

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ

ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ

ΤΜΗΜΑ ΠΟΛΙΤΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

**ΜΙΚΡΟΣΚΟΠΙΚΕΣ, ΜΕΣΟΣΚΟΠΙΚΕΣ ΚΑΙ
ΜΑΚΡΟΣΚΟΠΙΚΕΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ ΡΟΩΝ ΣΕ
ΑΓΩΓΟΥΣ ΜΕ ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ ΤΟΙΧΩΜΑΤΑ**

υπό

ΚΑΣΙΤΕΡΟΠΟΥΛΟΥ Σ. ΔΩΡΟΘΕΑ

Διπλωματούχου Πολιτικού Μηχανικού, Π.Θ., 2004

Υπεβλήθη για την εκπλήρωση των απαιτήσεων για την
απόκτηση του Διδακτορικού Διπλώματος

ΒΟΛΟΣ, ΙΟΥΝΙΟΣ 2009

© 2009 Κασιτεροπούλου Δωροθέα

Η έγκριση της Διδακτορικής Διατριβής 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). Επίσης, οι απόψεις του συγγραφέα δεν αντανακλούν απαραίτητα αυτές της Ευρωπαϊκής Ένωσης.

Εγκρίθηκε από τα μέλη της επταμελούς εξεταστικής επιτροπής:

Πρώτος εξεταστής (Επιβλέπων)	Καθηγητής Λιακόπουλος Αντώνιος Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας
Δεύτερος εξεταστής	Καθηγητής Βαλουγιώργης Δημήτριος Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας
Τρίτος εξεταστής	Αναπληρωτής Καθηγητής Ευαγγελάκης Γεώργιος Τμήμα Φυσικής Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων
Τέταρτος εξεταστής	Λέκτορας Καρακασίδης Θεόδωρος Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας
Πέμπτος εξεταστής	Αναπληρωτής Καθηγητής Παπανικολάου Παναγιώτης Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας
Έκτος εξεταστής	Καθηγητής Γιαννακόπουλος Αντώνιος Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας
Έβδομος εξεταστής	Καθηγητής Μποντόζογλου Βασίλειος Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Αφιερώνεται

στο σύζυγο μου Δημήτρη

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Πρώτα απ' όλους θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα Καθηγητή κ. Αντώνη Λιακόπουλο. Αισθάνομαι ιδιαίτερα τυχερή που συμπορεύτηκα δίπλα σε έναν άνθρωπο που αγαπά τόσο πολύ την έρευνα. Οι πλούσιες γνώσεις που μου μετέδιδε καθ' όλη τη διάρκεια έπαιξαν ουσιαστικό ρόλο στην επίτευξη των ερευνητικών μου στόχων. Η επιμονή του στην επιστημονική τελειότητα συνετέλεσαν στην περαίωση της διατριβής και στην ποιότητα των αποτελεσμάτων της.

Θα ήθελα ακόμη να ευχαριστήσω τον Λέκτορα Θεόδωρο Καρακασίδη για την σημαντική βοήθεια που μου προσέφερε καθ' όλη τη διάρκεια της διατριβής. Ο τρόπος σκέψης που μου ενέπνευσε αποτέλεσε σημαντικό εφόδιο στην επιστημονική μου πορεία και την αντιμετώπιση των διαφόρων επιστημονικών θεμάτων που προέκυπταν.

Θα ήθελα να εκφράσω τις ευχαριστίες μου στον Καθηγητή κ. Βαλουγιώργη Δημήτριο, τον Καθηγητή κ. Γιαννακόπουλο Αντώνιο, τον Αναπληρωτή καθηγητή κ. Παπανικολάου Παναγιώτη, τον Αναπληρωτή καθηγητή κ. Ευαγγελάκη Γεώργιο και τον Καθηγητή κ. Μποντόζογλου Βασίλειο για τις χρήσιμες παρατηρήσεις τους και για την τιμή που μου κάνουν να συμμετέχουν στην επιτροπή αξιολόγησης.

Ένα μεγάλο ευχαριστώ στον Δρ. Γκιάλη Στέλιο, τον κ. Χολέβα Νικόλαο και, φυσικά, στο διοικητικό και τεχνικό προσωπικό του Τμήματος Πολιτικών Μηχανικών του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας, την κ. Μπαλαμώτη Γλυκερία, την κ. Βούλγαρη Χρύσα, τον κ. Φράγκου Αθανάσιο, την κ. Καραφύλλη Βασιλική, τον κ. Οικονομίδη Κωστή, τον κ. Καραμπερόπουλο Δημήτρη και την κ. Τσικάκη Τερψιχόρη.

Σε προσωπικό επίπεδο οφείλω ένα μεγάλο ευχαριστώ στους γονείς μου και τα αδέρφια μου για την συμπαράσταση τους όλα αυτά τα χρόνια. Τέλος, αισθάνομαι ότι η διατριβή αυτή δεν θα έφτανε ποτέ στο τέλος της χωρίς την στήριξη και την ψυχολογική συμπαράσταση του συζύγου μου Δημήτρη. Η παρουσία του καθ' όλη τη διάρκεια της διατριβής και η αγάπη του για μένα έπαιξαν ουσιαστικό ρόλο σε όλη αυτή την προσπάθεια.

Η διατριβή αυτή εκπονήθηκε στο πλαίσιο του προγράμματος ΠΕΝΕΔ-03ΕΔ588 και συγχρηματοδοτήθηκε κατά:

- 75% της Δημόσιας Δαπάνης από την Ευρωπαϊκή Ένωση – Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
- 25% της Δημόσιας Δαπάνης από το Ελληνικό Δημόσιο – Υπουργείο Ανάπτυξης – Γενική Γραμματεία Έρευνας και Τεχνολογίας
- και από τον Ιδιωτικό Τομέα

στο πλαίσιο του Μέτρου 8.3 του Ε.Π. Ανταγωνιστικότητα – Γ' Κοινοτικό Πλαίσιο Στήριξης.

**Μικροσκοπικές, Μεσοσκοπικές και
Μακροσκοπικές Προσομοιώσεις
Ροών σε Αγωγούς με Περιοδικά Τοιχώματα**

υπό

Κασιτεροπούλου Σ. Δωροθέα

Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Πεδίον Άρεως, 38334, Βόλος, Ελλάδα

ΠΕΡΙΛΗΨΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗΣ

Στην παρούσα διατριβή μελετήθηκε η ροή στο χώρο μεταξύ δύο ακίνητων παράλληλων πλακών από τις οποίες η άνω χαρακτηρίζεται από την ύπαρξη περιοδικών προεξοχών ορθογωνικής μορφής, και η κάτω είναι λεία και επίπεδη. Η ροή μελετάται με τη χρήση των μακροσκοπικών εξισώσεων συνέχειας και ορμής και τη μέθοδο προσομοίωσης Dissipative Particle Dynamics (DPD).

Στόχος της διατριβής είναι η καταγραφή της εξάρτησης των μακροσκοπικών ιδιοτήτων της ροής (πυκνότητα, ταχύτητα, πίεση και θερμοκρασία) από την επίδραση των γεωμετρικών χαρακτηριστικών της προεξοχής για κανάλια πλάτους από μερικά νανόμετρα εως μερικά μέτρα. Μελετώνται αρχικά όλες οι παράμετροι που υπεισέρχονται σε μια προσομοίωση με τη μέθοδο DPD με στόχο τη βαθμονόμηση του μοντέλου και στη συνέχεια διερευνάται η διαμόρφωση της ροής για τέσσερα διαφορετικά μήκη και ύψη προεξοχής. Εξετάζεται η διαφορά στη συμπεριφορά του υγρού στη νάνο- και μέσο- κλίμακα με τη μέθοδο DPD σε σχέση με τη θεωρία συνεχούς μέσου.

Περιγραφή του προβλήματος

Θεωρείται αρχικά η ροή σε νανοαγωγούς με επίπεδες πλάκες. Η ροή Poiseuille αποτελεί το πρόβλημα βάση και τα αποτελέσματα της συγκρίνονται στη συνέχεια με τα αποτελέσματα της ροής σε αγωγούς με προεξοχές ώστε να διερευνηθεί η επίδραση των προεξοχών στη διαμόρφωση της ροής. Η ροή μελετάται με τη χρήση της μεθόδου προσομοίωσης DPD που βασίζεται στην κίνηση των σωματιδίων και τις μεταξύ τους αλληλεπιδράσεις, και μοντελοποιείται με τη χρήση περιοδικών συνθηκών στην είσοδο και την έξοδο του υπολογιστικού φατνίου. Στη διεπιφάνεια τοίχου-ρευστού χρησιμοποιούνται bounce-back συνθήκες με στόχο την επιστροφή των σωματιδίων εντός του αγωγού όταν αυτά έρχονται σε δεδομένη απόσταση από τον τοίχο (η κατακόρυφη και η οριζόντια συνιστώσα της ταχύτητας αντιστρέφονται). Για την ροή μελετώνται παράμετροι όπως ο συντελεστής αλληλεπίδρασης των σωματιδίων τοίχου και ρευστού, η κινούσα δύναμη ανά σωματίδιο ρευστού, η πυκνότητα του τοίχου και η ακτίνα αποκοπής αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων. Στόχος αυτής της διερεύνησης είναι η βαθμονόμηση όλων των πιθανών παραμέτρων που επηρεάζουν την προσομοίωση.

Στη συνέχεια μελετάται η ροή σε αγωγούς μεσοκοπικής κλίμακας με επίπεδες πλάκες. Υπολογίζονται οι μακροσκοπικές ποσότητες της ροής και συγκρίνονται τα αποτελέσματα με αυτά που προκύπτουν με χρήση των εξισώσεων Navier-Stokes. Φαίνεται ότι η μέθοδος δίνει πολύ καλή προσέγγιση καθώς τα αποτελέσματα της μεθόδου είναι πολύ κοντά στα θεωρητικά (παρατηρείται διαφορά της τάξεως του 6% για την ταχύτητα, σταθερή πυκνότητα και σταθερή θερμοκρασία).

Στους αγωγούς με προεξοχές, εξετάζονται τρία διαφορετικά μήκη και τέσσερα διαφορετικά ύψη προεξοχής για την ροή σε νανοαγωγό (11σ) και σε αγωγό μεσοσκοπικής κλίμακας (1,1μm) και ένα μήκος και ύψος προεξοχής για τη ροή σε αγωγό μακροσκοπικής κλίμακας (1m). Καθορίζεται ακόμη η σχέση της αδιαστατοποιημένης κινούσας δύναμης συναρτήσει του αριθμού Re για όλους τους αγωγούς και εξάγονται εξισώσεις που διέπουν τη σχέση αυτή για όλες τις κλίμακες (μάκρο-, μέσο-, νάνο-).

Αποτελέσματα και συζήτηση

Για όλες τις κλίμακες (μάκρο-, μέσο-, νάνο-) και για όλα τα μήκη και ύψη προεξοχής, διαπιστώθηκε ότι η διαμόρφωση προεξοχών οδηγεί σε ‘παγίδευση’ των σωματιδίων στο εσωτερικό των εσοχών. Η συμπεριφορά αυτή επαληθεύεται με τον υπολογισμό του μέσου χρόνου παραμονής των σωματιδίων μέσα στις εσοχές. Διαπιστώνεται ότι, όσο μειώνεται το μήκος και αυξάνεται το ύψος των εσοχών, τόσο ο μέσος χρόνος παραμονής των σωματιδίων στις εσοχές αυξάνεται.

Η κατανομή της ταχύτητας κοντά στην επίπεδη κάτω πλάκα του αγωγού επηρεάζεται μόνον για τα μεγάλα ύψη προεξοχής ($h=0.30H$ και $h=0.40H$). Αντιθέτως, η ταχύτητα μειώνεται στην επάνω πλάκα και ειδικότερα μέσα στις εσοχές γεγονός που εξηγείται στην προσομοίωση DPD από την παγίδευση των σωματιδίων στην περιοχή των εσοχών όπως προκύπτει από την ανάλυση της τοπικής πυκνότητας.

Η πίεση εμφανίζει ομοίως περίεργη συμπεριφορά υπό την επίδραση της εμφάνισης των προεξοχών τόσο για την περίπτωση των νανοαγωγών όσο και για την περίπτωση των μέσοαγωγών. Στην περίπτωση των νανοαγωγών, η διαμόρφωση προεξοχών οδηγεί στην εμφάνιση περιοχών υψηλής πίεσης μέσα στις εσοχές, η

τοπολογία και ο αριθμός των οποίων είναι σε άμεση συνάρτηση με το μήκος και το ύψος της προεξοχής. Ειδικότερα, μείωση του μήκους και αύξηση του ύψους της προεξοχής οδηγεί σε αύξηση του αριθμού αυτών των περιοχών. Στους αγωγούς μεσοσκοπικής κλίμακας, η μείωση του μήκους και η αύξηση του ύψους της προεξοχής μεταβάλλει μόνον το ύψος της περιοχής υψηλής πίεσης, ενώ ο αριθμός τους παραμένει σταθερός.

Η θερμοκρασία σταθεροποιείται γύρω από μια μέση τιμή της οποίας το μέγεθος για την περίπτωση των νανοαγωγών εξαρτάται από τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της προεξοχής (μήκος και ύψος). Η μείωση του μήκους και η αύξηση του ύψους οδηγεί σε μείωση της θερμοκρασίας του ρευστού. Όσον αφορά τους αγωγούς μεσοκοπικής κλίμακας, η θερμοκρασία του ρευστού δεν επηρεάζεται από την παρουσία των προεξοχών και η τιμή της είναι ίση με την αρχική.

Η γραφική απεικόνιση τέλος, της αδιαστατοποιημένης δύναμης που κινεί το ρευστό συναρτήσει του αριθμού Re αποκαλύπτει συμπεριφορές ανάλογες για τη μεσοσκοπική και τη μακροσκοπική ροή. Στην μακροσκοπική ροή η ‘δύναμη’ που κινεί το ρευστό είναι η διαφορά της πίεσης και στην μεσοσκοπική ροή η δύναμη σε κάθε σωματίδιο. Σύγκριση των αποτελεσμάτων της μεθόδου προσομοίωσης DPD και των αποτελεσμάτων που προκύπτουν με χρήση των εξισώσεων Navier-Stokes οδηγεί στο συμπέρασμα ότι οι δύο μέθοδοι δίνουν λύσεις που είναι πολύ κοντά και η εξίσωση που περιγράφει τη σχέση της αδιαστατοποιημένης κινούσας δύναμης συναρτήσει του αριθμού Re εμφανίζει μια μέγιστη διαφορά της τάξεως του 6-7% για τις δύο μεθόδους που είναι γενικά πάρα πολύ καλή προσέγγιση.

Συμπεράσματα

Ανακεφαλαιώνοντας, διαπιστώθηκε ότι το μέγεθος των μακροσκοπικών ιδιοτήτων της ροής (πυκνότητα, ταχύτητα, πίεση και θερμοκρασία) και η συμπεριφορά τους εξαρτάται άμεσα από τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της προεξοχής. Η εμφάνιση προεξοχών ορθογωνικής μορφής οδηγεί σε περίεργες συμπεριφορές των μακροσκοπικών ιδιοτήτων της ροής κυρίως κοντά στην επάνω πλάκα όπου διαμορφώνονται οι προεξοχές. Η περίεργη συμπεριφορά οφείλεται όπως απεδείχθη σε παγίδευση των σωματιδίων στην περιοχή των εσοχών που οδηγεί σε μείωση κάποιων μακροσκοπικών μεγεθών όπως για παράδειγμα μείωση της ταχύτητας.

Ακόμη, είναι υψίστης σημασίας να αναφερθεί ότι η μέθοδος προσομοίωσης DPD μπορεί να δώσει απαντήσεις σε προσομοιώσεις ροών μεσοκοπικής κλίμακας. Οι προσομοιώσεις με τη μέθοδο DPD δίνουν πληροφορίες για τη συμπεριφορά του ρευστού κοντά στα στερεά τοιχώματα και λαμβάνουν υπόψη το υλικό των τοίχων, κάτι που αγνοεί η μακροσκοπική προσέγγιση.

ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΩΝ

ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΩΝ.....	xi
1.ΕΙΣΑΓΩΓΗ	1
2. ΜΕΘΟΔΟΣ DISSIPATIVE PARTICLE DYNAMICS.....	9
2.1 Μαθηματικές εξισώσεις.....	10
2.2 Οριακές συνθήκες	14
2.3 Αριθμητική ολοκλήρωση.....	17
2.4 Επιλογή των παραμέτρων προσομοίωσης σε ένα σύστημα DPD	22
2.5 Σύστημα μονάδων	25
3. ΡΟΗ POISEUILLE: NANO-, ΜΕΣΟ-, ΜΑΚΡΟ ΚΑΙΜΑΚΑ.....	27
3.1 Ροή Poiseuille σε Nano-Αγωγούς	27
3.1.1 Μοντελοποίηση του συστήματος προσομοίωσης	27
3.1.2 Μετεπεξεργασία των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης	29
3.1.3 Ανάλυση των αποτελεσμάτων	32
<i>Κατανομή της πυκνότητας</i>	32
<i>Κατανομή της ταχύτητας</i>	37
<i>Κατανομή της πίεσης</i>	40
<i>Κατανομή της θερμοκρασίας</i>	44
3.1.4 Συμπεράσματα ενότητας.....	48
3.2 Ροή Poiseuille στη Μεσοκλίμακα	52
3.2.1 Μοντελοποίηση του συστήματος προσομοίωσης	53
3.2.2 Μετεπεξεργασία των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης	57
3.2.3 Αποτελέσματα.....	58
<i>Κατανομή της πυκνότητας</i>	58
<i>Κατανομή της ταχύτητας</i>	60
<i>Κατανομή της πίεσης</i>	62
<i>Κατανομή της θερμοκρασίας</i>	63
3.2.4 Συμπεράσματα ενότητας.....	64
4. ΝΑΝΟΑΓΩΓΟΙ ΜΕ ΠΕΡΙΟΔΙΚΕΣ ΟΡΘΟΓΩΝΙΚΕΣ ΠΡΟΕΞΟΧΕΣ	65
4.1 Ροή σε νανοαγωγούς με σταθερό ύψος προεξοχής	68
4.1.1 Υπολογιστικές λεπτομέρειες	68
4.1.2 Αποτελέσματα	71
<i>Αριθμητική πυκνότητα</i>	71
<i>Κατανομή της ταχύτητας</i>	78
<i>Κατανομή της πίεσης</i>	83
<i>Κατανομή της θερμοκρασίας</i>	86
4.2 Παραμετρική μελέτη των αδιάστατων γεωμετρικών παραμέτρων των πλακών στη ροή	92
4.2.1. <i>Μοντέλο προσομοίωσης</i>	92
4.2.2. <i>Μετεπεξεργασία των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης</i>	97
4.2.3. <i>Αποτελέσματα</i>	98
<i>Κατανομή της πυκνότητας</i>	98
<i>Κατανομή της ταχύτητας</i>	105

<i>Πεδίο πίεσης</i>	112
<i>Κατανομή της θερμοκρασίας</i>	115
4.3 Ροή σε νανοαγωγούς υπό διαφορετικές συνθήκες εξωτερικής δύναμης συναρτήσει των γεωμετρικών παραμέτρων.....	123
5. ΑΓΩΓΟΙ ΜΕ ΠΕΡΙΟΔΙΚΕΣ ΟΡΘΟΓΩΝΙΚΕΣ ΠΡΟΕΞΟΧΕΣ: ΜΕΣΟ - ΚΛΙΜΑΚΑ	130
5.1 Υπολογιστικές λεπτομέρειες.....	130
5.2 Μετεπεξεργασία των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης.....	135
5.3 Αποτελέσματα.....	136
<i>Κατανομή της πυκνότητας</i>	136
<i>Κατανομή της ταχύτητας</i>	143
<i>Πεδίο πίεσης</i>	149
<i>Κατανομή της θερμοκρασίας</i>	153
5.4 Συμπεράσματα για αγωγούς με περιοδικές προεξοχές υπό σταθερή εξωτερική δύναμη 157	
5.5 Μελέτη ροής για διάφορα μεγέθη της εξωτερικής δύναμης.....	158
5.6 Συμπεράσματα.....	163
6. ΑΓΩΓΟΙ ΜΕ ΠΕΡΙΟΔΙΚΕΣ ΟΡΘΟΓΩΝΙΚΕΣ ΠΡΟΕΞΟΧΕΣ: ΜΑΚΡΟ- ΚΛΙΜΑΚΑ	164
6.1 Περιγραφή του συστήματος προσομοίωσης.....	164
6.2 Μαθηματικό Μοντέλο.....	166
6.3 Αριθμητικό πλέγμα προσομοίωσης.....	168
6.4 Αριθμητική επίλυση.....	170
6.5 Αποτελέσματα.....	172
<i>Κατανομή της ταχύτητας</i>	172
<i>Πεδίο πίεσης</i>	178
6.6 Συγκριτικά Αποτελέσματα-Συμπεράσματα	179
7. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	186
7.1 Αριθμητική πυκνότητα του ρευστού.....	187
7.2 Πεδίο ταχύτητας.....	188
7.3 Πεδίο πίεσης.....	190
7.4 Κατανομή της θερμοκρασίας.....	192
7.5 Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re.....	193
7.6 Σύνοψη.....	196
ΑΓΓΛΙΚΗ ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	198
ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	208
ΠΙΝΑΚΑΣ ΣΥΜΒΟΛΩΝ	209
ΒΙΟΓΡΑΦΙΚΟ ΣΗΜΕΙΩΜΑ	212

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΣΧΗΜΑΤΩΝ

Σχήμα 2.1. Δυναμικό Lennard - Jones και ο μέσος όρος του δυναμικού (προσαρμοσμένο από [Symeonidis et al., 2005]).	12
Σχήμα 3.1. Υπό μελέτη σύστημα στη ροή Poiseuille (τα μήκη εκφράζονται σε μονάδες r_c).	29
Σχήμα 3.2. Χωρισμός του υπολογιστικού φατνίου σε κελιά για την μετεπεξεργασία των αποτελεσμάτων.	31
Σχήμα 3.3. Ροή Poiseuille: Κατανομή της αριθμητικής πυκνότητας. Επίδραση του συντελεστή αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων τοίχου και ρευστού. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.	33
Σχήμα 3.4. Ροή Poiseuille: Κατανομή της αριθμητικής πυκνότητας. Επίδραση του συντελεστή αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων τοίχου και ρευστού. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων (Λεπτομέρεια του Σχ.3.3).	33
Σχήμα 3.5. Ροή Poiseuille: Κατανομή της αριθμητικής πυκνότητας. Επίδραση της εξωτερικής δύναμης. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.	34
Σχήμα 3.6. Ροή Poiseuille: Κατανομή της αριθμητικής πυκνότητας. Επίδραση της πυκνότητας του τοίχου. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.	35
Σχήμα 3.7. Ροή Poiseuille: Κατανομή της αριθμητικής πυκνότητας. Επίδραση της ακτίνας αποκοπής. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.	36
Σχήμα 3.8. Ροή Poiseuille: Κατανομή της αριθμητικής πυκνότητας. Επίδραση της ακτίνας αποκοπής. Λεπτομέρεια.	36
Σχήμα 3.9. Ροή Poiseuille: Κατανομή της ταχύτητας. Επίδραση του συντελεστή αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων τοίχου και ρευστού. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.	37
Σχήμα 3.10. Ροή Poiseuille: Κατανομή της ταχύτητας. Επίδραση της εξωτερικής δύναμης. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.	38
Σχήμα 3.11. Ροή Poiseuille: Κατανομή της ταχύτητας. Επίδραση της πυκνότητας του τοίχου. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.	39

Σχήμα 3.12. Ροή Poiseuille: Κατανομή της ταχύτητας. Επίδραση της ακτίνας αποκοπής. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.	40
Σχήμα 3.13. Ροή Poiseuille: Κατανομή της πίεσης. Επίδραση του συντελεστή αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων τοίχου και ρευστού. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.....	41
Σχήμα 3.14. Ροή Poiseuille: Κατανομή της πίεσης. Επίδραση της εξωτερικής δύναμης. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.	42
Σχήμα 3.15. Ροή Poiseuille: Κατανομή της πίεσης. Επίδραση της πυκνότητας του τοίχου. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.	43
Σχήμα 3.16. Ροή Poiseuille: Κατανομή της πίεσης. Επίδραση της ακτίνας αποκοπής. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.	44
Σχήμα 3.17. Ροή Poiseuille: Κατανομή της θερμοκρασίας. Επίδραση του συντελεστή αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων τοίχου και ρευστού. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.....	45
Σχήμα 3.18. Ροή Poiseuille: Κατανομή της θερμοκρασίας. Επίδραση της εξωτερικής δύναμης. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.	46
Σχήμα 3.19. Ροή Poiseuille: Κατανομή της θερμοκρασίας. Επίδραση της πυκνότητας του τοίχου. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.	47
Σχήμα 3.20. Ροή Poiseuille: Κατανομή της θερμοκρασίας. Επίδραση της ακτίνας αποκοπής. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.	48
Σχήμα 3.21. Σύγκριση της x-συνιστώσας της ταχύτητας με χρήση της μεθόδου DPD για ροή σε νανοαγωγό με τη x-συνιστώσα της ταχύτητας με τη χρήση των εξισώσεων Navier-Stokes (το y είναι σε ανηγμένη μορφή). Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα.	50
Σχήμα 3.22. Σύγκριση της x-συνιστώσας της ταχύτητας με χρήση της μεθόδου DPD για ροή σε νανοαγωγό με τη x-συνιστώσα της ταχύτητας με τη χρήση των εξισώσεων Navier-Stokes (το y είναι σε ανηγμένη μορφή). Μεταβολή του συντελεστή αλληλεπίδρασης των σωματιδίων τοίχου και ρευστού σε σχέση με το πρόβλημα βάση. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα.	50
Σχήμα 3.23. Σύστημα προσομοίωσης στη ροή Poiseuille για αγωγό μεσοκοπικής κλίμακας.....	53

Σχήμα 3.24. Ροή Poiseuille: διάγραμμα αριθμητικής πυκνότητας για αγωγό μεσοσκοπικής κλίμακας (το y είναι σε μονάδες r_c) . Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα.....	59
Σχήμα 3.25. Ροή Poiseuille: διάγραμμα της ταχύτητας για αγωγό μεσοσκοπικής κλίμακας (το y είναι σε μονάδες r_c) . Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα.	60
Σχήμα 3.26. Σύγκριση της x -συνιστώσας της ταχύτητας με χρήση της μεθόδου DPD με της x -συνιστώσας της ταχύτητας με τη χρήση των εξισώσεων Navier-Stokes (το y είναι σε ανηγμένη μορφή) . Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα.....	61
Σχήμα 3.27. Ροή Poiseuille: διάγραμμα της πίεσης για αγωγό μεσοσκοπικής κλίμακας (το y είναι σε μονάδες r_c) . Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα.....	62
Σχήμα 3.28. Ροή Poiseuille: διάγραμμα της θερμοκρασίας για αγωγό μεσοσκοπικής κλίμακας (το y είναι σε μονάδες r_c) . Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα.	63
Σχήμα 4.1. Σχηματική άποψη των υπό μελέτη αγωγών	69
Σχήμα 4.2. Καμπύλες ίσης πυκνότητας για α) $l_{r_0} = 0l_{tot}$, β) $l_{r_1} = 0.5l_{tot}$, γ) $l_{r_2} = 0.25l_{tot}$ και δ) $l_{r_3} = 0.125l_{tot}$	71
Σχήμα 4.3. Διαγράμματα πυκνότητας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για α) $l_{r_1} = 0.5l_{tot}$, β) $l_{r_2} = 0.25l_{tot}$ και γ) $l_{r_3} = 0.125l_{tot}$ (το y είναι σε μονάδες r_c) . Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα.....	72
Σχήμα 4.4. Μέσος χρόνος παραμονής μέσα στις εσοχές ως συνάρτηση του αριθμού των προεξοχών β) $l_{r_1} = 0.5l_{tot}$, γ) $l_{r_2} = 0.25l_{tot}$ και δ) $l_{r_3} = 0.125l_{tot}$. Τα αποτελέσματα προκύπτουν για χρονική διάρκεια 5×10^4 χρονικά βήματα. Για σύγκριση παρουσιάζεται ακόμη ο χρόνος παραμονής στο κεντρικό τμήμα του αγωγού (σημείο (α)).....	75
Σχήμα 4.5. Χαρακτηριστικές τροχιές ενός παγιδευμένου και ενός ελεύθερα κινούμενου σωματιδίου. Με x αναπαρίσταται οι τοίχοι. α) $l_{r_1} = 0.5l_{tot}$, β) $l_{r_2} = 0.25l_{tot}$ και γ) $l_{r_3} = 0.125l_{tot}$	77
Σχήμα 4.6. Διανύσματα της ταχύτητας στο x - y επίπεδο για α) $l_{r_1} = 0.5l_{tot}$ β) $l_{r_2} = 0.25l_{tot}$	78

- Σχήμα 4.7. α) Μέση $\frac{v}{v_{\max}}$ ταχύτητα και β) μέση ταχύτητα για τις περιπτώσεις i) $l_{r0} = 0l_{tot}$, ii) $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, iii) $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και iv) $l_{r3} = 0.125l_{tot}$. (το y είναι σε μονάδες r_c). Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα..... 79
- Σχήμα 4.8. Διαγράμματα της ταχύτητας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για α) $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, β) $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και γ) $l_{r3} = 0.125l_{tot}$ (το y είναι σε μονάδες r_c). Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα..... 80
- Σχήμα 4.9. Μέση ταχύτητα μέσα στις εσοχές ως συνάρτηση του αριθμού των προεξοχών για α) $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, β) $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και γ) $l_{r3} = 0.125l_{tot}$ (η μέση τιμή της ταχύτητας προσδιορίζεται από το μέσο όρο της ταχύτητας των υπολογιστικών καλειών που βρίσκονται μέσα στην εσοχή)..... 82
- Σχήμα 4.10. Ισοβαρείς για α) $l_{r0} = 0l_{tot}$, β) $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, γ) $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και δ) $l_{r3} = 0.125l_{tot}$ 83
- Σχήμα 4.11. Διαγράμματα της πίεσης σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για α) $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, β) $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και γ) $l_{r3} = 0.125l_{tot}$ (το y είναι σε μονάδες r_c). Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα..... 84
- Σχήμα 4.12. Ισόθερμες καμπύλες για α) $l_{r0} = 0l_{tot}$, β) $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, γ) $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και δ) $l_{r3} = 0.125l_{tot}$ 87
- Σχήμα 4.13. Διαγράμματα της θερμοκρασίας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για α) $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, β) $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και γ) $l_{r3} = 0.125l_{tot}$ (το y είναι σε μονάδες r_c). Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα..... 88
- Σχήμα 4.14. Σύστημα προσομοίωσης για όλα τα ύψη προεξοχής και για μήκη α) $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, β) $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και γ) $l_{r3} = 0.125l_{tot}$ (η περίπτωση $h = 0.10H$ περιγράφεται στο Σχ.4.1)..... 95
- Σχήμα 4.15. Διαγράμματα της πυκνότητας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για μήκος $l_{r1} = 0.5l_{tot}$ και ύψος : α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$ (το y είναι σε μονάδες r_c). Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα 99
- Σχήμα 4.16. Διαγράμματα της πυκνότητας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για μήκος $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και ύψος : α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$,

γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$ (το y είναι σε μονάδες r_c) . Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα	100
Σχήμα 4.17. Διαγράμματα της πυκνότητας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για μήκος $l_{r3} = 0.125l_{tot}$ και ύψος : α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$ (το y είναι σε μονάδες r_c) . Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα	101
Σχήμα 4.18. Υπολογισμός του μέσου χρόνου παραμονής στις εσοχές ως συνάρτηση του μήκους και του ύψους της εσοχής. Τα αποτελέσματα προκύπτουν για χρονική διάρκεια 5×10^4 χρονικά βήματα.	103
Σχήμα 4.19. Χαρακτηριστικές τροχιές ενός παγιδευμένου και ενός ελεύθερα κινούμενου σωματιδίου. Με x αναπαρίσταται οι τοίχοι. α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$	104
Σχήμα 4.20. Ισοταχείς για μήκος προεξοχής $l_{r1} = 0.5l_{tot}$ α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$	106
Σχήμα 4.21. Ισοταχείς για μήκος προεξοχής $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$	107
Σχήμα 4.22. Ισοταχείς για μήκος προεξοχής $l_{r3} = 0.125l_{tot}$ α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$	108
Σχήμα 4.23.α) Μέση $\frac{v}{v_{max}}$ ταχύτητα και β) μέση ταχύτητα για $l_{r1} = 0.50l_{tot}$	109
Σχήμα 4.24.α) Μέση $\frac{v}{v_{max}}$ ταχύτητα και β) μέση ταχύτητα για $l_{r2} = 0.25l_{tot}$	109
Σχήμα 4.25.α) Μέση $\frac{v}{v_{max}}$ ταχύτητα και β) μέση ταχύτητα για $l_{r3} = 0.125l_{tot}$	110
Σχήμα 4.26. Μέση ταχύτητα στις εσοχές ως συνάρτηση του μήκους και του ύψους της προεξοχής. (η μέση τιμή της ταχύτητας προσδιορίζεται από το μέσο όρο της ταχύτητας των υπολογιστικών κελιών που βρίσκονται μέσα στην εσοχή).	111
Σχήμα 4.27. Ισοβαρείς για μήκος προεξοχής $l_{r1} = 0.5l_{tot}$ α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$	112
Σχήμα 4.28. Ισοβαρείς για μήκος προεξοχής $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$	113

Σχήμα 4.29. Ισοβαρείς για μήκος προεξοχής $l_{r3} = 0.125l_{tot}$ α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$	113
Σχήμα 4.30. Διαγράμματα της θερμοκρασίας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για μήκος $l_{r1} = 0.5l_{tot}$ και ύψος : α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$ (το y είναι σε μονάδες r_c) . Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα	116
Σχήμα 4.31. Διαγράμματα της θερμοκρασίας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για μήκος $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και ύψος : α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$ (το y είναι σε μονάδες r_c) . Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα	117
Σχήμα 4.32. Διαγράμματα της θερμοκρασίας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για μήκος $l_{r3} = 0.125l_{tot}$ και ύψος : α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$ (το y είναι σε μονάδες r_c) . Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα	118
Σχήμα 4.33. Μέγιστη ταχύτητα του ρευστού ως συνάρτηση του ύψους προεξοχής για μήκη προεξοχής: $l_{r1} = 0.50l_{tot}$, $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και $l_{r3} = 0.125l_{tot}$. $F_{ext} = 0.02$	121
Σχήμα 4.34. Μέγιστη πίεση του αγωγού ως συνάρτηση του ύψους προεξοχής για μήκη προεξοχής: $l_{r1} = 0.50l_{tot}$, $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και $l_{r3} = 0.125l_{tot}$. $F_{ext} = 0.02$	122
Σχήμα 4.35. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για ύψος προεξοχών $h = 0.10H$	124
Σχήμα 4.36. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για ύψος προεξοχών $h = 0.20H$	124
Σχήμα 4.37. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για ύψος προεξοχών $h = 0.30H$	125
Σχήμα 4.38. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για ύψος προεξοχών $h = 0.40H$	125
Σχήμα 4.39. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για μήκος προεξοχών $l_{r1} = 0.5l_{tot}$	126
Σχήμα 4.40. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για μήκος προεξοχών $l_{r2} = 0.25l_{tot}$	127
Σχήμα 4.41. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για μήκος προεξοχών $l_{r3} = 0.125l_{tot}$	127

Σχήμα 4.42. Μεταβολή της παραμέτρου A της εξίσωσης 4.1 συναρτήσει του αδιαστατοποιημένου ύψους της προεξοχής για αριθμό Re 1.0.	128
Σχήμα 5.1. Σύστημα προσομοίωσης για όλα τα ύψη προεξοχής και για μήκη $\alpha) l_{r1} = 0.5l_{tot}$, $\beta) l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και $\gamma) l_{r3} = 0.167l_{tot}$	133
Σχήμα 5.2. Διαγράμματα της πυκνότητας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για μήκος $l_{r1} = 0.5l_{tot}$ και ύψος : $\alpha) h = 0.10H$, $\beta) h = 0.20H$, $\gamma) h = 0.30H$ και $\delta) h = 0.40H$ (το y είναι σε μονάδες r_c). Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα	137
Σχήμα 5.3. Διαγράμματα της πυκνότητας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για μήκος $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και ύψος : $\alpha) h = 0.10H$, $\beta) h = 0.20H$, $\gamma) h = 0.30H$ και $\delta) h = 0.40H$ (το y είναι σε μονάδες r_c). Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα	138
Σχήμα 5.4. Διαγράμματα της πυκνότητας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για μήκος $l_{r3} = 0.167l_{tot}$ και ύψος : $\alpha) h = 0.10H$, $\beta) h = 0.20H$, $\gamma) h = 0.30H$ και $\delta) h = 0.40H$ (το y είναι σε μονάδες r_c). Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα	139
Σχήμα 5.5. Μέσος χρόνος παραμονής των σωματιδίων μέσα στις εσοχές ως συνάρτηση του μήκους και του ύψους της εσοχής.	141
Σχήμα 5.7. Ισοταχείς για μήκος προεξοχής $l_{r1} = 0.5l_{tot}$ $\alpha) h = 0.10H$, $\beta) h = 0.20H$, $\gamma) h = 0.30H$ και $\delta) h = 0.40H$	144
Σχήμα 5.8. Ισοταχείς για μήκος προεξοχής $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ $\alpha) h = 0.10H$, $\beta) h = 0.20H$, $\gamma) h = 0.30H$ και $\delta) h = 0.40H$	144
Σχήμα 5.9. Ισοταχείς για μήκος προεξοχής $l_{r3} = 0.167l_{tot}$ $\alpha) h = 0.10H$, $\beta) h = 0.20H$, $\gamma) h = 0.30H$ και $\delta) h = 0.40H$	145
Σχήμα 5.10.α) Μέση $\frac{v}{v_{max}}$ ταχύτητα και β) μέση ταχύτητα για $l_{r1} = 0.50l_{tot}$	146
Σχήμα 5.11.α) Μέση $\frac{v}{v_{max}}$ ταχύτητα και β) μέση ταχύτητα για $l_{r2} = 0.25l_{tot}$	146
Σχήμα 5.12.α) Μέση $\frac{v}{v_{max}}$ ταχύτητα και β) μέση ταχύτητα για $l_{r3} = 0.167l_{tot}$	147

Σχήμα 5.13. Μέση ταχύτητα στις εσοχές ως συνάρτηση του μήκους και του ύψους της προεξοχής. (η μέση τιμή της ταχύτητας προσδιορίζεται από το μέσο όρο της ταχύτητας των υπολογιστικών καλειών που βρίσκονται μέσα στην εσοχή).	148
Σχήμα 5.14. Ισοβαρείς για μήκος προεξοχής $l_{r1} = 0.5l_{tot}$ α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$	150
Σχήμα 5.15. Ισοβαρείς για μήκος προεξοχής $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$	151
Σχήμα 5.16. Ισοβαρείς για μήκος προεξοχής $l_{r3} = 0.167l_{tot}$ α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$	151
Σχήμα 5.17. Διαγράμματα της θερμοκρασίας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για μήκος $l_{r1} = 0.5l_{tot}$ και ύψος : α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$ (το y είναι σε μονάδες r_c) . Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα	154
Σχήμα 5.18. Διαγράμματα της θερμοκρασίας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για μήκος $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και ύψος : α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$ (το y είναι σε μονάδες r_c) . Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα	155
Σχήμα 5.19. Διαγράμματα της θερμοκρασίας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για μήκος $l_{r3} = 0.167l_{tot}$ και ύψος : α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$ (το y είναι σε μονάδες r_c) . Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα	156
Σχήμα 5.20. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για ύψος προεξοχών $h = 0.10H$	159
Σχήμα 5.21. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για ύψος προεξοχών $h = 0.20H$	159
Σχήμα 5.22. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για ύψος προεξοχών $h = 0.30H$	160
Σχήμα 5.23. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για ύψος προεξοχών $h = 0.40H$	160
Σχήμα 5.24. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για μήκος προεξοχών $l_{r1} = 0.50l_{tot}$	161

Σχήμα 5.26. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για μήκος προεξοχών $l r_3 = 0.167l_{tot}$	162
Σχήμα 6.1. Υπό μελέτη σύστημα για πλάκες με ορθογωνικές προεξοχές. Ορισμός υπολογιστικού φατνίου με το επίπεδο περιοδικότητας στο κέντρο της προεξοχής	165
Σχήμα 6.2. Σχηματική άποψη του υπό μελέτη αγωγού	166
Σχήμα 6.3. Υπό μελέτη σύστημα για πλάκες με ορθογωνικές προεξοχές. Διαμόρφωση πλέγματος με το επίπεδο περιοδικότητας στο κέντρο της προεξοχής	169
Σχήμα 6.4. Κατανομή του μέτρου της ταχύτητας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής. Re=3.30	172
Σχήμα 6.5. Κατανομή της αδιάστατης x- συνιστώσας της ταχύτητας στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής. Σύγκριση με την κατανομή της ταχύτητας της ροής Poiseuille (μαύρο). Re=3.3	173
Σχήμα 6.6. Ισοταχείς σε αγωγό με ορθογωνική προεξοχή. Re=3.3	174
Σχήμα 6.7. Ισοταχείς σε αγωγό με ορθογωνική προεξοχή. Re=0.3	175
Σχήμα 6.8. Ισοταχείς σε αγωγό με ορθογωνική προεξοχή. Re=40000	175
Σχήμα 6.9. Γραμμές ροής στην επάνω πλάκα σε αγωγό με ορθογωνική προεξοχή. Re=3.3	176
Σχήμα 6.10. Γραμμές ροής στην επάνω πλάκα σε αγωγό με ορθογωνική προεξοχή. Re=0.3	176
Σχήμα 6.11. Γραμμές ροής στην επάνω πλάκα σε αγωγό με ορθογωνική προεξοχή. Re=40000	177
Σχήμα 6.12. Πεδίο πίεσης σε αγωγό με ορθογωνική προεξοχή. Re=3.3	178
Σχήμα 6.13. Πεδίο πίεσης σε αγωγό με ορθογωνική προεξοχή. Re=0.3	179
Σχήμα 6.14. Σύγκριση της x- συνιστώσας της ταχύτητας για την προσομοίωση ροής σε νανοαγωγό με τη μέθοδο DPD και την προσομοίωση ροής σε αγωγό μακροσκοπικής κλίμακας με χρήση των εξισώσεων συνέχειας και ορμής, σε διατομές που βρίσκονται στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής. Re=8.0	180
Σχήμα 6.15. Σύγκριση της x- συνιστώσας της ταχύτητας για την προσομοίωση ροής σε αγωγό μεσοσκοπικής κλίμακας με τη μέθοδο DPD και την προσομοίωση σε αγωγό μακροσκοπικής κλίμακας με χρήση των εξισώσεων συνέχειας και ορμής, σε	

διατομές που βρίσκονται στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής. Re=8.0.....	181
Σχήμα 6.16. Ισοταχείς για : α) ροή σε νανοαγωγούς, β) ροή σε αγωγούς μεσοσκοπικής κλίμακας, γ) ροή σε αγωγούς μακροσκοπικής κλίμακας με περιοδικές προεξοχές. Re=8.0.....	182
Σχήμα 6.17. Αδιαστατοποιημένη πτώση πίεσης συναρτήσει του αριθμού Re για ύψος προεξοχής $h = 0.10H$	184
Σχήμα 7.1. Σύγκριση της αδιαστατοποιημένης πτώσης πίεσης και δύναμης συναρτήσει του αριθμού Re για ύψος προεξοχής $h = 0.10H$ και μήκος $l_{r1} = 0.50l_{tot}$ για επίλυση με τις εξισώσεις Navier-Stokes και τη μέθοδο DPD.	195

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΠΙΝΑΚΩΝ

Πίνακας 2.1. Μονάδες συστήματος DPD.....	26
Πίνακας 4.1. Αριθμός των σωματιδίων του συστήματος (με μπλέ αναγράφονται τα σωματίδια του τοίχου και με κόκκινο τα σωματίδια του ρευστού).....	96
Πίνακας 5.1. Αριθμός των σωματιδίων του συστήματος (με μπλέ αναγράφονται τα σωματίδια του τοίχου και με κόκκινο τα σωματίδια του ρευστού).....	134

1.ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η μελέτη ροών σε αγωγούς με πλάτος από μερικά νανόμετρα έως μερικά μέτρα αποτελεί εδώ και αρκετά χρόνια αντικείμενο έρευνας και μελέτης από την επιστημονική κοινότητα. Αγνοώντας τις κλίμακες κάτω από το ατομικό επίπεδο, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε δύο κύρια φυσικά μοντέλα και τα αντίστοιχα υπολογιστικά μοντέλα για την προσομοίωση ροής : α) τις μοριακές προσομοιώσεις και β) την προσέγγιση συνεχούς μέσου [Karniadakis et al., 2005; Dzwiniel et al., 2006; Fyta et al., 2006; Mukhopadhyay & Abraham, 2009].

Οι μοριακές προσομοιώσεις βασίζονται στην αλληλεπίδραση των σωματιδίων, των οποίων η χωρική εξέλιξη υπακούει στο νόμο κίνησης του Νεύτωνα, και λαμβάνει χώρα στην μικροκλίμακα. Η τεχνική της Μοριακής Δυναμικής (MD) είναι η πιο γνωστή μέθοδο αυτής της κατηγορίας. Η Μοριακή Δυναμική χρησιμοποιείται για τον προσδιορισμό των φυσικών ιδιοτήτων των ρευστών σε ατομικό επίπεδο [Narumi et al., 2001] και αποτελεί αντικείμενο μελέτης εδώ και περίπου 50 έτη [Koh et al., 2005]. Αφορά υλικά με χαρακτηριστικό μέγεθος της τάξης των 100nm ή μικρότερο [Koh et al., 2005] και χρονικά διαστήματα κάποιων δεκάδων νανοδευτερολέπτων (ns) [Karniadakis et al., 2005]. Η Μοριακή Δυναμική παρέχει ένα ‘υπολογιστικό μικροσκόπιο’ για τη μελέτη των φαινομένων που είναι πολύ δύσκολο να μελετηθούν πειραματικά. Η βιοχημεία και η μοριακή βιολογία στηρίζονται σε μεθόδους Μοριακής Δυναμικής για την παρατήρηση των πρωτεϊνών, των νουκλεϊκών οξέων κ.λ.π. [Bowers et al., 2005]. Είναι, ίσως, η μόνη ακριβής προσέγγιση για την προσομοίωση ροών στη νανοκλίμακα και τη μικροκλίμακα. Η κύρια ιδέα πίσω από την κλασική Μοριακή Δυναμική είναι ο υπολογισμός των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των σωματιδίων και η επίλυση των

εξισώσεων του Νεύτωνα για κάθε σωματίδιο έτσι ώστε να εξαχθούν οι θερμοδυναμικές ιδιότητες, όπως η πυκνότητα, η ταχύτητα, η πίεση και οι ιδιότητες μεταφοράς (ιξώδες όγκου και διάτμησης, θερμική αγωγιμότητα, κ.α.) [Allen and Tildesley 1987; Haile, 1992; Raparport, 1995]. Οι προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής σε νανοκλίμακα (για παράδειγμα, Holian, and Ravelo, 1995; Moscinski et al., 1997; Abraham et al., 1998) παρουσιάζουν ακόμη πολύ μεγάλο ενδιαφέρον σε σύνθετα μοριακά συστήματα και η σημαντικότητα τους δεν μπορεί να υποτιμηθεί, ειδικά όταν αυτές εφαρμόζονται σε έρευνες για νέα υλικά, σύνθετα φαινόμενα, χημικές αντιδράσεις, διεπιφανειακά φαινόμενα και ούτε καθεξής. Ακόμη, οι προσομοιώσεις σε ατομική κλίμακα μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την εξαγωγή καταστατικών νόμων, οι οποίοι μπορούν να βρουν εφαρμογή σε μοντέλα μακροκλίμακας.

Θα μπορούσε προφανώς να θεωρηθεί ότι η Μέθοδος Μοριακής Δυναμικής μπορεί να δώσει λύσεις και σε πολύ μεγάλου μεγέθους προβλήματα (της τάξεως των μερικών μικρομέτρων). Αυτό μεθοδολογικά είναι εφικτό, είναι όμως ανέφικτο υπολογιστικά. Η διαπίστωση αυτή γίνεται κατανοητή αν σκεφτεί κανείς ότι για την μοντελοποίηση ενός συστήματος της τάξεως των μερικών μικρομέτρων χρησιμοποιώντας την Μοριακή Δυναμική σε τρεις διαστάσεις, απαιτούνται περισσότερα από 10^9 σωματίδια και 10^5 - 10^6 χρονοβήματα [Beazley et al., 1996, Vashishta and Nakano, 1999]. Από την άλλη πλευρά, η μέθοδος της Μοριακής Δυναμικής είναι ανεπιτυχής στην προσομοίωση ροών αερίου εξαιτίας των μεγάλων αποστάσεων μεταξύ των σωματιδίων που απαιτούν αντίστοιχα μεγάλα υπολογιστικά χωρία [Karniadakis et al., 2005].

Η προσέγγιση συνεχούς μέσου από την άλλη, αγνοεί την ατομική φύση της ύλης, υποθέτει τη συνεχή κατανομή της ύλης σε ένα υποθετικό ‘continuum’ και στηρίζεται στις αρχές διατήρησης της μάζας, της ορμής και της συνέχειας μακροσκοπικά [Λιακόπουλος, 2008]. Η προσέγγιση αυτή επιτρέπει τον υπολογισμό των μακροσκοπικών ιδιοτήτων της ροής. Το μαθηματικό μοντέλο αποτελείται από ένα μη γραμμικό σύστημα διαφορικών εξισώσεων. Η επίλυση γίνεται συνήθως με την χρήση πεπερασμένων στοιχείων (FEM) ή πεπερασμένων διαφορών (FDM). Οι εξισώσεις επιλύονται σε κάθε χρονικό βήμα και υπολογίζονται οι μακροσκοπικές ποσότητες όπως π.χ. η πυκνότητα, η ορμή και η ενέργεια στους κόμβους του πλέγματος. Για περισσότερο σύνθετα και μη γραμμικά μαθηματικά μοντέλα, το σύνολο των μη γραμμικών εξισώσεων πρέπει να επιλύεται σε κάθε χρονικό βήμα, το οποίο είναι δύσκολο σε συνεχείς μεθόδους, ειδικότερα για προβλήματα με απότομες μεταβολές στις φυσικές ιδιότητες [Thompson et al., 2002].

Η προσέγγιση του συνεχούς μέσου επιτρέπει την επίλυση ροικών συστημάτων μεγάλου μεγέθους, χωρίς όμως να παρέχει στοιχεία της μικροδομής. Υπάρχουν πολλές έρευνες που έχουν αποδείξει ότι η προσέγγιση αυτή παύει να ισχύει σε αγωγούς μικρού πλάτους. Αρχικά, η κατανομή της πυκνότητας θεωρείται ομοιογενής στην προσέγγιση συνεχούς μέσου, ενώ στην πραγματικότητα παρουσιάζει ισχυρές ταλαντώσεις σε περιοχές κοντά στα στερεά τοιχώματα. Η ανομοιογένεια αυτή δεν λαμβάνεται υπόψη στην προσέγγιση συνεχούς μέσου. Η ανομοιογένεια της πυκνότητας κοντά στα στερεά τοιχώματα αποτελεί μια γενική διαπίστωση η οποία έχει παρατηρηθεί σε όλες τις προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής και έχει επιβεβαιωθεί και πειραματικά ([Chan & Horn, 1985; Zhu & Granick, 2002; Zhu & Granick, 2001]). Ακόμη, η προσέγγιση

συνεχούς μέσου ‘προβλέπει’ παραβολική κατανομή της ταχύτητας κατά μήκος του αγωγού για την περίπτωση της ροής Poiseuille. Στην πραγματικότητα όμως η ταχύτητα αποκλίνει από την παραβολική συμπεριφορά για αγωγούς πλάτους μικρότερου από 10σ, όπου σ είναι η διάμετρος του ρευστού ([Travis & Gubbins, 2000; Travis et al., 1997]). Ένας μεγάλος αριθμός δημοσιεύσεων παρέχει κατανομές πυκνότητας και ταχύτητας σε διάφορες θερμοκρασίες, διαφορετικές πυκνότητες του ρευστού και διαφορετικές τιμές του μέτρου της εξωτερικής δύναμης για πλάτος από 4σ έως 100σ ([Travis & Gubbins, 2000; Travis et al., 1997; Heinbuch & Fischer, 1989; Akhmatkaya et al., 1997; Ziarani & Mohammad, 2005; Sofos et al., 2008; Somers & Davis, 1991]), όπου φαίνεται ακόμη καλύτερα η κατάρρευση των εξισώσεων Navier-Stokes σε αγωγούς μικρού πλάτους. Σημαντικό είναι ακόμη να αναφερθεί ότι μειονέκτημα της μεθόδου αποτελεί η θεώρηση της συνθήκης μη ολίσθησης στα όρια των στερεών τοιχωμάτων. Στις εργασίες των ([Heinbuch & Fischer, 1989; Galea & Attard, 2004; Hansen & Ottesen, 2006; Sofos, 2009]) απεδείχθη ότι η υπόθεση της συνθήκης μη ολίσθησης καταρρέει σε αγωγούς μικρού πλάτους. Τέλος, αναφορικά με τις ιδιότητες μεταφοράς του ρευστού, η προσέγγιση συνεχούς μέσου θεωρεί σταθερή τιμή σε κάθε σημείο του, ενώ στην πραγματικότητα η τιμή τους μεταβάλλεται κοντά στα στερεά τοιχώματα ([Bitsanis et al., 1988; Hu et al., 1996; Sofos et al., 2008]).

Η αδυναμία αφενός των μοριακών προσομοιώσεων να μελετήσουν μεγάλου μεγέθους προβλήματα και αφετέρου η αδυναμία της προσέγγισης συνεχούς μέσου να παρέχει λεπτομέρειες της μικροδομής και να δίνει λύσεις σε αγωγούς μικρού πλάτους δημιουργούν την ανάγκη για την ανάπτυξη μεσοσκοπικών μεθόδων οι οποίες θα συνδυάζουν, όσο αυτό είναι εφικτό, τα πλεονεκτήματα και των δύο μεθόδων. Θα

παρέχουν δηλαδή αφενός λεπτομέρειες της μικροδομής των υλικών με μια πιθανότητα ‘χονδρόκοκη’ προσέγγιση (coarse-graining procedure) και αφετέρου θα απαιτούν χαμηλότερη υπολογιστική ισχύ καθώς θα αναφέρονται σε μεγαλύτερου μεγέθους σωματίδια εξαιτίας της χονδρόκοκης προσέγγισης.

Σήμερα, έχουν αναπτυχθεί και χρησιμοποιηθεί διάφορες μέθοδοι μεσοσκοπικής προσέγγισης. Μία από αυτές είναι η μέθοδος Άμεσης Προσομοίωσης Monte Carlo (Direct Simulation Monte Carlo – DSMC). Η μέθοδος αυτή προτάθηκε από τον Bird [Bird, 1963] και έχει στατιστικό χαρακτήρα. Βασίζεται στην προσομοίωση σωματιδίων των οποίων ο αριθμός είναι μικρότερος από τον πραγματικό αριθμό των μορίων της ροής. Τα σωματίδια αυτά συγκρούονται και η διαδικασία μοντελοποιείται ως στατιστική διαδικασία. Η μέθοδος αυτή είναι πιο οικονομική από αυτή της Μοριακής Δυναμικής αλλά παρουσιάζει το μειονέκτημα της εμφάνισης στατιστικού θορύβου σε έρπουσες ροές [Oran et al., 1998]. Ακόμη, στις μεσοσκοπικές προσεγγίσεις σημαντική επιτυχία έχουν σημειώσει οι μέθοδοι Lattice gas και Lattice Boltzmann Gas (LBG). Η επιτυχία αυτή προκύπτει από την υπολογιστική απλότητα της μεθόδου, η οποία με την σειρά της προέρχεται από την απλοποίηση των κανόνων αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων με την χρήση μοντέλων όπως: το μοντέλο BGK [Bhatnagar et al., 1954; Welandar, 1954], το μοντέλο S [Shakhov, 1974] και το ελλειψοειδές μοντέλο ES [Cercignani, 1969].

Πέραν αυτών των μεθόδων μεσοσκοπικής προσομοίωσης αναπτύχθηκαν και άλλες μέθοδοι στις οποίες το μαθηματικό μοντέλο δεν εφαρμόζεται σε κάποιο στοιχείο του καννάβου αλλά αφορούν σωματιδιακές προσομοιώσεις (off-grid particle methods). Σημαντικότερες από αυτές είναι η μέθοδος DPD (Dissipative Particle

Dynamics) [Hoogerbrugge & Koelman, 1992; Espagnol, 1995], η SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) [Monaghan, 1992] και η DEM (Discrete Element Method) [Cundall, 1979]. Βασικό χαρακτηριστικό αυτών των μεθόδων είναι ότι μπορούν εύκολα να δώσουν λύση σε μεγάλου μεγέθους προβλήματα (περισσότερα από 10^7 σωματίδια). Ακόμη, οι σωματιδιακές προσομοιώσεις προσεγγίζουν καλύτερα από φυσικής άποψης τη δυναμική συμπεριφορά των ρευστών σε αντίθεση με τις μεθόδους όπου η επίλυση γίνεται με βασικές αγνώστους τις τιμές u, v, w, p, T πάνω σε κόμβους. Επιπλέον, σε σύγκριση με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής είναι αναμφισβήτητα οικονομικές από άποψη υπολογιστικού χρόνου καθώς για ίδιου μεγέθους προσομοιώσεις εξοικονομούν σημαντικό χρόνο κατά τον υπολογισμό των αλληλεπιδράσεων των σωματιδίων γιατί αφορούν μεγαλύτερου μεγέθους σωματίδια [Dzwiniel et al., 2000]

Μία από τις σωματιδιακές μεθόδους και συγκεκριμένα η μέθοδος προσομοίωσης DPD (Dissipative Particle Dynamics) χρησιμοποιείται στην παρούσα διατριβή για την μοντελοποίηση πολλαπλής κλίμακας ροής σε αγωγούς με περιοδικές προεξοχές. Η μέθοδος αυτή συνδυάζει χαρακτηριστικά της Μοριακής Δυναμικής και της μεθόδου Lattice Boltzmann (LBM) [Fyta et al., 2006]. Σε αντίθεση με την μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής η μέθοδος DPD αφορά μεγαλύτερου μεγέθους σωματίδια καθώς και μεγαλύτερα χρονικά βήματα εξαιτίας των χαμηλών απωστικών δυνάμεων μεταξύ των σωματιδίων [Fedosov et al., 2008]. Η μέθοδος προτάθηκε από τους [Hoogerbrugge & Koelman, 1992] ως μία μέθοδος προσομοίωσης για την αποφυγή αφενός των τρόπων επίλυσης της μεθόδου προσομοίωσης Lattice Boltzmann, με τη χρήση δηλαδή των μοντέλων απλοποίησης των συγκρούσεων των σωματιδίων, και αφετέρου για την

επίλυση προβλημάτων μεγαλύτερης κλίμακας από αυτά της Μοριακής Δυναμικής [Revena et al., 1999]. Στη μέθοδο Dissipative Particle Dynamics το σύστημα αποτελείται από σωματίδια που αντιπροσωπεύουν τμήματα ρευστού, και όχι μεμονωμένα άτομα ή μόρια.

Στο κεφάλαιο αυτό που αποτελεί και το πρώτο της διατριβής έγινε μια σύντομη ανασκόπηση στις μεθόδους προσομοίωσης νάνο-, μέσο και μακρο-κλίμακας με έμφαση στις μεθόδους της μεσοσκοπικής κλίμακας.

Στο δεύτερο κεφάλαιο παραθέτουμε τις βασικές αρχές που διέπουν ένα σύστημα DPD και παρουσιάζουμε τα πλεονεκτήματα της μεθόδου έναντι άλλων γνωστών μεθόδων προσομοίωσης. Παρουσιάζουμε τις μαθηματικές εξισώσεις που χαρακτηρίζουν το σύστημα καθώς και τις οριακές συνθήκες που παίζουν καθοριστικό ρόλο στην προσομοίωση. Στη συνέχεια γίνεται συνοπτική αναφορά στις βασικότερες μεθόδους αριθμητικής ολοκλήρωσης. Στο τέλος του κεφαλαίου γίνεται αναφορά στην επιλογή των παραμέτρων προσομοίωσης σε ένα σύστημα DPD και περιγράφεται το σύστημα μονάδων που εφαρμόζεται στη συνέχεια για διευκόλυνση της σύγκρισης των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης.

Στο τρίτο κεφάλαιο εφαρμόζεται η μέθοδος DPD στη ροή Poiseuille σε νανοαγωγούς και αγωγούς μεσοσκοπικής κλίμακας. Η ροή Poiseuille αποτελεί το πρόβλημα βάση για την επιβεβαίωση της εγκυρότητας της μεθόδου προσομοίωσης ώστε να είναι δυνατή η περαιτέρω χρήση του σε πιο πολύπλοκα προβλήματα. Εξετάζουμε στο νανοαγωγό όλες τις παραμέτρους που υπεισέρχονται σε ένα σύστημα DPD και την επίδραση τους στις προβλέψεις των μακροσκοπικών ιδιοτήτων της ροής (πυκνότητα, ταχύτητα, πίεση, θερμοκρασία). Στη συνέχεια επιλύεται η ροή Poiseuille

σε αγωγό μεσοσκοπικής κλίμακας και παρουσιάζονται και για αυτή την περίπτωση λεπτομερή διαγράμματα των μακροσκοπικών μεγεθών.

Στο τέταρτο και πέμπτο κεφάλαιο μελετάται η ροή σε νανοαγωγούς και αγωγούς μεσοσκοπικής κλίμακας αντίστοιχα με περιοδικές προεξοχές με τη χρήση της μεθόδου DPD. Καταγράφεται η επιρροή των προεξοχών στις μακροσκοπικές ιδιότητες της ροής και εντοπίζονται οι διαφορές των μεγεθών αυτών για τις ροές στους νανοαγωγούς και αγωγούς μεσοσκοπικής κλίμακας.

Στο έκτο κεφάλαιο επιλύονται οι διαφορικές εξισώσεις συνέχειας και ορμής για τη μελέτη της ροής σε αγωγούς με ορθογωνικές προεξοχές. Παρουσιάζεται το πεδίο ροής για δύο διαφορετικούς αριθμούς Re και στο τέλος του κεφαλαίου γίνεται σύγκριση των αποτελεσμάτων των διαφορικών εξισώσεων συνέχειας και ορμής με τα αποτελέσματα της μεθόδου προσομοίωσης DPD.

Στο έβδομο και τελευταίο κεφάλαιο συνοψίζονται τα αποτελέσματα της διατριβής.

2. ΜΕΘΟΔΟΣ DISSIPATIVE PARTICLE DYNAMICS

Στις προσομοιώσεις DPD, τα σωματίδια αλληλεπιδρούν μέσω των συντηρητικών δυνάμεων, των στοχαστικών δυνάμεων και των δυνάμεων απωλειών [Pivkin & Karniadakis., 2005; Liu et al., 2006]. Οι συντηρητικές δυνάμεις αναγκάζουν τα ρευστά σωματίδια σε κίνηση εξαιτίας των δυνάμεων αλληλεπίδρασης. Οι δυνάμεις απωλειών αντικατοπτρίζουν τις αντιστάσεις λόγω ιξώδους σε διάφορα τμήματα του ρευστού. Οι στοχαστικές δυνάμεις τέλος, μοντελοποιούν τους βαθμούς ελευθερίας του συστήματος που έχουν αφαιρεθεί από το σύστημα κατά τη διάρκεια της διαδικασίας επίλυσης με μεγαλύτερα τμήματα ρευστού από αυτά της Μοριακής Δυναμικής. Τα δύο τελευταία είδη δυνάμεων λειτουργούν ως θερμοστάτης για την διατήρηση σταθερής θερμοκρασίας στο σύστημα. Η συμπεριφορά αυτών των δυνάμεων ικανοποιεί το θεώρημα διακύμανσης [Español & Warren, 1995] το οποίο βεβαιώνει ότι η θερμοδυναμική ισορροπία στο σύστημα ακολουθεί την κανονική κατανομή και θα παρουσιαστεί αναλυτικότερα σε επόμενη παράγραφο.

Ανακεφαλαιώνοντας, η μέθοδος προσομοίωσης Dissipative Particle Dynamics έχει τα ακόλουθα χαρακτηριστικά:

- Οι θέσεις και οι ταχύτητες των σωματιδίων είναι συνεχείς μεταβλητές όπως στην περίπτωση της Μοριακής Δυναμικής, ενώ το χρονικό βήμα είναι διακριτή μεταβλητή, όπως στην περίπτωση της προσομοίωσης με τη μέθοδο Lattice Boltzmann.
- Οι συντηρητικές δυνάμεις μεταξύ των σωματιδίων ρευστού είναι λιγότερο απωθητικές σε σχέση με αυτές στην περίπτωση της Μοριακής Δυναμικής

με αποτέλεσμα να είναι εφικτή η επίλυση προσομοιώσεων μεγαλύτερης χρονικής κλίμακας σε σχέση με αυτή της Μοριακής Δυναμικής.

- Η υδροδυναμική συμπεριφορά παρατηρείται σε μικρότερο αριθμό σωματιδίων σε σχέση με αυτό της Μοριακής Δυναμικής, καθώς σε ένα σωματίδιο DPD μπορεί να αντιστοιχήσει συσσωμάτωμα μορίων και όχι ένα μεμονωμένο άτομο ή μόριο.
- Το χρονικό βήμα είναι μεγαλύτερο από αυτό της Μοριακής Δυναμικής.

Στην επόμενη παράγραφο θα παρουσιαστούν αναλυτικά οι βασικές εξισώσεις που διέπουν την μέθοδο προσομοίωσης που μελετάται καθώς και λεπτομέρειες των οριακών συνθηκών που χρησιμοποιούνται για την επίλυση του μοντέλου προσομοίωσης.

2.1 Μαθηματικές εξισώσεις

Το σύστημα DPD αποτελείται από N σωματίδια. Για το i th σωματίδιο προσδιορίζεται η μάζα m_i , η θέση \vec{r}_i και η ταχύτητα του \vec{v}_i , $i=1,2,\dots,N$. Γενικά, κάθε σωματίδιο αντιπροσωπεύει ένα συσσωμάτωμα μορίων και όχι ένα μεμονωμένο μόριο.

Η συνολική δύναμη που ασκείται από ένα σωματίδιο i σε ένα σωματίδιο j αποτελείται από τρεις συνιστώσες: (1) τη συντηρητική δύναμη \vec{F}_{ij}^C ; (2) τη δύναμη απωλειών \vec{F}_{ij}^D ; (3) τη στοχαστική δύναμη \vec{F}_{ij}^R , που δίνονται από τους τύπους,

$$\vec{F}_{ij}^C(r_{ij}) = \begin{cases} \alpha_{ij} \left(1 - \frac{r_{ij}}{r_c}\right) \hat{r}_{ij}, & \text{for } r_{ij} \leq r_c \\ 0, & \text{for } r_{ij} > r_c \end{cases} \quad (2.1)$$

$$\vec{F}_{ij}^D = -\gamma\omega^D(r_{ij})(\vec{v}_{ij} \cdot \hat{r}_{ij})\hat{r}_{ij} \quad (2.2)$$

$$\vec{F}_{ij}^R = \sigma\omega^R(r_{ij})\xi_{ij}\hat{r}_{ij} \quad (2.3)$$

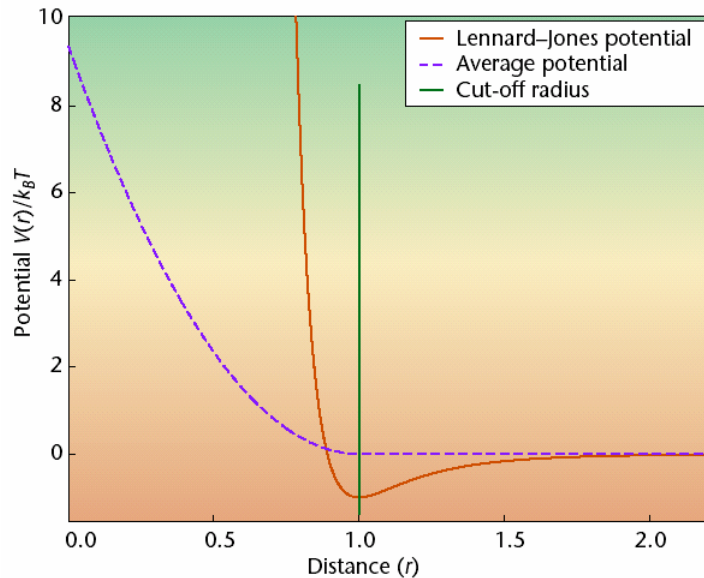
όπου $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$, $r_{ij} = |\vec{r}_{ij}|$, $\hat{r}_{ij} = \frac{\vec{r}_{ij}}{|\vec{r}_{ij}|}$, $\vec{v}_{ij} = \vec{v}_i - \vec{v}_j$ [Espanol & Warren, 1995] και α_{ij} είναι

ο συντελεστής αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων i και j , όπως αυτός προσδιορίζεται στην εργασία των [Henrich et al., 2007]. Οι παράμετροι γ και σ δηλώνουν την βαρύτητα των δυνάμεων απωλειών και των στοχαστικών δυνάμεων αντιστοίχως και τα ω^D και ω^R είναι συντελεστές βαρύτητας. Στην Εξ. 2.3 ο ξ_{ij} είναι ένας πίνακας που αποτελείται από μεταβλητές Γκαουσιανής κατανομής [Groot & Warren, 1997]. Η εξίσωση $\xi_{ij} = \xi_{ji}$ εκφράζει τη αρχή διατήρησης της ορμής [Karniadakis et al., 2005]. Η παράμετρος των στοχαστικών δυνάμεων, σ , 'ελέγχει' την ταχύτητα στην οποία το σύστημα ανταποκρίνεται στις μεταβολές της θερμοκρασίας. Υπάρχει ένα ανώτατο όριο για την παράμετρο αυτή που προσδιορίζεται από την αριθμητική ολοκλήρωση που χρησιμοποιείται κατά την επίλυση, όπως επίσης και από το χρονικό βήμα και τη θερμοκρασία του συστήματος [Keaveny et al., 2005].

Τα σωματίδια αλληλεπιδρούν μέσα σε μία ακτίνα αποκοπής r_c [Liu et al., 2006]. Η μεγαλύτερη επίδραση στις δυνάμεις και τη δυναμική ενέργεια προέρχεται από σωματίδια γειτονικά στο σωματίδιο ενδιαφέροντος. Για μικρής κλίμακας δυνάμεις, εφαρμόζουμε μια σφαιρική ακτίνα αποκοπής. Αυτό σημαίνει ότι το δυναμικό είναι ίσο με το μηδέν για $r_{ij} \geq r_c$, όπου r_c η ακτίνα αποκοπής.

Η συντηρητική δύναμη, \vec{F}_{ij}^C , αναφέρεται σε ένα δυναμικό χαμηλών απωθητικών αλληλεπιδράσεων (soft interaction potential), παρόμοιο με αυτό που

προτάθηκε από τους [Forest & Suter, 1995] στην προσομοίωση πολυμερών. Ο συστηματικός υπολογισμός του μέσου όρου ενός δυναμικού τύπου Lennard-Jones ή οι ταχύτατες κινήσεις των ατόμων κατά τη διάρκεια μικρών χρονικών βημάτων παράγουν ένα νέο δυναμικό που φαίνεται αναλυτικότερα στο Σχ. 2.1.



Σχήμα 2.1. Δυναμικό Lennard - Jones και ο μέσος όρος του δυναμικού (προσαρμοσμένο από [Symeonidis et al., 2005]).

Αντιθέτως προς τις υψηλές απωστικές αλληλεπιδράσεις του δυναμικού Lennard-Jones (που χρησιμοποιεί συχνά Μοριακή Δυναμική) οι οποίες απειρίζονται σε απόσταση $r = 0$, οι χαμηλές απωστικές αλληλεπιδράσεις που προάγονται στην μέθοδο προσομοίωσης Dissipative Particle Dynamics εμφανίζουν τιμή στην ίδια απόσταση ίση προς α_{ij} . Αυτό εξηγείται από το γεγονός ότι πιθανολογείται ότι δεν θα υπάρχουν άτομα σε απόσταση $r = 0$ για κάποιες πραγματικές εφαρμογές [Karniadakis et al., 2005].

Οι [Español & Warren, 1995] απέδειξαν ότι το σύστημα σταθεροποιείται σε θερμοκρασία T όταν οι στοχαστικές δυνάμεις και οι συντηρητικές δυνάμεις

ικανοποιούν το θεώρημα διακύμανσης (fluctuation dissipation theorem) το οποίο καταλήγει στις εξισώσεις

$$\omega^D(r_{ij}) = [\omega^R(r_{ij})]^2 \quad (2.4)$$

$$\sigma^2 = 2\gamma k_B T \quad (2.5)$$

όπου k_B είναι η σταθερά του Boltzmann. Μια τυπική επιλογή του συντελεστή βαρύτητας είναι

$$\omega^R(r_{ij}) = \begin{cases} \left(1 - \frac{r_{ij}}{r_c}\right)^p, & \text{for } r_{ij} \leq r_c \\ 0, & \text{for } r_{ij} > r_c \end{cases} \quad (2.6)$$

Όπου $p = 1$, για την πρότυπη μέθοδο προσομοίωσης DPD (έχει χρησιμοποιηθεί τιμή του συντελεστή ίση με $p = 0.25$ στην εφαρμογή του [Fan, 2006] με σκοπό την αύξηση του αριθμού Schmidt για τον οποίο θα μιλήσουμε λεπτομερώς σε επόμενο κεφάλαιο) [Fedosov, 2008].

Οι θέσεις και οι ταχύτητες των σωματιδίων σε κάθε χρονικό βήμα προσδιορίζονται από τους τύπους [Pivkin & Karniadakis, 2005]

$$d\vec{r}_i = \vec{v}_i dt \quad (2.7)$$

$$d\vec{v}_i = \frac{1}{m} (\vec{F}_i^C dt + \vec{F}_i^D dt + \vec{F}_i^R \sqrt{dt}) \quad (2.8)$$

όπου $\vec{F}_i^C = \sum_{i \neq j} \vec{F}_{ij}^C$, $\vec{F}_i^D = \sum_{i \neq j} \vec{F}_{ij}^D$ και $\vec{F}_i^R = \sum_{i \neq j} \vec{F}_{ij}^R$.

Ο συντελεστής της ταχύτητας που οφείλεται στις στοχαστικές δυνάμεις έχει τον όρο \sqrt{dt} αντί του όρου dt . Αυτός ο όρος παριστάνει την κίνηση Brown (Brownian motion) η οποία περιγράφεται από μία διαδικασία Wiener με μία διακύμανση που δίνεται από την σχέση

$$R_{FF}(t_i, t_j) = e^{-\gamma|t_i - t_j|} \quad (2.9)$$

από όπου παρατηρούμε ότι ο όρος $\left(\frac{1}{\gamma}\right)$ είναι το μήκος συσχέτισης στο χρόνο για αυτή τη στοχαστική διαδικασία [Karniadakis et al., 2005].

2.2 Οριακές συνθήκες

Οι οριακές συνθήκες παίζουν σημαντικό ρόλο για ένα σύστημα DPD. Όπως έχει ήδη αναφερθεί στην παράγραφο 2.1 του παρόντος οι χαμηλές απωστικές αλληλεπιδράσεις τοίχου και ρευστού δεν εμποδίζουν την απομάκρυνση των σωματιδίων ρευστού από τον αγωγό. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα να απαιτείται επιπλέον προσπάθεια ώστε τα σωματίδια του ρευστού να επιστρέφουν στο εσωτερικό του αγωγού.

Για την αποφυγή της απομάκρυνσης σωματιδίων χρησιμοποιήθηκαν ποικίλες μέθοδοι από διάφορους ερευνητές, όπως η υψηλότερη πυκνότητα των σωματιδίων του τοίχου αλλά και οι υψηλότερες απωστικές δυνάμεις που ενδυναμώνουν την επιρροή των σωματιδίων του τοίχου έναντι των σωματιδίων του ρευστού. Αυτό όμως οδηγεί σε σημαντικές διακυμάνσεις της πυκνότητας του ρευστού αλλά και εμφάνιση ταχύτητας στα στερεά τοιχώματα, κατάρρευση δηλαδή της συνθήκης μη ολίσθησης. Η ανάγκη για περισσότερο ευσταθείς λύσεις που να ικανοποιούν τη συνθήκη μη ολίσθησης αλλά και την αποφυγή των διακυμάνσεων της πυκνότητας, οδήγησε τους επιστήμονες σε αναζήτηση άλλων μεθόδων εισαγωγής των οριακών συνθηκών. Οι πιο συνηθισμένες από αυτές τις μεθόδους είναι οι ακόλουθες:

- **Ψύξη των σωματιδίων του τοίχου** με στόχο τη δημιουργία ενός άκαμπτου τοίχου. Η μέθοδος αυτή χρησιμοποιήθηκε κυρίως για την προσομοίωση κολλοειδών συστημάτων [Revenga et al., 1998].
- Χρήση τριών μεθόδων ανάκλασης στα όρια των τοίχων που είναι: 1) η **Maxwellian ανάκλαση**, η **bounce – back** και η **κατοπτρική – specular ανάκλαση**. Στην περίπτωση της ανάκλασης Maxwellian τα σωματίδια επιστρέφουν στο εσωτερικό του αγωγού με ταχύτητα η οποία ακολουθεί την κατανομή Maxwellian γύρω από ένα σωματίδιο τοίχου. Στην bounce-back ανάκλαση τόσο η οριζόντια όσο και η κατακόρυφη συνιστώσα της ταχύτητας αντιστρέφονται. Τέλος στην specular ανάκλαση αντιστρέφεται μόνον η κατακόρυφη συνιστώσα της ταχύτητας, ενώ η οριζόντια παραμένει αμετάβλητη [Revenga et al., 1999].
- Εισαγωγή ενός **λεπτού στρώματος σωματιδίων** κοντά στα όρια των τοίχων. Το στρώμα αυτό παρεμβάλλεται ανάμεσα στον τοίχο και στα ρευστά σωματίδια. Η παρουσία του λεπτού στρώματος εξυπηρετεί την ισχύ της συνθήκης μη ολίσθησης στο όριο του τοίχου. Η θέση και η ταχύτητα των σωματιδίων που συνθέτουν αυτό το στρώμα καθορίζεται από τα σωματίδια που βρίσκονται μέσα στο υπολογιστικό φατνίο, με τρόπο ώστε η μέση τιμή του ζεύγους των σωματιδίων μέσα και έξω από τον τοίχο να ικανοποιεί πάντοτε τις δεδομένες οριακές συνθήκες [Fan et al., 2003]. Η μέθοδος βέβαια αυτή χρησιμοποιείται πάντοτε σε συνδυασμό με την ‘ψύξη’ των σωματιδίων του τοίχου και την αντανάκλαση στα όρια των τοίχων. Ακόμη, το πάχος του στρώματος αλλά και οι αποθηκευτικές δυνάμεις ανάμεσα στον

τοίχο και στα σωματίδια του ρευστού επιλέγονται με στόχο την ελαχιστοποίηση των διακυμάνσεων της πυκνότητας και της ταχύτητας που εμφανίζονται κοντά στα όρια των τοίχων. Τέλος, παρουσία αυτού του στρώματος εμποδίζεται η ψύξη του ρευστού από την απευθείας επαφή με τα παγωμένα σωματίδια του τοίχου. Η μέθοδος αυτή χρησιμοποιείται συνήθως σε προσομοιώσεις πολύπλοκης γεωμετρίας.

- **Η μέθοδος Lees-Edwards** που χρησιμοποιείται για την προσομοίωση των ‘διατμητικών’ ροών. Με τη χρήση αυτής της μεθόδου γίνεται σταδιακή εισαγωγή διατμητικής δύναμης στο ρευστό σε μια ροή τύπου Couette. Η μέθοδος αυτή διευκολύνει τον υπολογισμό ιξώδους διάτμησης σε μια προσομοίωση ρευστού ως συνάρτηση του ρυθμού διάτμησης [Chatterjee, 2007].
- **Οριακές συνθήκες κατά Pivkin** [Pivkin & Karniadakis, 2005] στα όρια των πλακών. Σύμφωνα με την μεθοδολογία αυτή εξισώνεται η δύναμη που ασκούν τα σωματίδια του ρευστού στον τοίχο με τη δύναμη που ασκούν τα σωματίδια του τοίχου σε αυτά του ρευστού. Με τον τρόπο αυτό επαναπροσδιορίζεται ο συντελεστής αλληλεπίδρασης των σωματιδίων ρευστού και τοίχου. Ειδικότερα, η σχέση που δίνει την τιμή του συντελεστή είναι

$$a_e = \frac{0.39 \left(n_f k_B T + 0.10 a_f n_f^2 \right)}{\left(0.0303 n_w^2 + 0.5617 n_w - 0.8536 \right)} \quad (2.10)$$

όπου a_e είναι ο συντελεστής αλληλεπίδρασης σωματιδίων τοίχου και ρευστού, n_f, n_w η αριθμητική πυκνότητα του ρευστού και του τοίχου αντίστοιχα και $k_B T$ η θερμοκρασία του συστήματος. Η μέθοδος αυτή εφαρμόζεται για αριθμητική πυκνότητα τοίχου ίση με 3-25 και μόνον για τετραγωνικό πλέγμα διάταξης των ατόμων του τοίχου.

Στην είσοδο και την έξοδο του υπολογιστικού φατνίου (κατεύθυνση $-x$) και σε κατεύθυνση κάθετη στη ροή (κατεύθυνση $-z$) χρησιμοποιήθηκαν περιοδικές συνθήκες. Η επίλυση μιας ροής Poiseuille θα ήταν πιθανότατα αδύνατη χωρίς τη χρήση περιοδικών συνθηκών. Η μετάβαση στη στρωτή ροή, πέραν της οποίας θα είναι λογική η καταγραφή των αποτελεσμάτων, απαιτεί την χρήση συστημάτων DPD με πολύ μεγάλο αριθμό σωματιδίων. Αυτό βέβαια αφενός δεν είναι εφικτό χωρίς τη χρήση υπερυπολογιστών (supercomputers) και αφετέρου η αύξηση του αριθμού των σωματιδίων οδηγεί σε τετραγωνική αύξηση του χρόνου προσομοίωσης με αποτέλεσμα να χρειαστεί και το χρονικό διάστημα κάποιων μηνών για την εξαγωγή αποτελεσμάτων για μια προσομοίωση.

2.3 Αριθμητική ολοκλήρωση

Αντίθετα με τις εξισώσεις επίλυσης της μεθόδου Μοριακής Δυναμικής, οι εξισώσεις της μεθόδου Dissipative Particle Dynamics είναι και στοχαστικές και αυτό εισάγει επιπλέον δυσκολία στην επίλυση. Πιο συγκεκριμένα, η στοχαστική δύναμη εξαρτάται από την ταχύτητα, η οποία εξαρτάται από την δύναμη, και έτσι δεν υπάρχει κάποια γραμμική προσέγγιση που να συνδέει τα δύο αυτά μεγέθη [Karniadakis et al.,

2005]. Παρακάτω θα παρουσιαστούν κάποια αριθμητικά σχήματα (μέθοδοι) που χρησιμοποιήθηκαν στο παρελθόν για την τελική διαμόρφωση των εξισώσεων της μεθόδου Dissipative Particle Dynamics:

1. Η μέθοδος Euler Forward (EF)

Σε αυτή τη μέθοδο, ο προσδιορισμός της ταχύτητας και της θέσης των σωματιδίων της χρονική στιγμή $(n+1)$ γίνεται με δεδομένη τη λύση τη χρονική στιγμή n . Επαναπροσδιορίζουμε τόσο τις ταχύτητες όσο και τις θέσεις των σωματιδίων απευθείας από την εξίσωση του Νεύτωνα [Pagonabarraga et al., 1998]. Αναλυτικότερα η μεθοδολογία αφορά τα εξής:

- Στο χρόνο $t^{(n+1)}$ προσδιορίζονται οι ταχύτητες και οι θέσεις των σωματιδίων από τις σχέσεις

$$\vec{v}_i^{n+1} = \vec{v}_i^n + \frac{1}{m_i} (\vec{F}_i^C dt + \vec{F}_i^D dt + \vec{F}_i^R \sqrt{dt}) \quad (2.11)$$

$$\vec{r}_i^{n+1} = \vec{r}_i^n + \vec{v}_i^n dt \quad (2.12)$$

- Στην συνέχεια προσδιορίζονται οι φυσικές ιδιότητες του ρευστού.

Η μέθοδος αυτή δεν χρησιμοποιείται άμεσα, ωστόσο είναι απαραίτητη στην διαμόρφωση περισσότερο πολύπλοκων αλγόριθμων και ακόμη σαν εκκίνηση για μεθόδους πολλαπλών ολοκληρώσεων σε διαφορετικά χρονικά βήματα [Karniadakis et al., 2005].

2. Η μέθοδος Velocity-Verlet (DPD-VV)

Η μεθοδολογία της μεθόδου περιλαμβάνει τα ακόλουθα:

- Στο χρόνο $t^{(n+1)}$ προσδιορίζονται οι ταχύτητες και οι θέσεις των σωματιδίων από τις σχέσεις

$$\vec{v}_i = \vec{v}_i + \frac{1}{2} \frac{1}{m_i} (\vec{F}_i^C dt + \vec{F}_i^D dt + \vec{F}_i^R \sqrt{dt}) \quad (2.13)$$

$$\vec{r}_i^{n+1} = \vec{r}_i^n + \vec{v}_i dt \quad (2.14)$$

$$\vec{v}_i^{n+1} = \vec{v}_i + \frac{1}{2} \frac{1}{m_i} (\vec{F}_i^C dt + \vec{F}_i^D dt + \vec{F}_i^R \sqrt{dt}) \quad (2.15)$$

- Στη συνέχεια προσδιορίζεται η δύναμη απωλειών \vec{F}_i^D και οι φυσικές ιδιότητες του ρευστού.

Οι δυνάμεις στο τελευταίο χρονικό βήμα επαναπροσδιορίζονται μέσω των ποσοτήτων \vec{v}_i και \vec{r}_i^{n+1} .

Η μέθοδος αυτή βασίζεται στον κλασικό αλγόριθμο της Μοριακής Δυναμικής Velocity-Verlet αλλά διαφέρει από αυτόν σε ένα βασικό σημείο. Η διαφορά είναι ότι η δύναμη απωλειών υπολογίζεται δύο φορές σε κάθε χρονικό βήμα για τον προσδιορισμό στη συνέχεια της ταχύτητας των σωματιδίων. Η διαδικασία βελτιώνει σημαντικά την απόδοση του συστήματος και καθιστά τη μέθοδο αποδοτική καθώς ο επαναπροσδιορισμός των δυνάμεων απωλειών δεν αποτελεί χρονοβόρα διαδικασία [Nikunen et al., 2003].

3. Η μέθοδος διαχωρισμού του Shardlow

Μία ακόμη προσέγγιση, η οποία συχνά χρησιμοποιείται στην κλασσική ρευστομηχανική είναι η διαδικασία διαχωρισμού (operator splitting) [Shardlow, 2003]. Η βασική ιδέα της μεθόδου είναι ότι οι συντηρητικές δυνάμεις υπολογίζονται ξεχωριστά από τις δυνάμεις απωλειών και τις στοχαστικές δυνάμεις. Αρχικά, υπολογίζονται η συντηρητικές δυνάμεις με την μέθοδο Μοριακής Δυναμικής και οι δυνάμεις απωλειών όπως και οι στοχαστικές δυνάμεις προσδιορίζονται με τη χρήση της στοχαστικής διαφορικής εξίσωσης Langevin. Η μέθοδος προτείνει δύο διαδικασίες διαχωρισμού (S1,S2) οι οποίες αναφέρονται στον πρώτο και δεύτερο βαθμό αντιστοίχως των εξισώσεων κίνησης [Karniadakis et al., 2005; Nikunen et al., 2003]. Η πρώτη διαδικασία διαχωρισμού (S1) που είναι η συνηθέστερη παρουσιάζεται παρακάτω (λεπτομέρειες για τη δεύτερη διαδικασία διαχωρισμού (S2) φαίνονται στην εργασία του [Shardlow, 2003]).

- Στο χρόνο $t^{(n+1)}$ προσδιορίζονται οι ποσότητες:

$$\bar{\mathbf{u}}_i = \mathbf{u}_i^n - \frac{1}{2} \frac{1}{m} \gamma \omega^2(\mathbf{r}_{ij}) (\mathbf{u}_{ij}^n \cdot \bar{\mathbf{r}}_{ij}) \bar{\mathbf{r}}_{ij} dt + \frac{1}{2} \frac{1}{m} \sigma \omega(\mathbf{r}_{ij}) \xi_{ij} \bar{\mathbf{r}}_{ij} \sqrt{dt} \quad (2.16)$$

$$\bar{\mathbf{u}}_j = \mathbf{u}_j^n + \frac{1}{2} \frac{1}{m} \gamma \omega^2(\mathbf{r}_{ij}) (\mathbf{u}_{ij}^n \cdot \bar{\mathbf{r}}_{ij}) \bar{\mathbf{r}}_{ij} dt - \frac{1}{2} \frac{1}{m} \sigma \omega(\mathbf{r}_{ij}) \xi_{ij} \bar{\mathbf{r}}_{ij} \sqrt{dt} \quad (2.17)$$

$$\bar{\bar{\mathbf{u}}}_i = \bar{\mathbf{u}}_i + \frac{1}{2} \frac{1}{m} \sigma \omega(\mathbf{r}_{ij}) \xi_{ij} \bar{\mathbf{r}}_{ij} \sqrt{dt} - \frac{1}{2} \frac{1}{m} \frac{\gamma \omega^2(\mathbf{r}_{ij}) dt}{1 + \gamma \omega^2(\mathbf{r}_{ij}) dt} [(\bar{\mathbf{u}}_{ij} \cdot \bar{\mathbf{r}}_{ij}) \bar{\mathbf{r}}_{ij} + \sigma \omega(\mathbf{r}_{ij}) \xi_{ij} \bar{\mathbf{r}}_{ij} \sqrt{dt}] \quad (2.18)$$

$$\bar{\bar{\mathbf{u}}}_j = \bar{\mathbf{u}}_j - \frac{1}{2} \frac{1}{m} \sigma \omega(\mathbf{r}_{ij}) \xi_{ij} \bar{\mathbf{r}}_{ij} \sqrt{dt} + \frac{1}{2} \frac{1}{m} \frac{\gamma \omega^2(\mathbf{r}_{ij}) dt}{1 + \gamma \omega^2(\mathbf{r}_{ij}) dt} [(\bar{\mathbf{u}}_{ij} \cdot \bar{\mathbf{r}}_{ij}) \bar{\mathbf{r}}_{ij} + \sigma \omega(\mathbf{r}_{ij}) \xi_{ij} \bar{\mathbf{r}}_{ij} \sqrt{dt}] \quad (2.19)$$

$$\tilde{v}_i = \bar{v}_i + \frac{1}{2} \frac{1}{m} F_i^C dt \quad (2.20)$$

$$r_i^{n+1} = r_i^n + \tilde{v}_i dt \quad (2.21)$$

$$v_i^{n+1} = \tilde{v}_i + \frac{1}{2} \frac{1}{m} F_i^C(r_j^{n+1}) dt \quad (2.22)$$

- Στην συνέχεια προσδιορίζονται οι φυσικές ιδιότητες του ρευστού.

4. Η εναλλακτική μέθοδος Lowe's

Η μέθοδος αυτή προτάθηκε από τον [Lowe, 1999] και διαφέρει από τις υπόλοιπες προσεγγίσεις της μεθόδου προσομοίωσης Dissipative Particle Dynamics. Στη μέθοδο αυτή η ολοκλήρωση των στοχαστικών δυνάμεων και των δυνάμεων απωλειών παρακάμπτεται. Συγκεκριμένα, ολοκληρώνονται οι εξισώσεις κίνησης του Νεύτωνα και στη συνέχεια το σύστημα θερμαίνεται ως εξής: Για όλα τα σωματίδια που βρίσκονται μέσα στη σφαίρα αλληλεπίδρασης ακτίνας r_c προσδιορίζουμε την πιθανότητα ($0 < \Gamma dt \leq 1$) (το Γ εκφράζει τη συχνότητα των στοχαστικών αλληλεπιδράσεων) για να προβλέψουμε μία σχετική ταχύτητα από μία κατανομή Maxwell. Έτσι λοιπόν για ένα συγκεκριμένο ζεύγος (ij) εξάγουμε αρχικά την σχετική ταχύτητα $v_{ij}^0 \cdot e_{ij}$ από μία κατανομή $\xi_{ij} \sqrt{2k_B T / m}$, όπου ο συντελεστής ξ_{ij} είναι μία Γκαουσιανή τυχαία μεταβλητή με μηδενικό μέσο όρο και διακύμανση όπως προηγουμένως. Αυτή η διαδικασία εισάγει στο σύστημα έναν θερμοστάτη τύπου Andersen [Andersen, 1980]. Ειδικότερα, για $\Gamma dt = 0$ το σύστημα δεν συσχετίζεται με τον θερμοστάτη ενώ για $\Gamma dt = 1$ οι ταχύτητες των σωματιδίων μεταβάλλονται λόγω επίδρασης θερμοκρασίας σε

κάθε χρονικό βήμα [Karniadakis et al., 2005; Nikunen et al., 2003]. Η μεθοδολογία της μεθόδου αφορά τα εξής:

- Στο χρόνο $t^{(n+1)}$ προσδιορίζονται οι ποσότητες:

$$\bar{v}_i = \bar{v}_i^n + \frac{1}{2} \frac{1}{m} \bar{F}_i^c dt \quad (2.23)$$

$$\bar{r}_i = \bar{r}_i^n + \bar{v}_i^n dt \quad (2.24)$$

$$\bar{\bar{v}}_i = \bar{v}_i + \frac{1}{2} \frac{1}{m} \bar{F}_i^c(\bar{r}_j) dt \quad (2.25)$$

- Για όλα τα ζεύγη σωματιδίων για τα οποία ισχύει $r_{ij} < r_c$, επιλέγεται πιθανότητα Γdt . Υπολογίζουμε τον όρο $v_{ij}^0 \cdot \bar{r}_{ij}$:

$$\Delta_{ij} = \frac{1}{2} \bar{r}_{ij} (v_{ij}^0 - \bar{\bar{v}}_{ij}) \cdot \bar{r}_{ij} \quad (2.26)$$

$$v_i^{n+1} = v_i^n + \Delta_{ij} \quad (2.27)$$

$$v_j^{n+1} = v_j^{n+1} - \Delta_{ij} \quad (2.28)$$

- Στη συνέχεια προσδιορίζονται οι φυσικές ιδιότητες του ρευστού

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιείται η μέθοδος ολοκλήρωσης Velocity-Verlet.

2.4 Επιλογή των παραμέτρων προσομοίωσης σε ένα σύστημα DPD

Κατά τη δημιουργία ενός μοντέλου προσομοίωσης με τη μέθοδο προσομοίωσης DPD χρειάζεται προσεκτική επιλογή των παραμέτρων που θα χρησιμοποιηθούν. Οι διάφορες παράμετροι του προγράμματος επηρεάζουν σημαντικά την ακρίβεια της επίλυσης, την ταχύτητα εκτέλεσης του προγράμματος και την ευστάθεια του συστήματος προσομοίωσης. Οι σημαντικότερες παράμετροι είναι:

- **Συντελεστές απωλειών και στοχαστικών δυνάμεων.** Η σχέση που συνδέει τις δύο αυτές παραμέτρους είναι το θεώρημα διακύμανσης που περιγράφηκε στην παράγραφο 2.1 του παρόντος. Μια από τις δύο παραμέτρους επιλέγεται και στη συνέχεια προσδιορίζεται η δεύτερη. Η επιλογή αυτών των παραμέτρων συμβάλλει και στον προσδιορισμό του χρονικού βήματος της προσομοίωσης. Οι [Groot & Warren, 1997] μελέτησαν την επιρροή του συντελεστή στοχαστικών δυνάμεων σ . Ανακάλυψαν ότι μια λογική τιμή για το συντελεστή αυτό είναι 3.0 (σε μονάδες DPD που θα περιγραφούν αναλυτικά σε επόμενη παράγραφο). Η τιμή αυτή οδηγεί το σύστημα σε ισορροπία σχετικά γρήγορα για συνήθεις θερμοκρασίες ($k_B T = 1-10$). Όταν ο συντελεστής αυξάνεται ($\sigma = 8$), η θερμοκρασία αυξάνεται πολύ γρήγορα και η προσομοίωση γίνεται ασταθής. Αντιθέτως, όταν ο συντελεστής μειώνεται το χρονικό διάστημα στο οποίο το σύστημα φτάνει σε ισορροπία δεν αλλάζει σημαντικά, παρόλα αυτά όμως η ταχύτητα στην οποία το σύστημα αντιδρά στις μεταβολές της θερμοκρασίας μειώνεται και η ακρίβεια των αποτελεσμάτων αμφισβητείται. Μια λογική λοιπόν επιλογή αυτών των παραμέτρων για μια γρήγορη προσομοίωση και ένα ευσταθές, φυσικό σύστημα είναι $\sigma = 3.0$, θερμοκρασίες $k_B T = 1-10$ και το γ να προσδιορίζεται εξ' αυτών από το θεώρημα διακύμανσης.
- **Συντελεστής αλληλεπίδρασης α_{ij} .** Ο συντελεστής αλληλεπίδρασης επιλέγεται με τέτοιο τρόπο ώστε ένα υποθετικό ρευστό DPD να ανταποκρίνεται σε ένα πραγματικό ρευστό, όπως για παράδειγμα το

νερό. Για να επιτευχθεί αυτό συγκρίνεται η αδιάστατη συμπίεστικότητα του ρευστού DPD με αυτή του νερού στους 300K ($15.9835 \approx 16$). Η σχέση από την οποία προκύπτει ο συντελεστής είναι

$$\alpha_{ij} = \frac{75K_B T}{n_f} \quad (2.29)$$

όπου $K_B T$ είναι η θερμοκρασία του συστήματος και n_f είναι η αριθμητική πυκνότητα του ρευστού.

- **Αριθμητική πυκνότητα του συστήματος.** Η αριθμητική πυκνότητα είναι μια παράμετρος που επιλέγεται από τον μελετητή σύμφωνα με το σύστημα που θέλει να προσομοιώσει. Αυτό που πρέπει όμως ο μελετητής να προσέξει κατά την επιλογή της τιμής είναι ότι καθώς ο αριθμός των αλληλεπιδράσεων για κάθε σωματίδιο αυξάνει γραμμικά με την πυκνότητα, ο απαιτούμενος χρόνος επεξεργασίας ανά χρονικό βήμα και ανά όγκο αναφοράς αυξάνει με το τετράγωνο της πυκνότητας. Για το λόγο αυτό ενδείκνυται η επιλογή μικρή τιμής της αριθμητικής πυκνότητας και στις περισσότερες εφαρμογές η τιμή επιλέγεται ίση με 3.0.

2.5 Σύστημα μονάδων

Σε αντίθεση με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής όπου τα σωματίδια αντιπροσωπεύουν άτομα ή μόρια, τα σωματίδια σε ένα σύστημα DPD δεν αναπαριστούν πραγματικά μεγέθη ατόμων ή μορίων. Αναπαριστούν, όπως προαναφέρθηκε τμήματα ρευστού που αλληλεπιδρούν μέσω φαινομενολογικών δυνάμεων.

Η μάζα και η ακτίνα αποκοπής αυτών των σωματιδίων επιλέγονται συνήθως για λόγους ευκολίας να είναι μονάδα. Οι ποσότητες που σχετίζονται με μεγέθη μάζας ή μήκους εισάγονται αδιάστατες με τη διαίρεση τους με τη μάζα και την ακτίνα των σωματιδίων. Απομένει λοιπόν ο προσδιορισμός του τρίτου βασικού μεγέθους της προσομοίωσης που είναι ο χρόνος. Θα μπορούσε να επιλεγεί και ο χρόνος μοναδιαίος αλλά επιλέγεται τελικά με στόχο την εξομάλυνση των ταχυτήτων των σωματιδίων με βάση το θεώρημα ισοκατανομής της ενέργειας (theorem of equipartition of energy).

Εφαρμογή αυτού του θεωρήματος οδηγεί στην μονάδα του χρόνου που είναι: $\sqrt{\frac{mr_c^2}{k_B T}}$

[Chen et al., 2007]. Μέσω αυτών των απλοποιήσεων όλες οι μονάδες εισάγονται σε αδιάστατη μορφή στο σύστημα που προσομοιώνουμε.

Για να εξάγουμε τα αποτελέσματα της προσομοίωσης σε πραγματικά φυσικά μεγέθη αρκεί να ορίσουμε την πραγματική τιμή της μάζας και της ακτίνας του σωματιδίου, όπως επίσης και τη θερμοκρασία του συστήματος. Τα υπόλοιπα μεγέθη, όπως για παράδειγμα οι θέσεις των σωματιδίων ή οι ταχύτητες προσδιορίζονται από κατάλληλους συνδυασμούς αυτών των τριών βασικών μεγεθών (βλέπε πίνακα 2.1).

Πίνακας 2.1. Μονάδες συστήματος DPD

Παράμετρος	Τυπικές μονάδες	Σύστημα DPD
Θερμοκρασία	T (°K)	$T^* = \frac{\varepsilon}{K_B T}$
Χρόνος	t (s)	$t^* = \frac{t}{\sqrt{\frac{mr_c^2}{k_B T}}}$
Μήκος	r (m)	$r^* = \frac{r}{r_c}$
Ταχύτητα	v (m/s)	$v^* = \frac{v}{\sqrt{\frac{k_B T}{m}}}$
Δύναμη	F (N)	$F^* = \frac{F}{\frac{r_c}{k_B T}}$

Έτσι λοιπόν η προσομοίωση σε ένα σύστημα DPD ανταποκρίνεται σε διάφορα φυσικά συστήματα ανάλογα με την επιλογή των παραμέτρων όπως η μάζα του σωματιδίου και η ακτίνα του, η θερμοκρασία του συστήματος και οι παράμετροι αλληλεπίδρασης των σωματιδίων. Για λόγους ευκολίας τα αποτελέσματα της μεθόδου DPD θα παρουσιαστούν σε μονάδες DPD όπως περιγράφηκαν σε αυτή την παράγραφο.

3. ΡΟΗ POISEUILLE: ΝΑΝΟ-, ΜΕΣΟ-, ΜΑΚΡΟ ΚΛΙΜΑΚΑ

3.1 Ροή Poiseuille σε Νανο-Αγωγούς

Στο προηγούμενο κεφάλαιο περιγράφηκαν οι βασικές αρχές της μεθόδου DPD, παρουσιάστηκαν οι μαθηματικές εξισώσεις που διέπουν ένα τέτοιο σύστημα και διερευνήθηκαν οι οριακές συνθήκες που απαιτούνται στις προσομοιώσεις. Στο παρόν κεφάλαιο θα μελετηθεί η ροή Poiseuille σε νανοαγωγούς και αγωγούς μεσοσκοπικής κλίμακας με τη χρήση της μεθόδου προσομοίωσης DPD. Η επίλυση της ροής Poiseuille στοχεύει στην επιβεβαίωση της ορθότητας των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης μετά από σύγκριση με γνωστές μέχρι στιγμής λύσεις ώστε να είναι δυνατή η περαιτέρω χρήση του μοντέλου για την προσομοίωση ροών σε αγωγούς με περιοδικές ορθογωνικές προεξοχές. Αφού μελετηθεί η ροή σε νανοαγωγούς και διερευνηθούν οι παράγοντες που επηρεάζουν τη ροή σε ένα τέτοιο σύστημα, θα γίνει η μετάβαση σε αγωγούς μεσοσκοπικής κλίμακας ώστε να διερευνηθεί η ικανότητα της μεθόδου να προσομοιώνει ροές σε αγωγούς μεγαλύτερων διαστάσεων.

3.1.1 Μοντελοποίηση του συστήματος προσομοίωσης

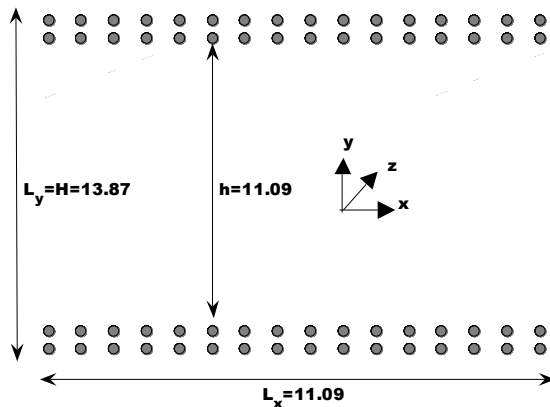
Με στόχο την κατανόηση της επίδρασης των διαφόρων παραμέτρων στη χρήση της μεθόδου προσομοίωσης DPD, προσομοιώθηκε η επίπεδη ροή Poiseuille σε ένα υπολογιστικό φαντίο διαστάσεων $L_x \times L_y \times L_z = 11.09 r_c \times 13.87 r_c \times 11.09 r_c$. Η γεωμετρία του συστήματος που μελετάται περιγράφεται στο Σχ.3.1. Περιοδικές συνθήκες θεωρούνται στις x- και z-κατευθύνσεις.

Στο ‘πρόβλημα βάση’ με το οποίο συγκρίνονται οι υπόλοιπες προσομοιώσεις ισχύουν τα ακόλουθα: η αριθμητική πυκνότητα του ρευστού είναι $n_f = 3$ και η θερμοκρασία του συστήματος είναι $k_B T = 1$. Οι συντελεστές των δυνάμεων απωλειών και των στοχαστικών δυνάμεων λαμβάνονται αντίστοιχα : $\sigma = 3$ και $\gamma = 4.5$. Ο συντελεστής αλληλεπίδρασης των σωματιδίων λαμβάνεται $a_{ij} = 25.0$. Το υποθετικό ρευστό που χρησιμοποιείται έχει μέγεθος σωματιδίων ίσο με το μέγεθος ενός ατόμου αργού και συμπίεστικότητα ίση με αυτή του νερού στους 300°K. Η εξωτερική δύναμη ανά σωματίδιο είναι $F_{ext} = 0.02 \text{DPD units}$ (για τις μονάδες βλέπε παράγραφο 2.5).

Ο τοίχος προσομοιώνεται με ακίνητα σωματίδια διατεταγμένα σε ένα τετραγωνικό πλέγμα πυκνότητας ίσης με αυτή του ρευστού, σε δύο σειρές κατά την y-κατεύθυνση. Τα σωματίδια του τοίχου αλληλεπιδρούν με τα σωματίδια του ρευστού, ωστόσο δεν τους επιτρέπεται η μετακίνηση. Θεωρήθηκαν ακόμη, οριακές συνθήκες στα όρια των τοίχων με στόχο την επιστροφή των σωματιδίων μέσα στο αγωγό όταν αυτά πλησιάζουν σε δεδομένη απόσταση από τον τοίχο (bounce-back συνθήκες).

Με σκοπό την διερεύνηση και κατηγοριοποίηση όλων των πιθανών παραμέτρων που επηρεάζουν την προσομοίωση σε ένα σύστημα DPD, χρησιμοποιήθηκαν διαφορετικές τιμές του συντελεστή αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων του τοίχου και των σωματιδίων του ρευστού. Μελετήθηκε ακόμη η επίδραση της εξωτερικής δύναμης που κινεί το ρευστό και εφαρμόζεται σε κάθε σωματίδιο του ρευστού ξεχωριστά. Διερευνήθηκε τέλος, η επίδραση της πυκνότητας του τοίχου και της ακτίνας αποκοπής της αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων. Σε κάθε μια από τις εφαρμογές μεταβάλλεται κάθε φορά μόνον ένας παράγοντας, διατηρώντας τους υπόλοιπους σταθερούς ώστε να είναι δυνατή η διερεύνηση της επιρροής του καθενός παράγοντα

στις πρόβλεψεις του μαθηματικού μοντέλου. Όλες οι προσομοιώσεις έγιναν με τη χρήση του πακέτου προσομοίωσης Large –scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) που αναπτύχθηκε στο SANDIA National Lab [Plimpton, 1995].



Σχήμα 3.1. Υπό μελέτη σύστημα στη ροή Poiseuille (τα μήκη εκφράζονται σε μονάδες r_c)

3.1.2 Μετεπεξεργασία των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης

Σε όλες τις προσομοιώσεις το χρονικό βήμα παρέμεινε σταθερό και ίσο με $\Delta t = 0.01 \text{ DPD units (0.015 psec)}$. Η συνολική διάρκεια της προσομοίωσης είναι 5×10^5 χρονικά βήματα ($7.5 \times 10^3 \text{ psec}$) (για την κάθε εφαρμογή και η αριθμητική πυκνότητα, η ταχύτητα, η πίεση και η θερμοκρασία υπολογίζονται στα τελευταία 2.5×10^4 χρονικά βήματα ($3.25 \times 10^3 \text{ psec}$)).

Ο υπολογισμός της κατανομής της αριθμητικής πυκνότητας, της ταχύτητας, της πίεσης και της θερμοκρασίας έγινε με το χωρισμό του αγωγού σε 4 υπολογιστικά κελιά (bins) κατά τη x-κατεύθυνση, 80 κελιά κατά την y-κατεύθυνση και 80 κατά την z-κατεύθυνση (βλέπε Σχ. 3.2). Η στιγμιαία μέση αριθμητική πυκνότητα του ρευστού (number density) υπολογίζεται από τον αριθμό των σωματιδίων που βρίσκονται μέσα

σε ένα υπολογιστικό κελί σε κάθε χρονική στιγμή. Η ποσότητα αυτή εκτιμάται για όλη τη διάρκεια της προσομοίωσης και στη συνέχεια εξάγεται ο μέσος όρος. Η σχέση που εκφράζει την ποσότητα αυτή είναι

$$number\ density = \langle Nbin(y, y + hbin) \rangle \quad (3.1)$$

όπου με $\langle Nbin(y, y + hbin) \rangle$ εκφράζεται ο μέσος αριθμός των σωματιδίων του ρευστού στο χρόνο που βρίσκονται στο διάστημα $(y, y + hbin)$ και $hbin$ είναι το ύψος του υπολογιστικού κελιού της προσομοίωσης.

Η κατανομή της ταχύτητας εξάγεται από τον υπολογισμό του μέσου όρου της ταχύτητας (κατά τη x-κατεύθυνση) σε κάθε υπολογιστικό κελί για τη χρονική διάρκεια της προσομοίωσης. Η σχέση που μας δίνει την κατανομή της ταχύτητας είναι :

$$v = \frac{\langle v_x(y, y + hbin) \rangle}{N(y, y + hbin)} \quad (3.2)$$

όπου με $\langle v_x(y, y + hbin) \rangle$ εκφράζεται η μέση χρονική ταχύτητα σε κάθε υπολογιστικό κελί και $N(y, y + hbin)$ είναι ο αριθμός των ατόμων στο αντίστοιχο υπολογιστικό κελί για κάθε χρονική στιγμή.

Η πίεση υπολογίζεται από το ίχνος του τανυστή της τάσης ως εξής

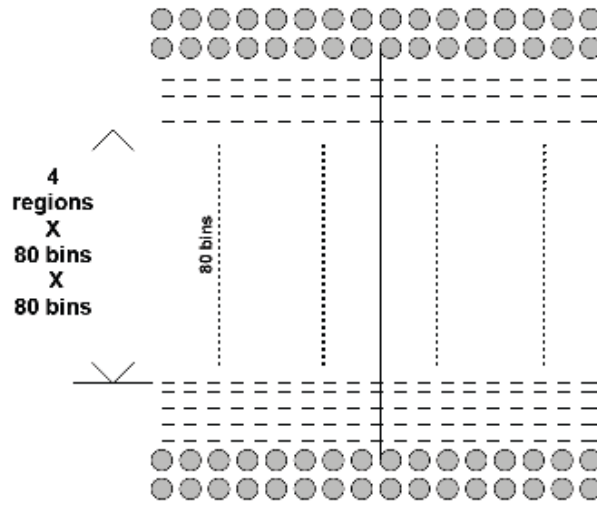
$$p = -\frac{1}{3} tr \mathbf{S} \quad (3.3)$$

όπου ο τανυστής της τάσης εκτιμάται με τη θεωρία Irving– Kirkwood [Fan et al.,2003; Irving & Kirkwood,1950] από την σχέση:

$$\mathbf{S} = -\frac{1}{V} \left[\sum_i m_i (\bar{v}_i - \bar{v})(\bar{v}_i - \bar{v}) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \vec{r}_{ij} \vec{F}_{ij} \right] \quad (3.4)$$

εδώ V είναι ο όγκος του υπολογιστικού κελίου, και \bar{v} η μέση ταχύτητα κατά την κατεύθυνση της ροής και \vec{F}_{ij} είναι η δύναμη που ασκείται από ένα σωματίδιο i σε ένα σωματίδιο j και δίδεται από τον τύπο:

$$\vec{F}_{ij} = \vec{F}_{ij}^C + \vec{F}_{ij}^D + \vec{F}_{ij}^R \quad (3.5)$$



Σχήμα 3.2. Χωρισμός του υπολογιστικού φατνίου σε κελιά για την μετεπεξεργασία των αποτελεσμάτων

Η θερμοκρασία υπολογίζεται σε κάθε υπολογιστικό κελί κατά μήκος του αγωγού με τη χρήση της εξίσωσης

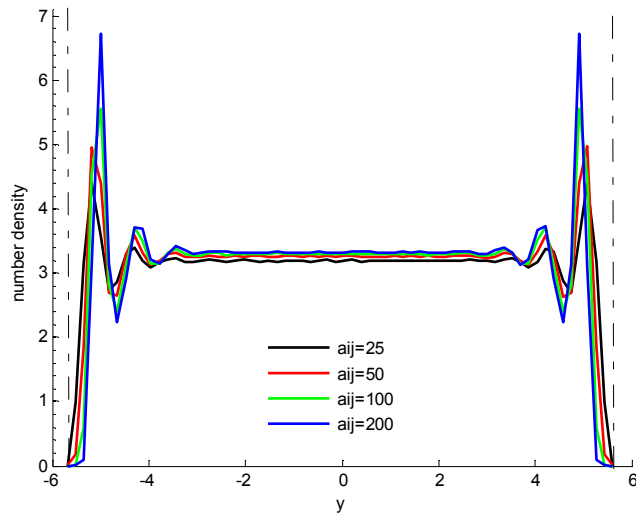
$$T = \frac{m_i}{3Nk_B} \sum_{i=1}^N (\vec{v}_i - \bar{v})^2 \quad (3.5)$$

όπου N είναι ο αριθμός των σωματιδίων στο αντίστοιχο υπολογιστικό κελί μετεπεξεργασίας και \bar{v} η μέση μακροσκοπική ταχύτητα των σωματιδίων.

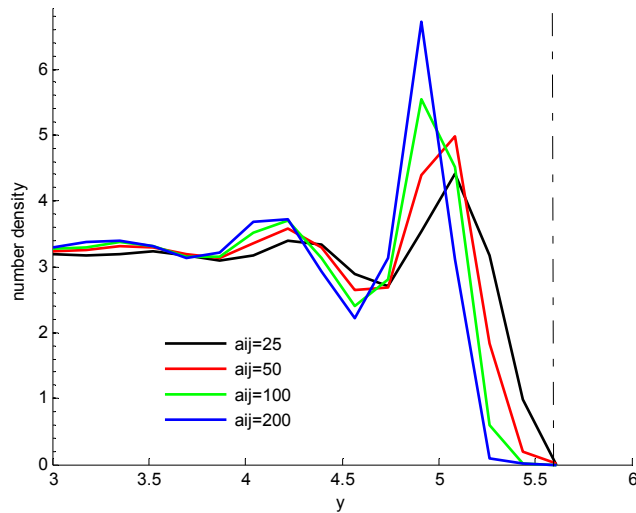
3.1.3 Ανάλυση των αποτελεσμάτων

Κατανομή της πυκνότητας

Στο Σχ. 3.3 μελετάται η επιρροή του συντελεστή αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων ρευστού και τοίχου, a_{ij} , στην κατανομή της πυκνότητας. Στον κάθετο άξονα του σχήματος αναπαρίσταται η μέση αριθμητική πυκνότητα, ενώ στον οριζόντιο άξονα το πλάτος του αγωγού σε μονάδες DPD. Παρατηρούμε ότι η αύξηση του συντελεστή αλληλεπίδρασης οδηγεί σε μικρή αύξηση της μέσης τιμής της πυκνότητας στο κεντρικό τμήμα του αγωγού και συγκεκριμένα για $-3.5 r_c < y < 3.5 r_c$. Ακόμη παρατηρείται ότι οι κορυφές της πυκνότητας κοντά στα στερεά τοιχώματα αυξάνονται με την αύξηση του συντελεστή. Αυτό σημαίνει ότι περισσότερα σωματίδια συγκεντρώνονται σε δεδομένη απόσταση από τον τοίχο. Όσον αφορά βέβαια την απόσταση της κορυφής από το τοίχωμα φαίνεται ξεκάθαρα στο Σχ. 3.4, όπου δίδεται η λεπτομέρεια της κατανομής κοντά στα στερεά τοιχώματα, ότι η αύξηση του συντελεστή αυξάνει την απόσταση αυτή. Η συμπεριφορά αυτή οφείλεται στην ισχυρότερη απόθεση των σωματιδίων ρευστού από τα σωματίδια του τοίχου, με την αύξηση του συντελεστή, με αποτέλεσμα τα σωματίδια του ρευστού να συγκεντρώνονται σε τόσο μεγαλύτερη απόσταση, όσο μεγαλύτερη είναι αντιστοίχως η τιμή του συντελεστή. Παρόμοια συμπεριφορά παρατηρήθηκε σε αποτελέσματα προσομοιώσεων DPD για αγωγό διαστάσεων $10 r_c \times 10 r_c \times 10 r_c$, όπου διαπιστώθηκε τόσο η μικρή αύξηση της πυκνότητας στο κεντρικό τμήμα του αγωγού, όσο και η μετατόπιση της κορυφής σε μεγαλύτερη απόσταση από τους τοίχους [Pivkin & Karniadakis, 2005].



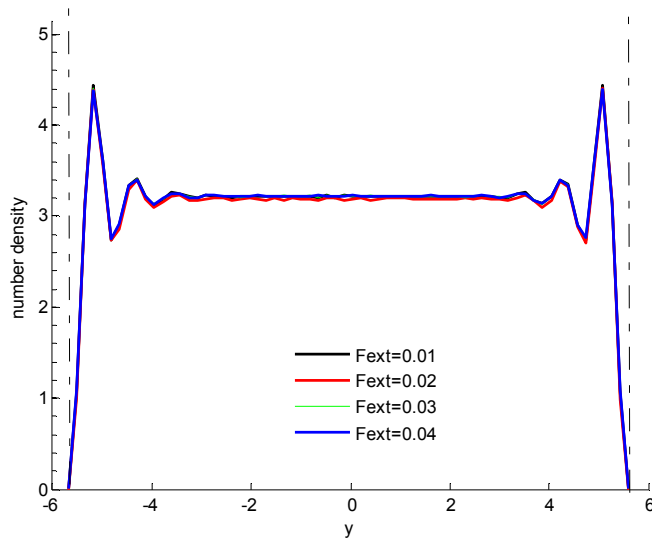
Σχήμα 3.3. Ροή Poiseuille: Κατανομή της αριθμητικής πυκνότητας. Επίδραση του συντελεστή αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων τοίχου και ρευστού. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.



Σχήμα 3.4. Ροή Poiseuille: Κατανομή της αριθμητικής πυκνότητας. Επίδραση του συντελεστή αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων τοίχου και ρευστού. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων (Λεπτομέρεια του Σχ.3.3).

Η επίδραση της κινούσας δύναμης παρουσιάζεται στο Σχ. 3.5. Παρατηρείται ότι για τις τέσσερις διαφορετικές τιμές της κινούσας δύναμης σε κάθε σωματίδιο που μελετήθηκαν δεν παρατηρείται επιρροή στην κατανομή της πυκνότητας. Ειδικότερα,

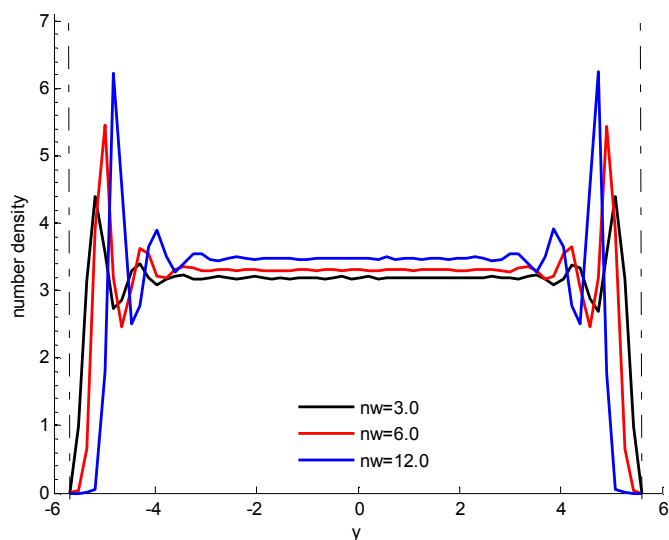
τόσο η κορυφή όσο και η απόσταση από τα στερεά τοιχώματα είναι ίδια καθώς ίδια είναι και η τιμή της πυκνότητας στο κέντρο του αγωγού (στα πλαίσια του στατιστικού σφάλματος). Η συμπεριφορά αυτή είναι σύμφωνη με τα αποτελέσματα μελέτης της ροής Poiseuille σε νανοαγωγούς με Μοριακή Δυναμική [Sofos et al., 2008].



Σχήμα 3.5. Ροή Poiseuille: Κατανομή της αριθμητικής πυκνότητας. Επίδραση της εξωτερικής δύναμης. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.

Η αριθμητική πυκνότητα των τοίχων επηρεάζει σημαντικά την κατανομή της πυκνότητας του ρευστού όπως φαίνεται στο Σχ. 3.6. Είναι εμφανής η μετατόπιση του διαγράμματος (κατανομή) προς το κέντρο του αγωγού όσο αυξάνεται η πυκνότητα του τοίχου. Ακόμη, αύξηση της πυκνότητας οδηγεί και σε αύξηση της κορυφής που εντοπίζεται κοντά στους τοίχους, αλλά και σε αυξημένη τιμή της πυκνότητας στο κέντρο του αγωγού. Η μετατόπιση του διαγράμματος προς το κέντρο σημαίνει ότι δεν υπάρχουν σχεδόν καθόλου σωματίδια κοντά στους τοίχους. Αυτό εξηγείται από το γεγονός ότι η αύξηση της πυκνότητας οδηγεί σε αύξηση της συνολικής απωστικής δύναμης που ασκούν τα σωματίδια των τοίχων στα σωματίδια του ρευστού. Στις

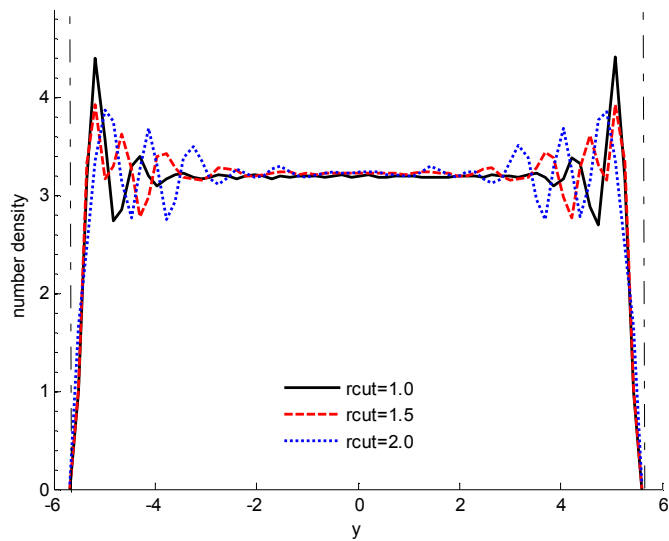
ισχυρές απωστικές δυνάμεις αποδίδεται και η αύξηση της κορυφής της πυκνότητας, καθώς περισσότερα σωματίδια συγκεντρώνονται σε μεγαλύτερες αποστάσεις από τους τοίχους. Η συμπεριφορά αυτή συμφωνεί με τα αποτελέσματα των Pivkin και Karniadakis [Pivkin & Karniadakis, 2005] όπου επίσης βρέθηκε ότι η αύξηση της πυκνότητας του τοίχου οδηγεί σε αύξηση της πυκνότητας στο κεντρικό τμήμα του αγωγού, μετακίνηση της κορυφής προς το μέσον του αγωγού (συμπίεση δηλ. του διαγράμματος της πυκνότητας) και σε αύξηση της τιμής της κορυφής της κατανομής κοντά στα στερεά τοιχώματα.



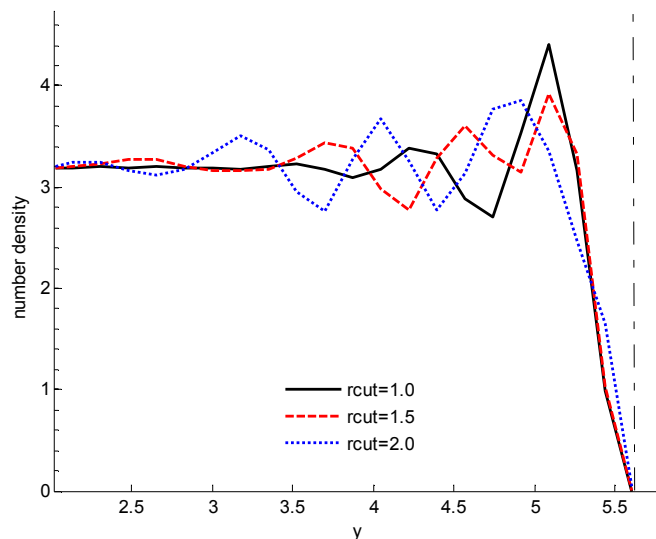
Σχήμα 3.6. Ροή Poiseuille: Κατανομή της αριθμητικής πυκνότητας. Επίδραση της πυκνότητας του τοίχου. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.

Παρατηρείται από το Σχ. 3.7 ότι η επίδραση της τιμής της ακτίνας αποκοπής r_c εντοπίζεται κυρίως στη συμπεριφορά του ρευστού κοντά στα στερεά τοιχώματα (Σχ. 3.8). Ειδικότερα, αύξηση της ακτίνας αποκοπής αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων συνεπάγεται εμφάνιση περισσότερων κορυφών χαμηλότερης τιμής και σε μεγαλύτερη απόσταση από τα στερεά τοιχώματα σε σύγκριση με αυτές που

εντοπίζονται στο 'πρόβλημα βάση'. Η συμπεριφορά αυτή οφείλεται στο γεγονός ότι η μεγαλύτερη ακτίνα αλληλεπίδρασης έχει ως αποτέλεσμα να επηρεάζεται μεγαλύτερη έκταση του ρευστού, όπως παρατηρούμε από την έκταση της περιοχής των διακυμάνσεων της πυκνότητας κοντά στα στερεά τοιχώματα.



Σχήμα 3.7. Ροή Poiseuille: Κατανομή της αριθμητικής πυκνότητας. Επίδραση της ακτίνας αποκοπής. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.

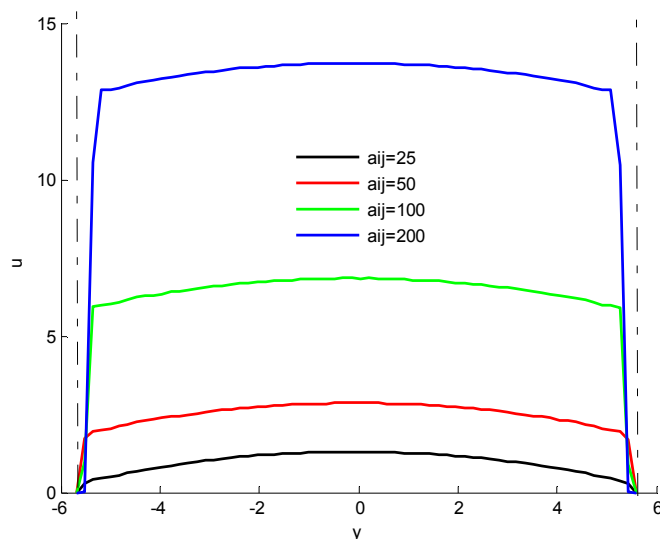


Σχήμα 3.8. Ροή Poiseuille: Κατανομή της αριθμητικής πυκνότητας. Επίδραση της ακτίνας αποκοπής. Λεπτομέρεια.

Η επίδραση των παραμέτρων στην κατανομή της πυκνότητας είναι αναμενόμενο ότι θα επηρεάσουν τόσο τις τιμές της ταχύτητας όσο και της πίεσης και της θερμοκρασίας όπως θα διερευνηθεί λεπτομερώς παρακάτω.

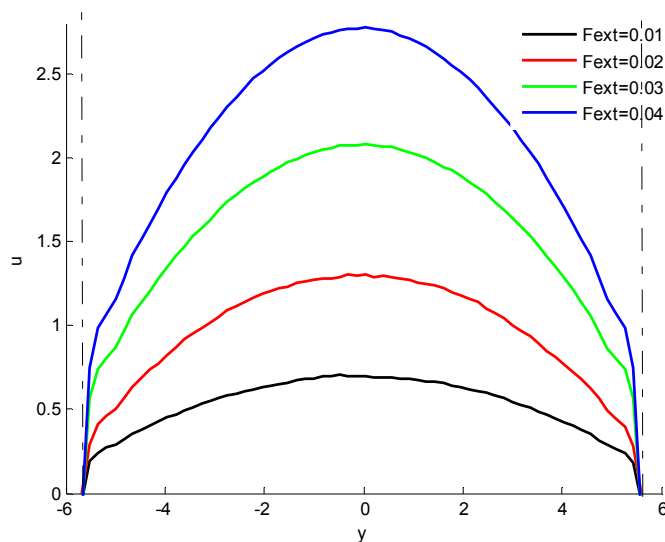
Κατανομή της ταχύτητας

Στο Σχ. 3.9 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της μεταβολής του συντελεστή αλληλεπίδρασης των σωματιδίων τοίχου και ρευστού στην κατανομή της ταχύτητας. Διαπιστώνεται σημαντική αύξηση της ταχύτητας καθώς αυξάνεται ο συντελεστής. Το ρευστό ‘συμπιέζεται’ προς το κεντρικό τμήμα του αγωγού υπό την επίρεια των απωστικών δυνάμεων των σωματιδίων του τοίχου, με αποτέλεσμα την εμφάνιση υψηλής ταχύτητας στα όρια των τοίχων (ταχύτητα ολίσθησης). Η συμπεριφορά αυτή παρατηρήθηκε επίσης από τους Pivkin και Karniadakis σε προσομοιώσεις ροής με τη μέθοδο DPD [Pivkin & Karniadakis, 2005].



Σχήμα 3.9. Ροή Poiseuille: Κατανομή της ταχύτητας. Επίδραση του συντελεστή αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων τοίχου και ρευστού. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.

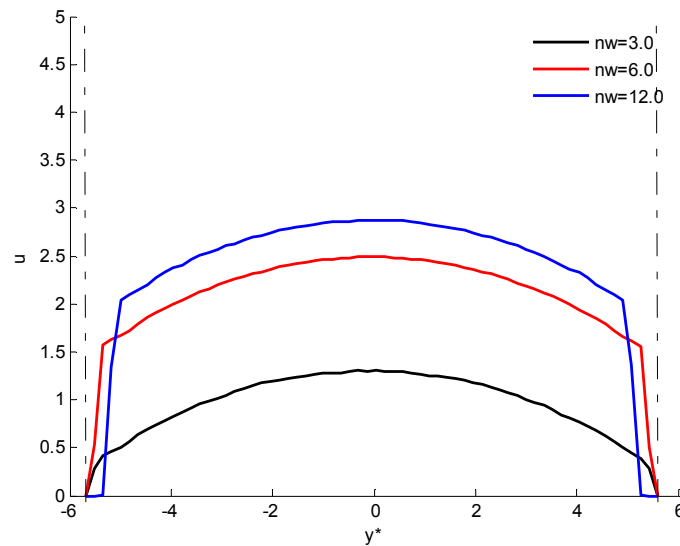
Στη συνέχεια μελετάται η επίδραση της κινούσας δύναμης στην κατανομή της ταχύτητας (Σχ. 3.10). Παρατηρείται ότι η αύξηση της κινούσας δύναμης οδηγεί σε σημαντική αύξηση της ταχύτητας. Αυτή η συμπεριφορά αποδίδεται στο γεγονός ότι η αύξηση της δύναμης προκαλεί αύξηση της επιτάχυνσης των σωματιδίων στην κατεύθυνση της ροής με αποτέλεσμα να αυξάνεται η ταχύτητα τους. Η εξωτερική λοιπόν δύναμη αποτελεί σημαντικό παράγοντα της ροής και αυτό πρέπει να ληφθεί υπόψη κατά το σχεδιασμό ενός μοντέλου προσομοίωσης.



Σχήμα 3.10. Ροή Poiseuille: Κατανομή της ταχύτητας. Επίδραση της εξωτερικής δύναμης. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.

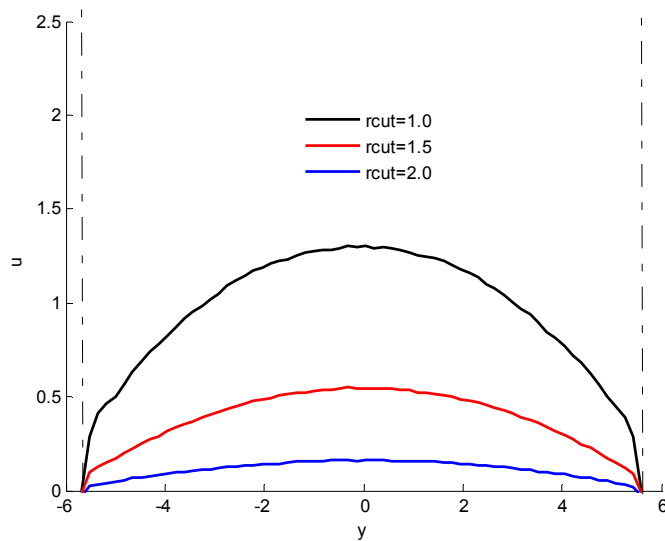
Η πυκνότητα του τοίχου αποτελεί ομοίως σημαντικό παράγοντα που επηρεάζει την ταχύτητα (Σχ. 3.11). Αύξηση της πυκνότητας οδηγεί σε σημαντική αύξηση της ταχύτητας. Ειδικότερα, η αύξηση της πυκνότητας του τοίχου οδηγεί σε αύξηση της απωστικής δύναμης που ασκούν τα σωματίδια του τοίχου στα σωματίδια του ρευστού και ‘συμπίεση’ των σωματιδίων του ρευστού προς το κέντρο του αγωγού (όπως έχει ήδη αναφερθεί στην παράγραφο 3.1 του παρόντος). Ακόμη, η μετατόπιση των σωματιδίων του ρευστού προς το μέσον του αγωγού οδηγεί στην εμφάνιση ταχύτητας

ολίσθησης στα όρια των πλακών και συνεπώς ασυμφωνία με τις παραδοχές επίλυσης των εξισώσεων Navier-Stokes (όπου θεωρείται απαραίτητη προϋπόθεση η συνθήκη μη ολίσθησης στην επίλυση των ροών μεταξύ ακίνητων πλακών).



Σχήμα 3.11. Ροή Poiseuille: Κατανομή της ταχύτητας. Επίδραση της πυκνότητας του τοίχου. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.

Η επίδραση της ακτίνας αποκοπής στην κατανομή της ταχύτητας παρουσιάζεται στο Σχ. 3.12. Παρατηρείται ότι η αύξηση της ακτίνας αποκοπής οδηγεί σε μείωση της ταχύτητας του ρευστού. Η αύξηση της ακτίνας αποκοπής αυξάνει το πλήθος των σωματιδίων που επιδρούν σε ένα σωματίδιο. Αποτέλεσμα των αυξημένων απωστικών αλληλεπιδράσεων είναι η μεγαλύτερη επιβράδυνση των σωματιδίων (σε σχέση με αλληλεπιδράσεις μικρότερης ακτίνας) και συνεπώς η μείωση της ταχύτητας. Ανάλογη συμπεριφορά παρατηρήθηκε σε προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής σε νανοαγωγούς [Σοφός, 2009].

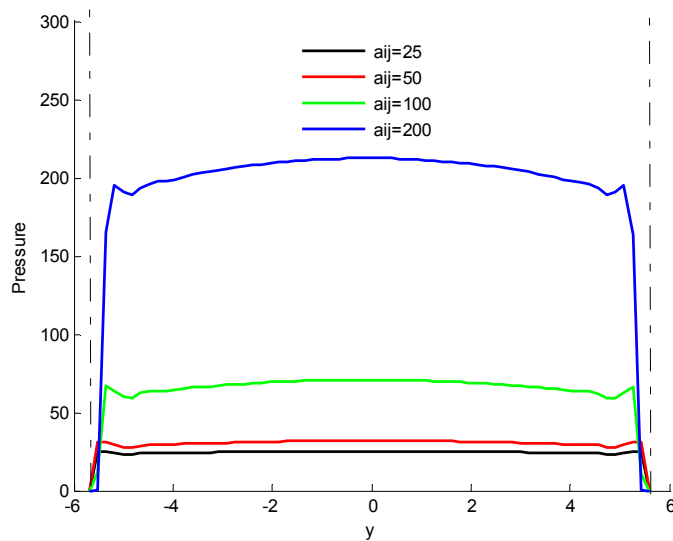


Σχήμα 3.12. Ροή Poiseuille: Κατανομή της ταχύτητας. Επίδραση της ακτίνας αποκοπής. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.

Στις επόμενες δύο παραγράφους θα μελετήσουμε αντιστοίχως την επιρροή των προηγούμενων παραμέτρων στο προφίλ της πίεσης και της θερμοκρασίας.

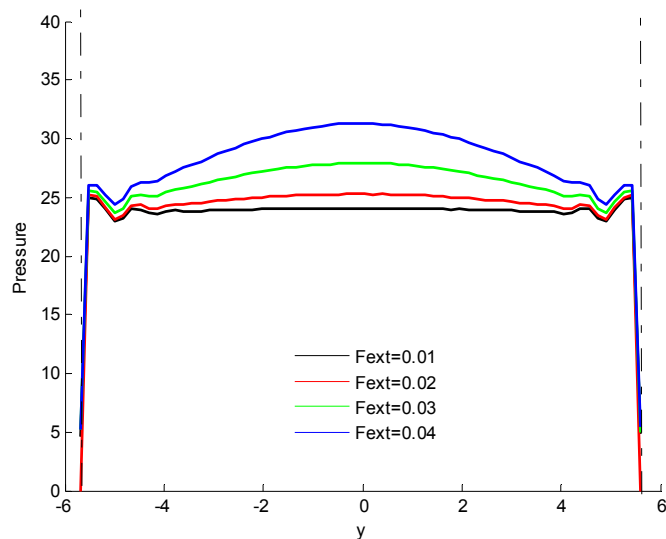
Κατανομή της πίεσης

Στο Σχ. 3.13 παρουσιάζεται η κατανομή της πίεσης για διαφορετικές τιμές του συντελεστή αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων τοίχου και ρευστού. Παρατηρείται ότι η αύξηση του συντελεστή οδηγεί σε σημαντική αύξηση της πίεσης. Όπως είδαμε η αύξηση του συντελεστή αλληλεπίδρασης οδηγεί σε μεγαλύτερη συγκέντρωση των σωματιδίων προς το μέσον του αγωγού (Σχ.3.3). Η αύξηση της συγκέντρωσης οδηγεί σε αύξηση των ενδοσωματιδιακών αλληλεπιδράσεων και καθώς η πίεση περιλαμβάνει στον υπολογισμό της τον παράγοντα των αλληλεπιδράσεων (Εξ. 3.4), η αύξηση αυτή επιφέρει αύξηση στην πίεση του ρευστού.



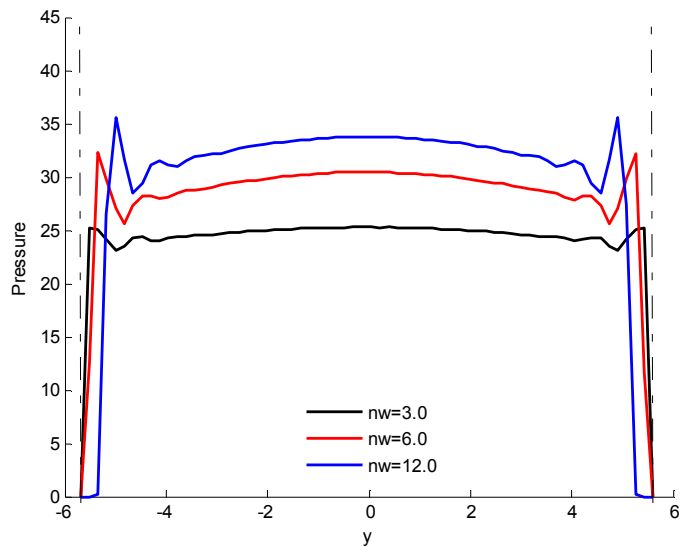
Σχήμα 3.13. Ροή Poiseuille: Κατανομή της πίεσης. Επίδραση του συντελεστή αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων τοίχου και ρευστού. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.

Εν συνεχεία, μελετάται η επίδραση της εξωτερικής δύναμης στην κατανομή της πίεσης (Σχ. 3.14). Παρατηρείται ότι η πίεση επηρεάζεται, από την μεταβολή της εξωτερικής δύναμης αλλά όχι τόσο σημαντικά όσο στην προηγούμενη περίπτωση. Ειδικότερα, παρατηρείται μικρή αύξηση στο κεντρικό τμήμα του αγωγού για σχετικά σημαντική αύξηση της δύναμης (τετραπλασιασμό). Παρατηρώντας λίγο πιο προσεκτικά τη σημασία της εξωτερικής δύναμης θυμόμαστε ότι η πυκνότητα δεν επηρεάστηκε από τις μεταβολές της εξωτερικής δύναμης. Αυτό σημαίνει ότι, οι ενδοσωματιδιακές αποστάσεις παραμένουν σχεδόν σταθερές και κατά συνέπεια και οι δυνάμεις μεταξύ των σωματιδίων δεν αλλάζουν σημαντικά, άρα και ο όρος των αλληλεπιδράσεων στην πίεση δεν επηρεάζεται σημαντικά. Εδώ παίζει ρόλο η αύξηση της ταχύτητας των σωματιδίων με αποτέλεσμα την μικρή αύξηση της πίεσης.



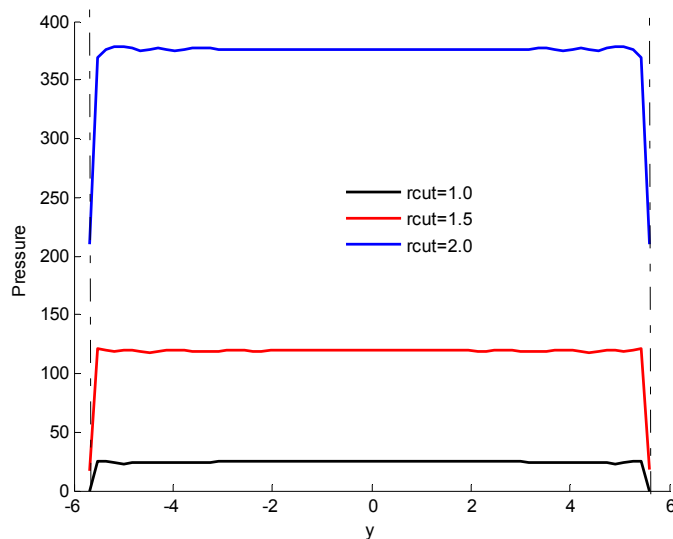
Σχήμα 3.14. Ροή Poiseuille: Κατανομή της πίεσης. Επίδραση της εξωτερικής δύναμης. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.

Στο Σχ. 3.15 παρουσιάζεται η κατανομή της πίεσης για μεταβολή στην πυκνότητα του τοίχου. Η αύξηση της πυκνότητας οδηγεί σε αύξηση της πίεσης, γεγονός που συνδέεται και με την αύξηση της ταχύτητας του ρευστού που συζητήθηκε στην προηγούμενη παράγραφο. Ακόμη παρατηρείται αύξηση του ύψους της κορυφής κοντά στα στερεά τοιχώματα και μετατόπιση προς το μέσον του αγωγού κάτι που άλλωστε δικαιολογείται από την αντίστοιχη συμπεριφορά της πυκνότητας του ρευστού. Δεν έχουν αναφερθεί αντίστοιχα αποτελέσματα στην κατανομή της πίεσης από άλλους ερευνητές ωστόσο είναι λογική η συμπεριφορά καθώς μεταβολές στην πυκνότητα επιφέρουν αντίστοιχες μεταβολές στην πίεση.



Σχήμα 3.15. Ροή Poiseuille: Κατανομή της πίεσης. Επίδραση της πυκνότητας του τοίχου. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.

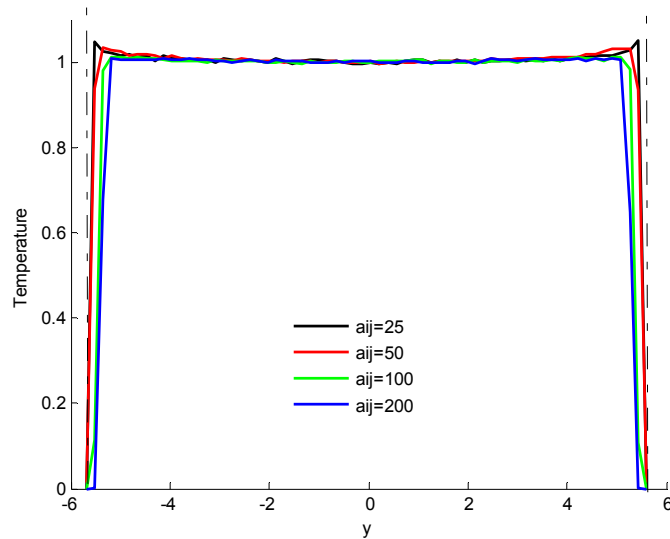
Η επίδραση της ακτίνας αποκοπής των αλληλεπιδράσεων των σωματιδίων στην πίεση παρουσιάζεται στο Σχ. 3.16. Η πίεση αυξάνεται καθώς αυξάνεται η ακτίνα αποκοπής. Μάλιστα μια αύξηση της ακτίνας αποκοπής της τάξεως του 50% οδηγεί σε αύξηση της πίεσης κατά 1400% περίπου. Είναι λογικό να αναμένουμε ότι η αύξηση των απωστικών δυνάμεων (που συζητήθηκε ήδη στην κατανομή της πυκνότητας και της ταχύτητας) θα οδηγήσει σε αύξηση της πίεσης καθώς σύμφωνα με την Εξ. 3.4 για τον υπολογισμό της πίεσης του ρευστού εισάγεται και ο παράγοντας των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των σωματιδίων.



Σχήμα 3.16. Ροή Poiseuille: Κατανομή της πίεσης. Επίδραση της ακτίνας αποκοπής. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.

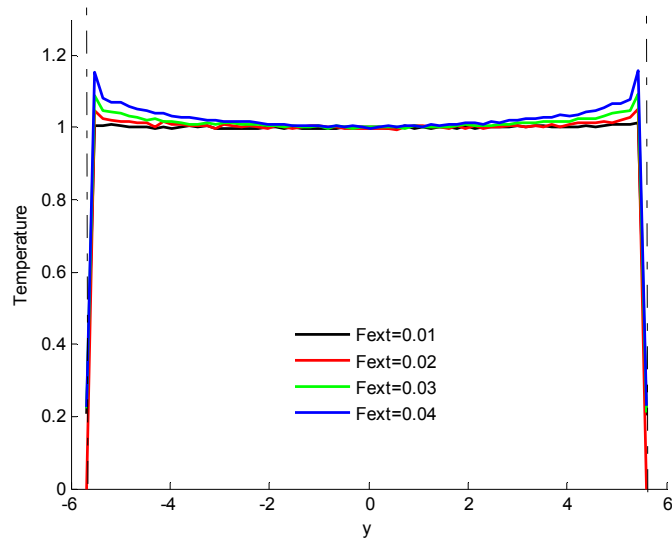
Κατανομή της θερμοκρασίας

Η επίδραση των παραμέτρων που μελετήθηκαν στις προηγούμενες παραγράφους στην κατανομή της θερμοκρασίας παρουσιάζεται στα Σχ. 3.17-3.20. Γενικότερα η κατανομή της θερμοκρασίας εμφανίζεται επίπεδη στο κεντρικό τμήμα του αγωγού και οι μεταβολές της θερμοκρασίας περιορίζονται μόνον κοντά στα στερεά τοιχώματα. Πιο συγκεκριμένα, αύξηση του συντελεστή αλληλεπίδρασης συνεπάγεται μείωση της κορυφής της κατανομής κοντά στα στερεά τοιχώματα και μικρή μετατόπιση του προς το μέσον του αγωγού. Αυτή η συμπεριφορά συνδέεται με την αντίστοιχη συμπεριφορά που εντοπίζεται στην κατανομή της πυκνότητας του Σχ. 3.4, όπου η κορυφή της πυκνότητας εμφανίζεται μετατοπισμένη προς το μέσον του αγωγού. Η μετατόπιση αυτή οφείλεται όπως προαναφέρθηκε στις ισχυρότερες απωθητικές δυνάμεις που ασκούν τα σωματίδια του τοίχου στα σωματίδια του ρευστού.



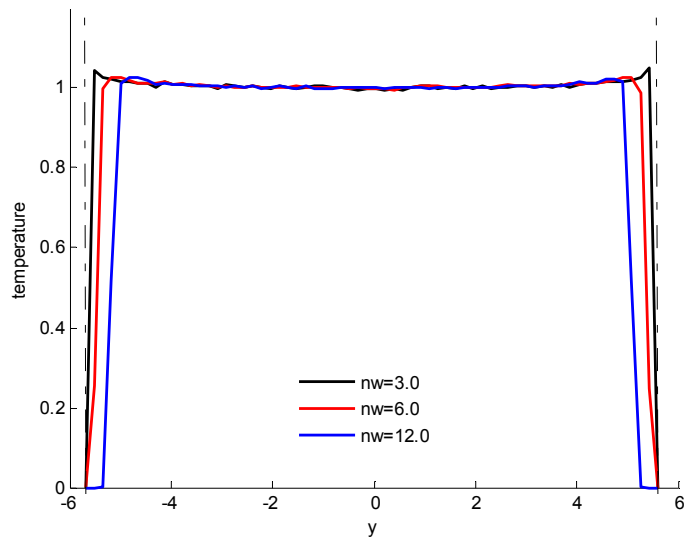
Σχήμα 3.17. Ροή Poiseuille: Κατανομή της θερμοκρασίας. Επίδραση του συντελεστή αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων τοίχου και ρευστού. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.

Στο Σχ. 3.18 παρουσιάζεται η επίδραση της εξωτερικής δύναμης στο προφίλ της θερμοκρασίας. Παρατηρείται ότι η αύξηση της εξωτερικής δύναμης συνεπάγεται αύξηση της τιμής της θερμοκρασίας κοντά στα στερεά τοιχώματα του αγωγού. Η συμπεριφορά αυτή αποδίδεται στο γεγονός ότι καθώς αυξάνεται η εξωτερική δύναμη, προκαλείται αύξηση στις σχετικές ταχύτητες μεταξύ των σωματιδίων του τοίχου (που παραμένουν ακούνητα) και των σωματιδίων του ρευστού και αυτό έχει ως συνέπεια την παραγωγή θερμότητας που διακρίνεται με τις κορυφές στα αποτελέσματα μας. Κάτι ανάλογο παρατηρήθηκε και στο [Nagayama & Cheng, 2004], όπου τονίζεται η μεγάλη σημασία της διεπιφάνειας μεταξύ των σωματιδίων του ρευστού και των σωματιδίων του τοίχου, στην κατανομή της θερμοκρασίας σε ένα μικροαγωγό .



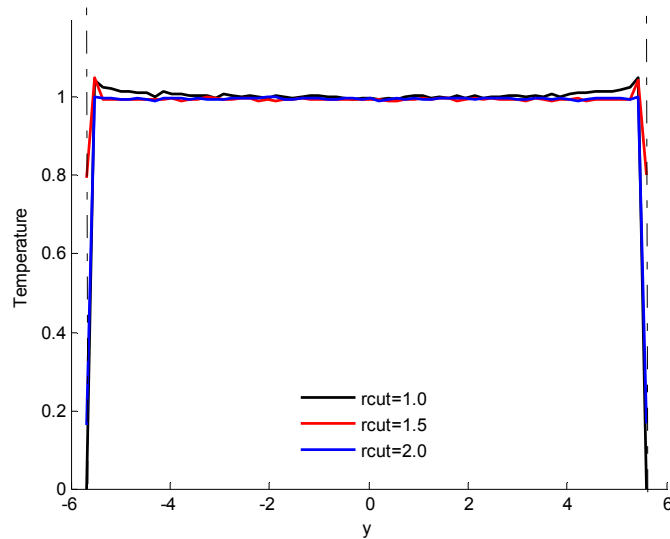
Σχήμα 3.18. Ροή Poiseuille: Κατανομή της θερμοκρασίας. Επίδραση της εξωτερικής δύναμης. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.

Η επίδραση της πυκνότητας του τοίχου στην κατανομή της θερμοκρασίας παρουσιάζεται στο Σχ. 3.19. Παρατηρείται συμπίεση του διαγράμματος της θερμοκρασίας προς το κέντρο του αγωγού με την αύξηση της πυκνότητας. Η συμπεριφορά αυτή βέβαια συνδέεται με τη συγκέντρωση των σωματιδίων προς το μέσον του αγωγού και γενικότερα τη συμπίεση της πυκνότητας όπως αποκαλύφθηκε στο Σχ. 3.6 και συζητήθηκε ήδη στην προηγούμενη παράγραφο.



Σχήμα 3.19. Ροή Poiseuille: Κατανομή της θερμοκρασίας. Επίδραση της πυκνότητας του τοίχου. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.

Τέλος, στο Σχ. 3.20 παρουσιάζεται η επίδραση της ακτίνας αποκοπής στην κατανομή της θερμοκρασίας. Διαπιστώνεται μείωση της θερμοκρασίας κοντά στα στερεά τοιχώματα με την αύξηση της ακτίνας αποκοπής. Είναι λογικό να αναμένουμε ότι η ‘απομάκρυνση’ των σωματιδίων που συζητήθηκε στην κατανομή της πυκνότητας και η μείωση των σχετικών ταχυτήτων οδηγούν σε μείωση της θερμοκρασίας καθώς η τελευταία συνδέεται με την κινητική ενέργεια των σωματιδίων.



Σχήμα 3.20. Ροή Poiseuille: Κατανομή της θερμοκρασίας. Επίδραση της ακτίνας αποκοπής. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα όρια των στερεών τοιχωμάτων.

3.1.4 Συμπεράσματα ενότητας

Στην ενότητα αυτή μελετήθηκε η ροή Poiseuille σε νανοαγωγούς με τη χρήση της μεθόδου προσομοίωσης DPD. Ερευνήθηκαν όλες οι παράμετροι που υπεισέρχονται σε ένα τέτοιο σύστημα και εξετάστηκε η επιρροή τους σε μακροσκοπικές ιδιότητες της ροής (πυκνότητα του ρευστού, η ταχύτητα του, η πίεση και η θερμοκρασία).

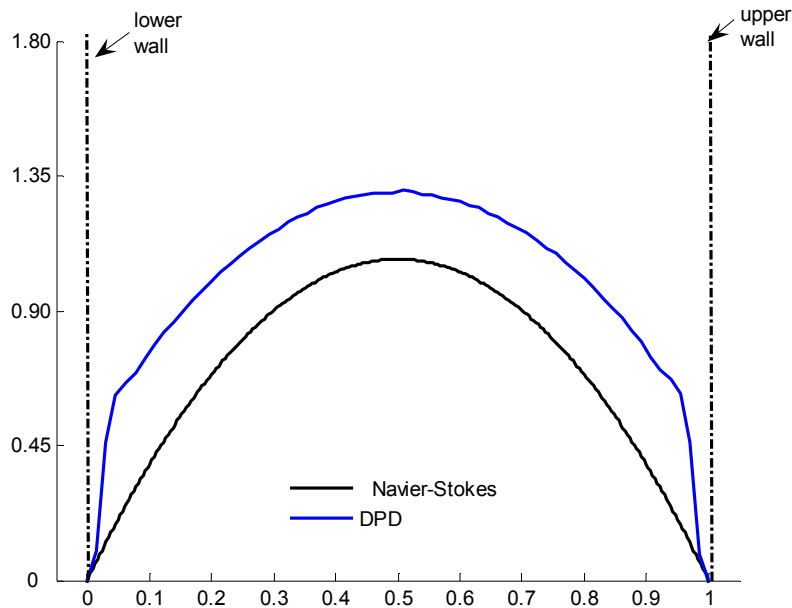
Η πυκνότητα του ρευστού επηρεάζεται κυρίως από εσωτερικούς παράγοντες του συστήματος, όπως είναι για παράδειγμα ο συντελεστής αλληλεπίδρασης τοίχου και ρευστού και η πυκνότητα των τοίχων. Εξωτερικοί παράγοντες όπως η εξωτερική δύναμη δεν φαίνεται να επηρεάζουν την κατανομή της πυκνότητας τουλάχιστον για τις τιμές της δύναμης που μελετήθηκαν εδώ. Πιθανότατα μια μεγαλύτερου μεγέθους δύναμη να επηρέαζε την κατανομή.

Η ταχύτητα του ρευστού φαίνεται ότι επηρεάζεται απ' όλους τους παράγοντες που μελετήθηκαν εδώ. Σημαντικότερη επίδραση στην κατανομή έχουν ο συντελεστής

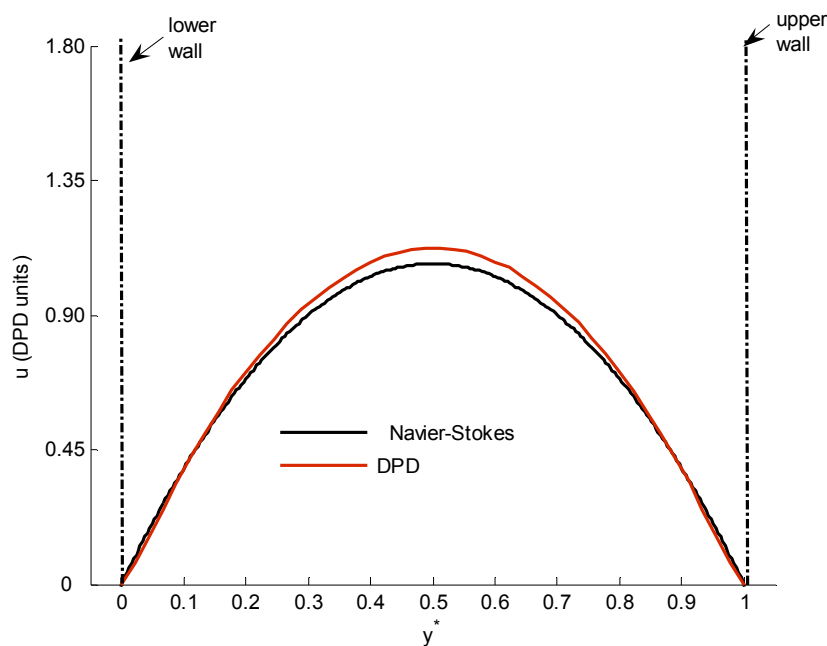
αλληλεπίδρασης και η πυκνότητα των τοίχων. Μικρότερη είναι η επίδραση παράγοντων όπως η εξωτερική δύναμη και η ακτίνα αποκοπής των αλληλεπιδράσεων των σωματιδίων. Ο συντελεστής αλληλεπίδρασης και η αύξηση της πυκνότητας των τοίχων φαίνεται ότι οδηγούν σε περίεργα φαινόμενα όπως η εμφάνιση ταχύτητας ολίσθησης κοντά στα στερεά τοιχώματα.

Παρόμοια συμπεριφορά φαίνεται να παρουσιάζει και η κατανομή της πίεσης με σημαντική αύξηση της πίεσης να εντοπίζεται κατά την αύξηση του συντελεστή αλληλεπίδρασης των σωματιδίων τοίχου και ρευστού αλλά και κατά την αύξηση της ακτίνας αποκοπής της αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων. Η θερμοκρασία δεν επηρεάζεται στο κεντρικό τμήμα του αγωγού ενώ η επίδραση των παραγόντων που μελετήθηκαν εντοπίζεται μόνον κοντά στα στερεά τοιχώματα. Φαίνεται ότι το σύστημα μας λειτουργεί πολύ καλά καθώς υπό την επίδραση των δυνάμεων διατηρείται σταθερή η θερμοκρασία του και δεν απαιτείται η χρήση επιπλέον θερμοστάτη για τη ρύθμιση της θερμοκρασίας.

Είναι ενδιαφέρον να συγκρίνουμε την κατανομή της ταχύτητας σε νανοαγωγούς με την κατανομή της ταχύτητας που προκύπτει με τη χρήση των εξισώσεων Navier-Stokes. Στο Σχ. 3.21 δίδεται η σύγκριση της κατανομής της ταχύτητας για το πρόβλημα βάση ($a_{ij} = 25.0$, $\gamma = 4.50$, $k_B T = 1.0$, $\sigma = 3.0$, $n_w = n_f = 3.0$) και στο Σχ. 3.22 δίδεται η σύγκριση της κατανομής της ταχύτητας για το πρόβλημα βάση με οριακές συνθήκες κατά Pivkin (όπου ρυθμίζονται οι τιμές του συντελεστή αλληλεπίδρασης των συντηρητικών δυνάμεων των σωματιδίων-για περισσότερες λεπτομέρειες βλέπε κεφ.2) με την κατανομή της ταχύτητας που προκύπτει με επίλυση με τις εξισώσεις Navier-Stokes



Σχήμα 3.21. Σύγκριση της x-συνιστώσας της ταχύτητας με χρήση της μεθόδου DPD για ροή σε νανοαγωγό με τη x-συνιστώσα της ταχύτητας με τη χρήση των εξισώσεων Navier-Stokes (το y είναι σε ανηγμένη μορφή). Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα.



Σχήμα 3.22. Σύγκριση της x-συνιστώσας της ταχύτητας με χρήση της μεθόδου DPD για ροή σε νανοαγωγό με τη x-συνιστώσα της ταχύτητας με τη χρήση των εξισώσεων Navier-Stokes (το y είναι σε ανηγμένη μορφή). Μεταβολή του συντελεστή αλληλεπίδρασης των σωματιδίων τοίχου και ρευστού σε σχέση με το πρόβλημα βάση. Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα.

Η εξίσωση που περιγράφει την παραβολική συμπεριφορά της ταχύτητας στην μακροσκοπική ροή Poiseuille με τη χρήση των εξισώσεων Navier-Stokes είναι γνωστή [Λιακόπουλος, 2008] και αποδίδεται από την εξίσωση

$$v_x = v_{x0} \left[1 - \left(\frac{y}{h/2} \right)^2 \right] \quad (3.6)$$

Όπου το v_{x0} είναι η μέγιστη ταχύτητα που εντοπίζεται στο κέντρο του αγωγού.

Η μέγιστη ταχύτητα δίνεται από τον τύπο

$$v_{x0} = \frac{F_{\text{ext}} (h/2)^2}{2\nu_{\text{dpd}}^*} \quad (3.7)$$

Όπου ν_{dpd}^* το κινηματικό ιξώδες του ρευστού, F_{ext} είναι η εξωτερική δύναμη που ασκείται στο ρευστό (κινούσα δύναμη) και h είναι απόσταση μεταξύ των δύο πλακών. Με χρήση των παραμέτρων του συστήματος η μέγιστη τιμή της ταχύτητας προκύπτει ίση με $v_{x0} = 0.96$.

Παρατηρούμε ότι για το πρόβλημα βάση η κατανομή της ταχύτητας δεν συμπίπτει στις δύο περιπτώσεις και μάλιστα η μέθοδος DPD δίνει μεγαλύτερες ταχύτητες (διαφορά της τάξεως του 20% στη μέγιστη ταχύτητα). Ακόμη, κοντά στα όρια των πλακών η κατανομή της ταχύτητας της μεθόδου DPD εμφανίζει κάποιες κορυφές της ταχύτητας οι οποίες εκτιμάται ότι οφείλονται στην αλληλεπίδραση σωματιδίων τοίχου με τα σωματίδια του ρευστού. Όπως είναι γνωστό οι εξισώσεις Navier-Stokes αγνοούν την επίδραση του τοίχου, τη δομή του και το υλικό κατασκευής του και λογικό είναι να μην εμφανίζει όμοια συμπεριφορά με την κατανομή που προκύπτει από σωματιδιακές μεθόδους, ειδικότερα όταν αναφερόμαστε σε τόσο μικρές διαστάσεις αγωγού (της τάξεως του 11σ), όπου οι εξισώσεις Navier-Stokes καταρρέουν

(βλέπε εισαγωγή). Η συμπεριφορά αυτή συμφωνεί επίσης με τα αποτελέσματα των Pivkin και Karniadakis [Pivkin & Karniadakis, 2005].

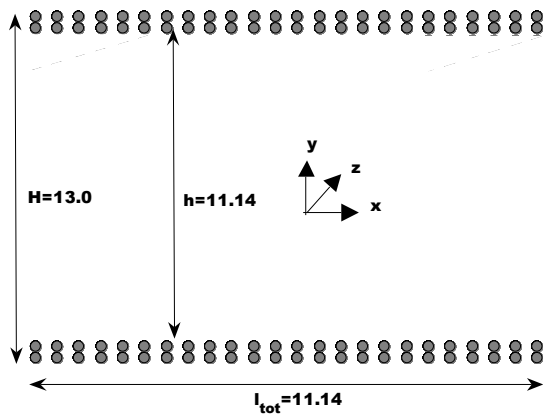
Στην εφαρμογή των οριακών συνθηκών κατά Pivkin, η κατανομή της ταχύτητας είναι πάρα πολύ κοντά σε αυτή που προκύπτει με τη χρήση των εξισώσεων Navier-Stokes. Κοντά στα όρια των στερεών τοίχων δεν εντοπίζονται κορυφές της πυκνότητας και ακόμη η μέγιστη ταχύτητα που εκτιμά η μέθοδος DPD είναι πολύ κοντά στη μέγιστη ταχύτητα της θεωρητικής λύσης (διαφορά της τάξεως του 2.5%). Διαπιστώνεται επομένως, ότι η κατανομή της ταχύτητας με τη μέθοδο DPD επηρεάζεται σημαντικά από το συντελεστή αλληλεπίδρασης των συντηρητικών δυνάμεων των σωματιδίων. Κατάλληλη επιλογή του συντελεστή οδηγεί σε λύσεις πολύ κοντά στις εξισώσεις Navier-Stokes.

3.2 Ροή Poiseuille στη Μεσοκλίμακα

Στην προηγούμενη ενότητα του παρόντος κεφαλαίου μελετήθηκε η ροή Poiseuille σε νανοαγωγούς με τη χρήση της μεθόδου DPD. Διερευνήθηκαν όλες οι παράμετροι που υπεισέρχονται σε ένα τέτοιο σύστημα και καταγράφηκε η επιρροή του καθενός στις μακροσκοπικές ιδιότητες της ροής. Στην ενότητα αυτή μελετάται η ροή Poiseuille στη μεσοκλίμακα με τη χρήση της μεθόδου DPD. Η ενότητα αυτή διαμορφώνεται ως εξής: στην πρώτη παράγραφο περιγράφεται το σύστημα προσομοίωσης και δίνονται αναλυτικά οι σχέσεις της μεσοσκοπικής προσέγγισης. Εν συνεχεία στην επόμενη παράγραφο δίδεται ο τρόπος υπολογισμού των μακροσκοπικών ιδιοτήτων της ροής. Στην τρίτη και τελευταία παράγραφο σχολιάζονται τα αποτελέσματα της προσομοίωσης.

3.2.1 Μοντελοποίηση του συστήματος προσομοίωσης

Η μέθοδος προσομοίωσης DPD χρησιμοποιείται για να προσομοιώσει την επίπεδη μεσοσκοπική ροή Poiseuille για υποθετικό ρευστό που έχει την συμπεριφορά του νερού στους 300K και τα λοιπά χαρακτηριστικά του αργού (διάμετρος, μάζα κ.λ.π.). Το υπολογιστικό φαντίο που μελετάται φαίνεται στο Σχήμα 3.23. Οι τοίχοι αποτελούνται από δύο επίπεδα σωματιδίων τα οποία ακολουθούν την δομή του απλού κυβικού (simple cubic) πλέγματος.



Σχήμα 3.23. Σύστημα προσομοίωσης στη ροή Poiseuille για αγωγό μεσοκοπικής κλίμακας

Όπως έχουμε ήδη αναφέρει, η μετάβαση στην μεσοσκοπική προσέγγιση γίνεται με τη χρήση του ‘χονδρόκοκκου’ σωματιδίου. Σε κάθε τμήμα του ρευστού (σωματίδιο) που μελετάται μπορεί να περιλαμβάνονται από ένα έως εκατοντάδες χιλιάδες άτομα. Για την καλύτερη κατανόηση αυτής της υπόθεσης, θεωρήστε ότι ένα σωματίδιο ρευστού περιλαμβάνει όχι μόνο 1 άτομο, όπως συμβαίνει στην περίπτωση της Μοριακής Δυναμικής, αλλά 10^5 άτομα. Αν λοιπόν στην προσομοίωση μας θεωρήσουμε 10^5 άτομα ανά σωματίδιο και η ροή μας προσομοιώνεται με 3×10^3 σωματίδια, τότε ο συνολικός αριθμός των ατόμων αγγίζει τα 3×10^8 άτομα. Καταλαβαίνουμε λοιπόν την

μεγάλη διαφορά στην κλίμακα του προβλήματος σε σχέση με αυτήν της Μοριακής Δυναμικής και γίνεται περισσότερο κατανοητός ο χαρακτηρισμός της μεθόδου προσομοίωσης DPD ως μεσοσκοπική μέθοδο προσομοίωσης. Η παράμετρος που παρέχει τον αριθμό των ατόμων ανά σωματίδιο θα αναφέρεται στο εξής ως N_m .

Η εμφάνιση αυτής της παραμέτρου είναι και το ‘κλειδί’ για την μετάβαση στην μεσοσκοπική προσομοίωση. Παρουσία αυτής μεταβάλλεται ο τρόπος που υπολογίζονται κάποια μεγέθη για το νέο μας σύστημα. Αρχικά επηρεάζεται η κλίμακα της προσομοίωσης. Δεν αναφερόμαστε σε ατομικό ή μοριακό επίπεδο όπως είδαμε στην προηγούμενη παράγραφο και όπως αντιστοίχως συναντάμε στη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής. Η ακτίνα αποκοπής αποτελεί όπως έχουμε ήδη πει την παράμετρο μήκους του συστήματος. Η τιμή της συναρτήσει του N_m δίνεται από τον τύπο

$$r_c = \left((N_m \frac{\rho_{dpd}^*}{\rho_{md}})^{\frac{1}{3}} \right) \sigma \quad (3.8)$$

Όπου σ είναι η διάμετρος ενός ατόμου αργού, ρ_{dpd}^* η αριθμητική πυκνότητα του DPD συστήματος (για $N_m=10^5$) σε μονάδες σ^{-3} και ρ_{md} η αριθμητική πυκνότητα του συστήματος για $N_m=1$ όπως προκύπτει από το ατομικό σύστημα σε μονάδες σ^{-3} (βλέπε παράγραφο 3.1).

Η συνολική μάζα του συστήματος είναι ομοίως λογικό να επηρεάζεται από τον αριθμό N_m . Όπως συζητήθηκε προηγουμένως αύξηση του N_m συνεπάγεται αύξηση του αριθμού των σωματιδίων και κατά συνέπεια αύξηση της μάζας του συστήματος. Η μάζα δίνεται από τη σχέση

$$M = N_m \cdot m \quad (3.9)$$

Όπου m η μάζα του ενός ατόμου αργού στην περίπτωση μας.

Μια ακόμη παράμετρος που επηρεάζεται από την μεταβολή του N_m είναι ο συντελεστής αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων. Λογικό είναι ότι όσο αυξάνει το ‘μέγεθος’ του σωματιδίου τόσο μεγαλύτερη δύναμη αλληλεπίδρασης ασκείται μεταξύ των σωματιδίων. Η σχέση που αποδίδει την εξάρτηση αυτή είναι

$$\alpha_{ij} = k_B T \left(\frac{\kappa^{-1} N_m - 1}{2\alpha \rho_{dpd}} \right) \quad (3.10)$$

Όπου $k_B T$ είναι η θερμοκρασία του συστήματος, κ^{-1} η αδιάστατη συμπιεστότητα του νερού ενός 300K ($\kappa^{-1} \approx 16$), $\alpha = 0.101$ σταθερά και ρ_{dpd} ($= n_f$) η αριθμητική πυκνότητα του συστήματος σε μονάδες r_c^{-3} .

Η παράμετρος N_m επηρεάζει και το χρονικό βήμα ενός προσομοίωσης. Ειδικότερα, το χρονικό βήμα ενός προσομοίωσης συνδέει το κινηματικό ιξώδες ενός συστήματος DPD (υποθετικό ρευστό) με το κινηματικό ιξώδες του πραγματικού συστήματος ($N_m = 1$). Η σχέση που αποδίδει την τιμή του χρονικού βήματος είναι

$$\tau_{dpd} = \frac{v_{dpd}^*}{v_{md}} \left(\frac{r_c}{\sigma} \right)^2 \tau \quad (3.11)$$

όπου τ είναι το χρονικό βήμα για ένα σύστημα DPD με $N_m = 1$.

Το κινηματικό ιξώδες ενός ρευστού DPD (v_{dpd}^*) εκτιμάται από την σχέση

$$v_{dpd}^* = \frac{D}{2} + \frac{2\pi\gamma\rho_{dpd}^* r_c^5}{1575} \quad (3.12)$$

Και ο συντελεστής διάχυσης D δίδεται από την σχέση

$$D = \frac{45k_B T}{2\pi\gamma\rho_{dpd}^* r_c^3} \quad (3.13)$$

Ένα ερώτημα που προκύπτει είναι εάν υπάρχει κάποιος περιορισμός στην επιλογή της τιμής της παραμέτρου N_m . Έχουν γίνει πάρα πολλές μελέτες αναφορικά με αυτό το ερώτημα. Γενικότερα, διαπιστώθηκε ότι δεν υπάρχει μια δεδομένη ανώτερη τιμή γι' αυτήν την παράμετρο. Η τιμή της καθορίζεται από το φυσικό σύστημα που θέλουμε να προσομοιώσουμε. Ο λόγος φυσικά για το αν προσομοιώνουμε μονοατομικά ρευστά, κολλοειδή κ.λ.π.

Ο συντελεστής που εξετάζεται για την επιλογή του N_m είναι ο αριθμός Sc (Schmidt). Ο αριθμός αυτός καθορίζεται από το λόγο του κινηματικού ιξώδους προς το συντελεστή διάχυσης του ρευστού που προσδιορίστηκαν αντιστοίχως στις εξισώσεις 3.12 και 3.13 του παρόντος. Σε αρκετές από τις προσομοιώσεις DPD που πραγματοποιήθηκαν από διάφορους μελετητές ο αριθμός Sc για μονοατομικά κυρίως ρευστά μπορούσε οριακά να γίνει δεκτός κοντά στην τιμή 1. Για συνήθη ρευστά, όπως για παράδειγμα το νερό, η τιμή του αριθμού Sc πρέπει να είναι της τάξης του 10^3 . Για τα κολλοειδή η τιμή αυτή είναι πολύ μεγαλύτερη (της τάξεως του 10^6).

Έτσι λοιπόν, εάν κάποιος μελετητής επιθυμεί να προσομοιώσει νερό στο σύστημα του θα πρέπει να καθορίσει του παράγοντες του συστήματος με τέτοιο τρόπο ώστε η τιμή του αριθμού Sc να είναι της τάξεως το 10^3 . Μπορεί για παράδειγμα να μεταβάλλει τη θερμοκρασία του συστήματος, το συντελεστή γ , την πυκνότητα του συστήματος κ.λ.π. Σε κάθε περίπτωση βέβαια αλλαγή ενός παράγοντα πρέπει να γίνει με ιδιαίτερη προσοχή, γιατί αυτό πιθανόν να επηρεάσει και άλλους παράγοντες σε ένα

σύστημα DPD. Μια εφαρμογή με νερό για την καλύτερη κατανόηση των όσων προαναφέρθηκαν παρουσιάζεται στην [Li & Drazer, 2008].

Στην μετάβαση από την ροή σε νανοαγωγό που μελετήθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο στη μεσοσκοπική ροή Poiseuille το σύστημα μας παρέμεινε στην ίδια θερμοκρασία. Χρησιμοποιήθηκαν 10^5 άτομα σε κάθε σωματίδιο DPD και οι παράγοντες γ και σ παρέμειναν σταθεροί ($\gamma=4.50$ και $\sigma=3.00$). Για να επιτευχθεί σχετικά μεγάλος αριθμός Sc επιλέχθηκε αριθμητική πυκνότητα ίση με 10 (η πυκνότητα του ρευστού και του τοίχου είναι ίδια). Στην προσομοίωση βέβαια πέραν του αριθμού Sc μελετάται και η τιμή του κινηματικού ιξώδους και του συντελεστή διάχυσης ώστε η εικόνα του ρευστού να είναι όσο το δυνατόν πιο ρεαλιστική.

Στην προσομοίωση μας χρησιμοποιήθηκαν bounce-back συνθήκες στη διεπιφάνεια τοίχου-ρευστού. Περιοδικές συνθήκες εφαρμόζονται κατά τη x- και z-κατεύθυνση. Η εξωτερική δύναμη ανά σωματίδιο είναι $F_{ext}=0.02$. Η τιμή του N_m που επιλέχθηκε οδηγεί σε ένα υπολογιστικό φατνίο διαστάσεων $1.109 \mu\text{m} \times 1.387\mu\text{m} \times 1.109\mu\text{m}$, η παρουσίαση όμως των αποτελεσμάτων για λόγους διευκόλυνσης στη σύγκριση θα παρουσιαστούν σε αδιάστατες μονάδες DPD που περιγράφηκαν αναλυτικά στην παράγραφο 2.6.

3.2.2 Μετεπεξεργασία των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης

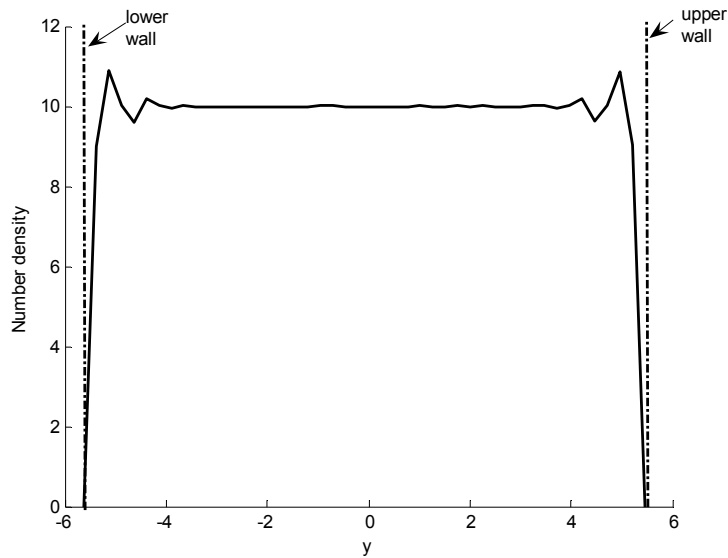
Υπολογίστηκαν οι μακροσκοπικές ποσότητες της πυκνότητας, της ταχύτητας, της πίεσης και της θερμοκρασίας. Ο προσδιορισμός των μακροσκοπικών ποσοτήτων έγινε με το διαχωρισμό του αγωγού σε υπολογιστικά κελιά όπως ακριβώς και στην εφαρμογή της παραγράφου 3.1.2.

Το χρονικό βήμα της προσομοίωσης είναι 0.01DPD units (αντιστοιχεί σε 0.10μsec). Η συνολική διάρκεια της προσομοίωσης είναι 5×10^5 χρονικά βήματα (50msec). Η εξαγωγή των μακροσκοπικών ιδιοτήτων της ροής έγινε στα τελευταία 2.5×10^5 χρονικά βήματα (2.5×10^4 μsec).

3.2.3 Αποτελέσματα

Κατανομή της πυκνότητας

Στο Σχ 3.24 παρουσιάζεται η κατανομή της αριθμητικής πυκνότητας. Παρατηρείται ότι η πυκνότητα είναι σταθερή στο μεγαλύτερο τμήμα του αγωγού ($-4 r_c < y < 4 r_c$) και εμφανίζει μια μικρή υπερύψωση κοντά στα όρια των πλακών εξαιτίας της παρουσίας των σωματιδίων του τοίχου και της αλληλεπίδρασης τους με τα σωματίδια του ρευστού. Η υπερύψωση εντοπίζεται στην ίδια απόσταση για τον κάτω και τον επάνω τοίχο. Ακόμη, στο σημείο αυτό θα ήταν επιθυμητή η σύνδεση με τα αποτελέσματα και τις παραδοχές της μακροσκοπικής θεωρίας καθώς η μεσοσκοπική μέθοδος αποτελεί την σύνδεση μεταξύ της νανοσκοπικής προσέγγισης και της μακροσκοπικής θεώρησης και ως τέτοια θα πρέπει να ανταποκρίνεται κατά το μέγιστο δυνατό στις απαιτήσεις ενός τέτοιου συνδυασμού.

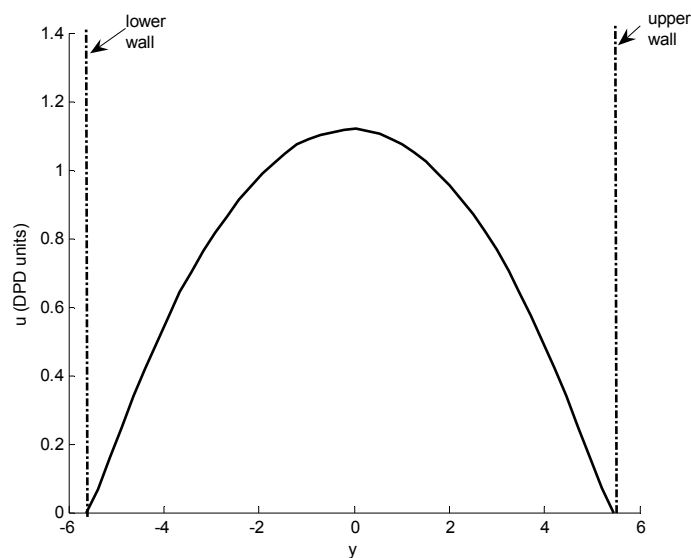


Σχήμα 3.24. Ροή Poiseuille: διάγραμμα αριθμητικής πυκνότητας για αγωγό μεσοσκοπικής κλίμακας (το y είναι σε μονάδες r_c). Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα

Στις παραδοχές της επίλυσης με τις μακροσκοπικές εξισώσεις συνέχειας και ορμής περιλαμβάνεται η απλοποιητική παραδοχή σταθερής πυκνότητας του ρευστού. Παρατηρούμε ότι δεδομένων των συνθηκών η προσομοίωση μας δίνει τιμές στο κεντρικό τμήμα του αγωγού ίδιες με την αρχική στα πλαίσια του στατιστικού σφάλματος και εμφάνιση κορυφών στα όρια των τοίχων υπό την επίδραση των απωθητικών δυνάμεων που ασκούν τα σωματίδια του τοίχου στα σωματίδια του ρευστού. Σύμφωνα με την αρχή διατήρησης της μάζας οι κορυφές που εντοπίζονται κοντά στους τοίχους έχουν τιμή μεγαλύτερη από την τιμή της πυκνότητας στο κέντρο. Εξαιτίας όμως της σταθερής τιμής στο μεγαλύτερο τμήμα του αγωγού (72% περίπου του πλάτους του αγωγού) και της εμφάνισης κορυφής πολύ κοντά στα όρια των πλακών εν συγκρίσει με το συνολικό πλάτος του αγωγού είναι αποδεκτή η θεώρηση της σταθερής πυκνότητας στα πλαίσια των απλοποιητικών παραδοχών.

Κατανομή της ταχύτητας

Στο Σχ.3.25 παρουσιάζεται η κατανομή της ταχύτητας του υπό μελέτη αγωγού μεσοσκοπικής κλίμακας. Παρατηρείται ότι η κατανομή είναι παραβολική ως προς το κέντρο του αγωγού. Η τιμή της ταχύτητας δηλαδή μειώνεται καθώς πηγαίνουμε από το μέσον του αγωγού και μηδενίζεται στα όρια των τοίχων. Η συμπεριφορά αυτή βέβαια πρέπει να συγκριθεί με τα αποτελέσματα της επίλυσης με τις εξισώσεις Navier-Stokes.

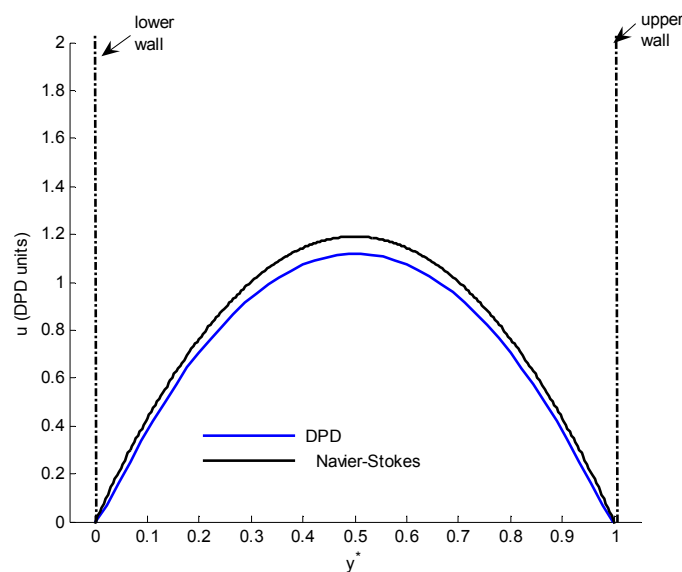


Σχήμα 3.25. Ροή Poiseuille: διάγραμμα της ταχύτητας για αγωγό μεσοσκοπικής κλίμακας (το y είναι σε μονάδες r_c). Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα.

Στην επίλυση με τις εξισώσεις Navier-Stokes η κατανομή της ταχύτητας είναι ομοίως παραβολική με συμμετρία ως προς το κέντρο του αγωγού. Παρατηρείται δηλαδή και εδώ μείωση καθώς κινούμαστε προς τα στερεά τοιχώματα, ενώ στα όρια των τοίχων η ταχύτητα είναι μηδενική καθώς στη διεπιφάνεια τοίχου-ρευστού ισχύει η συνθήκη μη ολίσθησης σύμφωνα με την οποία το ρευστό στο όριο των τοίχων αποκτά

ταχύτητα ίδια με αυτή του τοίχου. Έτσι λοιπόν, καθώς το τοίχωμα παραμένει ακίνητο, η ταχύτητα στο όριο είναι μηδενική.

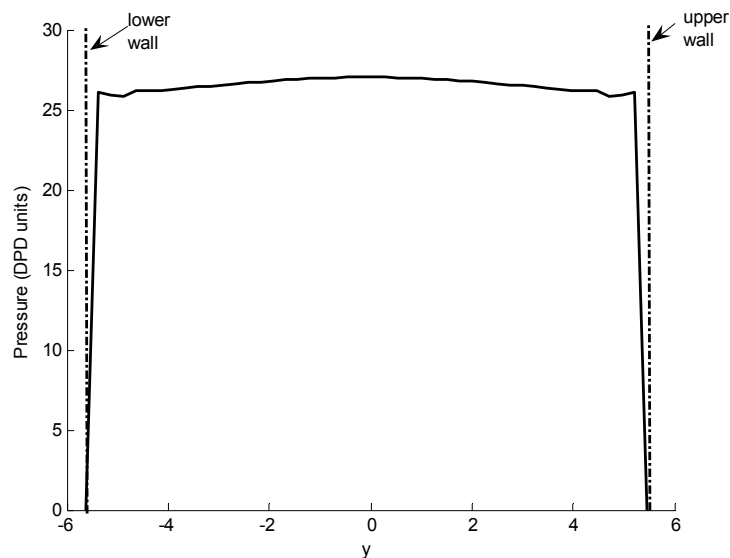
Η σύγκριση της παραβολικής κατανομής της ταχύτητας που προκύπτει από τις εξισώσεις Navier-Stokes (μέγιστη τιμή της ταχύτητας στο κέντρο με εφαρμογή της εξίσωσης 3.7 προκύπτει 1.19) με την κατανομή όπως προκύπτει από την επίλυση με τη μέθοδο DPD φαίνεται στο Σχ 3.26. Παρατηρείται ότι η υπολογιζόμενη τιμή με τη μέθοδο προσομοίωσης DPD είναι πάρα πολύ κοντά στην θεωρητική τιμή (θεωρητική τιμή ίση με 1.19). Η υπολογιζόμενη τιμή της ταχύτητας στο κέντρο είναι 1.01 και η διαφορά της από την θεωρητική τιμή είναι μόλις 6% που είναι γενικά πολύ καλή προσέγγιση. Η συμπεριφορά της κατανομής στο υπόλοιπο τμήμα είναι πολύ κοντά στην θεωρητική λύση στα πλαίσια φυσικά του στατιστικού σφάλματος.



Σχήμα 3.26. Σύγκριση της x-συνιστώσας της ταχύτητας με χρήση της μεθόδου DPD με της x-συνιστώσας της ταχύτητας με τη χρήση των εξισώσεων Navier-Stokes (το y είναι σε ανηγμένη μορφή) . Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα.

Κατανομή της πίεσης

Η κατανομή της πίεσης παρουσιάζεται στο Σχ 3.27 και η συμπεριφορά της παρουσιάζει έντονο ενδιαφέρον. Όπως είναι αναμενόμενο σύμφωνα με την κατανομή της πυκνότητας η πίεση στο κεντρικό τμήμα του αγωγού είναι σταθερή και μειώνεται ελαφρώς καθώς κινούμαστε προς το στερεό τοίχωμα. Δίπλα στα όρια των πλακών και μάλιστα σε απόσταση ίση με αυτή που εντοπίζεται η μέγιστη τιμή της πυκνότητας, η πίεση σημειώνει μια ελαφρά υπερύψωση η οποία φαίνεται ότι έχει ίδια τιμή με την πίεση στο κέντρο του αγωγού. Η συμπεριφορά αυτή εξηγείται από την εμφάνιση των σωματιδίων του τοίχου που ασκούν απωθητικές δυνάμεις στα σωματίδια του ρευστού και επαληθεύεται από την κατανομή της πυκνότητας.

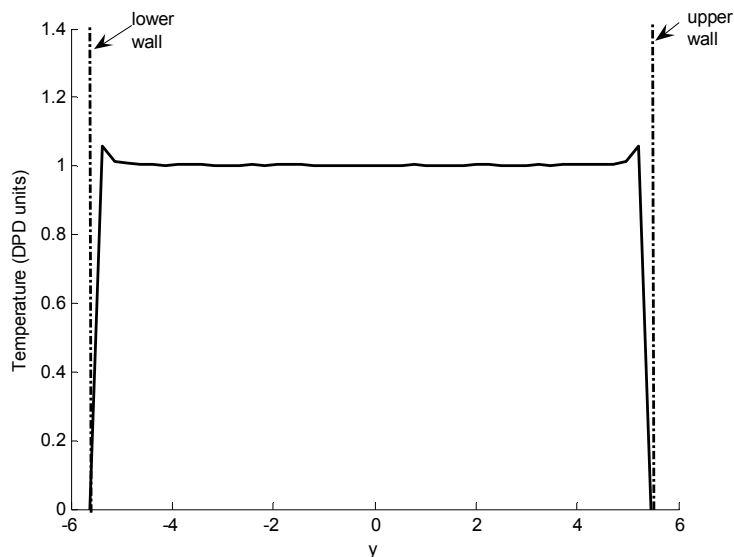


Σχήμα 3.27. Ροή Poiseuille: διάγραμμα της πίεσης για αγωγό μεσοσκοπικής κλίμακας (το y είναι σε μονάδες r_c). Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα.

Κατανομή της θερμοκρασίας

Η κατανομή της θερμοκρασίας παρουσιάζεται στο Σχ. 3.28. Παρατηρείται ότι η θερμοκρασία σε όλο σχεδόν το πλάτος του αγωγού παραμένει σταθερή και ακριβώς ίση με την αρχική της τιμή, στα όρια του στατιστικού σφάλματος.

Η συμπεριφορά αυτή εμπίπτει στις παραδοχές της μακροσκοπικής θεώρησης για σταθερή θερμοκρασία του ρευστού μέσα στους αγωγούς. Πολύ κοντά στους τοίχους εντοπίζεται κορυφή στην κατανομή της θερμοκρασίας στην ίδια περίπου απόσταση που παρατηρήθηκε κορυφή στην κατανομή της πυκνότητας. Όπως είναι γνωστό η θερμοκρασία δίνεται από την κινητική ενέργεια του συστήματος και συνεπώς από την θερμική ταχύτητα των σωματιδίων. Η ταχύτητα των σωματιδίων αυξάνεται λόγω της συγκέντρωσης τους στην περιοχή αυτή. Ειδικότερα, αύξηση της συγκέντρωσης των σωματιδίων, όπως διαπιστώνεται από την κατανομή της πυκνότητας, οδηγεί σε αύξηση των ενδοσωματιδιακών δυνάμεων και άρα αύξηση της ταχύτητας των σωματιδίων.



Σχήμα 3.28. Ροή Poiseuille: διάγραμμα της θερμοκρασίας για αγωγό μεσοσκοπικής κλίμακας (το y είναι σε μονάδες r_c). Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα.

3.2.4 Συμπεράσματα ενότητας

Στο κεφάλαιο αυτό μελετήθηκε η ροή Poiseuille για αγωγούς στη μεσοκλίμακα με χρήση της μεθόδου προσομοίωσης DPD. Διαπιστώθηκε ότι τα αποτελέσματα της μεθόδου είναι πολύ κοντά στα αποτελέσματα των μακροσκοπικών εξισώσεων συνέχειας και ορμής. Αφενός η κατανομή της ταχύτητας για τις δύο περιπτώσεις παρουσιάζει μεγάλη ομοιότητα (με διαφορά στη μέγιστη ταχύτητα στο κέντρο του αγωγού της τάξεως του 6%) και αφετέρου η θερμοκρασία και η πυκνότητα παραμένουν σταθερές κατά μήκος του αγωγού συμπεριφορά η οποία συμφωνεί με τις παραδοχές της μακροσκοπικής θεωρίας.

4. ΝΑΝΟΑΓΩΓΟΙ ΜΕ ΠΕΡΙΟΔΙΚΕΣ ΟΡΘΟΓΩΝΙΚΕΣ ΠΡΟΕΞΟΧΕΣ

Στο κεφάλαιο 3 μελετήσαμε τους παράγοντες που επηρεάζουν την ροή ρευστού σε νανοκλίμακα και μεσοκλίμακα. Είδαμε ότι η δομή του τοιχώματος αλλά και ο συντελεστής αλληλεπίδρασης του με το υγρό παίζουν καθοριστικό ρόλο στις ιδιότητες ροής του ρευστού στον αγωγό. Στο παρόν κεφάλαιο θα μελετήσουμε την επίδραση της μορφολογίας των τοίχων (λείο ή με προεξοχές) που εκτιμάται ότι αποτελεί, επίσης, σημαντικό παράγοντα που καθορίζει τη συμπεριφορά του υγρού στις ροές σε αγωγούς, καθώς το μέγεθος των προεξοχών μπορεί να είναι σημαντικό σε σχέση με τις διαστάσεις του αγωγού.

Η παρουσία περιοδικών προεξοχών σε κλειστούς αγωγούς, με χαρακτηριστικό πλάτος μερικά νανόμετρα έως μερικά μικρόμετρα, αποτελεί, εδώ και αρκετά χρόνια, αντικείμενο έρευνας και μελέτης από την επιστημονική κοινότητα. Πολλές έρευνες έχουν γίνει για την κατανόηση του προβλήματος μεταφοράς ρευστών και θερμότητας σε αυλακωμένους αγωγούς (grooved channels). Οι αυλακωμένοι αγωγοί συναντώνται σε πλήθος εφαρμογών, όπως η μεταφορά θερμότητας στην επιφάνεια των εναλλακτών θερμότητας, η ψύξη των πυρήνων ηλεκτρονικού εξοπλισμού και των πυρηνικών αντιδραστήρων, οι βιοιατρικές και αεροδιαστημικές εφαρμογές καθώς επίσης και σε μικροηλεκτρομηχανολογικά (MEMS) και νανο-ροικά συστήματα [Herman & Kang, 2002].

Αρκετές αναφορές απαντώνται για ροή αερίου και υγρού σε αυλακωμένους αγωγούς χαμηλότερων διαστάσεων. Οι Cao et al. [Cao et al., 2006] μελέτησαν με χρήση της μεθόδου Μοριακής Δυναμικής την επίδραση της τραχύτητας στην ροή του αερίου αργού σε αγωγούς από λευκόχρυσο και διαπίστωσαν ότι οι οριακές συνθήκες

της ταχύτητας ολίσθησης (συμπεριλαμβανομένου ολίσθησης, μη ολίσθησης και αρνητική ολίσθησης) εξαρτώνται όχι μόνον από τον αριθμό Knudsen αλλά και από το είδος της επιφανειακής τραχύτητας. Οι Priezjev & Troian [Priezjev & Troian, 2006] μελέτησαν την επίδραση της τραχύτητας στην ολίσθηση ενός Νευτώνιου ρευστού σε επίπεδη μόνιμη ροή με τη χρήση τριών προσεγγίσεων: των εξισώσεων ροής Stokes, την μέθοδο Μοριακής Δυναμικής και ενός στατιστικού μοντέλου για τον συντελεστή τριβής μεταξύ του αυλακωμένου τοίχου και της πρώτης στρώσης ρευστού, και διαπίστωσαν ότι καθώς το αυλακωμένο μήκος του υποστρώματος προσεγγίζει την μοριακή διάμετρο του ρευστού σωματιδίου, η λύση με την εξίσωση συνέχειας υπερεκτιμά το μέγεθος της ολίσθησης. Οι Naris & Valougeorgis [Naris & Valougeorgis, 2007] μελέτησαν τη ροή εκτός ισορροπίας αερίου σε δισδιάστατο αυλακωμένο αγωγό υπό συνθήκες κίνησης της πλάκας του αγωγού. Βασιζόμενοι στην κινητική θεωρία, ποσοτικοποίησαν την επιρροή του μήκους και του πλάτους της προεξοχής στην δύναμη αντίστασης και την παροχή.

Στην εργασία των Ziarani & Mohammad [Ziarani & Mohammad, 2006] μελετήθηκε η ροή σε αγωγό με προεξοχές τυχαίου σχήματος στους τοίχους και παρουσιάζονται αποτελέσματα για την ταχύτητα του υγρού, η οποία έχει διακυμάνσεις καθώς το πλάτος των προεξοχών αυξάνεται. Στην εργασία των Jabbarzadeh et al. [Jabbarzadeh et al., 2000] πραγματοποιήθηκε η παραμετρική μελέτη των γεωμετρικών παραμέτρων των πλακών στη ροή ενός υγρού εξα-δεκάνιου σε αγωγούς με προεξοχές ημιτονοειδούς μορφής και διαπιστώθηκε αύξηση της ολίσθησης στα τοιχώματα καθώς αυξάνεται η περίοδος των προεξοχών. Τέλος, στην εργασία του Sofos et al. [Sofos et al., 2009] μελετήθηκε με τη χρήση της Μοριακής Δυναμικής η επίδραση στις

μακροσκοπικές ποσότητες της ροής (πυκνότητα, ταχύτητα) της διαμόρφωσης ορθογωνικών προεξοχών στην επάνω πλάκα του αγωγού. Παρατηρήθηκε ‘παγίδευση’ των ατόμων στις εσοχές της επάνω πλάκας και κατά συνέπεια μείωση της ταχύτητας του συστήματος. Η μελέτη έγινε για ύψος προεξοχής 10% και τρία διαφορετικά μήκη προεξοχής.

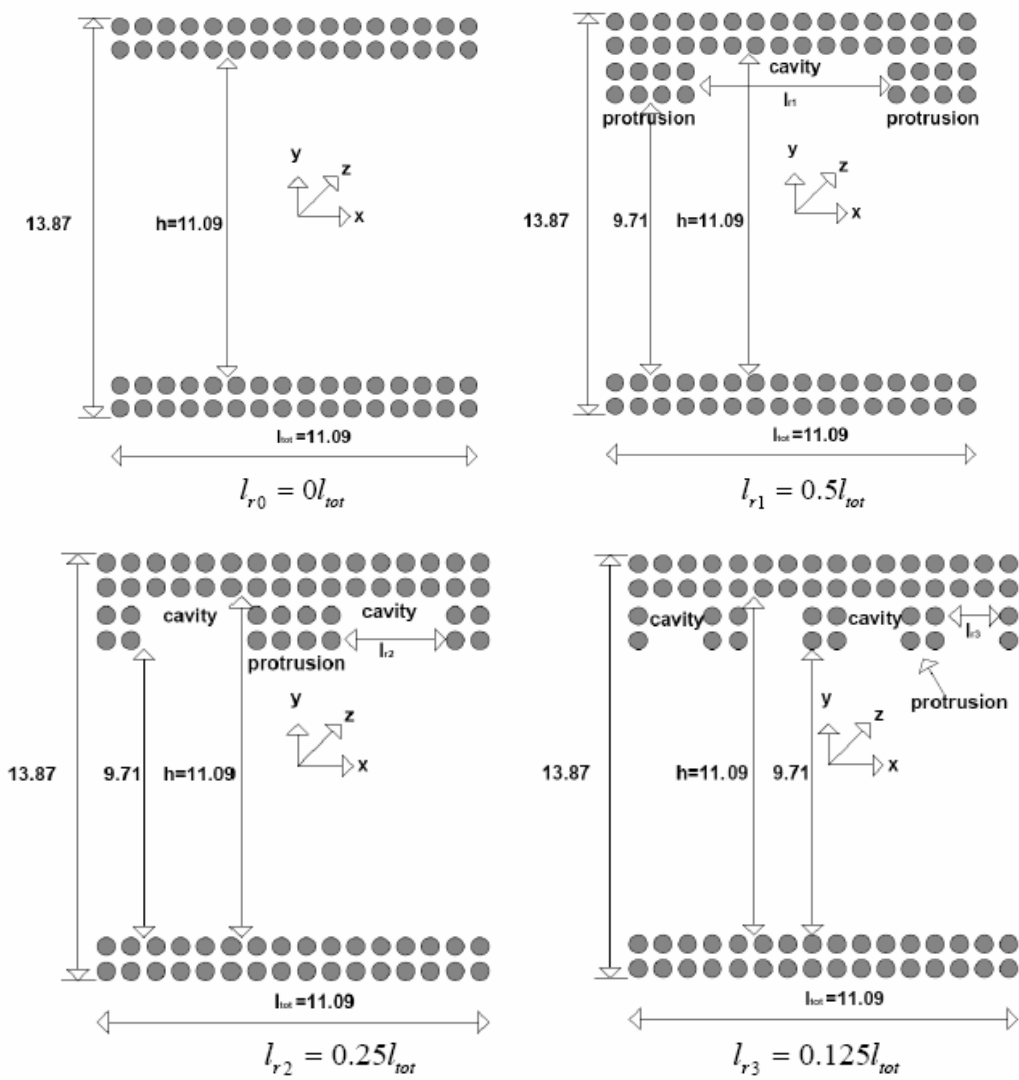
Στο κεφάλαιο αυτό πραγματοποιείται περαιτέρω διερεύνηση της επίδρασης της εμφάνισης περιοδικών προεξοχών της επάνω πλάκας του αγωγού. Τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά των πλακών διαφέρουν με στόχο τη διερεύνηση της επίδρασης της τραχύτητας των τοίχων στη ροή του υγρού. Τα αποτελέσματα των μακροσκοπικών μεγεθών και ο υπολογισμός του μέσου χρόνου παραμονής των σωματιδίων σε συνδυασμό με την αναπαράσταση τροχιών των σωματιδίων αποκαλύπτουν την παγίδευση των σωματιδίων μέσα στις εσοχές που σχηματίζονται ανάμεσα στις προεξοχές και φαίνεται ότι η γεωμετρία των προεξοχών παίζει σημαντικό ρόλο στις μακροσκοπικές ιδιότητες του ρευστού (πυκνότητα, ταχύτητα, πίεση, θερμοκρασία). Το κεφάλαιο αυτό διαμορφώνεται ως εξής: στην πρώτη ενότητα μελετάται η ροή σε νανοαγωγούς με σταθερό ύψος προεξοχής και τρία διαφορετικά μήκη προεξοχής. Παρουσιάζεται το μοντέλο προσομοίωσης και τα αποτελέσματα των μακροσκοπικών ποσοτήτων. Στη δεύτερη ενότητα μεταβάλλεται τόσο το μήκος όσο και το ύψος της προεξοχής υπό συνθήκες σταθερής δύναμης. Στην τρίτη και τελευταία ενότητα καθορίζεται η επίδραση των γεωμετρικών χαρακτηριστικών των προεξοχών υπό συνθήκες διαφορετικών μεγεθών εξωτερικής δύναμης.

4.1 Ροή σε νανοαγωγούς με σταθερό ύψος προεξοχής

4.1.1. Υπολογιστικές λεπτομέρειες

Μελετήθηκε η ροή μεταξύ ακίνητων παράλληλων πλακών που βρίσκονται σε απόσταση h μεταξύ τους. Ο κάτω τοίχος είναι λείος και επίπεδος ενώ ο επάνω χαρακτηρίζεται από την ύπαρξη περιοδικών προεξοχών ορθογωνικής διατομής. Θεωρούνται τέσσερα διαφορετικά μήκη προεξοχής: $l_{r0} = 0l_{tot}$, $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και $l_{r3} = 0.125l_{tot}$, όπου το l_{ri} αντιπροσωπεύει το μήκος των ορθογωνικών προεξοχών και το l_{tot} το συνολικό μήκος του υπολογιστικού μας φατνίου κατά τη x-κατεύθυνση (κατεύθυνση ροής). Για παράδειγμα $l_{r0} = 0l_{tot}$ είναι ο λείος αγωγός, $l_{r1} = 0.5l_{tot}$ είναι ο αγωγός με μια ορθογωνική προεξοχή μήκους $0.5l_{tot}$ στο υπολογιστικό φατνίο, $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ είναι ο αγωγός με δύο ορθογωνικές προεξοχές μήκους $0.25l_{tot}$ η καθεμία και $l_{r3} = 0.125l_{tot}$ είναι ο αγωγός με τέσσερις ορθογωνικές προεξοχές μήκους $0.125l_{tot}$ η καθεμία (Σχ.4.1).

Οι διαστάσεις όλων των υπολογιστικών φατνίων κατά τις τρεις κατευθύνσεις είναι $L_x \times L_y \times L_z = 11.09r_c \times 13.87r_c \times 11.09r_c$ (σε μονάδες DPD). Το ύψος της προεξοχής είναι περίπου 10% του πλάτους του αγωγού. Πραγματοποιήθηκαν ακόμη προσομοιώσεις σε αγωγούς με διπλάσιο και τριπλάσιο μήκος $L_x \times L_y \times L_z = 22.18r_c \times 13.87r_c \times 11.09r_c$ και $L_x \times L_y \times L_z = 33.27r_c \times 13.87r_c \times 11.09r_c$ με σκοπό τη διερεύνηση της ύπαρξης φαινομένων πεπερασμένης διάστασης και σε όλες τις περιπτώσεις τα αποτελέσματα ήταν ίδια στα πλαίσια του στατιστικού σφάλματος.



Σχήμα 4.1. Σχηματική άποψη των υπό μελέτη αγωγών

Ο λείος αγωγός αποτελείται από 1024 σωματίδια τοίχου και 3840 σωματίδια ρευστού, ενώ ο αγωγός με προεξοχές, και για τις τρεις περιπτώσεις που μελετώνται, αποτελείται από 1260 σωματίδια τοίχου και 3584 σωματίδια ρευστού. Τα σωματίδια

του τοίχου τοποθετούνται σε τετραγωνικό πλέγμα (sc) και οι ταχύτητες τους είναι μηδενικές.

Περιοδικές συνθήκες θεωρούνται στις x- και z-κατευθύνσεις. Με σκοπό την αποφυγή της απομάκρυνσης των σωματιδίων ρευστού διαμέσου των τοίχων εξαιτίας μη επάρκειας των απωστικών δυνάμεων από τα σωματίδια του τοίχου, χρησιμοποιήθηκαν συνθήκες ανάκλασης (bounce-back συνθήκες) ώστε τα σωματίδια του ρευστού να επιστρέφουν στο εσωτερικό του αγωγού. Σύμφωνα με τις bounce-back συνθήκες κάθε φορά που ένα σωματίδιο ρευστού πλησιάζει σε δεδομένη απόσταση από τον τοίχο, η ταχύτητα του αντιστρέφεται (βλέπε κεφ.2).

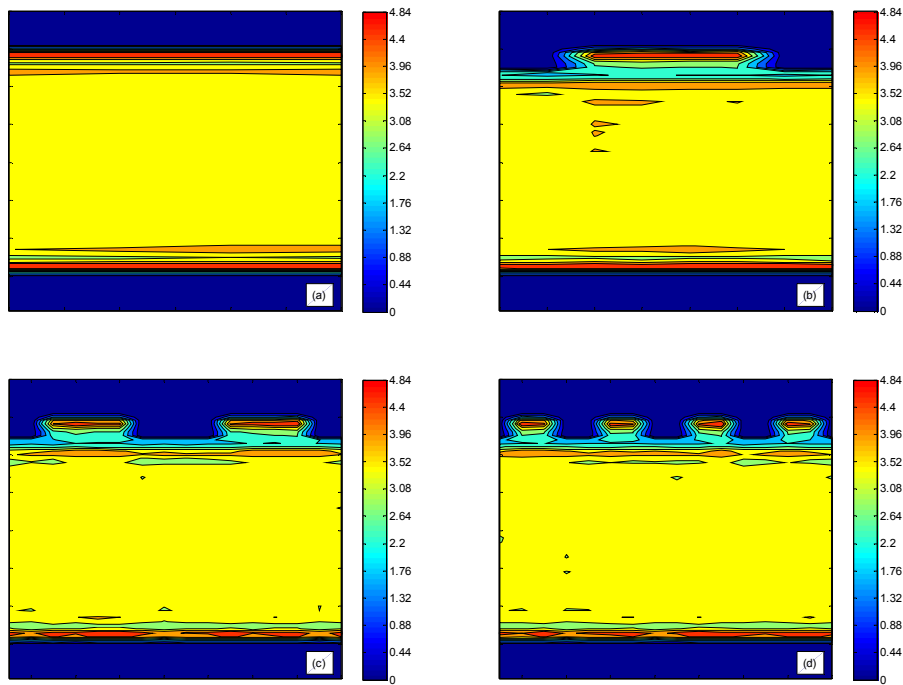
Η θερμοκρασία του συστήματος διατηρείται σταθερή (300K). Η εξωτερική δύναμη είναι ίση με $F_{ext} = 0.02$ και ασκείται σε κάθε σωματίδιο ρευστού κατά τη x-κατεύθυνση. Το χρονικό βήμα της προσομοίωσης είναι $\Delta t = 0.01 \sqrt{\frac{m r_c^2}{k_B T}}$ (αντιστοιχεί σε πραγματικές διαστάσεις σε 0.015psec). Στις προσομοιώσεις αυτού του κεφαλαίου το μέγεθος του σωματιδίου DPD αντιστοιχεί στο μέγεθος ενός άτομου αργού ($N_m=1$).

Οι κατανομές της πυκνότητας, της ταχύτητας, της πίεσης και της θερμοκρασίας υπολογίζονται ως τοπικές τιμές σε παραλληλεπίπεδα όπως έχει περιγραφεί λεπτομερώς στη παράγραφο 3.3. Η διάρκεια της προσομοίωσης είναι 5×10^5 χρονικά βήματα και τα μακροσκοπικά μεγέθη (πυκνότητα, ταχύτητα, πίεση, θερμοκρασία) υπολογίζονται ως μέσες τιμές στα τελευταία 2.5×10^5 χρονικά βήματα.

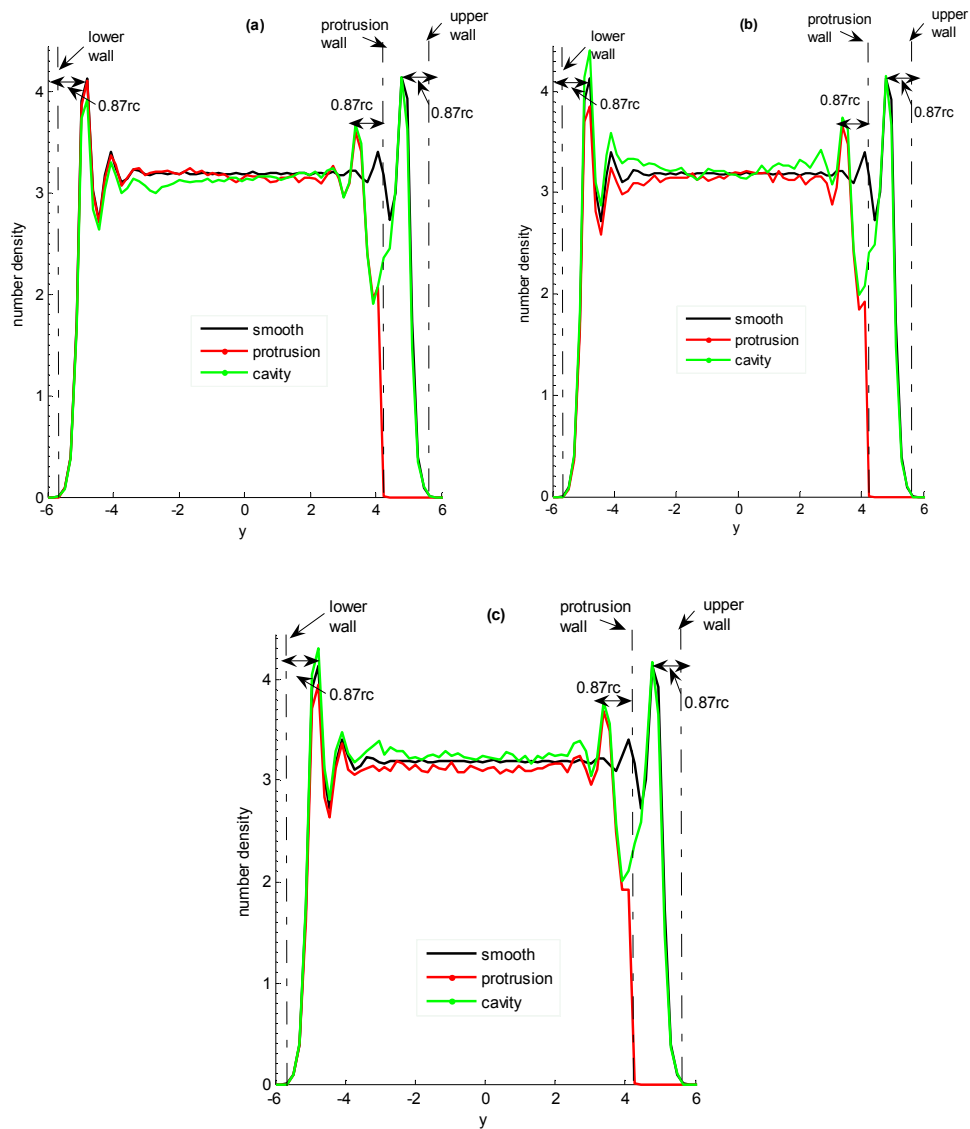
4.1.2 Αποτελέσματα

Αριθμητική πυκνότητα

Υπολογίστηκαν οι καμπύλες ίσης πυκνότητας (Σχ. 4.2), όπως επίσης και τα διαγράμματα πυκνότητας σε συγκεκριμένες διατομές του αγωγού (Σχ. 4.3). Τα αποτελέσματα του λείου αγωγού (περίπτωση l_{r0}) συμφωνούν με τα αποτελέσματα των Pivkin και Karniadakis [Pivkin & Karniadakis, 2005].



Σχήμα 4.2. Καμπύλες ίσης πυκνότητας για α) $l_{r0} = 0l_{tot}$, β) $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, γ) $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και δ) $l_{r3} = 0.125l_{tot}$.



Σχήμα 4.3. Διαγράμματα πυκνότητας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για **α)** $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, **β)** $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και **γ)** $l_{r3} = 0.125l_{tot}$ (το y είναι σε μονάδες r_c). Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα

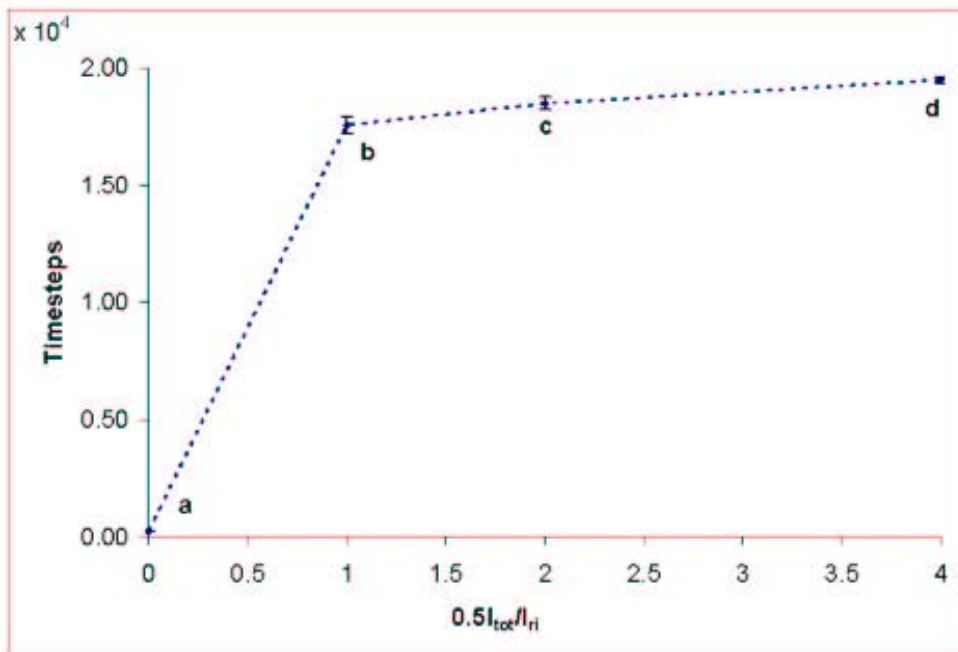
Παρουσιάζει ενδιαφέρον η μελέτη των καμπύλων ίσης πυκνότητας πριν την αναλυτική περιγραφή των κατανομών της πυκνότητας σε διατομές του αγωγού που βρίσκονται στις προεξοχές και τις εσοχές του πάνω τοίχου (Σχ. 4.3). Στην περίπτωση του λείου αγωγού η πυκνότητα είναι ομογενής στο κεντρικό τμήμα του αγωγού και διαφέρει κοντά στα όρια των τοίχων όπου παρατηρείται εναλλαγή περιοχών χαμηλής

και περιοχών υψηλής πυκνότητας σε σχέση με τη μέση τιμή στο κεντρικό τμήμα του αγωγού. Αυτή η ανομοιογένεια αποδίδεται στην παρουσία των σωματιδίων του τοίχου και την αλληλεπίδραση τους με τα σωματίδια του ρευστού, όπως παρατηρήθηκε και στα αποτελέσματα των [Sofos et al.,2009] για προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής. Στην περίπτωση των αγωγών με ορθογωνικές προεξοχές παρατηρείται ότι ενώ η συμπεριφορά της πυκνότητας κοντά στο όριο του κάτω τοίχου δεν επηρεάζεται σημαντικά, η συμπεριφορά κοντά στον επάνω τοίχο παρουσιάζει ενδιαφέρον. Μέσα στις εσοχές υπάρχουν περιοχές υψηλής πυκνότητας (υψηλότερη από την τιμή στο κέντρο του αγωγού) που περιτριγυρίζονται από περιοχές χαμηλής πυκνότητας (Σχ. 4.2β-δ). Έξω από τις εσοχές και παράλληλα προς τον τοίχο με τις προεξοχές, παρατηρείται η εμφάνιση στρώματος χαμηλής πυκνότητας το οποίο ακολουθεί μια ζώνη υψηλής πυκνότητας. Σε μεγάλες αποστάσεις από τον τοίχο η πυκνότητα του ρευστού πλησιάζει τη μέση τιμή της.

Παρουσιάζει ενδιαφέρον η λεπτομερής μελέτη της συμπεριφοράς σε διατομές του αγωγού που βρίσκονται στις εσοχές και τις προεξοχές της επάνω πλάκας (Σχ. 4.3). Γενικότερα, η εμφάνιση των σωματιδίων ρευστού σε συγκεκριμένες θέσεις είναι παρόμοια για όλες τις περιπτώσεις προεξοχών που μελετώνται εδώ. Πιο συγκεκριμένα, στον κάτω λείο τοίχο παρατηρείται κορυφή στην κατανομή σε απόσταση περίπου $0.87r_c$ από το όριο του κάτω τοίχου. Η πυκνότητα είναι σχεδόν σταθερή για $-4r_c < y < 4r_c$ τόσο για την περίπτωση των διατομών στην προεξοχή, όσο και για την περίπτωση των διατομών στην εσοχή. Κοντά στον επάνω τοίχο παρατηρείται κορυφή στην κατανομή σε απόσταση $0.87r_c$ από το στερεό όριο της προεξοχής και μια ακόμη κορυφή σε απόσταση $0.87r_c$ από το στερεό όριο της εσοχής. Αξίζει ακόμη να

σημειωθεί ότι πολύ κοντά στο στερεό όριο της προεξοχής παρατηρείται μια μικρή υπερύψωση της κατανομής ($y \approx 4r_c$), ενώ στην ίδια απόσταση η κατανομή της πυκνότητας στην εσοχή παρουσιάζει τοπικό ελάχιστο.

Η κατανομή των σωματιδίων ρευστού στις εσοχές, όπως περιγράφηκε παραπάνω, είναι πιθανή ένδειξη παγίδευσης των σωματιδίων μέσα στις εσοχές του επάνω τοίχου. Για την περαιτέρω διερεύνηση αυτής της υπόθεσης υπολογίστηκε ο μέσος χρόνος παραμονής των σωματιδίων ρευστού μέσα στις εσοχές και συγκρίθηκε η τιμή του με το μέσο χρόνο παραμονής στο υπόλοιπο τμήμα του αγωγού. Ο μέσος χρόνος παραμονής υπολογίζεται διαιρώντας το συνολικό χρόνο παραμονής των σωματιδίων που βρίσκονται μέσα στην εσοχή με τον αριθμό τους για κάθε χρονικό βήμα. Οι υπολογισμοί του μέσου χρόνου παραμονής έγιναν σε πέντε χρονικά διαστήματα των 5×10^4 χρονικών βημάτων το καθένα (συνολικά $5 \times 5 \times 10^4 = 2.5 \times 10^5$ χρονικά βήματα) και η τιμή του μέσου χρόνου παραμονής παρέμεινε σταθερή στα πλαίσια του στατιστικού σφάλματος όπως φαίνεται στο Σχ. 4.4. Ο μέσος χρόνος παραμονής για το κεντρικό τμήμα είναι πρακτικά ο ίδιος για όλες τις περιπτώσεις αγωγών που μελετώνται εδώ (παρουσιάζονται ως σημείο α στο Σχ. 4.4). Ωστόσο, ο μέσος χρόνος παραμονής μέσα στις εσοχές αυξάνει καθώς μειώνεται το μήκος της ορθογωνικής προεξοχής για το ίδιο μήκος του υπολογιστικού φατνίου, l_{tot} , και είναι αισθητά μεγαλύτερος από το χρόνο παραμονής στο κεντρικό τμήμα του αγωγού, γεγονός που αποδεικνύει ότι τα σωματίδια 'περνούν' περισσότερο χρόνο μέσα στις εσοχές συγκριτικά με το υπόλοιπο τμήμα του αγωγού.

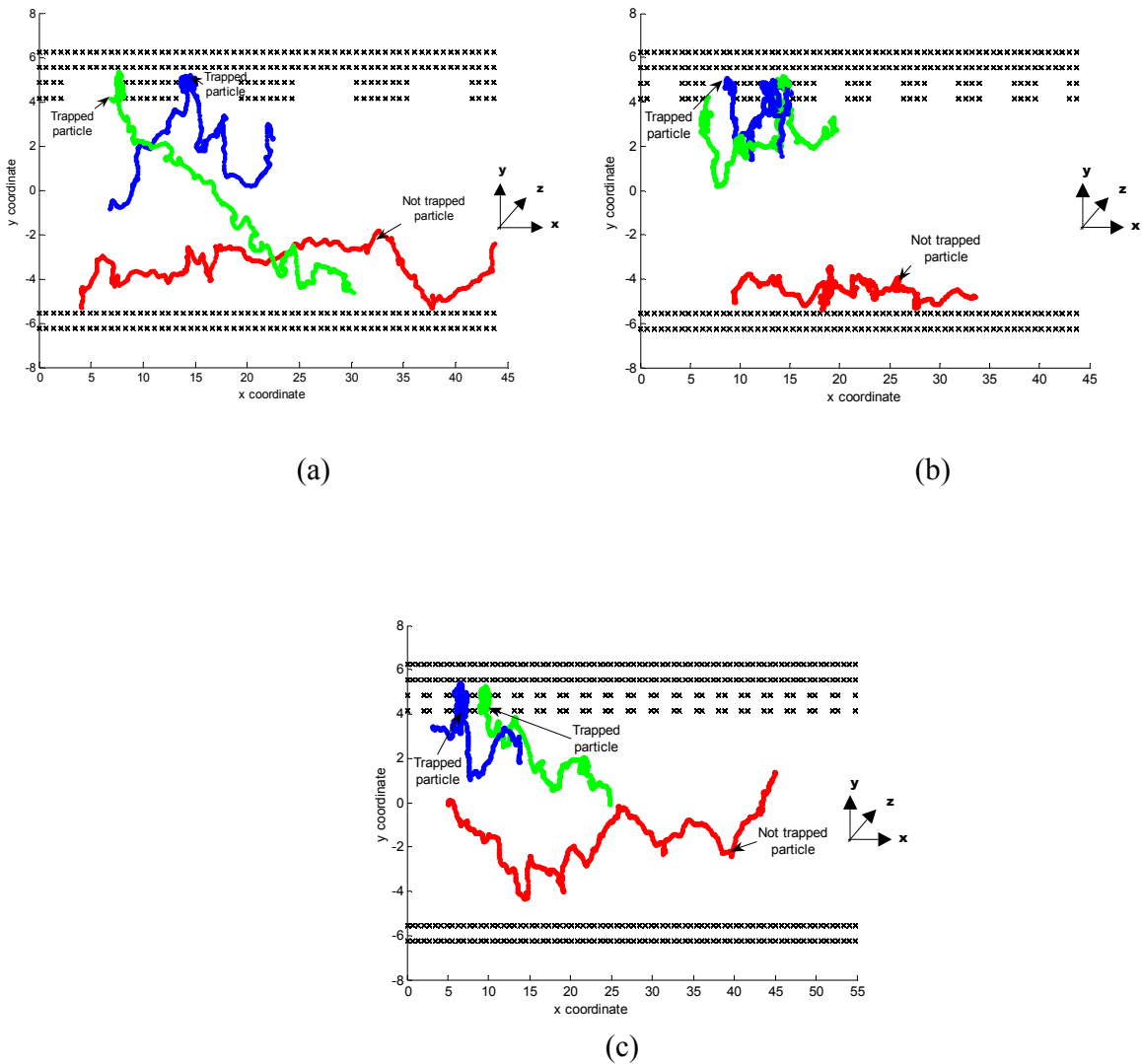


Σχήμα 4.4. Μέσος χρόνος παραμονής μέσα στις εσοχές ως συνάρτηση του αριθμού των προεξοχών β) $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, γ) $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και δ) $l_{r3} = 0.125l_{tot}$. Τα αποτελέσματα προκύπτουν για χρονική διάρκεια 5×10^4 χρονικά βήματα. Για σύγκριση παρουσιάζεται ακόμη ο χρόνος παραμονής στο κεντρικό τμήμα του αγωγού (σημείο (α))

Λεπτομερής ανάλυση των τροχιών των σωματιδίων απέδειξε ότι δεν υπάρχουν σωματίδια που μένουν παγιδευμένα καθ' όλη τη διάρκεια της προσομοίωσης. Διερευνήθηκε ακόμη η εξάρτηση της παγίδευσης των σωματιδίων από τις αρχικές συνθήκες. Στην πραγματικότητα, μελετήθηκε η θέση των σωματιδίων για όλη τη διάρκεια της προσομοίωσης και διαπιστώθηκε ότι τα σωματίδια που στην αρχή της προσομοίωσης βρίσκονται μέσα στην εσοχή δεν παραμένουν στην περιοχή αυτή για όλη τη διάρκεια της προσομοίωσης. Επιπρόσθετα, σωματίδια που βρίσκονται έξω από την εσοχή στην αρχή της προσομοίωσης, μπορούν κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης να εισέλθουν στην εσοχή και να μείνουν παγιδευμένα εκεί για κάποια χρονική διάρκεια. Στο Σχ. 4.5 παρουσιάζονται χαρακτηριστικές τροχιές σωματιδίων στο x-y επίπεδο και

διαπιστώνεται η διαφορά στην κίνηση ανάμεσα σε ένα παγιδευμένο σωματίδιο (μπλε και πράσινη τροχιά) και ένα ελεύθερα κινούμενο σωματίδιο το οποίο κινείται ανεμπόδιστα στο κεντρικό τμήμα του αγωγού (κόκκινη τροχιά).

Τα παραπάνω αποτελέσματα συμφωνούν ποιοτικά με τα αποτελέσματα της Μοριακής Δυναμικής εκτός ισορροπίας για ροή αργού σε νανοαγωγό με κρυπτό στους τοίχους [Sofos et al., 2009], όπου ο μέσος χρόνος μέσα στις εσοχές εμφανίζεται ομοίως αυξημένος σε σύγκριση με το μέσο χρόνο στο εσωτερικό του αγωγού. Η απευθείας σύγκριση των δύο μεθόδων προσομοίωσης (DPD, MD) παρουσιάζει σημαντικές δυσκολίες εξαιτίας των διαφορετικών δυναμικών αλληλεπίδρασης του ρευστού και του τοίχου στις δύο περιπτώσεις.



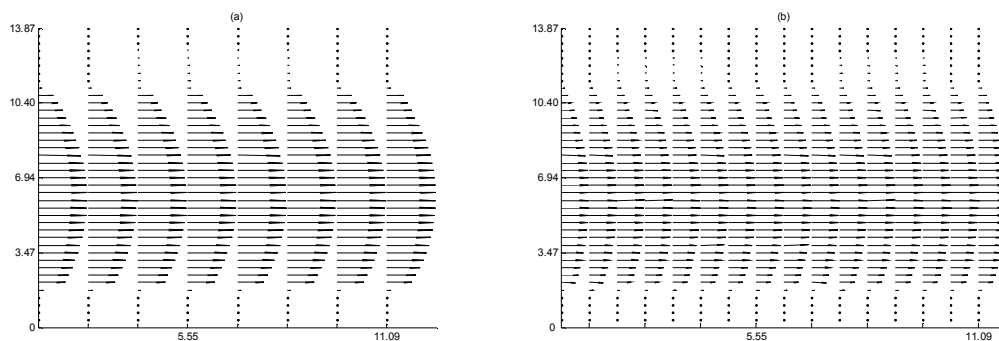
Σχήμα 4.5. Χαρακτηριστικές τροχιές ενός παγιδευμένου και ενός ελεύθερα κινούμενου σωματιδίου. Με x αναπαρίσταται οι τοίχοι. α) $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, β) $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και γ) $l_{r3} = 0.125l_{tot}$.

Η παγίδευση των σωματιδίων όπως περιγράφηκε στην παράγραφο αυτή εκτιμάται ότι θα προκαλέσει μείωση των ταχυτήτων και κατά συνέπεια θα επηρεάσει την κατανομή της πίεσης και της θερμοκρασίας μέσα στις εσοχές. Αυτές οι μακροσκοπικές ποσότητες μελετώνται λεπτομερώς στις επόμενες παραγράφους.

Κατανομή της ταχύτητας

Υπολογίστηκαν τα διανύσματα της x-συνιστώσας της ταχύτητας, όπως επίσης και οι κατανομές της ταχύτητας σε συγκεκριμένες διατομές του αγωγού (εσοχές και προεξοχές). Οι κατανομές της ταχύτητας στην περίπτωση του λείου αγωγού συμφωνούν με τα αντίστοιχα αποτελέσματα των Pivkin και Karniadakis [Pivkin & Karniadakis, 2005].

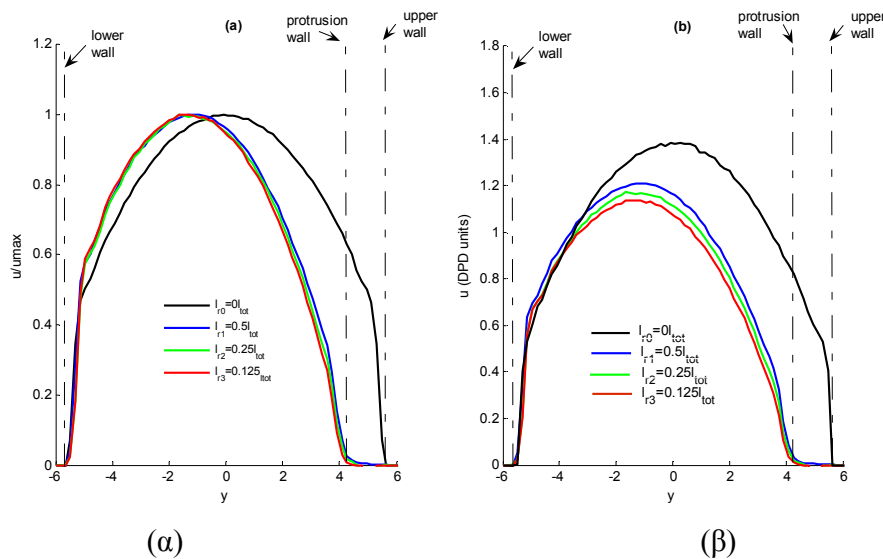
Αντιπροσωπευτικά διανύσματα της ταχύτητας παρουσιάζονται στο Σχ. 4.6. Παρατηρείται, ότι στην περίπτωση των αγωγών με προεξοχές η κατανομή της ταχύτητας δεν είναι συμμετρική ως προς το κέντρο του αγωγού (Σχ. 4.6α-4.6β). Στην πραγματικότητα οι υψηλές τιμές της ταχύτητας εντοπίζονται κοντά στο κάτω λείο στερεό τοίχωμα.



Σχήμα 4.6. Διανύσματα της ταχύτητας στο x-y επίπεδο για α) $l_{r1} = 0.5l_{tot}$ β) $l_{r2} = 0.25l_{tot}$.

Στο Σχ. 4.7 παρουσιάζονται οι κατανομές της ταχύτητας που προκύπτουν ως μέση τιμή σε στρώματα παράλληλα στη ροή ενώ στο Σχ. 4.8 παρουσιάζονται οι τοπικές κατανομές της ταχύτητας σε συγκεκριμένες διατομές του αγωγού. Όπως παρατηρείται

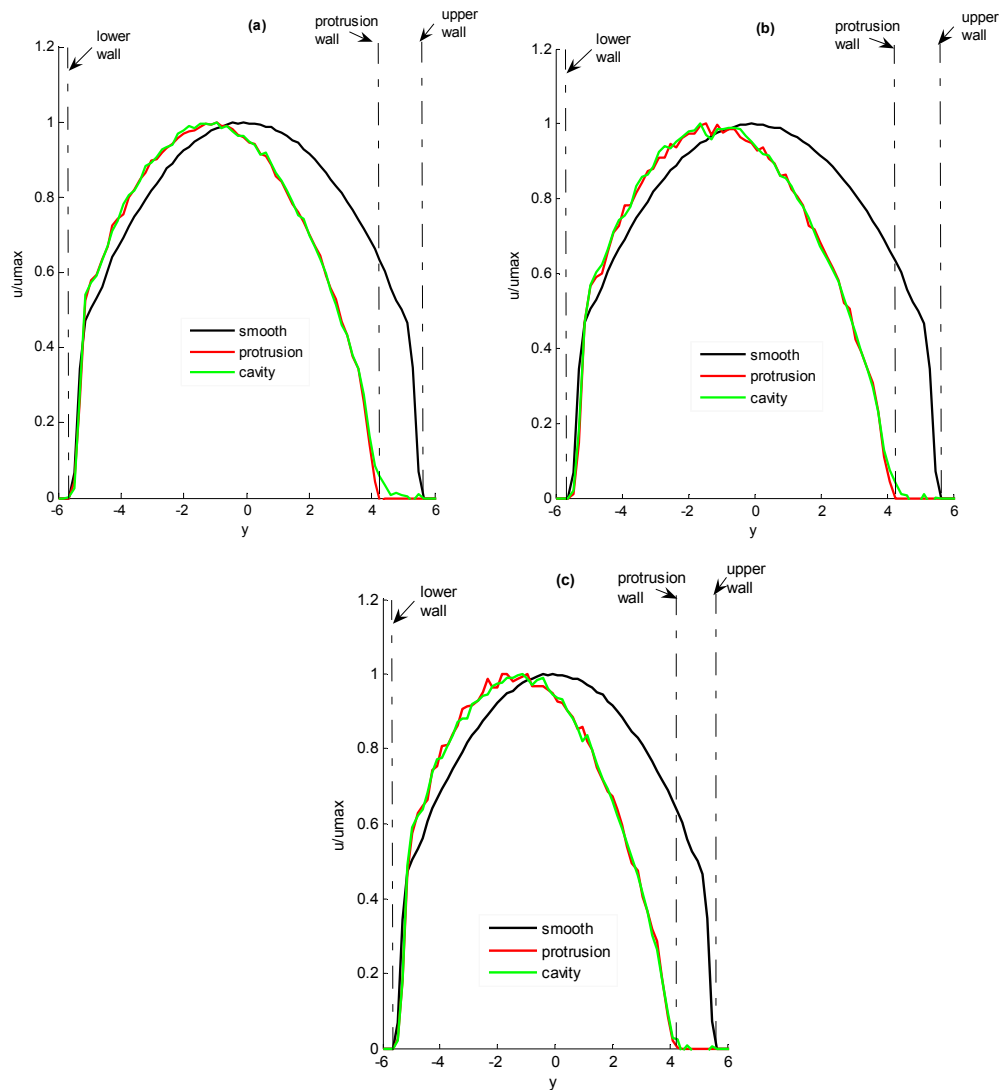
(Σχ. 4.7β), η μέγιστη ταχύτητα εξαρτάται από το μήκος της προεξοχής. Η μέγιστη ταχύτητα στο λείο αγωγό είναι αισθητά μεγαλύτερη εν συγκρίσει με τους αγωγούς με ορθογωνικές προεξοχές, ενώ το σχήμα της κατανομής στην περίπτωση των αγωγών με προεξοχές επηρεάζεται κυρίως στο μισό επάνω τμήμα του αγωγού, όπου εμφανίζεται ο τοίχος με προεξοχές. Διαπιστώνεται ότι οι ταχύτητες μειώνονται συστηματικά σε όλο το αγωγό όσο το μήκος της προεξοχής μειώνεται. Ακόμη, παρατηρείται ότι κοντά στον επάνω τοίχο η ταχύτητα είναι μικρότερη σε σχέση με το λείο αγωγό.



Σχήμα 4.7. α) Μέση $\frac{u}{u_{\max}}$ ταχύτητα και β) μέση ταχύτητα για τις περιπτώσεις i) $l_{r0} = 0l_{tot}$, ii) $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, iii) $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και iv) $l_{r3} = 0.125l_{tot}$. (το y είναι σε μονάδες r_c). Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα.

Μια πιο προσεκτική ματιά της αδιάστατης ταχύτητας σε συγκεκριμένες διατομές του αγωγού παρουσιάζει ενδιαφέροντα χαρακτηριστικά (Σχ. 4.8). Για την περίπτωση l_{r1} (Σχ. 4.8α) παρατηρείται ότι οι κατανομές της ταχύτητας για όλες τις περιοχές που μελετώνται (εσοχή, προεξοχή) έχουν παρόμοιο σχήμα για πλάτος αγωγού

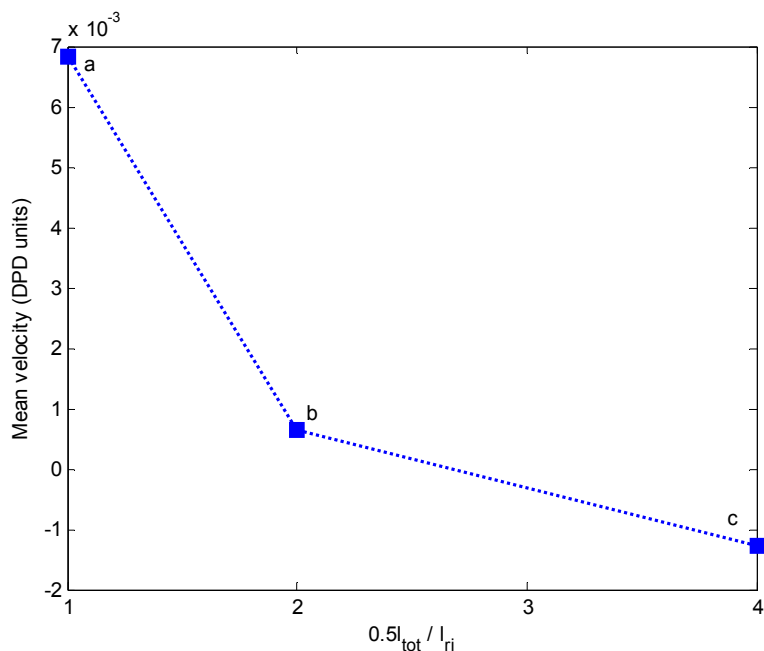
$-5.5r_c < y < 4r_c$. Μέσα στις εσοχές οι ταχύτητες είναι μικρές όπως άλλωστε ήταν αναμενόμενο από την συγκέντρωση των σωματιδίων και τον αυξημένο χρόνο παραμονής (βλέπε προηγούμενη παράγραφο).



Σχήμα 4.8. Διαγράμματα της ταχύτητας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για α) $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, β) $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και γ) $l_{r3} = 0.125l_{tot}$ (το y είναι σε μονάδες r_c). Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα

Για την περίπτωση l_{r2} (Σχ. 4.7β , 4.8β) παρατηρείται ότι οι ταχύτητες στις εσοχές είναι μικρότερες σε σχέση με το λείο αγωγό και ακόμη μικρότερες σε σχέση με την περίπτωση l_{r1} . Οι κατανομές της ταχύτητας (τόσο στις προεξοχές, όσο και στις εσοχές) είναι παρόμοιες και οι τιμές της ταχύτητας χαμηλότερες σε σχέση με αυτές του λείου αγωγού. Παρατηρείται ακόμη, ‘συμπύεση’ της κατανομής της ταχύτητας προς τα αριστερά, όπως και στην περίπτωση l_{r1} , σε σύγκριση με την κατανομή στο λείο αγωγό.

Για την περίπτωση l_{r3} (Σχ. 4.8γ) η ταχύτητα στις εσοχές είναι μικρότερη σε σχέση με την l_{r1} και την l_{r2} . Αυτό σημαίνει ότι το μήκος της προεξοχής επηρεάζει τις τιμές της ταχύτητας σε αυτήν την περιοχή, τουλάχιστον για τις περιπτώσεις που μελετήθηκαν στην παρούσα ενότητα, όπου το ύψος της προεξοχής είναι περίπου 10% του συνολικού ύψους του αγωγού. Η μείωση αυτή φαίνεται στο Σχ. 4.9 όπου παρουσιάζεται η μέση ταχύτητα των σωματιδίων μέσα στις εσοχές (η μέση ταχύτητα υπολογίζεται σαν μέση τιμή της ταχύτητας για τα υπολογιστικά κελιά που βρίσκονται μέσα στην εσοχή). Από το διάγραμμα αυτό διαπιστώνεται ευκρινέστερα ότι καθώς το μήκος της προεξοχής μειώνεται, μειώνεται και η μέση ταχύτητα μέσα στις εσοχές υπό τις ίδιες συνθήκες εξωτερικής δύναμης.



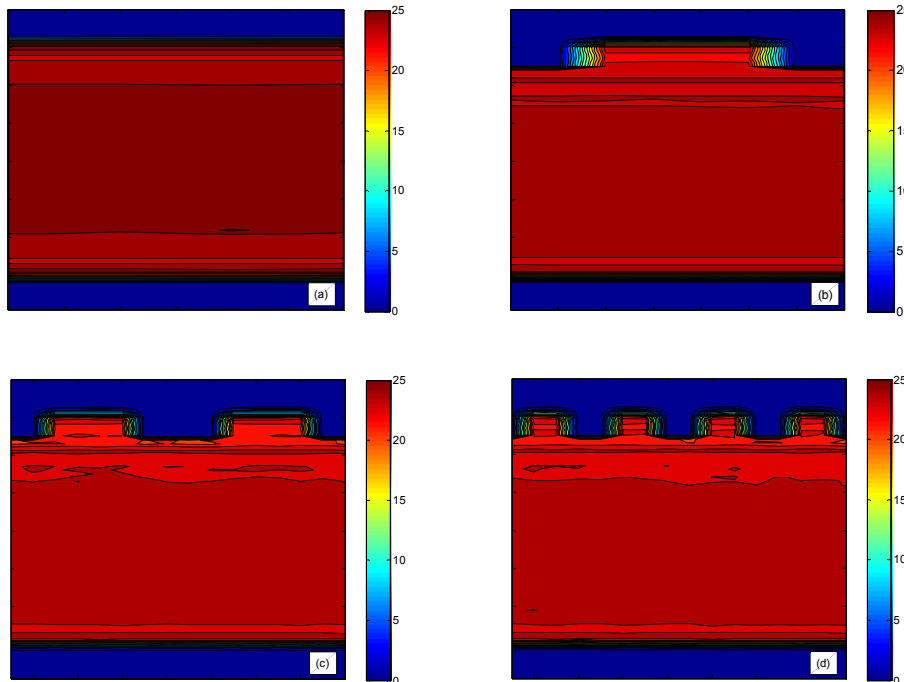
Σχήμα 4.9. Μέση ταχύτητα μέσα στις εσοχές ως συνάρτηση του αριθμού των προεξοχών για α) $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, β) $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και γ) $l_{r3} = 0.125l_{tot}$ (η μέση τιμή της ταχύτητας προσδιορίζεται από το μέσο όρο της ταχύτητας των υπολογιστικών καλιών που βρίσκονται μέσα στην εσοχή).

Συμπερασματικά, από την λεπτομερή μελέτη των κατανομών ταχύτητας παρατηρείται ότι οι ταχύτητες των σωματιδίων μέσα στις εσοχές είναι πολύ μικρές και ακόμη μικρότερες είναι και οι μέσες ταχύτητες στο υπόλοιπο τμήμα του αγωγού εν συγκρίσει με τις ταχύτητες που αναπτύσσονται στο λείο αγωγό. Τόσο οι μέσες ταχύτητες, όσο και οι ταχύτητες στις εσοχές εξαρτώνται από το μήκος της προεξοχής και μάλιστα μειώνονται καθώς το μήκος της προεξοχής μειώνεται.

Η συμπεριφορά της ταχύτητας, όπως μελετήθηκε στην παρούσα παράγραφο, αναμένεται ότι θα προκαλέσει τροποποίηση τόσο στην πίεση όσο και στη θερμοκρασία.

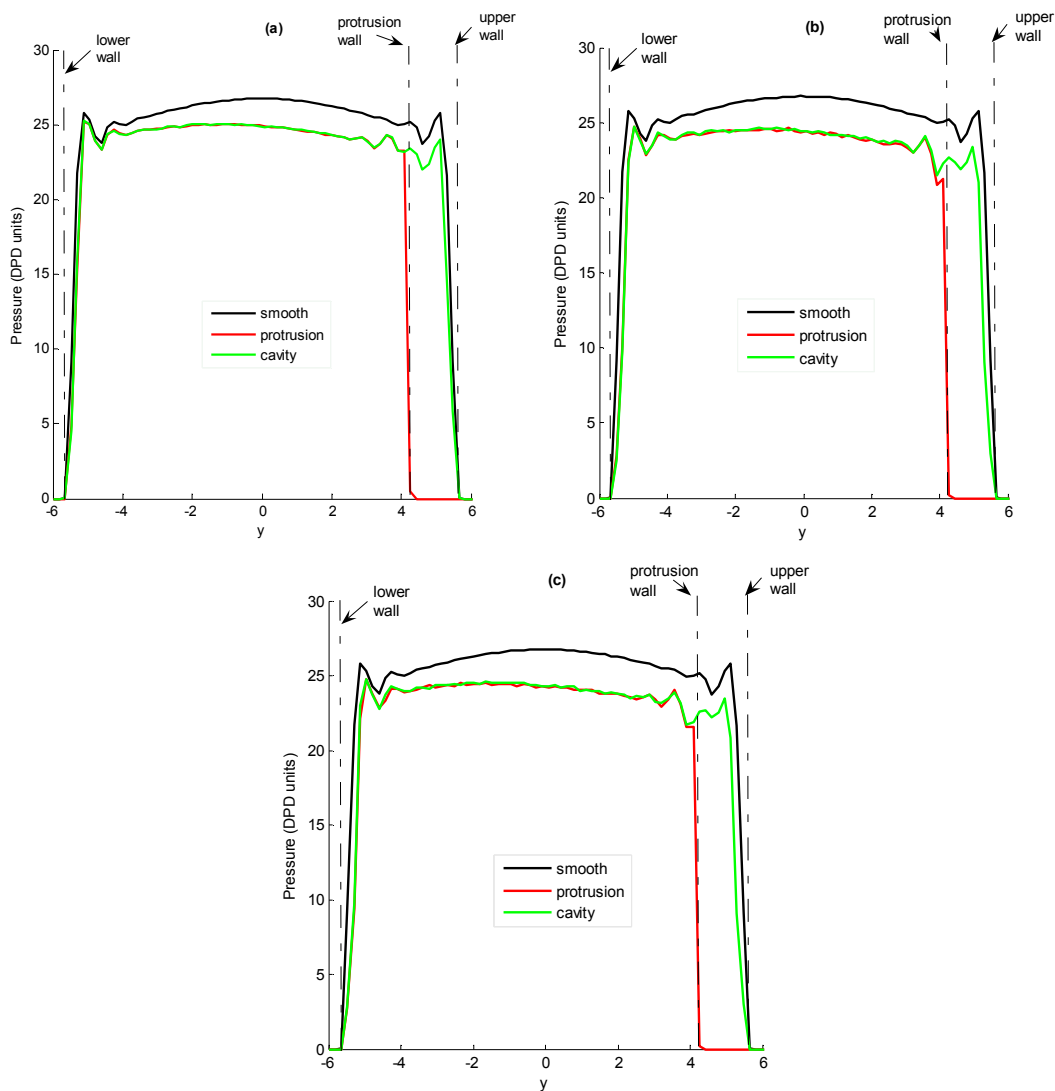
Κατανομή της πίεσης

Στο Σχ. 4.10 φαίνονται οι ισοβαρείς καμπύλες ενώ στο Σχ. 4.11 παρουσιάζονται οι κατανομές της πίεσης στις εσοχές και τις προεξοχές. Όπως ήταν αναμενόμενο, στο λείο αγωγό η συμπεριφορά της πίεσης εμφανίζεται συμμετρική ως προς το κέντρο του αγωγού. Η μέγιστη τιμή της πίεσης εμφανίζεται στο κέντρο του αγωγού και μειώνεται ελαφρώς καθώς κινούμαστε προς τους τοίχους. Γειτονικά στους τοίχους, παρατηρείται η εμφάνιση ταλαντώσεων παρόμοια με την πυκνότητα (Σχ. 4.2). Είναι λογικό να αναμένουμε ότι η αυξημένη παρουσία των σωματιδίων σε αυτή την περιοχή οδηγεί σε αυξημένες αλληλεπιδράσεις μεταξύ των σωματιδίων και συνεπώς σε αύξηση της πίεσης.



Σχήμα 4.10. Ισοβαρείς για α) $l_{r0} = 0l_{tot}$, β) $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, γ) $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και δ) $l_{r3} = 0.125l_{tot}$.

Για όλες τις περιπτώσεις των αγωγών με προεξοχές η πίεση είναι χαμηλότερη σε σχέση με το λείο αγωγό. Ακόμη, κοντά στον κάτω λείο τοίχο όλοι οι αγωγοί παρουσιάζουν την ίδια συμπεριφορά, και αυτό πιθανότατα αποδίδεται στο γεγονός ότι το ύψος της προεξοχής είναι χαμηλό σε σχέση με το συνολικό ύψος του αγωγού (0.10h). Τέλος, παρατηρείται ότι οι τιμές της πίεσης είναι πολύ κοντά για τις περιπτώσεις l_{r2} και l_{r3} .



Σχήμα 4.11. Διαγράμματα της πίεσης σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για α) $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, β) $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και γ) $l_{r3} = 0.125l_{tot}$ (το y είναι σε μονάδες r_c). Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα

Για την περίπτωση l_{r1} (Σχ. 4.10β) η πίεση μειώνεται κοντά στις εσοχές του επάνω τοίχου. Ωστόσο μέσα στις εσοχές παρατηρείται η εμφάνιση μιας περιοχής υψηλής πίεσης σε εναλλαγή με περιοχές χαμηλής πίεσης. Εκτιμάται ότι οι περιοχές υψηλής πίεσης παρατηρούνται εξαιτίας της παγίδευσης των σωματιδίων ρευστού μέσα στις εσοχές όπως παρατηρήθηκε στην κατανομή της πυκνότητας (Σχ 4.3α). Η συμπεριφορά αυτή οδηγεί σε μικρότερες ενδοσωματιδιακές αποστάσεις και συνεπώς υψηλότερες μεταξύ τους δυνάμεις που οδηγούν σε αύξηση της πίεσης. Δίπλα στον επάνω τοίχο η πίεση μειώνεται καθώς τα σωματίδια δεν συγκεντρώνονται σε εκείνες τις περιοχές.

Για την περίπτωση l_{r2} (Σχ. 4.10γ), στον επάνω τοίχο (μέσα στις εσοχές), παρατηρείται και πάλι η εμφάνιση μιας περιοχής υψηλής πίεσης που είναι μικρότερη σε ύψος από αυτή που παρατηρείται στην περίπτωση l_{r1} . Η περιοχή υψηλής πίεσης εναλλάσσεται και πάλι με περιοχές χαμηλής πίεσης. Στις προεξοχές η πίεση είναι χαμηλότερη σε σχέση με την περίπτωση l_{r1} .

Για την περίπτωση l_{r3} (Σχ. 4.10δ) στον επάνω τοίχο, μέσα στις εσοχές, υπάρχουν δύο περιοχές υψηλής πίεσης που εναλλάσσονται με τρεις περιοχές χαμηλής πίεσης. Στις προεξοχές η πίεση έχει την ίδια τιμή με την περίπτωση l_{r2} .

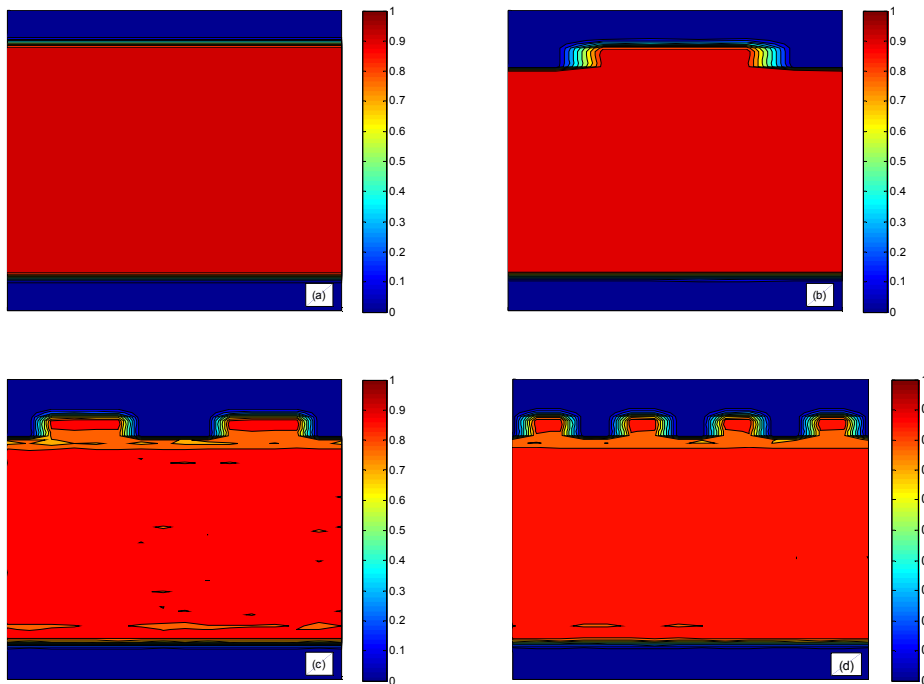
Η λεπτομερής μελέτη των κατανομών της πίεσης στις εσοχές και τις προεξοχές αποκαλύπτει πιο ξεκάθαρα τη συμπεριφορά που συζητήθηκε προηγουμένως (Σχ. 4.11). Η πίεση στο κεντρικό τμήμα του αγωγού είναι σχεδόν ίδια για την εσοχή και την προεξοχή, και εμφανίζει διακυμάνσεις όμοιες με αυτές που παρατηρήθηκαν στην

κατανομή της πυκνότητας κοντά στα στερεά τοιχώματα. Παρατηρείται ότι η πίεση μειώνεται καθώς αυξάνεται το μήκος της προεξοχής, λόγω της μείωσης των ταχυτήτων που συζητήθηκαν εκτενώς στο προηγούμενο κεφάλαιο.

Ανακεφαλαιώνοντας, είναι εμφανές ότι η πίεση μέσα στις εσοχές εξαρτάται από το μήκος της προεξοχής l_{pi} . Περιοχές υψηλής πίεσης παρατηρούνται μέσα στις εσοχές και η τοπολογία τους καθορίζεται από το μήκος της προεξοχής. Οι περιοχές υψηλής πίεσης είναι ενδεικτικές της παγίδευσης των σωματιδίων ρευστού γεγονός που αποκαλύπτεται από την ανάλυση της τροχιάς των σωματιδίων, το μέσο χρόνο παραμονής μέσα στις εσοχές και τη μέση τιμή της ταχύτητας μέσα στις εσοχές που συζητήθηκαν στο προηγούμενο κεφάλαιο.

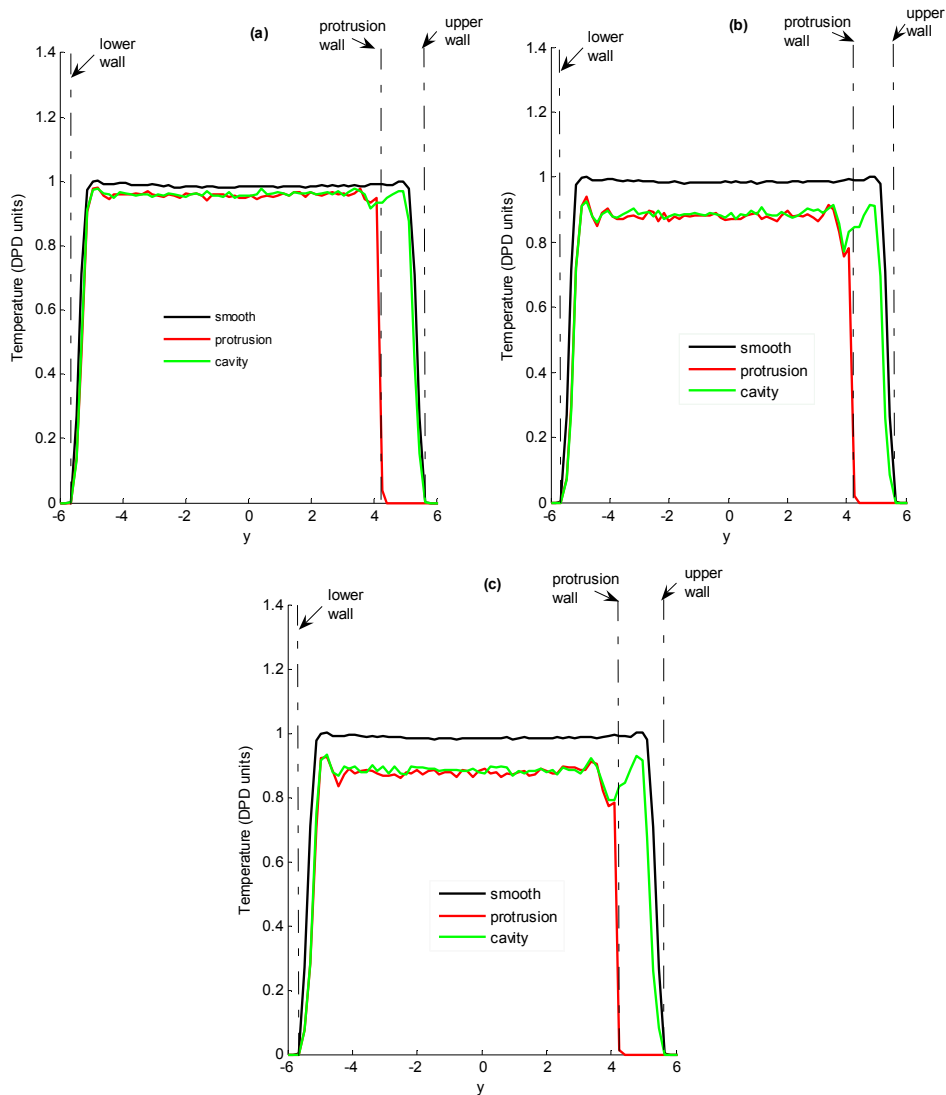
Κατανομή της θερμοκρασίας

Στο Σχ. 4.12 παρουσιάζονται οι ισόθερμες καμπύλες και στο Σχ. 4.13 οι τοπικές κατανομές της θερμοκρασίας. Μέσα στις εσοχές παρατηρείται η εμφάνιση περιοχών υψηλής θερμοκρασίας που εναλλάσσονται με περιοχές χαμηλότερης θερμοκρασίας ιδιαίτερα για τις περιπτώσεις l_{r2} και l_{r3} . Η συμπεριφορά αυτή είναι αναμενόμενη καθώς όπως είδαμε στο κεφ 4.2 υπάρχουν περιοχές υψηλής πυκνότητας οι οποίες οδηγούν σε μικρότερες ενδοσωματιδιακές αποστάσεις οι οποίες με τη σειρά τους οδηγούν σε υψηλές δυνάμεις μεταξύ των σωματιδίων και άρα αύξηση των θερμικών ταχυτήτων.



Σχήμα 4.12. Ισόθερμες καμπύλες για α) $l_{r0} = 0l_{tot}$, β) $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, γ) $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και δ) $l_{r3} = 0.125l_{tot}$.

Για την περίπτωση l_{r1} (Σχ. 4.13α) η θερμοκρασία στο κεντρικό τμήμα του αγωγού (για $-4.5 r_c < y < 3.5 r_c$) τόσο στην προεξοχή όσο και στην εσοχή είναι περίπου ίδιες στα πλαίσια του στατιστικού σφάλματος. Στον κάτω τοίχο, εμφανίζεται μια κορυφή χαμηλής τιμής, η οποία πιθανόν να οφείλεται στην υψηλή συγκέντρωση των σωματιδίων όπως παρατηρήθηκε από την μελέτη της κατανομής της πυκνότητας. Η ίδια κορυφή εντοπίζεται κοντά στον τοίχο της προεξοχής και της εσοχής, για τον ίδιο λόγο. Ωστόσο είναι πολύ σημαντικό να σημειωθεί ότι η θερμοκρασία στους αγωγούς με προεξοχές, όπως έχει ήδη αναφερθεί στην μελέτη ισόθερμων καμπύλων, είναι χαμηλότερη από αυτή του λείου αγωγού γεγονός που αποκαλύπτει ότι η παρουσία των προεξοχών πιθανόν να οδηγεί στην ψύξη του ρευστού.



Σχήμα 4.13. Διαγράμματα της θερμοκρασίας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για α) $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, β) $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και γ) $l_{r3} = 0.125l_{tot}$ (το y είναι σε μονάδες r_c). Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα

Για τις περιπτώσεις l_{r2}, l_{r3} (Σχ. 4.13β, 4.13γ), οι κορυφές της θερμοκρασίας μέσα στις εσοχές είναι πιο εύκολο να προσδιοριστούν σε σχέση με την περίπτωση l_{r1} . Παρατηρούνται και πάλι τρεις κορυφές, η μία κοντά στον κάτω τοίχο, η δεύτερη κοντά στον τοίχο της εσοχής και η τρίτη κοντά στο όριο της προεξοχής, σε συμφωνία με την κατανομή της πυκνότητας. Και στις δύο περιπτώσεις, η θερμοκρασία μειώνεται στο

$y \approx 4.2 r_c$ και αυτό μπορεί να συνδεθεί με την χαμηλότερη συγκέντρωση των σωματιδίων που συζητήθηκε στην κατανομή της πυκνότητας. Η τιμή της θερμοκρασίας στο κεντρικό τμήμα του αγωγού μειώνεται σημαντικά, αποκαλύπτοντας ακόμη περισσότερο την ψύξη του ρευστού υπό την επίδραση των ορθογώνιων προεξοχών.

Ανακεφαλαιώνοντας, η κατανομή της θερμοκρασίας εξαρτάται από το μήκος της προεξοχής. Για τις περιπτώσεις l_{r2}, l_{r3} οι θερμοκρασίες στις προεξοχές και μέσα στις εσοχές είναι χαμηλότερες τόσο σε σύγκριση με την περίπτωση l_{r1} , όσο και σε σύγκριση με το λείο αγωγό. Η συνολική μείωση της θερμοκρασίας, ιδιαίτερα για τις περιπτώσεις l_{r2} και l_{r3} μπορεί να αποδοθεί στο γεγονός ότι οι ορθογωνικές προεξοχές λειτουργούν ως συντελεστής τριβής που οδηγεί στην μείωση των θερμικών ταχυτήτων (και επομένως και της θερμοκρασίας) καθώς το μήκος αυτών των στοιχείων μειώνεται (και αυξάνεται ο αριθμός τους).

Συμπεράσματα ενότητας

Σε αυτή την ενότητα παρουσιάστηκαν προσομοιώσεις με τη χρήση της μεθόδου προσομοίωσης DPD σε αγωγό με περιοδικές ορθογωνικές προεξοχές σταθερού ύψους και μεταβλητού μήκους. Ο αγωγός κατασκευάστηκε με την τοποθέτηση ορθογωνικών προεξοχών ίσου μήκους προεξοχών και εσοχών. Οι υπολογισμοί της τροχιάς των σωματιδίων, του μέσου χρόνου παραμονής μέσα στις εσοχές, όπως επίσης και της πυκνότητας, της ταχύτητας και της πίεσης αποδεικνύουν την παγίδευση των σωματιδίων μέσα στις εσοχές για ένα μεγάλο χρονικό διάστημα.

Η κατανομή της πυκνότητας εμφανίζεται ανομοιογενές κοντά στο στερεό τοίχωμα και ειδικότερα κοντά στο τοίχωμα με αυλακώσεις. Οι τοπικές κατανομές της

πυκνότητας αποδεικνύουν ότι τα σωματίδια ρευστού τείνουν να παγιδευτούν μέσα στις εσοχές. Όσο οι εσοχές ‘στενεύουν’, τόσο ο μέσος χρόνος παραμονής αυξάνεται και η ταχύτητα μειώνεται, μειώνοντας τη συνολική ταχύτητα μέσα στο αγωγό. Μέσα στις εσοχές εντοπίζονται πολύ μικρές ταχύτητες ροής. Παρατηρείται ακόμη, μετατόπιση του διαγράμματος προς το λείο τοίχο.

Οι καμπύλες ίσης πίεσης αποκαλύπτουν ανομοιογενή συμπεριφορά κοντά στον τοίχο παρόμοια με αυτή που εντοπίστηκε στην κατανομή της πυκνότητας. Η πίεση μειώνεται καθώς κινούμαστε από το μέσον του πλάτους του αγωγού προς τα στερεά τοιχώματα. Ωστόσο, πολύ κοντά στους τοίχους εντοπίζονται ζώνες υψηλής πίεσης σε εναλλαγή με ζώνες χαμηλής πίεσης. Στην πραγματικότητα πολύ κοντά στον λείο τοίχο εμφανίζονται δύο κορυφές υψηλής πίεσης, ενώ μέσα στις εσοχές εμφανίζεται μια κορυφή και η δεύτερη σε μεγαλύτερη απόσταση. Αυτή η συμπεριφορά αποδίδεται στο γεγονός ότι τα σωματίδια παγιδεύονται μέσα στις εσοχές όπως άλλωστε διαπιστώνεται τόσο από την τροχιά των σωματιδίων στο x-y επίπεδο, όσο και από την εκτίμηση του χρόνου παραμονής μέσα στις εσοχές.

Οι κατανομές της θερμοκρασίας έχουν όμοιο σχήμα και γενικότερα μικρότερες τιμές σε σύγκριση με το λείο αγωγό, γεγονός που αποδεικνύει τη λειτουργία ψύξης υπό την εμφάνιση των ορθογωνικών προεξοχών. Οι μέγιστες τιμές της θερμοκρασίας εξαρτώνται από το μήκος της προεξοχής και το μέγεθος τους μειώνεται καθώς μειώνεται και το μήκος τους. Η μείωση της θερμοκρασίας είναι αποτέλεσμα της λειτουργίας των ορθογωνικών προεξοχών ως συντελεστή τριβής που μειώνει τις ταχύτητες των σωματιδίων και κατά συνέπεια και τη θερμοκρασία του ρευστού. Για

όλες τις περιπτώσεις αγωγών που μελετήθηκαν εδώ, η θερμοκρασία στο κεντρικό τμήμα του αγωγού είναι επίπεδη.

Ακόμη, έχει γίνει σύγκριση μεταξύ των αποτελεσμάτων αυτής της εργασίας και των αποτελεσμάτων με προσομοίωση με μεθόδους Μοριακής Δυναμικής. Οι κατανομές της πυκνότητας είναι παρόμοιες για τις δύο μεθόδους, με κορυφές πυκνότητας να εντοπίζονται κοντά στον κάτω τοίχο, τον επάνω τοίχο και τον τοίχο με την προεξοχή.

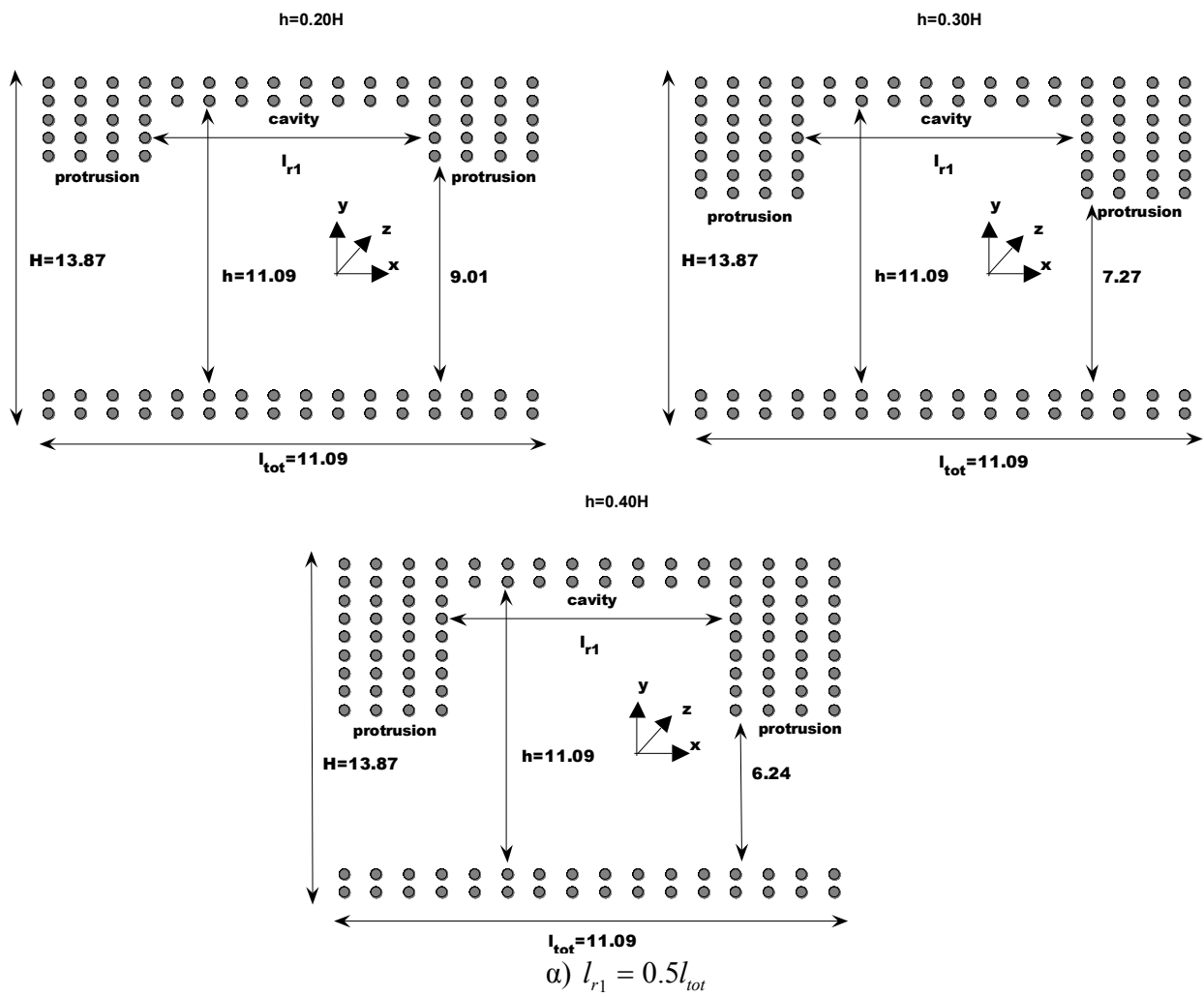
Ανακεφαλαιώνοντας, είναι αναμφισβήτητη η επίδραση της εμφάνισης προεξοχών στην πυκνότητα, την ταχύτητα, την πίεση και τη θερμοκρασία και γι' αυτό το λόγο κρίνεται σκόπιμη η περαιτέρω διερεύνηση με διαφορετικά ύψη της προεξοχής. Η θεματολογία αυτή αναπτύσσεται διεξοδικά στην επόμενη ενότητα του παρόντος κεφαλαίου.

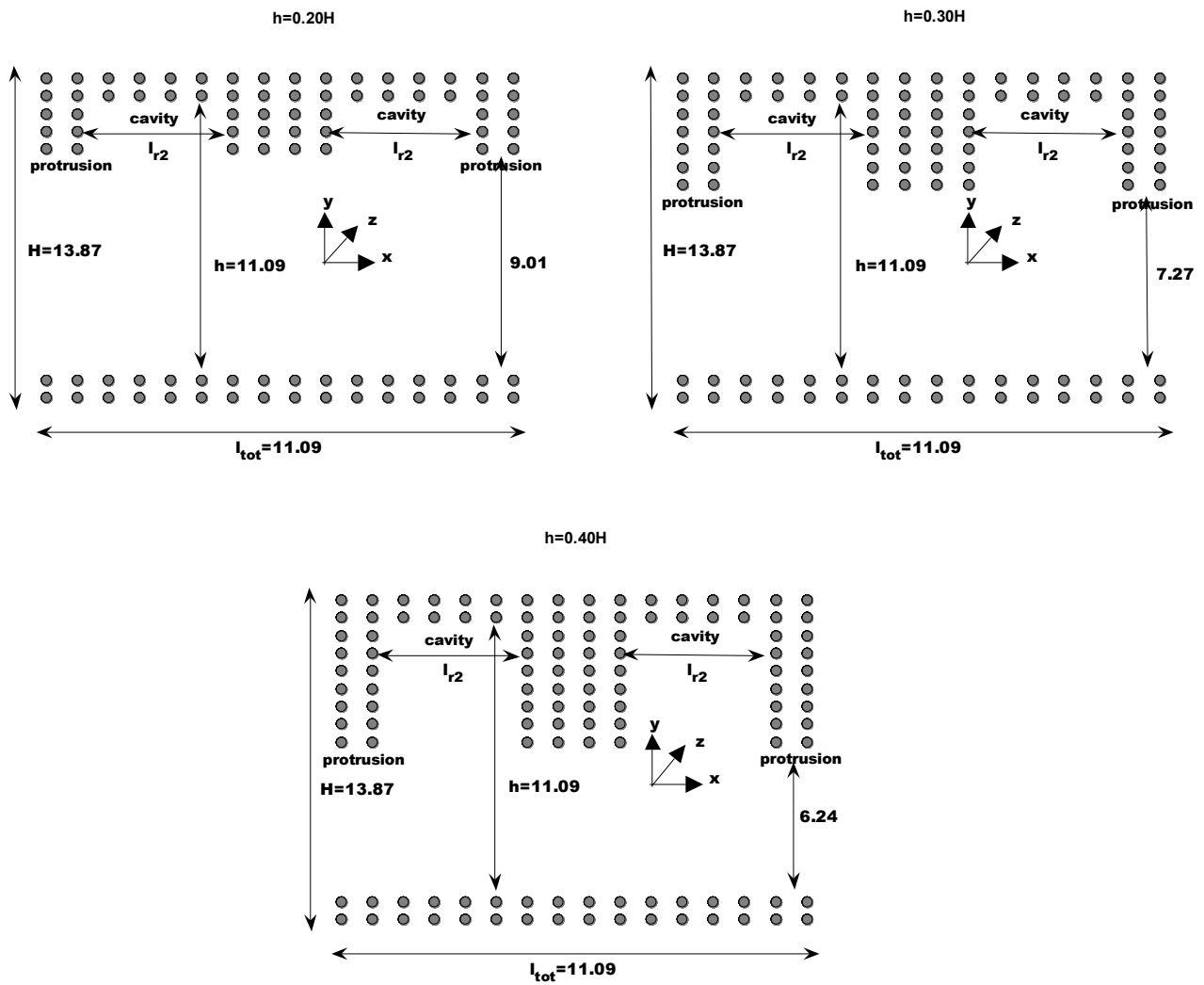
4.2 Παραμετρική μελέτη των αδιάστατων γεωμετρικών παραμέτρων των πλακών στη ροή

Στην προηγούμενη ενότητα του παρόντος κεφαλαίου μελετήθηκε η ροή σε νανοαγωγούς με περιοδικές ορθογωνικές προεξοχές ύψους $h = 0.10H$ (10% του πλάτους του αγωγού) και μήκους $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, $l_{r2} = 0.25l_{tot}$, $l_{r3} = 0.125l_{tot}$. Στο σημείο αυτό κρίνεται απαραίτητη η μελέτη της επίδρασης του ύψους της προεξοχής για τα τρία αυτά μήκη, ώστε να είναι δυνατή η σφαιρική διερεύνηση της επίδρασης της γεωμετρίας των προεξοχών στην διαμόρφωση της ροής.

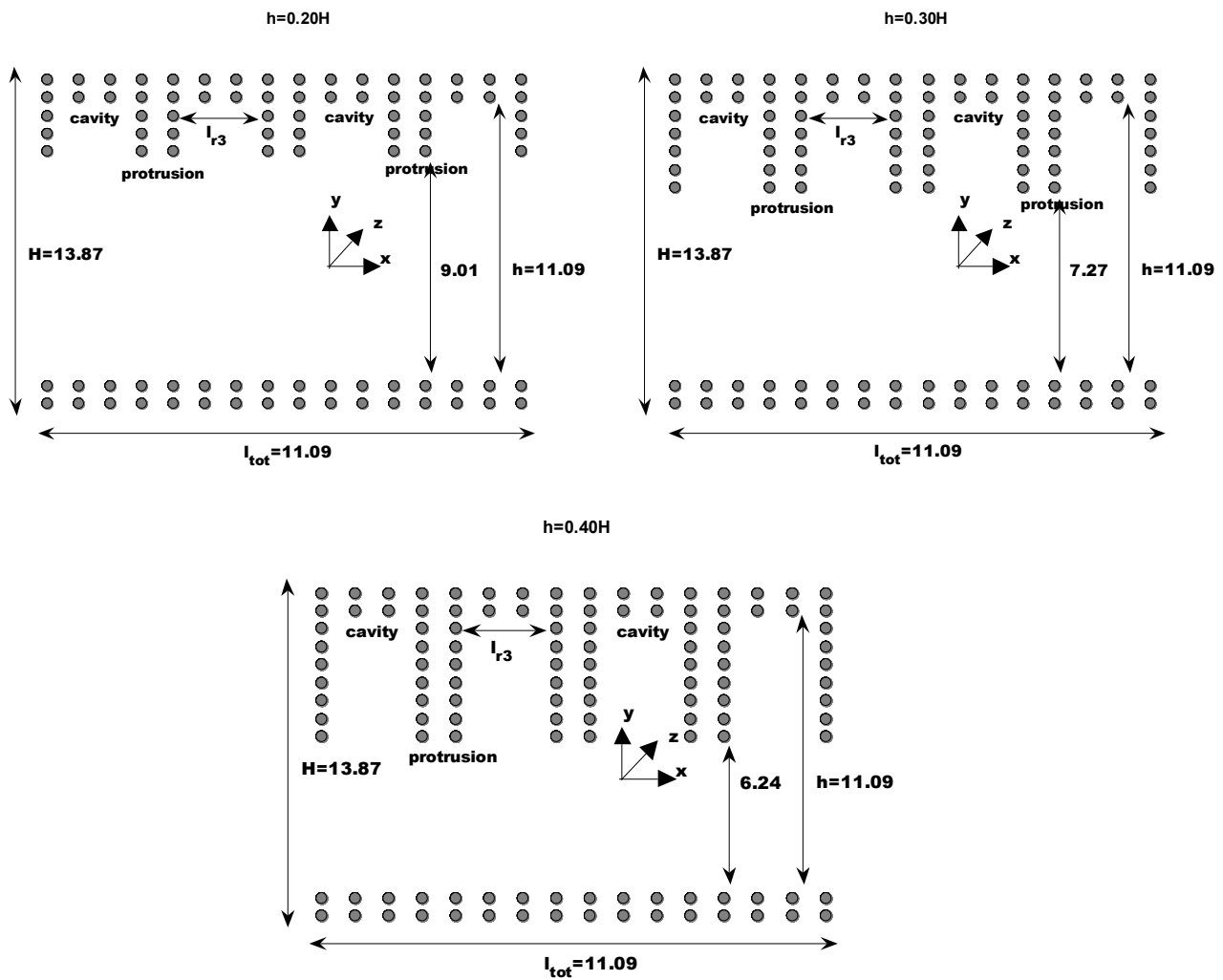
4.2.1. Μοντέλο προσομοίωσης

Μελετήθηκε η ροή μεταξύ δύο ακίνητων οριζόντιων πλακών που βρίσκονται σε απόσταση h μεταξύ τους. Ο κάτω τοίχος του αγωγού είναι λείος και επίπεδος και ο άνω χαρακτηρίζεται από την ύπαρξη περιοδικών προεξοχών ορθογωνικής διατομής που σχηματίζονται με την προσθήκη επιπλέον σωματιδίων τοίχου έναντι των σωματιδίων του ρευστού. Θεωρούνται τέσσερα διαφορετικά ύψη προεξοχής: $h = 0.10H$, $h = 0.20H$, $h = 0.30H$ και $h = 0.40H$ (όπου $H = 13.87r_c$ είναι το συνολικό πλάτος του αγωγού). Οι διαστάσεις όλων των υπολογιστικών φατνίων κατά τις τρεις κατευθύνσεις είναι $L_x \times L_y \times L_z = 11.09r_c \times 13.87r_c \times 11.09r_c$ (σε μονάδες DPD).





$$\beta) l_{r2} = 0.25l_{tot}$$



$$\gamma) l_{r3} = 0.125l_{tot}$$

Σχήμα 4.14. Σύστημα προσομοίωσης για όλα τα ύψη προεξοχής και για μήκη α) $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, β) $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και γ) $l_{r3} = 0.125l_{tot}$ (η περίπτωση $h = 0.10H$ περιγράφεται στο Σχ.4.1)

Ο αριθμός των σωματιδίων του τοίχου και του ρευστού ποικίλει ανά περίπτωση και φαίνεται αναλυτικά στον Πίνακα 4.1. Τα σωματίδια του τοίχου τοποθετούνται σε τετραγωνικό πλέγμα (sc) και οι ταχύτητες τους ορίζονται μηδενικές.

Περιοδικές συνθήκες θεωρούνται κατά τις x- και z-κατευθύνσεις. Στη διεπιφάνεια τοίχου-ρευστού εφαρμόζονται οι bounce-back συνθήκες για την επιστροφή των σωματιδίων στο εσωτερικό του αγωγού.

Η θερμοκρασία του ρευστού είναι σταθερή και ίση με $k_B T = 1.0$. Η εξωτερική δύναμη είναι ίση με 0.02DPD units και ασκείται σε κάθε σωματίδιο ρευστού κατά τη x-κατεύθυνση (κατεύθυνση ροής). Το χρονικό βήμα της προσομοίωσης είναι

$$\Delta t = 0.01 \sqrt{\frac{m r_c^2}{k_B T}} \text{ (αντιστοιχεί σε πραγματικές διαστάσεις σε } 0.015 \text{ psec)}. \text{ Η διάρκεια της}$$

προσομοίωσης είναι 5×10^5 χρονικά βήματα και τα μακροσκοπικά μεγέθη (πυκνότητα, ταχύτητα, πίεση και θερμοκρασία) υπολογίζονται ως μέσες τιμές στα τελευταία 2.5×10^5 χρονικά βήματα της προσομοίωσης.

Μήκος προεξοχής Υψος προεξοχής	$l r_1 = 0.5 l_{tot}$	$l r_2 = 0.25 l_{tot}$	$l r_3 = 0.125 l_{tot}$
$h = 0.10H$	1260 3584	1260 3584	1260 3584
$h = 0.20H$	1516 3328	1516 3328	1516 3328
$h = 0.30H$	1772 3072	1772 3072	1772 3072
$h = 0.40H$	2028 2816	2028 2816	2028 2816

Πίνακας 4.1. Αριθμός των σωματιδίων του συστήματος (με μπλέ αναγράφονται τα σωματίδια του τοίχου και με κόκκινο τα σωματίδια του ρευστού)

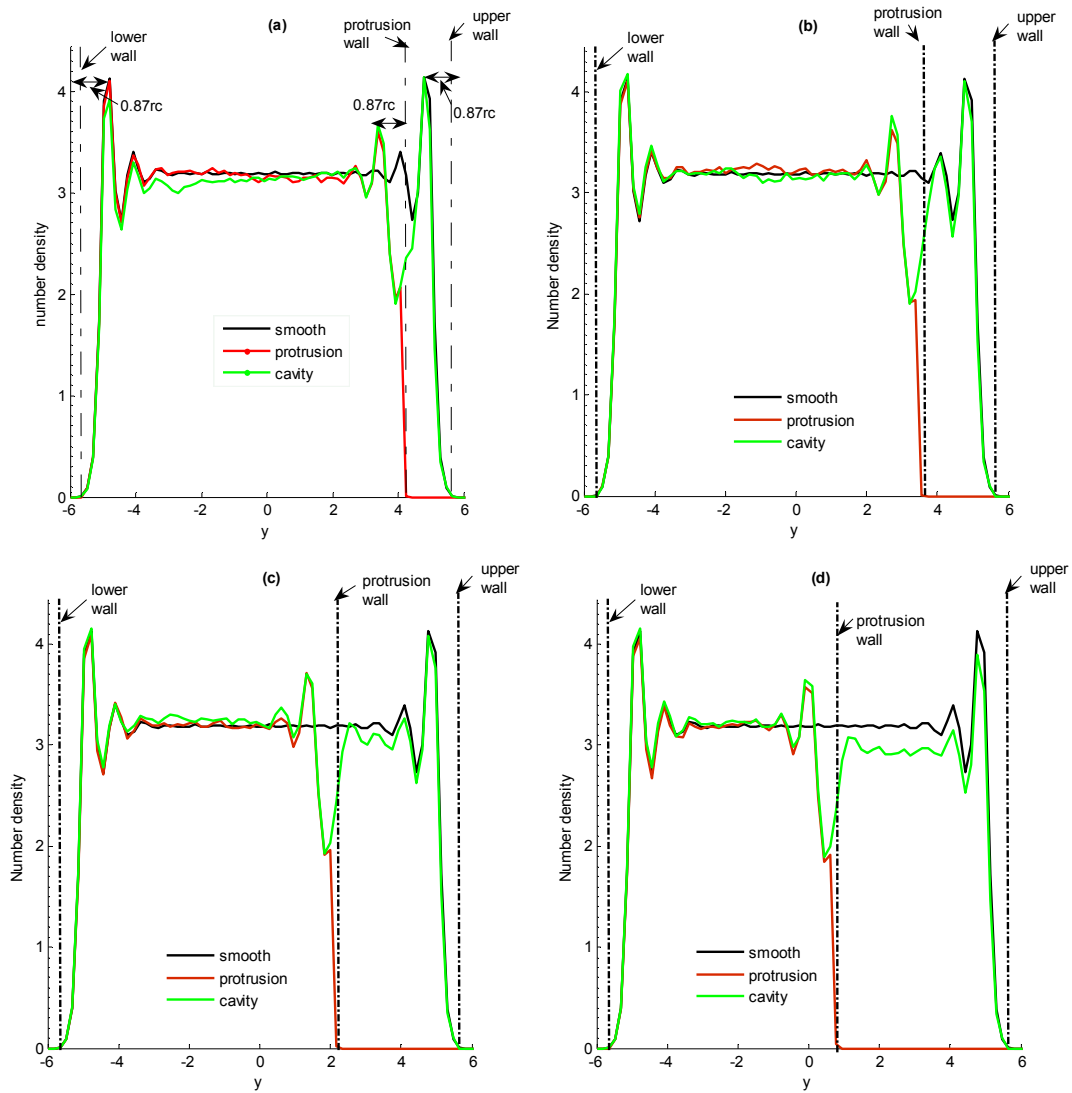
4.2.2. Μετεπεξεργασία των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης

Η εξαγωγή των μέσων όρων της πυκνότητας, της ταχύτητας, της πίεσης και της θερμοκρασίας γίνεται με εφαρμογή των εξισώσεων της παραγράφου 3.1.2. Το υπολογιστικό φαντίο διαιρείται σε υπολογιστικά κελιά με γνώμονα τον τρόπο κατασκευής του, ώστε να επιτευχθεί η μέγιστη δυνατή ακρίβεια σε συνδυασμό με την εξοικονόμηση χρόνου στην προσομοίωση. Συγκεκριμένα, χρησιμοποιήθηκαν 8x80x80 υπολογιστικά κελιά κατά τις x, y, z- κατευθύνσεις αντίστοιχα για μήκος προεξοχής l_{r1} , 16x80x80 για μήκος προεξοχής l_{r2} και 16x80x80 για μήκος προεξοχής l_{r3} (όμοια με την εφαρμογή της προηγούμενης παραγράφου).

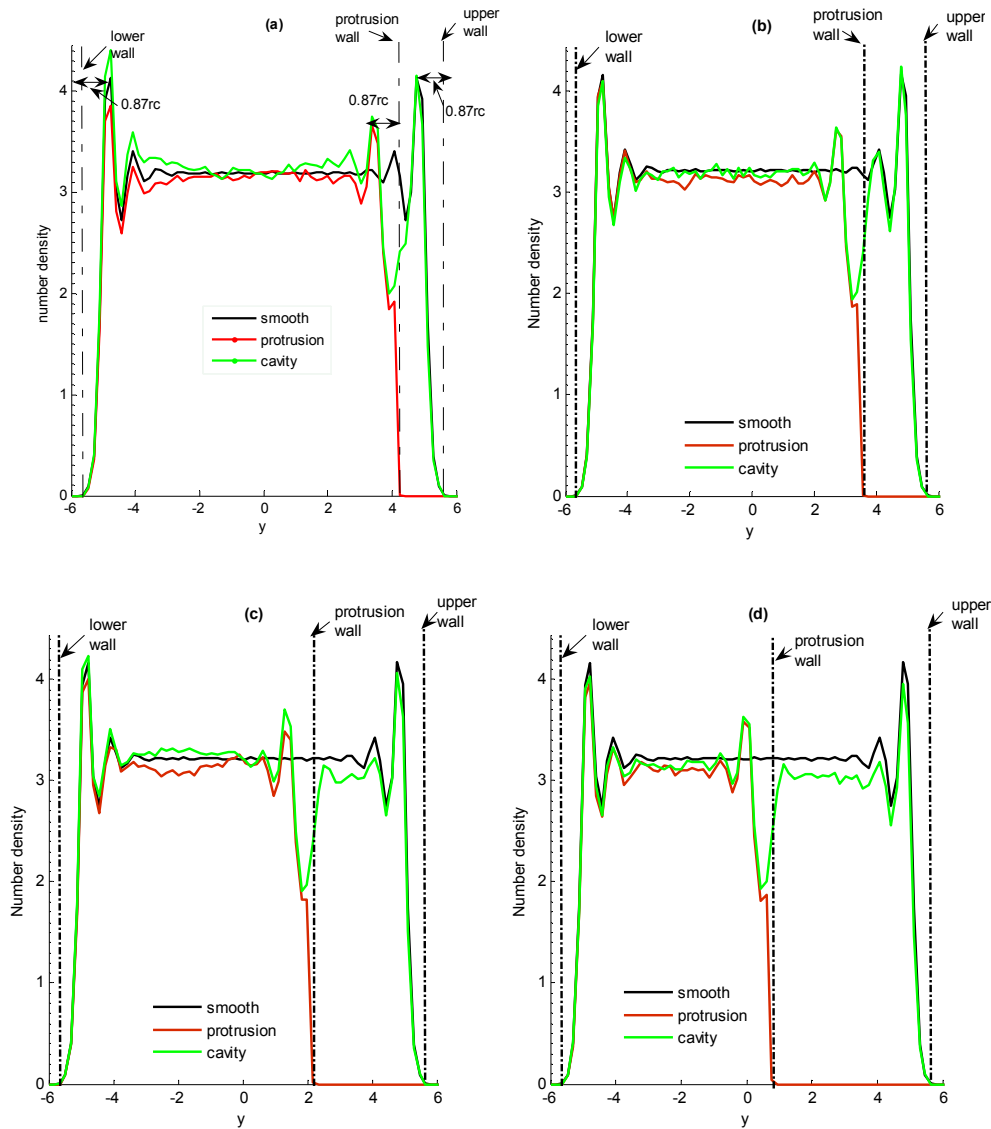
4.2.3. Αποτελέσματα

Κατανομή της πυκνότητας

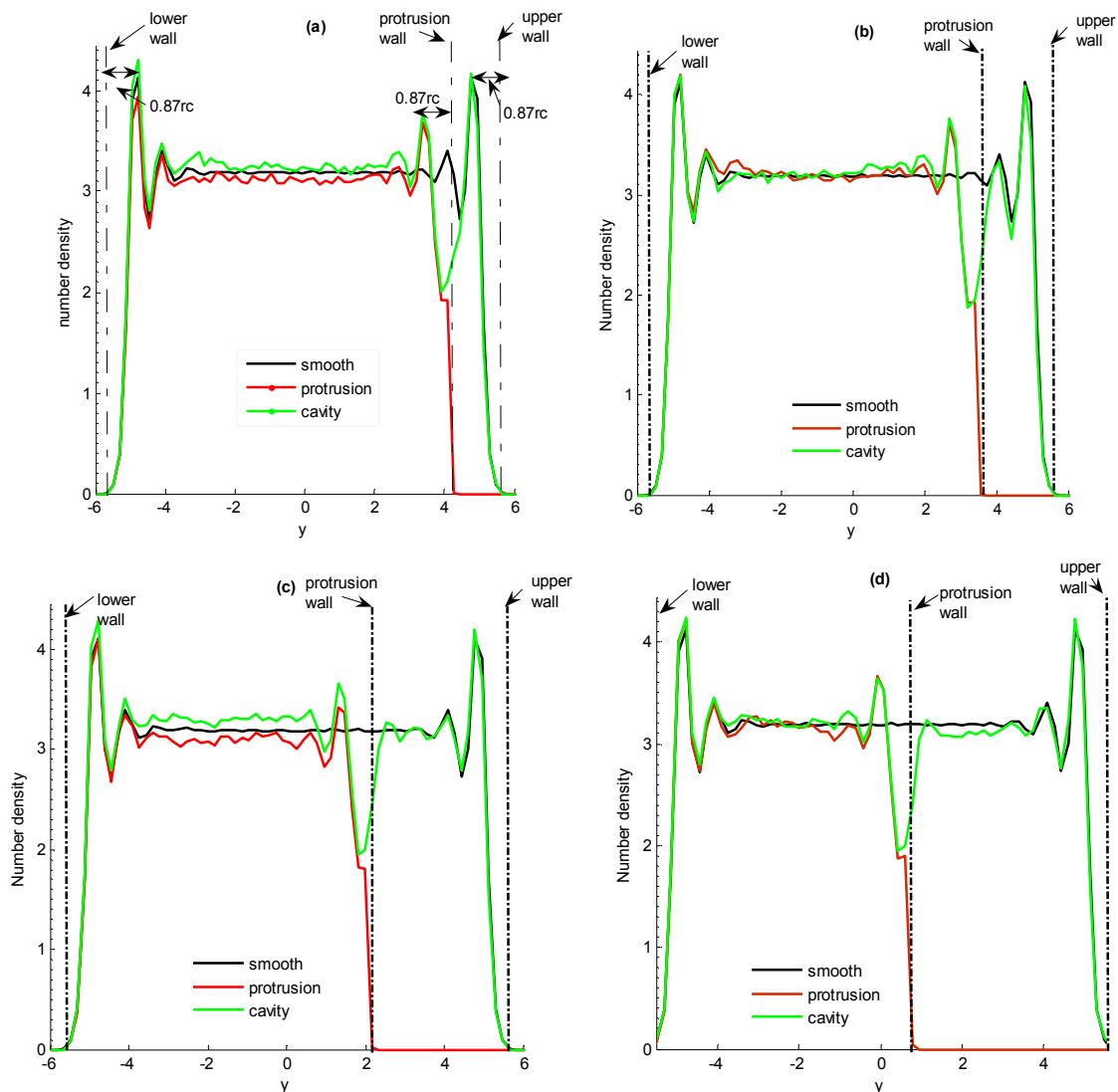
Στα Σχ. 4.15, 4.16, 4.17 παρουσιάζονται οι τοπικές κατανομές της πυκνότητας σε διατομές του αγωγού που βρίσκονται στις εσοχές και τις προεξοχές του επάνω τοίχου. Γενικότερα, για όλες τις περιπτώσεις μήκους και ύψους προεξοχής που μελετώνται εδώ η συμπεριφορά του ρευστού σε περιοχές γειτονικές των στερεών τοιχωμάτων παρουσιάζει ομοιότητες. Πιο συγκεκριμένα, παρατηρείται η εμφάνιση κορυφής στην κατανομή της πυκνότητας σε απόσταση $0.87r_c$ από το κάτω στερεό τοίχωμα, για όλους τους αγωγούς. Στον πάνω τραχύ τοίχο, παρατηρείται μια κορυφή στην κατανομή σε απόσταση $0.87r_c$ από το όριο της εσοχής και μια ακόμη στην ίδια απόσταση από το όριο της προεξοχής. Φαίνεται ότι η συμπεριφορά αυτή αποδίδεται στην παρουσία των σωματιδίων του τοίχου και την αλληλεπίδραση τους με τα σωματίδια του ρευστού. Μια μικρή υπερύψωση της κατανομής της προεξοχής παρατηρείται πολύ κοντά στο στερεό τοίχωμα της προεξοχής στο σημείο όπου η κατανομή της εσοχής παρουσιάζει τοπικό ελάχιστο. Σε μεγάλες αποστάσεις από τον τοίχο της προεξοχής η πυκνότητα του ρευστού πλησιάζει τη μέση τιμή της. Τέλος, η συμπεριφορά της πυκνότητας κοντά στο όριο του κάτω τοίχου δεν επηρεάζεται από τις προεξοχές του επάνω τοίχου ακόμη και για σχετικά μεγάλο ύψος προεξοχής (της τάξεως του 40%).



Σχήμα 4.15. Διαγράμματα της πυκνότητας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για μήκος $l_{r1} = 0.5l_{tot}$ και ύψος : α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$ (το y είναι σε μονάδες r_c) . Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα



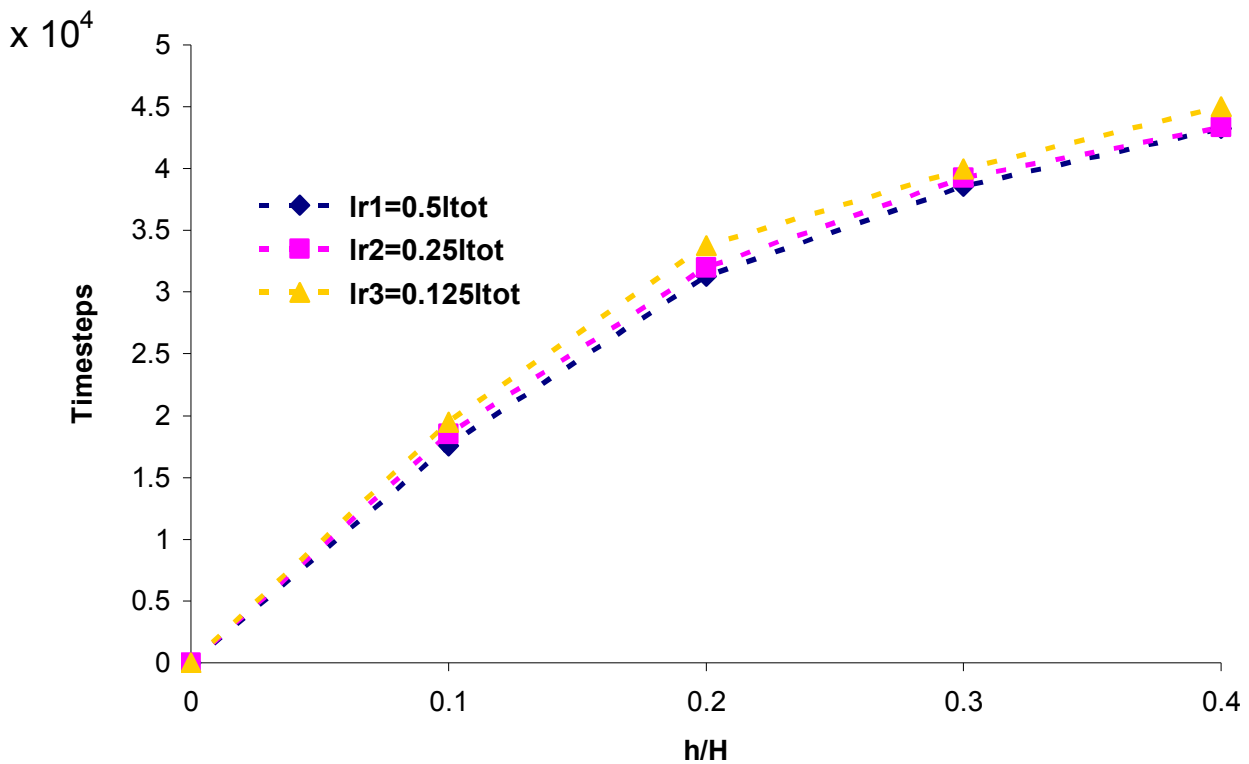
Σχήμα 4.16. Διαγράμματα της πυκνότητας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για μήκος $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και ύψος : α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$ (το y είναι σε μονάδες r_c) . Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα



Σχήμα 4.17. Διαγράμματα της πυκνότητας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για μήκος $l_{r3} = 0.125l_{tot}$ και ύψος : α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$ (το y είναι σε μονάδες r_c) . Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα

Η κατανομή των σωματιδίων μέσα στις εσοχές αποτελεί πιθανή ένδειξη παγίδευσης των σωματιδίων στις περιοχές αυτές. Η υπόθεση αυτή επαληθεύεται με τον υπολογισμό του μέσου χρόνου παραμονής των σωματιδίων ρευστού ως συνάρτηση του μήκους και του ύψους της προεξοχής (Σχ. 4.18). Ο τρόπος υπολογισμού του μέσου

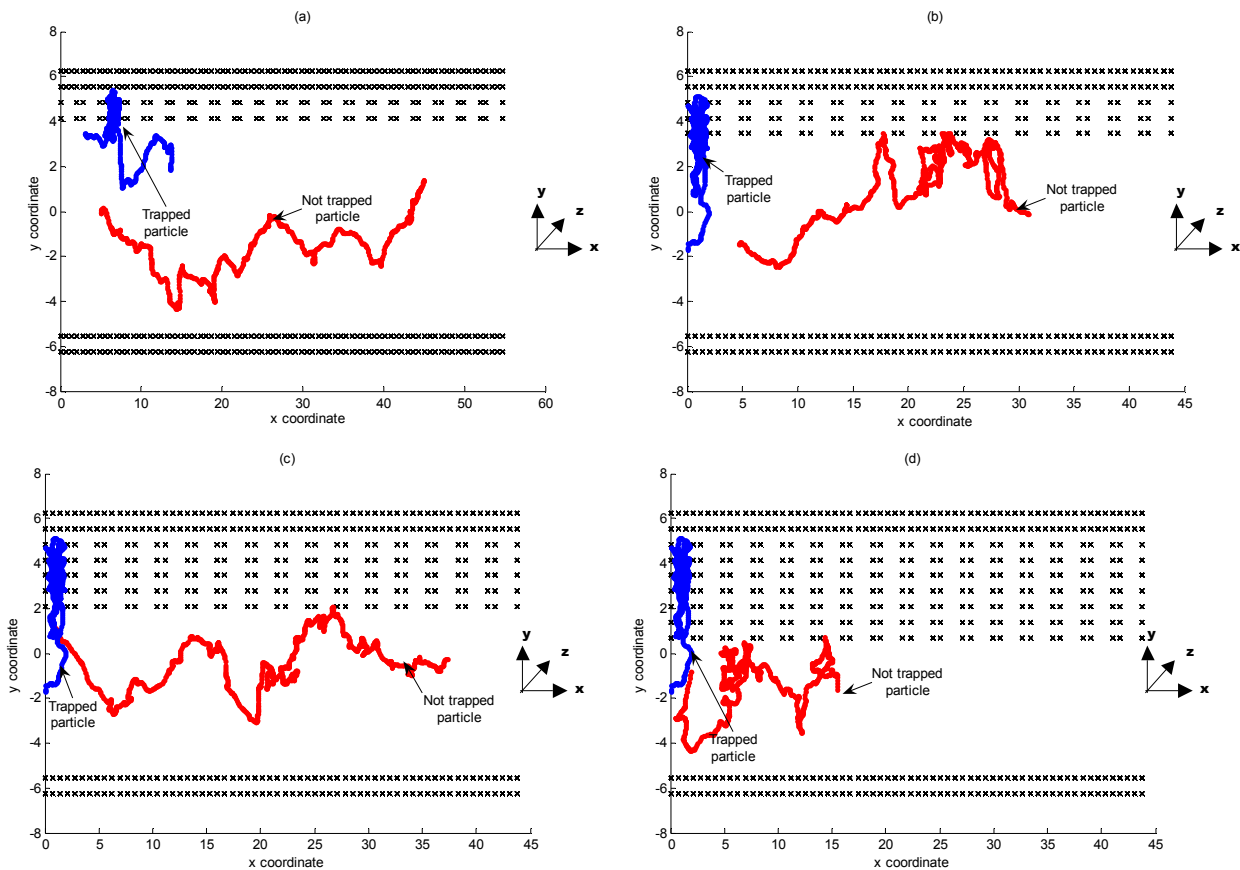
χρόνου παραμονής διευκρινίστηκε στην προηγούμενη ενότητα. Παρατηρείται ότι ο μέσος χρόνος παραμονής εξαρτάται κυρίως από τις μεταβολές του ύψους και λιγότερο από τις μεταβολές του μήκους. Φυσικά, όπως έχει ήδη αναφερθεί και στο προηγούμενο κεφάλαιο μείωση του μήκους της προεξοχής, για το ίδιο μήκος του υπολογιστικού φατνίου I_{tot} , οδηγεί σε αύξηση του μέσου χρόνου παραμονής μέσα στις εσοχές. Αισθητή βέβαια είναι η μεταβολή του συναρτήσεως του ύψους της προεξοχής. Ειδικότερα, αύξηση του ύψους της προεξοχής από 10% σε 40% οδηγεί σε τριπλάσια περίπου αύξηση του χρόνου παραμονής. Η διαπίστωση αυτή επιβεβαιώνει τις αρχικές μας υποθέσεις για παγίδευση των σωματιδίων μέσα στις εσοχές. Αξίζει ακόμη να τονισθεί ότι ο μέσος χρόνος παραμονής των σωματιδίων μέσα στις εσοχές είναι αισθητά μεγαλύτερος από το χρόνο παραμονής στο κεντρικό τμήμα του αγωγού, γεγονός που ενδυναμώνει την αρχική μας υπόθεση ότι τα σωματίδια ‘περνούν’ περισσότερο χρόνο μέσα στις εσοχές συγκριτικά με το υπόλοιπο τμήμα του αγωγού.



Σχήμα 4.18. Υπολογισμός του μέσου χρόνου παραμονής στις εσοχές ως συνάρτηση του μήκους και του ύψους της εσοχής. Τα αποτελέσματα προκύπτουν για χρονική διάρκεια 5×10^4 χρονικά βήματα.

Χαρακτηριστικές τροχιές ενός παγιδευμένου και ενός ελεύθερα κινούμενου σωματιδίου αποδίδουν οπτικά τη συμπεριφορά που περιγράφηκε παραπάνω (Σχ. 4.19). Οι τροχιές παριστάνονται στο x-y επίπεδο για δεδομένο χρονικό διάστημα και για ενδεικτικά μήκη και ύψη προεξοχής. Παρατηρείται ότι το ‘παγιδευμένο’ σωματίδιο παραμένει αρκετά μεγάλο χρονικό διάστημα μέσα στην εσοχή ενώ το ελεύθερα κινούμενο σωματίδιο φαίνεται ότι δεν συναντά ‘εμπόδια’ στην κίνηση του καθ’ όλη τη διάρκεια της παρατήρησης. Στο σημείο αυτό πρέπει να τονισθεί ότι η χρονική διάρκεια της παρατήρησης είναι ενδεικτική και σε καμία περίπτωση δεν ταυτίζεται με τη συνολική διάρκεια της προσομοίωσης. Στην πραγματικότητα, μελετήθηκε η θέση των

σωματιδίων για όλη τη διάρκεια της προσομοίωσης και διαπιστώθηκε ότι δεν υπάρχουν σωματίδια που παραμένουν μέσα στην εσοχή για όλο το χρονικό διάστημα. Αναλυτικότερα, σωματίδια που βρίσκονται αρχικά μέσα στην εσοχή εξέρχονται από αυτή μετά από κάποιο χρονικό διάστημα, που εξαρτάται από τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της προεξοχής (μήκος και ύψος), και αντιθέτως άλλα σωματίδια που αρχικά βρίσκονται έξω από την εσοχή εισέρχονται μέσα στην εσοχή μετά από κάποια χρονικά βήματα, μένουν σε αυτή για κάποιο χρονικό διάστημα και στην συνέχεια εξέρχονται στο υπόλοιπο τμήμα του αγωγού.



Σχήμα 4.19. Χαρακτηριστικές τροχιές ενός παγιδευμένου και ενός ελεύθερα κινούμενου σωματιδίου. Με x αναπαρίσταται οι τοίχοι. α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$.

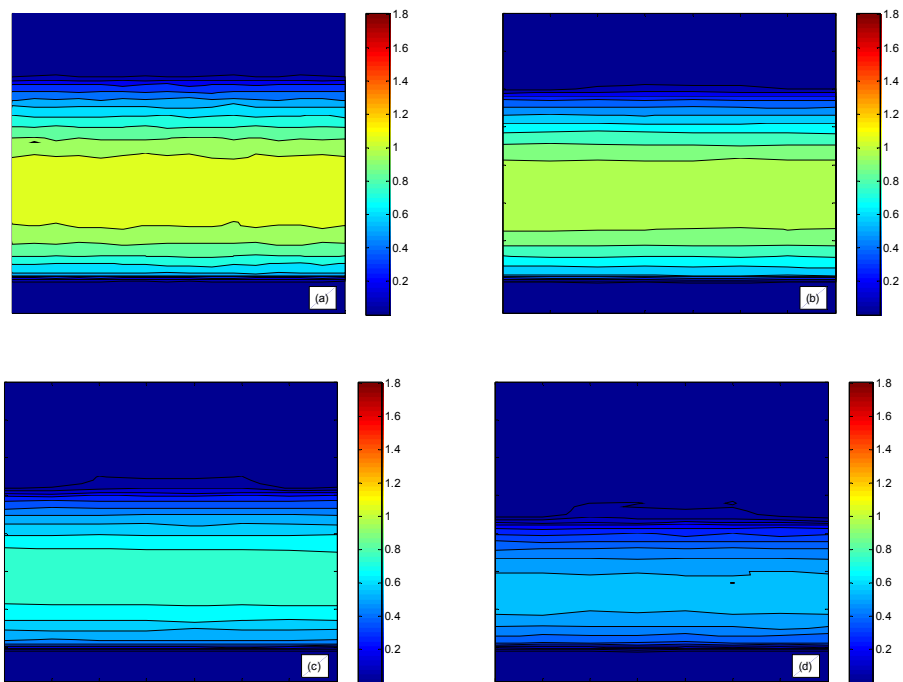
Συμπερασματικά, από την αναλυτική διερεύνηση των κατανομών της πυκνότητας για ύψη προεξοχής $h = 0.10H$, $h = 0.20H$, $h = 0.30H$ και $h = 0.40H$ και μήκη προεξοχής $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, $l_{r2} = 0.25l_{tot}$, $l_{r3} = 0.125l_{tot}$, σε συνδυασμό με το μέσο χρόνο παραμονής υπάρχει ένδειξη ότι τα σωματίδια του ρευστού παγιδεύονται μέσα στις εσοχές. Η παγίδευση αυτή γίνεται τόσο περισσότερο αντιληπτή, όσο μεγαλύτερο είναι το ύψος της προεξοχής.

Η συμπεριφορά αυτή της πυκνότητας αναμένεται ότι θα επηρεάσει τις τιμές της ταχύτητας, της πίεσης και της θερμοκρασίας που θα παρουσιαστούν στις επόμενες παραγράφους.

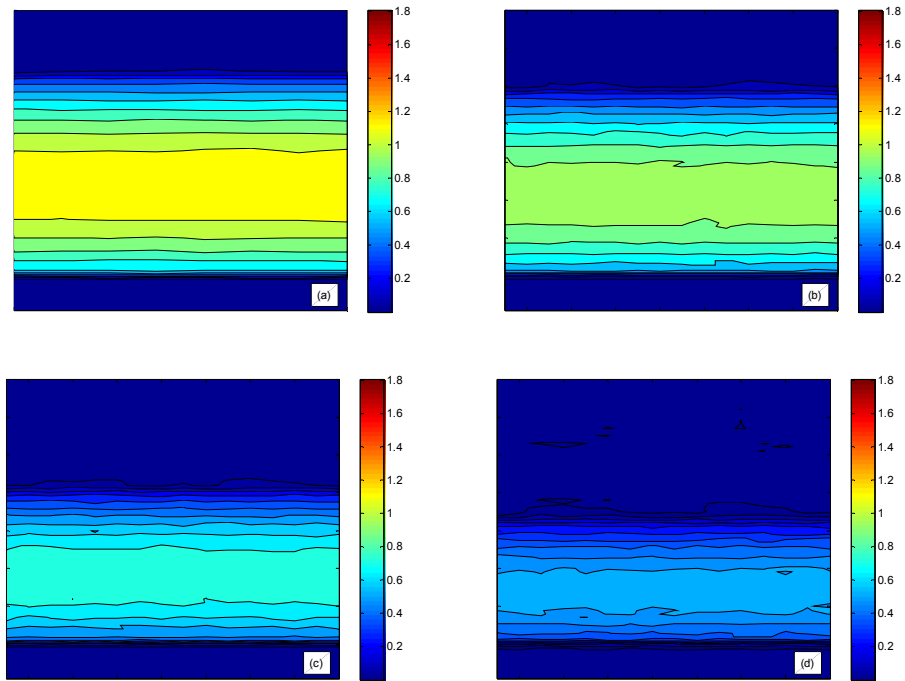
Κατανομή της ταχύτητας

Υπολογίστηκαν οι ισοταχείς και οι κατανομές της ταχύτητας για όλα τα μήκη και ύψη της προεξοχής. Οι ισοταχείς παρουσιάζονται στα Σχ. 4.20, 4.21 και 4.22. Παρατηρείται ότι η συμπεριφορά της ταχύτητας δεν είναι συμμετρική ως προς το κέντρο του αγωγού για όλους τους αγωγούς με προεξοχές. Η αύξηση του ύψους οδηγεί σε μεγαλύτερη μετατόπιση της μέγιστης ταχύτητας προς την κάτω πλάκα του αγωγού, σε σχέση με τον κεντρικό άξονα του αγωγού. Ακόμη, πρέπει να αναφερθεί ότι στο εσωτερικό της εσοχής οι τιμές της ταχύτητας είναι πολύ μικρές. Λαμβάνοντας υπόψη τα συμπεράσματα της προηγούμενης παραγράφου για τη συγκέντρωση των σωματιδίων μέσα στις εσοχές καταλήγουμε στη διαπίστωση ότι τα σωματίδια του ρευστού τείνουν να ακινητοποιηθούν εσωτερικά των εσοχών. Αξίζει τέλος να σημειωθεί ότι η αύξηση του ύψους της προεξοχής φαίνεται να επηρεάζει έστω και λίγο τη συμπεριφορά της

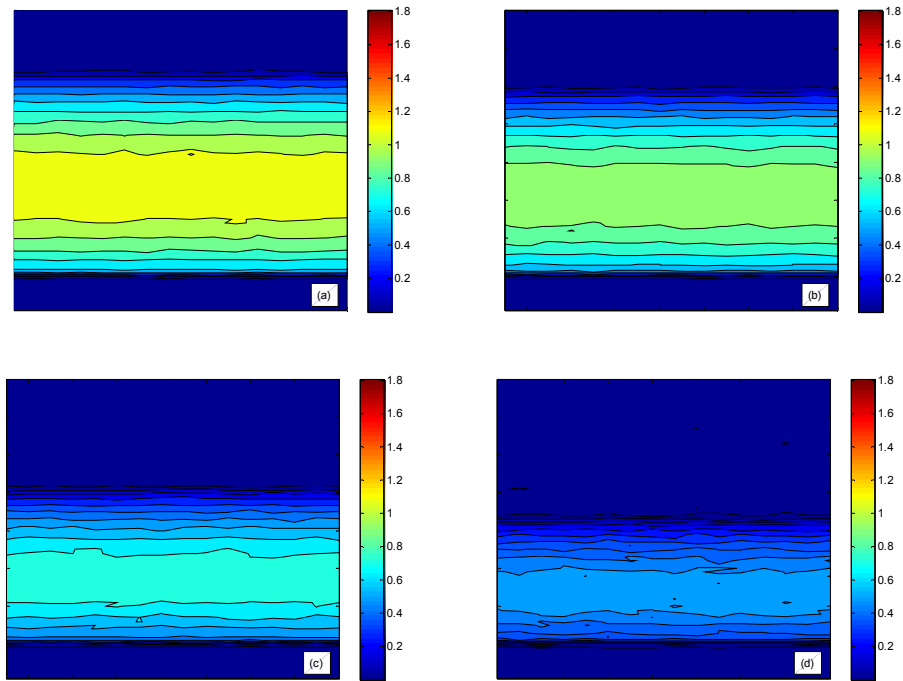
ταχύτητας στην κάτω πλάκα και αυτό κυρίως συμβαίνει στην περίπτωση του ύψους $h = 0.40H$.



Σχήμα 4.20. Ισοταχείς για μήκος προεξοχής $l_{r1} = 0.5l_{tot}$ α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$.

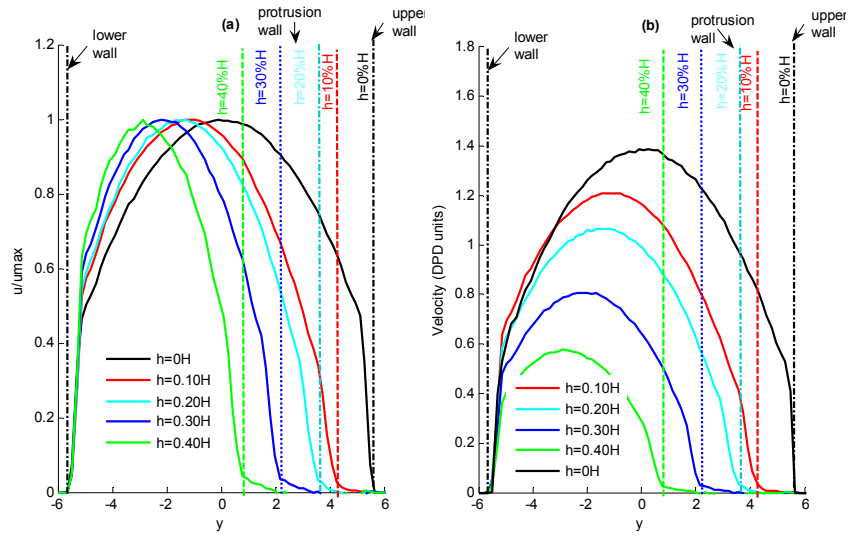


Σχήμα 4.21. Ισοταχείς για μήκος προεξοχής $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$.

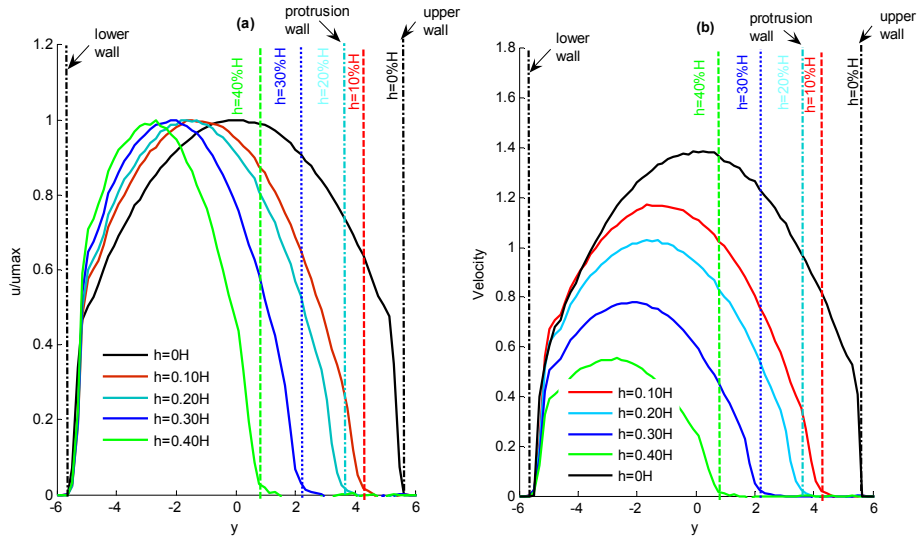


Σχήμα 4.22. Ισοταχείς για μήκος προεξοχής $l_{r3} = 0.125l_{tot}$ α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$.

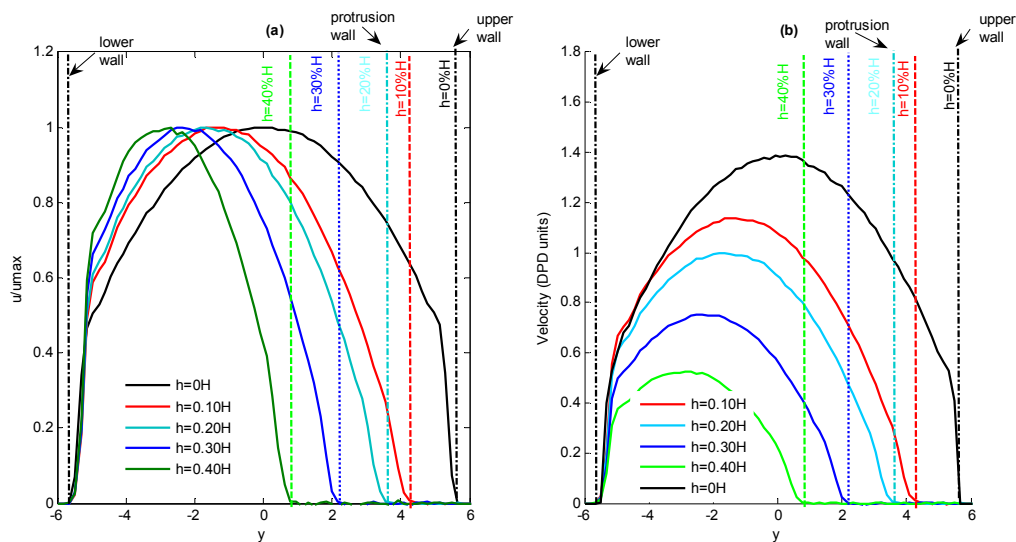
Στα Σχ. 4.23, 4.24 και 4.25 παρουσιάζεται η κατανομή της μέσης ταχύτητας που προκύπτει ως μέση τιμή σε στρώματα παράλληλα στη ροή για όλους τους αγωγούς με περιοδικές προεξοχές. Για μήκος προεξοχής l_{r1} (Σχ. 4.23) διαπιστώνεται ότι οι ταχύτητες μειώνονται συστηματικά (Σχ. 4.23β) καθώς το ύψος της προεξοχής αυξάνεται. Η συστηματική μείωση της ταχύτητας με την αύξηση του ύψους πιθανόν να αποδίδεται στο γεγονός ότι όσο αυξάνεται το ύψος των εσοχών περισσότερα σωματίδια τείνουν να ακινητοποιηθούν εσωτερικά των εσοχών.



Σχήμα 4.23.α) Μέση $\frac{v}{v_{max}}$ ταχύτητα και β) μέση ταχύτητα για $l_{r1} = 0.50l_{tot}$



Σχήμα 4.24.α) Μέση $\frac{v}{v_{max}}$ ταχύτητα και β) μέση ταχύτητα για $l_{r2} = 0.25l_{tot}$.



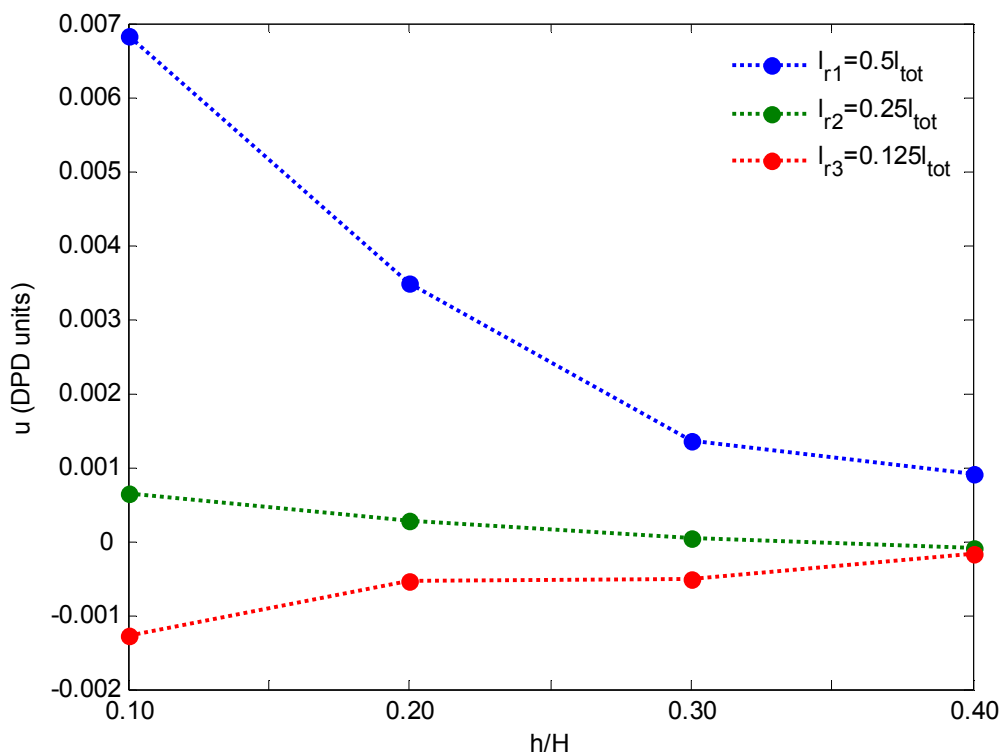
Σχήμα 4.25.α) Μέση $\frac{U}{U_{\max}}$ ταχύτητα και β) μέση ταχύτητα για $l_{r3} = 0.125l_{tot}$

Για μήκος προεξοχής l_{r2} (Σχ. 4.24) παρατηρείται ότι οι ταχύτητες μέσα στις εσοχές είναι μικρότερες σε σχέση με την περίπτωση l_{r1} για όλα τα ύψη προεξοχής. Οι κατανομές της ταχύτητας έχουν παρόμοιο σχήμα και γενικά μέγιστες τιμές της ταχύτητας πολύ κοντά σε αυτές της περίπτωσης l_{r1} . Οι τιμές της ταχύτητας είναι χαμηλότερες από αυτές του λείου αγωγού και μάλιστα μειώνονται όσο αυξάνει το ύψος της προεξοχής.

Για την περίπτωση l_{r3} η ταχύτητα μέσα στις εσοχές μειώνεται ακόμη περισσότερο σε σχέση με τις περιπτώσεις l_{r1} και l_{r2} . Η μέγιστη τιμή της ταχύτητας φαίνεται και πάλι να μειώνεται συστηματικά με την αύξηση του ύψους ενώ είναι πολύ κοντά στις τιμές των περιπτώσεων l_{r1} και l_{r2} .

Για την περαιτέρω διερεύνηση της μείωσης της ταχύτητας μέσα στις εσοχές υπολογίστηκε η μέση ταχύτητα των σωματιδίων μέσα στις εσοχές ως συνάρτηση του

μήκους και του ύψους της προεξοχής (Σχ. 4.26). Η μέση ταχύτητα υπολογίζεται ως μέση τιμή της ταχύτητας για τα υπολογιστικά κελιά που βρίσκονται μέσα στην εσοχή. Και για τα τρία μήκη της προεξοχής διαπιστώνεται ότι αύξηση του ύψους της προεξοχής οδηγεί σε συστηματική μείωση της μέσης ταχύτητας (σε απόλυτες τιμές της ταχύτητας) μέσα στις εσοχές υπό τις ίδιες φυσικά συνθήκες εξωτερικής δύναμης.

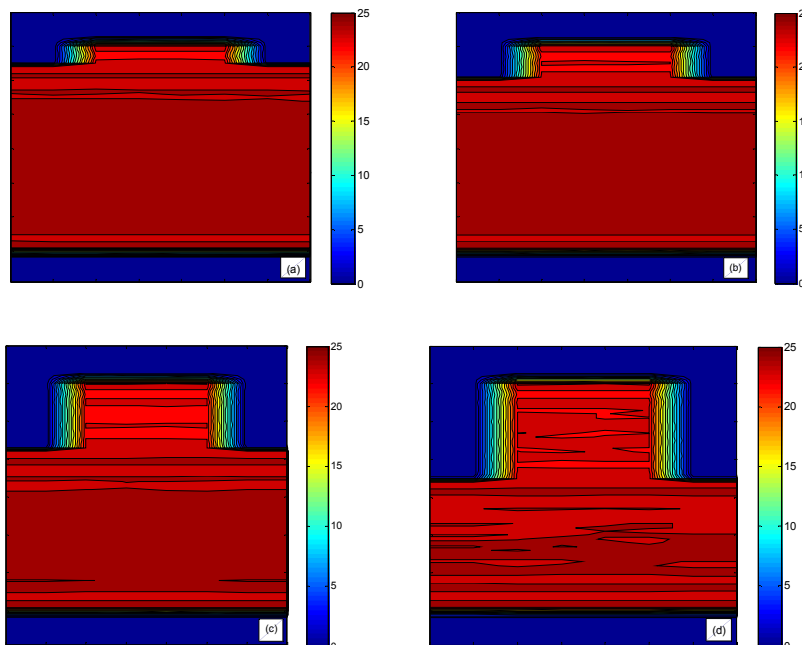


Σχήμα 4.26. Μέση ταχύτητα στις εσοχές ως συνάρτηση του μήκους και του ύψους της προεξοχής. (η μέση τιμή της ταχύτητας προσδιορίζεται από το μέσο όρο της ταχύτητας των υπολογιστικών κελιών που βρίσκονται μέσα στην εσοχή).

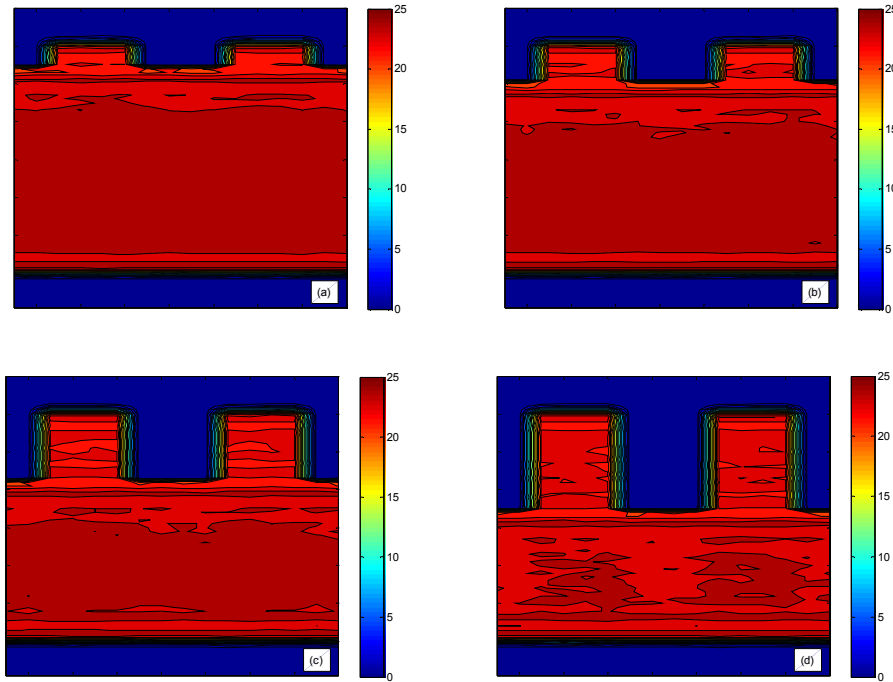
Ανακεφαλαιώνοντας, από την λεπτομερή παρατήρηση των κατανομών της ταχύτητας διαπιστώνεται ότι οι ταχύτητες των σωματιδίων μέσα στις εσοχές είναι πολύ μικρές. Τόσο οι ταχύτητες μέσα στις εσοχές όσο και οι μέγιστες ταχύτητες στο κεντρικό τμήμα του καναλιού εξαρτώνται από το ύψος της προεξοχής και μάλιστα μειώνονται συστηματικά με την αύξηση του ύψους.

Πεδίο πίεσης

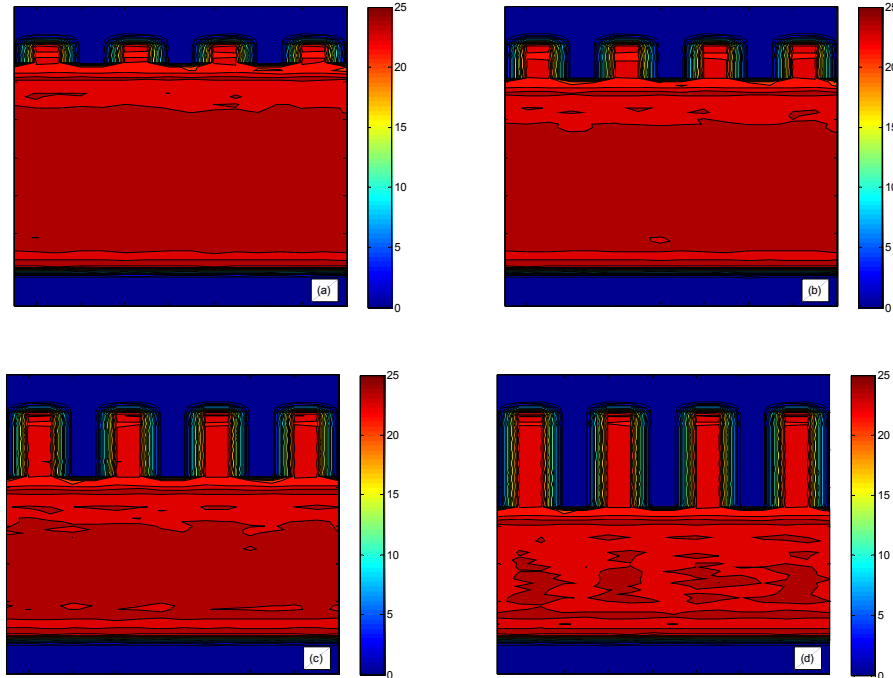
Παρουσιάζει πολύ μεγάλο ενδιαφέρον η συμπεριφορά της πίεσης στους αγωγούς με ορθογωνικές προεξοχές της επάνω πλάκας. Για την καλύτερη κατανόηση της μεταβολής της πίεσης παρουσιάζονται στα Σχ. 4.27, 4.28, 4.29 οι ισοβαρείς καμπύλες. Η πίεση στο κεντρικό τμήμα του αγωγού είναι σταθερή και μειώνεται ελαφρώς καθώς κινούμαστε προς τους τοίχους. Κοντά στο κάτω στερεό τοίχωμα εμφανίζεται μια ζώνη υψηλής πίεσης η οποία συνδέεται με την περιοχή υψηλής πυκνότητας που εντοπίστηκε για όλους τους αγωγούς σε δεδομένη απόσταση από τον κάτω τοίχο. Η αυξημένη παρουσία των σωματιδίων σε συγκεκριμένες θέσεις οδηγεί σε αυξημένες αλληλεπιδράσεις μεταξύ τους, που έχουν ως συνέπεια την αύξηση της πίεσης (Εξισώσεις 3.3 και 3.4).



Σχήμα 4.27. Ισοβαρείς για μήκος προεξοχής $l_{r1} = 0.5l_{tot}$ α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$.



Σχήμα 4.28. Ισοβαρείς για μήκος προεξοχής $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$.



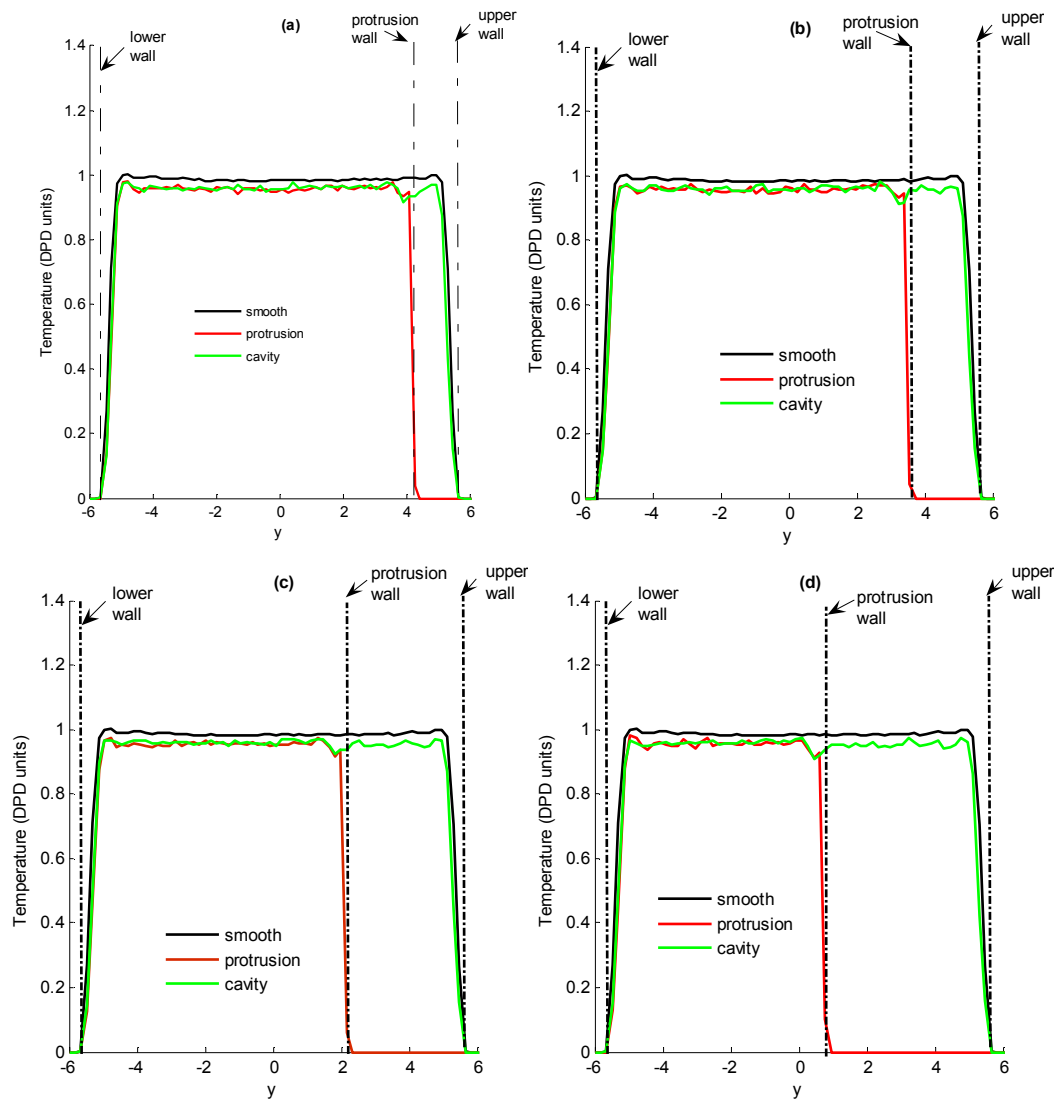
Σχήμα 4.29. Ισοβαρείς για μήκος προεξοχής $l_{r3} = 0.125l_{tot}$ α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$.

Παρουσιάζει ενδιαφέρον η συμπεριφορά της πίεσης στην επάνω πλάκα όπου εμφανίζονται οι εσοχές. Για όλες τις περιπτώσεις προεξοχών (Σχ. 4.27, 4.28 και 4.29) παρατηρείται, ότι η πίεση μειώνεται κοντά στις εσοχές του επάνω τοίχου. Η μείωση μάλιστα είναι μεγαλύτερη όσο αυξάνεται το ύψος της προεξοχής. Ωστόσο, μέσα στις εσοχές παρατηρείται η εμφάνιση περιοχών υψηλής πίεσης που εναλλάσσονται με περιοχές χαμηλής πίεσης. Εκτιμάται ότι η εμφάνιση των περιοχών υψηλής πίεσης οφείλεται στην παγίδευση των σωματιδίων μέσα στις εσοχές όπως παρατηρήθηκε από την κατανομή της πυκνότητας. Η παγίδευση αυτή οδηγεί σε μικρότερες ενδοσωματιδιακές αποστάσεις και συνεπώς υψηλότερες μεταξύ τους δυνάμεις που οδηγούν σε αύξηση της πίεσης. Παρατηρείται ακόμη μείωση της πίεσης στο κέντρο του αγωγού με την αύξηση του ύψους, που πιθανότατα συνδέεται με τη μείωση της ταχύτητας που συζητήθηκε εκτενώς στο προηγούμενο κεφάλαιο.

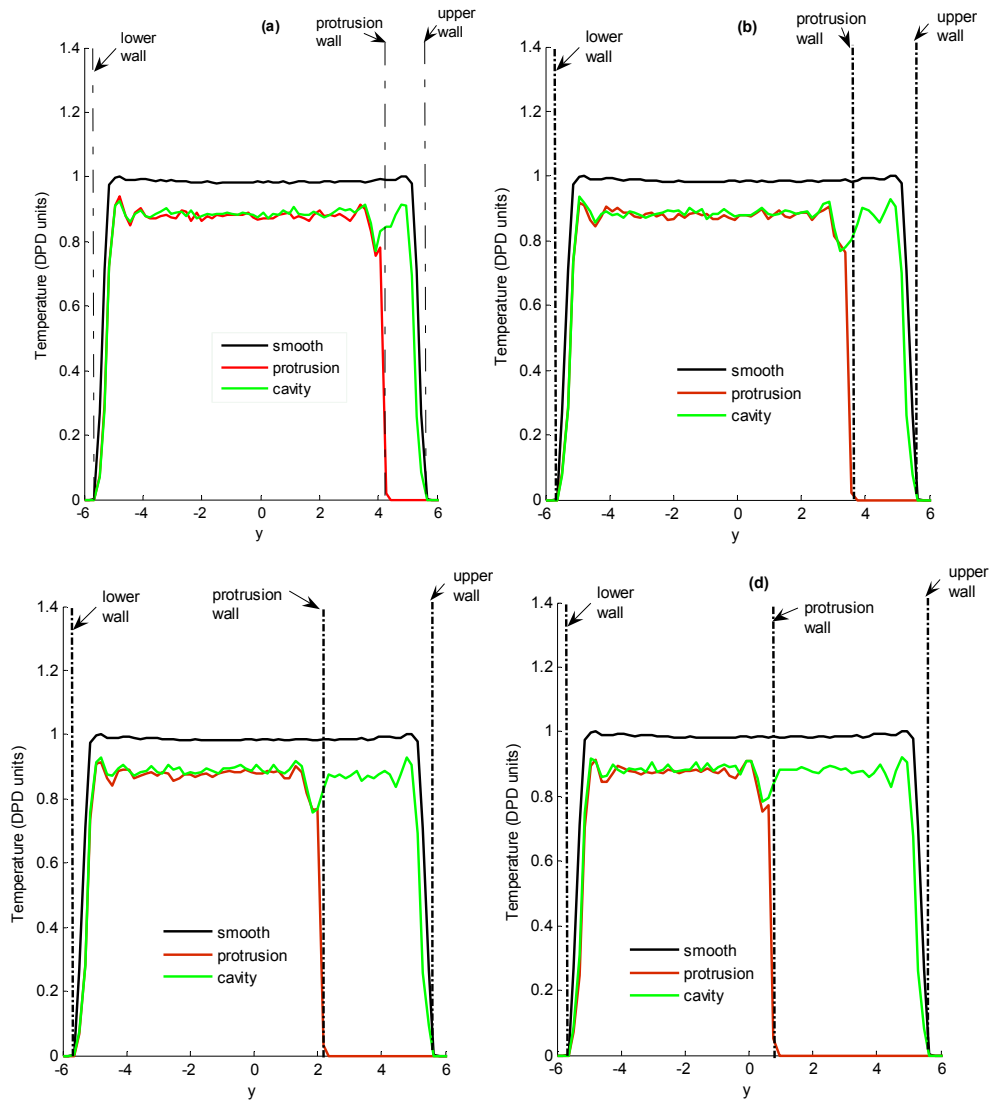
Ανακεφαλαιώνοντας, είναι εμφανές ότι η πίεση μέσα στις εσοχές εξαρτάται από το ύψος της προεξοχής. Περιοχές υψηλής πίεσης εντοπίζονται μέσα στις εσοχές και ο αριθμός τους καθορίζεται από το ύψος της προεξοχής. Οι περιοχές υψηλής πίεσης είναι ενδεικτικές της παγίδευσης των σωματιδίων του ρευστού γεγονός που αποκαλύπτεται από την κατανομή της πυκνότητας, το μέσο χρόνο παραμονής στις εσοχές και τη μέση τιμή της ταχύτητας στις εσοχές.

Κατανομή της θερμοκρασίας

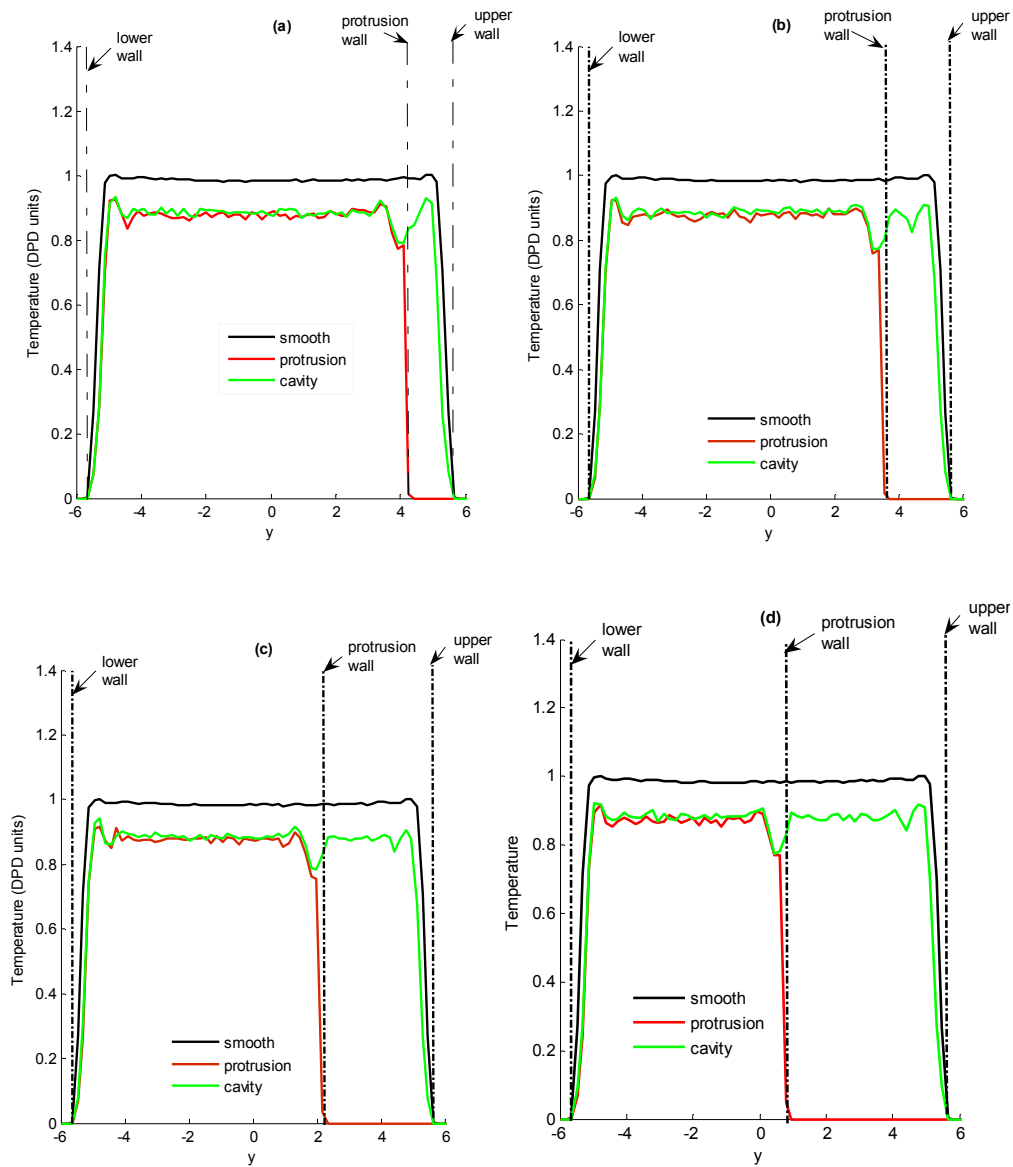
Στα Σχ. 4.30, 4.31 και 4.32 παρουσιάζονται οι τοπικές κατανομές της θερμοκρασίας στην προεξοχή και την εσοχή για όλα τα μήκη και ύψη προεξοχής. Η θερμοκρασία είναι χαμηλότερη από την αρχική ($k_B T = 1.0$) για όλους τους αγωγούς με προεξοχές και μάλιστα μειώνεται σημαντικά μόνον με τη μεταβολή του μήκους, ενώ για το ίδιο μήκος δεν φαίνεται να επηρεάζεται από τη μεταβολή του ύψους. Η κατανομή της θερμοκρασίας πλησίον των τοίχων θυμίζει στοιχεία από τη συμπεριφορά της πυκνότητας κοντά σε αυτές τις περιοχές. Ειδικότερα, παρατηρείται η εμφάνιση τριών κορυφών, μία κοντά στον κάτω τοίχο, μία στον τοίχο της εσοχής και μία στον τοίχο της προεξοχής σε ίσες αποστάσεις από τους τοίχους. Μια μικρή υπερύψωση της κατανομής της προεξοχής παρατηρείται πολύ κοντά στο στερεό τοίχωμα της προεξοχής στο σημείο όπου η κατανομή της εσοχής παρουσιάζει τοπικό ελάχιστο. Στο κεντρικό τμήμα του αγωγού η θερμοκρασία σταθεροποιείται στη μέση τιμή της.



Σχήμα 4.30. Διαγράμματα της θερμοκρασίας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για μήκος $l_{r1} = 0.5l_{tot}$ και ύψος : α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$ (το y είναι σε μονάδες r_c) . Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα



Σχήμα 4.31. Διαγράμματα της θερμοκρασίας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για μήκος $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και ύψος : α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$ (το y είναι σε μονάδες r_c). Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα



Σχήμα 4.32. Διαγράμματα της θερμοκρασίας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για μήκος $l_{r3} = 0.125l_{tot}$ και ύψος : α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$ (το y είναι σε μονάδες r_c) . Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα

Ειδικότερα, για την περίπτωση l_{r1} (Σχ. 4.30) η θερμοκρασία του ρευστού είναι χαμηλότερη από αυτή του λείου αγωγού. Οι κορυφές της θερμοκρασίας που εντοπίζονται όπως ήδη αναφέρθηκε σε δεδομένη απόσταση από τους τοίχους δεν διαφέρουν σημαντικά από τη μέση θερμοκρασία στο κεντρικό τμήμα του αγωγού.

Για τις περιπτώσεις l_{r2} (Σχ. 4.31) και l_{r3} (Σχ. 4.32) η παρουσία των προεξοχών έχει μεγαλύτερη επίδραση στη θερμοκρασία του συστήματος. Η θερμοκρασία στο κεντρικό τμήμα του αγωγού είναι αισθητά χαμηλότερη από αυτή του λείου αγωγού και από αυτή της περίπτωσης l_{r1} , αποκαλύπτοντας το 'ψυκτικό' αποτέλεσμα της εμφάνισης των προεξοχών. Η τιμή της θερμοκρασίας για τις δύο αυτές περιπτώσεις μικρών είναι ίδια στα πλαίσια του στατιστικού σφάλματος για όλα τα ύψη προεξοχής. Όσον αφορά τις κορυφές κοντά στα στερεά τοιχώματα, αυτές εντοπίζονται στις ίδιες αποστάσεις με τις αντίστοιχες της περίπτωσης l_{r1} με τη διαφορά ότι είναι αρκετά μεγαλύτερες από την μέση τιμή της θερμοκρασίας στο κέντρο του αγωγού, σε αντίθεση με την περίπτωση l_{r1} .

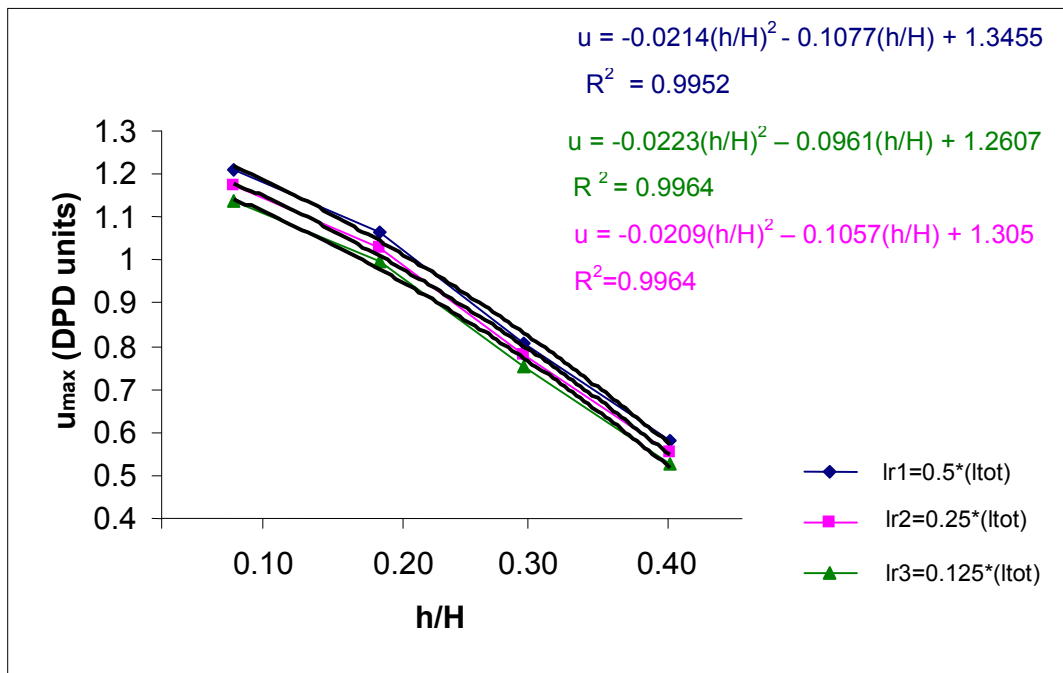
Συμπερασματικά, από την αναλυτική διερεύνηση των διαγραμμάτων της θερμοκρασίας διαπιστώνεται ότι η τιμή της θερμοκρασίας επηρεάζεται κυρίως από το μήκος της προεξοχής και σχεδόν καθόλου από το ύψος. Η συμπεριφορά κοντά στα στερεά τοιχώματα 'θυμίζει' κατά πολύ την συμπεριφορά στην κατανομή της πυκνότητας και χαρακτηρίζεται από την εμφάνιση κορυφών σε δεδομένη απόσταση από τα στερεά τοιχώματα. Η θερμοκρασία του ρευστού μειώνεται με την παρουσία των προεξοχών γεγονός που αποκαλύπτει μια πολύ σημαντική εφαρμογή μιας τέτοιας προσομοίωσης που είναι η ψύξη ναοσυσκευών.

Συμπεράσματα ενότητας

Στην παρούσα ενότητα διερευνήθηκε η επιρροή των γεωμετρικών χαρακτηριστικών των ορθογωνικών προεξοχών της επάνω πλάκας στις μακροσκοπικές ποσότητες της ροής με τη χρήση της μεθόδου DPD.

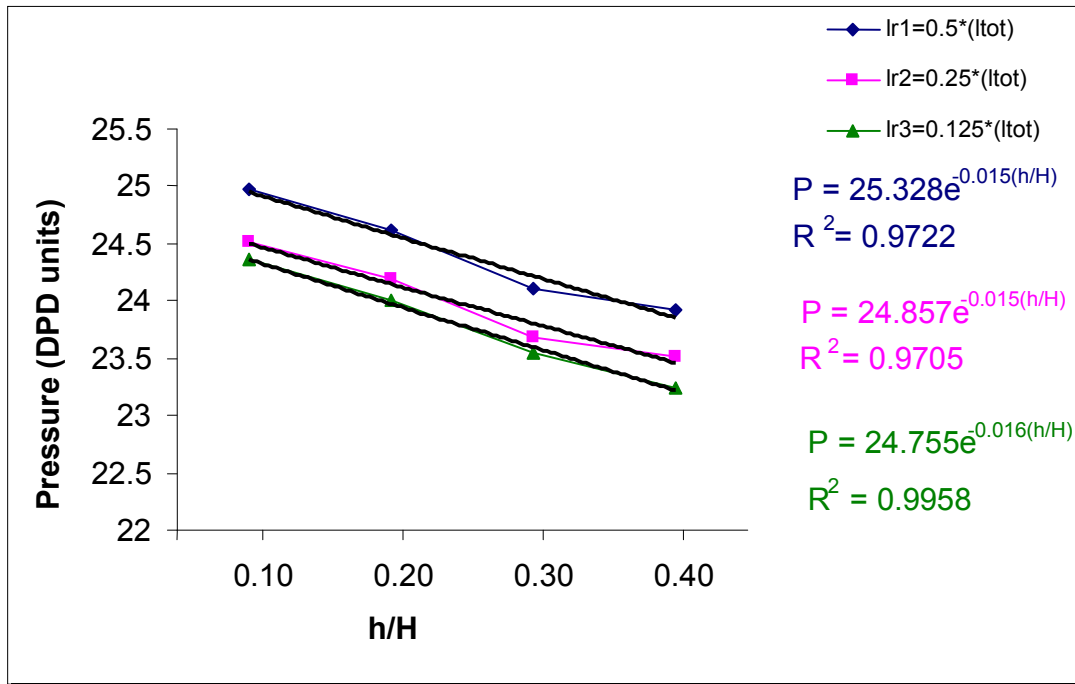
Οι κατανομές της πυκνότητας παρουσιάζουν ομοιογένεια στο κεντρικό τμήμα του αγωγού για όλα τα μήκη προεξοχής. Ανομοιογένεια εντοπίζεται κοντά στα στερεά τοιχώματα και ενώ στο κάτω τοίχωμα η συμπεριφορά είναι ίδια για όλους τους αγωγούς στο επάνω τοίχωμα φαίνεται ότι εξαρτάται από το ύψος της προεξοχής. Γενικότερο συμπέρασμα είναι ότι για όλους τους αγωγούς με προεξοχές παρατηρείται παγίδευση των σωματιδίων μέσα στις εσοχές, όπως αποκαλύπτεται από τον υπολογισμό του μέσου χρόνου παραμονής των σωματιδίων μέσα στις εσοχές.

Η ταχύτητα εξαρτάται από το ύψος της προεξοχής και μάλιστα μειώνεται σημαντικά με την αύξηση του ύψους. Η συμπεριφορά αυτή διακρίνεται καλύτερα στο Σχ. 4.33 όπου δίδεται η μέγιστη τιμή της ταχύτητας συναρτήσει του μήκους και του ύψους για όλους τους αγωγούς που μελετήθηκαν.



Σχήμα 4.33. Μέγιστη ταχύτητα του ρευστού ως συνάρτηση του ύψους προεξοχής για μήκη προεξοχής: $l_{r1} = 0.50l_{tot}$, $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και $l_{r3} = 0.125l_{tot}$. $F_{ext} = 0.02$.

Η πίεση εμφανίζει συμπεριφορά που συμφωνεί με τη συμπεριφορά της πυκνότητας. Μειώνεται καθώς κινούμαστε από το κέντρο προς τα στερεά τοιχώματα ενώ κοντά στα τοιχώματα εμφανίζει περιοχές υψηλής πίεσης, η τοπολογία και το μέγεθος των οποίων είναι συνάρτηση του μήκους και του ύψους της προεξοχής. Αύξηση του ύψους οδηγεί γενικότερα σε αύξηση του μεγέθους αυτών των περιοχών. Η εμφάνιση τους δικαιολογείται από την υψηλή συγκέντρωση των σωματιδίων όπως αποκαλύπτεται από την κατανομή της πυκνότητας. Η αυξημένη παρουσία των σωματιδίων οδηγεί σε υψηλές ενδοσωματιδιακές δυνάμεις και συνεπώς στην αύξηση της πίεσης. Η εξάρτηση της πίεσης από το μήκος και το ύψος της προεξοχής δίδεται στο Σχ. 4.34 όπου είναι ίσως καλύτερα αντιληπτό πως το μήκος και το ύψος της προεξοχής επηρεάζουν την κατανομή της πίεσης.



Σχήμα 4.34. Μέγιστη πίεση του αγωγού ως συνάρτηση του ύψους προεξοχής για μήκη προεξοχής: $l_{r1} = 0.50l_{tot}$, $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και $l_{r3} = 0.125l_{tot}$. $F_{ext} = 0.02$.

Η θερμοκρασία μειώνεται με την παρουσία των προεξοχών. Παραμένει σταθερή στο κεντρικό τμήμα του αγωγού και η μέγιστη τιμή της θερμοκρασίας εξαρτάται κυρίως από το μήκος της προεξοχής.

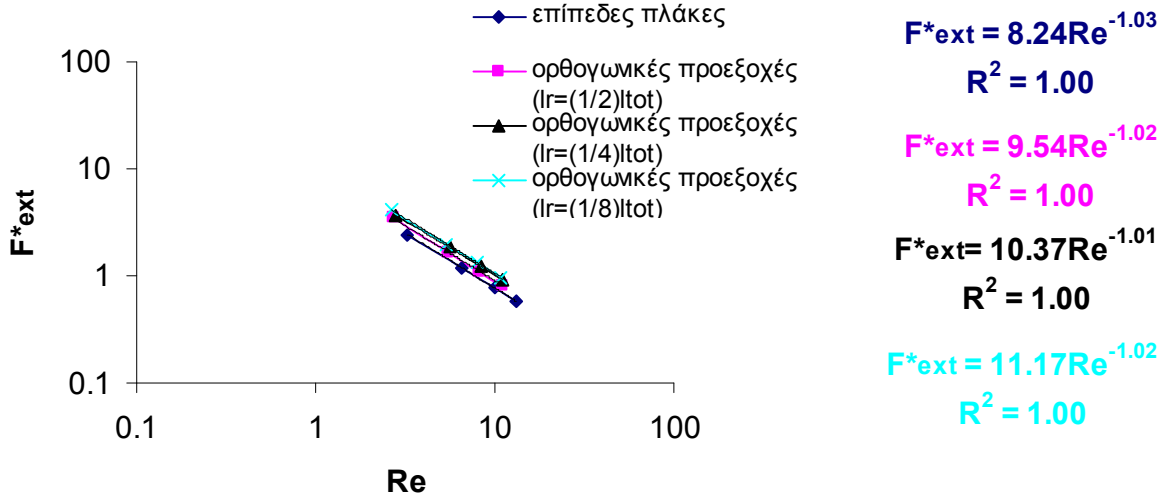
Ανακεφαλαιώνοντας, η επιρροή των γεωμετρικών χαρακτηριστικών της προεξοχής της επάνω πλάκας είναι πολύ σημαντική για την κατανομή της πυκνότητας, την ταχύτητα, την πίεση και τη θερμοκρασία. Τα αποτελέσματα αυτά μπορούν να χρησιμοποιηθούν στο σχεδιασμό ψυκτικών νανοσυσκευών.

4.3 Ροή σε νανοαγωγούς υπό διαφορετικές συνθήκες εξωτερικής δύναμης συναρτήσει των γεωμετρικών παραμέτρων

Στην ενότητα αυτή μελετάται η επιρροή της αδιαστατοποιημένης κινούσας δύναμης σε συνδυασμό με την παραμετρική μελέτη της επιρροής των αδιάστατων γεωμετρικών παραμέτρων των πλακών στη ροή ανάμεσα σε επίπεδες πλάκες. Για το σκοπό αυτό εφαρμόζονται τέσσερις διαφορετικές τιμές της δύναμης ($F_{ext} = 0.01, 0.02, 0.03, 0.04$), τρία διαφορετικά μήκη ($l_{r1} = 0.5l_{tot}, l_{r2} = 0.25l_{tot}, l_{r3} = 0.125l_{tot}$) και τέσσερα ύψη προεξοχής ($h = 0.10H, h = 0.20H, h = 0.30H$ και $h = 0.40H$). Η σύγκριση των διαφορετικών μοντέλων γίνεται με την αδιαστατοποιημένη μεταβολή της κινούσας δύναμης συναρτήσει του αριθμού Re. Η αδιαστατοποίηση εξασφαλίζει τη δυνατότητα σύγκρισης ροών σε αγωγούς με διαφορετικά γεωμετρικά χαρακτηριστικά. Η αδιαστατοποίηση της κινούσας δύναμης γίνεται με τον όρο $\rho \bar{u}^2 h L$ που έχει διαστάσεις δύναμης. Ως δύναμη θεωρείται το άθροισμα της δύναμης που ασκείται σε όλα τα σωματίδια του ρευστού.

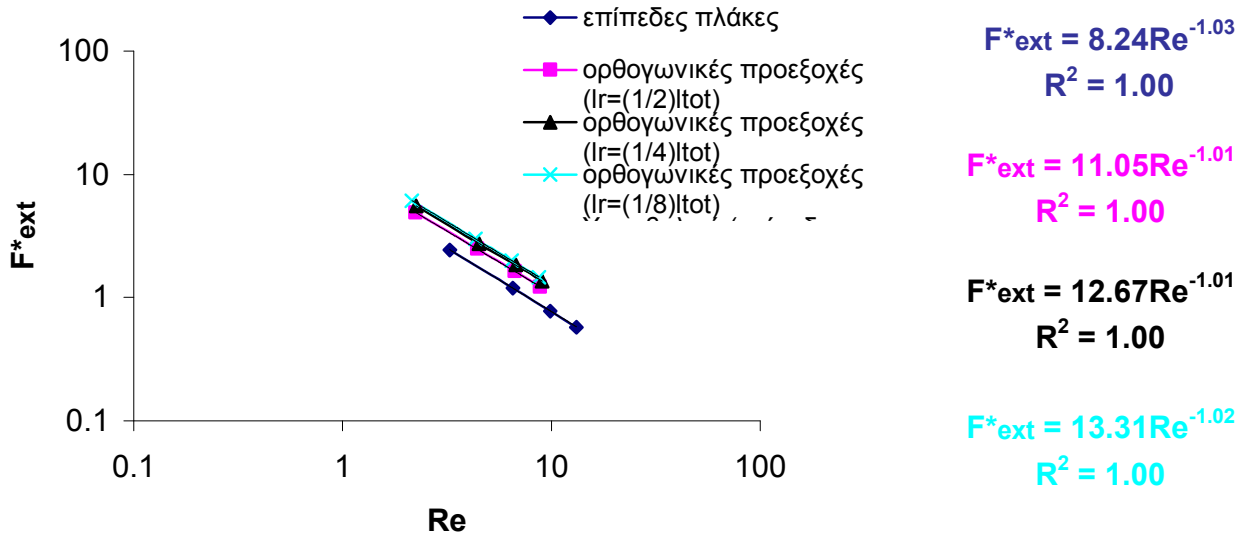
Στα Σχ. 4.35, 4.36, 4.37 και 4.38 απεικονίζονται τα μεγέθη αυτά για ύψη προεξοχών $h = 0.10H, h = 0.20H, h = 0.30H$ και $h = 0.40H$ αντίστοιχα. Παρατηρείται ότι η συμπεριφορά της αδιαστατοποιημένης κινούσας δύναμης συναρτήσει του αριθμού Re σε λογαριθμική κλίμακα είναι γραμμική. Για όλα τα ύψη προεξοχής, η αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη μειώνεται με την αύξηση του αριθμού Re. Παρατηρείται ακόμη, ότι για σταθερό ύψος προεξοχής η αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη αυξάνεται με την μείωση του μήκους προεξοχής.

Κανάλι με ορθογωνικές προεξοχές - ύψος προεξοχής 10%

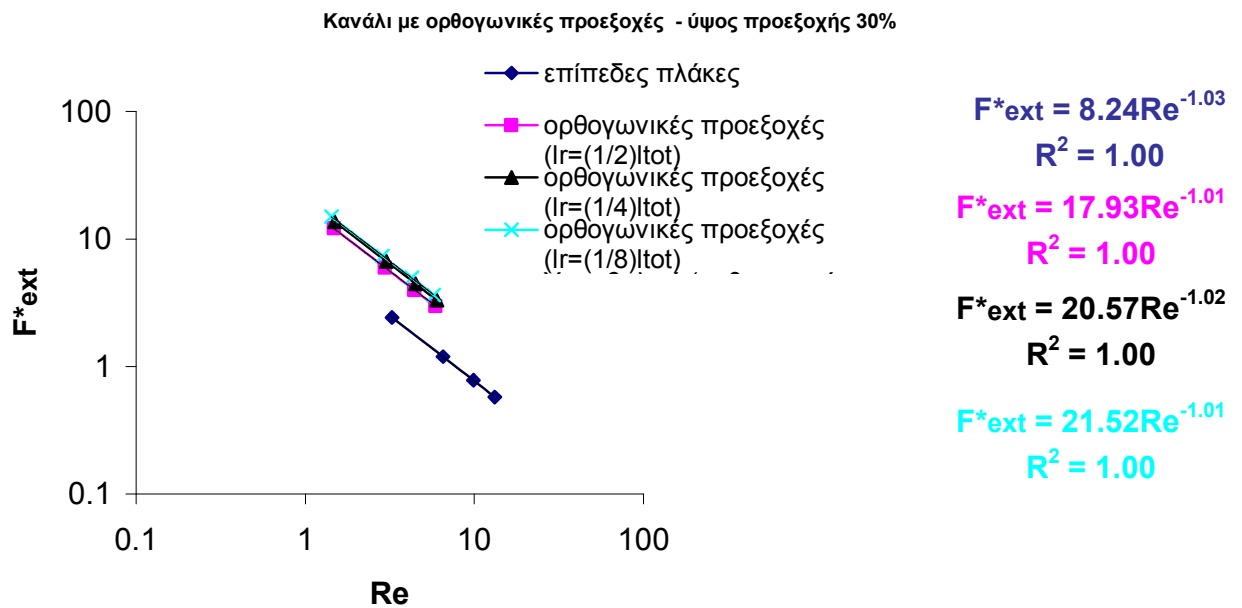


Σχήμα 4.35. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για ύψος προεξοχών $h = 0.10H$

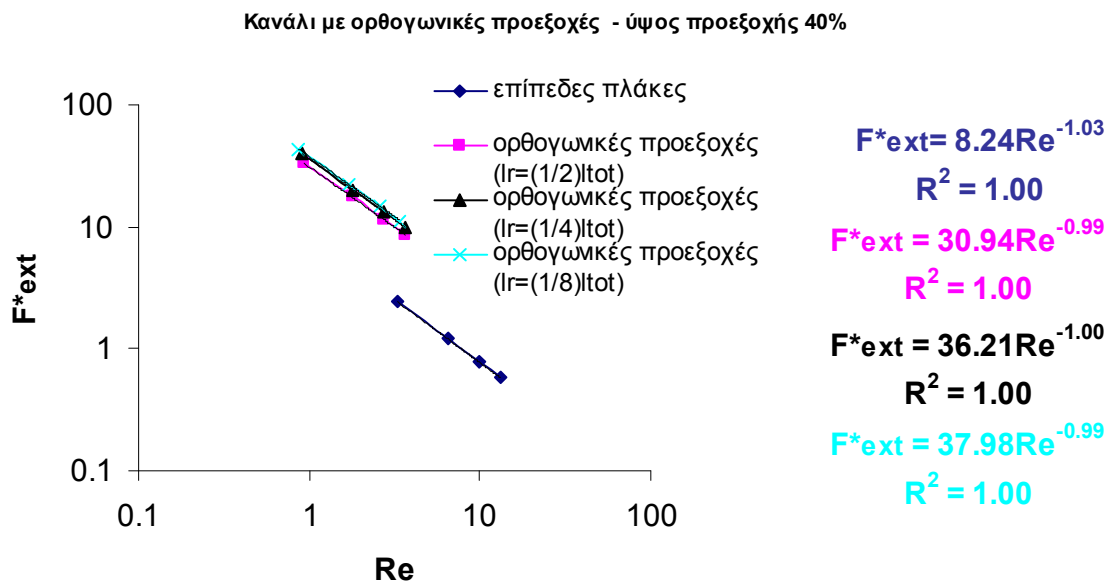
Κανάλι με ορθογωνικές προεξοχές - ύψος προεξοχής 20%



Σχήμα 4.36. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για ύψος προεξοχών $h = 0.20H$



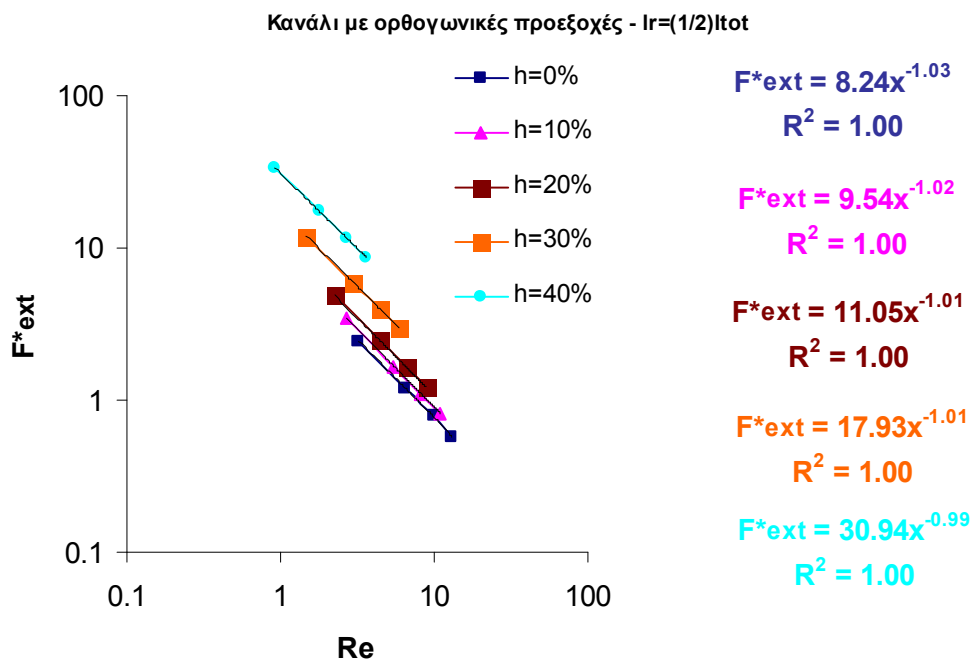
Σχήμα 4.37. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για ύψος προεξοχών $h = 0.30H$



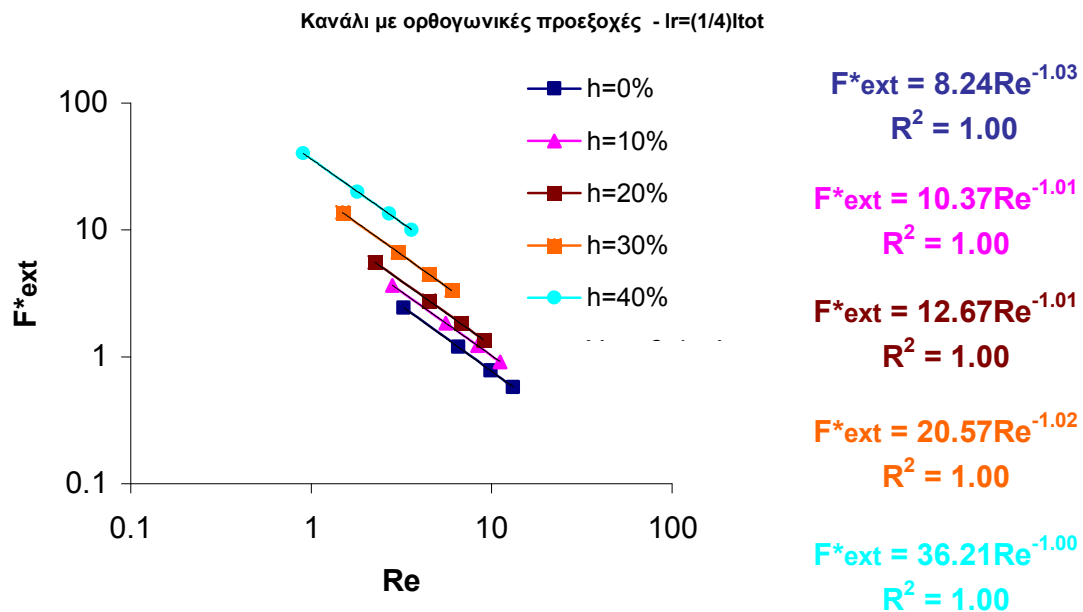
Σχήμα 4.38. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για ύψος προεξοχών $h = 0.40H$

Η σύγκριση των υψών προεξοχής υπό συνθήκες σταθερού μήκους φαίνεται ευκρινέστερα στα Σχ. 4.40, 4.41 και 4.42. Στα διαγράμματα αυτά είναι ευδιάκριτη η εξάρτηση της δύναμης από το ύψος της προεξοχής. Παρατηρείται ότι η αύξηση του ύψους προεξοχής οδηγεί σε αύξηση της απαιτούμενης αδιαστατοποιημένης κινούσας δύναμης για δεδομένο αριθμό Re. Ακόμη, για όλα τα ύψη διακρίνεται η μείωση της αδιαστατοποιημένης κινούσας δύναμης με την αύξηση του αριθμού Re. Πρέπει τέλος να σημειωθεί ότι η σχέση της αδιαστατοποιημένης εξωτερικής δύναμης συναρτήσει του αριθμού Re για όλους τους αγωγούς που μελετήθηκαν εδώ είναι της μορφής

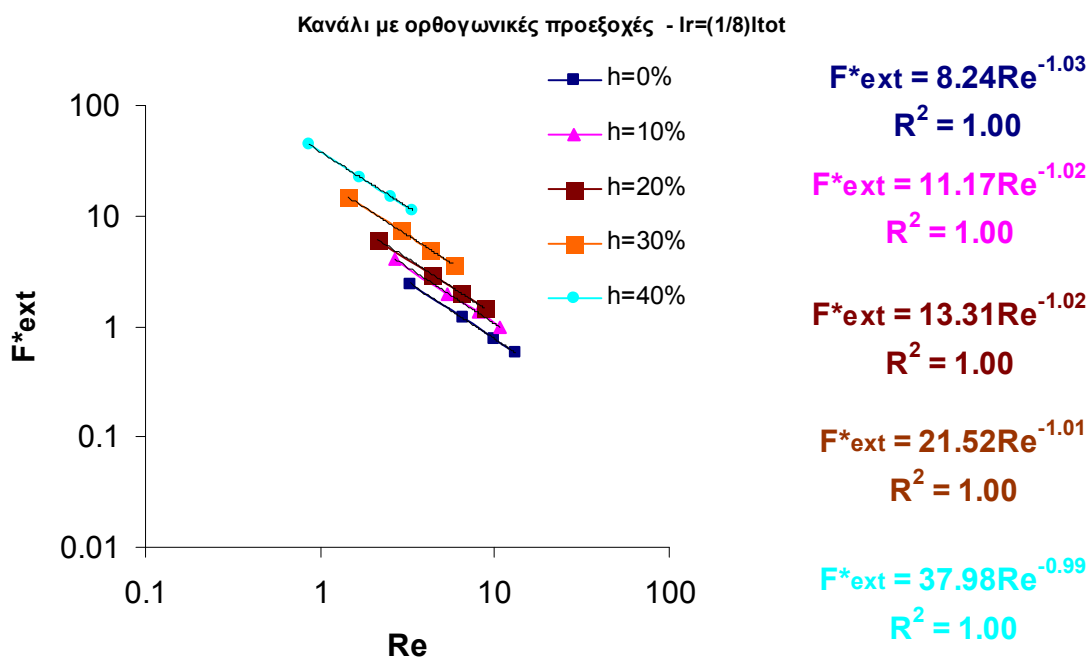
$$F^*_{ext} = \frac{A}{Re} \quad (4.1)$$



Σχήμα 4.39. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για μήκος προεξοχών $l_{r1} = 0.5l_{tot}$.

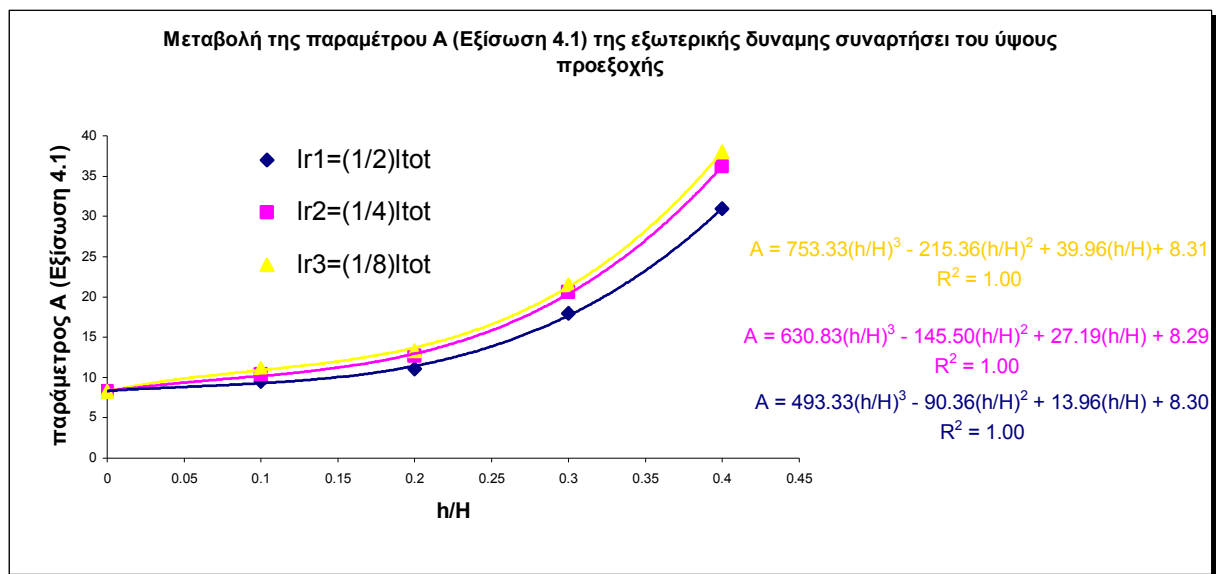


Σχήμα 4.40. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτίζεται του αριθμού Re για μήκος προεξοχών $lr_2 = 0.25l_{tot}$.



Σχήμα 4.41. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτίζεται του αριθμού Re για μήκος προεξοχών $lr_3 = 0.125l_{tot}$.

Στο Σχ. 4.42 παρουσιάζεται η μεταβολή της παραμέτρου A (Εξίσωση 4.1) της αδιαστατοποιημένης κινούσας δύναμης συναρτήσει του αδιαστατοποιημένου ύψους της προεξοχής για όλα τα μήκη και για σταθερό αριθμό Re (Re=1.00). Η παράμετρος A εκφράζει το λόγο της δύναμης συναρτήσει του αριθμού Re. Παρατηρείται ότι η παράμετρος αυτή αυξάνεται με την αύξηση του αδιαστατοποιημένου ύψους της προεξοχής.



Σχήμα 4.42. Μεταβολή της παραμέτρου A της εξίσωσης 4.1 συναρτήσει του αδιαστατοποιημένου ύψους της προεξοχής για αριθμό Re 1.0.

Συμπεράσματα ενότητας

Τα συμπεράσματα που προέκυψαν για την ροή μεταξύ οριζόντιων ακίνητων παράλληλων πλακών για διαφορετικά μήκη και ύψη προεξοχής της επάνω πλάκας αλλά και διαφορετικές εξωτερικές δυνάμεις είναι τα ακόλουθα:

- Η διαμόρφωση των προεξοχών στην επάνω πλάκα διαταράσσει τη ροή του ρευστού και οδηγεί σε επιβράδυνση των σωματιδίων μέσα στις εσοχές.
- Όσο μειώνεται το μήκος και αυξάνεται το ύψος των εσοχών, τόσο ο μέσος χρόνος παραμονής των σωματιδίων στις εσοχές αυξάνεται και η ταχύτητα στις εσοχές μειώνεται.
- Η διαμόρφωση προεξοχών στην επάνω πλάκα οδηγεί στην εμφάνιση περιοχών υψηλής πίεσης μέσα στις εσοχές. Η αύξηση της πίεσης οφείλεται στην αυξημένη παρουσία των σωματιδίων μέσα στις εσοχές όπως αποκαλύπτεται από το προφίλ της πυκνότητας.
- Η μείωση του μήκους και η αύξηση του ύψους της προεξοχής οδηγεί σε μείωση της θερμοκρασίας του ρευστού.
- Η αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη εμφανίζει γραμμική συμπεριφορά σε λογαριθμική (log-log) κλίμακα για όλα τα αδιάστατα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της ροής και μειώνεται με την αύξηση του αριθμού Re για όλα τα μήκη και ύψη της προεξοχής.

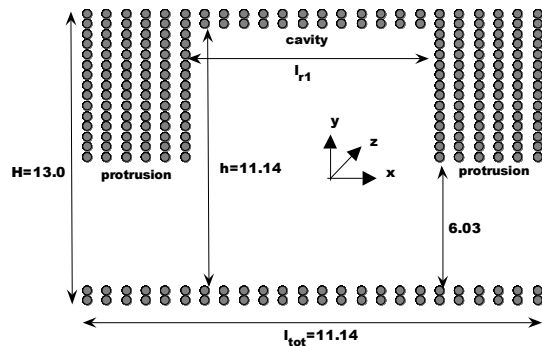
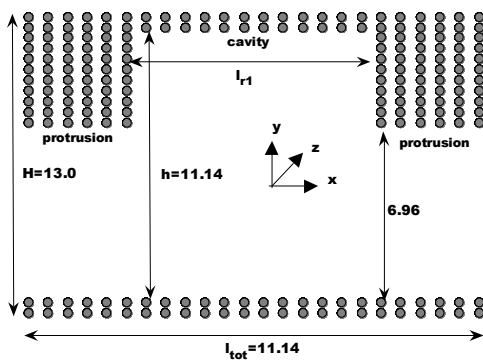
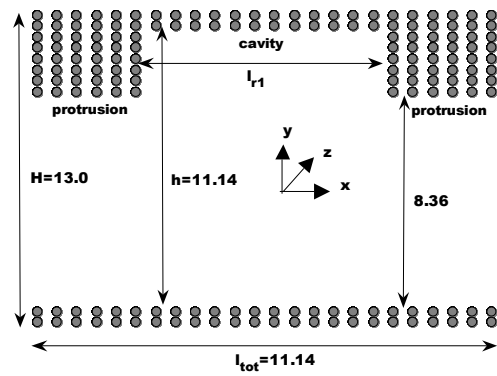
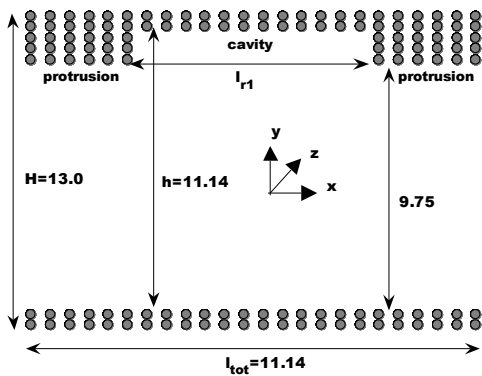
5. ΑΓΩΓΟΙ ΜΕ ΠΕΡΙΟΔΙΚΕΣ ΟΡΘΟΓΩΝΙΚΕΣ ΠΡΟΕΞΟΧΕΣ: ΜΕΣΟ - ΚΛΙΜΑΚΑ

Στο προηγούμενο κεφάλαιο μελετήθηκε η ροή σε νανοαγωγό με περιοδικές ορθογωνικές προεξοχές της επάνω πλάκας. Στο κεφάλαιο αυτό μελετάται η ροή σε αγωγούς μεσοσκοπικής κλίμακας με περιοδικές ορθογωνικές προεξοχές. Παρουσιάζονται αρχικά τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του αγωγού, οι οριακές συνθήκες του προβλήματος και οι λοιπές υπολογιστικές λεπτομέρειες της προσομοίωσης. Αναλύονται τα αποτελέσματα για διαφορετικά μήκη και ύψη προεξοχής υπό συγκεκριμένη εξωτερική δύναμη και στο τέλος του κεφαλαίου μελετάται η επίδραση της εξωτερικής δύναμης σε συνδυασμό με τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά των προεξοχών στην μεταβολή του αριθμού Re. Η σπουδαιότητα της μελέτης αγωγών με περιοδικές προεξοχές της επάνω πλάκας περιγράφηκε εκτενέστερα στο κεφ.4 όπου αναφέρθηκαν και προηγούμενες μελέτες άλλων ερευνητών σε τέτοιες εφαρμογές.

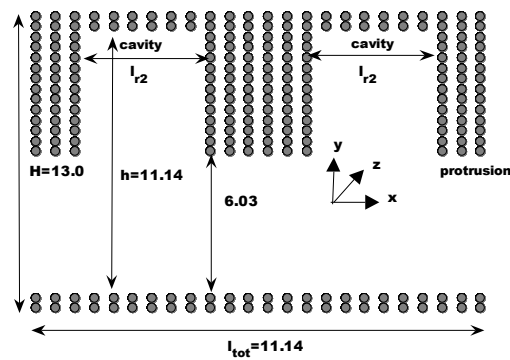
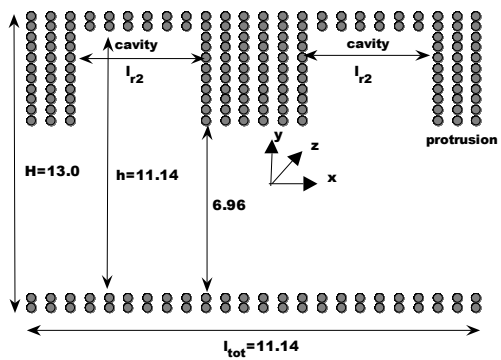
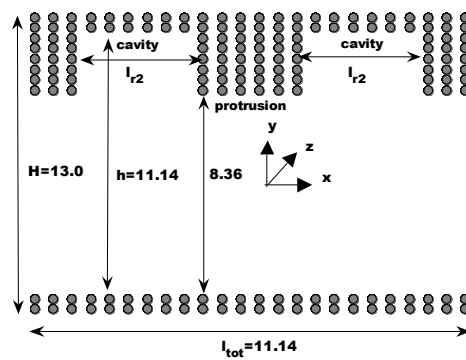
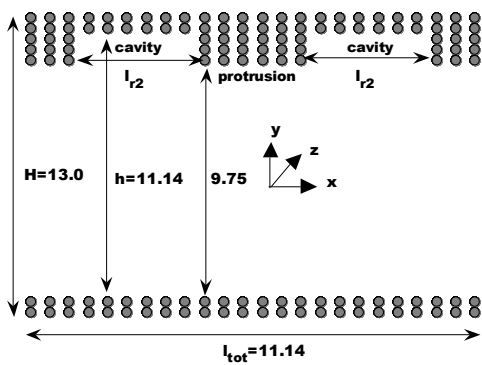
5.1 Υπολογιστικές λεπτομέρειες

Μελετήθηκε η ροή μεταξύ δύο ακίνητων οριζόντιων παράλληλων πλακών που βρίσκονται σε απόσταση $h=11.14r_c$ μεταξύ τους. Ο κάτω τοίχος είναι επίπεδος ενώ ο επάνω χαρακτηρίζεται από την ύπαρξη περιοδικών προεξοχών ορθογωνικής διατομής. Θεωρούνται τρία διαφορετικά μήκη προεξοχής: $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, $l_{r2} = 0.25l_{tot}$, $l_{r3} = 0.167l_{tot}$ και τέσσερα ύψη προεξοχής: $h = 0.10H$, $h = 0.20H$, $h = 0.30H$ και $h = 0.40H$ (όπου $H = 13.00r_c$ το πλάτος του αγωγού). Το l_{ri} αντιπροσωπεύει ο μήκος των ορθογωνικών προεξοχών και το l_{tot} το συνολικό μήκος του υπολογιστικού μας φατνίου. Σε κάθε εφαρμογή το μήκος των προεξοχών και το μήκος των εσοχών είναι ίσα. Έτσι λοιπόν

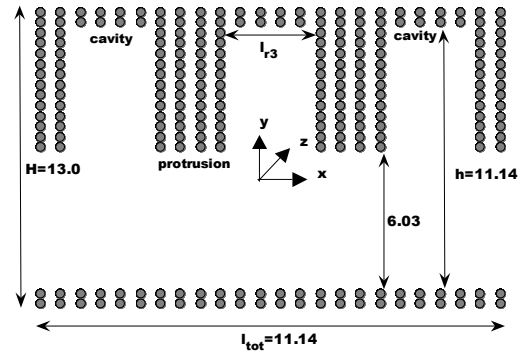
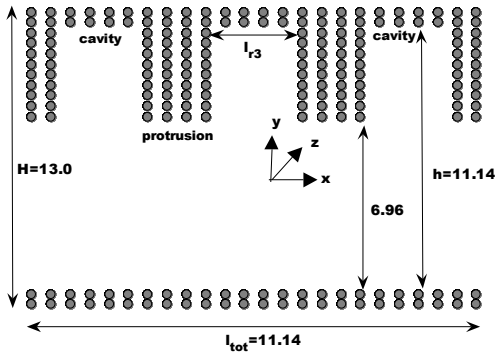
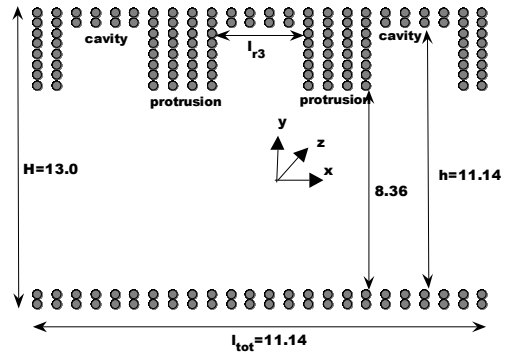
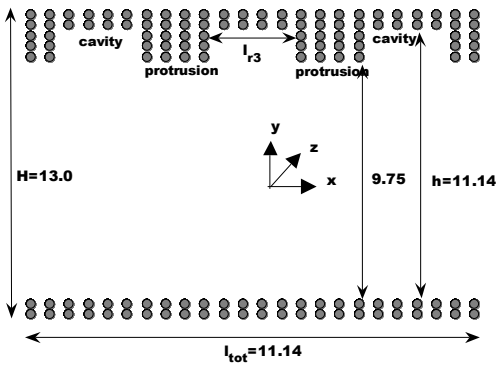
l_{r1} είναι ο αγωγός με μια ορθογωνική προεξοχή μήκους $0.5l_{tot}$ στο υπολογιστικό φατνίο, l_{r2} είναι ο αγωγός με δύο ορθογωνικές προεξοχές μήκους $0.25l_{tot}$ η καθεμία και l_{r3} είναι ο αγωγός με τρεις ορθογωνικές προεξοχές μήκους $0.167l_{tot}$ η καθεμία. Οι διαστάσεις όλων των υπολογιστικών φατνίων κατά τις τρεις κατευθύνσεις (x-,y-,z-) είναι $L_x \times L_y \times L_z = 11.14r_c \times 13.00r_c \times 11.14r_c$ (1.11 μm x 1.30 μm x 1.11 μm). Τα αποτελέσματα των αγωγών με προεξοχές συγκρίνονται με τα αποτελέσματα της ροής μεταξύ λείων και επίπεδων ακίνητων πλακών που απέχουν μεταξύ τους απόσταση $h=11.14r_c$. Ο λείος αγωγός θα αναφέρεται στο εξής για λόγους ευκολίας ως $l_{r0} = 0l_{tot}$



α) $l_{r1} = 0.5l_{tot}$



$$\beta) l_{r2} = 0.25l_{tot}$$



$$\gamma) l_{r3} = 0.167l_{tot}$$

Σχήμα 5.1. Σύστημα προσομοίωσης για όλα τα ύψη προεξοχής και για μήκη α) $l_{r1} = 0.5l_{tot}$, β) $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και γ) $l_{r3} = 0.167l_{tot}$.

Ο συνολικός αριθμός των σωματιδίων τοίχου και ρευστού ποικίλει ανά περίπτωση εφαρμογής και φαίνεται αναλυτικά στον Πίνακα 5.1. Τα σωματίδια του τοίχου τοποθετούνται σε ένα τετραγωνικό πλέγμα και οι ταχύτητες τους είναι μηδενικές.

Περιοδικές συνθήκες θεωρούνται στις x- και z- κατευθύνσεις, ενώ κατά την y-κατεύθυνση στα όρια των πλακών (διεπιφάνεια τοίχου-ρευστού) εφαρμόζονται οι bounce-back συνθήκες που εξασφαλίζουν την αποφυγή της απομάκρυνσης των σωματιδίων έξω από το υπολογιστικό φαντίο όπως περιγράφηκε πολύ αναλυτικά στην παράγραφο 2.2 του παρόντος.

Το ρευστό που χρησιμοποιείται για την προσομοίωση είναι υποθετικό με συμπίεστικότητα ίδια με αυτή του νερού στους 300K και μέγεθος σωματιδίων ίσο με 10^5 άτομα αργού. Η αριθμητική πυκνότητα του ρευστού και του τοίχου είναι ίση με 10, ώστε να επιτευχθεί η επιθυμητή τιμή του αριθμού Sc σύμφωνα με τα όσα αναφέρθηκαν στην παράγραφο 3.2. Η θερμοκρασία του ρευστού είναι σταθερή και ίση με $k_B T = 1.0$ και η εξωτερική δύναμη που ασκείται σε κάθε σωματίδιο ρευστού είναι ίση με 0.02DPD units. Το χρονικό βήμα της προσομοίωσης είναι $\Delta t = 0.01 \sqrt{\frac{mr_c^2}{k_B T}}$ (αντιστοιχεί σε πραγματικές διαστάσεις σε 1.07msec). Η διάρκεια της προσομοίωσης είναι 5×10^5 χρονικά βήματα και τα μακροσκοπικά μεγέθη (πυκνότητα, ταχύτητα, πίεση, θερμοκρασία) υπολογίζονται ως μέσες τιμές στα τελευταία 2.5×10^5 χρονικά βήματα.

Μήκος προεξοχής Υψος προεξοχής	$lr_1 = 0.5l_{tot}$	$lr_2 = 0.25l_{tot}$	$lr_3 = 0.167l_{tot}$
$h = 0.10H$	3168	3168	3168
	13536	13536	13536
$h = 0.20H$	4032	4032	4032
	12672	12672	12672
$h = 0.30H$	4896	4896	4896
	11808	11808	11808
$h = 0.40H$	5472	5472	5472
	11232	11232	11232

Πίνακας 5.1. Αριθμός των σωματιδίων του συστήματος (με μπλέ αναγράφονται τα σωματίδια του τοίχου και με κόκκινο τα σωματίδια του ρευστού)

5.2 Μετεπεξεργασία των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης

Η εξαγωγή των μέσων όρων της πυκνότητας, της ταχύτητας, της πίεσης και της θερμοκρασίας γίνεται με εφαρμογή των εξισώσεων της παραγράφου 3.2. Ο αγωγός διαιρείται σε υπολογιστικά κελιά (παραλληλεπίπεδα) κατά τις κατευθύνσεις x,y,z. Αναλυτικότερα, για μήκη προεξοχής $lr_1 = 0.5l_{tot}$ και $lr_2 = 0.25l_{tot}$ και για όλα τα ύψη χρησιμοποιήθηκαν 8x56x56 υπολογιστικά κελιά (κατά τις κατευθύνσεις x,y και z αντίστοιχα), ενώ στην περίπτωση $lr_3 = 0.167l_{tot}$ χρησιμοποιήθηκαν 12x56x56 υπολογιστικά κελιά, μεγαλύτερος δηλαδή αριθμός εξαιτίας των περισσότερων προεξοχών σε αυτή την περίπτωση οι οποίες απαιτούν πιο προσεκτική ανάλυση στα σημεία της ασυνέχειας.

5.3 Αποτελέσματα

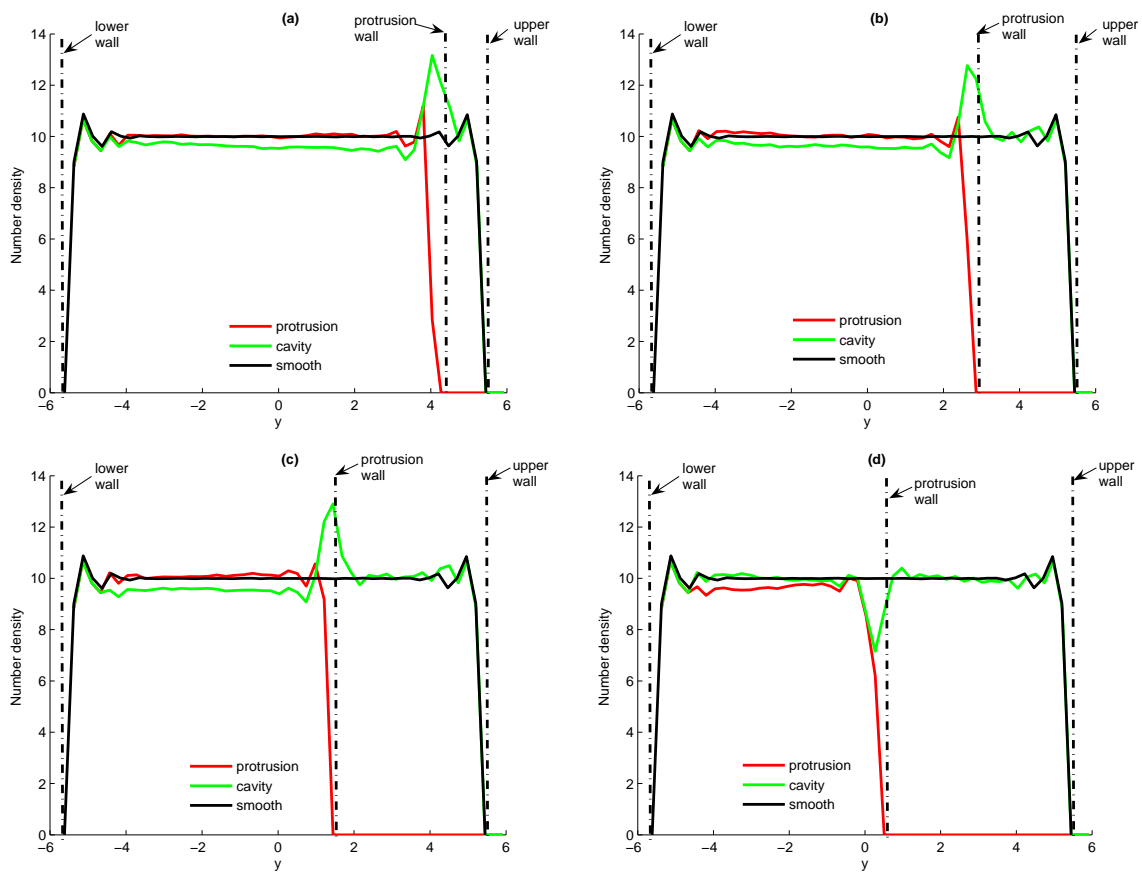
Κατανομή της πυκνότητας

Στα Σχ.5.2, 5.3 και 5.4 παρουσιάζονται οι τοπικές κατανομές της πυκνότητας σε διατομές του αγωγού που βρίσκονται στις εσοχές και τις προεξοχές της επάνω πλάκας. Στην περίπτωση του λείου αγωγού (μαύρη γραμμή στα διαγράμματα της πυκνότητας) η πυκνότητα είναι ομογενής στο κεντρικό τμήμα του αγωγού και διαφέρει κοντά στα όρια των στερεών τοίχων, όπου παρατηρείται εναλλαγή περιοχών χαμηλής και υψηλής πυκνότητας. Η ανομοιογένεια αυτή αποδίδεται στην παρουσία των σωματιδίων του τοίχου και την αλληλεπίδραση τους με τα σωματίδια του ρευστού. Στο κεντρικό τμήμα του αγωγού η πυκνότητα είναι ίση με την αρχική της τιμή στα πλαίσια του στατιστικού σφάλματος.

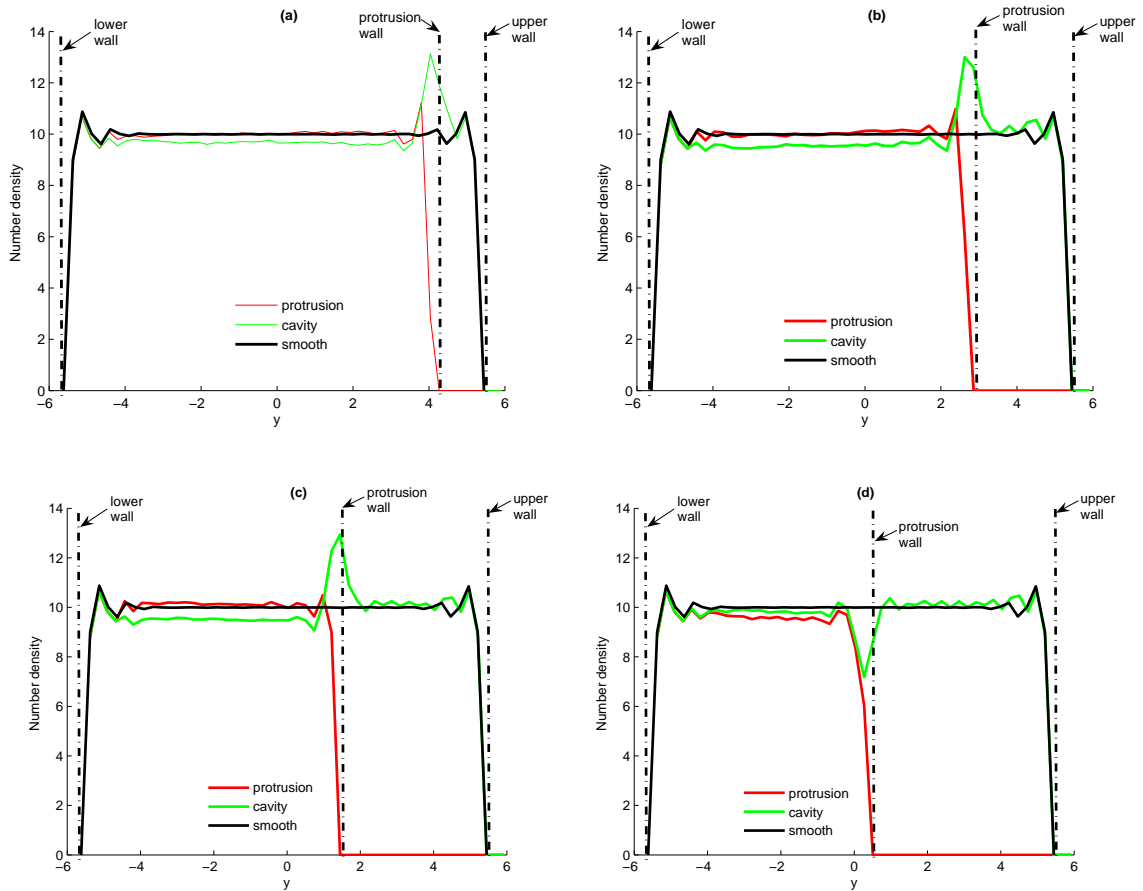
Στην περίπτωση των αγωγών με προεξοχές παρατηρείται ότι ενώ η συμπεριφορά της πυκνότητας κοντά στο όριο του κάτω τοίχου δεν επηρεάζεται σημαντικά για όλα τα μήκη και ύψη προεξοχής, η συμπεριφορά κοντά στον επάνω τοίχο παρουσιάζει ενδιαφέρον. Η εμφάνιση των σωματιδίων σε συγκεκριμένες θέσεις είναι παρόμοια για όλα τα μήκη προεξοχών, ενώ για τα ύψη διαφέρει ελαφρώς κυρίως σε μεγαλύτερα ύψη προεξοχής ($h=0.40H$). Η συμπεριφορά σε διατομές του αγωγού που βρίσκονται στις εσοχές διαφέρει από αυτή των προεξοχών της επάνω πλάκας.

Όσον αφορά την κατανομή της πυκνότητας σε διατομές του αγωγού που βρίσκονται μέσα στην εσοχή, παρατηρείται κοντά στο επάνω όριο του τοίχου κορυφή στην κατανομή της πυκνότητας σε απόσταση $0.44 r_c$ για όλα τα ύψη προεξοχής. Κοντά στον κάτω τοίχο παρατηρείται κορυφή στην ίδια απόσταση. Στο κάτω όριο της εσοχής η κατανομή της πυκνότητας για ύψη προεξοχής $h = 0.10H$, $h = 0.20H$ και $h = 0.30H$

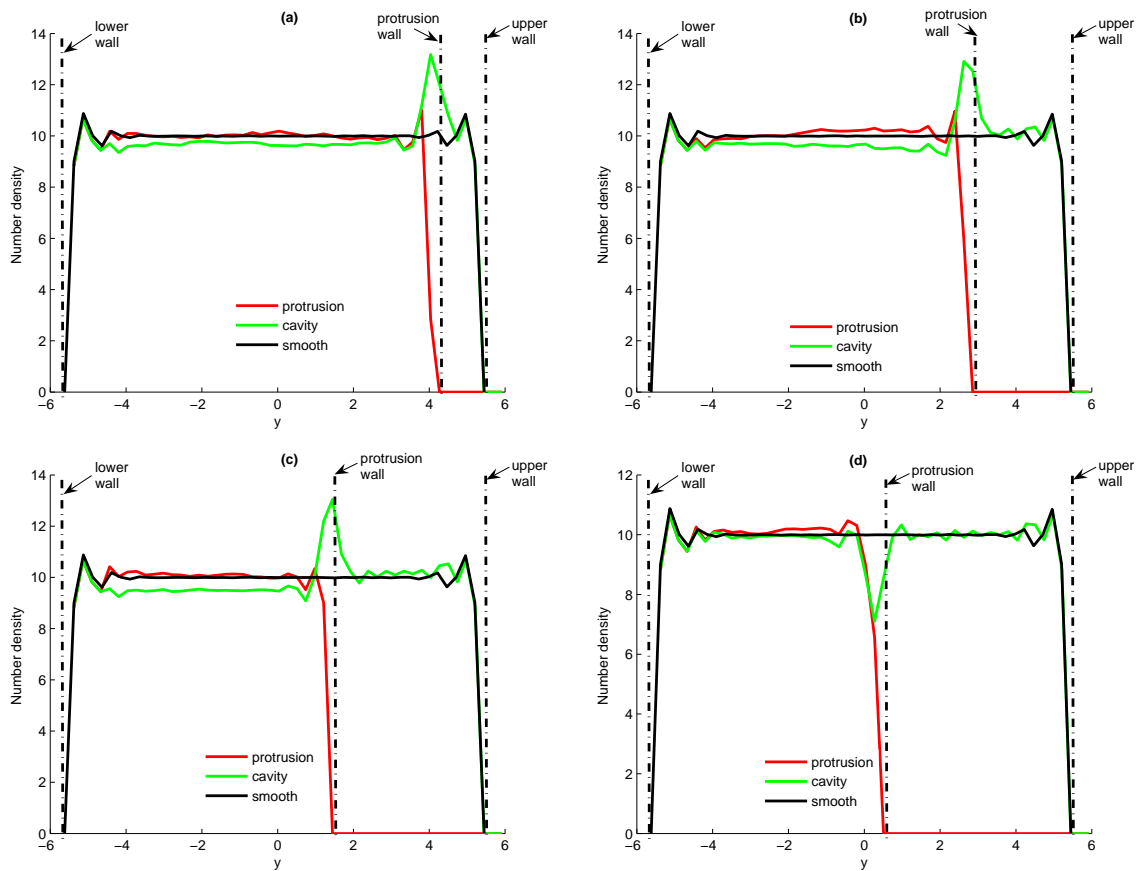
παρουσιάζει τοπικό μέγιστο και στην ίδια θέση τοπικό ελάχιστο για ύψος $h = 0.40H$. Η πυκνότητα είναι σταθερή στο κεντρικό τμήμα του αγωγού και μικρότερη από την αρχική της τιμή για ύψη $h = 0.10H$, $h = 0.20H$ και $h = 0.30H$, ενώ παραμένει ίση με την αρχική της τιμή για ύψος προεξοχής $h = 0.40H$.



Σχήμα 5.2. Διαγράμματα της πυκνότητας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για μήκος $l_{r1} = 0.5l_{tot}$ και ύψος : α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$ (το y είναι σε μονάδες r_c). Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα



Σχήμα 5.3. Διαγράμματα της πυκνότητας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για μήκος $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και ύψος : α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$ (το y είναι σε μονάδες r_c). Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα



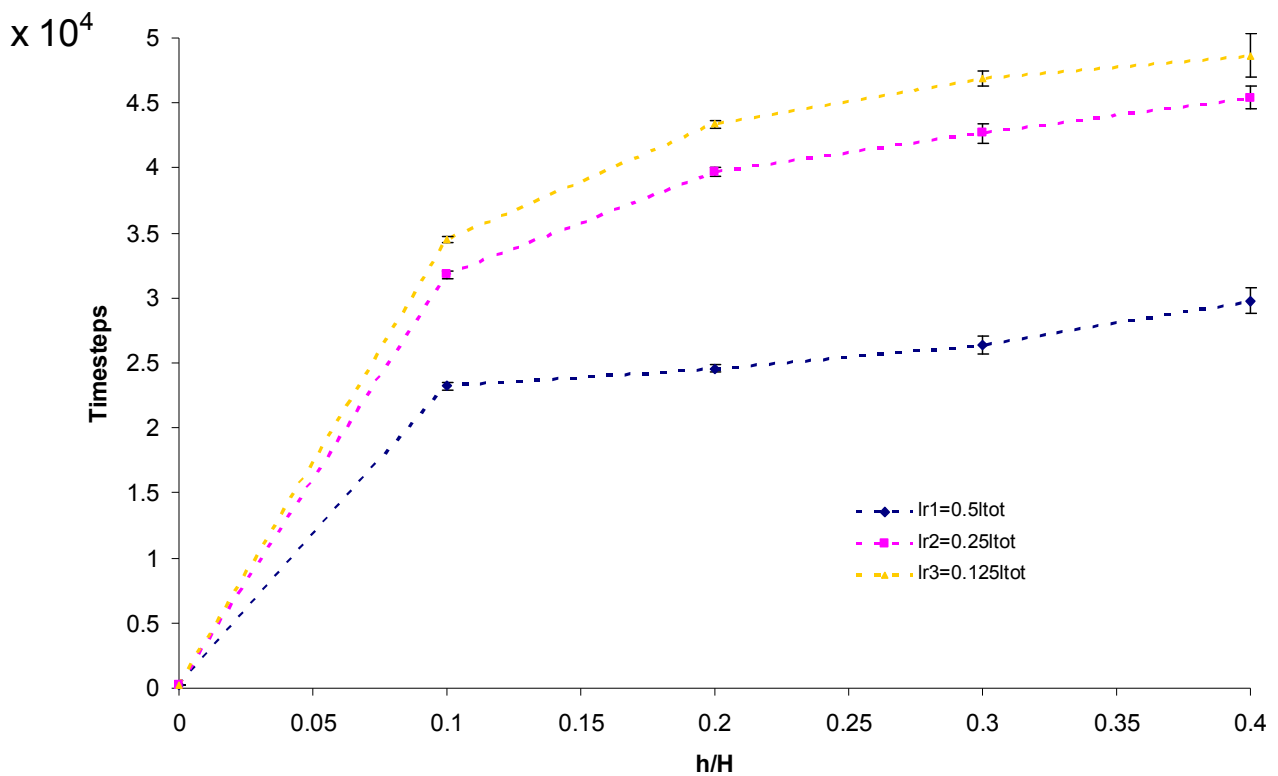
Σχήμα 5.4. Διαγράμματα της πυκνότητας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για μήκος $l_{r3} = 0.167l_{tot}$ και ύψος : α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$ (το y είναι σε μονάδες r_c) . Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα

Η συμπεριφορά της πυκνότητας σε διατομές του αγωγού που βρίσκονται σε προεξοχές της επάνω πλάκας παρουσιάζει ομοιότητες για όλα τα ύψη προεξοχής. Η πυκνότητα είναι σταθερή στο κεντρικό τμήμα του αγωγού και ίση με την αρχική της τιμή. Κοντά στον επάνω τοίχο παρατηρείται κορυφή στην κατανομή της πυκνότητας σε απόσταση $0.44r_c$ από το στερεό όριο της προεξοχής. Στον κάτω τοίχο παρατηρείται κορυφή στη ίδια απόσταση.

Η κατανομή των σωματιδίων ρευστού στις εσοχές, όπως περιγράφηκε παραπάνω, αποτελεί πιθανή ένδειξη παγίδευσης των σωματιδίων μέσα στις εσοχές του

επάνω τοίχου. Η υπόθεση αυτή επαληθεύεται με τον υπολογισμό του μέσου χρόνου παραμονής (Σχ5.5) των σωματιδίων μέσα στις εσοχές. Ο μέσος χρόνος παραμονής προσδιορίζεται από το πηλίκο του αθροίσματος του χρόνου παραμονής των σωματιδίων που εντοπίζονται μέσα στην εσοχή προς τον αριθμό των σωματιδίων. Οι υπολογισμοί του μέσου χρόνου παραμονής έγιναν σε πέντε χρονικά διαστήματα των 5×10^4 χρονικών βημάτων το καθένα (συνολικά $5 \times 5 \times 10^4 = 2.5 \times 10^5$ χρονικά βήματα) και η τιμή του μέσου χρόνου παραμονής παρέμεινε σταθερή στα πλαίσια του στατιστικού σφάλματος. Ο μέσος χρόνος παραμονής για το κεντρικό τμήμα είναι πρακτικά ο ίδιος για όλες τις περιπτώσεις αγωγών που μελετώνται εδώ (παρουσιάζονται ως σημείο $h=0H$ στο Σχ. 5.5). Όταν το μήκος των εσοχών μειώνεται και το ύψος τους αυξάνεται, ο μέσος χρόνος παραμονής των σωματιδίων στις εσοχές αυξάνεται. Ο χρόνος αυτός είναι αισθητά μεγαλύτερος από το χρόνο παραμονής στο κεντρικό τμήμα του αγωγού, γεγονός που αποδικνύει ότι τα σωματίδια ‘περνούν’ περισσότερο χρόνο στις εσοχές συγκριτικά με το χρόνο στο υπόλοιπο τμήμα του αγωγού.

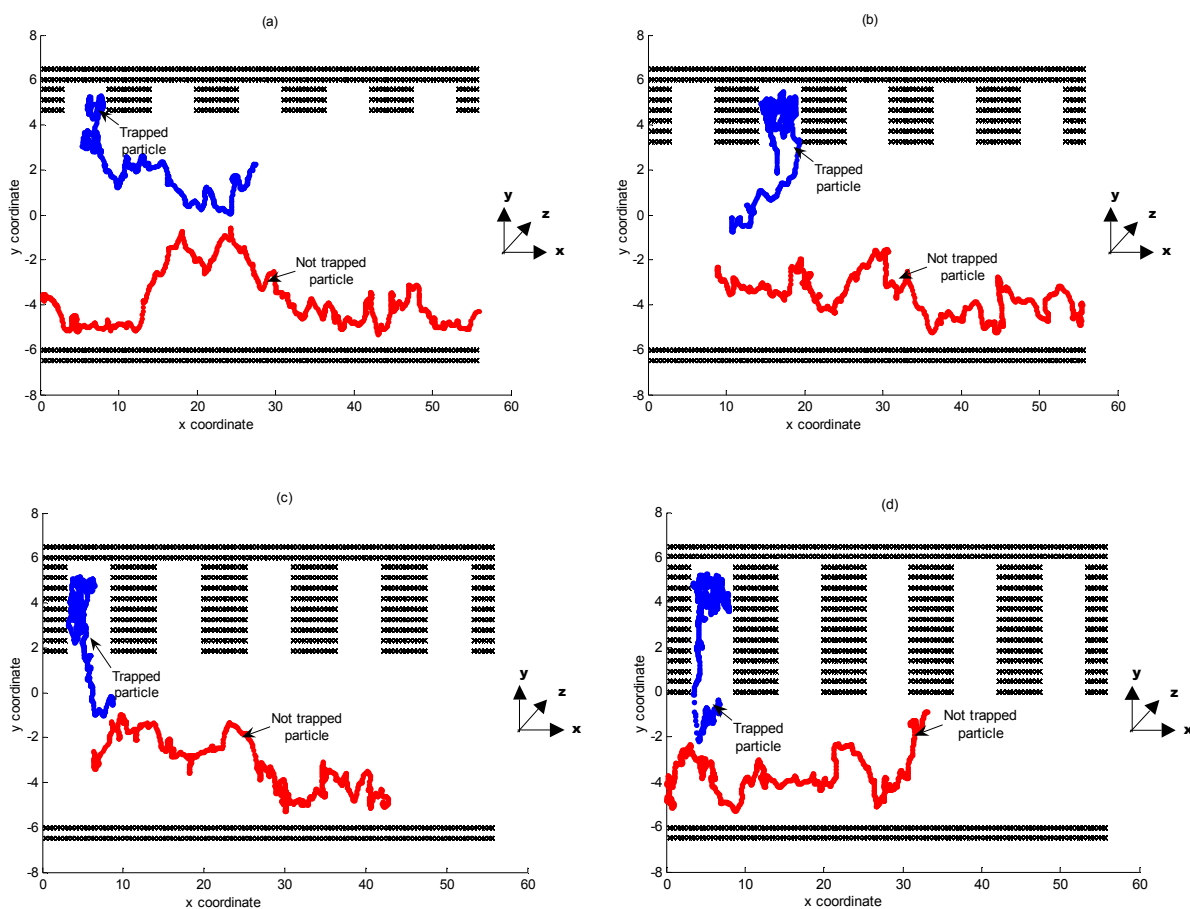
Η συμπεριφορά του μέσου χρόνου παραμονής συναρτήσει των γεωμετρικών χαρακτηριστικών της προεξοχής παρουσιάζει ομοιότητες για τους νανοαγωγούς και τους αγωγούς μεσοσκοπικής κλίμακας. Ειδικότερα, και στις δύο περιπτώσεις ροών, όσο οι εσοχές ‘στενεύουν’ και αυξάνουν σε ύψος, τόσο ο μέσος χρόνος αυξάνει. Αξίζει βέβαια να αναφερθεί ότι στην περίπτωση των αγωγών μεσοσκοπικής κλίμακας, είναι σημαντική και η επίδραση του μήκους παράλληλα με το ύψος, ενώ στους νανοαγωγούς κύριος παράγοντας για τη μεταβολή του μέσου χρόνου παραμονής φαίνεται ότι είναι το ύψος της προεξοχής..



Σχήμα 5.5. Μέσος χρόνος παραμονής των σωματιδίων μέσα στις εσοχές ως συνάρτηση του μήκους και του ύψους της εσοχής.

Χαρακτηριστικές τροχιές ενός παγιδευμένου και ενός ελεύθερα κινούμενου σωματιδίου αποδίδουν οπτικά τη συμπεριφορά που περιγράφηκε παραπάνω (Σχ. 5.6). Οι τροχιές παριστάνονται στο x-y επίπεδο για δεδομένο χρονικό διάστημα και για ενδεικτικά μήκη και ύψη προεξοχής. Στο σημείο αυτό πρέπει να τονισθεί ότι η χρονική διάρκεια της παρατήρησης είναι ενδεικτική και σε καμία περίπτωση δεν ταυτίζεται με τη συνολική διάρκεια της προσομοίωσης. Στην πραγματικότητα, μελετήθηκε η θέση των σωματιδίων για όλη τη διάρκεια της προσομοίωσης και διαπιστώθηκε ότι δεν υπάρχουν σωματίδια που παραμένουν μέσα στην εσοχή για όλο το χρονικό διάστημα. Συγκεκριμένα, σωματίδια που βρίσκονται αρχικά μέσα στην εσοχή εξέρχονται από αυτή μετά από κάποιο χρονικό διάστημα, που εξαρτάται από τα γεωμετρικά

χαρακτηριστικά της προεξοχής (μήκος και ύψος), και αντιθέτως άλλα σωματίδια που αρχικά βρίσκονται έξω από την εσοχή εισέρχονται μέσα στην εσοχή μετά από κάποια χρονικά βήματα, μένουν σε αυτή για κάποιο χρονικό διάστημα και στην συνέχεια εξέρχονται στο υπόλοιπο τμήμα του αγωγού. Η συμπεριφορά αυτή των σωματιδίων παρουσιάζει πολλές ομοιότητες με αυτή που περιγράφηκε στην ενότητα 4.2 και αφορά νανοαγωγούς με προεξοχές ποικίλου μήκους και ύψους.



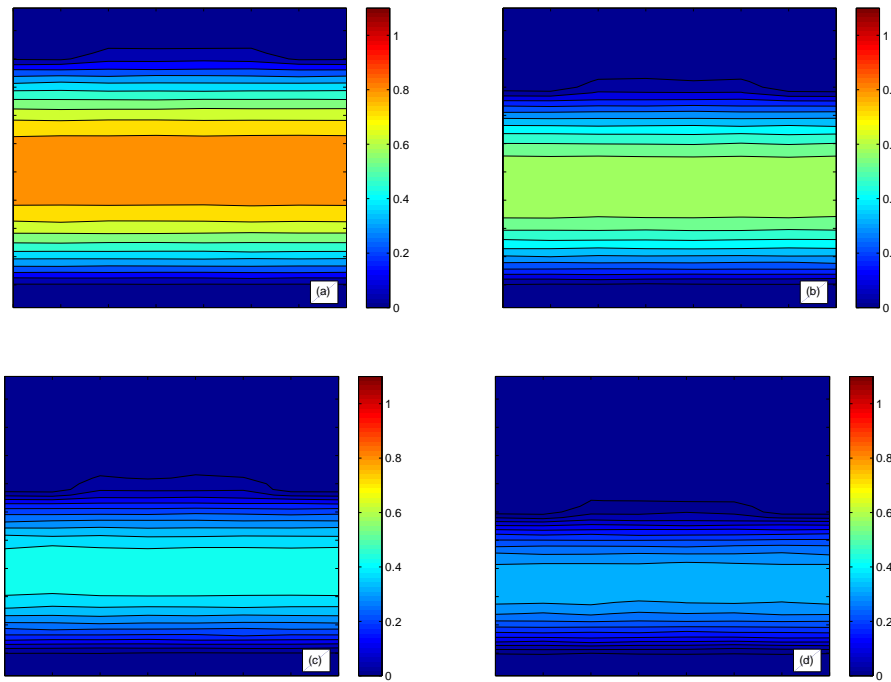
Σχήμα 5.6. Χαρακτηριστικές τροχιές ενός παγιδευμένου και ενός ελεύθερα κινούμενου σωματιδίου.

Με x αναπαρίσταται οι τοίχοι. α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$

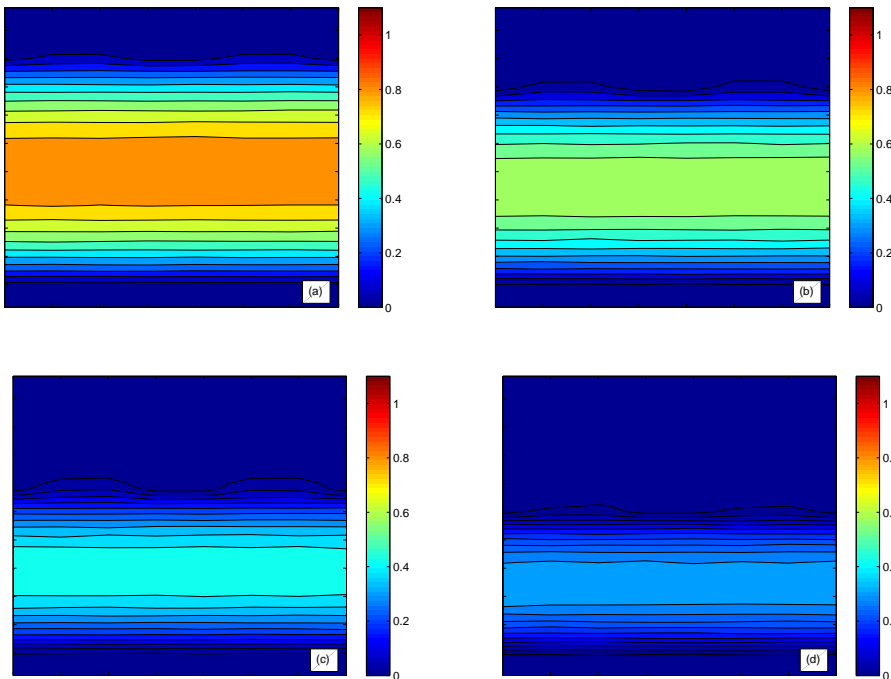
Συμπερασματικά, διαπιστώνεται ότι η πυκνότητα προδίδει παγίδευση των σωματιδίων και στην περίπτωση της μελέτης σε αγωγό μεσοσκοπικής κλίμακας για όλα τα μήκη και ύψη που μελετήθηκαν εδώ, συμπεριφορά ανάλογη με αυτή που περιγράφηκε στην περίπτωση του νανοαγωγού. Εκτιμάται ότι η παγίδευση των σωματιδίων θα επηρεάσει την κατανομή της ταχύτητας, της πίεσης και της θερμοκρασίας.

Κατανομή της ταχύτητας

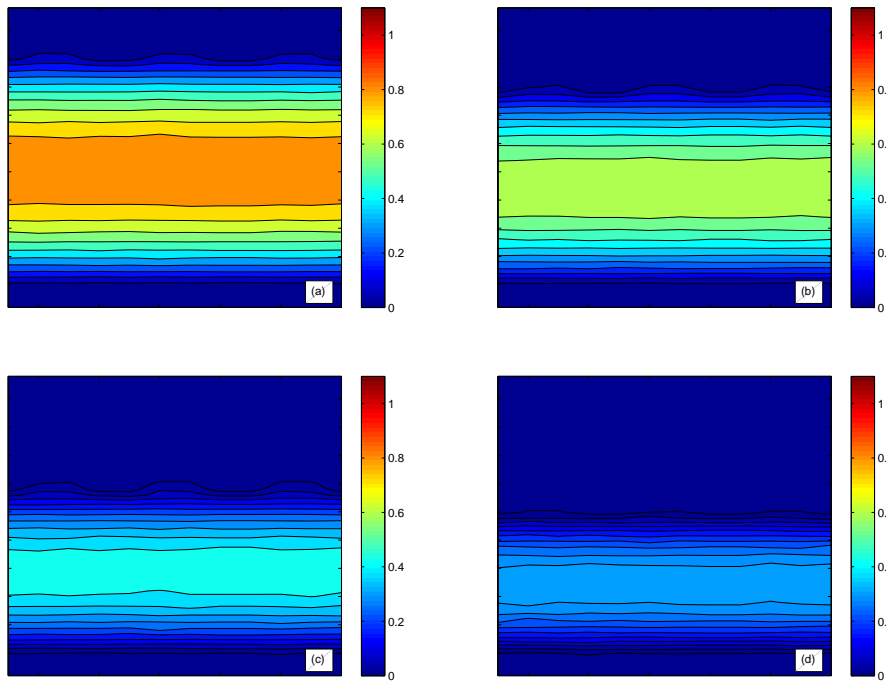
Οι ισοταχείς παρουσιάζονται στα Σχ5.7., 5.8, 5.9 ενώ οι κατανομές της μέσης ταχύτητας που προκύπτουν ως μέση τιμή σε στρώματα παράλληλα στη ροή για όλους τους αγωγούς με προεξοχές παρουσιάζονται στα Σχ5.10, 5.11, 5.12. Παρατηρείται συστηματική μείωση της ταχύτητας με την αύξηση του ύψους και τη μείωση του μήκους της προεξοχής. Η αύξηση του ύψους φαίνεται ότι αρχίζει να επηρεάζει τις τιμές της ταχύτητας και στην κάτω πλάκα του αγωγού κυρίως για τα μεγάλα ύψη των προεξοχών ($h = 0.30H$ και $h = 0.40H$). Σε όλες τις περιπτώσεις προεξοχών παρατηρείται 'συμπίεση' του διαγράμματος προς την κάτω πλάκα του αγωγού καθώς οι προεξοχές εισέρχονται στην περιοχή του ρευστού και το διαθέσιμο πλάτος του αγωγού μειώνεται.



Σχήμα 5.7. Ισοταχείς για μήκος προεξοχής $l_{r1} = 0.5l_{tot}$ α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$.

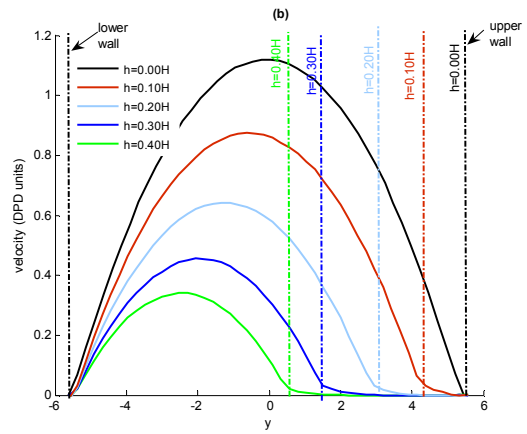
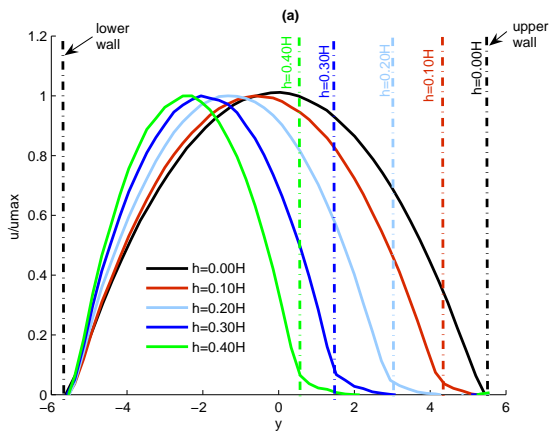


Σχήμα 5.8. Ισοταχείς για μήκος προεξοχής $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$.

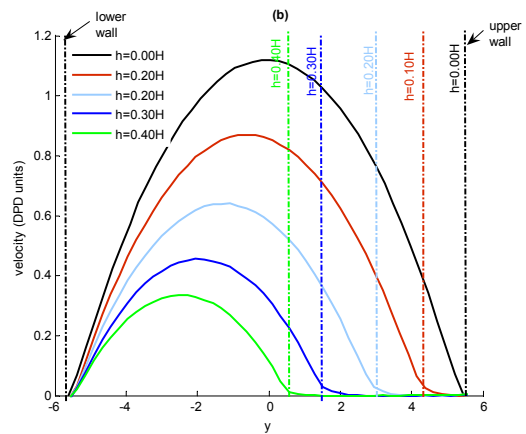
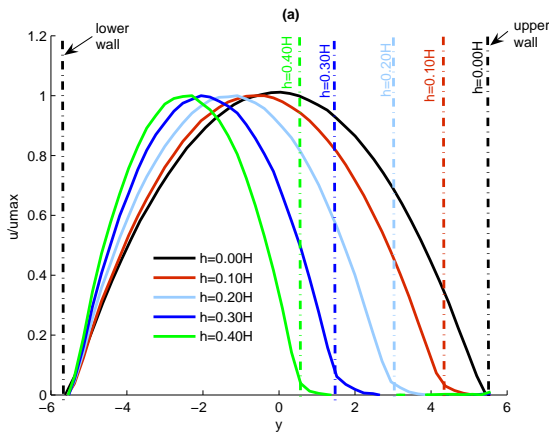


Σχήμα 5.9. Ισοταχείς για μήκος προεξοχής $l_{r3} = 0.167l_{tot}$ α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$.

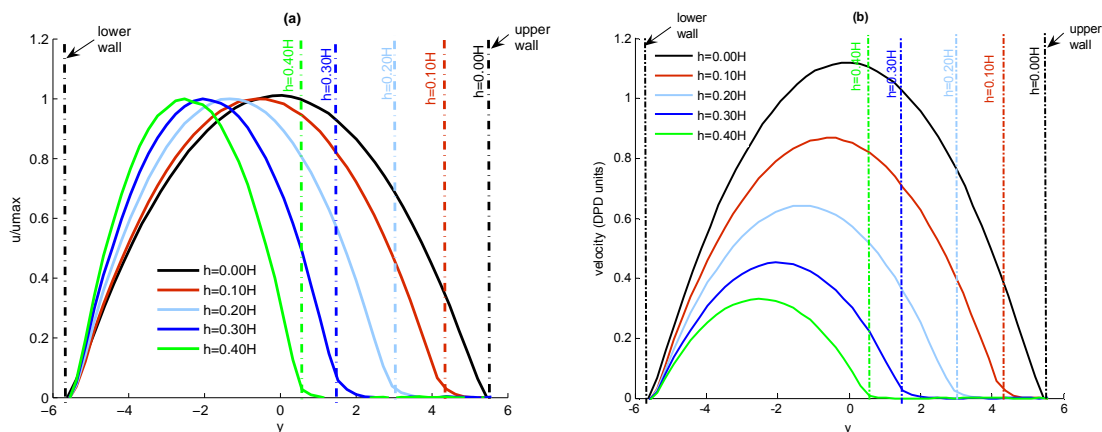
Μια πιο προσεκτική ματιά της μέσης ταχύτητας σε στρώματα παράλληλα στη ροή παρουσιάζει ενδιαφέροντα χαρακτηριστικά. Για την περίπτωση l_{r1} , οι τιμές της ταχύτητας για όλα τα ύψη προεξοχής είναι μικρότερες από αυτές του λείου αγωγού. Οι τιμές της ταχύτητας μέσα στις εσοχές είναι μικρές και μάλιστα μειώνονται με την αύξηση του ύψους για το ίδιο μήκος προεξοχής. Οι μικρές τιμές της ταχύτητας είναι αναμενόμενες εξαιτίας της αυξημένης συγκέντρωσης των σωματιδίων στις περιοχές αυτές όπως αποκαλύφθηκε από την ανάλυση της τοπικής πυκνότητας.



Σχήμα 5.10.α) Μέση $\frac{U}{U_{\max}}$ ταχύτητα και β) μέση ταχύτητα για $l_{r1} = 0.50l_{tot}$



Σχήμα 5.11.α) Μέση $\frac{U}{U_{\max}}$ ταχύτητα και β) μέση ταχύτητα για $l_{r2} = 0.25l_{tot}$.



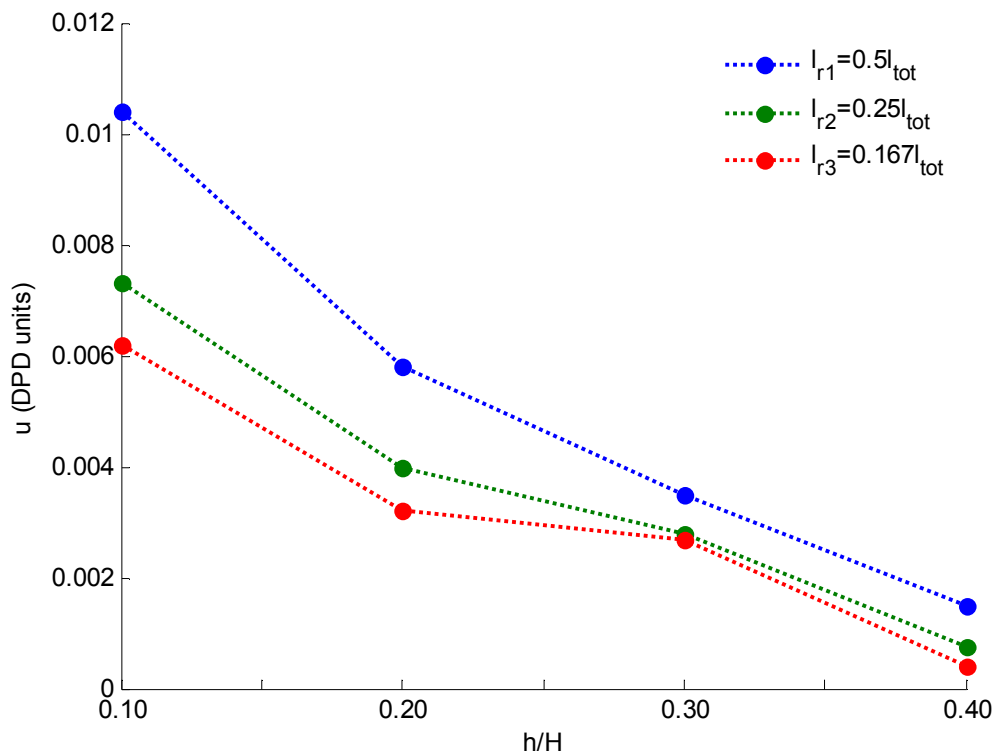
Σχήμα 5.12.α) Μέση $\frac{u}{u_{\max}}$ ταχύτητα και β) μέση ταχύτητα για $l_{r3} = 0.167l_{tot}$

Για την περίπτωση l_{r2} (Σχ5.11) η μέγιστη ταχύτητα στο κέντρο του αγωγού είναι λίγο μικρότερη από την περίπτωση l_{r1} για αντίστοιχα ύψη προεξοχής (διαφορά της τάξεως του 2%) και φυσικά μικρότερη από το λείο αγωγό. Οι τιμές της ταχύτητας μέσα στις εσοχές είναι μικρότερες από την περίπτωση l_{r1} για τα αντίστοιχα ύψη και φαίνεται ότι και σε αυτή την περίπτωση μειώνονται συστηματικά με την αύξηση του ύψους.

Όμοια συμπεριφορά παρατηρείται για την περίπτωση l_{r3} , όπου αφενός οι μέγιστες ταχύτητες είναι μικρότερες από αυτές της περίπτωσης l_{r2} και αφετέρου οι ταχύτητες μέσα στις εσοχές είναι αρκετά μικρές και μάλιστα μικρότερες από τις αντίστοιχες των περιπτώσεων l_{r1} και l_{r2}

Η υπόθεση για την εμφάνιση χαμηλών ταχυτήτων των σωματιδίων μέσα στις εσοχές επαληθεύεται με τον υπολογισμό της μέσης ταχύτητας των σωματιδίων μέσα στις εσοχές ως συνάρτηση του μήκους και του ύψους της προεξοχής (Σχ5.13). Η μέση ταχύτητα υπολογίζεται ως μέση τιμή της ταχύτητας για τα υπολογιστικά κελιά που

βρίσκονται μέσα στην εσοχή. Παρατηρείται ότι για όλα τα μήκη προεξοχής, η αύξηση του ύψους της προεξοχής συντελεί στην μείωση της ταχύτητας μέσα στις εσοχές υπό τις ίδιες φυσικά συνθήκες εξωτερικής δύναμης.



Σχήμα 5.13. Μέση ταχύτητα στις εσοχές ως συνάρτηση του μήκους και του ύψους της προεξοχής. (η μέση τιμή της ταχύτητας προσδιορίζεται από το μέσο όρο της ταχύτητας των υπολογιστικών καλιών που βρίσκονται μέσα στην εσοχή).

Ανακεφαλαιώνοντας, από την λεπτομερή διερεύνηση των κατανομών της ταχύτητας για όλα τα μήκη και ύψη προεξοχής διαπιστώνεται ότι η κατανομή δεν επηρεάζεται σημαντικά από την μεταβολή του μήκους (διαφορά της τάξεως του 2% με την μείωση του μήκους) ενώ αντίθετα αύξηση του ύψους οδηγεί σε συστηματική μείωση της ταχύτητας. Η διαμόρφωση προεξοχών στην επάνω πλάκα οδηγεί στην επιβράδυνση των σωματιδίων μέσα στις εσοχές. Ακόμη, καθώς οι προεξοχές

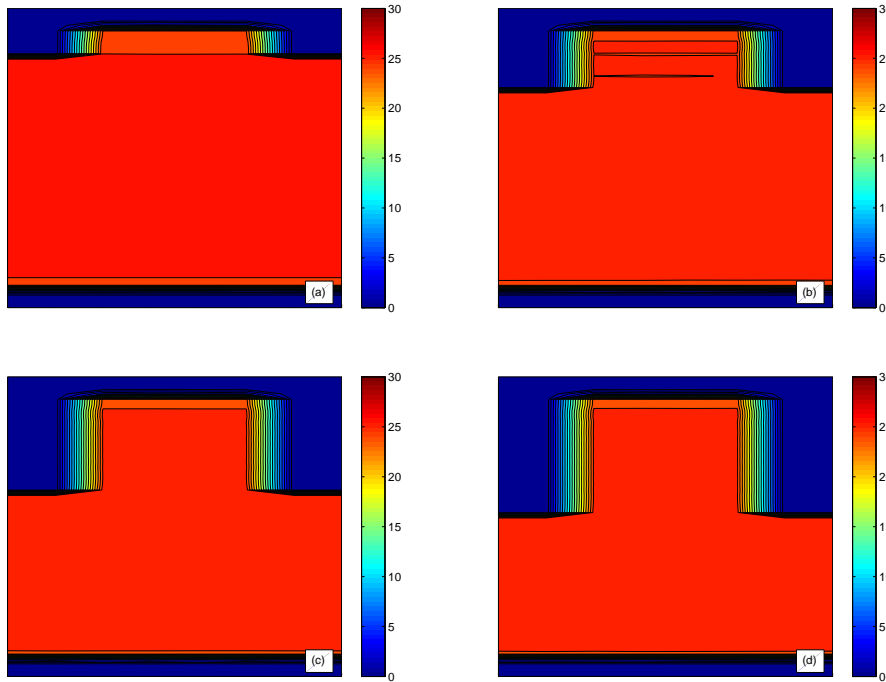
εισέρχονται στην περιοχή του ρευστού και το διαθέσιμο πλάτος του ρευστού μειώνεται παρατηρείται συμπίεση του διαγράμματος προς την κάτω πλάκα του αγωγού.

Πεδίο πίεσης

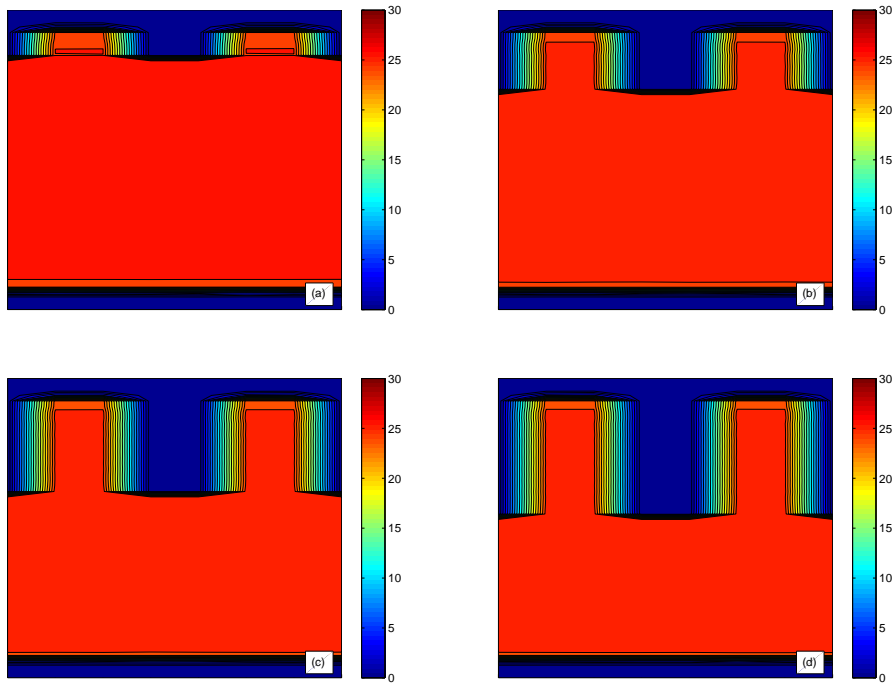
Στα Σχ. 5.14, 5.15, 5.16 παρουσιάζονται οι ισοβαρείς καμπύλες για όλα τα μήκη και ύψη προεξοχής. Είναι λογικό, σύμφωνα με την συμπεριφορά της πυκνότητας, η πίεση να παραμένει σταθερή στο κεντρικό τμήμα του αγωγού και να μειώνεται καθώς πλησιάζουμε προς το στερεό τοίχωμα. Είναι αξιοσημείωτο ότι η πίεση στο κεντρικό τμήμα του αγωγού δεν επηρεάζεται δραματικά από την μεταβολή του μήκους της προεξοχής καθώς παρατηρείται όμοια συμπεριφορά στα αντίστοιχα ύψη προεξοχής για διαφορετικά μήκη. Μέσα στις εσοχές η πίεση έχει ίδια τιμή με τη μέγιστη πίεση στο κεντρικό τμήμα του αγωγού. Η υψηλή τιμή της πίεσης στις περιοχές αυτές συνδέεται με την αυξημένη παρουσία των σωματιδίων που οδηγεί σε αυξημένες αλληλεπιδράσεις μεταξύ τους και συνεπώς σε αύξηση της πίεσης (σύμφωνα με τις Εξ.3.3 και 3.4). Ακόμη, η συμπεριφορά της πίεσης στην κάτω πλάκα δεν φαίνεται να επηρεάζεται από την εμφάνιση της προεξοχής, τουλάχιστον για τα ύψη που μελετήθηκαν στην παρούσα εργασία.

Μια πιο προσεκτική ματιά των ισοβαρών καμπύλων παρουσιάζει μερικά ενδιαφέροντα χαρακτηριστικά. Για την περίπτωση l_{r1} (Σχ5.14) παρατηρούμε ότι η αύξηση του ύψους της προεξοχής οδηγεί σε αύξηση του ύψους (κατά την γ-κατεύθυνση) των περιοχών υψηλής πίεσης που εντοπίζονται μέσα στις εσοχές. Ενδεικτικά αναφέρουμε ότι για ύψος προεξοχής $h = 0.10H$ η περιοχή υψηλής πίεσης

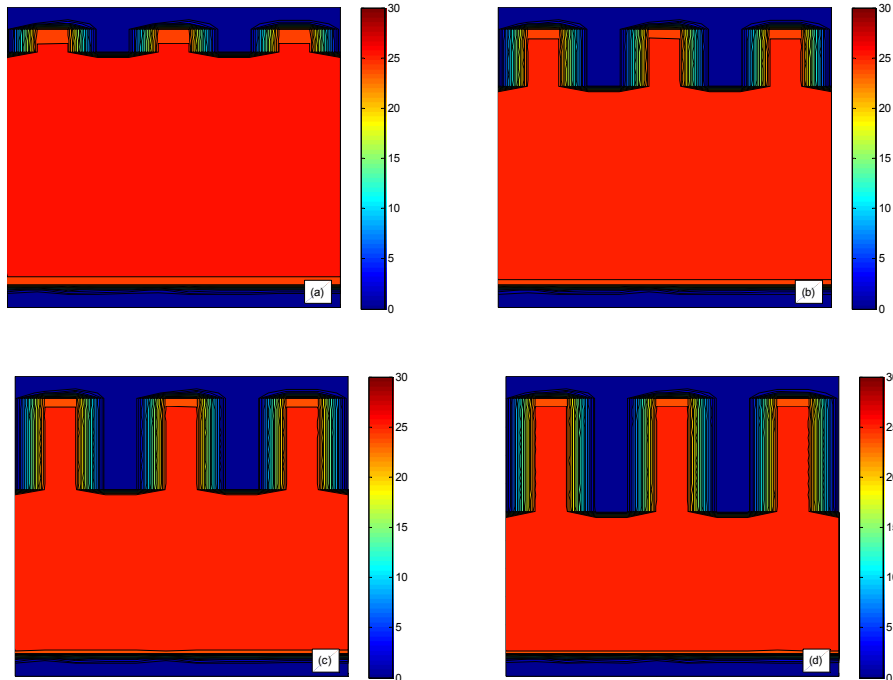
εντοπίζεται στο κατώτατο όριο της εσοχής, ενώ για ύψος $h = 0.40H$ η περιοχή υψηλής πίεσης καταλαμβάνει το 90% περίπου του ύψους της προεξοχής.



Σχήμα 5.14. Ισοβαρείς για μήκος προεξοχής $l_{r1} = 0.5l_{tot}$ α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$.



Σχήμα 5.15. Ισοβαρείς για μήκος προεξοχής $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$.



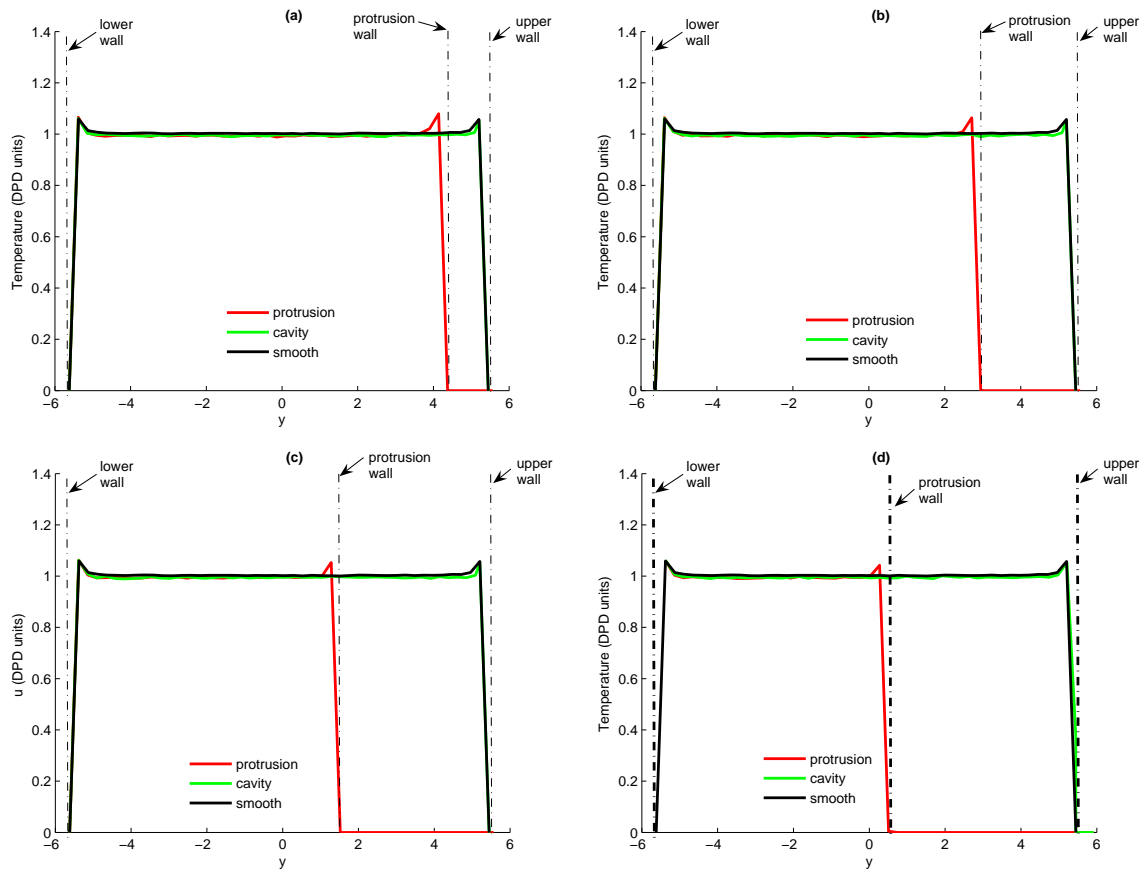
Σχήμα 5.16. Ισοβαρείς για μήκος προεξοχής $l_{r3} = 0.167l_{tot}$ α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$.

Για την περίπτωση l_{r2} (Σχ. 5.15) και την περίπτωση l_{r3} (Σχ. 5.16) η συμπεριφορά είναι παρόμοια με την περίπτωση l_{r1} . Και πάλι η αύξηση του ύψους της προεξοχής συνεπάγεται αύξηση του ύψους των περιοχών υψηλής πίεσης. Σύγκριση βέβαια των περιοχών αυτών για διαφορετικά μήκη προεξοχής οδηγεί στο συμπέρασμα ότι η μείωση του μήκους οδηγεί σε αύξηση του ύψους των περιοχών υψηλής πίεσης μέσα στις εσοχές. Για παράδειγμα, για ύψος προεξοχής $h = 0.10H$ (Σχ.5.14α, 5.15α, 5.16α) παρατηρείται ότι για μήκος l_{r1} το ύψος της περιοχής υψηλής πίεσης μέσα στην εσοχή είναι πολύ μικρό (κοντά στο κατώτατο όριο της εσοχής όπως ήδη αναφέρθηκε), για μήκος l_{r2} καταλαμβάνει το 25% του ύψους της προεξοχής και για μήκος l_{r3} καταλαμβάνει το 50% του ύψους της προεξοχής. Η διαφορά αυτή της περιοχής υψηλής πίεσης είναι τόσο περισσότερο αντιληπτή όσο μικρότερο είναι το ύψος της προεξοχής, ενώ για μεγαλύτερα ύψη φαίνεται ότι το ύψος των περιοχών υψηλής πίεσης είναι πολύ κοντά για όλα τα μήκη της προεξοχής.

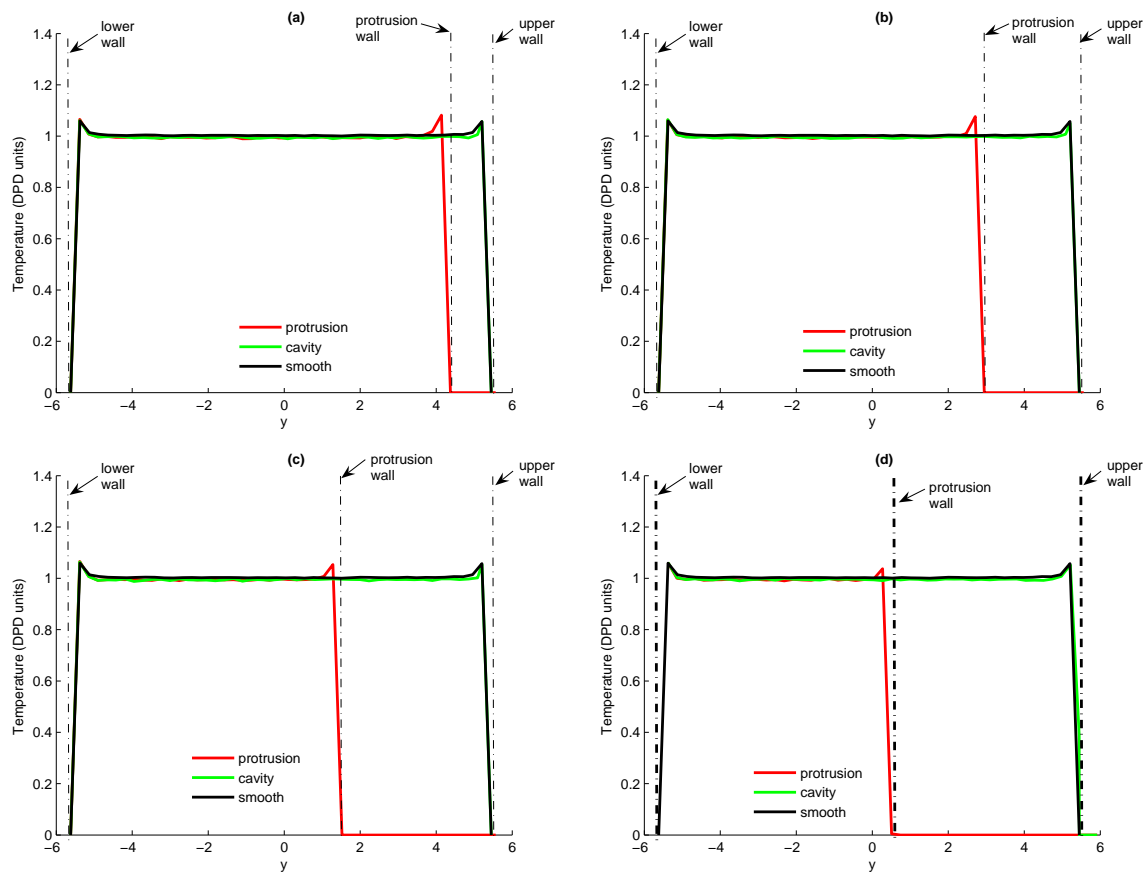
Ανακεφαλαιώνοντας, η κατανομή της πίεσης μπορεί να θεωρηθεί ως ο 'καθρέπτης' της κατανομής της πυκνότητας. Στις περιοχές υψηλής πυκνότητας εντοπίζονται περιοχές υψηλής πίεσης και στις περιοχές σταθερής πυκνότητας συναντώνται περιοχές σταθερής πίεσης. Παρατηρείται γενικότερα, ότι η πίεση παραμένει σταθερή στο κέντρο και μειώνεται καθώς πλησιάζουμε προς το στερεό τοίχωμα. Μέσα στις εσοχές εντοπίζονται περιοχές υψηλής πίεσης των οποίων το μέγεθος είναι σε άμεση συνάρτηση με το μήκος και το ύψος της προεξοχής. Τέλος, η συμπεριφορά της πίεσης στην κάτω πλάκα φαίνεται ότι δεν επηρεάζεται από την διαμόρφωση των προεξοχών στην επάνω πλάκα.

Κατανομή της θερμοκρασίας

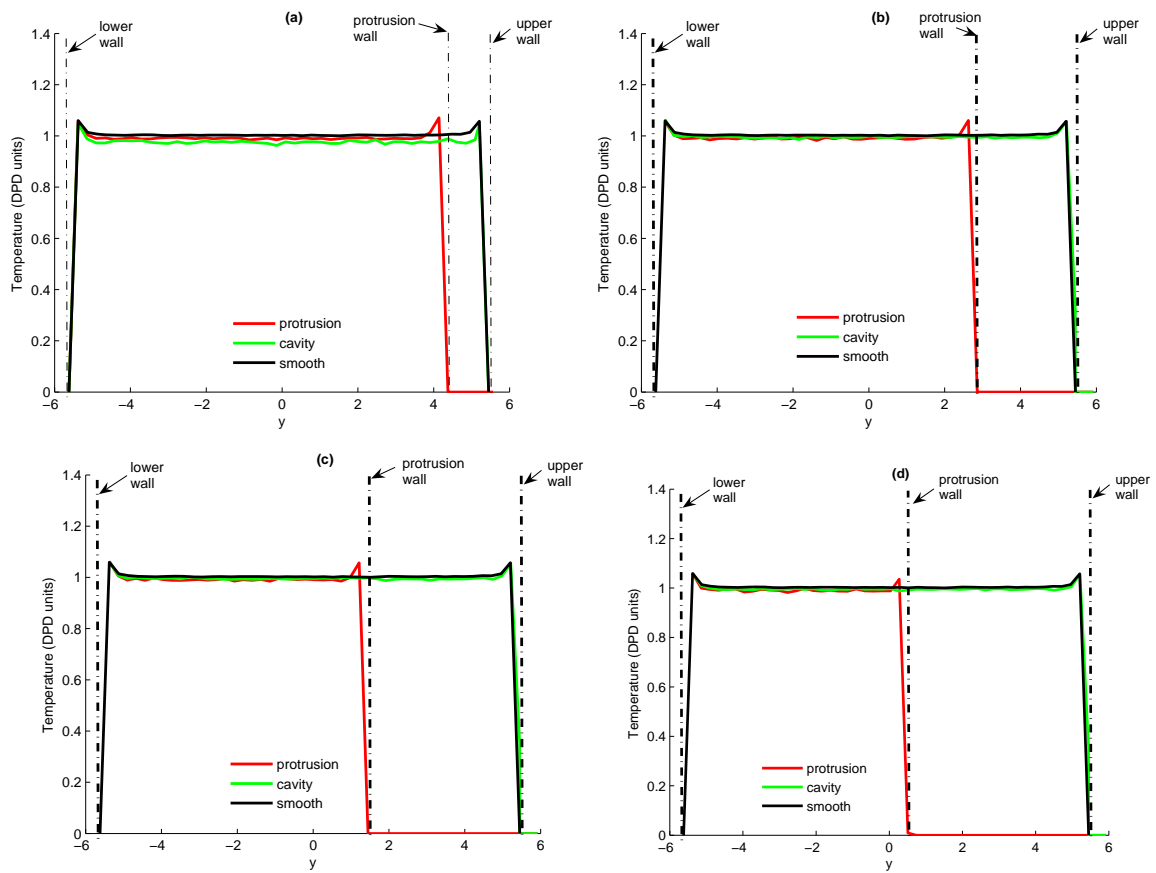
Στα Σχ5.17, 5.18, 5.19 παρουσιάζονται οι τοπικές κατανομές της θερμοκρασίας σε διατομές που βρίσκονται στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για όλα τα μήκη και ύψη προεξοχής. Η συμπεριφορά της θερμοκρασίας είναι παρόμοια για όλες τις περιπτώσεις προεξοχών. Η τιμή της θερμοκρασίας στο κεντρικό τμήμα του αγωγού παραμένει σταθερή και ίδια με αυτή του λείου αγωγού στα πλαίσια του στατιστικού σφάλματος. Αυτό βέβαια μας οδηγεί σε δύο πολύ σημαντικά συμπεράσματα. Αφενός ότι η τιμή της θερμοκρασίας δεν επηρεάζεται από τη διαμόρφωση προεξοχών στην επάνω πλάκα, τουλάχιστον για τα μήκη και ύψη προεξοχής που μελετήθηκαν στην παρούσα εργασία, και αφετέρου ότι η θερμοκρασία του συστήματος διατηρείται σταθερή και δεν απαιτείται η χρήση επιπλέον θερμοστάτη που να εξασφαλίζει σταθερή θερμοκρασία στο σύστημα μας. Αξίζει ακόμη να σημειωθεί ότι όπως ακριβώς και στην περίπτωση του λείου αγωγού, έτσι και στους αγωγούς με προεξοχές εντοπίζεται η εμφάνιση κορυφών κοντά στα στερεά τοιχώματα που πιθανότατα συνδέεται με τις κορυφές που συναντήθηκαν στην κατανομή της πυκνότητας. Οι κορυφές αυτές πιθανότατα οφείλονται στις αλληλεπιδράσεις των σωματιδίων τοίχου και ρευστού.



Σχήμα 5.17. Διαγράμματα της θερμοκρασίας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για μήκος $l_{r1} = 0.5l_{tot}$ και ύψος : α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$ (το y είναι σε μονάδες r_c) . Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα



Σχήμα 5.18. Διαγράμματα της θερμοκρασίας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για μήκος $l_{r2} = 0.25l_{tot}$ και ύψος : α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$ (το y είναι σε μονάδες r_c). Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα



Σχήμα 5.19. Διαγράμματα της θερμοκρασίας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής για μήκος $l_{r3} = 0.167l_{tot}$ και ύψος : α) $h = 0.10H$, β) $h = 0.20H$, γ) $h = 0.30H$ και δ) $h = 0.40H$ (το y είναι σε μονάδες r_c) . Οι κατακόρυφες γραμμές αναπαριστούν τα στερεά τοιχώματα

5.4 Συμπεράσματα για αγωγούς με περιοδικές προεξοχές υπό σταθερή εξωτερική δύναμη

Στην παρούσα ενότητα μελετήθηκε η μεσοσκοπική ροή σε αγωγούς με ορθογωνικές προεξοχές της επάνω πλάκας και διερευνήθηκε η επιρροή των γεωμετρικών παραμέτρων των ορθογωνικών προεξοχών στις μακροσκοπικές ιδιότητες της ροής (πυκνότητα, ταχύτητα, πίεση και θερμοκρασία) με τη χρήση της μεθόδου προσομοίωσης DPD.

Οι κατανομές της πυκνότητας παρουσιάζουν ομοιογένεια στο κεντρικό τμήμα του αγωγού και τιμή ίδια με αυτή του λείου αγωγού. Κοντά στα στερεά τοιχώματα εντοπίζονται κορυφές της πυκνότητας οι οποίες είναι αποτέλεσμα της αλληλεπίδρασης των σωματιδίων τοίχου και ρευστού. Οι τοπικές κατανομές της πυκνότητας αποδεικνύουν ότι τα σωματίδια του ρευστού τείνουν να ακινητοποιηθούν εσωτερικά των εσοχών. Όταν το μήκος των εσοχών μειώνεται και το ύψος τους αυξάνεται, ο μέσος χρόνος παραμονής των σωματιδίων στις εσοχές αυξάνεται.

Η ταχύτητα επηρεάζεται περισσότερο από την μεταβολή του ύψους και λιγότερο από τη μεταβολή του μήκους της προεξοχής. Η διαμόρφωση των προεξοχών στην επάνω πλάκα οδηγεί στην επιβράδυνση των σωματιδίων μέσα στις εσοχές. Όσο οι εσοχές 'στενεύουν' και μεγαλώνουν σε ύψος, τόσο η ταχύτητα των σωματιδίων στις περιοχές αυτές μειώνεται, μειώνοντας τη συνολική ταχύτητα μέσα στον αγωγό. Παρατηρείται ακόμη, μετατόπιση του διαγράμματος προς τον κάτω λείο τοίχο.

Η πίεση εν συνεχεία, εμφανίζει σταθερή τιμή στο κεντρικό τμήμα του αγωγού, και ίση με αυτή του λείου αγωγού στα πλαίσια του στατιστικού σφάλματος, και μειώνεται καθώς κινούμαστε προς τα στερεά τοιχώματα. Μέσα στις εσοχές εντοπίζονται περιοχές υψηλής πίεσης το μέγεθος των οποίων είναι συνάρτηση με το

μήκος και το ύψος της προεξοχής. Η εμφάνιση τους δικαιολογείται από την υψηλή συγκέντρωση των σωματιδίων όπως αποκαλύπτεται από την κατανομή της πυκνότητας.

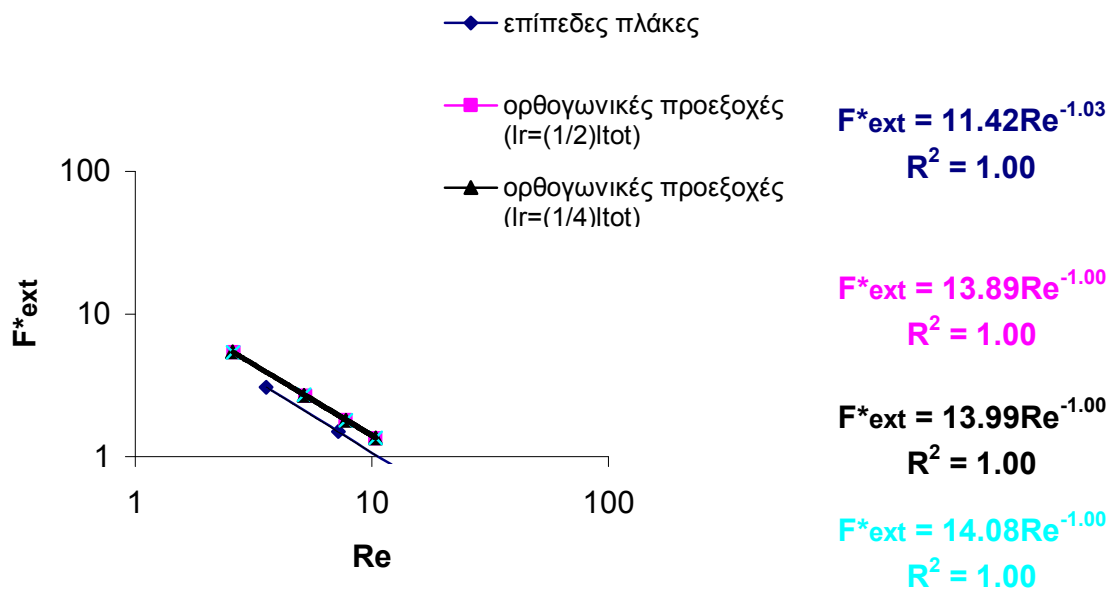
Η θερμοκρασία τέλος, παρουσιάζει σταθερή τιμή σε όλο σχεδόν το πλάτος του αγωγού πλην των περιοχών πολύ κοντά στους τοίχους όπου λογικό είναι να εμφανίζονται κορυφές εξαιτίας της αλληλεπίδρασης των σωματιδίων του τοίχου με τα σωματίδια του ρευστού. Η μέση τιμή της θερμοκρασίας στο κεντρικό τμήμα του αγωγού είναι ίση με την αρχική της τιμή στα πλαίσια του στατιστικού σφάλματος.

5.5 Μελέτη ροής για διάφορα μεγέθη της εξωτερικής δύναμης

Στην ενότητα αυτή μελετάται η επιρροή της εξωτερικής δύναμης σε αγωγούς ποικίλου μήκους και ύψους προεξοχής της επάνω πλάκας. Συγκεκριμένα, εφαρμόζονται τέσσερις διαφορετικές τιμές της εξωτερικής δύναμης ($F_{ext} = 0.01, 0.02, 0.03, 0.04$ DPD units) σε συνδυασμό με τρία διαφορετικά μήκη (l_{r1}, l_{r2}, l_{r3}) και τέσσερα ύψη προεξοχής ($h = 0.10H, h = 0.20H, h = 0.30H, h = 0.40H$). Η σύγκριση των διαφορετικών εφαρμογών γίνεται όπως και στο κεφ.4 με την αδιαστατοποίηση της κινούσας δύναμης συναρτήσει του αριθμού Re . Η αδιαστατοποίηση της δύναμης γίνεται με τον όρο $\frac{1}{2} \rho \bar{u} H L_z$ που έχει διαστάσεις δύναμης.

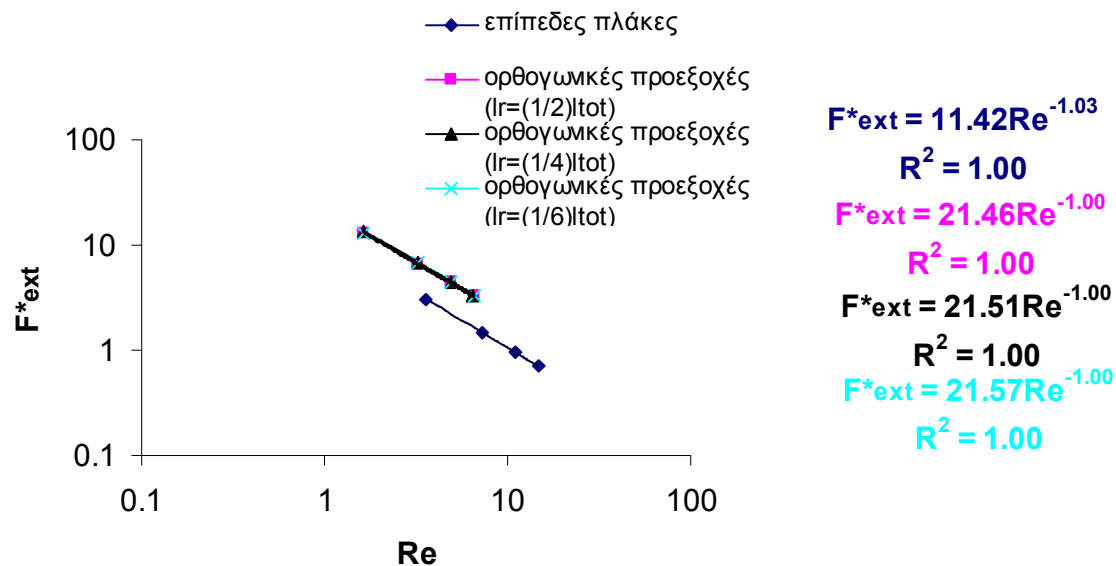
Στα Σχ. 5.20, 5.21, 5.22, 5.23 απεικονίζονται τα μεγέθη αυτά για ύψη προεξοχής $h = 0.10H, h = 0.20H, h = 0.30H, h = 0.40H$. Σύγκριση αυτών των διαγραμμάτων οδηγεί στο συμπέρασμα ότι η αύξηση του ύψους προεξοχής οδηγεί σε αύξηση της απαιτούμενης δύναμης ώστε να επιτευχθεί συγκεκριμένος αριθμός Re .

Κανάλι με ορθογωνικές προεξοχές - ύψος προεξοχής 10%

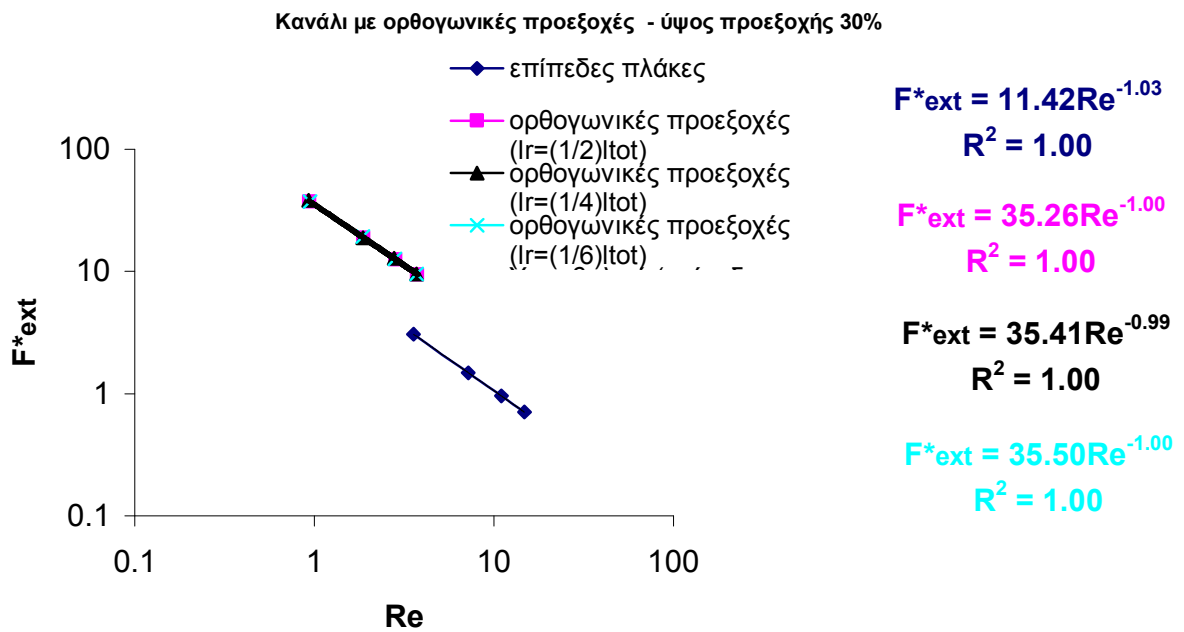


Σχήμα 5.20. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για ύψος προεξοχών $h = 0.10H$.

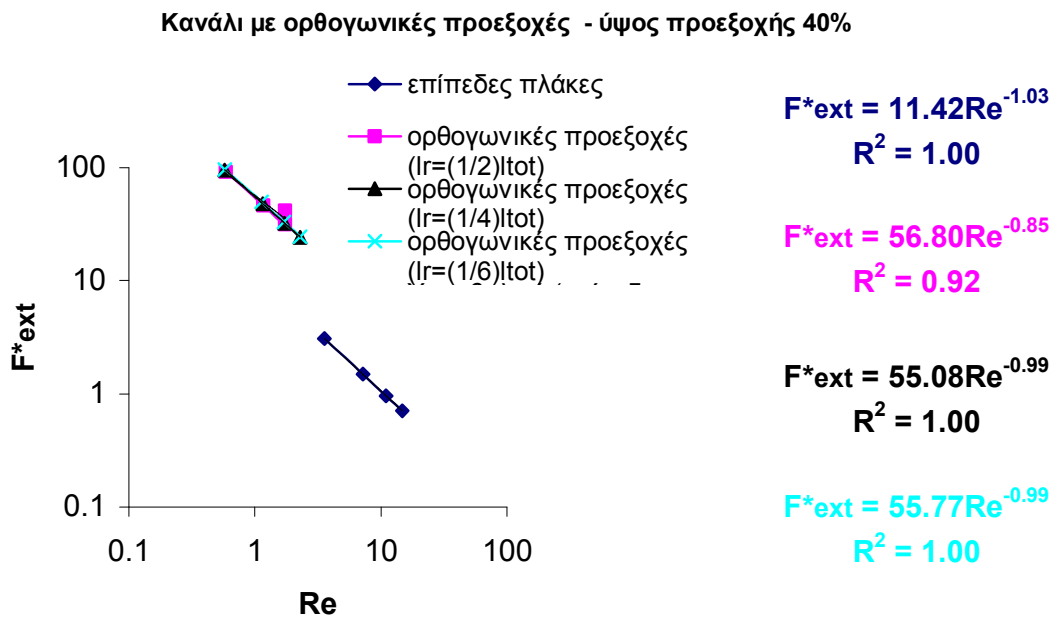
Κανάλι με ορθογωνικές προεξοχές - ύψος προεξοχής 20%



Σχήμα 5.21. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για ύψος προεξοχών $h = 0.20H$.

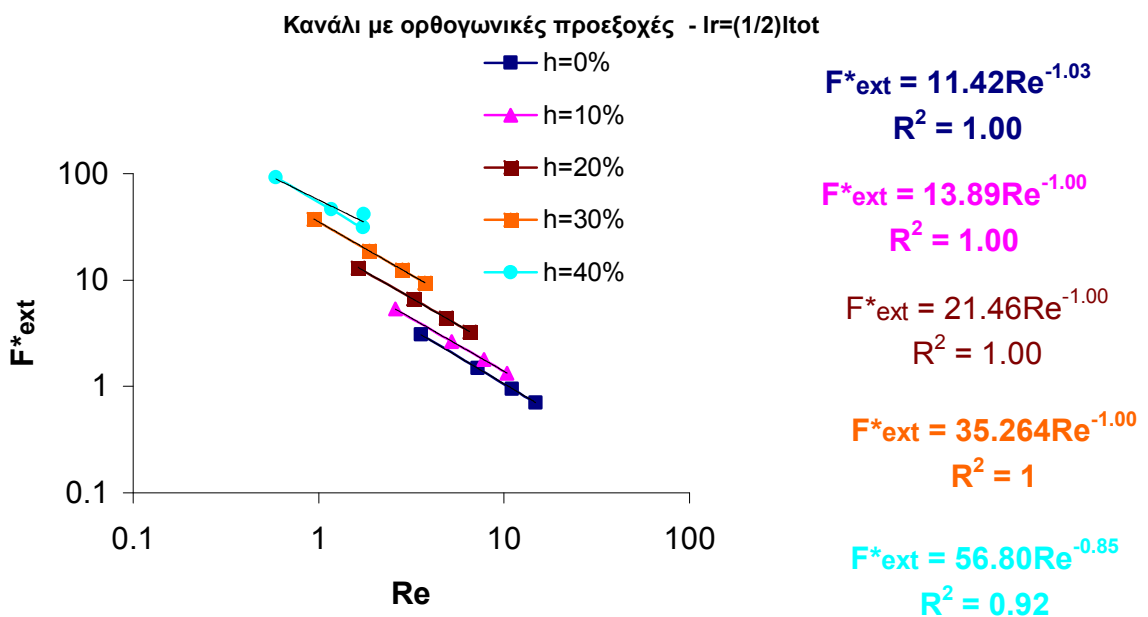


Σχήμα 5.22. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για ύψος προεξοχών $h = 0.30H$.

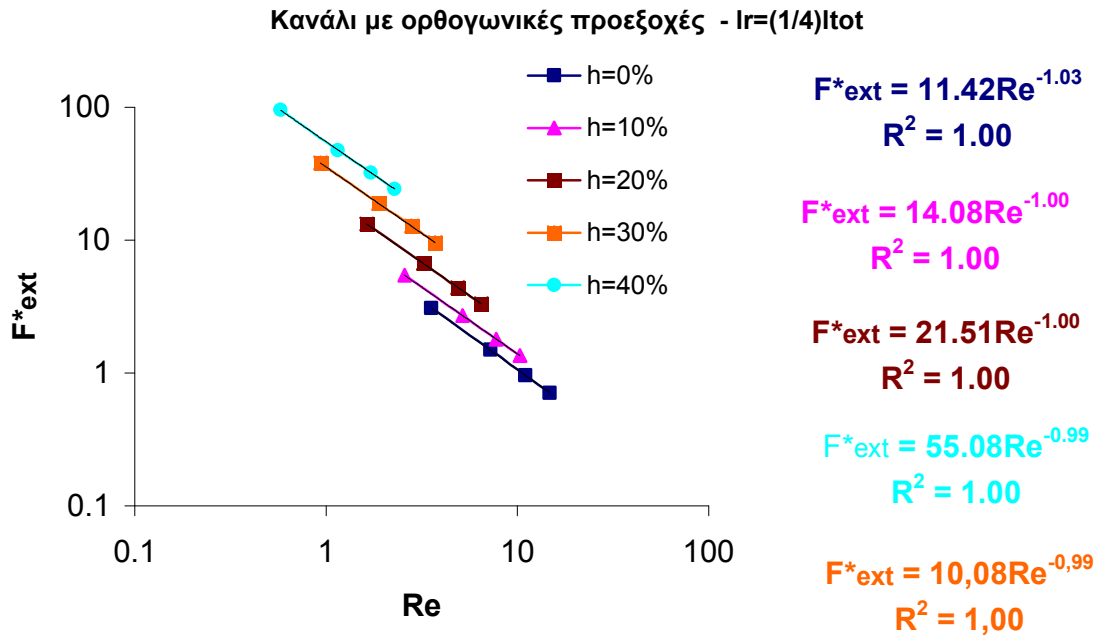


Σχήμα 5.23. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για ύψος προεξοχών $h = 0.40H$.

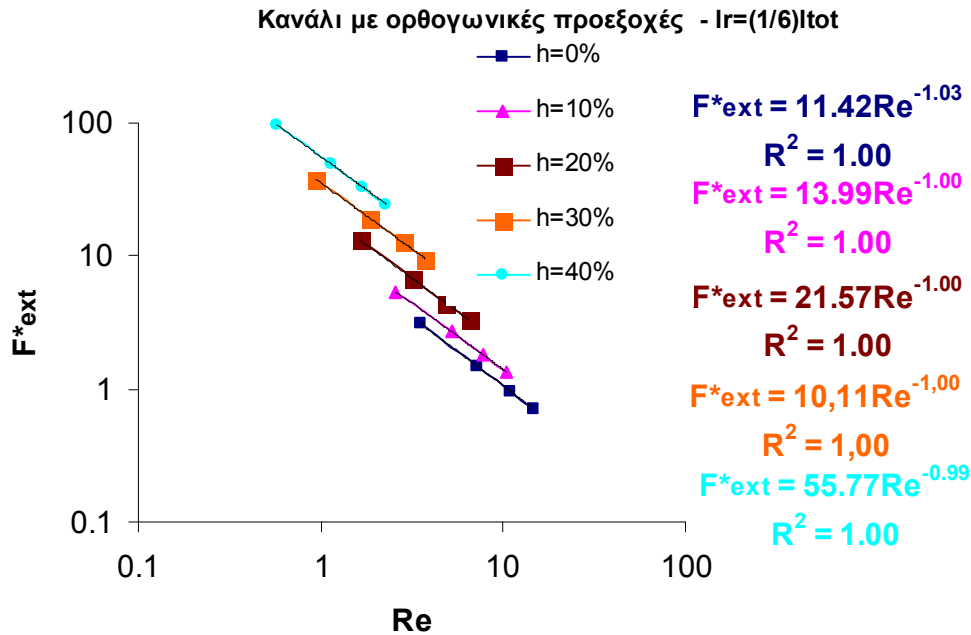
Στα Σχ5.24, 5.25, 5.26 απεικονίζεται η σύγκριση των μεγεθών της αδιαστατοποιημένης δύναμης συναρτήσει του αριθμού Re για όλα τα μήκη της προεξοχής. Είναι ευδιάκριτη η διαπίστωση που συζητήθηκε στην προηγούμενη παράγραφο ότι η αύξηση του ύψους προεξοχής συμβάλλει στην αύξηση της απαιτούμενης κινούσας δύναμης για όλα τα μήκη που μελετήθηκαν στην παρούσα εργασία. Πρέπει ακόμη να σημειωθεί ότι η σχέση της αδιαστατοποιημένης δύναμης συναρτήσει του αριθμού Re είναι γραμμική σε log-log κλίμακα για όλα τα μήκη και ύψη προεξοχής που μελετήθηκαν εδώ και μάλιστα είναι της μορφής $F_{ext}^* = \frac{A}{Re}$ (ο εκθέτης σε όλες σχεδόν τις σχέσεις μπορεί κατά προσέγγιση να θεωρηθεί μονάδα).



Σχήμα 5.24. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για μήκος προεξοχών $l_r = 0.50l_{tot}$.



Σχήμα 5.25. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για μήκος προεξοχών $lr_2 = 0.25l_{tot}$.



Σχήμα 5.26. Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για μήκος προεξοχών $lr_3 = 0.167l_{tot}$.

5.6 Συμπεράσματα

Τα σημαντικότερα συμπεράσματα που προκύπτουν από τη ροή σε αγωγούς μεσοσκοπικής κλίμακας με διαφορετικό μήκος και ύψος προεξοχής είναι τα εξής:

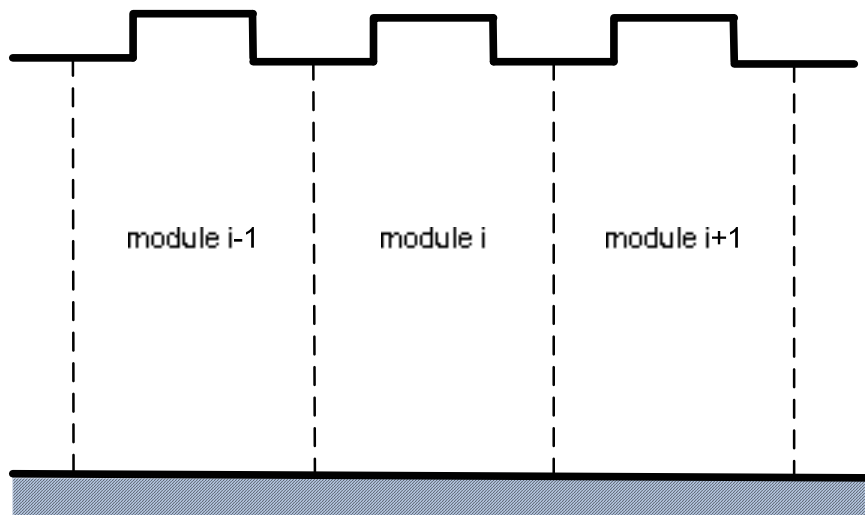
- Η πυκνότητα του ρευστού παραμένει σταθερή σε όλο σχεδόν το πλάτος του αγωγού και εμφανίζει κορυφές κοντά στα στερεά τοιχώματα και μέσα στις εσοχές.
- Η εμφάνιση των προεξοχών διαταράσσει τη ροή του ρευστού και οδηγεί στην παγίδευση των σωματιδίων μέσα στις εσοχές.
- Όσο μειώνεται το μήκος και αυξάνεται το ύψος των προεξοχών, τόσο ο μέσος χρόνος παραμονής των σωματιδίων στις εσοχές αυξάνεται και η ταχύτητα στις εσοχές μειώνεται.
- Η θερμοκρασία και η πίεση παραμένουν σταθερές μακριά από τα τοιχώματα του αγωγού.
- Η αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη είναι συνάρτηση του αδιαστατοποιημένου ύψους της προεξοχής, του αδιαστατοποιημένου μήκους προεξοχής και του αριθμού Re .
- Η αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη μειώνεται με την αύξηση του αριθμού Re , με την μείωση του αδιαστατοποιημένου μήκους και την αύξηση του αδιαστατοποιημένου ύψους της προεξοχής.

6. ΑΓΩΓΟΙ ΜΕ ΠΕΡΙΟΔΙΚΕΣ ΟΡΘΟΓΩΝΙΚΕΣ ΠΡΟΕΞΟΧΕΣ: ΜΑΚΡΟ-ΚΛΙΜΑΚΑ

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζεται η μεθοδολογία και ερμηνεύονται τα αποτελέσματα της προσομοίωσης ροών σε αγωγούς μακροσκοπικής κλίμακας με περιοδικές προεξοχές. Αρχικά, παρουσιάζεται το φυσικό και το μαθηματικό μοντέλο. Δίνονται λεπτομέρειες για τον τρόπο διαμόρφωσης του πλέγματος του προβλήματος, τις φυσικές ιδιότητες του ρευστού και τις οριακές συνθήκες του προβλήματος. Παρουσιάζονται στη συνέχεια τα αποτελέσματα της ταχύτητας και της πίεσης για δύο αριθμούς Re . Στο τέλος του κεφαλαίου δίδεται το γράφημα της επίδρασης της αδιαστατοποιημένης κινούσας δύναμης (διαφορά πίεσης ανάμεσα στην είσοδο και την έξοδο του υπολογιστικού φατνίου) στην μεταβολή του αριθμού Re και συνοψίζονται τα συμπεράσματα της μελέτης.

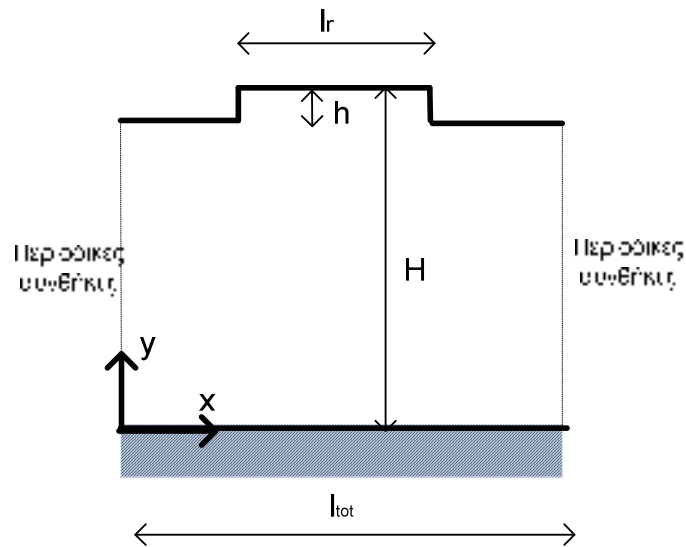
6.1 Περιγραφή του συστήματος προσομοίωσης

Μελετήθηκε η μόνιμη πλήρως ανεπτυγμένη στρωτή ροή μεταξύ ακίνητων οριζόντιων πλακών που απέχουν μεταξύ τους απόσταση H . Η κάτω πλάκα του αγωγού είναι επίπεδη ενώ η επάνω πλάκα χαρακτηρίζεται από την ύπαρξη περιοδικών ορθογωνικών προεξοχών (Σχ. 6.1). Η ακριβής διατομή και οι διαστάσεις των περιοδικών προεξοχών της επάνω πλάκας επεξηγείται αναλυτικότερα στο Σχ.6.2. Το ύψος της προεξοχής είναι ίσο με 10% του πλάτους του αγωγού, ενώ το μήκος της προεξοχής είναι ίσο με το μισό μήκος του υπολογιστικού μας φατνίου ($l_r = 0.5l_{tot}$, $h = 0.1H$).



Σχήμα 6.1. Υπό μελέτη σύστημα για πλάκες με ορθογωνικές προεξοχές. Ορισμός υπολογιστικού φατνίου με το επίπεδο περιοδικότητας στο κέντρο της προεξοχής

Το ρευστό είναι νευτόνιο με σταθερή πυκνότητα και σταθερό δυναμικό ιξώδες. Η θερμοκρασία του συστήματος είναι σταθερή και ίση με 25°C . Το ρευστό είναι υποθετικό και οι φυσικές του παράμετροι (πυκνότητα, δυναμικό ιξώδες) καθορίζονται με βάση την τιμή του αριθμού Re που θέλουμε να προσεγγίσουμε στην προσομοίωση μας ώστε να είναι δυνατή στη συνέχεια η σύγκριση με τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων με τη μέθοδο DPD που παρουσιάστηκαν στα κεφάλαια 4 και 5.



Σχήμα 6.2. Σχηματική άποψη του υπό μελέτη αγωγού

6.2 Μαθηματικό Μοντέλο

Είναι γνωστό ότι η ασυμπίεστη ροή με σταθερό συντελεστή συνεκτικότητας, μ , μπορεί να μελετηθεί με την χρήση των εξισώσεων διατήρησης της μάζας και της ορμής, χωρίς τη χρήση της εξίσωσης διατήρησης της ενέργειας [Λιακόπουλος, 2009]. Η γενικότερη αριθμητική έκφραση της εξίσωσης της συνέχειας (διατήρηση της μάζας) αποδίδεται ως ακολούθως:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U}) = 0 \quad (6.1)$$

όπου ρ είναι η πυκνότητα του υγρού ($M L^{-3}$) και \vec{U} το διάνυσμα της ταχύτητας (LT^{-1})

Σε ορθογώνιες καρτεσιανές συντεταγμένες η αναλυτική έκφραση της εξίσωσης (6.1) είναι:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (6.2)$$

Η εξίσωση της ορμής εκφράζει τον δεύτερο νόμο του Νεύτωνα όπου η συνισταμένη δύναμη ανά μονάδα μάζας αναλύεται σε δυνάμεις λόγω βαρύτητας, πίεσης και συνεκτικότητας. Η γενικότερη αριθμητική της έκφραση αποδίδεται ως ακολούθως:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U} \otimes \vec{U}) = \nabla \cdot \left(-p \delta + \mu (\nabla \vec{U} + (\nabla \vec{U})^T) \right) \quad (6.3)$$

όπου ρ είναι η πυκνότητα του υγρού ($M L^{-3}$), p είναι η πίεση του υγρού ($M L^{-1} T^{-2}$), \vec{U} το διάνυσμα της ταχύτητας ($L T^{-1}$). (Οι διαστάσεις όλων των παραμέτρων δίνονται συναρτήσει των θεμελιώδων μεγεθών του μήκους (L), της μάζας (M) και του χρόνου (T)).

Η αντικατάσταση των αντίστοιχων όρων της εξίσωσης μας δίνει τις εξισώσεις Navier-Stokes οι οποίες για την περίπτωση των ορθογώνιων καρτεσιανών συντεταγμένων γίνονται αντίστοιχα:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{V} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \right] \quad (6.4)$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{V} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right] \quad (6.5)$$

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = \rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(2 \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{V} \right) \right] \quad (6.6)$$

Εάν ρ =σταθερό και μ = σταθερό οι εξισώσεις (6.4) , (6.5) και (6.6) διαμορφώνονται ως εξής:

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) = \rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \quad (6.7)$$

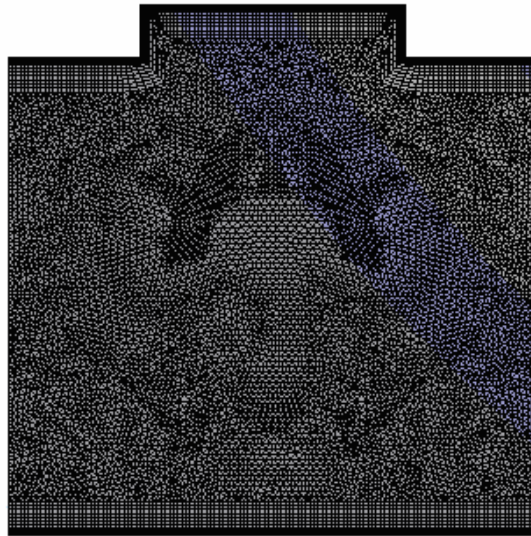
$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) = \rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \quad (6.8)$$

$$\rho \left(\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) = \rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right). \quad (6.9)$$

6.3 Αριθμητικό πλέγμα προσομοίωσης

Η γεωμετρία του αγωγού διακριτοποιείται με ένα δισδιάστατο πλέγμα με τη διαμόρφωση πρισμάτων κοντά στα στερεά τοιχώματα και τετραπλεύρων στο εσωτερικό του αγωγού. Η επιλογή των διαστάσεων των τετραπλεύρων έγινε με τέτοιο τρόπο, ώστε η διάσταση του στοιχείου να είναι μικρότερη από το 5% της μέγιστης διάστασης του υπό μελέτη υπολογιστικού φατνίου (για την περίπτωση μας η απόσταση μεταξύ των πλακών). Η επιλογή του ύψους των πρισμάτων έγινε με στόχο την ομαλή μετάβαση από τα πρίσματα στα τετράπλευρα κατά τη διαμόρφωση του πλέγματος ώστε να αποφευχθεί η δημιουργία ασυνεχειών στη διαμόρφωση του αριθμητικού πλέγματος και η αστάθεια στη λύση. Συνολικά χρησιμοποιήθηκαν 17.792 τετράπλευρα και 1.354

πρίσματα. Το ύψος των πρισμάτων επελέγη ίσο με 0.001 m για το πρίσμα που συνορεύει με το στερεό τοίχωμα και αναλογία ύψους των υπόλοιπων πρισμάτων ίση προς 1.25. Η διάσταση τετραπλεύρων επελέγη ίση προς 0.01 m. Το υπολογιστικό φαντίο χρησιμοποιήθηκε ακόμη, στην εργασία της [Κασιτεροπούλου, 2007] για τη μελέτη ροών υψηλού αριθμού Re και σε αυτό το λόγο αποδίδεται ο μεγάλος αριθμός των στοιχείων του πλέγματος. Η ανάγκη για υψηλή ανάλυση των λεπτών οριακών στρωμάτων της ταχύτητας κοντά στα σημεία απότομης μεταβολής της γεωμετρίας οδηγούν στη χρήση πολύ μικρών αποστάσεων του πρώτου σημείου του πλέγματος από τον τοίχο και την επιλογή μικρού ύψους του πρισματος. Η διαμόρφωση του πλέγματος προσομοίωσης παρουσιάζεται στο Σχ. 6.3.



Σχήμα 6.3. Υπό μελέτη σύστημα για πλάκες με ορθογωνικές προεξοχές. Διαμόρφωση πλέγματος με το επίπεδο περιοδικότητας στο κέντρο της προεξοχής

6.4 Αριθμητική επίλυση

Το πρόγραμμα που χρησιμοποιείται στην προσομοίωση είναι το ANSYS CFX . Η επίλυση γίνεται με την χρήση πεπερασμένων όγκων που προκύπτουν με τον καθορισμό του αριθμητικού πλέγματος. Στην πραγματικότητα πρόκειται για την εφαρμογή ενός βασικού νόμου για παράδειγμα της μάζας ή της ορμής σε κάθε όγκο ελέγχου. Αυτές οι ολοκληρωτικές εξισώσεις μετατρέπονται σε ένα σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων με την παραγωγή ενός συνόλου προσεγγίσεων για τους όρους των αντίστοιχων εξισώσεων.

Ο υπολογισμός των μεταβλητών του συστήματος γίνεται στους κόμβους του πλέγματος. Ωστόσο κάποιοι όροι στις εξισώσεις απαιτούν την επίλυση ή την αντίστοιχη κλίση της στα σημεία της ολοκλήρωσης. Γι' αυτό το λόγο είναι απαραίτητος ο υπολογισμός κάποιας μεταβλητής στο εσωτερικό του στοιχείου. Η ανάγκη αυτή οδηγεί στην χρήση και πεπερασμένων στοιχείων στους πεπερασμένους όγκους με την βοήθεια των εξισώσεων μορφής (shape functions). Για παράδειγμα η τιμή μιας μεταβλητής με την χρήση των εξισώσεων μορφής ορίζεται από την σχέση

$$\phi = \sum_{i=1}^{N_{node}} N_i \phi_i \quad (6.10)$$

όπου N_i είναι οι συναρτήσεις μορφής για τον κόμβο i και ϕ_i είναι η τιμή της μεταβλητής ϕ στον κόμβο i . Οι τιμές αυτών των μεταβλητών υπολογίζονται για κάθε κόμβο και στην συνέχεια γίνεται γραμμική παρεμβολή. Για τις συναρτήσεις μορφής ισχύει η σχέση

$$\sum_{i=1}^{N_{node}} N_i = 1 \quad (6.11)$$

$$\text{At node } j, \quad N_i = \begin{cases} 1, & i=j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (6.12)$$

Αυτές οι συναρτήσεις μορφής είναι γραμμικές όσον αφορά τις παραμετρικές συντεταγμένες. Με την χρήση των πεπερασμένων όγκων και στην συνέχεια των εξισώσεων μορφής οι τελικές εξισώσεις γραμμικοποιούνται :

$$\sum a_i^{nb} \phi_i = b_i \quad (6.13)$$

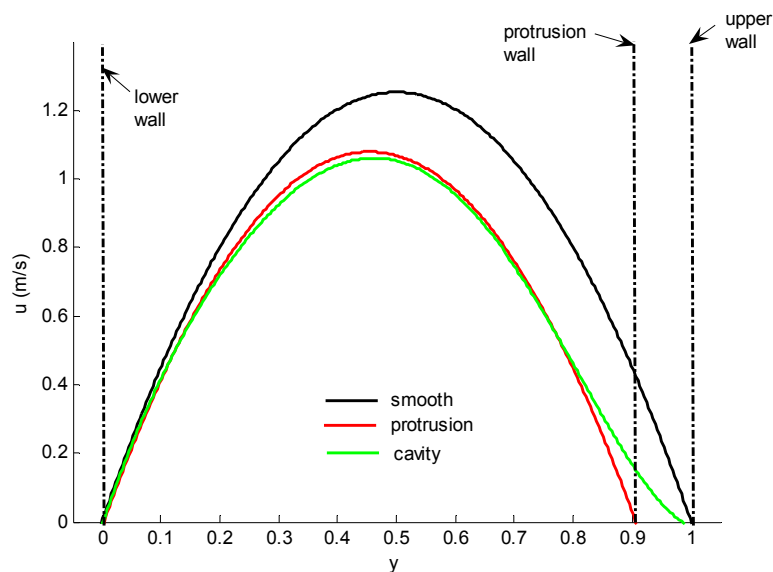
όπου a είναι οι αντίστοιχοι συντελεστές της εξίσωσης και i ο αριθμός του αντίστοιχου όγκου ελέγχου και nb είναι οι γειτονικοί όγκοι ελέγχου. Η επίλυση των εξισώσεων γίνεται με επαναληπτική διαδικασία. Η επαναληπτική προσέγγιση στοχεύει στην σύγκλιση του προβλήματος στην πραγματική λύση. Τα κριτήρια της σύγκλισης καθορίζονται από διάφορους παράγοντες, συμπεριλαμβανομένου του υπό μελέτη προβλήματος, του μεγέθους και της μορφής των όγκων ελέγχου και του μεγέθους των τελικών υπολοίπων. Οι σύνθετες φυσικές διαδικασίες, όπως η τύρβη, διαμορφώνονται χρησιμοποιώντας τις εμπειρικές σχέσεις.

Η επιλογή του χρονικού βήματος προσομοίωσης έγινε σύμφωνα με το κριτήριο ευστάθειας Courant – Friedrichs – Lewy [Courant *et al.*, 1928] και υπολογίζεται από το ίδιο το πρόγραμμα με εμπειρικές σχέσεις που βασίζονται στην κλίμακα του μοντέλου και την ταχύτητα του ρευστού. Περισσότερες λεπτομέρειες για τον τρόπο υπολογισμού του χρονικού βήματος μπορεί να αποκομίσει ο αναγνώστης από το [CFX – 5 Solver Theory] και την εργασία της [Κασιτεροπούλου, 2007].

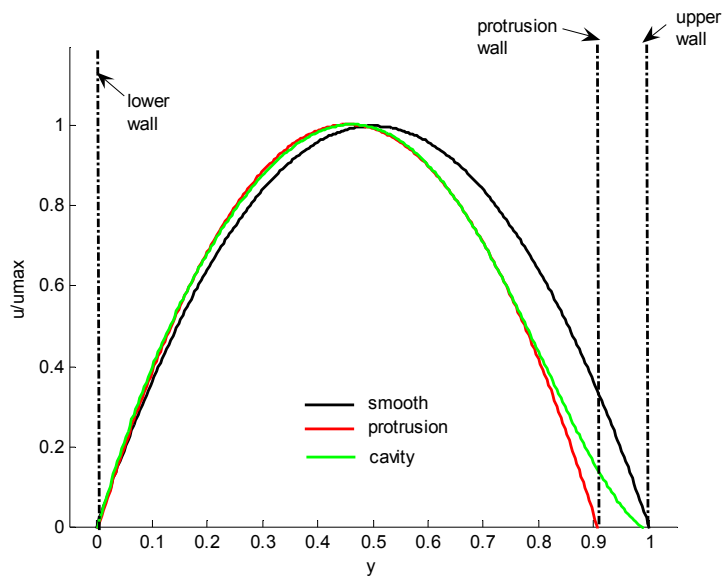
6.5 Αποτελέσματα

Κατανομή της ταχύτητας

Στο Σχ. 6.4 δίνεται η απεικόνιση της κατανομής του μέτρου της ταχύτητας σε διατομές του αγωγού που βρίσκονται στην προεξοχή και την εσοχή για αριθμό $Re_{3.30}$ και στο Σχ. 6.5 γίνεται η σύγκριση του αδιάστατου μέτρου της ταχύτητας με την κατανομή της ροής Poiseuille για την περίπτωση του αγωγού με ορθογωνικές προεξοχές της επάνω πλάκας για ίδιο αριθμό Re . Ο αριθμός Re είναι πολύ μικρός και αναμένουμε γενικά έρπουσα ροή, ωστόσο κρίνεται απαραίτητη η χρήση τόσο μικρού αριθμού Re ώστε να είναι εφικτή η σύγκριση με τα αποτελέσματα της μεσοσκοπικής μεθόδου προσομοίωσης DPD που παρουσιάστηκαν στο προηγούμενο κεφάλαιο.



Σχήμα 6.4. Κατανομή του μέτρου της ταχύτητας σε διατομές στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής. $Re=3.30$

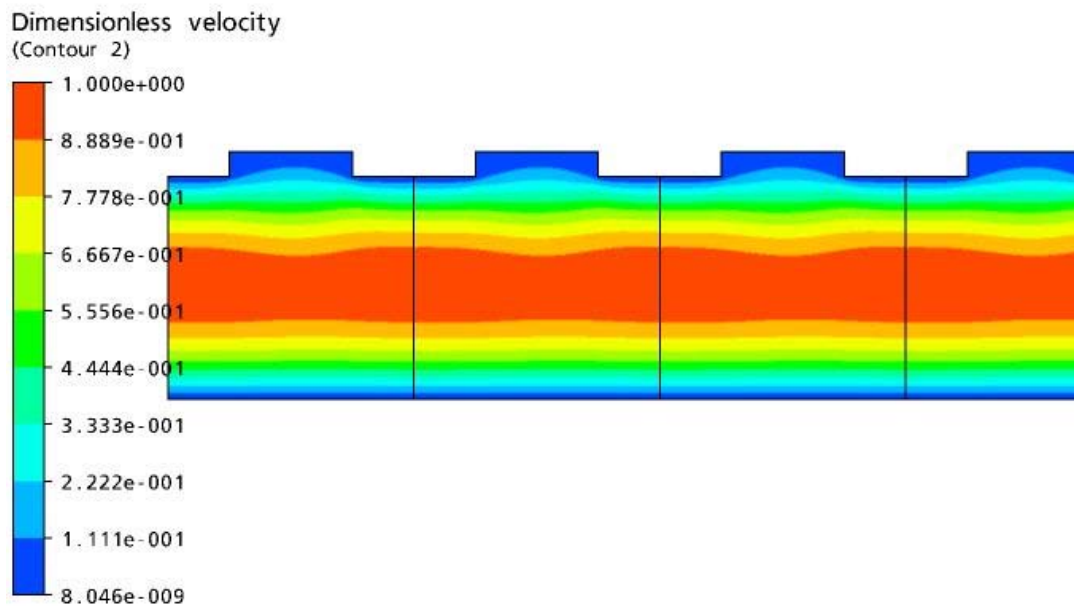


Σχήμα 6.5. Κατανομή της αδιάστατης x - συνιστώσας της ταχύτητας στο μέσον της προεξοχής και το μέσον της εσοχής. Σύγκριση με την κατανομή της ταχύτητας της ροής Poiseuille (μαύρο). $Re=3.3$.

Διαπιστώθηκε ότι, η μέγιστη τιμή της ταχύτητας στο αγωγό με την ορθογωνική προεξοχή εντοπίζεται πιο κοντά στην κάτω επίπεδη πλάκα σε σύγκριση με την κατανομή της ροής Poiseuille όπου η μέγιστη ταχύτητα εντοπίζεται στο μέσον του πλάτους του αγωγού. Η ταχύτητα μέσα στις εσοχές είναι χαμηλή και αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι το ρευστό ‘παγιδεύεται’ μέσα στις εσοχές. Σημαντικό είναι επίσης να αναφερθεί ότι η κατανομή της ταχύτητας κοντά στην επίπεδη κάτω πλάκα του αγωγού δεν επηρεάζεται από την διαμόρφωση προεξοχών στην επάνω πλάκα. Αυτό μπορεί να εξηγηθεί από το μικρό ποσοστό (10%) που καταλαμβάνει το μέγιστο ύψος της προεξοχής ως προς το συνολικό ύψος του αγωγού. Αύξηση του ύψους της προεξοχής θα οδηγούσε πιθανόν σε επιρροή της κατανομής της ταχύτητας και στην κάτω πλάκα.

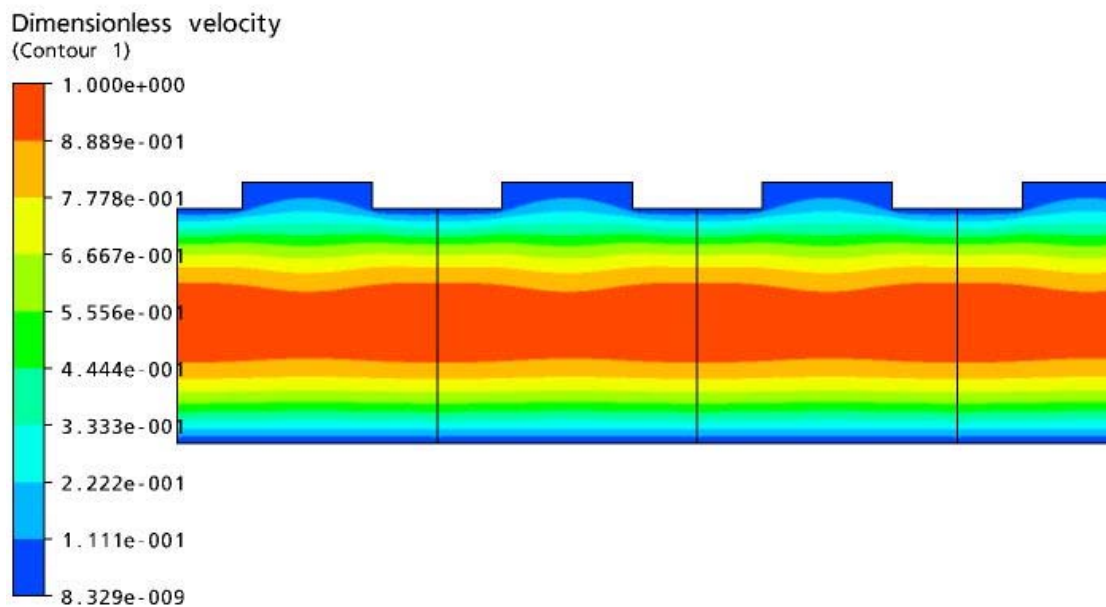
Για την καλύτερη κατανόηση της κατανομής της ταχύτητας στο εσωτερικό του αγωγού παρουσιάζονται στα Σχ. 6.6, 6.7 οι ισοταχείς για δύο ενδεικτικούς αριθμούς Re (3.30 και 0.30) και στα Σχ. 6.9, 6.10 οι γραμμές ροής κοντά στις εσοχές του άνω

τοιχώματος για τους ίδιους αριθμούς Re. Ο σχεδιασμός των γραμμών ροής γίνεται με τη χρήση 1,000 σημείων σε κάθε υπολογιστικό φατνίο σε ίση απόσταση μεταξύ τους (συνολικά διαμορφώνονται 1,000 γραμμές ροής). Παρατηρείται ότι η ροή είναι έρπουσα, καθώς για δύο διαφορετικούς αριθμούς Re παρατηρείται ίδια συμπεριφορά της ταχύτητας κάτι που άλλωστε είναι αναμενόμενο εξαιτίας της χαμηλής τιμής του αριθμού Re. Είναι σημαντικό να τονιστεί ότι εντοπίζεται στο εσωτερικό των εσοχών η εμφάνιση κλειστών γραμμών ροής. Οι κλειστές γραμμές ροής συναντώνται στις δύο άκρες (ασυνέχειες) της εσοχής και μάλιστα η θέση τους για τους αριθμούς Re που μελετήθηκαν εδώ δεν φαίνεται να μεταβάλλεται σημαντικά. *



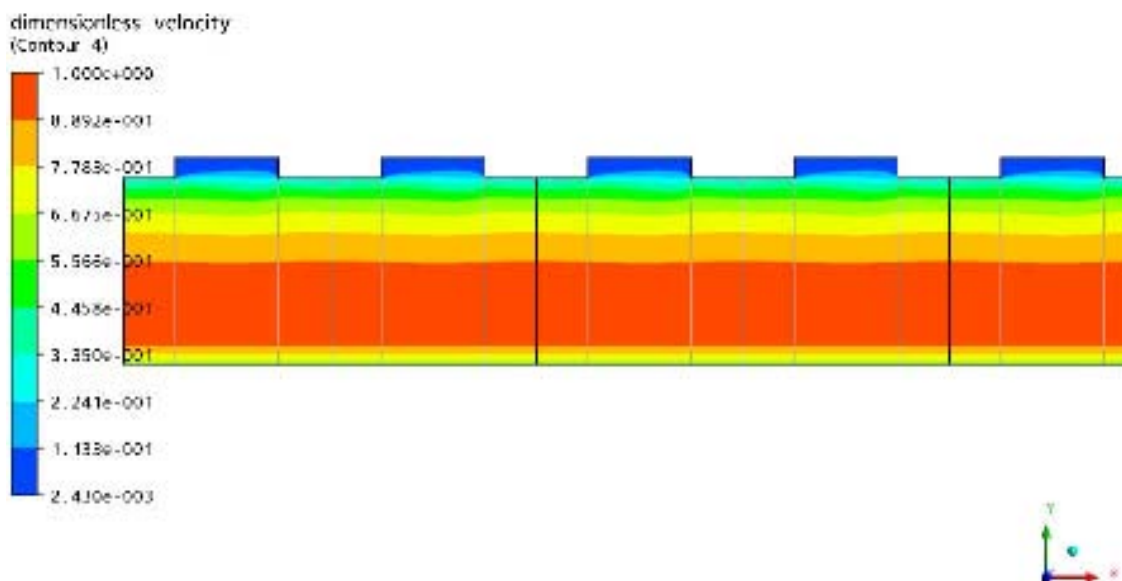
Σχήμα 6.6. Ισοταχείς σε αγωγό με ορθογωνική προεξοχή. $Re=3.3$

* Σημειώνεται ότι το πεδίο ταχύτητας που παρουσιάζεται στα Σχ. 6.6 και 6.7 είναι πολύ διαφορετικό από το πεδίο ταχύτητας για μεγαλύτερους αριθμούς Re. Ενδεικτικά παρουσιάζεται το πεδίο ταχύτητας για αριθμό $Re=40000$ στα Σχ. 6.8 και 6.11 [Κασιτεροπούλου, 2007]

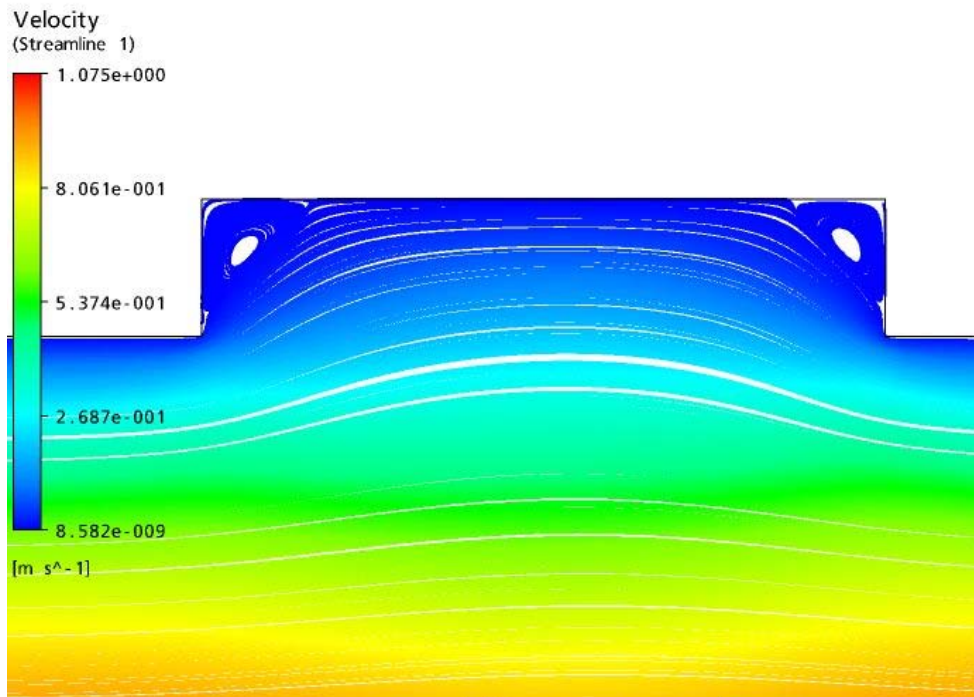


Σχήμα 6.7. Ισοταχείς σε αγωγό με ορθογωνική προεξοχή. $Re=0.3$

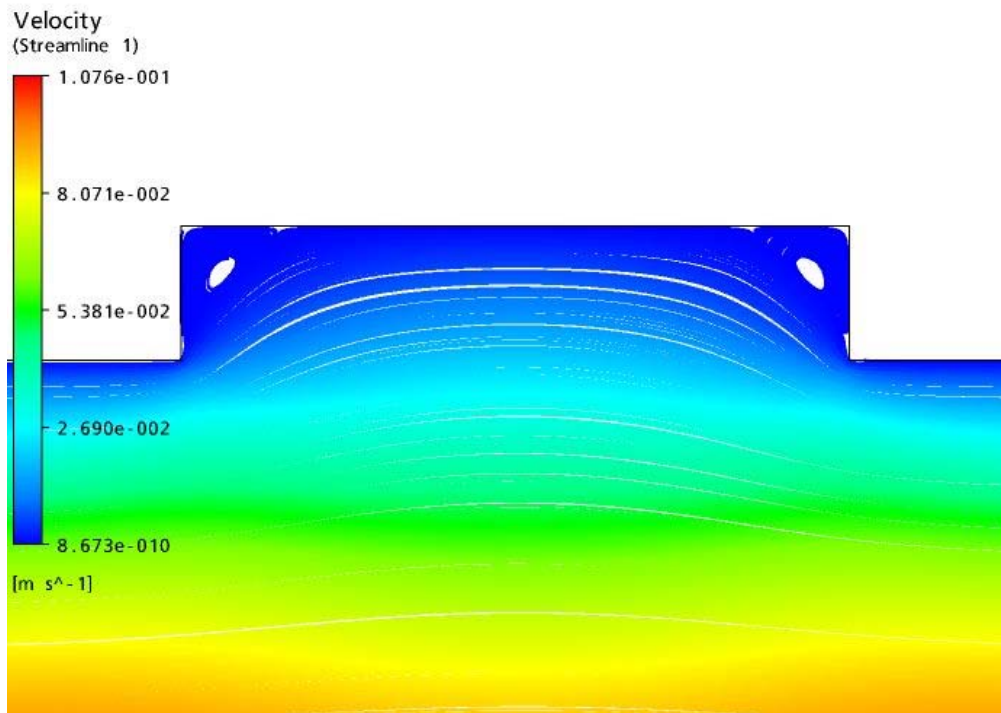
ANSYS



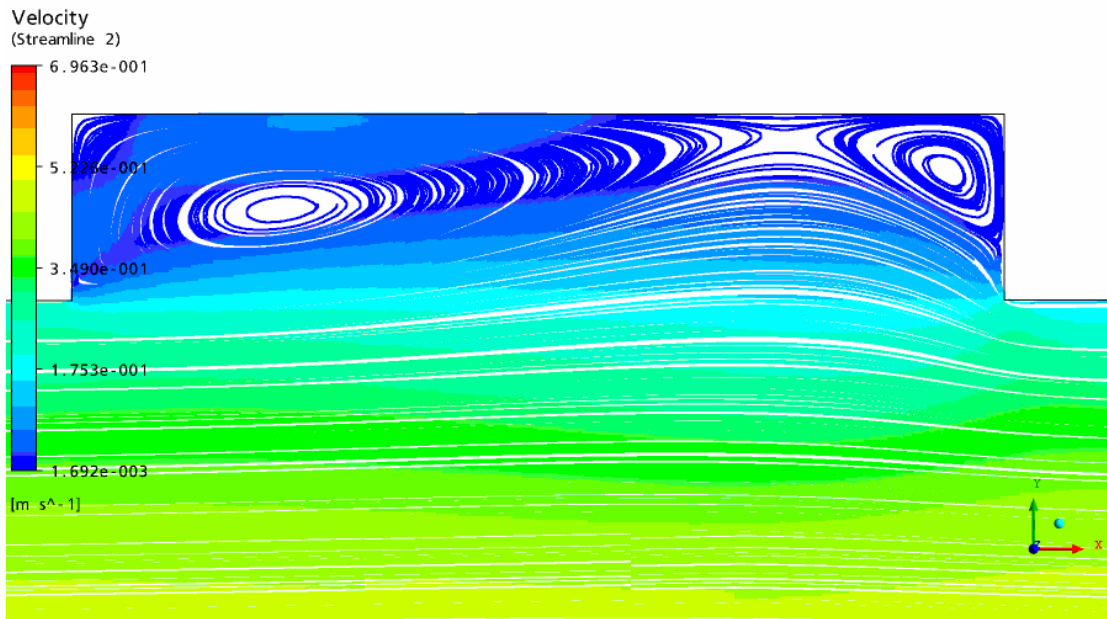
Σχήμα 6.8. Ισοταχείς σε αγωγό με ορθογωνική προεξοχή. $Re=40000$



Σχήμα 6.9. Γραμμές ροής στην επάνω πλάκα σε αγωγό με ορθογωνική προεξοχή. $Re=3.3$



Σχήμα 6.10. Γραμμές ροής στην επάνω πλάκα σε αγωγό με ορθογωνική προεξοχή. $Re=0.3$

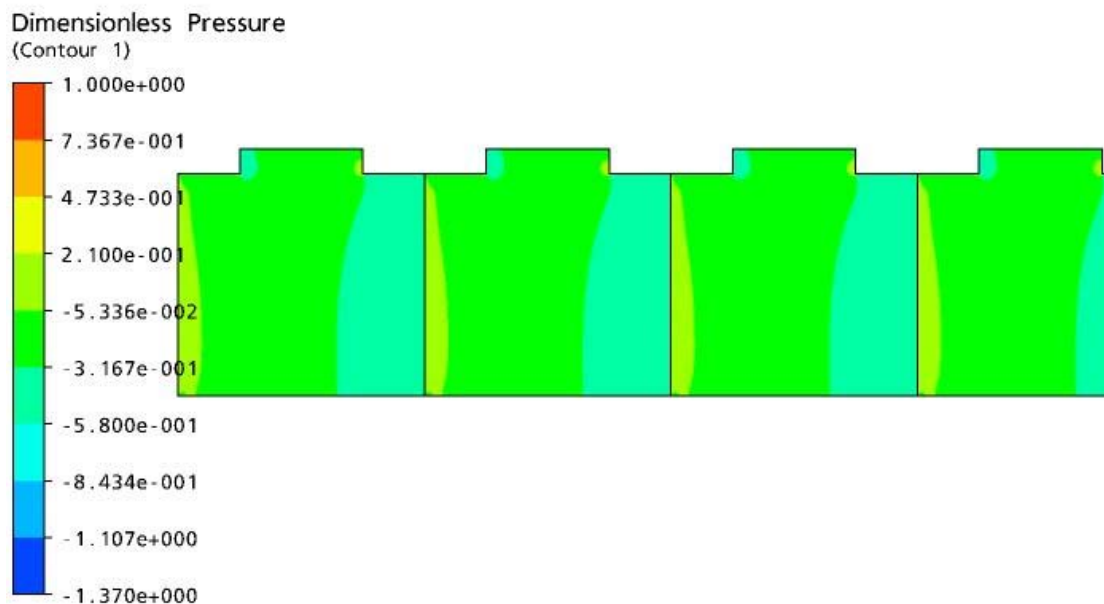


Σχήμα 6.11. Γραμμές ροής στην επάνω πλάκα σε αγωγό με ορθογωνική προεξοχή. $Re=40000$

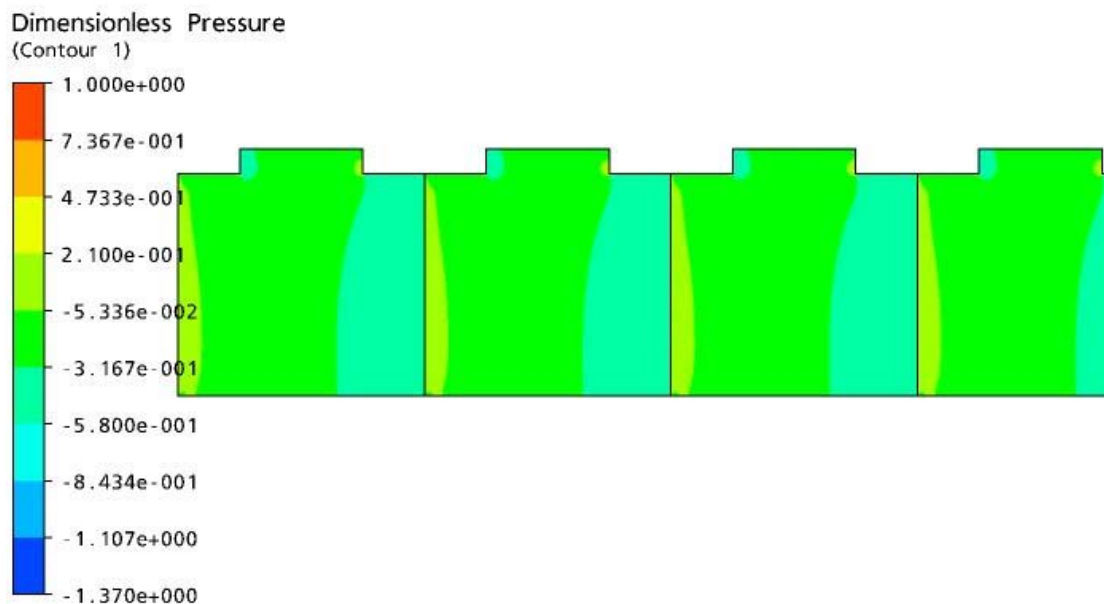
Η παρουσία των ασυνεχειών οδηγεί στην δημιουργία στρώματος διάτμησης κοντά στα σημεία της απότομης μεταβολής της γεωμετρίας. Ειδικότερα, όπως αναφέρθηκε παραπάνω στην εσοχή που δημιουργείται ανάμεσα στα δύο σημεία ασυνέχειας το ρευστό εμφανίζει χαμηλές τιμές ταχυτήτων. Αντιθέτως στο κεντρικό τμήμα του αγωγού το ρευστό κινείται ανεμπόδιστα και αναπτύσσει μεγάλες ταχύτητες. Η εναλλαγή αυτή της τιμής της ταχύτητας από το ένα στρώμα ρευστού στο άλλο οδηγεί στην δημιουργία στρώματος διάτμησης (shear layer) δηλαδή μετακίνησης του ενός ως προς το άλλο.

Πεδίο πίεσης

Η απεικόνιση του πεδίου της πίεσης στον αγωγό με τις ορθογωνικές προεξοχές της επάνω πλάκας δίνεται στα σχήματα 6.12, 6.13 για αριθμούς Re 3.30 και 0.30 αντίστοιχα. Παρατηρείται σημαντική μεταβολή της πίεσης κοντά στα σημεία ασυνέχειας, σε αντίθεση με το κεντρικό τμήμα του αγωγού όπου οι μεταβολές της πίεσης από σημείο σε σημείο είναι μικρές. Ειδικότερα, μέσα στις εσοχές η πίεση είναι υψηλή σε όλο σχεδόν το εσωτερικό της εσοχής και η τιμή αυτή μειώνεται καθώς απομακρυνόμαστε από την επάνω πλάκα και κινούμαστε προς το κέντρο. Η κατανομή της πίεσης δεν διαφέρει σημαντικά με την τιμή του αριθμού Re , καθώς οι τιμές του αριθμού Re που μελετήθηκαν εδώ είναι πολύ μικρές.



Σχήμα 6.12. Πεδίο πίεσης σε αγωγό με ορθογωνική προεξοχή. $Re=3.3$



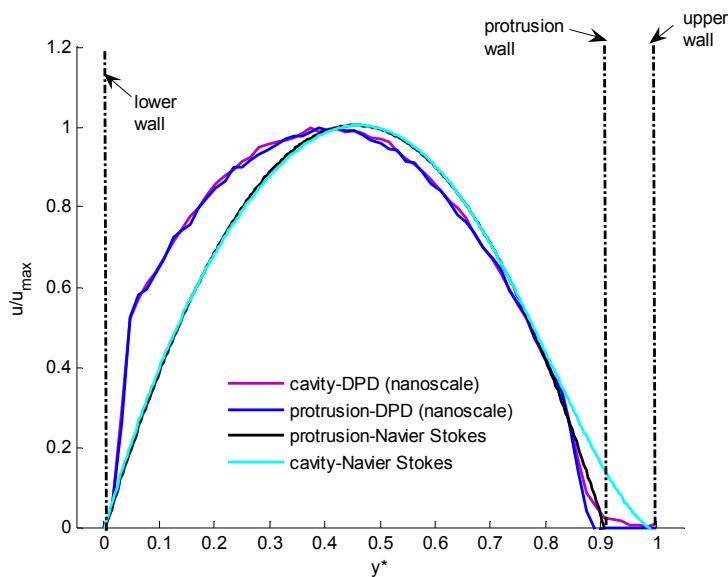
Σχήμα 6.13. Πεδίο πίεσης σε αγωγό με ορθογωνική προεξοχή. $Re=0.3$

6.6 Συγκριτικά Αποτελέσματα-Συμπεράσματα

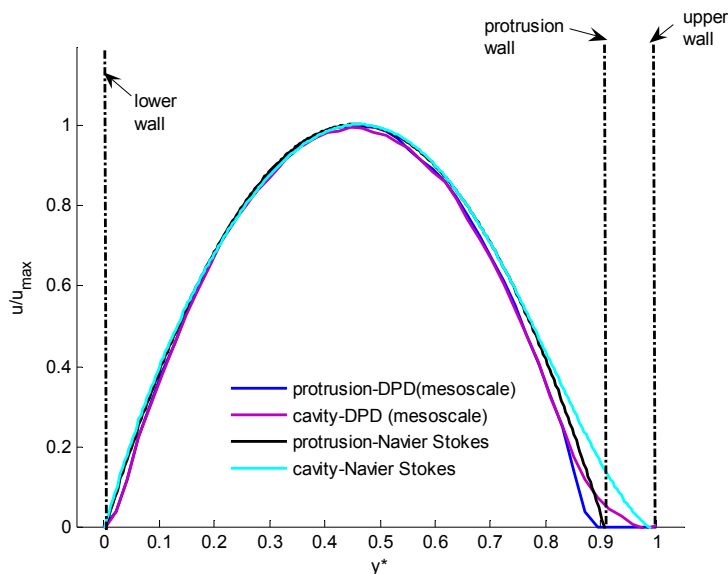
Η σύγκριση των αποτελεσμάτων της μακροσκοπικής προσομοίωσης με τη χρήση των εξισώσεων Navier-Stokes με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την προσομοίωση με τη χρήση της μεθόδου DPD γίνεται με: 1) τα διαγράμματα της x-συνιστώσας της ταχύτητας σε διατομές στο μέσον της εσοχής και το μέσον της προεξοχής για μήκος προεξοχής $l_r = 0.5l_{tot}$ και ύψος προεξοχής $h = 0.1H$, 2) τις αδιάστατοποιημένες ισοταχείς καμπύλες για το ίδιο μήκος και ύψος προεξοχής και 3) την αδιάστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re .

Στο Σχ. 6.14 παρουσιάζεται η σύγκριση των διαγραμμάτων της x-συνιστώσας της ταχύτητας για $Re=8$ για τη ροή σε νανοαγωγούς και αγωγούς μακροσκοπικής κλίμακας και στο Σχ. 6.15 παρουσιάζεται η σύγκριση των διαγραμμάτων της x-συνιστώσας της ταχύτητας για τον ίδιο αριθμό Re για την ροή σε αγωγούς

μεσοσκοπικής και μακροσκοπικής κλίμακας. Για την περίπτωση του νανοαγωγού, η κατανομή της ταχύτητας με τη μέθοδο DPD δεν συμφωνεί με τα αποτελέσματα των εξισώσεων Navier-Stokes. Εντοπίζονται σημαντικές διαφορές στην ταχύτητα κυρίως κοντά στην κάτω πλάκα του αγωγού ($y^*=0$). Η αδιάστατη ταχύτητα μέσα στις εσοχές είναι χαμηλότερη για τον νανοαγωγό σε σύγκριση με την ταχύτητα στον αγωγό μακροσκοπικής κλίμακας. Εκτιμάται ότι, η συμπεριφορά της ταχύτητας είναι δυνατό να μεταβληθεί με κατάλληλη επιλογή του συντελεστή αλληλεπίδρασης των συνηρητικών δυνάμεων των σωματιδίων η οποία πιθανόν να οδηγήσει σε λύσεις πολύ κοντά στις εξισώσεις Navier-Stokes (όπως ενδεικτικά παρουσιάστηκε στο κεφ.3 για τη ροή Poiseuille σε νανοαγωγούς).

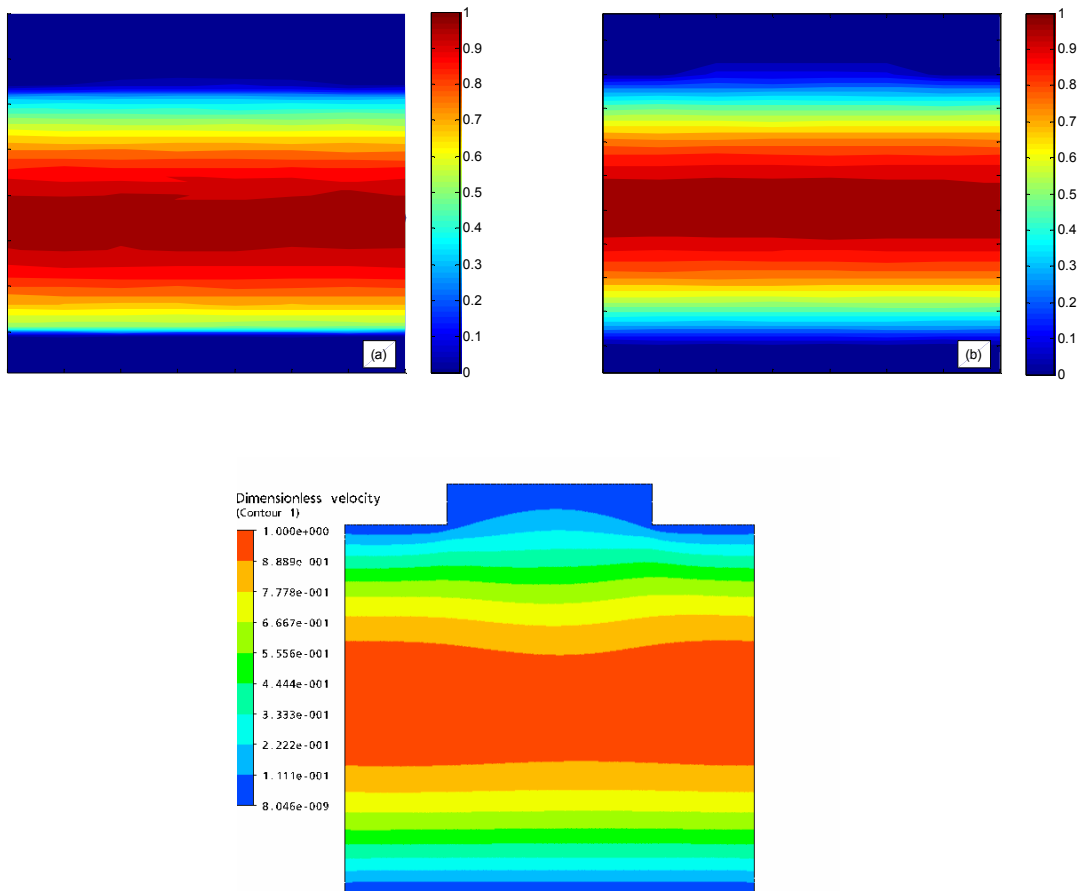


Σχήμα 6.14. Σύγκριση της x- συνιστώσας της ταχύτητας για την προσομοίωση ροής σε νανοαγωγό με τη μέθοδο DPD και την προσομοίωση ροής σε αγωγό μακροσκοπικής κλίμακας με χρήση των εξισώσεων συνέχειας και ορμής, σε διατομές που βρίσκονται στο μέσον της προσεχοχής και το μέσον της εσοχής. $Re=8.0$



Σχήμα 6.15. Σύγκριση της x - συνιστώσας της ταχύτητας για την προσομοίωση ροής σε αγωγό μεσοσκοπικής κλίμακας με τη μέθοδο DPD και την προσομοίωση σε αγωγό μακροσκοπικής κλίμακας με χρήση των εξισώσεων συνέχειας και ορμής, σε διατομές που βρίσκονται στο μέσον της προσοχής και το μέσον της εσοχής. $Re=8.0$

Στην περίπτωση του μεσοσκοπικού αγωγού αντιθέτως η συμπεριφορά είναι εντελώς διαφορετική. Η κατανομή της ταχύτητας με τη μέθοδο DPD είναι πολύ κοντά στα αποτελέσματα των εξισώσεων Navier-Stokes. Κοντά στην κάτω πλάκα οι κατανομές παρουσιάζουν μεγάλη ομοιότητα. Η πρόβλεψη της αδιάστατης ταχύτητας μέσα στις εσοχές είναι χαμηλότερη για τον αγωγό μεσοσκοπικής κλίμακας σε σύγκριση με την ταχύτητα στον αγωγό μακροσκοπικής κλίμακας. Πιθανόν αυτή η συμπεριφορά να οφείλεται στις διαφορετικές οριακές συνθήκες που εφαρμόζονται στη διεπιφάνεια τοίχου-ρευστού στις δύο μεθόδους προσομοίωσης (bounce-back συνθήκες για τη μέθοδο DPD, συνθήκες μη – ολίσθησης για την μακροσκοπική προσέγγιση).



Σχήμα 6.16. Ισοταχείς για : α) ροή σε νανοαγωγούς, β) ροή σε αγωγούς μεσοσκοπικής κλίμακας, γ) ροή σε αγωγούς μακροσκοπικής κλίμακας με περιοδικές προεξοχές. $Re=8.0$

Η απεικόνιση των αδιαστατοποιημένων ισοταχών για τη ροή σε νανοαγωγούς και τη ροή σε αγωγούς μεσοσκοπικής και μακροσκοπικής κλίμακας (Σχ. 6.16) παρουσιάζει ευκρινέστερα τα συμπεράσματα που συζητήθηκαν προηγουμένως. Και πάλι εντοπίζεται διαφορετική συμπεριφορά της ταχύτητας για την περίπτωση των νανοαγωγών και των αγωγών μακροσκοπικής κλίμακας κοντά στην κάτω πλάκα του αγωγού ($y^*=0$). Πιο κοντινή συμπεριφορά φαίνεται ότι παρουσιάζει η ταχύτητα για τη ροή σε αγωγούς μεσοσκοπικής κλίμακας και αγωγούς μακροσκοπικής κλίμακας σε όλο σχεδόν το τμήμα του αγωγού πλην της ταχύτητας μέσα στις εσοχές όπου φαίνεται ότι η

μέθοδος DPD προβλέπει πιο χαμηλές τιμές της αδιάστατης ταχύτητας σε σύγκριση με αυτές που υπολογίζουν οι εξισώσεις Navier-Stokes. Παρατηρείται μάλιστα μέσα στις εσοχές ότι οι ισοταχείς καμπύλες έχουν διαφορετική μορφή για τη ροή σε αγωγούς μεσοσκοπικής και τη ροή σε αγωγούς μακροσκοπικής κλίμακας.

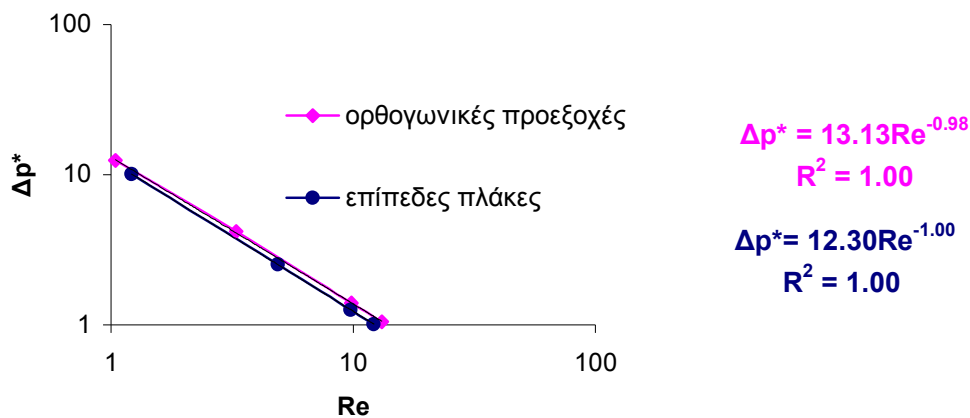
Η σύγκριση των αποτελεσμάτων ολοκληρώνεται με την σύγκριση της σχέσης της αδιαστατοποιημένης κινούσας δύναμης του ρευστού συναρτήσει του αριθμού Re. Στην περίπτωση ροής σε αγωγό μακροσκοπικής κλίμακας ‘αίτιο’ της κίνησης του ρευστού αποτελεί η διαφορά της πίεσης ανάμεσα στην είσοδο και την έξοδο του υπολογιστικού φατνίου, ενώ στην περίπτωση της ροής σε νανοαγωγό και σε αγωγό μεσοσκοπικής κλίμακας η κινούσα δύναμη σε κάθε σωματίδιο. Σε κάθε περίπτωση πάντως αδιαστατοποιείται η εξωτερική αιτία κίνησης του ρευστού και μελετάται πως αυτή επηρεάζει τη τιμή του αριθμού Re. Η αδιαστατοποίηση της πτώσης πίεσης γίνεται με την χρήση του όρου $\frac{1}{2}\rho\bar{U}^2$ που έχει διαστάσεις πίεσης, δηλαδή $\Delta p^* = \frac{\Delta p}{(\frac{1}{2}\rho\bar{U}^2)}$.

Η αδιαστατοποίηση για την περίπτωση της επίλυσης με τη μέθοδο DPD έχει περιγραφεί στο κεφάλαιο 4 και γίνεται με τη χρήση του όρου $\frac{1}{2}\rho\bar{U}^2 A$ όπου A είναι το εμβαδόν της διατομής, ρ είναι η πυκνότητα του ρευστού και \bar{U} η μέση ταχύτητα σε τυχούσα διατομή, δηλαδή $F^*_{ext} = \frac{F_{ext}}{(\frac{1}{2}\rho\bar{U}^2 A)}$. Στο Σχ. 6.17 απεικονίζεται η αδιαστατοποιημένη

πτώση πίεσης συναρτήσει του αριθμού Re για τη ροή σε αγωγούς μακροσκοπικής κλίμακας με περιοδικές ορθογωνικές προεξοχές της επάνω πλάκας. Είναι εμφανές ότι η αδιαστατοποιημένη πτώση πίεσης μειώνεται όσο αυξάνεται ο αριθμός Re, γεγονός που οδηγεί στο συμπέρασμα ότι απαιτείται μεγαλύτερη διαφορά πίεσης ώστε η ταχύτητα

του ρευστού να παραμείνει σταθερή και ότι η παρουσία των προεξοχών οδηγεί εν γένει σε μείωση της ταχύτητας κάτι που άλλωστε διαπιστώθηκε και από την κατανομή της ταχύτητας που μελετήθηκε στην προηγούμενη παράγραφο. Η συμπεριφορά είναι γραμμική σε log-log κλίμακα τόσο για τον αγωγό με επίπεδες πλάκες, όσο και για τον αγωγό με ορθογωνικές προεξοχές.

Κανάλι με ορθογωνικές προεξοχές - ύψος προεξοχής 10%



Σχήμα 6.17. Αδιαστατοποιημένη πτώση πίεσης συναρτήσει του αριθμού Re για ύψος προεξοχής $h = 0.10H$.

Στο Σχ. 4.35 και το Σχ. 5.20 παρουσιάστηκε η αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re για μήκος και ύψος προεξοχής ίδιο με αυτό της μακροσκοπικής επίλυσης ($l_r = l_{r1}, h = 0.10H$) για νανοαγωγούς και αγωγούς μεσοσκοπικής κλίμακας αντίστοιχα. Η αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη μειώνεται με την αύξηση του αριθμού Re, και για τις δύο περιπτώσεις, όπως ακριβώς συμβαίνει και στην περίπτωση της μακροσκοπικής προσέγγισης. Η συμπεριφορά είναι ομοίως γραμμική σε λογαριθμική κλίμακα για όλες τις περιπτώσεις ροών.

Παρατηρείται ακόμη, ότι η συμπεριφορά που συνδέει το αδιαστατοποιημένο 'αίτιο' κίνησης του ρευστού (αδιαστατοποιημένη διαφορά πίεσης για τη ροή σε αγωγούς μακροσκοπικής κλίμακας και η αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη για τους νανοαγωγούς και τους αγωγούς μεσοσκοπικής κλίμακας) για τη ροή σε αγωγούς μακροσκοπικής κλίμακας και αγωγούς μεσοσκοπικής κλίμακας είναι πολύ κοντά, τόσο για τις επίπεδες πλάκες ($F^*_{ext} = 11.42 Re^{-1.03}$ για τη μεσοσκοπική κλίμακα, $\Delta p^* = 12.30 Re^{-1.00}$ για τη μακροσκοπική κλίμακα) όσο και για τις πλάκες με προεξοχές ($F^*_{ext} = 13.89 Re^{-1.00}$ για τη μεσοσκοπική και $\Delta p^* = 13.18 Re^{-0.98}$ για τη μακροσκοπική κλίμακα). Αντιθέτως η ροή σε νανοαγωγούς παρουσιάζει μεγαλύτερες διαφορές στη σχέση της αδιαστατοποιημένης δύναμης συναρτήσει του αριθμού Re τόσο για επίπεδες πλάκες, όσο και για πλάκες με προεξοχές ($F^*_{ext} = 8.24 Re^{-1.03}$ για επίπεδες πλάκες και $F^*_{ext} = 9.54 Re^{-1.02}$ για πλάκες με προεξοχές). Πιθανόν μεταβολή κάποιων παραμέτρων στην επίλυση με τη μέθοδο DPD (π.χ. συντελεστής αλληλεπίδρασης συντηρητικών δυνάμεων μεταξύ των σωματιδίων) να οδηγήσει σε αποτελέσματα πιο κοντά στα αποτελέσματα των εξισώσεων Navier-Stokes.

7. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Στην παρούσα εργασία μελετήθηκε η ροή στο χώρο μεταξύ δύο ακίνητων παράλληλων πλακών από τις οποίες η άνω χαρακτηρίζεται από την ύπαρξη περιοδικών ορθογωνικών προεξοχών και η κάτω είναι λεία και επίπεδη. Η ροή μελετάται με τη χρήση της μεθόδου DPD και των μακροσκοπικών εξισώσεων συνέχειας και ορμής.

Στην εργασία αφού στοιχειοθετήθηκαν οι βασικές εξισώσεις επίλυσης της μεθόδου και επιβεβαιώθηκε η ορθότητα του μοντέλου, εξετάστηκαν όλες οι παράμετροι που υπεισέρχονται σε ένα σύστημα DPD (πυκνότητα τοίχου, συντελεστής αλληλεπίδρασης των σωματιδίων τοίχου και ρευστού, κινούσα δύναμη σε κάθε σωματίδιο, ακτίνα αποκοπής αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων) και καθορίστηκε η επίδραση τους στις μακροσκοπικές ιδιότητες της ροής. Σημαντικότερη παράμετρος αποδείχθη ο συντελεστής αλληλεπίδρασης των σωματιδίων του τοίχου και του ρευστού και εν συνεχεία η πυκνότητα του τοίχου, χαρακτηριστικά που σχετίζονται με τη δομή και τις δυνάμεις των τοίχων. Μελετήθηκε στη συνέχεια η επίδραση της μορφολογίας των τοίχων με τη διαμόρφωση ορθογωνικών προεξοχών στην επάνω πλάκα του αγωγού. Αποδείχθηκε 'παγίδευση' των σωματιδίων μέσα στις εσοχές που επηρεάζουν τις ιδιότητες του ρευστού, ιδιαίτερα στις περιοχές κοντά στις προεξοχές. Παρακάτω δίνονται περιληπτικά τα σημαντικότερα αποτελέσματα της μελέτης.

7.1 Αριθμητική πυκνότητα του ρευστού

Στη νανοκλίμακα, η κατανομή της πυκνότητας επηρεάζεται από διάφορους παράγοντες σημαντικότεροι από τους οποίους είναι η πυκνότητα των τοίχων και ο συντελεστής αλληλεπίδρασης των σωματιδίων τοίχου και ρευστού (ο συντελεστής αλληλεπίδρασης μπορεί να προσομοιώσει υδρόφοβες και υδρόφιλες επιφάνειες τοίχου που σήμερα φαίνεται ότι αποτελούν αντικείμενο μελέτης από πολλούς ερευνητές [Galea & Attard, 2004; Nagayama & Cheng, 2004; Ziarani & Mohammad, 2006]). Ειδικότερα, αύξηση του συντελεστή αλληλεπίδρασης συνεπάγεται συγκέντρωση περισσότερων σωματιδίων σε μεγαλύτερη απόσταση από τους τοίχους εξαιτίας των ισχυρών απωστικών δυνάμεων που ασκούν τα σωματίδια του τοίχου στα σωματίδια του ρευστού. Επιπρόσθετα, αύξηση της πυκνότητας του τοίχου οδηγεί σε απομάκρυνση των σωματιδίων του ρευστού από τους τοίχους και μάλιστα η απομάκρυνση γίνεται εντονότερη όσο η πυκνότητα αυξάνεται.

Μικρότερη φαίνεται ότι είναι η επίδραση της ακτίνας αποκοπής αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων, r_c , και της κινούσας δύναμης σε κάθε σωματίδιο. Η επιρροή της ακτίνας αποκοπής εντοπίζεται κυρίως στο ύψος και τον αριθμό των κορυφών που εμφανίζονται κοντά στους τοίχους. Η αύξηση της ακτίνας αποκοπής συντελεί στη μείωση του ύψους της κορυφής κοντά στα στερεά τοιχώματα και την αύξηση της έκτασης διακύμανσης της πυκνότητας (περισσότερες κορυφές σε μεγαλύτερη απόσταση από τους τοίχους). Όσον αφορά την κινούσα δύναμη του ρευστού διαπιστώνεται ότι τόσο η κορυφή της πυκνότητας, όσο και η απόσταση της από τα στερεά τοιχώματα είναι ίδια, όπως ίδια είναι και η μέση τιμή της πυκνότητας στο κέντρο του αγωγού υπό διαφορετική τιμή της κινούσας δύναμης.

Η μορφολογία των τοίχων μελετήθηκε διεξοδικά με τη διαμόρφωση ορθογωνικών προεξοχών ποικίλου μήκους και ύψους ώστε να εκτιμηθεί κατά πόσο η γεωμετρία τους επηρεάζει την κατανομή των σωματιδίων ρευστού μέσα στο αγωγό . Παρατηρήθηκε ‘παγίδευση’ των σωματιδίων μέσα στις εσοχές του επάνω τοίχου. Η ‘παγίδευση’ αυτή επαληθεύτηκε με τον υπολογισμό του μέσου χρόνου παραμονής των σωματιδίων μέσα στις εσοχές και διαπιστώθηκε ότι όσο οι εσοχές ‘στενεύουν’ και μεγαλώνει το ύψος τους, τόσο ο μέσος χρόνος παραμονής των σωματιδίων μέσα σε αυτές τις περιοχές αυξάνεται. Η συμπεριφορά αυτή επαληθεύεται και από την ‘παρακολούθηση’ της τροχιάς των σωματιδίων στο x-y επίπεδο.

Γενικότερο συμπέρασμα είναι ότι η εσοχή ‘εγκλωβίζει’ τα σωματίδια στο εσωτερικό της, διαπίστωση η οποία συμφωνεί με τα αποτελέσματα της μακροσκοπικής θεωρίας όπου παρατηρείται παγίδευση του ρευστού μέσα στις εσοχές. Στη νανοκλίμακα, η πυκνότητα στο κεντρικό τμήμα του αγωγού παρουσιάζει υπερυψωμένη τιμή σε σύγκριση με την αρχική της τιμή και μεγάλες κορυφές κοντά στα στερεά τοιχώματα. Αντιθέτως, στη μεσοκλίμακα η συμπεριφορά είναι πιο ομαλή με τις κορυφές της πυκνότητας να παρουσιάζονται πιο κοντά στα στερεά τοιχώματα και την τιμή της πυκνότητας στο κεντρικό τμήμα να είναι ίδια με την αρχική στα πλαίσια του στατιστικού σφάλματος.

7.2 Πεδίο ταχύτητας

Στη νανοκλίμακα, σημαντικότερος παράγοντας που φαίνεται να επηρεάζει την κατανομή της ταχύτητας είναι ο συντελεστής αλληλεπίδρασης των σωματιδίων τοίχου και ρευστού. Το ρευστό ‘μετατοπίζεται’ προς το κεντρικό τμήμα του αγωγού υπό την επίρεια των αυξημένων απωστικών δυνάμεων των σωματιδίων του τοίχου με

αποτέλεσμα την εμφάνιση υψηλής ταχύτητας στα όρια των τοίχων (ταχύτητα ολίσθησης) και την αύξηση της ταχύτητας στο κεντρικό τμήμα του αγωγού. Η αύξηση της πυκνότητας των τοίχων οδηγεί σε ανάλογη συμπεριφορά η οποία επεξηγείται κατά όμοιο τρόπο από την αύξηση των απωθητικών δυνάμεων που ασκούν τα σωματίδια του τοίχου στα σωματίδια του ρευστού.

Όσον αφορά την ακτίνα αποκοπής αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων παρατηρείται ότι η αύξηση της ακτίνας αποκοπής οδηγεί σε μείωση της μέγιστης ταχύτητας του αγωγού. Η αύξηση της ακτίνας αποκοπής αυξάνει το πλήθος των σωματιδίων που επιδρούν σε ένα σωματίδιο. Αποτέλεσμα των αυξημένων απωστικών αλληλεπιδράσεων είναι η επιβράδυνση των σωματιδίων και συνεπώς η μείωση της ταχύτητας. Τέλος, η αύξηση της κινούσας δύναμης που ασκείται σε κάθε σωματίδιο οδηγεί σε σημαντική αύξηση της ταχύτητας του ρευστού.

Σε αγωγούς με ορθογωνικές προεξοχές της επάνω πλάκας η κατανομή της ταχύτητας αποκλίνει από την παραβολική συμπεριφορά εξαιτίας της επίδρασης των προεξοχών και των εσοχών. Οι μέγιστες τιμές της ταχύτητας μειώνονται με την μείωση του μήκους και την αύξηση του ύψους της προεξοχής, ενώ παρατηρείται μετατόπιση του διαγράμματος προς την κάτω στερεή επιφάνεια υπό την επίδραση των προεξοχών. Η διαμόρφωση των προεξοχών στην επάνω πλάκα οδηγεί σε επιβράδυνση των σωματιδίων μέσα στις εσοχές.

Η σύγκριση της κατανομής της ταχύτητας με τη μέθοδο DPD με τη μακροσκοπική λύση κρίθηκε απαραίτητη για τη διερεύνηση της ποιότητας των αποτελεσμάτων της μεθόδου DPD. Αρχικά, συγκρίθηκε η κατανομή της ταχύτητας του νανοαγωγού με την κατανομή της ταχύτητας των εξισώσεων Navier-Stokes για την ροή

Poiseuille. Η κατανομή της ταχύτητας με τη μέθοδο DPD επηρεάζεται σημαντικά από το συντελεστή αλληλεπίδρασης των συντηρητικών δυνάμεων των σωματιδίων. Κατάλληλη επιλογή του συντελεστή οδηγεί σε λύσεις πολύ κοντά στις εξισώσεις Navier-Stokes. Στη ροή Poiseuille σε μεσοσκοπικούς αγωγούς, η ταχύτητα είναι πολύ κοντά στη μακροσκοπική λύση (παραβολική κατανομή) με διαφορά στη μέγιστη τιμή της ταχύτητας ίση με 6%. Στους αγωγούς με προεξοχές, η κατανομή της ταχύτητας σε διατομές στο μέσον της εσοχής και το μέσον της προεξοχής για τη ροή σε νανοαγωγό δεν συμφωνεί με τα αποτελέσματα των εξισώσεων Navier-Stokes. Εντοπίζονται σημαντικές διαφορές στην ταχύτητα κυρίως στην κάτω πλάκα ($y^*=0$), τουλάχιστον για το συντελεστή αλληλεπίδρασης σωματιδίων τοίχου και ρευστού που χρησιμοποιείται στην παρούσα εφαρμογή ($a_{ij}=25$). Αντιθέτως, στη ροή σε μεσοσκοπικούς αγωγούς με προεξοχές το διάγραμμα της ταχύτητας τόσο σε διατομές στο μέσον της εσοχής, όσο και σε διατομές στο μέσον της προεξοχής, είναι πολύ κοντά στα αποτελέσματα των εξισώσεων Navier-Stokes. Στην κάτω πλάκα του αγωγού οι κατανομές παρουσιάζουν μεγάλη ομοιότητα. Στην επάνω πλάκα, η πρόβλεψη της αδιάστατης ταχύτητας μέσα στις εσοχές είναι χαμηλότερη για τον αγωγό μεσοσκοπικής κλίμακας σε σύγκριση με τον αγωγό μακροσκοπικής κλίμακας.

7.3 Πεδίο πίεσης

Η συμπεριφορά της πίεσης ‘θυμίζει’ αρκετά τη συμπεριφορά της πυκνότητας. Στη ροή σε νανοαγωγό με επίπεδες πλάκες, σημαντικότεροι παράγοντες που επηρεάζουν την κατανομή της πίεσης είναι κατά προτεραιότητα ο συντελεστής αλληλεπίδρασης των σωματιδίων του τοίχου με τα σωματίδια του ρευστού και δευτερευόντως η πυκνότητα του τοίχου. Και οι δύο παράγοντες πάντως φαίνεται ότι

υπεισέρχονται στο συντελεστή της δύναμης που περιλαμβάνει ο τύπος της πίεσης (Εξ. 3.3 και 3.4) και συνδέονται με την αύξηση των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των σωματιδίων.

Σημαντική ομοίως επίδραση έχει και η ακτίνα αποκοπής στην αύξηση της πίεσης. Ενδεικτικά αναφέρουμε ότι μια αύξηση της ακτίνας αποκοπής της τάξεως του 50% οδηγεί σε αύξηση της πίεσης 1400% περίπου. Η εξωτερική δύναμη τέλος, φαίνεται ότι επηρεάζει αλλά όχι σημαντικά (εν συγκρίσει με τους υπόλοιπους παράγοντες) την κατανομή της πίεσης τουλάχιστον για τις τιμές της εξωτερικής δύναμης που μελετήθηκαν εδώ. Πιθανότατα σημαντική αύξηση της δύναμης να προκαλέσει ανάλογη συμπεριφορά στην κατανομή της πίεσης.

Στους νανοαγωγούς με ορθογωνικές προεξοχές παρουσιάζει πολύ μεγάλο ενδιαφέρον η συμπεριφορά της πίεσης. Η διαμόρφωση προεξοχών οδηγεί στην εμφάνιση περιοχών υψηλής πίεσης μέσα στις εσοχές, η τοπολογία και ο αριθμός των οποίων είναι σε άμεση συνάρτηση με το μήκος και το ύψος της προεξοχής. Αναλυτικότερα, μείωση του μήκους και αύξηση του ύψους οδηγεί σε αύξηση του αριθμού αυτών των περιοχών. Στο κεντρικό τμήμα του αγωγού παρατηρείται μείωση της πίεσης με την αύξηση του ύψους της προεξοχής.

Στη ροή σε αγωγούς μεσοσκοπικής κλίμακας η συμπεριφορά του ρευστού είναι παρόμοια με αυτή στην ροή σε νανοαγωγούς. Στο λείο αγωγό η πίεση είναι σταθερή στο κεντρικό τμήμα και μειώνεται ελαφρώς καθώς κινούμαστε προς τα στερεά τοιχώματα. Στην γειτνίαση με τα τοιχώματα εντοπίζονται κορυφές οι οποίες οφείλονται κατά προτεραιότητα στις αλληλεπιδράσεις των σωματιδίων ρευστού με τα σωματίδια του τοίχου. Στους αγωγούς με προεξοχές, η πίεση παραμένει σταθερή μακριά από τα

τοιχώματα. Μέσα στις εσοχές η πίεση έχει ίδια τιμή με τη μέγιστη τιμή στο κεντρικό τμήμα του αγωγού. Το μέγεθος των περιοχών υψηλής πίεσης μέσα στις εσοχές εξαρτάται από τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά των εσοχών και μάλιστα η μείωση του μήκους και η αύξηση του ύψους της προεξοχής οδηγεί σε αύξηση του ύψους αυτών των περιοχών.

7.4 Κατανομή της θερμοκρασίας

Η κατανομή της θερμοκρασίας στη μελέτη της ροής Poiseuille σε νανοαγωγούς αποδεικνύει σταθερή τιμή της θερμοκρασίας στο κεντρικό τμήμα του αγωγού και εμφάνιση κορυφών κοντά στα όρια των πλακών σε απόσταση ίδια περίπου με την απόσταση που εμφανίζει κορυφή (τοπικά μέγιστη τιμή) το διάγραμμα της πυκνότητας. Η μελέτη των διαφόρων παραμέτρων του συστήματος (πυκνότητα τοίχου, συντελεστής αλληλεπίδρασης των σωματιδίων τοίχου και ρευστού, κινούσα δύναμη σε κάθε σωματίδιο, ακτίνα αποκοπής αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων) απέδειξε ότι η θερμοκρασία δεν επηρεάζεται στο κεντρικό τμήμα του αγωγού και η επίδραση των παραγόντων περιορίζεται μόνον κοντά στα στερεά τοιχώματα.

Η διαμόρφωση ορθογωνικών προεξοχών στην επάνω πλάκα του νανοαγωγού φαίνεται ότι επηρεάζει την κατανομή της θερμοκρασίας μέσα στο αγωγό. Σε κάθε περίπτωση πρέπει να σημειωθεί ότι η τελική θερμοκρασία σταθεροποιείται γύρω από μια μέση τιμή της οποίας το μέγεθος είναι σε άμεση συνάρτηση με το ύψος και το μήκος της προεξοχής. Ειδικότερα, μείωση του μήκους και αύξηση του ύψους της προεξοχής οδηγεί σε μείωση της θερμοκρασίας του συστήματος. Η συμπεριφορά αυτή εξηγείται από το γεγονός ότι όσο στενεύει η προεξοχή (μείωση του μήκους και αύξηση του ύψους) τόσο περισσότερα σωματίδια παγιδεύονται μέσα στις εσοχές, δηλαδή τόσο

περισσότερα σωματίδια αποκτούν χαμηλές ταχύτητες με αποτέλεσμα να μειώνονται οι σχετικές ταχύτητες των σωματιδίων και κατά συνέπεια η θερμική ταχύτητα και άρα η θερμοκρασία του συστήματος. Στην περίπτωση του αγωγού μεσοσκοπικής κλίμακας με προεξοχές, η θερμοκρασία παραμένει σταθερή μακριά από τα τοιχώματα και η μέση τιμή της είναι ίση με την αρχική για όλα τα μήκη και ύψη προεξοχής. Κορυφές της θερμοκρασίας εντοπίζονται κοντά στα όρια των πλακών, οι οποίες εκτιμάται ότι οφείλονται στην επίδραση των τοιχωμάτων.

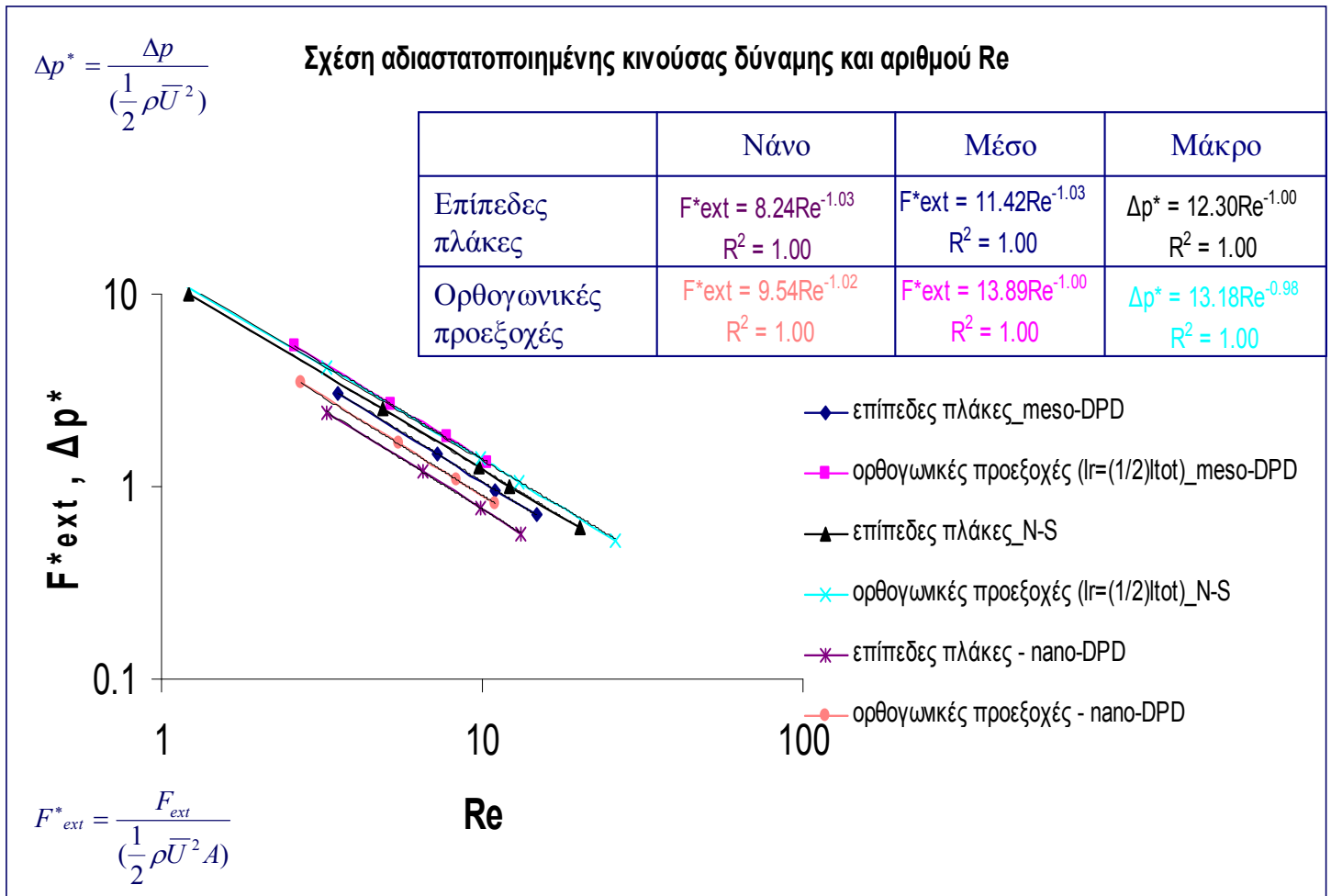
7.5 Αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη συναρτήσει του αριθμού Re

Παρουσιάστηκαν τα διαγράμματα επίδρασης της αδιαστατοποιημένης κινούσας δύναμης του ρευστού συναρτήσει του αριθμού Re. Η σύνταξη αυτών των διαγραμμάτων στοχεύει αφενός στο να δοθεί μια πλήρη εικόνα για το πώς επηρεάζει η διαμόρφωση των προεξοχών την τιμή των μακροσκοπικών ιδιοτήτων της ροής και αφετέρου ώστε να είναι εφικτή η σύγκριση των αποτελεσμάτων προσομοίωσης με τη μέθοδο DPD με τα αποτελέσματα που προκύπτουν με τη χρήση των εξισώσεων Navier-Stokes. Τα αποτελέσματα της ροής Poiseuille (πρόβλημα βάση) με τη μέθοδο DPD για τη μεσοσκοπική κλίμακα είναι πολύ κοντά στη μακροσκοπική λύση. Η λύση όμως της ροής σε αγωγούς με ορθογωνικές προεξοχές δεν είναι γνωστή και μια σύγκριση με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από τις μακροσκοπικές εξισώσεις συνέχειας και ορμής και από τη μέθοδο προσομοίωσης DPD είναι επιθυμητή, ώστε αφενός να επιβεβαιώσουμε τα αποτελέσματα της προσομοίωσης DPD και αφετέρου να κατοχυρώσουμε την ορθότητα της λύσης η οποία θα μας εξασφαλίσει τη σύνταξη μεθοδολογίας για ανάλογα προβλήματα.

Η άμεση σύγκριση των αποτελεσμάτων δεν είναι εφικτή λόγω διαφορών στην κλίμακα του προβλήματος και έτσι κρίθηκε απαραίτητη η εισαγωγή αδιάστατων παραμέτρων ώστε να αποφευχθούν σφάλματα που πιθανότατα οφείλονται σε διαφορές όπως η γεωμετρία του προβλήματος, τα μεγέθη των αγωγών κ.λ.π. Έτσι λοιπόν δόθηκαν τα δύο βασικά μεγέθη που χαρακτηρίζουν τη ροή και είναι το αίτιο κίνησης του ρευστού και ο αριθμός Re .

Στην νανοσκοπική και τη μεσοσκοπική ροή εξωτερικό αίτιο κίνησης του ρευστού αποτελεί η κινούσα δύναμη που ασκείται σε κάθε σωματίδιο, ενώ στη μακροσκοπική ροή θεωρείται η διαφορά της πίεσης ανάμεσα στην είσοδο και την έξοδο του υπολογιστικού φατνίου. Σε κάθε περίπτωση υπολογίστηκαν αριθμοί Re που είναι πολύ κοντά ώστε να είναι εφικτή η άμεση σύγκριση των διαφορετικών μεθόδων προσομοίωσης.

Η σύγκριση της μεσοσκοπικής και της μακροσκοπικής προσέγγισης (Σχ. 7.1) απέδειξε ότι η μέθοδος προσομοίωσης DPD μπορεί με μεγάλη προσέγγιση να δώσει αξιόπιστη λύση σε μεγάλου μεγέθους προβλήματα (της τάξεως του $0.10\mu\text{m}$) καθώς παρατηρείται ότι η σχέση που συνδέει την αδιαστατοποιημένη κινούσα δύναμη με τον αριθμό Re είναι περίπου ίδια με αυτή που προκύπτει από την επίλυση με τις εξισώσεις Navier-Stokes . Διαφορές εντοπίζονται στα αποτελέσματα της ροής σε νανοαγωγό με περιοδικές προεξοχές με τα αποτελέσματα των μακροσκοπικών εξισώσεων συνέχειας και ορμής. Εκτιμάται ότι οι διαφορές αυτές μπορούν να απαλειφθούν με κατάλληλη επιλογή του συντελεστή αλληλεπίδρασης των συντηρητικών δυνάμεων μεταξύ των σωματιδίων.



Σχήμα 7.1. Σύγκριση της αδιαστατοποιημένης πτώσης πίεσης και δύναμης συναρτήσει του αριθμού Re για ύψος προεξοχής $h = 0.10H$ και μήκος $l_{r1} = 0.50l_{tot}$ για επίλυση με τις εξισώσεις Navier-Stokes και τη μέθοδο DPD.

Συμπεραίνουμε λοιπόν ότι η μέθοδος προσομοίωσης DPD είναι μία μέθοδος που παρέχει έγκυρα αποτελέσματα σε ροές μεσοσκοπικής κλίμακας όχι μόνο για τη ροή Poiseuille αλλά ακόμη και για τη ροή σε αγωγούς με ορθογωνικές προεξοχές.

7.6 Σύνοψη

Συνοψίζοντας τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων της διατριβής για τις ροές σε νανοαγωγούς, σε αγωγούς μεσοσκοπικής κλίμακας και σε αγωγούς μακροσκοπικής κλίμακας με ορθογωνικές προεξοχές της επάνω πλάκας παρατηρούνται τα εξής

- Η μέθοδος DPD μπορεί να δώσει απαντήσεις σε προβλήματα ροών μεσοσκοπικής κλίμακας.
- Οι προσομοιώσεις με τη μέθοδο DPD δίνουν πληροφορίες για τη συμπεριφορά του ρευστού κοντά στα στερεά τοιχώματα και λαμβάνουν υπόψη το υλικό των τοίχων, κάτι που αγνοεί η μακροσκοπική προσέγγιση.
- Με τη μέθοδο αυτή μπορούν να προσδιοριστούν οι μακροσκοπικές ιδιότητες της ροής (πυκνότητα, ταχύτητα, πίεση, θερμοκρασία) για αγωγούς από μερικά νανόμετρα έως μερικά μέτρα.
- Τα αποτελέσματα της μεθόδου DPD στις ιδιότητες της ροής επηρεάζονται από διάφορους παράγοντες με σημαντικότερους το συντελεστή αλληλεπίδρασης των σωματιδίων τοίχου με τα σωματίδια του ρευστού και την πυκνότητα των τοίχων.
- Η διαμόρφωση προεξοχών οδηγεί σε επιβράδυνση των σωματιδίων μέσα στις εσοχές.
- Όσο οι εσοχές 'στενεύουν', τόσο ο μέσος χρόνος παραμονής των σωματιδίων στις εσοχές αυξάνεται και η ταχύτητα μειώνεται, μειώνοντας τη συνολική ταχύτητα μέσα στο αγωγό. Μέσα στις εσοχές εντοπίζονται πολύ μικρές ταχύτητες ροής.
- Η διαμόρφωση προεξοχών οδηγεί στην εμφάνιση περιοχών υψηλής πίεσης μέσα στις εσοχές, η τοπολογία και ο αριθμός των οποίων είναι σε άμεση συνάρτηση με το μήκος και το ύψος της προεξοχής. Γενικότερα, μείωση του μήκους και αύξηση του

ύψους της προεξοχής οδηγεί σε αύξηση του αριθμού αυτών των περιοχών. Στο κεντρικό τμήμα παρατηρείται μείωση της πίεσης με την αύξηση του μήκους της προεξοχής.

- Η θερμοκρασία σταθεροποιείται γύρω από μια μέση τιμή της οποίας το μέγεθος εξαρτάται από το ύψος και το μήκος της προεξοχής. Η μείωση του μήκους και η αύξηση του ύψους οδηγεί σε μείωση της θερμοκρασίας του ρευστού.
- Η συμπεριφορά της αδιαστατοποιημένης κινούσας δύναμης συναρτήσει του αριθμού Re είναι γραμμική σε log-log κλίμακα για όλους τους αγωγούς.

ΑΓΓΛΙΚΗ ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- Abraham, F., Broughton, J. Q., Bernstein, N., and Kaxiras, E., 1998, 'Spanning the Length Scales in Dynamic Simulation', *Computers in Physics* 12/6(538).
- Akhmatskaya, E., Todd, B. D., Davis, P. J., Evans, D. J., Gubbins, K. E. and Pozhar, L. A., 1997, 'A study of viscosity inhomogeneity in porous media', *Journal of Chemical Physics* 106(4684).
- Andersen, H.C., 1980, 'Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature' *J. Chem. Phys.*, Vol.72, pp.2384-2393.
- Allen, M. P. and Tildesley, T. J., 1987, 'Computer Simulation of Liquids', *Clarendon Press, Oxford*.
- Baudet, C., Hulin, J.P., Lallemand, P., d'Humieres, D., 1989, 'Lattice-gas automata: a model for the simulations of dispersed phenomena', *Phys. Fluids*, vol.A(1), pp.507-512.
- Beazley, D.M., Lomdahl, P.S., Gronbech-Jansen, N., Giles, R., Tomayo, P., 1996, 'Parallel Algorithms for Short Range Molecular Dynamics', *Annual Reviews of Computational Physics III, World Scientific*, pp.119-175.
- Bitsanis, I., Vanderlick, T.K., Tirell, M., Davis, H.T., 1988, 'A tractable molecular theory of flow in strongly inhomogeneous fluids', *Journal of Chemical Physics* 89(5).
- Bhatnagar, P.L., Gross, E.P., Krook, M.A., 1954, 'A model for collision processes in gases', *Phys.Rev*, vol.94 , pp.511-525.
- Bowers, K.J., Chow, E., Xu, H., Dror, R.O., Eastwood, M.P., Gregersen, B.A., Klepeis, J.L., Kolossvary, I., Moraes, M.A., Sacerdoti, F.D., Salmon, J.K., Shan, Y.,

- Shaw, D.E., ‘Scalable Algorithms for Molecular Dynamics Simulations on Commodity Clusters’, *D.E. Shaw Research, LLC, New York, NY 10036, USA*.
- Cao, B.Y., Chen, M., Guo, Z.Y., 2006, ‘Effect of Surface Roughness on Gas Flow in Microchannels by Molecular Dynamics Simulation’, *Int. J. Eng. Sc.*, vol 44, pp. 927 - 937.
- Cercignani, C., 1969, ‘Mathematical Methods in Kinetic Theory’, *Plenum, New York*.
- CFX – 5 Solver Theory, 2006, ‘Automatic Timescale Calculation, Basic Solver Capability Theory’, *Computational Fluid Dynamics – CFD Software manual*, pp. 49–50.
- Chan, D. Y. and Horn, R. G., 1985, ‘The drainage of thin liquid films between solid surfaces’, *J. Chem.Phys*, vol.83(10), pp.5311-5324.
- Chatterjee, A., 2007, 'Modification to Lees-Edwards periodic boundary condition for dissipative particle dynamics simulation with high dissipation rates', *Molecular Simulation*, vol.33(15), pp.1233-1236.
- Chen, S. and Doolen, G.D., 1998, ‘Lattice Boltzmann method for fluid flows’, *Annu. Rev. Fluid Mechanics*, vol.30, pp.329-364.
- Chen, S., Guo, C., Hu, G.H., Liu, H.Z., Liang, X.F., Wnag, J., Ma, J.H., Zheng, L., 2007, 'Dissipative particle dynamics simulation of gold nanoparticles stabilization by PEO–PPO–PEO block copolymer micelles’, *Colloid Polym Sci*, vol.285, pp.1543–1552
- Courant, R., Friedrichs, K. and Lewy, H., 1928, ‘Über die partiellen Differenzgleichungen der mathematischen Physik’, *Mathematische Annalen*, vol. 100(1), pp. 32–74.

- Cundall, P.A. and Strack, O.D.L., 1979, 'A Discrete Numerical Model for Granular Assemblies', *Géotechnique*, vol.29, pp.47-65.
- Dzwinel, W., Boryczko, K., Yuen, D.A., 2006, 'Modelling Mesoscopic Fluids with Discrete-Particles Methods, Algorithms and Results', *Heteroaggregate Finely Dispersed Systems of Biological Interest. A.M. Spasic & J.P. Hsu eds., Taylor&Francis, CRC Press*, pp. 715-778.
- Ellero, M., 2004, 'Smoothed Particle Dynamics Methods for the Simulation of Viscoelastic Fluids', *Ph.D.thesis*, University of Berlin.
- Espanol, P. and Warren, P., 1995, 'Statistical mechanics of dissipative particle dynamics', *Europhys. Lett.*, vol.30, pp.191-196.
- Espanol, P., 1998, 'Fluid Particle Model', *Phys. Rev.*, vol.E(57), pp.2930-2948.
- Fan, X., Phan-Thien, N., Yong, N., Wu, X. and Xu, D., 2003, 'Microchannel flow of a macromolecular suspension', *Phys. Fluids*, vol.15(11), pp.11-21.
- Fan, X., Phan-Thien, N., Chen, S., Wu, X. and Ng, T., 2006, 'Simulating flow of DNA suspension using dissipative particle dynamics', *Phys. Fluids*, vol.18(6), pp.063102-1-063102-10.
- Fedosov, D.A., Pivkin, I.V. and Karniadakis, G.E., 2008, 'Velocity limit in DPD simulations of wall-bounded flows', *J. Comput. Phys.*, vol.227, pp.2540-2559.
- Flekkøy, E.G., 1993, 'Lattice Bhatnagar-Gross-Krook models for miscible fluids', *Phys.Rev*, vol.E(47), pp.4247-4257.
- Forrest, B.M., Suter, U.W., 1995, 'Time-Coarse-Graining in Flexible Models of Polymer Melts', *J. Computer-Aided Mater. Des*, vol. 2, pp.259-269.

- Fyta, M.G., Melchionna, S., Kaxiras, E. and Succi, S., 2006, 'Multiscale coupling of molecular dynamics and hydrodynamics: application to DNA translocation through a nanopore', *Multiscale Model. Simul.*, Vol.4(4), pp.1156-1173.
- Galea, T. M. and Attard, P., 2004, 'Molecular dynamics study of the effect of atomic roughness on the slip length at the fluid-solid boundary during shear flow', *Langmuir* 20(3477).
- Groot, R.D. and Warren, P.B., 1997, 'Dissipative particle dynamics: bridging the gap between atomistic and mesoscopic simulation', *J. Chem. Phys.*, vol.107, pp.4423-4435.
- Groot, R.D., Rabone, K.L., 2001, 'Mesoscopic simulation of cell membrane damage, morphology change and rupture by nonionic surfactants', *Biophysical Journal*, vol.81(2), pp.725-736.
- Haile, P.M., 1992, 'Molecular Dynamics Simulation', *Wiley&Sons, New York*.
- Hansen, J.S. and Ottesen, J.T., 2006, 'Molecular dynamics simulations of oscillatory flows in microfluidic channels', *Microfluidic Nanofluidic* 2(301).
- Henrich, B., Cupelli, C., Moseler, M. and Santer, M., 2007, 'An adhesive DPD wall model for dynamic wetting' *Europhys. Lett.* 60 (6004).
- Heinbuch, U. and Fischer, J., 1989, 'Liquid flow in pores: Slip, no-slip, or multilayer sticking', *Physical Review A* 40(1144).
- Herman, C., Kang, E., 2002, 'Heat transfer enhancement in a grooved channel with curved vanes', *Int. J. Heat Mass Transf.*, vol. 45, pp. 3741-3757.
- Holian, B.L., Ravelo, R., 1995, 'Fracture Simulation Using Large-Scale Molecular Dynamics', *Phys. Rev. B.*, vol.51(17), 11275-11285.
- Hoogerbrugge, P.J. and Koelman, J.M.V.A., 1992, 'Simulating microscopic hydrodynamic phenomena with dissipative particle dynamics', *Europhys. Lett.*, vol.19, pp.155-160.

- Hu, Y.Z., Wang, H., Guo, Y., Zheng, L.Q., 1996, 'Simulation of lubricant rheology in thin film lubrication Part I: simulation of Poiseuille flow', *Wear* 196.
- Irving, J.H. and Kirkwood, J.G., 1950, 'The statistical mechanics of transport processes. IV. The equation of hydrodynamics', *J. Chem. Phys.*, vol.18, pp.817.
- Jabbarzadeh, A., Atkinson, J.D. and Tarner, R.I., 2000, 'Effect of the wall roughness on slip and rheological properties of hexadecane in molecular dynamics simulation of Couette shear flow between two sinusoidal walls', *Physical Review*, vol.E (61), pp.1.
- Karniadakis, G., Beskok, A. and Aluru, N., 2005, 'Microflows and Nanoflows, Fundamentals and Simulation', *Springer, Chapter 16*.
- Keaveny, E.E., Pivkin, I.V., Maxey, M. and Karniadakis, G., 2005, 'A comparative study between dissipative particle dynamics and molecular dynamics for simple- and complex-geometry flows', *J. Chem. Phys.*, vol.123, pp.104107-1 -104107-9.
- Koh, S.J.A., Lee, H.P., Lu, C. and Cheng, Q.H., 2005, 'Molecular dynamics simulation of a solid platinum nanowire under uniaxial tensile strain: Temperature and strain-rate effects', *Phys.,Rev.*, vol.B(72), pp.085414 -1 - 085414-11.
- Krivtsov, A.M. and Wiercigroch, M., 2001, 'Molecular Dynamics simulation of mechanical properties for polycrystal materials', *Mater.Phys.Mech.*, vol.3, pp.45-51.
- Ladd, A.J.C. and Verberg, R., 2001, 'Lattice-Boltzmann Simulations of Particle-Fluid Suspensions', *J. Stat. Phys.*, vol.104, pp.1191-1251.
- Liu, M., Meakin, P. and Huang, H., 2007, 'Dissipative particle dynamics simulation of fluid motion through an unsaturated fracture and fracture junction', *Phys. Fluids*, vol.22, pp.110-130.

- Li, Z., and Drazer, G. 2008, 'Hydrodynamic interactions in dissipative particle dynamics', *Phys. Fluids*, vol.20, pp.103601-1-103601-8.
- Lowe, C.P., 1999, 'An alternative approach to Dissipative Particle Dynamics', *Europhys. Lett.*, vol.47, pp.145-151.
- Lutsko, J.F., Boon, J.P. and Somers, J.A., 1992, 'Lattice gas automata simulations of viscous fingering in a porous medium, in T.M.M. Verheggen Numerical Methods for the Simulation of Multi-Phase and Complex Flow', *Springer Verlag, Berlin*, vol.398 pp. 124-135.
- Maiti, A., McGrother, S., 2004, 'Bead-bead interaction parameters in dissipative particle dynamics: relation to bead-size, solubility parameter, and surface tension', *Journal of Chemical Physics*, vol.120(3), pp.1594–1601.
- Manwart, C., Aaltosalmi, U., Koponen, A., Hilfer, R., Timonen, J., 2002, 'Lattice-Boltzmann and finite-difference simulations for the permeability for three-dimensional porous media', *Phys.Rev.*, vol.E(66), pp.1.
- Marsh, C., 1998, 'Theoretical aspect of dissipative particle dynamics', *Ph.D.thesis*, *University of Oxford*.
- Martys, N., Chen, H., 1996, 'Simulation of multicomponent fluids in complex three-dimensional geometries by the lattice Boltzmann method', *Phys.Rev*, vol.E(53), pp.743-750.
- Monaghan, J.J., 1992, 'Smoothed Particle Hydrodynamics', *Annu.Rev.Astronomy Astrophysics*, vol.30, pp.543-574.

- Moscinski, J., Alda, W., Bubak, M., Dzwinel, W., Kitowski, J., Pogoda, M., Yuen, D.A., 1997, 'Molecular Dynamics Simulations of Rayleigh-Taylor Instability', *Ann. Rev. of Comput. Phys.*, vol.V, pp.97-136.
- Mukhopadhyay, S. and Abraham, J., 2009, 'Particle-based multiscale model for submicron fluid flows', *Phys. Fluids*, vol.21, pp.027102-1-027102-13.
- Nagayama, G. and Cheng, P., 2004, 'Effects of interface wettability on microscale flow by molecular dynamics simulation', *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol.47, pp.501-513.
- Naris, S. and Valougeorgis, D., 2007, 'Boundary – driven nonequilibrium gas flow in a grooved channel via kinetic theory', *Phys.Fluids*, vol.19, pp.067103-1 - 067103-15.
- Narumi, T., Kawai, A., Koishi, T., 2001, 'An 8.61 Tflop/s Molecular Dynamics Simulation for NaCl with a Special-Purpose Computer: MDM', *Computational Science Division, Advanced Computing Center, RIKEN*.
- Nikunen, P., Karttunen, M., Vattulainen, I., 2003, 'How would you integrate the equations of motion in dissipative particle dynamics simulations?', *Computer Physics Communications*, vol.153 , pp.407–423.
- Oran, E., Oh, C., Cybyk, B., 1998, 'Direct simulation monte carlo: Recent advances and applications', *Annu.Rev.Fluid Mech.*, vol.30 , pp.403-441.
- Pagonabarraga, I., Hagen, M.H.J. and Frankel, 1998, 'Self-consistent dissipative particle dynamics algorithm', *Europhys. Lett.*, vol.42 (4), pp.337-382.

- Pivkin, I.V. and Karniadakis, G.E., 2005, 'A new method to impose no-slip boundary conditions in dissipative particle dynamics', *J. Comput. Phys.*, vol.207, pp.114-128.
- Plimpton, S.J., 1995, 'Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics', *J.Comp.Phys.*, vol.117, pp.1-19.
- Priezjev, N. and Troian, S., 2006, 'Influence of periodic wall roughness on the slip behaviour at liquid/solid interfaces: molecular-scale simulations versus continuum predictions', *J. Fluid Mech.*, vol. 554, pp.25-46.
- Rapaport, D. C., 1995, 'The Art of Molecular Dynamics Simulation', *Cambridge University Press*.
- Reventa, M., Zuniga, I., Espanol, P., Pagonabarraga, I., 1998, 'Boundary models in DPD', *International Journal of Modern Physics*, vol.C9(8), pp.1319-1328.
- Reventa, M., Zuniga, I. and Espanol, P., 1999, 'Boundary conditions in dissipative particle dynamics', *Comp. Phys. Comm.*, vol.121-122, pp.309-311.
- Rothman, D.H., 1988, 'Cellular Automaton Fluids: a model for flow in porous media', *Geophysics*, vol.53, pp.509-518.
- Shakhov, E.M., 1974, 'Method of Investigation of Rarefied Gas Flows', *Nauka, Moscow,(in Russian)*.
- Shardlow, T., 2003, 'Splitting for dissipative particle dynamics', *SIAM J. Sci. Comp.*, vol.24 , pp.1267-1282.
- Sofos, F.D., Karakasidis, T.E., Liakopoulos, A., 2008, 'Non-Equilibrium Molecular Dynamics investigation of parameters affecting planar nanochannel flows' (submitted for publication).

- Sofos, F., Karakasidis, T.E., Liakopoulos, A., 2008, 'Transport properties of liquid argon in krypton nanochannels: Anisotropy and non-homogeneity introduced by the solid walls', *doi:10.1016/j.ihemasstransfer.2008.07.022*.
- Sofos, F.D., Karakasidis, T.E., Liakopoulos, A., 2009, 'Effects of wall roughness on flow in nanochannels', *Phys.,Rev.*, vol.E(79), pp.026305-1-026305-7.
- Somers, S.A. and Davis, H.T., 1991, 'Microscopic dynamics of fluids confined between smooth and atomically structured solid surfaces', *Journal of Chemical Physics* 96(5389).
- Stockman, H.W., Li, C. and Wilson, J.L., 1997, 'A lattice-gas and lattice Boltzmann study of mixing at continuous fracture junctions: Importance of boundary conditions', *Geophys. Res. Lett.*, vol.24, pp.1515-1518.
- Swift, M.R., Orlandini, E., Osborn, W.R., Yeomans, J., 1996, 'Lattice Boltzmann Simulations of Liquid-Gas and Binary-Fluid systems', *Phys.,Rev.*, vol.E(54), pp.5041-5052.
- Symeonidis, V., Karniadakis, G.E. and Caswell, B., 2005, 'A Seamless Approach to Multiscale Complex Fluid Simulation', *IEE CS and the AIP*, May/June 2005, pp.39-46.
- Travis, B.J., Eggert, K., Grunau, D., Chen S.Y. and Doolen, G. 1993 'Lattice Boltzmann Models for Flow in Porous Media', in *Computing at the Leading Edge: Research in the Energy Sciences*, eds. A. A. Mirin, and P. T. Van Dyke, National Energy Research Supercomputer Center, Lawrence Livermore National Laboratory Rep. UCRL-TB-111084, pp. 42-47.
- Travis, K.P., Todd, B.D. and Evans, D. J., 1997, 'Departure from Navier-Stokes hydrodynamics in confined liquids', *Physical Review E* 55(4288).

- Travis, K.P. and Gubbins, K.E., 2000, 'Poiseuille flow of Lennard-Jones fluids in narrow slit pores', *Journal of Chemical Physics* 112(1984).
- Thompson, D.S., Machiraju, R., Dusi, V.S., Jiang, M., Nair, J., Thampy, S., Craciun, G., 2002, 'Physics-based Feature Mining of Computational Fluid Dynamics Data Sets', *Special Issue of IEEE Computing in Science and Engineering on Data Mining*, pp 22-30.
- Uspal, W., 2007, 'Control of Budded Domains in Amphiphilic Bilayer Membranes', *Ph.D.thesis, University of Pittsburg*.
- Welander, P., 1954, 'On the temperature jump in a rarefied gas', *Arkiv Fys.*, vol.7(5), pp.507-553.
- Ziarani, A.S. and Mohammad, A.A., 2005, 'A molecular dynamics study of perturbed Poiseuille flow in a nanochannel', *Microfluidic Nanofluidic* 2(12).
- Ziarani, A.S. and Mohammad, A.A., 2006, 'Molecular dynamics study of velocity slip in microchannels', *Proceedings of the 17th IASTED International Conference Modelling and Simulation*, Montreal, Canada.
- Zhu, Y. and Granick, S., 2001, 'Rate-dependent slip of Newtonian liquid at smooth surfaces', *Phys. Rev. Lett.*, 87(9), 096105.
- Zhu, Y. and Granick, S., 2002, 'Limits of the hydrodynamic no-slip boundary condition', *Phys. Rev. Lett.*, 88(10), 106102.

ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- Κασιτεροπούλου, Δ., 2007, 'Μελέτη Ροής σε Κλειστούς Αγωγούς με Περιοδικά Τοιχώματα', *Μεταπτυχιακή Διατριβή, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών, Εργαστήριο Υδρομηχανικής και Περιβαλλοντικής Τεχνικής, Βόλος.*
- Κασιτεροπούλου, Δ., Σοφός, Φ., Καρακασίδης, Θ., Λιακόπουλος, Α., 2008, 'Μοντελοποίηση Πολλαπλής Κλίμακας σε Κανάλια με περιοδικές προεξοχές', *ΡΟΗ 2008, Κοζάνη.*
- Λιακόπουλος, Α. 2008, 'Μαθήματα Ρευστομηχανικής', *Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών, Βόλος.*
- Λιακόπουλος, Α. 2009, 'Μαθήματα Ρευστομηχανικής', *Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών, Βόλος.*
- Σοφός, Φ., 2009, 'Ροές Υγρών στην Νανοκλίμακα : Αριθμητική Προσομοίωση με Μεθόδους Μοριακής Δυναμικής', *Διδακτορική Διατριβή, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών, Εργαστήριο Υδρομηχανικής και Περιβαλλοντικής Τεχνικής, Βόλος.*

ΠΙΝΑΚΑΣ ΣΥΜΒΟΛΩΝ

Λατινικοί χαρακτήρες

D	Συντελεστής διάχυσης
F_{ext}	Κινούσα δύναμη ανά σωματίδιο (μέτρο)
\vec{F}_{ij}^C	Συντηρητική δύναμη που ασκεί το σωματίδιο i στο σωματίδιο j
\vec{F}_i^C	Συντηρητική δύναμη που ασκείται στο σωματίδιο i
\vec{F}_{ij}^D	Δύναμη απωλειών που ασκεί το σωματίδιο i στο σωματίδιο j
\vec{F}_i^D	Δύναμη απωλειών που ασκείται στο σωματίδιο i
\vec{F}_{ij}^R	Στοχαστική δύναμη που ασκεί το σωματίδιο i στο σωματίδιο j
\vec{F}_i^R	Στοχαστική δύναμη που ασκείται στο σωματίδιο i
\vec{g}	Δύναμη της βαρύτητας
H	Συνολικό πλάτος του αγωγού (κατεύθυνση y)
h	Απόσταση μεταξύ των πλακών του αγωγού (κατεύθυνση y)
k_B	Σταθερά του Boltzmann
l_{ri}	Μήκος ορθογωνικών προεξοχών της επάνω πλάκας (Σχήμα 1)
L_x	Μήκος του υπολογιστικού φατνίου στη x -κατεύθυνση (Σχήμα Π1.1)
L_y	Μήκος του υπολογιστικού φατνίου στη y -κατεύθυνση (Σχήμα Π1.1)
L_z	Μήκος του υπολογιστικού φατνίου στη z -κατεύθυνση (Σχήμα Π1.1)
m_i	Μάζα σωματιδίου i
n_f, n_w	Αριθμητική πυκνότητα ρευστού, τοίχου σε μονάδες r_c^{-3}
N_{bin}	Μέσος αριθμός σωματιδίων στο χρόνο ανά υπολογιστικό κελί

N	Αριθμός σωματιδίων
N_i	Συναρτήσεις μορφής στον κόμβο i
N_m	Αριθμός ατόμων στο σωματίδιο DPD
p	Πίεση
r_c	Ακτίνα αποκοπής
\vec{r}_{ij}	Διάνυσμα απόστασης μεταξύ του σωματιδίου i και του σωματιδίου j
\vec{r}_i	Διάνυσμα θέσης του σωματιδίου i
r_{ij}	Απόσταση μεταξύ του σωματιδίου i και του σωματιδίου j
R_{FF}	Συντελεστής διακύμανσης διαδικασίας Wiener
S	Τανυστής τάσης
S_c	Αριθμός Schmidt
T	Θερμοκρασία
\vec{u}_i	Διάνυσμα ταχύτητας του σωματιδίου i
u_i	i -οστή συνιστώσα της ταχύτητας του σωματιδίου, $i = 1,2,3$ (μέτρο)
\bar{u}_i	i -οστή συνιστώσα της μέσης μακροσκοπικής ταχύτητας
u_i, v, w	Συνιστώσες της ταχύτητας κατά τις κατευθύνσεις x, y, z
V	Όγκος του υπολογιστικού φατνίου

Ελληνικοί χαρακτήρες

α	Σταθερά (=0.101) (μέθοδος DPD, Εξ.3.10)
α_{ij}	Συντελεστής αλληλεπίδρασης σωματιδίου i με το σωματίδιο j (α_w συντελεστής αλληλεπίδρασης των σωματιδίων του τοίχου, α_f του ρευστού, α_e) ο συντελεστής αλληλεπίδρασης των σωματιδίων τοίχου και ρευστού
γ	Συντελεστής βαρύτητας της δύναμης απωλειών (μέθοδος DPD)
Δt	Χρονικό βήμα προσομοίωσης (=dt)
ε	Παράμετρος ενέργειας ($T = \frac{\varepsilon}{k_B}$)
κ^{-1}	Αδιάστατη συμπιεστότητα του ρευστού
μ	Δυναμικό ιξώδες
ν	Κινηματικό ιξώδες
ρ	Πυκνότητα του ρευστού σε μονάδες Kg/m^3
ρ_{DPD}^*	Αριθμητική πυκνότητα του συστήματος DPD σε μονάδες σ^{-3}
ρ_{MD}	Αριθμητική πυκνότητα του συστήματος DPD για $N_m=1$ σε μονάδες σ^{-3}
σ	Συντελεστής βαρύτητας της στοχαστικής δύναμης (μέθοδος DPD)
τ	Αδιαστατοποιημένο χρονικό βήμα
ξ_{ij}	Πίνακας με μεταβλητές Γκαουσιανής κατανομής
ω^D	Συντελεστής βαρύτητας της δύναμης απωλειών (μέθοδος DPD)
ω^R	Συντελεστής βαρύτητας της στοχαστικής δύναμης (μέθοδος DPD)

ΒΙΟΓΡΑΦΙΚΟ ΣΗΜΕΙΩΜΑ

ΟΝΟΜΑ: Κασιτεροπούλου Δωροθέα
ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ ΓΕΝΝΗΣΗΣ: 24 Σεπτεμβρίου 1980
ΤΟΠΟΣ ΚΑΤΟΙΚΙΑΣ: Σκοπιάδων 17, Λάρισα
ΤΗΛΕΦΩΝΟ: 2410621052, 6947047845
E – MAIL: dkasiter@uth.gr

ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ:

ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ ΚΤΗΣΗΣ: 16/07/2004
ΕΚΠΑΙΔΕΥΤΙΚΟ ΙΔΡΥΜΑ: Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας - Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών
ΤΙΤΛΟΣ: Δίπλωμα Πολιτικού Μηχανικού
ΚΑΤΕΥΘΥΝΣΗ: Υδραυλικός Τομέας
ΤΟΜΕΑΣ ΕΙΔΙΚΕΥΣΗΣ: Διαχείριση Υδατικών Πόρων - Υδραυλικά έργα
ΒΑΘΜΟΣ: 8,24 (Λίαν Καλώς)

ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ ΚΤΗΣΗΣ: 26/07/2007
ΕΚΠΑΙΔΕΥΤΙΚΟ ΙΔΡΥΜΑ: Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας - Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών
ΤΙΤΛΟΣ: Μεταπτυχιακό Δίπλωμα Ειδίκευσης Πολιτικού Μηχανικού
ΚΑΤΕΥΘΥΝΣΗ: Εφαρμοσμένη Μηχανική και Προσομοίωση Συστημάτων
ΤΟΜΕΑΣ ΕΙΔΙΚΕΥΣΗΣ: Μελέτη ροών σε κλειστούς αγωγούς με περιοδικά τοιχώματα
ΒΑΘΜΟΣ: 8,13 (Λίαν Καλώς)

ΕΠΑΓΓΕΛΜΑΤΙΚΗ ΕΜΠΕΙΡΙΑ:

1.ΤΙΤΛΟΣ ΜΕΛΕΤΗΣ: Συμμετοχή σε πανελλήνιο αρχιτεκτονικό διαγωνισμό :
ΜΕΛΕΤΗ ΔΗΜΑΡΧΙΑΚΟΥ ΜΕΓΑΡΟΥ ΜΕΣΣΟΛΟΓΓΙΟΥ

ΦΟΡΕΑΣ ΑΝΑΘΕΣΗΣ: ΔΗΜΟΣ ΜΕΣΣΟΛΟΓΓΙΟΥ

ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΟ
ΑΠΑΣΧΟΛΗΣΗΣ: Επιστημονικός συνεργάτης – Συνεργασία στα πλαίσια
πρακτικής άσκησης

ΔΙΑΡΚΕΙΑ: 08/2002-01/2003

2.ΤΙΤΛΟΣ ΜΕΛΕΤΗΣ: ΚΑΤΑΣΚΕΥΗ ΚΑΙ ΕΞΟΠΛΙΣΜΟΣ ΚΛΕΙΣΤΟΥ
ΚΟΛΥΜΒΗΤΗΡΙΟΥ ΔΗΜΟΥ ΤΥΡΝΑΒΟΥ

ΦΟΡΕΑΣ ΑΝΑΘΕΣΗΣ: ΔΗΜΟΣ ΤΥΡΝΑΒΟΥ

ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΟ
ΑΠΑΣΧΟΛΗΣΗΣ: Επιστημονικός συνεργάτης – Συνεργασία στα πλαίσια
πρακτικής άσκησης (Διαγωνισμός με το σύστημα μελέτη –
κατασκευή)

ΔΙΑΡΚΕΙΑ: 01/2003-07/2003

3.ΤΙΤΛΟΣ ΜΕΛΕΤΗΣ: ΜΕΛΕΤΗ ΚΤΙΡΙΑΚΩΝ ΕΓΚΑΤΑΣΤΑΣΕΩΝ
ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΠΟΛΙΤΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ

ΦΟΡΕΑΣ ΑΝΑΘΕΣΗΣ: ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ

ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΟ
ΑΠΑΣΧΟΛΗΣΗΣ: Επιστημονικός συνεργάτης (προμελέτη, οριστική μελέτη,
μελέτη εφαρμογής, Τεύχη δημοπράτησης)

ΔΙΑΡΚΕΙΑ: 09/2004-03/2005

4.ΤΙΤΛΟΣ ΜΕΛΕΤΗΣ:	<u>ΜΕΛΕΤΗ ΥΠΟΔΟΜΩΝ & ΚΤΙΡΙΑΚΩΝ</u> <u>ΕΓΚΑΤΑΣΤΑΣΕΩΝ Τ.Ε.Φ.Α.Α. ΣΤΑ ΤΡΙΚΑΛΑ</u>
ΦΟΡΕΑΣ ΑΝΑΘΕΣΗΣ:	ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΟ ΑΠΑΣΧΟΛΗΣΗΣ:	Επιστημονικός συνεργάτης (προμελέτη, οριστική μελέτη, μελέτη εφαρμογής, Τεύχη δημοπράτησης)
ΔΙΑΡΚΕΙΑ:	09/2004-06/2005
ΔΙΔΑΚΤΙΚΗ ΕΜΠΕΙΡΙΑ:	
ΙΔΡΥΜΑ:	<u>Τ.Ε.Ι. ΛΑΡΙΣΑΣ, ΣΧΟΛΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΩΝ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ,</u> <u>ΤΜΗΜΑ ΠΟΛΙΤΙΚΩΝ ΕΡΓΩΝ ΥΠΟΔΟΜΗΣ</u>
ΔΙΑΡΚΕΙΑ:	03/2009-ΣΗΜΕΡΑ
ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΕΡΓΑ:	
ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ:	<u>01/01/2005-31/08/2006</u>
ΦΟΡΕΑΣ:	Γ.Γ.Ε.Τ. - Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας - Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών
ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΟ:	Συλλογή και καταγραφή δεδομένων με τα κύρια στοιχεία των δημοσιεύσεων και των ανακοινώσεων των ερευνητικών ομάδων του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας
ΑΡΜΟΔΙΟΤΗΤΕΣ:	Ερευνητική εργασία (σύμβαση έργου)
ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟΣ ΥΠΕΥΘΥΝΟΣ:	Βασίλειος Μποντόζογλου, Καθηγητής

ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ: 01/01/2006-01/01/2009

ΦΟΡΕΑΣ: Γ.Γ.Ε.Τ. - Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας - Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών

ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΟ: Μέθοδοι Μεσοσκοπικής και Μακροσκοπικής προσομοίωσης κίνησης ρευστών

ΑΡΜΟΔΙΟΤΗΤΕΣ: Ερευνητική εργασία (σύμβαση έργου)

ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟΣ ΥΠΕΥΘΥΝΟΣ: Αντώνιος Λιακόπουλος, Καθηγητής

ΥΠΟΤΡΟΦΙΕΣ:

- ο Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών, για την Επίδοση στις Σπουδές στο Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Ειδίκευσης : ‘Εφαρμοσμένη Μηχανική και Προσομοίωση Συστημάτων’

ΓΝΩΣΕΙΣ Η/Υ:

- Λειτουργικά Συστήματα: Windows, Linux
- Γλώσσες προγραμματισμού: Fortran
- Προγράμματα προσομοίωσης ατομικής κλίμακας: LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)
- Προγράμματα προσομοίωσης μακροσκοπικής κλίμακας: ANSYS - CFX (Computational Fluid)
- Προγράμματα διαχείρισης νερού: IWR - MAIN FORECAST AND CONSERVATION MANAGER
- MATLAB (Statistical, Mathematics,), AUTOCAD 2D – 3D, ARC/INFO, ARCHICAD, PUNCH, PHOTOSHOP

ΞΕΝΕΣ ΓΛΩΣΣΕΣ:

- Αγγλική
- Γαλλική

ΣΥΛΛΟΓΟΙ:

- Τεχνικό Επιμελητήριο Ελλάδος
- Σύλλογος Πολιτικών Μηχ/κών Ελλάδος
- Σύλλογος αποφοίτων Πανεπιστημίου Θεσσαλίας
- Σύλλογος Μεταπτυχιακών Φοιτητών του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας

ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΕΙΣ ΣΕ ΣΥΝΕΔΡΙΑ:

- Θ. Καρακασίδης, Φ. Σοφός, Δ. Κασιτεροπούλου, Α. Λιακόπουλος, Υπολογισμός Ιδιοτήτων Μεταφοράς με τη χρήση Μοριακής Δυναμικής, ΡΟΗ 2006, Πάτρα, Νοέμβριος 2006.
- D. Kasiteropoulou, A. Liakopoulos, T. Karakasidis, Friction laws for planar channels with idealized periodic roughness elements, Bulletin of the APS 52 (17), 2007.
- Δ. Κασιτεροπούλου, δίκτυο υδροΜΕΔΩΝ, 2η Πανελλήνια Συνάντηση μεταπτυχιακών φοιτητών και υποψήφιων διδασκτόρων, Βόλος, Ιούλιος 2008.
- Δ. Κασιτεροπούλου, Φ. Σοφός, Θ. Καρακασίδης, Α. Λιακόπουλος, Μοντελοποίηση Πολλαπλής Κλίμακας σε αγωγούς με περιοδικές προεξοχές, ΡΟΗ 2008, Κοζάνη, Νοέμβριος 2008.

ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ ΣΕ ΔΙΕΘΝΗ ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ:

- D. Kasiteropoulou, T.E. Karakasidis, and A. Liakopoulos, 2009, ‘Dissipative Particle Dynamics study of flow in periodically grooved nanochannels’, *Phys.,Rev.* (submitted).