεσμάτων του κώδικα. Φαίνεται ότι η αναλυτική λύση ακόμα και κατόπιν παραδοχής να πλησιάζει τα αποτελέσματα που εξήχθησαν από το μοντέλο ακόμα και σε μικρές διαστάσεις. Προκειμένου να γίνει σύγκριση με πραγματικά δεδομένα καταστρώθηκε και μοντέλο τυρβώδους ροής στιγμιότυπα του οποίου φαίνονται στην Εικόνα 26. Μέσω κριτηρίων ομοιότητας κατά  $Fr$  τα αποτελέσματα θα μπορούσαν να συγκριθούν με πειραματικά δεδομένα και πραγματικά προβλήματα. Με σκοπό να

γίνει σύγκριση με μεστά δεδομένα γίνεται έλεγχος ομοιότητας κατά Fr και Reynolds μεταξύ του ομοιώματος, το οποίο θεωρούμε ότι είναι το μοντέλο τυρβώδους ροής Διάγραμμα 5.1.3, και του πραγματικού. Για την περίπτωση του πραγματικού προβλήματος επιστρατεύεται η μελέτη των Jin & Liao (2019). Στην ερευνά τους μελέτησαν την κατανομή των ταχυτήτων με χρήση ενός οργάνου Large-Scale Particle Image Velocimetry (LSPIV), για ένα τμήμα του ποταμού Milwaukee, (Wisconsin, U.S.A). Μετά από σειρά μετρήσεων που αφορούσαν μία περιοχή του ποταμού μήκους περίπου 22 μέτρων και πλάτος περίπου 64 μέτρων κατέληξαν σε κάποιες χαρακτηριστικές τιμές ταχύτητας. Τα αποτελέσματα από το πείραμα των δύο μελετητών φαίνονται στον Πίνακα 9.

Date	$H_m$ (m)	$H_D$ (m)	$Q_{LSPIV}$ ( $m^3 s^{-1}$ )	$U$ ( $m s^{-1}$ )	$t$ ( $10^{-3} m^2 s^{-3}$ )
28-10-16	0.942	0.972	54.1	1.276	5.19
05-11-16	0.645	0.648	34.3	0.867	3.24
11-11-16	0.399	0.378	1.4	0.633	2.32
24-11-16	0.254	0.234	7.1	0.415	1.41
30-11-16	0.755	0.752	30.5	0.904	2.74
30-11-16	0.7668	0.846	38.3	1.075	3.79

Πίνακας 9, Περίληψη πειραματικών δεδομένων από μετρήσεις στον ποταμό Milwaukee (Jin & Liao, 2019)

Όπου  $H_m$  είναι το εκτιμώμενο βάθος ενώ  $H_D$  είναι το βάθος που μετρήθηκε απευθείας από τον ποταμό. Η Ταχύτητα  $U$  είναι ο μέσος όρος των ταχυτήτων που μετρήθηκαν στην επιφάνεια για την εκάστοτε χρονική στιγμή.

Από κριτήριο ομοιότητας κατά Reynolds πρέπει να ισχύει:

$$\frac{V_m}{V_p} = \frac{L_p \nu_m}{L_m \nu_p}$$

#### Εξίσωση 5.1.8

Αν υποθεθεί ότι και στις δύο περιπτώσεις το ρευστό που είναι το νερό χαρακτηρίζεται από όμοιο κινηματικό ιξώδες τότε προκύπτει ότι ο λόγος των ταχυτήτων μοντέλου και πραγματικών δεδομένων πρέπει να είναι αντιστρόφως ανάλογος του λόγου των εμβαδών τους, πράγμα που δεν ικανοποιείται για το παρόν μοντέλο καθώς οι δύο λόγοι έχουν μεγάλη διαφορά.

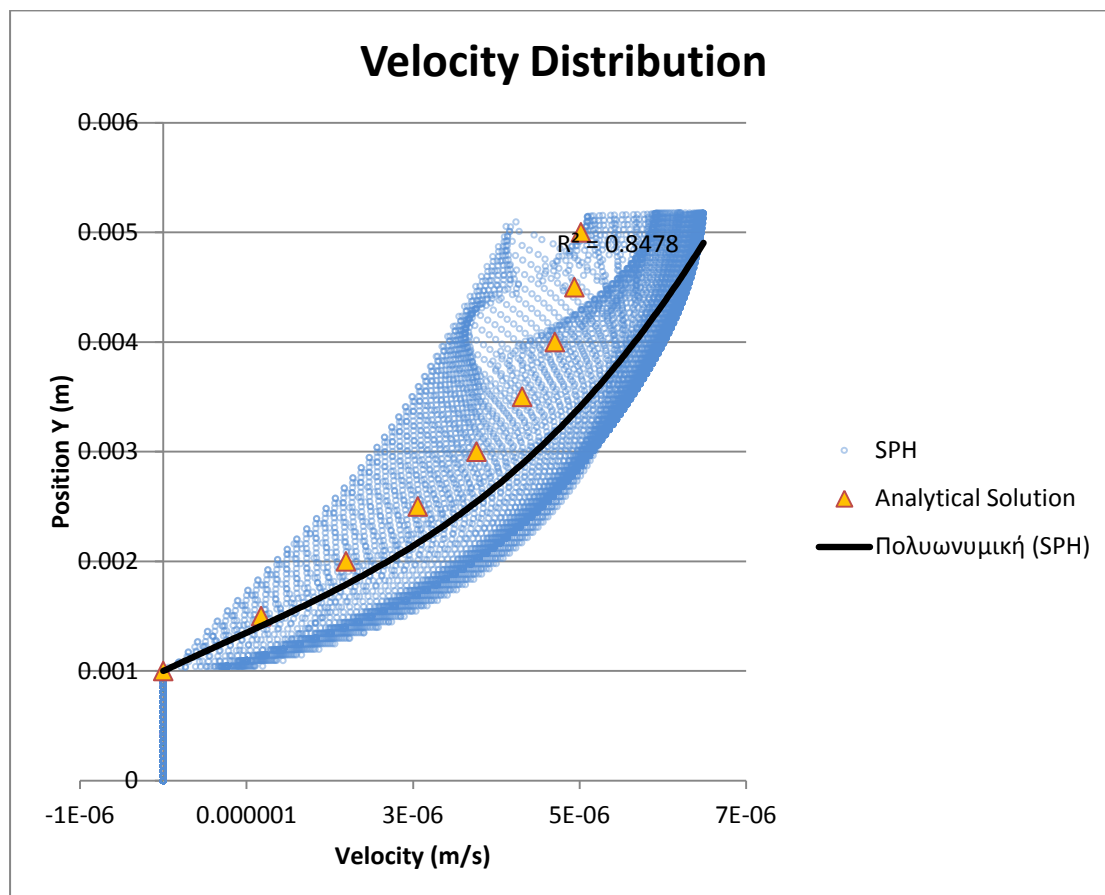
Όσον αφορά την υδραυλική ομοιότητα κατά Froude πρέπει να ισχύει:

$$\frac{V_m}{V_p} = \sqrt{\frac{L_m}{L_p}}$$

#### Εξίσωση 5.1.9

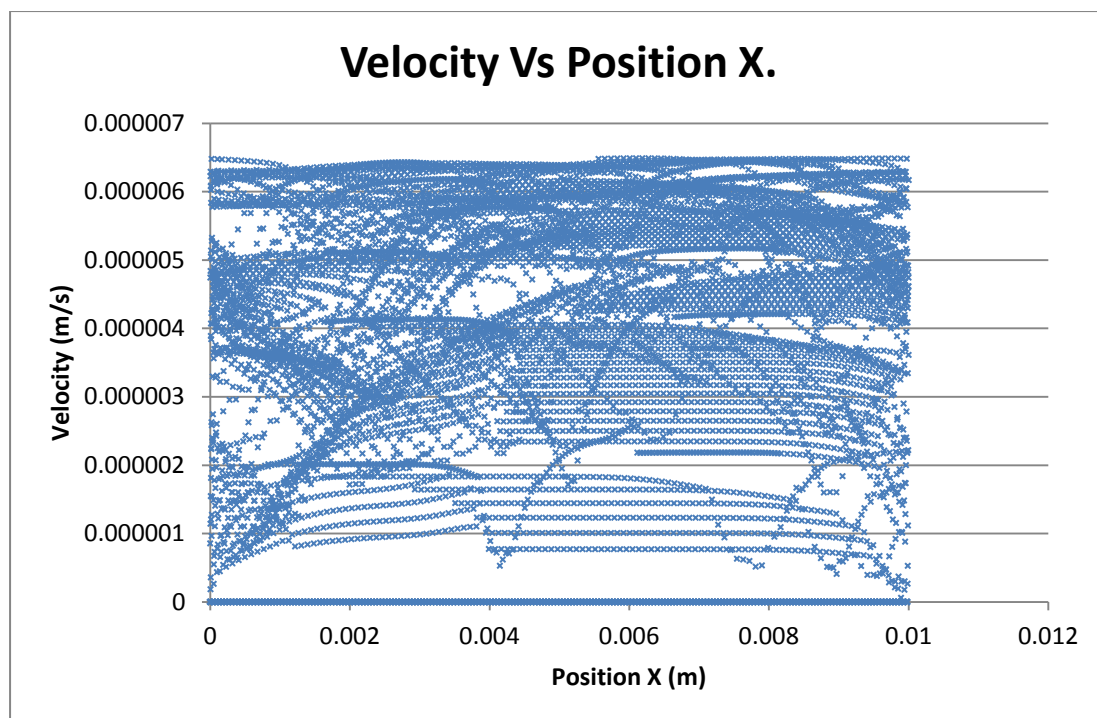
Και σε αυτή την περίπτωση ακόμα και αν τα αποτελέσματα είναι πιο κοντά σε σχέση με το κριτήριο ομοιότητας κατά Reynolds το σφάλμα είναι αρκετά μεγάλο. Παρόλα

αυτά η κατανομή των ταχυτήτων φαίνεται να βρίσκεται σε καλή θέση συγκριτικά με την αναλυτική λύση.

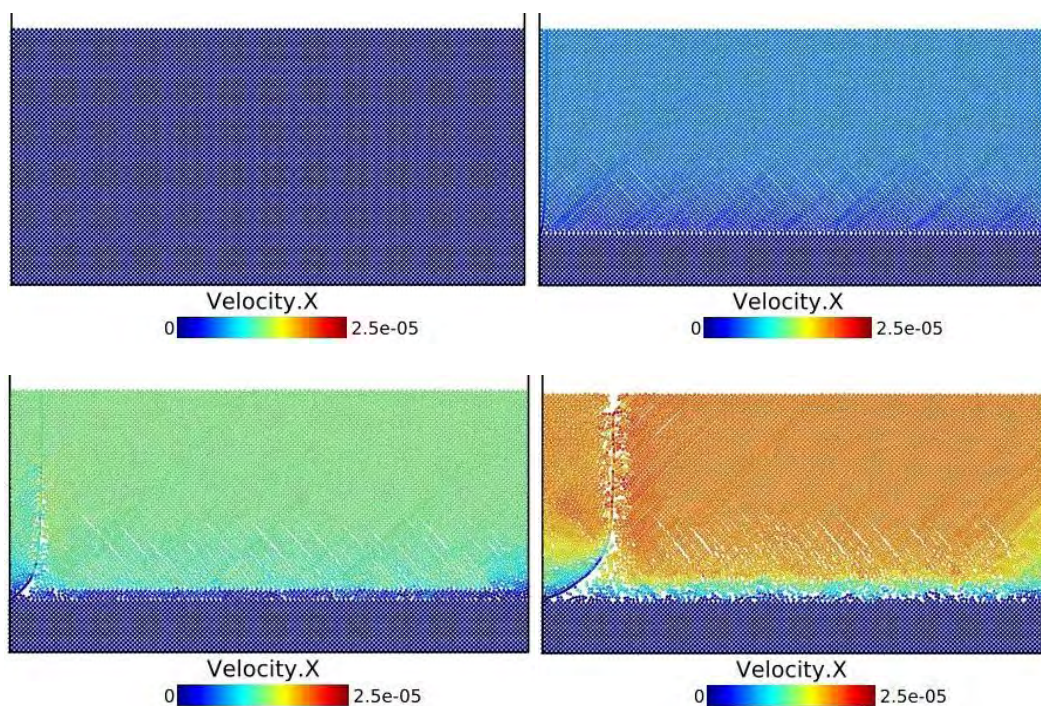


Διάγραμμα 5.1-1, Κατανομή των ταχυτήτων για την περίπτωση ομοιόμορφης ροής σε ανοιχτό αγωγό με αδιαπέρατο πυθμένα.

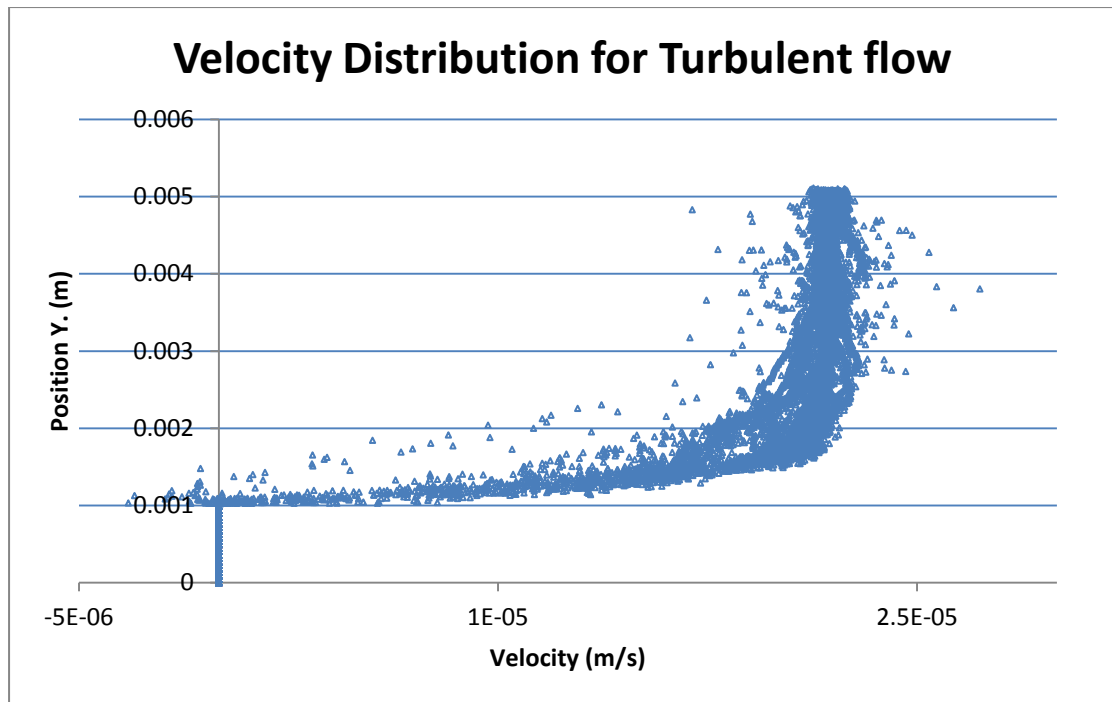
Η απόκλιση που φαίνεται στο σχήμα οφείλεται σε σωματίδια που λόγω υπολογιστικού σφάλματος έχουν μικρότερη ταχύτητα από τον υπόλοιπο όγκο των σωματιδίων, επηρεάζοντας έτσι την πολυωνυμική γραμμή τάσης.



Διάγραμμα 5.1-2, Κατανομή των ταχυτήτων κάθε σωματιδίου συναρτήσει της θέσεως του στον οριζόντιο άξονα.



Εικόνα 26, Στιγμιότυπα τυρβώδους ροής σε ανοιχτό αγωγό.

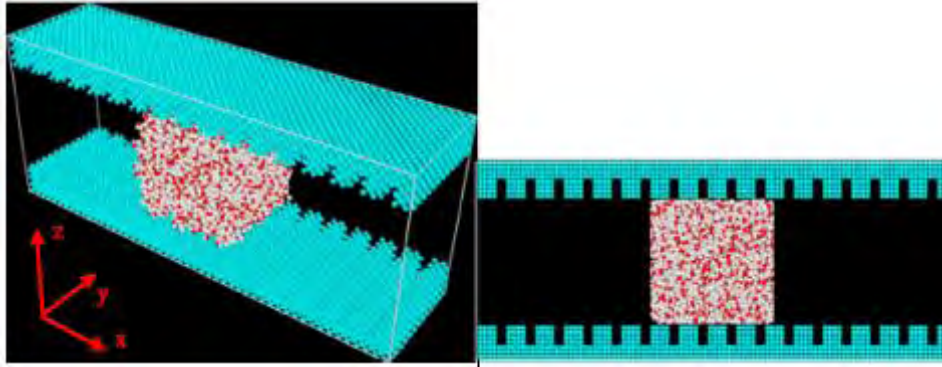


Διάγραμμα 5.1-3, Κατανομή των ταχυτήτων για κάθε σωματίδιο στην περίπτωση της τυρβώδους ροής σε ανοιχτό αγωγό.

## 5.2 Προσομοίωση ροής με ελεύθερη επιφάνεια και πορώδες υπόστρωμα.

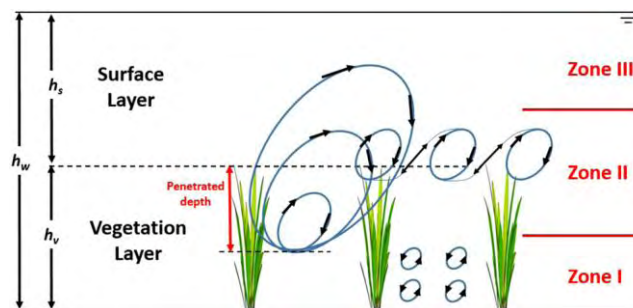
Με παρόμοια συλλογιστική αλλά πολυπλοκότερο κώδικα γίνεται η προσπάθεια της εισαγωγής ενός πορώδους στρώματος στην βάση του ίδιου καναλιού που προσομοιώθηκε στην παράγραφο 5.1. Ο βαθμός δυσκολίας αυξάνεται με ρυθμούς γεωμετρικής προόδου καθώς αφενός υπάρχει η ισχύουσα δυσκολία για το όριο (Boundary) που περιγράφει την ελεύθερη επιφάνεια και αφετέρου πρέπει να ενταχθεί ένα στρώμα (layer) το οποίο θα έχει ιδιότητες πορώδους, θα επιτρέπει δηλαδή στα μόρια του ρευστού (particles) να εισέρχονται μέσα σε αυτό και να αλληλεπιδρούν. Δεδομένου ότι έως πρότινος δεν υπάρχει κάποια εντολή στην βιβλιοθήκη του LAMMPS που να μπορεί να εισάγει απευθείας ένα τέτοιο στρώμα έγινα δύο προσπάθειες για την αποτύπωσή του. Η πρώτη σκέψη ήταν να δημιουργηθεί ένα στρώμα με πριονωτή γεωμετρία (Εικόνα 27) με τον συντελεστή πορώδους να υπολογίζεται ως το άθροισμα των περιοχών που είναι κενές προς το συνολικό όγκο του νέου στρώματος. Στην προσπάθεια υλοποίησης του προβλήματος αποδείχθηκε ότι ενώ λειτούργησε στην περίπτωση της μελέτης των Yuan et al. (2018) για την περιγραφή της υγρασίας σε αγωγό με νανοκλίμακα, δεν μπορούσε να αποτυπώσει το πρόβλημα της ροής με ελεύθερη επιφάνεια με ρεαλιστικό τρόπο. Η δεύτερη προσπάθεια η οποία είναι και η υλοποιήσιμη προϋποθέτει την εισαγωγή του νέου στρώματος με πολύ μικρές αποστικές δυνάμεις των μορίων του πορώδους προς τα μόρια του νερού ενώ παράλληλα μέσω της εντολής Lattice που ελέγχει την κατανομή των σωματιδίων στον χώρο επιλέχθηκε τιμή τέτοια που να επιτρέπει την είσοδο των μορίων του ρευστού εντός του στρώματος επηρεάζοντας έτσι την ροή με τον τρόπο που θα γινόταν σε ένα πραγματικό πρόβλημα. Η διάταξη του προβλήματος

παρουσιάζεται στον Πίνακα 10. Η διάταξη του προβλήματος φαίνεται στην Εικόνα 29 ενώ αντίστοιχα αποσπάσματα της ροής αποτυπώνονται στην Εικόνα 30.



Εικόνα 27, Γεωμετρία για το πορώδες υπόστρωμα μέσω γεωμετρίας που χρησιμοποιήθηκε για την επιρροή της τραχύτητας (Yuan et al., 2018)

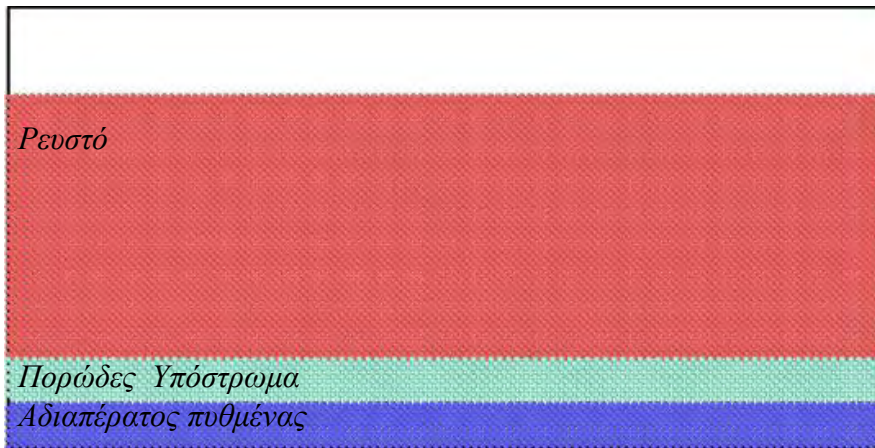
Όπως αναφέρθηκε και στην ανασκόπηση της βιβλιογραφίας το πορώδες υπόστρωμα μπορεί να ποικίλει από ένα αργιλώδες έδαφος, κροκάλες ή ακόμα και βλάστηση. Πολλές δημοσιεύσεις έχουν εστιάσει στο τρόπο που επιδρά η διαστρωμάτωση στην ροή εξαιτίας της τραχύτητας (roughness) που παρουσιάζει ο πυθμένας. Η τραχύτητα αυτή δημιουργεί μία ιδιαίτερη ροή στην διεπιφάνεια πορώδους ρευστού με ζώνες ανακυκλοφορίας (slip conditions). Από την έρευνα των Wang et al. (2019) για την επίδραση της τραχύτητας του πυθμένα στην κυρίως ροή γίνεται ξεκάθαρο ότι το μοντέλο έχει ποσοτική αναφορά με το πραγματικό πρόβλημα.



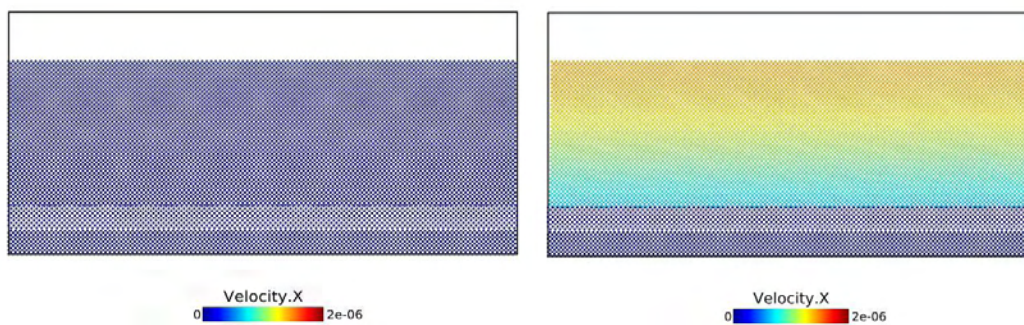
Εικόνα 28, Οι βασικές στρεπτικές δομές σε διάφορες περιοχές μιας φυτικής ζώνης σε ένα ευρύ κανάλι με την βλάστηση να είναι πλήρως βυθισμένη (Wang et al., 2019)

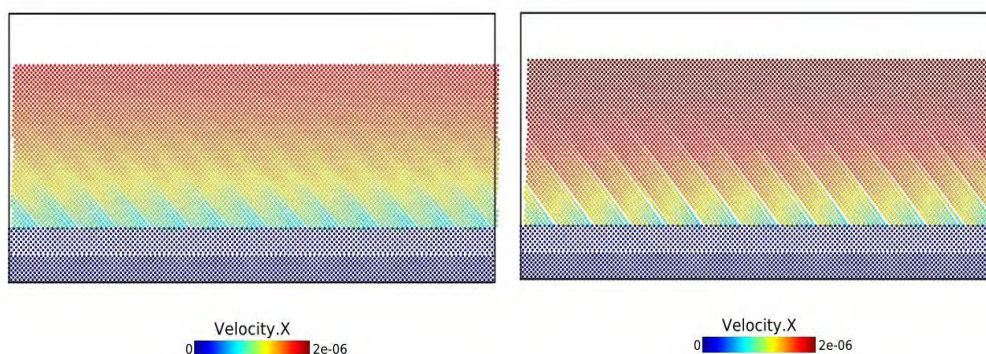
Διαστάσεις	2
Διάσταση x άξονα	0.01
Διάσταση y άξονα	0.005
Boundary conditions	fpp
c (m/s)	0.1
$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	1000
h(m)	6.50E-05
$\nu$ (m <sup>2</sup> /s)	1.00E-06
Πάχος πορώδους	0.0005
Πάχος αδιαπέρατου στρώματος	0.0005
Particles	10045
dt	5.00E-04
run	3000000

Πίνακας 10, Διάταξη προβλήματος ροής σε κανάλι με πορώδες υπόστρωμα.

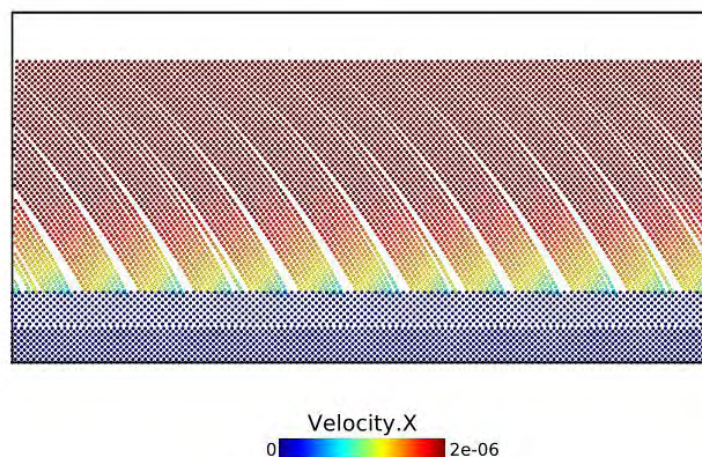


Εικόνα 29, Διάταξη προβλήματος ροής σε ανοιχτό αγωγό με πορώδες υπόστρωμα





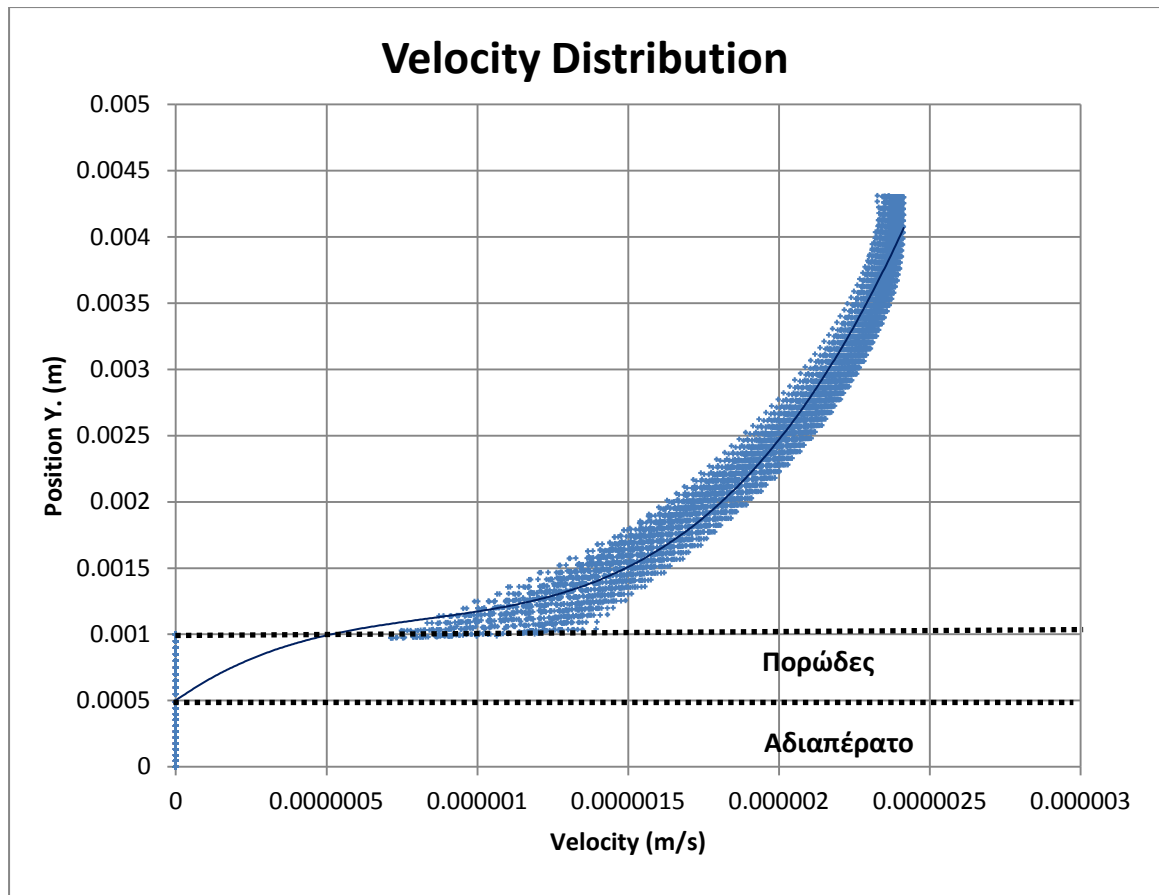
Εικόνα 30, Στιγμιότυπα της ροής σε κανάλι με πορώδη υπόστρωμα.



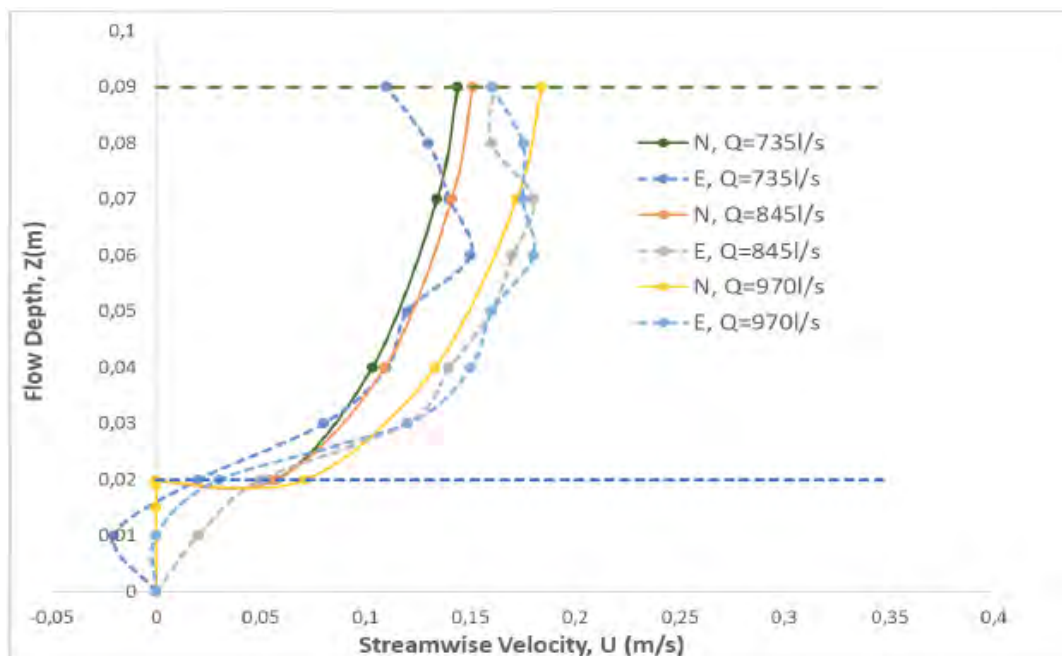
Εικόνα 31, Στιγμιότυπο αποκόλλησης ροής εξαιτίας της ύπαρξης του πορώδους πυθμένα.

Εξαιρετικό ενδιαφέρον παρουσιάζει και η σύγκριση του διαγράμματος που αποτυπώνει το προφίλ των ταχυτήτων κατά μήκος του αγωγού (Διάγραμμα 5.2.1). Από την έρευνα των Michalolias et al. (2018) προέκυψαν παρόμοια διαγράμματα που δείχνουν την κατανομή των ταχυτήτων σε όμοιο πρόβλημα, όπου N υποδηλώνει αριθμητική επίλυση (numerical analysis) ενώ E είναι τα διαγράμματα που προέκυψαν από πειραματικά δεδομένα (experimental analysis). Η αντίστοιχη ταχύτητα του εκάστοτε σωματιδίου συναρτήσει της θέσης που καταλαμβάνει στον οριζόντιο άξονα (κατεύθυνση της ροής) φαίνεται στο Διάγραμμα 5.2.3

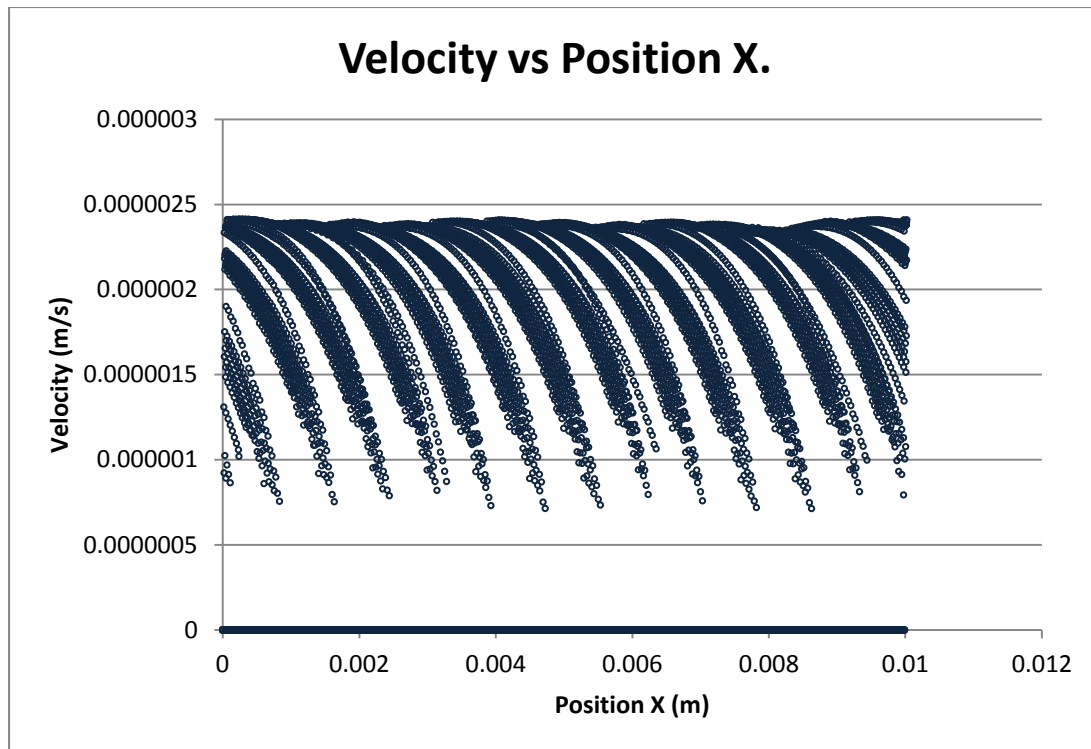




Διάγραμμα 5.2-1, Κατανομή των ταχυτήτων σε ροή ανοιχτού αγωγού με πορώδη πυθμένα.



Διάγραμμα 5.2-2, Κατανομή των ταχυτήτων σε κανάλι με πορώδη πυθμένα (Michalolias et al., 2018)



Διάγραμμα 5.2-3, Κατανομή των εκάστοτε ταχυτήτων κάθε σωματιδίου συναρτήσει της θέσης τους στην κατεύθυνση της ροής.

Όπως φαίνεται και από τα αντίστοιχα διαγράμματα η παρουσία του πορώδους έχει σημαντικές επιπτώσεις στην κυρίως ροή. Αφενός υπάρχει η ύπαρξη ταχύτητας, ακόμα και αν αυτή έχει εξαιρετικά μικρή τιμή, στον πυθμένα του ανοιχτού αγωγού. Αφετέρου η ροή που δημιουργείται στην διεπιφάνειας πορώδους και κύριας ροής (slip conditions), επηρεάζει τον τρόπο που κινούνται τα σωματίδια του νερού. Το παραπάνω φαινόμενο φαίνεται έντονα στο μοντέλο δεδομένου ότι το ρευστό αντιπροσωπεύεται από έναν αριθμό σωματιδίων που έχουν ατομικά χαρακτηριστικά ακόμα και αν επηρεάζονται από τα γειτονικά σωματίδια, αυτό εξηγεί και την φαινομενικά αποκοπή της ροής που φαίνεται στην Εικόνα 29. Αντίστοιχα σε κάποιο πραγματικό πρόβλημα η εικόνα που βλέπουν οι παρατηρητές φαίνεται στο Σχήμα 10.

Προκειμένου να αξιολογηθούν ποιοτικά και ποσοτικά τα αποτελέσματα, όπως και στην περίπτωση της ροής με αδιαπέρατο πυθμένα έτσι και για την περίπτωση της ροής με πορώδες υπόστρωμα γίνεται η προσπάθεια σύγκρισης με πραγματικά δεδομένα. Προκειμένου να γίνει πιο ρεαλιστικό το πρόβλημα και να μπορέσει να συγκριθεί με τα πραγματικά δεδομένα, τα οποία αναφέρονται σε τυρβώδη ροή, έγινε η προσπάθεια κατάστρωσης του μοντέλου με ακριβώς την ίδια γεωμετρία αλλά για τυρβώδη ροή. Όπως και στο παράδειγμα της ροής με αδιαπέρατο πυθμένα έτσι και σε αυτό συναντήθηκαν προβλήματα που αφορούν την εισαγωγή της τύρβης, τόσο στη μέθοδο SPH όσο και στον κώδικα LAMMPS, ειδικότερα ο κώδικας τερματίστηκε κάτω από αδιευκρίνιστες συνθήκες χωρίς να υπάρχει μείωση των σωματιδίων ή κάποιο από τα συνήθη σφάλματα που μπορεί να παρουσιαστούν. Στιγμιότυπα της

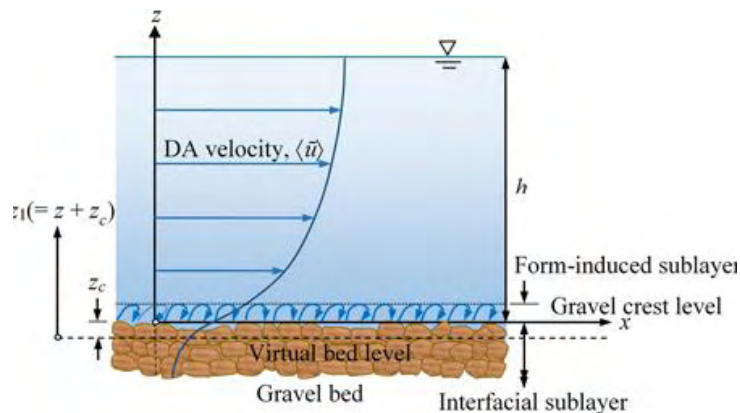
ροής φαίνονται στην Εικόνα 32. Το αντίστοιχο προφίλ των ταχυτήτων φαίνεται στο Διάγραμμα 5.2-4

Γίνεται σύγκριση με πειραματικά δεδομένα που προέκυψαν από την έρευνα των Keramaris et al. (2016). Η πειραματική διάταξη που στην παρούσα εργασία θα ληφθεί ως μέτρο σύγκρισης για την αξιολόγηση των αποτελεσμάτων φαίνεται στον Πίνακα 11. Εξετάστηκαν τιμές ταχυτήτων για διαφορετικά βάθη με ένα πορώδες υπόστρωμα πάχους 2 εκατοστών και ένα μήκος ροής 25m.

Flow Depth(cm)	$U_{mean}$ (m/s) (Keramaris et al., 2016)
7	0.149
9	0.129
11	0.101
13	0.084
7	0.167
9	0.143
11	0.109
13	0.089
7	0.186
9	0.153
11	0.116
13	0.098

Πίνακας 11, Αποτελέσματα μέσης ταχύτητας για διαφορετικά βάθη και παροχές από πειραματική ανάλυση ροής σε ανοιχτό αγωγό με πορώδη πυθμένα (Keramaris et al., 2016)

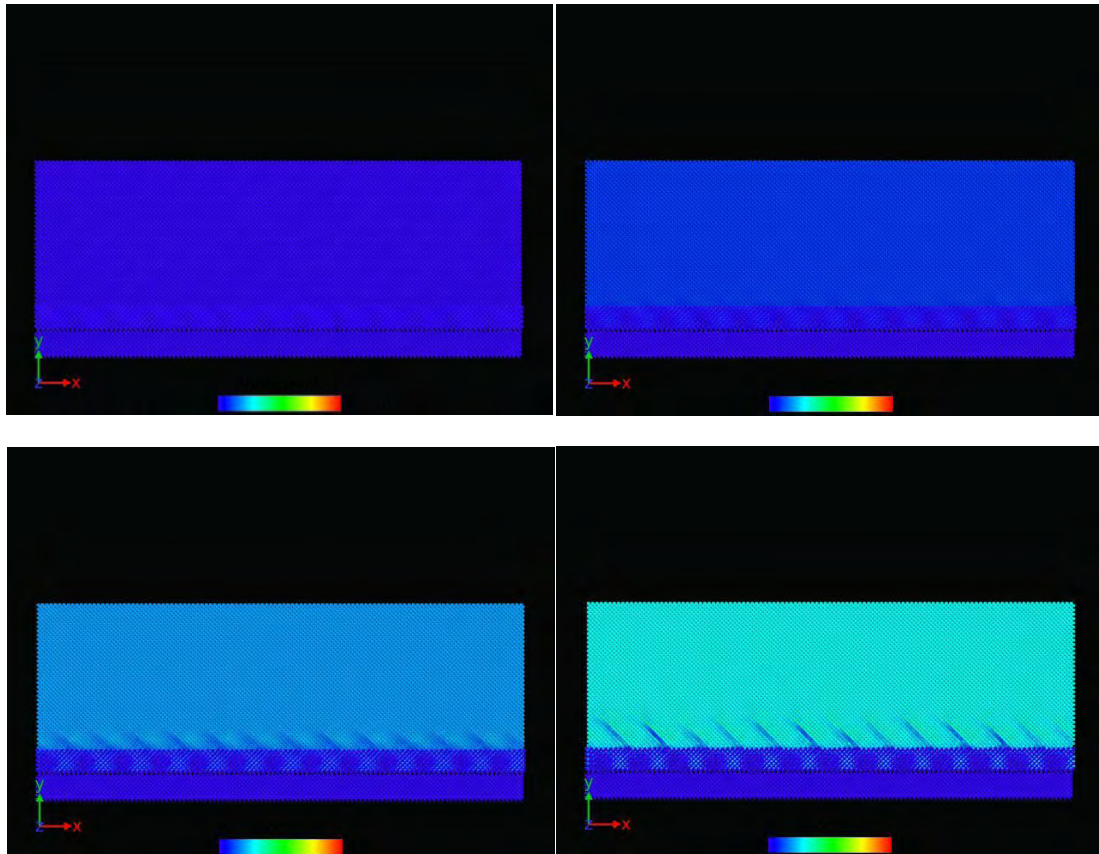
Μέσω των κριτηρίων υδραυλικής ομοιότητας κατά Re και Fr και σε αυτή την περίπτωση φαίνεται ότι τα αποτελέσματα του μοντέλου δεν βρίσκονται σε ανεκτή συμφωνία με αυτά της πραγματικής διάταξης. Το σφάλμα αυτό, πιθανόν να οφείλεται στον ότι το μοντέλο έχει χαρακτηριστικά μικρό μήκος ανάπτυξης με αποτέλεσμα η εξωτερική δύναμη που προκαλεί την κίνηση να είναι μικρή σε σχέση με το φυσικό πρόβλημα. Έτσι ενώ ποιοτικά φαίνεται να υπάρχει μία καλή συμφωνία η ποσοτική ανάλυση δείχνει ότι το μοντέλο χρήζει περαιτέρω μελέτης.

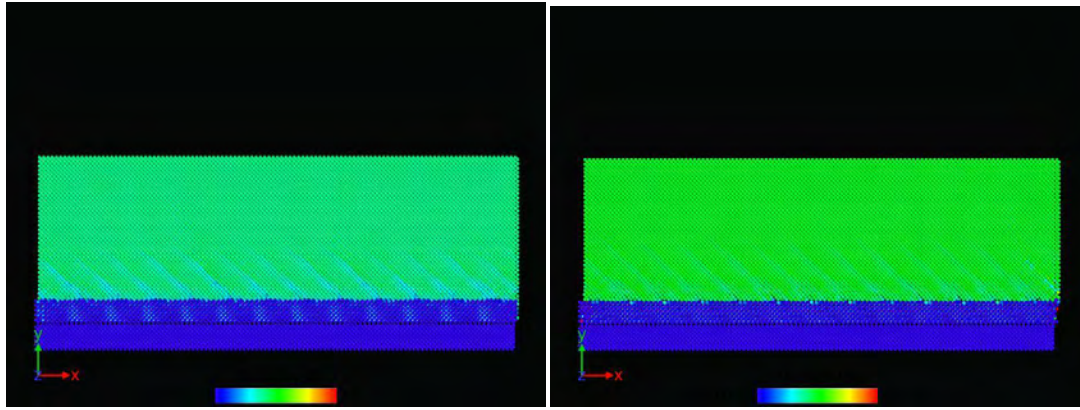


Σχήμα 10 , Προφίλ ταχύτητας για ροή σε ανοιχτό αγωγό με πορώδες υπόστρωμα (Padhi et al., 2018).

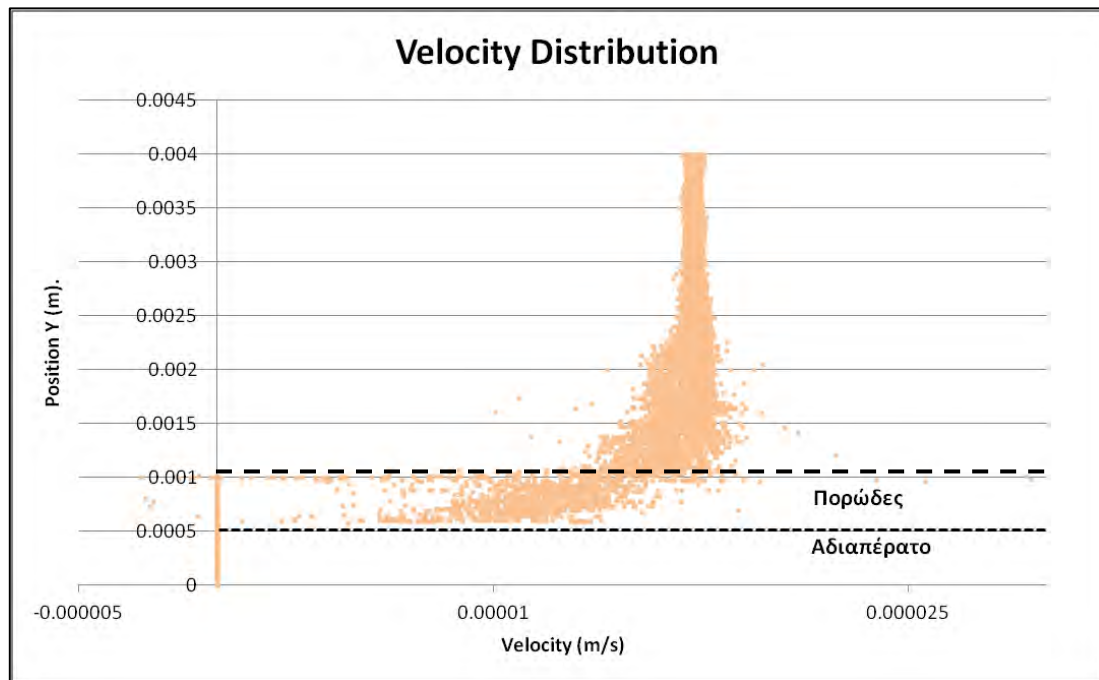
Προκειμένου να γίνει πιο ρεαλιστικό το πρόβλημα και να μπορέσει να συγκριθεί με τα πραγματικά δεδομένα, τα οποία αναφέρονται σε τυρβώδη ροή, έγινε η προσπάθεια

κατάστρωσης του μοντέλου με ακριβώς την ίδια γεωμετρία αλλά για τυρβώδη ροή. Όπως και στο παράδειγμα της ροής με αδιαπέρατο πυθμένα έτσι και σε αυτό συναντήθηκαν προβλήματα που αφορούν την εισαγωγή της τύρβης, τόσο στη μέθοδο SPH όσο και στον κώδικα LAMMPS, ειδικότερα ο κώδικας τερματίστηκε κάτω από αδιεφρίκνιστες συνθήκες χωρίς να υπάρχει μείωση των σωματιδίων ή κάποιο από τα συνήθη σφάλματα που μπορεί να παρουσιαστούν. Στιγμιότυπα της ροής φαίνονται στην Εικόνα 32. Το αντίστοιχο προφίλ των ταχυτήτων φαίνεται στο Διάγραμμα 5.2-4





Εικόνα 32, Στιγμιότυπα τυρβώδους ροής σε ανοιχτό αγωγό με πορώδες υπόστρωμα.



Διάγραμμα 5.2-4, Κατανομή ταχυτήτων για ροή σε κανάλι με πορώδες υπόστρωμα.

## 6 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ.

Τα συμπεράσματα που μπορούν να διεξαχθούν από την παρούσα εργασία διακρίνονται σε δύο κατηγορίες. Αφενός άξια σχολιασμού είναι τα συμπεράσματα που προκύπτουν από την αξιολόγηση της μεθόδου SPH σε συνεργασία με τον κώδικα LAMMPS, και αφετέρου είναι τα συμπεράσματα που προκύπτουν από την μελέτη του φαινομένου της ροής σε ένα κανάλι με πορώδες υπόστρωμα.

Αρχικά η μέθοδος SPH ως τρόπος προσομοίωσης είναι ιδιαίτερα αποδοτικός. Δίνοντας την δυνατότητα στον χρήστη να μελετά οποιοδήποτε φαινόμενο εστιάζοντας ακόμα και σε ένα σωματίδιο. Ιδιαίτερα μετά από τριβή με την μέθοδο σε περιβάλλον του κώδικα LAMMPS η μέθοδος έδειξε ότι για προβλήματα ρευστομηχανικής μπορεί να εξάγει ορθά αποτελέσματα. Όσον αφορά την ροή Poiseuille αν και λόγω υπολογιστικού φόρτου τα μοντέλα κατόρθωσαν να περιβάλλονται από διαστάσεις εκατοστών και χιλιοστών η σύγκριση με αναλυτική λύση έδειξε ότι ο κώδικας ανταποκρίνεται ποιοτικά και ποσοτικά με το φαινόμενο της ροής όπως αυτό αναγράφεται στην βιβλιογραφία. Εν συνεχεία έγινε η προσπάθεια για μελέτη του φαινομένου της ροής σε ένα κλειστό αγωγό με απότομη αύξησης και αντίστοιχα απότομη μείωση της διατομής του για 100%, 500% αύξηση και 25%, 50% μείωση αντίστοιχα. Και στα δύο μοντέλα έγινε αξιολόγηση των συμπερασμάτων με αναλυτικές λύσεις και αποδείχθηκε ότι συμφωνούν με το πραγματικό πρόβλημα σε εξαιρετικό βαθμό. Όσον αφορά την ροή σε ανοιχτό αγωγό, η προσομοίωση της ελεύθερης επιφάνειας αποδείχθηκε ιδιαίτερα απαιτητική καθώς πέραν της δυσκολίας του κώδικα έπρεπε να αντιμετωπιστεί η δυσκολία της ελεύθερης επιφάνειας ως όριο στο οποίο δεν μπορούν να ασκούνται δυνάμεις που συγκρατούν τα σωματίδια στον κατακόρυφο άξονα. Ενώ η αναλυτική λύση φαίνεται πως ικανοποιεί σε έναν βαθμό τα αποτελέσματα του μοντέλου, κριτήρια ομοιότητας κατά Reynolds και Froude μεταξύ του μοντέλου και μίας πραγματικής μελέτης περίπτωσης (case study) έδειξαν ότι υπήρχε μη ανεκτό σφάλμα. Όταν το πρόβλημα προστέθηκε και το πορώδες υπόστρωμα ενώ ποιοτικά τα διαγράμματα των ταχυτήτων φαίνεται να ακολουθούν μοτίβο όμοιο με αυτά που προέκυψαν από παλαιότερες έρευνες τα κριτήρια ομοιότητας και η σύγκριση με πειραματικά δεδομένα έδειξαν ότι και αυτό το μοντέλο αντιμετωπίζει πρόβλημα στην ποσοτική ανάλυση. Τα αίτια που πιθανόν οφείλεται το σφάλμα δεν φαίνεται να είναι εξαιτίας του κώδικα αλλά εξαιτίας των πολύ μικρών διαστάσεων και συνεπώς της χαμηλής τιμής για την επιβαλλόμενη εξωτερική δύναμη που είναι και η κινητήριος δύναμη της ροής. Πολύ μεγάλο παράγοντα παίζει και η παρουσία της τύρβης η οποία όπως αποδείχθηκε από την βιβλιογραφία και την προσπάθεια για προσομοίωση της μέσω του κώδικα είναι ένα από τα μειονεκτήματα της μεθόδου καθώς δεν εξάγει αποτελέσματα ποιοτικά και ποσοτικά ορθά.

Όσον αφορά την χρήση του κώδικα LAMMPS ως περιβάλλον για προσομοίωση με την μέθοδο SPH, φαίνεται ότι μπορούν εξαχθούν πολύ αξιόπιστα αποτελέσματα, αρκεί ο χρήστης να επιλέγει αντιπροσωπευτικές τιμές ανάλογα με την εκάστοτε εντολή και κυρίως να ελέγχει τις σχέσεις που παρουσιάζονται μεταξύ πολλών εντολών. Λόγω υπέρογκου υπολογιστικού φόρτου και απαίτηση πολύ μεγάλου

αριθμού σωματιδίων προκύπτει ως γενικό σχόλιο ότι ο κώδικας λειτουργεί καλύτερα σε προβλήματα με μικρή γεωμετρική διάταξη (τάξης εκατοστών και χιλιοστών). Αυτό δίνει εξαιρετική δυνατότητα στην μελέτη προβλημάτων που χρήζουν τρομερής λεπτομέρειας και συνάμα δημιουργεί αρκετά προβλήματα στην προσομοίωση φαινομένων που απαιτούν πιο χονδροειδή προσέγγιση (διατάξεις μέτρων). Ίσως ένας λόγος που υπήρξε σφάλμα στις περιπτώσεις ροής σε κανάλια να είναι το μικρό μήκος ανάπτυξης και οι απαίτηση περιοδικών ορίων κατά τον οριζόντιο άξονα, πράγμα που δεν αποκλείει την μελέτη όμοιων φαινομένων με την χρήση του κώδικα.

Τέλος από την μελέτη του προβλήματος της ροής σε ανοιχτό κανάλι με διαπερατό πυθμένα το μοντέλο έδειξε ποιοτικά ότι υπάρχει ροή εντός του πορώδους υποστρώματος. Η ύπαρξη αυτής της ροής αφενός κάνει την ταχύτητα στον πυθμένα διάφορη του μηδενός και αφετέρου επηρεάζει την κύρια ροή, καθώς δημιουργείται μία ζώνη ανακυκλοφορίας (slip boundary) στην διεπιφάνεια μεταξύ του πορώδους και της κύριας ροής.

## **7 ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ ΓΙΑ ΠΕΡΕΤΑΙΡΟ ΕΡΕΥΝΑ.**

Μετά την ενασχόληση με την μέθοδο SPH και κατά πόσο μπορεί να δώσει ρεαλιστικά αποτελέσματα σε προβλήματα ρευστομηχανικής με χρήση του κώδικα LAMMPS γίνεται σαφές ότι είναι μία μέθοδος που θα απασχολήσει την επιστημονική κοινότητα στο εγγύς μέλλον. Η μέθοδος δίνει εξαιρετικές δυνατότητες για την αναπαράσταση διαφορετικών προβλημάτων καθώς ο τρόπος αναπαράστασης μέσω σωματιδίων είναι ιδιαίτερα θεαματικός. Η ανάλυση των αποτελεσμάτων έδειξε ότι μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε προβλήματα με μικρή γεωμετρική διάταξη, δίνοντας ποσοτικά και ποιοτικά εύλογα αποτελέσματα. Ωστόσο το πρόβλημα της ροής με ελεύθερη επιφάνεια αποδείχθηκε ιδιαίτερος απαιτητικό πράγμα που χρήζει περαιτέρω μελέτης με σκοπό την υλοποίηση και διεξαγωγή ορθών αποτελεσμάτων. Ένας δεύτερος στόχος είναι η αύξηση της γεωμετρίας των προβλημάτων σε τέτοιο βαθμό που να μπορούν να συγκρίνονται με πειραματικές διατάξεις και πραγματικά προβλήματα, όχι μόνο αναπαριστώντας οπτικά το πρόβλημα, αλλά δίνοντας ρεαλιστικά αποτελέσματα για τιμές χαρακτηριστικών τιμών που περιγράφουν την ροή όπως αυτό της ταχύτητας.

Όσον αφορά το προς μελέτη φαινόμενο, αυτό της ροής σε έναν ανοιχτό αγωγό με πορώδη πυθμένα είναι σαφές ότι αναπτύσσεται ροή μέσα και πάνω από το πορώδες που αφενός κάνει την τιμή της ταχύτητας στο σημείο της διεπιφάνειας πυθμένα-ροής, διάφορη του μηδενός και αφετέρου σε περιπτώσεις όπου το πορώδες υπόστρωμα αποτελείται από βλάστηση αναπτύσσονται ζώνες ανακυκλοφορίας που επηρεάζουν την κύρια ροή. Ακριβής προσδιορισμός των ταχυτήτων και πληρέστερη ανάλυση μπορεί να δώσει λύση σε πολλά προβλήματα που αφορούν τέτοιου είδους ροές. Η δυσκολία που συναντήθηκε στην προσομοίωση της τυρβώδους ροής αποδεικνύει ότι το φαινόμενο χρήζει περαιτέρω μελέτης καθώς αναφέρονται αρκετά προβλήματα στην βιβλιογραφία όσον αφορά τον τρόπο που προσεγγίζει την τύρβη η μέθοδος SPH.





## Βιβλιογραφία.

### Ξενόγλωσσες

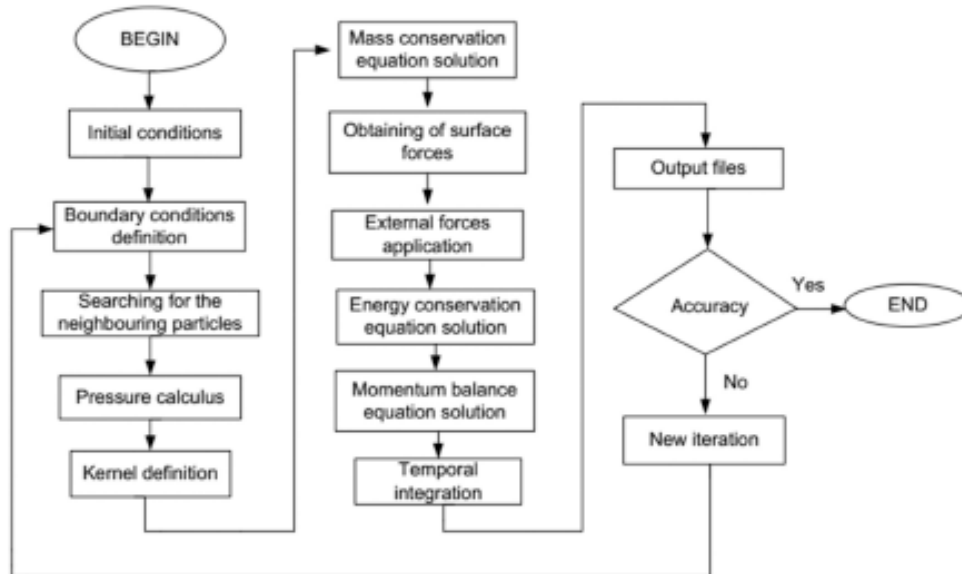
1. Afs.enea.it. (n.d.). [online] Available at: <http://www.afs.enea.it/software/lammps/doc14/units.html>.
2. Ganzenmuller, G. and Steinhauser, M. (2011). The implementation of Smoothed Particle Hydrodynamics in LAMMPS. Leuven, Belgium: Paul Van Liedekerke, pp.4-21.
3. Ferrari, A. (2010). SPH simulation of free surface flow over a sharp-crested weir. *Advances in Water Resources*, 33(3), pp.270-276.
4. Fraga Filho, C. (2017). Development of a computational instrument using a lagrangian particle method for physics teaching in the areas of fluid dynamics and transport phenomena. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 39(4).
5. Gingold, R. and Monaghan, J. (1977). Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 181(3), pp.375-389.
6. Givler, R. and Altobelli, S. (1994). A determination of the effective viscosity for the Brinkman–Forchheimer flow model. *Journal of Fluid Mechanics*, 258, pp.355-370.
7. Guo, J. and Zhang, J. (2016). Velocity distributions in laminar and turbulent vegetated flows. *Journal of Hydraulic Research*, 54(2), pp.117-130.
8. Harlow, F. and Welch, J. (1965). Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface. *Physics of Fluids*, 8(12), p.2182.
9. Jin, T. and Liao, Q. (2019). Application of large scale PIV in river surface turbulence measurements and water depth estimation. *Flow Measurement and Instrumentation*, 67, pp.142-152.
10. Keramaris, E., Pechlivanidis, G., Kasiteropoulou, D., Michalolias, N. and Liakopoulos, A. (2016). Experimental and Numerical Study of Turbulent Flow in Open Channels with Impermeable and Porous Bed. *Procedia Engineering*, 162, pp.381-387.
11. Leroch, S., Varga, M., Eder, S., Vernes, A., Ganzenmüller, G. and Ripoll, M. (2015). Smooth particle hydrodynamics simulation of damage induced by a spherical indenter scratching a viscoplastic material. *International Journal of Solids and Structures*, 81, pp.188-202.
12. Libersky, L., Petschek, A., Carney, T., Hipp, J. and Allahdadi, F. (1993). High Strain Lagrangian Hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 109(1), pp.67-75.
13. Lucy, L. (1977). A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *The Astronomical Journal*, 82, p.1013-1024
14. Mendoza, C. and Zhou, D. (1992). Effects of Porous Bed on Turbulent Stream Flow above Bed. *Journal of Hydraulic Engineering*, 118(9), pp.1222-1240.
15. Michalolias, N., Keramaris, E., Kasiteropoulou, D., Liakopoulos, A. and Pechlivanidis, G. (2018). Experiments and Numerical Analysis of Flow in an Open Channel with Gravel Bed. *Proceedings*, 2(11), p.581.
16. Monaghan, J. (1992). Smoothed Particle Hydrodynamics. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 30(1), pp.543-574.
17. Monaghan, J. (1994). Simulating Free Surface Flows with SPH. *Journal of Computational Physics*, 110(2), pp.399-406.
18. Monaghan, J. and Lattanzio, J. (1985). A refined particle method for astrophysical problems. *Astronomy and Astrophysics*, (149), pp.135-143.
19. Morris, J. (1996). *Analysis of smoothed particle hydrodynamics with applications*,. PhD thesis. Monash University.

20. MORISHITA, E. (2009). Analytical Formulas of Ideal Open Channel Flows. *TRANSACTIONS OF THE JAPAN SOCIETY FOR AERONAUTICAL AND SPACE SCIENCES*, 52(176), pp.111-113.
21. Padhi, E., Penna, N., Dey, S. and Gaudio, R. (2018). Hydrodynamics of water-worked and screeded gravel beds: A comparative study. *Physics of Fluids*, 30(8), p.085105.
22. Poulidakos, D. and Kazmierczak, M. (1987). Forced Convection in a Duct Partially Filled With a Porous Material. *Journal of Heat Transfer*, 109(3), pp.653-662.
23. Prinos, P. and Keramaris, E. (1998). Characteristics of turbulent flow over a porous bed. pp.1-15.
24. S. Plimpton, **Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics**, *J Comp Phys*, 117, 1-19 (1995). (<http://lammps.sandia.gov>).
25. Sofos, F., Karakasidis, T. and Liakopoulos, A. (2015). THE IMPACT OF SLIP ON NANOCHANNEL FRICTION FACTOR. In: *8th GRACM International Congress on Computational Mechanics*. Volos.
26. Tzedaki, A. (2015). Προσομοίωση Ροών Υγρών με Ελεύθερη Επιφάνεια με τη Χρήση Μεθόδων Υπολογιστικής Ρευστομηχανικής. MsC. Πολυτεχνείο Κρήτης.
27. Yuan, Y., Zhang, J., Wang, D., Xu, Y. and Bhandari, B. (2018). Molecular dynamics simulation on moisture diffusion process for drying of porous media in nanopores. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 121, pp.555-564.
28. Zhang, N., Zheng, X., Ma, Q., Duan, W., Khayyer, A., Lv, X. and Shao, S. (2018). A hybrid stabilization technique for simulating water wave – Structure interaction by incompressible Smoothed Particle Hydrodynamics (ISPH) method. *Journal of Hydro-environment Research*, 18, pp.77-94.
29. Zhou, D. and Mendoza, C. (1993). Flow through Porous Bed of Turbulent Stream. *Journal of Engineering Mechanics*, 119(2), pp.365-383.

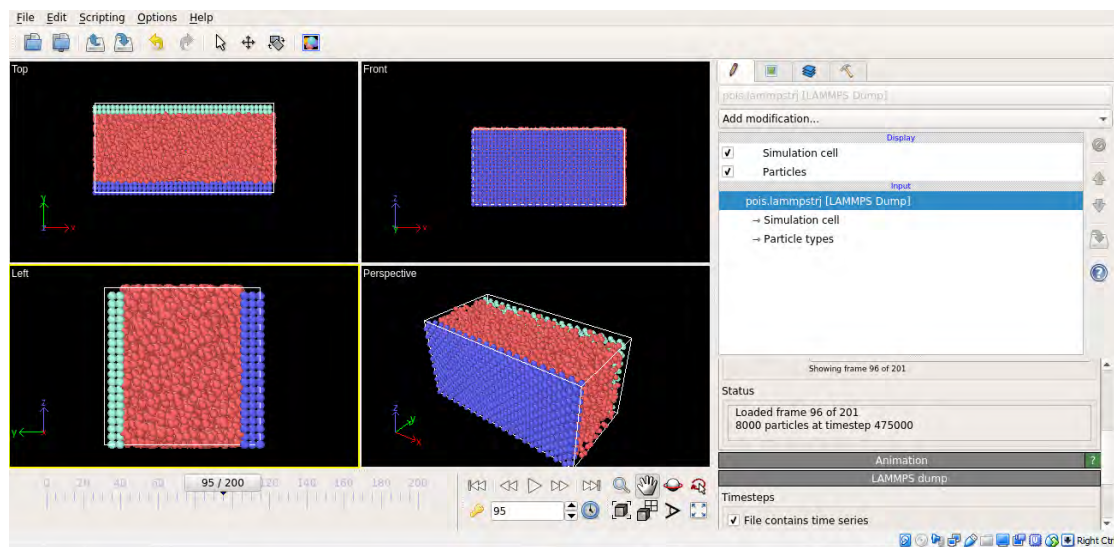
## Ελληνόγλωσσες

30. Κεραμάρης, Ε. (2001). *Τυρβώδης ροή σε ανοιχτό αγωγό με πορώδη πυθμένα*. PhD. Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης.
31. Λιακόπουλος, Α. (2016). *ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΡΕΥΣΤΩΝ*. 1st ed. Θεσσαλονίκη: Εκδόσεις ΤΖΙΟΛΑ, pp.99-269.
32. Λιακόπουλος, Α. (2016). *ΥΔΡΑΥΛΙΚΗ*. 2nd ed. Θεσσαλονίκη: Εκδόσεις ΤΖΙΟΛΑ, pp.87-112.
33. Μακρής, Χ. (2014). *Υπολογιστική Προσομοίωση Παράκτιων Κυματικών Διεργασιών με χρήση της Σωματιδιακής Μεθόδου Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)*. Doctoral Thesis. Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης.
34. ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΑΤΡΩΝ (2017). *Εργαστηριακή άσκηση στους ανοιχτούς αγωγούς*.
35. Παπαδόπουλος, Γ. (2009). *Ανάπτυξη και εφαρμογή της μεθόδου SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) για την προσομοίωση δισδιάστατων και τρισδιάστατων ροών με ελεύθερη επιφάνεια*. Διπλωματική Εργασία. Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο.
36. Πρίνος, Π. (2009). *Υδραυλική Ανοιχτών αγωγών*. Εκδόσεις Ζήτη, pp.1-24.

## Παράρτημα.



Παράρτημα 1, Λογικό διάγραμμα αλγορίθμου με όλες τις απαραίτητες διεργασίες (Fihlo, 2017)



Παράρτημα 2, Στιγμιότυπο από το πρόγραμμα οπτικοποίησης Onito.

artificial compressibility	τεχνητή συμπιεστότητα
artificial equation of state	τεχνητή καταστατική εξίσωση
artificial viscosity	τεχνητή συνεκτικότητα
boundary conditions	οριακές συνθήκες
compact	συμπαγής
discretization	διακριτοποίηση
fictitious particles	εικονικά σωματίδια
fix	σταθερός
ghost particles	φανταστικά σωματίδια
grid-based methods	πλεγματικές μέθοδοι
integral representation	ολοκληρωματική αναπαράσταση
interpolation	παρεμβολή
kernel approximation	προσέγγιση πυρήνα
meshfree methods	μη-πλεγματικές μέθοδοι
normalization	κανονικοποίηση
particle	σωματίδιο
particle approximation	σωματιδιακή προσέγγιση
periodic	περιοδικός
resolution	ανάλυση
run	επαναλήψεις
slip	ολίσθηση
smoothing kernel function W	συνάρτηση πυρήνα ή συνάρτηση εξομάλυνσης
smoothing length h	χαρακτηριστικό μήκος εξομάλυνσης
SPH - Smoothed Particle Hydrodynamics	Υδροδυναμική Ρεόντων Σωματιδίων
time integration	χρονική ολοκλήρωση
time step	χρονικό βήμα
uniform flow	ομοιόμορφη ροή
vizualisation	οπτικοποίηση

**Παράρτημα 3, Ξένη ορολογία**