



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΤΟΜΕΑΣ ΑΝΑΛΥΣΗΣ, ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΥ ΚΑΙ ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ
ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΚΑΙ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ

Μοντελοποίηση Τυρβώδους Καύσης με τη μεθοδολογία της υπολογιστικής μηχανικής και εφαρμογή σε θέματα Ασφάλειας Τεχνολογιών Υδρογόνου

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΗΛΙΑΣ ΤΟΛΙΑΣ

ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΟΣ ΜΗΧΑΝΙΚΟΣ

ΑΘΗΝΑ

2017

Η έγκριση της Διδακτορικής Διατριβής από την Ανωτάτη Σχολή Χημικών Μηχανικών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου δεν υποδηλώνει αποδοχή των γνώμων του συγγραφέα (Ν. 5343/1932, Άρθρο 202).

Η παρούσα Διδακτορική Διατριβή εκπονήθηκε στον Τομέα Ανάλυσης, Σχεδιασμού και Ανάπτυξης Διεργασιών και Συστημάτων της Σχολής Χημικών Μηχανικών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου. Το μεγαλύτερο μέρος του ερευνητικού έργου πραγματοποιήθηκε στο Εργαστήριο Περιβαλλοντικών Ερευνών του Ινστιτούτου Πυρηνικών και Ραδιολογικών Επιστημών και Τεχνολογίας, Ενέργειας και Ασφάλειας του Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. «Δημόκριτος».

Χρηματοδότηση: Υποτροφίες αριστείες Ι.Κ.Υ. μεταπτυχιακών σπουδών στην Ελλάδα – πρόγραμμα SIEMENS

Επιβλέπων

- Χ. Κυρανούδης, Καθηγητής, Σχολή Χημικών Μηχανικών Ε.Μ.Π.

Τριμελής Συμβουλευτική Επιτροπή

- Χ. Κυρανούδης, Καθηγητής, Σχολή Χημικών Μηχανικών Ε.Μ.Π.
- Α. Βενετσάνος, Ερευνητής Α', Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. «Δημόκριτος»
- Ν. Μαρκάτος, Ομότιμος Καθηγητής, Σχολή Χημικών Μηχανικών Ε.Μ.Π.

Επταμελής Εξεταστική Επιτροπή

- Χ. Κυρανούδης, Καθηγητής, Σχολή Χημικών Μηχανικών Ε.Μ.Π.
- Α. Βενετσάνος, Ερευνητής Α', Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. «Δημόκριτος»
- Ν. Μαρκάτος, Ομότιμος Καθηγητής, Σχολή Χημικών Μηχανικών Ε.Μ.Π.
- Μ. Φούντη, Καθηγήτρια, Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών Ε.Μ.Π.
- Κ. Γιαννάκογλου, Καθηγητής, Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών Ε.Μ.Π.
- Δ. Ασημακόπουλος, Καθηγητής, Σχολή Χημικών Μηχανικών Ε.Μ.Π.
- Θ. Στούμπος, Ερευνητής Α', Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. «Δημόκριτος»

Η Υποστήριξη της παρούσας Διδακτορικής Διατριβής έγινε στις 30/06/2017, στη Σχολή Χημικών Μηχανικών Ε.Μ.Π.

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να εκφράσω τις θερμές μου ευχαριστίες στον κ. Αλέξανδρο Βενετσάνο, για την ευκαιρία που μου έδωσε να εκπονήσω το συγκεκριμένο διδακτορικό, για τις γνώσεις που μου προσέφερε και για το άριστο κλίμα συνεργασίας που είχαμε. Ήταν πάντα εκεί, πρόθυμος να συζητήσουμε όλες τις απορίες και προβληματισμούς μου. Τον ευχαριστώ επίσης για την εμπιστοσύνη που μου έδειξε από τη πρώτη κιόλας μέρα, και για όλες τις ευκαιρίες τις οποίες μου χάρισε.

Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω τον κ. Νικόλαο Μαρκάτο, για την ουσιαστική επίβλεψη και βοήθεια που μου παρείχε πρόθυμα και αδιάκοπα καθ' όλη την διάρκεια της διατριβής μου, καθώς και για την αμεσότητα και φιλικότητα του. Επίσης τον ευχαριστώ θερμά για τις γνώσεις και την έμπνευση που μου παρείχε από τα χρόνια των μεταπτυχιακών μου σπουδών μέχρι και σήμερα.

Ιδιαίτερες ευχαριστίες θέλω να εκφράσω στον κ. Χρήστο Κυρανούδη, για την υποστήριξή του και την πολύτιμη βοήθεια που μου προσέφερε κατά την εκπόνηση της διατριβής μου. Ήταν πάντα ιδιαίτερα φιλικός και πρόθυμος να με βοηθήσει σε οποιοδήποτε πρόβλημα αντιμετώπιζα.

Θερμές ευχαριστίες εκφράζω στην κα. Στέλλα Γιαννίση, με την οποία συμπορευτήκαμε σε όλη τη διάρκεια των διδακτορικών μας σπουδών και με την οποία συνεργαστήκαμε στενά σε διάφορα ερευνητικά έργα. Με την κα. Γιαννίση μοιραστήκαμε όλες τις αγωνίες και τα άγχη, την ανησυχία για το αν θα προλάβουμε τα deadlines, αλλά και τις χαρές που προσφέρει το ταξίδι των διδακτορικών σπουδών. Την ευχαριστώ επίσης ιδιαιτέρως για την προθυμία και την υπομονή της στο να μου διορθώνει, πάντα με χαμόγελο, τόσο αγγλικά όσο και ελληνικά κείμενα μου. Η κριτική της και οι διορθώσεις της στο παρόν κείμενο ήταν πολύτιμες. Δε θα μπορούσα να είχα καλύτερο συνεργάτη.

Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά το Εργαστήριο Περιβαλλοντολογικών Ερευνών (ΕΠΕΡ) του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτου και τον διευθυντή του κ. Θάνο Στούμπο, για το άψογο εργασιακό επιστημονικό και φιλικό περιβάλλον που μου προσέφερε. Μέσα στο περιβάλλον αυτό είχα την ευκαιρία να διευρύνω τις γνώσεις μου και να εξελιχθώ σαν άνθρωπος. Γνώρισα αξιόλογους ανθρώπους με τους οποίους πέρα από επαγγελματικές αναπτύξαμε και ιδιαίτερα φιλικές σχέσεις. Πρώτα από όλους, θέλω να ευχαριστήσω τον κ. Νίκο Παπαδημητρίου, ένα υπόδειγμα επιστήμονα που δυστυχώς οι συνθήκες τον κάνουν να απομακρύνεται από τον χώρο της έρευνας, για την βοήθεια που μου παρείχε με την εμπειρία και τις γνώσεις του σε όλη τη διάρκεια των σπουδών μου, καθώς και για την πληθώρα επιστημονικών και μη συζητήσεων που είχαμε. Θερμές ευχαριστίες θέλω να εκφράσω επίσης στον κ. Νεκτάριο Κουτσουράκη για την συνεργασία που είχαμε, την ανταλλαγή απόψεων, καθώς και την ουσιαστική βοήθεια που μου παρείχε στην κατανόηση της μεθόδου LES. Η διδακτορική του διατριβή αποτέλεσε επίσης σημαντική βοήθεια σε εμένα. Επίσης τον ευχαριστώ για τις εύστοχες παρατηρήσεις του στο παρόν κείμενο. Τέλος θα ήθελα να ευχαριστήσω τον κ. Χρήστο Χατζηχρήστο για τις γνώσεις που απέκτησα από τις συζητήσεις μας και την εμπειρία του, την κ. Βίκυ Τσιουρή με την οποία μοιραζόμασταν το ίδιο γραφείο για αρκετά χρόνια, τον κ. Στέλιο Καρόζη για τη δημιουργία, διαχείριση και υποστήριξη του υπερ-υπολογιστικού συστήματος του εργαστηρίου, και τέλος τον κ. Ανδρέα Γιώτη.

Θερμές ευχαριστίες θέλω να εκφράσω στους καθηγητές Vladimir Molkon και Dmitriy Makaron του πανεπιστημίου του Ulster της Βορείου Ιρλανδίας, για την πολύτιμη και ουσιαστική βοήθεια που μου παρείχαν στα πρώτα στάδια του διδακτορικού στα θέματα μοντελοποίησης της καύσης. Ήταν

και οι δύο πάντα πρόθυμοι να απαντήσουν στις ερωτήσεις και τους προβληματισμούς μου. Τους ευχαριστώ επίσης για την όλη συνεργασία που είχαμε και συνεχίζουμε να έχουμε.

Ιδιαίτερες ευχαριστίες θέλω να εκφράσω στην κα. Ζωή Αποστολοπούλου, που αν και μη σχετική με το αντικείμενο, δέχτηκε με χαρά να διαβάσει και να διορθώσει το παρόν κείμενο. Η βοήθεια της είναι πολύτιμη.

Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω τα ερευνητικά προγράμματα της Ευρωπαϊκής Ένωσης H2FC, HyIndoor και SUSANA τα οποία μου έδωσαν την ευκαιρία να διευρύνω τις γνώσεις μου αλλά και στο να αποκτήσω την εμπειρία της ενεργούς συμμετοχής σε ένα ερευνητικό πρόγραμμα.

Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω το Ίδρυμα Κρατικών Υποτροφιών για την υποτροφία που έλαβα για τις διδακτορικές μου σπουδές μέσω του προγράμματος «Υποτροφίες αριστείες Ι.Κ.Υ. μεταπτυχιακών σπουδών στην Ελλάδα – πρόγραμμα SIEMENS». Εκτός από την μεγάλη οικονομική βοήθεια που μου παρείχε, το εν λόγω πρόγραμμα μου έδωσε την ευκαιρία διεύρυνσης των γνώσεων μου μέσω της συμμετοχής σε διεθνή συνέδρια.

Τέλος, ευχαριστώ τους γονείς μου, που καθ' όλη τη διάρκεια των σπουδών μου, με στήριξαν ηθικά και υλικά, όντας δίπλα μου στην όλη προσπάθειά μου.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Το αντικείμενο της Διδακτορικής Διατριβής είναι η ανάπτυξη υπολογιστικής μεθοδολογίας για τη μελέτη της καύσης αερίων καυσίμων, όπως το υδρογόνο, με στόχο τη δημιουργία ενός εργαλείου που θα προβλέπει τον βαθμό επικινδυνότητας ατυχημάτων που σχετίζονται με έκλυση εύφλεκτων αερίων σε ανοιχτούς και κλειστούς χώρους. Το εργαλείο αυτό θα επιτρέψει τον αποτελεσματικότερο σχεδιασμό των εγκαταστάσεων και τη λήψη των καταλλήλων μέτρων ασφαλείας που θα ελαχιστοποιούν τις επιπτώσεις σε περίπτωση ατυχήματος.

Η έρευνα για τη χρήση του υδρογόνου ως εναλλακτικό καύσιμο έχει αυξηθεί σημαντικά τα τελευταία χρόνια, αφού θεωρείται ότι μπορεί να συνεισφέρει στην αντιμετώπιση του ενεργειακού προβλήματος και της κλιματικής αλλαγής. Έχει μεγάλη θερμογόνο δύναμη ανά μονάδα μάζας, ενώ το μοναδικό προϊόν της καύσης του είναι το νερό, πράγμα που το καθιστά ιδιαίτερα φιλικό προς το περιβάλλον. Παρά τα πολλά πλεονεκτήματα που παρουσιάζει ως φορέας ενέργειας, έχει το μειονέκτημα ότι είναι ένα πολύ εύφλεκτο αέριο με μεγάλο εύρος ορίων αναφλεξιμότητας, που σημαίνει ότι σε περίπτωση διαρροής και ανάμειξης με τον αέρα μπορεί να οδηγήσει σε βίαιη έκρηξη.

Η έκρηξη αέριου μείγματος είναι μια περίπλοκη διεργασία η οποία περιλαμβάνει μεγάλο πλήθος φυσικών φαινομένων. Η δυσκολία στη μελέτη και μοντελοποίηση της έγκειται στο γεγονός ότι εμπεριέχει πολλά φαινόμενα τα οποία λαμβάνουν χώρα σε διαφορετικές χωρικές και χρονικές κλίμακες, οι οποίες μπορεί να διαφέρουν μεταξύ τους πολλές τάξεις μεγέθους. Η τύρβη, η οποία αναπτύσσεται στα περισσότερα προβλήματα της μηχανικής των ρευστών, είναι από μόνη της ένα φαινόμενο μεγάλης πολυπλοκότητας και η συνύπαρξή της με την καύση κάνει τη μελέτη της έκρηξης πολυσύνθετη.

Για την μελέτη και την προσομοίωση του φαινομένου της έκρηξης αέριου μείγματος με σκοπό τη βελτίωση της ικανότητας πρόβλεψης των συνεπειών της, χρησιμοποιήθηκε η μεθοδολογία της υπολογιστικής ρευστομηχανικής (Computational Fluid Dynamics, CFD). Πρόκειται για μια μέθοδο μεγάλης ακρίβειας, στην οποία επιλύονται αριθμητικά οι βασικές εξισώσεις που διέπουν τη μηχανική των ρευστών. Χρησιμοποιήθηκε ο εργαστηριακός CFD κώδικας ADREA-HF, ο οποίος έχει εφαρμοστεί εκτεταμένα στο παρελθόν σε προσομοιώσεις διασποράς αερίων, και ειδικά υδρογόνου, σε σύνθετες γεωμετρίες. Στο πλαίσιο της παρούσας Διατριβής ο κώδικας επεκτάθηκε έτσι ώστε να μπορεί να προσομοιώνει περιπτώσεις οι οποίες εμπλέκουν καύση, δίνοντας έμφαση στο φαινόμενο της τυρβώδους έκρηξης προαναμεμιγμένου μείγματος καυσίμου-αέρα.

Το βασικό μοντέλο καύσης το οποίο χρησιμοποιήθηκε και υλοποιήθηκε στον κώδικα, είναι ένα καινούργιο και πολλά υποσχόμενο μοντέλο το οποίο εμφανίστηκε πρόσφατα στη βιβλιογραφία. Στόχοι της παρούσας διατριβής ήταν η αξιολόγηση του, ο εντοπισμός των αδυναμιών του και η βελτίωσή του. Το μοντέλο αυτό λαμβάνει υπ' όψιν του τα περισσότερα φυσικά φαινόμενα τα οποία παρατηρούνται σε μια έκρηξη αέριου μείγματος και τις παραμέτρους που την ελέγχουν. Αυτά είναι η χημεία της αντίδρασης, η τύρβη η οποία βρίσκεται μπροστά από το μέτωπο της φλόγας, η τύρβη η οποία αναπτύσσεται από το ίδιο το μέτωπο, η αστάθεια θερμοδιάχυσης και τέλος η φράκταλ γεωμετρία της επιφάνειας της φλόγας σε εκρήξεις μεγάλης κλίμακας. Για τη διαχείριση της τύρβης χρησιμοποιήθηκε πρωτίστως η μέθοδος των μεγάλων δινών (LES), η χρήση της οποίας επεκτείνεται

συνεχώς τα τελευταία χρόνια λόγω της αυξημένης της ακρίβειας, ενώ εξετάστηκε και η μέθοδος RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes).

Αρχικά, πριν γίνει η μελέτη περίπλοκων σεναρίων, έγινε μοντελοποίηση έκρηξης σε απλές περιπτώσεις έτσι ώστε να επιβεβαιωθεί η ορθότητά της συνολικής μεθοδολογίας. Προσομοιώθηκαν οι περιπτώσεις της μονοδιάστατης έκρηξης σε ευθύγραμμο ημι-ανοιχτό κανάλι και της τριδιάστατης έκρηξης σε τελείως κλειστό χώρο. Από τις προσομοιώσεις αυτές συμπεραίνεται η ορθότητα της μεθοδολογίας, καθώς αναπαράχθηκαν με ακρίβεια οι θεωρητικές λύσεις των προβλημάτων.

Στην συνέχεια έγιναν τριδιάστατες προσομοιώσεις περιπτώσεων στις οποίες υπάρχουν διαθέσιμα πειραματικά δεδομένα. Οι περιπτώσεις που εξετάστηκαν καλύπτουν ένα εύρος διαφορετικών χωρικών κλιμάκων και φαινομένων έτσι ώστε η αξιολόγηση της μεθοδολογίας να είναι όσο το δυνατόν πληρέστερη. Σε όλες τις προσομοιώσεις εξετάστηκε η επίδραση στα αποτελέσματα διάφορων παραμέτρων του μοντέλου καύσης ενώ έγινε και σύγκριση των μεθόδων LES και RANS. Αρχικά έγινε προσομοίωση έκρηξης σε ημι-ανοιχτό αγωγό μικρής κλίμακας παρουσίας εμποδίων. Σε αυτή την περίπτωση αξιολογήθηκε η μοντελοποίηση της αστάθειας θερμοδιάχυσης και προτάθηκε μια διαφορετική τιμή της κρίσιμης ακτίνας μετάβασης στην αστάθεια αυτή, η οποία οδήγησε σε καλύτερη συμφωνία με το πείραμα. Στη συνέχεια η μεθοδολογία αξιολογήθηκε σε εκρήξεις μεγάλης κλίμακας, καθώς έγινε προσομοίωση ενός από τα μεγαλύτερα πειράματα έκρηξης μείγματος υδρογόνου-αέρα που έχουν πραγματοποιηθεί. Ιδιαίτερη σημασία δόθηκε στο υπομοντέλο φράκταλ, ενώ εξετάστηκαν και διαφορετικά μοντέλα καύσης. Στη συνέχεια εξετάστηκε το σενάριο έκρηξης σε μοντέλο σήραγγας παρουσίας και μη εμποδίων. Σε όλες τις προσομοιώσεις η συμφωνία με το πείραμα ήταν πολύ καλή.

Το τελευταίο σενάριο που εξετάστηκε αφορά την έκρηξη ομογενούς μείγματος υδρογόνου-αέρα σε κλειστό δοχείο μεσαίας κλίμακας με άνοιγμα για την εκτόνωση της πίεσης. Οι εκρήξεις τέτοιου είδους έχουν μεγάλη σημασία τόσο από πρακτική άποψη όσο και λόγω της πολυπλοκότητας του φαινομένου. Η δυσκολία της μοντελοποίησης έγκειται κυρίως στο φαινόμενο της εξωτερικής έκρηξης, η οποία λόγω της βιαιότητάς της οδηγεί στην απότομη αύξηση της πίεσης. Το αρχικό μοντέλο καύσης, προέβλεψε επιτυχώς το φαινόμενο μέχρι το σημείο που η φλόγα φεύγει από το άνοιγμα, απέτυχε όμως να προβλέψει σωστά την εξωτερική έκρηξη. Για αυτό το λόγο, προτάθηκαν και δοκιμάστηκαν δύο καινοτόμες παραλλαγές του μοντέλου καύσης. Η πρώτη παραλλαγή, έχει να κάνει με τον τρόπο υπολογισμού της χαρακτηριστικής ταχύτητας τύρβης, ο οποίος εφαρμόστηκε για πρώτη φορά σε περιπτώσεις σαν την εξεταζόμενη και οδήγησε στην καλύτερη συμφωνία με το πείραμα. Η δεύτερη παραλλαγή, έχει να κάνει με τον τρόπο με τον οποίο συνδέονται οι παράγοντες που συμμετέχουν στον υπολογισμό του ρυθμού καύσης και οι οποίοι μοντελοποιούν τα διάφορα φαινόμενα. Η αλλαγή αυτή, βελτίωσε εντυπωσιακά το μοντέλο καθώς η εξωτερική έκρηξη προβλέφθηκε επιτυχώς, με αποτέλεσμα η συνολική συμφωνία με τον πείραμα να είναι πάρα πολύ καλή τόσο ποιοτικά όσο και ποσοτικά.

Συνοψίζοντας, θεωρείται ότι ο κύριος σκοπός της διατριβής που ήταν η ανάπτυξη, υλοποίηση και αξιολόγηση ενός μαθηματικού μοντέλου καύσης, κατάλληλο για ένα μεγάλο εύρος περιπτώσεων έκρηξης προαναμεμιγμένου μείγματος καυσίμου-αέρα, εκπληρώθηκε.

CFD modeling of turbulent combustion for application to safety of Hydrogen Technologies

ABSTRACT

The general framework of the Doctoral Thesis is the numerical modelling of gaseous fuels combustion, such as hydrogen combustion, in order to create a tool that can be used for safety assessment of accidents associated with the release of flammable gases in open and closed spaces. This tool will contribute to the design of the appropriate safety measures in order to minimize the consequences of an accident.

Research on the use of hydrogen as an alternative fuel has been increased significantly over the past few years because hydrogen can contribute to the solution of the energy problem and to the mitigation of the climate change. It has high heat of combustion value per unit mass and it is an environmental friendly fuel because the only product of its combustion is water. Despite the many advantages that hydrogen presents as an energy carrier, it has the disadvantage of being a highly flammable gas with a wide range of flammability limits. As a result, in the case of an accident, hydrogen can escape to the atmosphere, mix with air and lead to a violent explosion (deflagration).

Deflagration is a complex process because it involves a wide range of physical phenomena. The difficulty in its modelling lays in the fact that these phenomena occur at different spatial and temporal scales, which may vary in size between several orders of magnitude. Turbulence, which exists in most fluid mechanics problems, is a phenomenon of great complexity, and its interaction with combustion makes the study of explosion a complex task.

In order to study and simulate the deflagration phenomenon, the Computational Fluid Dynamics (CFD) methodology is used. CFD is an attractive methodology of high accuracy which numerically solves the differential equations of fluid mechanics. The in-house CFD code ADREA-HF is utilized. ADREA-HF has been used successfully in the past in gas release and dispersion simulations in complex geometries. During this Thesis, ADREA-HF capabilities were extended so that it can simulate turbulent combustion, focusing on the deflagration modelling.

The basic combustion model used and implemented in the code is a new and promising model that has been developed recently. Some of the objectives of this Thesis were to evaluate it, to identify its drawbacks and limits and to further develop it. This model takes into account most of the physical phenomena which occurs in the deflagration process and the parameters that control them. These are the chemistry, the turbulence existing in front of the flame front, the turbulence generated by the flame front itself, the thermal-diffusion instability and the fractal nature of the flame surface in large scale deflagrations. For turbulence, the Large Eddy Simulation (LES) method was mainly used which is considered as a very promising and accurate technique. The RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes) method was also used and evaluated.

Initially, before the study of complex scenarios of real interest, verification of the overall methodology was performed. One-dimensional deflagration in a semi-open channel and three-dimensional deflagration in a completely closed space were simulated. The theoretical solutions of

these problems were accurately predicted. As a result, the verification of the methodology was successful.

Then, three-dimensional simulations of deflagration experiments were conducted. For the complete evaluation of the methodology, the cases examined cover a wide range of spatial scales and phenomena. In all simulations, the effect on the results of various parameters of the combustion model was examined and the comparison of the LES and RANS methods were made. At first, deflagration simulation was performed in a small scale channel with obstacles. The modelling of the thermo-diffusive instability was evaluated and a new value of the critical radius of transition to the instability was proposed, which led to a better agreement with the experiment. Then, the methodology was evaluated against a large scale deflagration. One of the largest hydrogen deflagration experiments ever conducted was simulated for that purpose. The fractal sub-model was evaluated and different combustion models were examined. Deflagration in a model of tunnel was simulated next. Two scenarios were examined, one with a completely empty tunnel and one with obstacles inside it. In all simulations the agreement with the experiment was very good.

The last simulation concerns the deflagration of homogeneous hydrogen-air mixture in a closed medium-scale enclosure with an opening (vented deflagration). Vented deflagrations are of great importance both from a practical point of view and because of the complexity of the phenomenon. External explosion which usually appears in this kind of deflagrations leads to a sharp increase in pressure and is difficult to be modelled. The combustion model predicted successfully the phenomenon until the point where the flame exits the opening, but failed to predict properly the external explosion. For this reason, two innovative modifications of the combustion model were developed and examined. The first modification concerns the way that the turbulent characteristic velocity is estimated. The new approach was applied for the first time in cases like the examined one and led to better agreement with the experiment. The second modification concerns the way that the modelling of the various phenomena contributes to the estimation of the turbulent burning velocity. This modification improved significantly the model's predictions. The external explosion was successfully predicted, resulting in very good qualitatively and quantitatively agreement with the experiment.

To sum up, the main purpose of the thesis, which was the development, implementation and evaluation of a mathematical combustion model, suitable for a wide range of deflagration cases, was fulfilled.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ	13
ΠΡΟΛΟΓΟΣ	17
1.1 ΒΑΣΙΚΟ ΚΙΝΗΤΡΟ	17
1.2 ΚΥΡΙΟΣ ΣΚΟΠΟΣ	17
1.3 ΔΟΜΗ ΚΕΦΑΛΑΙΩΝ.....	18
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ	21
1.1 ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΚΑΙ ΥΔΡΟΓΟΝΟ	21
1.2 ΘΕΜΑΤΑ ΑΣΦΑΛΕΙΑΣ ΥΔΡΟΓΟΝΟΥ.....	24
1.3 ΕΙΔΗ ΚΑΙ ΚΥΡΙΑ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ ΕΚΡΗΞΕΩΝ	27
1.3.1 <i>Εκρήξεις προ-αναμεμιγμένου μείγματος αερίων (VCE)</i>	27
1.3.2 <i>Εκρήξεις εκτόνωσης υγροποιημένου αερίου (BLEVE)</i>	30
1.3.3 <i>Κύματα πίεσης</i>	30
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2 ΦΥΣΙΚΑ ΦΑΙΝΟΜΕΝΑ ΚΑΤΑ ΤΗΝ ΕΚΡΗΞΗ ΑΕΡΙΟΥ ΜΕΙΓΜΑΤΟΣ	33
2.1 ΤΥΡΒΩΔΕΙΣ ΡΟΕΣ	34
2.1.1 <i>Χαρακτηριστικά της τύρβης</i>	34
2.1.2 <i>Τυρβώδεις διαταραχές</i>	37
2.1.3 <i>Χαρακτηριστικές κλίμακες</i>	39
2.2 ΣΤΡΩΤΗ ΚΑΥΣΗ ΠΡΟ-ΑΝΑΜΕΙΞΗΣ	42
2.2.1 <i>Λόγος επέκτασης</i>	44
2.2.2 <i>Ταχύτητα στρωτής καύσης</i>	45
2.2.3 <i>Πάχος φλόγας</i>	49
2.3 ΑΣΤΑΘΕΙΕΣ ΜΕΤΩΠΟΥ ΦΛΟΓΑΣ	50
2.3.1 <i>Υδροδυναμική αστάθεια</i>	51
2.3.2 <i>Αστάθεια θερμοδιάχυσης</i>	52
2.3.3 <i>Αστάθειες Rayleigh-Taylor, Richtmyer-Meshkov και Kelvin-Helmholtz</i>	55
2.4 ΤΥΡΒΩΔΗΣ ΚΑΥΣΗ	58
2.4.1 <i>Χαρακτηριστικοί αριθμοί και κατηγορίες τυρβώδους καύσης</i>	59
2.4.2 <i>Τυρβώδης ταχύτητα καύσης</i>	68
2.4.3 <i>Τύρβη που παράγεται από το μέτωπο της φλόγας</i>	71
2.5 ΕΚΡΗΞΕΙΣ ΣΕ ΕΛΕΥΘΕΡΟ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ.....	72
2.6 ΕΚΡΗΞΕΙΣ ΣΕ ΚΛΕΙΣΤΟ ΧΩΡΟ ΜΕ ΑΝΟΙΓΜΑΤΑ.....	73
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3 ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΕΚΡΗΞΗΣ ΑΕΡΙΟΥ ΜΕΙΓΜΑΤΟΣ	79
3.1 ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΡΟΗΣ – ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΤΥΡΒΗΣ.....	79
3.1.1 <i>Βασικές εξισώσεις ροής</i>	79
3.1.2 <i>Μέθοδος DNS</i>	82
3.1.3 <i>Μέθοδος RANS</i>	84
3.1.3.1 <i>Μοντέλα τύρβης</i>	86
3.1.3.2 <i>Σχολιασμός των κατά Favre μέσων όρων</i>	90
3.1.3.3 <i>Σχολιασμός της μοντελοποίησης της τυρβώδους μεταφοράς</i>	90

3.1.4	Μέθοδος LES.....	91
3.1.4.1	Είδη φιλτραρίσματος και ανεξαρτησία πλέγματος	95
3.1.4.2	Διαφορές LES και URANS	96
3.1.4.3	Εναλλακτικές μεθοδολογίες LES	97
3.1.5	Παράδειγμα αποτελεσμάτων μοντέλων τύρβης σε ροή διασποράς.....	98
3.2	ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΚΑΥΣΗΣ	98
3.2.1	Νόμος του Arrhenius.....	100
3.2.2	Μοντέλο θραύσης των δινών (Eddy break-up model, EBU)	100
3.2.3	Μοντέλο απορρόφησης των δινών (Eddy dissipation concept, EDC)	102
3.2.3.1	Παραλλαγές του μοντέλου	103
3.2.4	Το μοντέλο των Mantel και Borghi	104
3.2.5	Το μοντέλο του Schmid	104
3.2.6	Το πρόβλημα υπολογισμού χαρακτηριστικού χρόνου τυρβώδους φλόγας – μοντέλο INFS.....	105
3.2.7	Μοντέλα που βασίζονται στην τυρβώδη ταχύτητα καύσης.....	106
3.2.8	Άλλα μοντέλα.....	107
3.2.8.1	Μοντέλο τεχνικά παχιάς φλόγας.....	107
3.2.8.2	Μοντέλα επιφανειακής πυκνότητας της φλόγας	108
3.2.8.3	Μοντέλα εξάπλωσης φωτιάς σε δάσος	108
3.3	ΑΝΑΛΥΤΙΚΑ ΚΑΙ ΗΜΙ-ΕΜΠΕΙΡΙΚΑ ΜΟΝΤΕΛΑ ΕΚΡΗΞΕΩΝ	109
3.3.1	Μοντέλα γενικής χρήσης	109
3.3.2	Μοντέλα εκρήξεων σε κλειστό χώρο με ανοίγματα.....	111
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4 ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ ΠΟΥ ΑΝΑΠΤΥΧΘΗΚΕ ΚΑΙ ΧΡΗΣΙΜΟΠΟΙΗΘΗΚΕ ΣΤΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ		113
4.1	ΒΑΣΙΚΕΣ ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ	113
4.2	ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΚΑΥΣΗΣ	114
4.3	Ο ΚΩΔΙΚΑΣ ADREA-HF	121
4.3.1	Οριακές συνθήκες	122
4.4	ΣΧΗΜΑΤΑ ΔΙΑΚΡΙΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΣΤΟΝ ΧΩΡΟ	123
4.5	ΣΧΗΜΑ ΔΙΑΚΡΙΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΣΤΟΝ ΧΡΟΝΟ – ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗ ΟΡΟΥ ΠΗΓΗΣ.....	129
4.6	ΕΠΙΛΥΣΗ ΓΡΑΜΜΙΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ	132
4.7	ΠΑΡΑΛΛΗΛΟΠΟΙΗΣΗ ΤΟΥ ΚΩΔΙΚΑ	134
4.7.1	Παραλληλοποίηση για συστήματα κοινής μνήμης.....	134
4.7.2	Παραλληλοποίηση για συστήματα καταμεμημένης μνήμης	136
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5 ΕΞΑΚΡΙΒΩΣΗ ΤΗΣ ΠΑΡΟΥΣΑΣ ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑΣ.....		141
5.1	ΜΟΝΟΔΙΑΣΤΑΤΗ ΕΚΡΗΞΗ ΣΕ ΕΥΘΥΓΡΑΜΜΟ ΗΜΙ-ΑΝΟΙΧΤΟ ΚΑΝΑΛΙ	141
5.1.1	Λεπτομέρειες προσομοίωσης και εξεταζόμενα σενάρια	142
5.1.2	Έναυση στο πίσω μέρος του καναλιού	145
5.1.3	Έναυση στο μπροστά μέρος του καναλιού.....	147
5.1.4	Συμπεράσματα	148
5.2	ΤΡΙΔΙΑΣΤΑΤΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΕΚΡΗΞΗΣ ΣΕ ΚΛΕΙΣΤΟ ΧΩΡΟ	149
5.2.1	Χαρακτηριστικές θερμοκρασίες και πιέσεις.....	149
5.2.2	Φυσική του φαινομένου.....	150
5.2.3	Λεπτομέρειες προσομοίωσης και αποτελέσματα	150
5.2.3.1	Απώλειες θερμότητας από τα τοιχώματα	155
5.2.4	Συμπεράσματα	157
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6 ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΕΚΡΗΞΗΣ ΜΙΚΡΗΣ ΚΛΙΜΑΚΑΣ ΣΕ ΑΓΩΓΟ ΜΕ ΕΜΠΟΔΙΑ		159
6.1	ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	159

6.2	ΔΕΔΟΜΕΝΑ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗΣ	162
6.3	ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ	164
6.3.1	Μηχανισμός αύξησης της πίεσης	168
6.3.2	Σύγκριση μεθόδων τύρβης	170
6.3.3	Ευαισθησία σε χρονικές παραμέτρους	172
6.3.4	Ανάλυση LES	173
6.3.5	Περίπτωση προπανίου	178
6.4	ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	179
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7 ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΕΚΡΗΞΗΣ ΜΕΓΑΛΗΣ ΚΛΙΜΑΚΑΣ ΣΕ ΕΛΕΥΘΕΡΟ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ		181
7.1	ΕΙΣΑΓΩΓΗ	181
7.2	ΔΕΔΟΜΕΝΑ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗΣ	183
7.2.1	Υπολογιστικές λεπτομέρειες.....	184
7.3	ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ	186
7.3.1	Ανεξαρτησία πλέγματος και μέγεθος χωρίου	186
7.3.2	Αποτελέσματα βασικού μοντέλου - Διερεύνηση της τιμής της φράκταλ διάστασης.....	188
7.3.3	Σύγκριση μεθόδων τύρβης	194
7.3.4	Σύγκριση μοντέλων καύσης.....	196
7.4	ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	197
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 8 ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΕΚΡΗΞΗΣ ΣΕ ΜΟΝΤΕΛΟ ΟΔΙΚΗΣ ΣΗΡΑΓΓΑΣ.....		199
8.1	ΕΙΣΑΓΩΓΗ	199
8.2	ΔΕΔΟΜΕΝΑ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗΣ	200
8.3	ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ	202
8.3.1	Ανεξαρτησία πλέγματος	202
8.3.2	Βασικά αποτελέσματα.....	204
8.3.3	Διερεύνηση παραμέτρων μοντέλου καύσης	208
8.3.4	Σύγκριση μεθόδων τύρβης	210
8.3.5	Σενάριο με οχήματα.....	212
8.4	ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	215
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 9 ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΕΚΡΗΞΗΣ ΣΕ ΔΟΧΕΙΟ ΜΕ ΑΝΟΙΓΜΑ		217
9.1	ΕΙΣΑΓΩΓΗ	217
9.1.1	Ανάλυση πειράματος.....	217
9.1.2	Μέθοδοι μοντελοποίησης εξωτερικής έκρηξης	223
9.2	ΔΕΔΟΜΕΝΑ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗΣ	224
9.3	ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΒΑΣΙΚΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΚΑΥΣΗΣ.....	225
9.3.1	Σύγκριση μεθόδων τύρβης	231
9.4	ΤΡΟΠΟΠΟΙΗΣΗ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΚΑΥΣΗΣ ΣΤΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ ΤΟΥ LES	233
9.4.1	Περιγραφή του νέου μοντέλου	233
9.4.2	Αποτελέσματα	236
9.5	ΤΡΟΠΟΠΟΙΗΣΗ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΚΑΥΣΗΣ ΣΤΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ ΤΟΥ K-E	239
9.5.1	Περιγραφή του νέου μοντέλου	239
9.5.2	Αποτελέσματα	241
9.6	ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	244
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 10 ΕΠΙΛΟΓΟΣ.....		247
10.1	ΓΕΝΙΚΑ ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	247

10.2	ΣΥΜΒΟΛΗ ΤΗΣ ΔΙΑΤΡΙΒΗΣ ΣΤΗΝ ΕΠΙΣΤΗΜΗ	248
10.3	ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ ΓΙΑ ΜΕΛΛΟΝΤΙΚΗ ΕΡΕΥΝΑ	249
10.4	ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΕΣ ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ.....	250
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α ΛΕΠΤΟΜΕΡΕΙΕΣ ΣΧΕΣΕΩΝ ΚΑΙ ΜΕΘΟΔΩΝ		253
A.1	Άλλες μορφές της εξίσωσης ενέργειας.....	253
A.2	Υπόθεση ίσης διαχύσης συστατικών	256
A.3	Μεταβλητή προόδου	258
A.4	Σχέση του Charlette για την τυρβώση ταχύτητα καύσης.....	259
A.5	Τροποποιημένη μέθοδος SIMPLER	261
A.6	Ορισμοί και χρήσιμες σχέσεις μείγματος και καύσης.....	264
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β ΑΓΓΛΙΚΗ ΟΡΟΛΟΓΙΑ		267
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Γ ΠΙΝΑΚΑΣ ΣΥΜΒΟΛΩΝ.....		269
ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ.....		271
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ		273

Πρόλογος

No knowledge can be certain, if it is not based upon mathematics or upon some other knowledge which is itself based upon the mathematical sciences.

Leonardo da Vinci (1425 – 1519)

1.1 Βασικό κίνητρο

Οι αυξανόμενες ενεργειακές ανάγκες και η μείωση των αποθεμάτων των συμβατικών καυσίμων σε συνδυασμό με τη ρύπανση του περιβάλλοντος και το φαινόμενο του θερμοκηπίου ωθούν την επιστημονική και βιομηχανική κοινότητα να στραφεί προς εναλλακτικές πηγές ενέργειας. Και ενώ τις τελευταίες δεκαετίες οι ανανεώσιμες πηγές ενέργειας συμμετέχουν δραστικά στην παραγωγή ενέργειας, θα πρέπει να αντιμετωπιστούν αποτελεσματικά διάφορα ζητήματα, ώστε να μπορέσουν διεκδικήσουν πλειοψηφικό μέρος στην παγκόσμια παραγωγή. Το υδρογόνο σαν φορέας ενέργειας αποτελεί ιδανικό τρόπο αποθήκευσης της περίσσειας ενέργειας που παράγεται από τις ανανεώσιμες πηγές, η οποία στη συνέχεια μπορεί να αποδοθεί όταν υπάρχει ζήτηση, δημιουργώντας έτσι έναν ενεργειακό κύκλο με μηδενικούς ρύπους.

Ωστόσο, για να μπορέσει το υδρογόνο να κερδίσει την εμπιστοσύνη των αγορών και να διαδοθεί η χρήση του ως «πράσινο» καύσιμο, θα πρέπει να διερευνηθούν και επιλυθούν θέματα που σχετίζονται με την ασφάλεια του. Σε ενδεχόμενο ατύχημα με διαρροή το υδρογόνο αναμειγνύεται με τον αέρα δημιουργώντας ένα εύφλεκτο μείγμα το οποίο στην περίπτωση ανάφλεξης μπορεί υπό κατάλληλες συνθήκες να οδηγήσει σε έκρηξη, δηλαδή σε ανάπτυξη μεγάλων πιέσεων και θερμοκρασιών με καταστροφικές συνέπειες. Συνεπώς η μελέτη και πλήρης κατανόηση των φαινομένων που λαμβάνουν χώρα κατά την διασπορά και ανάφλεξη/έκρηξη του υδρογόνου είναι απαραίτητη.

1.2 Κύριος σκοπός

Στόχος της διδακτορικής διατριβής, είναι η ανάπτυξη, υλοποίηση και αξιολόγηση ενός νέου μαθηματικού μοντέλου καύσης, κατάλληλου για τις περιπτώσεις καύσης προαναμεμιγμένου μείγματος καυσίμου-αέρα το οποίο οδηγεί σε έκρηξη, δηλαδή σε βίαιη αύξηση της πίεσης και σε βίαιη έκλυση θερμότητας. Το μοντέλο αυτό πρέπει να είναι γρήγορο, να μην απαιτεί δηλαδή ιδιαίτερους υπολογιστικούς πόρους, έτσι ώστε να είναι εφικτή η εφαρμογή του σε προβλήματα μέσης και μεγάλης κλίμακας. Επίσης πρέπει να ενσωματώνει όλους τους μηχανισμούς που εμπλέκονται στην τυρβώδη καύση και ιδίως αυτούς που παρουσιάζονται σε έκρηξη έτσι ώστε να μπορεί να είναι ικανό να παράγει έγκυρα και ακριβή αποτελέσματα. Επιπλέον στόχος και πρωτοτυπία της διδακτορικής διατριβής είναι η χρήση του μοντέλου για μελέτες ασφάλειας σε

εφαρμογές υδρογόνου σε κλειστούς χώρους με ανοίγματα. Η συγκεκριμένη γεωμετρία έχει ιδιαίτερη σημασία λόγω του φαινομένου της εξωτερικής έκρηξης το οποίο παρατηρείται και το οποίο οδηγεί σε απότομη αύξηση της πίεσης.

1.3 Δομή κεφαλαίων

Στο πρώτο Κεφάλαιο του κειμένου, παρουσιάζεται το κίνητρο το οποίο υπήρχε για το ξεκίνημα της παρούσας διδακτορικής διατριβής, αναπτύσσονται οι λόγοι για τους οποίους υπάρχει έντονο ερευνητικό ενδιαφέρον για το υδρογόνο καθώς τα προβλήματα ασφάλειας που υπάρχουν στην χρήση του. Παρουσιάζονται κάποια βασικά ήδη εκρήξεων, επικεντρώνοντας στις επιταχυνόμενες εκρήξεις αέριου μείγματος καυσίμου-αέρα, οι οποίες αποτελούν το βασικό αντικείμενο της παρούσας διατριβής.

Στο δεύτερο Κεφάλαιο, παρουσιάζονται τα φυσικά φαινόμενα τα οποία εμφανίζονται στις εκρήξεις αέριου μείγματος καυσίμου-αέρα. Τα φαινόμενα αυτά είναι πολύ σημαντικό να κατανοηθούν σε βάθος, έτσι ώστε να μπορέσει να γίνει ορθή μοντελοποίηση τους. Αρχικά επισημαίνουμε τα βασικά γνωρίσματα των τυρβωδών ροών και στη συνέχεια περιγράφουμε τα χαρακτηριστικά της στρωτής καύσης προ-αναμεμειγμένου μείγματος. Έπειτα παρουσιάζουμε τις αστάθειες οι οποίες δημιουργούνται στο μέτωπο μιας στρωτής φλόγας και οι οποίες την κάνουν να μεταβεί στη κατηγορία της τυρβώδους καύσης. Τα βασικά χαρακτηριστικά της πολύ σημαντικής αυτής κατηγορίας καύσης, περιγράφονται στη συνέχεια. Τέλος, παρουσιάζονται δύο ιδιαίτερες καταστάσεις εκρήξεων οι οποίες είναι πολύ σημαντικές και με τις οποίες ασχολούμαστε και στα επόμενα Κεφάλαια, τις εκρήξεις σε ελεύθερο περιβάλλον και τις εκρήξεις σε κλειστούς χώρους με ανοίγματα.

Στο τρίτο Κεφάλαιο, γίνεται ανασκόπηση των τρόπων μοντελοποίησης εκρήξεων αέριου μείγματος καυσίμου-αέρα. Το κεφάλαιο επικεντρώνεται στη μοντελοποίηση με χρήση της μεθοδολογίας της Υπολογιστικής Ρευστομηχανικής, καθώς αυτή αποτελεί κύριο αντικείμενο της παρούσας διατριβής. Στο πρώτο μέρος του κεφαλαίου, παρουσιάζονται οι βασικές εξισώσεις και οι βασικές μεθοδολογίες για τη προσομοίωση τυρβωδών ροών. Στο δεύτερο μέρος, επικεντρωνόμαστε στη μοντελοποίηση της καύσης προ-αναμεμειγμένου μείγματος καυσίμου-αέρα. Στο τρίτο μέρος, τέλος, γίνεται μια σύντομη παρουσίαση κάποιων αναλυτικών και ημι-εμπειρικών μοντέλων εκρήξεων που είναι χρήσιμα για γρήγορους υπολογισμούς.

Στο τέταρτο Κεφάλαιο, περιγράφεται η μεθοδολογία του αναπτύχθηκε και χρησιμοποιήθηκε στη παρούσα διατριβή. Αρχικά γίνεται παρουσίαση των βασικών εξισώσεων και αναλυτική περιγραφή του μοντέλου καύσης που χρησιμοποιήθηκε. Στη συνέχεια περιγράφεται ο κώδικας υπολογιστικής μηχανικής ADREA-HF μέσα στον οποίο έγινε η ανάπτυξη της μεθοδολογίας, επεκτείνοντας τις δυνατότητες του. Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζονται επίσης κάποιες σημαντικές αριθμητικές λεπτομέρειες, όπως τα σχήματα χρονικής και χωρικής διακριτοποίησης. Τέλος, γίνεται σύντομη περιγραφή της παραλληλοποίησης του κώδικα, η οποία ήταν μια από τις πρώτες εργασίες που πραγματοποιήθηκαν στην αρχή αυτής της διατριβής έτσι ώστε να επιτύχουμε μειωμένο υπολογιστικό χρόνο προσομοιώσεων.

Στο πέμπτο Κεφάλαιο, γίνεται εξακρίβωση της μεθοδολογίας που αναπτύχθηκε. Η εξακρίβωση ενός υπολογιστικού μοντέλου είναι ένα πολύ σημαντικό βήμα με το οποίο βεβαιώνεται η ορθή υλοποίηση του. Εξετάστηκαν δύο περιπτώσεις για τις οποίες υπήρχαν θεωρητικές λύσεις για σύγκριση με αυτές, η περίπτωση της μονοδιάστατης έκρηξης σε ευθύγραμμο ημι-ανοικτό αγωγό, και η περίπτωση της τριδιάστατης έκρηξης σε κλειστό δοχείο.

Στα έκτο, έβδομο, όγδοο και ένατο Κεφάλαιο, γίνεται αξιολόγηση του υπολογιστικού μοντέλου έναντι πειραμάτων. Τα πειράματα αυτά επιλέχτηκαν έτσι ώστε να καλύπτουν ένα ευρύ πεδίο περιπτώσεων. Στο έκτο Κεφάλαιο γίνεται προσομοίωση έκρηξης μικρής κλίμακας σε αγωγό με εμπόδια, στο έβδομο γίνεται προσομοίωση έκρηξης μεγάλης κλίμακας σε ελεύθερο περιβάλλον, στο όγδοο προσομοίωση έκρηξης σε μοντέλο οδικής σήραγγας και στο ένατο προσομοίωση έκρηξης σε δοχείο με άνοιγμα. Σε όλα τα κεφάλαια, αρχικά γίνεται παρουσίαση του πειράματος και σύντομη βιβλιογραφική ανασκόπηση των προσομοιώσεων που έχουν γίνει, ενώ στη συνέχεια περιγράφονται οι υπολογιστικές λεπτομέρειες της προσομοίωσης και τα αποτελέσματα. Στο Κεφάλαιο 9, παρουσιάζονται επίσης δύο καινοτόμες μετατροπές του μοντέλου καύσης, έτσι ώστε αυτό να είναι σε θέση να περιγράψει με ακρίβεια το φαινόμενο της εξωτερικής έκρηξης που παρουσιάζεται σε περιπτώσεις έκρηξης σε κλειστό χώρο με ανοίγματα.

Στο Κεφάλαιο δέκα, γίνεται ο επίλογος του διδακτορικού παρουσιάζοντας τα γενικά συμπεράσματα, τη συμβολή της διατριβής στην επιστήμη και προτάσεις για μελλοντική έρευνα.

Το κείμενο συμπεριλαμβάνει τρία Παραρτήματα. Στο Παράρτημα Α παρουσιάζονται διάφορες λεπτομέρειες εξισώσεων και μεθόδων, στο Παράρτημα Β η Αγγλική μετάφραση κάποιων όρων όπως εμφανίζονται στη διεθνή βιβλιογραφία και στο Παράρτημα Γ η επεξήγηση των βασικών συμβόλων που χρησιμοποιούνται στο κείμενο.

Στο τέλος του κειμένου γίνεται η παράθεση της βιβλιογραφίας. Στο σύνολο της αποτελείται από 225 αναφορές σε εργασίες οι οποίες στη μεγάλη τους πλειοψηφία είναι αντιπροσωπευτικές των θεμάτων που πραγματεύονται και τυγχάνουν ευρείας αναγνωρισιμότητας.

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

*Πριν ξεκινήσουμε να συζητάμε,
πρέπει πρώτα να ορίζουμε τις
έννοιες για να μπορέσουμε να
συνεννοηθούμε*

Σωκράτης

1.1 Ενεργειακό πρόβλημα και υδρογόνο

Το υδρογόνο έχει αποτελέσει πρόσφατα αντικείμενο εκτεταμένης έρευνας αφού θεωρείται ότι μπορεί να συνεισφέρει στην αντιμετώπιση της κλιματικής αλλαγής αλλά και του ενεργειακού προβλήματος. Η κλιματική αλλαγή που παρατηρείται τα τελευταία χρόνια λόγω της αύξησης των εκπομπών αερίων του θερμοκηπίου (CO₂, NO_x, CH₄ κτλ) σε συνδυασμό με τα περιορισμένα αποθέματα ορυκτών καυσίμων, την πολιτική αστάθεια σε περιοχές παραγωγής πετρελαίου και της ανάγκης για ενεργειακή αυτονομία έχουν οδηγήσει στην αναζήτηση νέων μορφών ενέργειας. Οι στόχοι της Ευρωπαϊκής Ένωσης μέχρι το 2020 είναι η μείωση κατά 20% (σε σύγκριση με τα επίπεδα του 1990) των εκπομπών αερίων των θερμοκηπίου, η μείωση κατά 20% της χρησιμοποιούμενης ενέργειας μέσω της βελτίωσης του βαθμού απόδοσης και η παραγωγή ενέργειας κατά 20% από ανανεώσιμες πηγές ενέργειας, ενώ μέχρι το 2050 ο στόχος για την μείωση των εκπομπών αερίων του θερμοκηπίου φτάνει στο 60 με 80%. Μέσα σε αυτό πλαίσιο, το υδρογόνο μπορεί και προβλέπεται να παίξει έναν σημαντικό ρόλο στον ενεργειακό χάρτη τα επόμενα χρόνια.

Το υδρογόνο είναι ένα πολλά υποσχόμενο εναλλακτικό καύσιμο. Έχει μεγάλη θερμογόνο δύναμη ανά μονάδα μάζας (120-142 MJ/kg) η οποία είναι περίπου τρεις φορές μεγαλύτερη από αυτήν των κοινών υδρογονανθράκων (π.χ. φυσικό αέριο, πετρέλαιο) ενώ το μοναδικό προϊόν της καύσης του είναι το νερό πράγμα που το καθιστά ιδιαίτερα φιλικό προς το περιβάλλον. Παρόλα αυτά, σε ατμοσφαιρικές συνθήκες το υδρογόνο βρίσκεται σε αέρια μορφή έχοντας πολύ μικρή πυκνότητα (0.085 kg/m³). Αυτό συνεπάγεται την κατακόρυφη πτώση της θερμογόνου του δύναμης ανά μονάδα όγκου. Έτσι αναζητούνται αποτελεσματικοί τρόποι αποθήκευσης του ώστε να αυξηθεί ή κατ' όγκο ενεργειακή του περιεκτικότητα. Οι τρεις βασικοί τρόποι αποθήκευσης που έχουν προταθεί είναι συμπιεσμένο σε υψηλές πιέσεις, υγροποιημένο σε χαμηλές θερμοκρασίες και αποθηκευμένο σε στερεά υλικά.

Η συμπίεση του υδρογόνου σε κυλίνδρους (φιάλες) είναι ο πιο κοινός και διαδεδομένος τρόπος αποθήκευσης. Μια τυπική πίεση είναι τα 200 bar, ωστόσο νέες τεχνολογίες μπορούν να υποστηρίξουν πιέσεις μέχρι και 700 bar. Σε τόσο υψηλές πιέσεις το υδρογόνο έχει πυκνότητα περίπου ίση με 40 kg/m³, η οποία είναι 1.8 φορές περίπου μικρότερη από αυτή που έχει το υγρό υδρογόνο στη θερμοκρασία κορεσμού (20.35 K) σε ατμοσφαιρική πίεση. Σημαντικά θέματα

ασφάλειας συνοδεύουν την αποθήκευση του υδρογόνου σε υψηλή πίεση, ενώ άλλα μειονεκτήματα της αποθήκευσης πεπιεσμένου υδρογόνου είναι:

- Μεγάλοι αποθηκευτικοί όγκοι λόγω της χαμηλής πυκνότητας του ακόμα και σε υψηλές πιέσεις.
- Αύξηση του πάχους των τοιχωμάτων του αποθηκευτικού μέσου με την αύξηση της πίεσης για λόγους αντοχής.
- Προβλήματα διάχυσης του υδρογόνου μέσα από το υλικό αποθήκευσης.

Το υγρό υδρογόνο αποθηκεύεται σε κρυογονικές δεξαμενές (ή φιάλες) σε πιέσεις κοντά στην ατμοσφαιρική και στη θερμοκρασία κορεσμού του στη δεδομένη πίεση, δηλαδή περίπου στους 21 Κ. Λόγω της χαμηλής κρίσιμης θερμοκρασίας του υδρογόνου (33 Κ) υγροποίηση του σε υψηλές θερμοκρασίες δεν είναι εφικτή. Η πυκνότητα του υγρού υδρογόνου είναι 70.8 kg/m^3 . Τα βασικά προβλήματα στην αποθήκευση υγρού υδρογόνου αποτελούν η απαιτούμενη ενέργεια για τη διαδικασία της υγροποίησης του και συνεπώς το κόστος της διαδικασίας, αλλά και η θερμική μόνωση που απαιτείται στα δοχεία αποθήκευσης για την αποφυγή εξάτμισης του υδρογόνου η οποία θα οδηγούσε είτε σε απώλεια μάζας είτε σε δημιουργία υπερπίεσης στο δοχείο. Για παράδειγμα το πειραματικό αυτοκίνητο της BMW μετά από 17 ώρες ακινησίας αρχίζει να εξάγει το υδρογόνο που έχει εξατμιστεί ώστε να διατηρηθεί η πίεση σταθερή. Αυτό έχει σαν συνέπεια σε 10 με 12 ημέρες όλο το υδρογόνο να έχει διαφύγει στο περιβάλλον. Η υγροποίηση του υδρογόνου ως μέθοδος αποθήκευσης είναι δυνατή σε εφαρμογές όπου το κόστος της διαδικασίας δεν αποτελεί σημαντική παράμετρο και σε εφαρμογές που το υδρογόνο καταναλώνεται σε μικρό χρονικό διάστημα.

Τέλος, η αποθήκευση του υδρογόνου σε στερεά μπορεί να γίνει με φυσική ρόφηση ή με χημική ρόφηση. Στη φυσική ρόφηση το υδρογόνο προσροφάται στην επιφάνεια του στερεού χωρίς να γίνεται χημική αντίδραση. Ο άνθρακας είναι το υλικό που χρησιμοποιείται για φυσική ρόφηση υδρογόνου. Τα πλεονεκτήματα της φυσικής ρόφησης είναι οι χαμηλές πιέσεις του συστήματος, το χαμηλό κόστος των υλικών που χρησιμοποιούνται και η απλή διάταξη του αποθηκευτικού συστήματος. Μειονεκτήματα της μεθόδου αποτελούν το μικρό ποσοστό ρόφησης υδρογόνου στον άνθρακα σε συνδυασμό με τις χαμηλές θερμοκρασίες που απαιτούνται για τη ρόφηση. Στη χημική ρόφηση μέταλλα και κράματα μετάλλων αντιδρούν με το υδρογόνο και σχηματίζουν ένα στερεό μεταλλικό υδρίδιο. Ένας μεταλλικός υδρίτης περιέχει μέχρι το πολύ 3% kg/kg υδρογόνο. Το πλεονέκτημα των μεταλλικών υδριτών είναι ότι αποτελεί μια ασφαλή μέθοδο, ωστόσο το βάρος του μέσου αποθήκευσης είναι ένα σοβαρό μειονέκτημα της μεθόδου αυτής.

Το υδρογόνο δεν είναι μια πρωτογενής πηγή ενέργειας όπως τα ορυκτά καύσιμα (π.χ. άνθρακας, πετρέλαιο, φυσικό αέριο) καθώς δεν συναντάται ελεύθερο στη φύση και πρέπει να παραχθεί. Έτσι το υδρογόνο μπορεί να θεωρηθεί περισσότερο σαν ένα μέσο αποθήκευσης ενέργειας. Μακροπρόθεσμα, οι ανανεώσιμες πηγές ενέργειας (ηλιακή, αιολική κτλ) προβλέπεται να κατέχουν ένα μεγάλο ποσοστό της παγκόσμιας παραγωγής. Ένα σημαντικό πρόβλημα των ανανεώσιμων πηγών ενέργειας είναι οι έντονοι γεωγραφικοί και χρονικοί περιορισμοί στους οποίους αυτές υπόκεινται και που έχουν σαν αποτέλεσμα η ποσότητα της παραγόμενης ενέργειας να μη συμβαδίζει πάντα με την ζήτηση. Το χάσμα μεταξύ ζήτησης και κατανάλωσης μπορεί να καλυφτεί αν χρησιμοποιηθεί το υδρογόνο σαν μέσο αποθήκευσης της πλεονάζουσας ενέργειας.

Το υδρογόνο, μπορεί να αποτελέσει επίσης ένα μελλοντικό καύσιμο για τα μέσα μεταφοράς. Το υδρογόνο μπορεί να χρησιμοποιηθεί είτε για καύση σε μηχανές εσωτερικής καύσης (ΜΕΚ) με λειτουργία παρόμοια των ΜΕΚ με βενζίνη, είτε σε κυψελίδες καυσίμου για την παραγωγή ηλεκτρισμού. Η μεγάλη θερμότητα που παράγει, οδηγεί σε αύξηση τόσο της αυτονομίας όσο και της απόδοσης με αποτέλεσμα η χρήση του να γίνεται άκρως συμφέρουσα. Ήδη τα πρώτα αυτοκίνητα και λεωφορεία που κινούνται με υδρογόνο έχουν κάνει την εμφάνισή τους. Υδρογονοκίνητα αυτοκίνητα μεγάλων αυτοκινητοβιομηχανιών όπως το Toyota Mirai, Hyundai ix35 FCEV και Honda FCX Clarity (Σχήμα 1.1.1) είναι διαθέσιμα για αγορά και χρήση σε δημόσιους δρόμους στην Ιαπωνία, Κορέα και Αμερική, ενώ και άλλοι κατασκευαστές έχουν αρχίσει την παραγωγή τέτοιων οχημάτων (Πίνακας 1.1.1). Για τους Ολυμπιακούς αγώνες του Τόκιο το 2020, η κυβέρνηση της Ιαπωνίας έχει αποφασίσει να μετατρέψει το Ολυμπιακό χωριό σε «πόλη υδρογόνου». Το υδρογόνο θα είναι η κύρια πηγή ενέργειας ενώ θα υπάρχουν και πολλοί σταθμοί ανεφοδιασμού (υδρογονάδικα) που θα εξυπηρετούν τα υδρογονοκίνητα αυτοκίνητα.



Σχήμα 1.1.1: Τα υδρογονοκίνητα αυτοκίνητα Toyota Mirai και Honda FCX Clarity (πάνω) και σχηματική απεικόνιση του τρόπου λειτουργίας ενός αυτοκινήτου κυψέλης υδρογόνου από την Toyota (κάτω).

Πίνακας 1.1.1: Κύρια χαρακτηριστικά κάποιων εκ των υδρογονοκίνητων αυτοκινήτων

Μοντέλο	Είδος μηχανής	Ισχύς (hp)	Αποθήκευση	Εμβέλεια (km)
Toyota Mirai	Κυψέλη καυσίμου	153	Υπό πίεση (700 bar)	502
Hyundai ix35 FCEV	Κυψέλη καυσίμου	136	Υπό πίεση (700 bar)	600
Honda FCX Clarity (2014)	Κυψέλη καυσίμου	130	Υπό πίεση (350 bar)	372
Honda Clarity FC	Κυψέλη καυσίμου	-	Υπό πίεση	589

(2017)				
BMW Hydrogen 7	MEK	256	Υγροποιημένο	201
Mercedes-Benz F-Cell	Κυψέλη καυσίμου	134	Υπό πίεση	402

1.2 Θέματα ασφάλειας υδρογόνου

Παρά τα πολλά πλεονεκτήματα που παρουσιάζει το υδρογόνο σαν φορέας ενέργειας, έχει ένα πολύ σημαντικό μειονέκτημα. Πρόκειται για ένα πολύ εύφλεκτο αέριο, που σημαίνει ότι σε περίπτωση διαρροής και ανάμειξης με τον αέρα μπορεί να οδηγήσει σε βίαιη **έκρηξη**. Το υδρογόνο αναφλέγεται σε μεγάλο εύρος συγκεντρώσεων στον αέρα (4 ως 75% κατ' όγκο) με αποτέλεσμα να καθίσταται άκρως επικίνδυνο σε περίπτωση διαρροής. Η σημαντικότερη επίπτωση μιας πιθανής ανάφλεξης είναι η ανάπτυξη υπερπιέσεων που θα προκληθούν από την έκρηξη του μείγματος αέρα-υδρογόνου. Οι υπερπίεσεις που θα εμφανιστούν μπορεί να έχουν καταστροφικά αποτελέσματα τόσο στον ανθρώπινο πληθυσμό όσο και στις εγκαταστάσεις. Στον Πίνακα 1.2.1 απεικονίζονται οι εκτιμώμενες συνέπειες από την ανάπτυξη διαφόρων τιμών υπερπίεσης. Πρέπει να επισημάνουμε ότι οι συνέπειες αυτές είναι ενδεικτικές, καθώς υπάρχει εξάρτηση και από άλλους παράγοντες όπως είναι η διάρκεια της υπερπίεσης και η κατασκευή των κτιρίων και εγκαταστάσεων.

Πίνακας 1.2.1: Εκτιμώμενες συνέπειες για διάφορες τιμές υπερπίεσεων (Lees 1980)

Υπερπίεση (kPa)	Εκτιμώμενες συνέπειες
0.3	Δυνατός θόρυβος. Ράγισμα γυαλιών
1.0	Τυπική πίεση για σπάσιμο γυαλιού
2.8	Τυπική ελάχιστη πίεση για δομικές ζημιές
3.5-6.9	Σπάσιμο ορισμένων παραθύρων
4.8	Μικρές ζημιές σε δομικές κατασκευές
7.0	Μερική καταστροφή σπιτιών
7.0-14	Κάμψη μεταλλικών στοιχείων
7.0-55	Ελαφριοί έως βαριοί τραυματισμοί από τα ιπτάμενα θραύσματα
14	Μερική κατάρρευση τοίχων και οροφών σπιτιών
14-21	Κατάρρευση μη ενισχυμένου μπετό και τσιμεντόλιθων
17-84	Ρήξη τυμπάνου για 1 έως 90% του εκτιθέμενου πληθυσμού
17	50% καταστροφή των σπιτιών χτισμένων από τούβλα
21	Διαχωρισμός των μεταλλικών πλαισίων της βάσης των κτιρίων
35	Σπάσιμο ξύλινων δοκών
35-48	Σχεδόν ολοκληρωτική καταστροφή σπιτιών
48	Ανατροπή τρένων μεταφοράς αυτοκινήτων
69	Πιθανή ολοκληρωτική καταστροφή κτιρίων
100-200	1-99% πληθυσμιακές απώλειες λόγω του κρουστικού κύματος

Χαρακτηριστικά είναι τα παραδείγματα δύο ατυχημάτων. Το πρώτο συνέβη στη Στοκχόλμη το 1983 (Venetsanos et al. 2003). Το ατύχημα συνέβη όταν υπήρξε διαρροή σε φιάλες υδρογόνου οι οποίες μεταφέρονταν πάνω σε φορτηγό. Οι συνέπειες του ατυχήματος ήταν 16 τραυματίες, 10 κατεστραμμένα αυτοκίνητα, βαριές ζημιές στις προσόψεις των κοντινών κτιρίων και σπάσιμο τζαμιών σε ακτίνα 90 μέτρων. Το δεύτερο ατύχημα συνέβη το καλοκαίρι του 1985 σε εργοστάσιο

αμμωνίας στην Νορβηγία (Bjerketvedt & Mjaavatten 2013) και είχε σαν αποτέλεσμα δύο θανάτους και την καταστροφή του κτιρίου στο οποίο η έκρηξη έλαβε μέρος. Είναι μια από τις μεγαλύτερες εκρήξεις υδρογόνου που έχουν καταγραφεί. Γυαλιά παραθύρων σπάσανε σε ακτίνα 700 μέτρων, ενώ κομμάτια τσιμέντου βάρους 1.2 τόνων εκτοξεύτηκαν μέχρι και 16 μέτρα μακριά.

Στον παρακάτω πίνακα απεικονίζονται τα όρια αναφλεξιμότητας, η θερμοκρασία αυτανάφλεξης και η ταχύτητα στρωτής καύσης (§2.2.2) για διάφορα εύφλεκτα αέρια. Τα νούμερα που παρουσιάζονται είναι ενδεικτικά καθώς υπάρχει εξάρτηση από τις συνθήκες, π.χ. πίεση και συγκέντρωση. Τα μεγέθη αυτά είναι πολύ σημαντικά για τον χαρακτηρισμό της επικινδυνότητας των αερίων. Μεγάλο εύρος ορίων αναφλεξιμότητας αυξάνει την πιθανότητα έναυσης της καύσης στην περίπτωση διαρροής ενώ μεγάλη ταχύτητα καύσης συνεπάγεται πιο βίαιη έκρηξη. Παρατηρούμε ότι σε σύγκριση με τα άλλα αέρια, το υδρογόνο παρουσιάζει τη μεγαλύτερη ταχύτητα καύσης ενώ έχει και το δεύτερο μεγαλύτερο εύρος ορίων αναφλεξιμότητας.

Πίνακας 1.2.2: Κύρια χαρακτηριστικά καυσίμων τα οποία οδηγήσουν σε έκρηξη (AIChE 1998, §3.1)

Αέριο	Όρια αναφλεξιμότητας (% κατ' όγκο)	Θερμοκρασία αυτανάφλεξης (°C)	Στρωτή ταχύτητα καύσης (m/s)
Υδρογόνο, H ₂	4.0 – 75.0	560	3.25
Μεθάνιο, CH ₄	5.0 – 15.0	595	0.45
Αιθάνιο, C ₂ H ₆	3.0 – 15.5	515	0.48
Αιθυλένιο, C ₂ H ₄	2.7 – 34.0	425	0.74
Προπάνιο, C ₃ H ₈	2.1 – 9.5	470	0.46
Προπένιο, C ₃ H ₆	2.0 – 11.7	455	0.51
Ακετυλένιο, C ₂ H ₂	1.5 – 100	305	1.55

Για την ασφαλή μετάβαση στο υδρογόνο, τα θέματα ασφαλείας που σχετίζονται με αυτό πρέπει να ερευνηθούν και να κατανοηθούν. Για τον σκοπό αυτό, έχουν διεξαχθεί και συνεχίζονται να διεξάγονται πλήθος πειραμάτων σχετιζόμενα με εκρήξεις υδρογόνου (π.χ. Sato et al. 2006, Groethe et al. 2007) με σκοπό την διερεύνηση των επιπτώσεών τους. Τα πειράματα αφορούν πλήθος ρεαλιστικών περιπτώσεων όπως φωτιά σε σταθμό ανεφοδιασμού υδρογόνου για αυτοκίνητα (Makarou et al. 2009) ή φωτιά σε οδική σήραγγα λόγω ατυχήματος αυτοκινήτων υδρογόνου (Sato et al. 2006) αλλά και περιπτώσεων θεωρητικού ενδιαφέροντος (Xiao et al. 2012) που βοηθούν στην καλύτερη κατανόηση των μηχανισμών που εμπλέκονται στην καύση του υδρογόνου. Η σημασία που δίνεται στην ανάπτυξη τεχνολογιών ασφαλείας υδρογόνου φαίνεται και από το πλήθος των ερευνητικών προγραμμάτων που έχουν πραγματοποιηθεί και συνεχίζουν να πραγματοποιούνται με την καθοδήγηση της Ευρωπαϊκής Ένωσης (Σχήμα 1.2.1), όπως είναι τα HySafe (Safety of Hydrogen as an Energy Carrier), HyIndoor (Pre-normative research on safe indoor use of fuel cells and hydrogen Systems), SUSANA (Support to SAFETY ANALYSIS of Hydrogen and Fuel Cell Technologies) και HySEA (Improving Hydrogen Safety for Energy Applications).





Σχήμα 1.2.1: Λογότυπα κάποιων εκ των χρηματοδοτούμενων από την Ευρωπαϊκή Ένωση προγραμμάτων σχετιζόμενων με την τεχνολογία ασφάλειας υδρογόνου.

Το ενδιαφέρον για το υδρογόνο δεν είναι καινούργιο, καθώς ερευνητικά προγράμματα σχετικά με αυτό υπήρχαν ήδη 40 χρόνια πριν (Markatos et al. 1977), λόγω της χρήσης του σαν καύσιμο σε πυραύλους καθώς και λόγω της παραγωγής του σαν παρά-προϊόν σε πυρηνικούς αντιδραστήρες. Το πυρηνικό ατύχημα στο Three Mile Island το 1979, οδήγησε στην ανάπτυξη της έρευνας γύρω από τις εκρήξεις υδρογόνου. Κατά την διάρκεια του ατυχήματος παρήχθησαν μεγάλες ποσότητες υδρογόνου οι οποίες διέρρευσαν στο εσωτερικού του κτηρίου. Η έκρηξη από την καύση του υδρογόνου που ακολούθησε δεν ήταν αρκετή για να το καταστρέψει, ανέδειξε όμως την ανάγκη για ενδελεχή μελέτη της έκρηξης υδρογόνου όπως για παράδειγμα διερεύνηση των συνθηκών για μετάβαση σε υπερηχητική έκρηξη (§1.3.1) η οποία θα ήταν ικανή να καταστρέψει ένα κτίριο. Η Αμερικάνικη ένωση κανονισμών για πυρηνικά εργοστάσια, ξεκίνησε ένα πρόγραμμα έρευνας για υπερηχητικές εκρήξεις μεγάλης κλίμακας. Ένας από τους κύριους στόχους ήταν να καθοριστούν οι συνθήκες κάτω από τις οποίες μία έκρηξη υδρογόνου μπορεί να εξελιχθεί σε υπερηχητική έκρηξη. Τα πυρηνικά εργοστάσια έχουν έκτοτε εφοδιαστεί με τον κατάλληλο εξοπλισμό ώστε να μην είναι δυνατή μια μετάβαση σε υπερηχητική έκρηξη. Το υδρογόνο συνεχίζει να παραμένει ένα σημαντικό πρόβλημα για την ασφάλεια των πυρηνικών εργοστασίων. Ο διεθνής οργανισμός για την πυρηνική ενέργεια έχει δημοσιεύσει μια έκθεση για πυρηνικά εργοστάσια πάνω στην μετάβαση σε υπερηχητική έκρηξη (OECD 2000).

Η μελέτη της έκρηξης υδρογόνου δεν είναι το μόνο τμήμα της ασφάλειας που απασχολεί την κοινότητα που ασχολείται με την ασφάλεια του υδρογόνου. Άλλες περιπτώσεις είναι αυτές της έκλυσης και διασποράς, η περίπτωση φωτιάς και η περίπτωση της έναυσης (αυτανάφλεξη). Η **έκλυση και διασπορά** υδρογόνου αποτελούν συνήθως προαπαιτούμενα της έκρηξης, ώστε να αναμειχθεί το υδρογόνο με τον ατμοσφαιρικό αέρα και να δημιουργηθεί το εύφλεκτο μείγμα. Συνεπώς η μελέτη των φαινομένων έκλυσης και διασποράς και η αναζήτηση τρόπων μείωσης της συγκέντρωσης του υδρογόνου στον αέρα στην περίπτωση διαρροής, είναι δύο εξ' ίσου σημαντικά ζητήματα, κυρίως αν αναλογιστούμε τις ακραίες συνθήκες στις οποίες μπορεί να είναι αποθηκευμένο το υδρογόνο, δηλαδή υπό πολύ υψηλή πίεση (ακόμα και 700 bar) ή υπό πολύ χαμηλές θερμοκρασίας (π.χ. 20 K) ώστε να βρίσκεται στην υγρή κατάσταση. Οι διδακτορικές διατριβές των Παπανικολάου (2011) και Γιαννίση (2016) έχουν συμβάλει στην μελέτη της έκλυσης και της διασποράς του υδρογόνου στο περιβάλλον, η πρώτη για αέριες εκλύσεις ενώ η δεύτερη για διφασικές και κρυογενικές.

Περιπτώσεις **φωτιάς υδρογόνου** υπό την μορφή τζετ, έχουμε στην περίπτωση συνεχόμενης διαρροής υδρογόνου το οποίο αναφλέγεται είτε λόγω κάποιας πηγής έναυσης καύσης (π.χ. σπινθήρας, ζεστή επιφάνεια) είτε λόγω αυτανάφλεξης (Bragin & Molkon 2011, Bragin et al. 2013). Η **αυτανάφλεξη** είναι ένα φαινόμενο το οποίο μπορεί να πραγματοποιηθεί όταν το υδρογόνο διαφύγει στο περιβάλλον από δεξαμενή υψηλής πίεσης δημιουργώντας ένα υπο-εκτονωμένο τζετ (underexpanded jet) και οφείλεται στην τοπική έναυση της καύσης λόγω αύξησης της

θερμοκρασίας από τα κύματα πίεσης που δημιουργούνται¹. Σε αντίθεση με τη έκρηξη στην οποία το κύριο πρόβλημα ασφάλειας είναι η ανάπτυξη υψηλών υπερπίεσεων, η φωτιά τύπου jet εμπεριέχει κινδύνους ασφάλειας λόγω της υψηλής θερμοκρασίας της φλόγας και της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας. Έτσι τέτοιες περιπτώσεις πρέπει να μελετώνται ώστε να ορίζονται οι κατάλληλες αποστάσεις ασφαλείας. Η μελέτη του φαινομένου της αυτανάφλεξης είναι επίσης σημαντική για τον σχεδιασμό των καταλλήλων μηχανισμών εκτόνωσης πίεσης (pressure relief device) σε δεξαμενές αποθήκευσης υδρογόνου, ώστε να αποφευχθεί η δημιουργία φλόγας.

1.3 Είδη και κύρια χαρακτηριστικά εκρήξεων

Η διάδοση της χρήσης εύφλεκτων υγρών και αερίων καυσίμων έχει οδηγήσει στην αύξηση των ατυχημάτων που οδηγούν σε έκρηξη. Η έκρηξη μπορεί να οριστεί σαν την βίαιη έκλυση ενέργειας η οποία οδηγεί στην ανάπτυξη μεγάλων πιέσεων². Οι εκρήξεις συναντώνται από ατυχήματα που μπορούν να συμβούν στην καθημερινή μας ζωή όπως π.χ. από τους ατμούς της βενζίνης, μέχρι τις θερμό-πυρηνικές εκρήξεις τύπου Supernova των λευκών νάνων αστεριών. Οι εκρήξεις αυτές αν και φαίνονται να διαφέρουν πολύ μεταξύ τους, παρουσιάζουν κοινά χαρακτηριστικά (Oran 2015). Δύο βασικές κατηγορίες εκρήξεων οι οποίες είναι πιθανό να πραγματοποιηθούν στο περιβάλλον μας είναι οι εξής:

- Εκρήξεις προ-αναμεμιγμένου μείγματος αερίων (**VCE** - Vapor Cloud Explosions)
 - Επιταχυνόμενη έκρηξη (deflagration)
 - Υπερηχητική έκρηξη (detonation)
- Εκρήξεις εκτόνωσης υγροποιημένου αερίου (**BLEVE** - Boiling Liquid Expanding Vapor Explosion)
 - Εκρήξεις εκτόνωσης μη-εύφλεκτου υγροποιημένου αερίου (Ψυχρό BLEVE)
 - Εκρήξεις εκτόνωσης εύφλεκτου υγροποιημένου αερίου (Θερμό BLEVE)

Η παρούσα εργασία επικεντρώνεται στην υπο-κατηγορία των επιταχυνόμενων εκρήξεων (deflagration). Όλες οι παραπάνω κατηγορίες όμως περιγράφονται εν συντομία στη συνέχεια.

1.3.1 Εκρήξεις προ-αναμεμιγμένου μείγματος αερίων (VCE)

Για την πραγματοποίηση μιας VCE απαιτείται αρχικά η διαρροή εύφλεκτου αερίου καυσίμου στο περιβάλλον. Το αποτέλεσμα της διαρροής είναι η ανάμειξη με τον αέρα του περιβάλλοντος και η δημιουργία εύφλεκτου νέφους καυσίμου-αερίου. Στη συνέχεια είναι απαραίτητη η παρουσία τουλάχιστον ενός σημείου έναυσης (ignition) έτσι ώστε το μείγμα να αναφλεγεί. Η ανάφλεξη του μείγματος οδηγεί στην δημιουργία ενός μετώπου φλόγας το οποίο προελαύνει προς την κατεύθυνση της άκαυστης περιοχής. Το αποτέλεσμα της καύσης του προ-αναμεμιγμένου μείγματος είναι η ανάπτυξη υπερπίεσεων και αυξημένων θερμοκρασιών. Κάποια τυπικά καύσιμα που οδηγούν σε VCE είναι το προπάνιο, το βουτάνιο, το μεθάνιο (φυσικό αέριο) και το υδρογόνο.

¹ Στα αγγλικά το είδος αυτός της έναυσης αναφέρεται σαν “spontaneous ignition” ή “diffusion ignition”

² Μια εκτενής συζήτηση επάνω στο τι είναι έκρηξη και στους ορισμούς που χρησιμοποιούνται γίνεται στην εργασία των Keller et al. (2014)

Το καύσιμο μπορεί να βρίσκεται αρχικά είτε υγροποιημένο κάτω από υψηλή πίεση ή/και χαμηλή θερμοκρασία, είτε σε αέρια μορφή.

Μια επισκόπηση ενός μεγάλου πλήθους ατυχημάτων VCE (53 ατυχήματα τα οποία συνέβησαν μέχρι το 1993) παρουσιάζεται από τους Lenoir & Davenport (1993). Εκτενής περιγραφή κάποιων ατυχημάτων παρουσιάζεται επίσης σε οδηγίες για την αξιολόγηση εκρήξεων που έχουν εκδοθεί από την Αμερικάνικη ένωση χημικών μηχανικών (AIChE 1994).

Οι συνέπειες μιας VCE δεν είναι πάντα καταστροφικές και εξαρτώνται από τις συνθήκες στις οποίες πραγματοποιείται. Το μέγεθος των πιέσεων που θα αναπτυχθούν εξαρτάται από διάφορους παράγοντες όπως:

- Την χρονική στιγμή έναυσης της καύσης. Αν η έναυση γίνει σε σύντομο χρονικό διάστημα από την έναρξη της διαρροής, τότε η πιθανότητα να αναπτυχθούν μεγάλες υπερπιέσεις είναι μικρή. Σε αυτή την περίπτωση, το κύριο φαινόμενο που θα λάβει χώρα θα είναι μια μη προ-αναμεμειγμένη καύση όπως π.χ. τυπική φωτιά (fire) και φωτιά τύπου τζετ (jet flame). Η χρονική στιγμή στην οποία πρέπει να πραγματοποιηθεί η έναυση ώστε να προκληθεί μια VCE εξαρτάται από διάφορους παράγοντες όπως το μέγεθος της διαρροής, το είδος του καυσίμου και οι περιβαλλοντικές συνθήκες. Έναυση της καύσης από 1 έως 5 λεπτά μετά την έναρξη της έκλυσης θεωρείται ως η πιο πιθανή για να οδηγήσει σε VCE (Lenoir & Davenport 1993). Παρόλα αυτά μεγάλα ατυχήματα έχουν καταγραφεί ακόμα και με καθυστέρηση έναυσης λίγων δευτερολέπτων ή και μεγαλύτερη των 30 λεπτών.
- Την ποσότητα του προ-αναμεμειγμένου μείγματος που βρίσκεται εντός των ορίων αναφλεξιμότητας. Όσο μεγαλύτερη είναι αυτή τόσο μεγαλύτερες θα είναι και οι πιέσεις που θα αναπτυχθούν. Τυπικά, το προ-αναμεμειγμένο μείγμα χωρίζεται σε τρεις περιοχές: την πλούσια σε καύσιμο περιοχή η οποία βρίσκεται γύρω από το σημείο έκλυσης, την αραιή σε καύσιμο περιοχή η οποία βρίσκεται στα όρια του νέφους, και την μεταξύ τους περιοχή στην οποία η συγκέντρωση του καυσίμου είναι εντός των ορίων αναφλεξιμότητας. Το μέγεθος της περιοχής αυτής εξαρτάται από πολλούς παράγοντες όπως το είδος του καυσίμου, τις συνθήκες έκλυσης, την γεωμετρία της περιοχής και τις περιβαλλοντικές συνθήκες.
- Την ταχύτητα διάδοσης της φλόγας. Όσο μεγαλύτερη είναι η ταχύτητα διάδοσης της φλόγας τόσο μεγαλύτερες είναι οι πιέσεις που αναπτύσσονται. Οι παράγοντες από τους οποίους εξαρτάται η ταχύτητα διάδοσης της φλόγας αναλύεται σε επόμενα κεφάλαια.

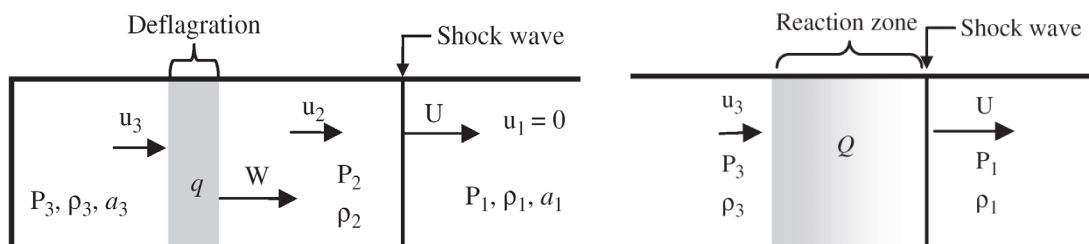
Οι εκρήξεις προ-αναμεμειγμένου μείγματος κατηγοριοποιούνται σε δύο μεγάλες υπο-κατηγορίες: τις επιταχυνόμενες εκρήξεις (deflagration) και τις υπερηχητικές εκρήξεις (detonation). Οι δύο αυτές κατηγορίες διακρίνονται από τον τρόπο με τον οποίο πραγματοποιείται η καύση.

Η πρώτη περίπτωση (**deflagration**) αποτελεί μια τυπική περίπτωση καύσης προ-αναμεμειγμένου μείγματος στην οποία ο ρυθμός καύσης εξαρτάται από την μοριακή και τυρβώδη διάχυση. Στην περίπτωση όπου η ροή είναι στρωτή (απουσία τύρβης), η ταχύτητα του μετώπου καύσης είναι συνήθως μικρή (π.χ. για τους περισσότερους υδρογονάνθρακες) και δεν αναμένεται να αναπτυχθούν μεγάλες πιέσεις. Σε αυτή την περίπτωση έχουμε μια φωτιά λάμψης (flash fires). Στις περισσότερες όμως περιπτώσεις η ροή παρουσιάζει τυρβώδη χαρακτηριστικά με αποτέλεσμα να επιταχύνεται σημαντικά το μέτωπο της φλόγας και να αναπτύσσονται μεγάλες υπερπιέσεις. Τύρβη σε μια VCE αναπτύσσεται για διάφορες αιτίες όπως:

- Τη διαρροή του καυσίμου (π.χ. ροή τύπου τζετ).
- Την περίπλοκη γεωμετρία.
- Την ίδια την φλόγα λόγω της καύσης και των ασταθειών που αναπτύσσονται.
- Τον εξωτερικό άνεμο.

Η περίπτωση των υπερηχητικών εκρήξεων (**detonation**) συναντάται πιο σπάνια σε ατυχήματα καθώς οι συνθήκες οι οποίες απαιτούνται είναι δύσκολο να επιτευχθούν. Αυτό του είδους έκρηξη χαρακτηρίζεται από ένα υπερηχητικό μέτωπο το οποίο κινείται με ταχύτητα της τάξεως των 1000 m/s ή και μεγαλύτερων. Η καύση συντελείται σαν αποτέλεσμα της αύξησης της θερμοκρασίας λόγω της αδιαβατικής συμπίεσης που προκαλεί το κύμα πίεσης. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα το κύμα πίεσης και η πρωτεύουσα ζώνη αντίδρασης να κινούνται μαζί με σταθερή ταχύτητα. Για στοιχειομετρικά μείγματα, ο λόγος πίεσης κατά μήκος του κύματος κυμαίνεται μεταξύ 15 και 20, το οποίο αντιστοιχεί περίπου σε διπλάσιο λόγο πίεσης σε σύγκριση με μια επιταχυνόμενη έκρηξη (deflagration) του ίδιου μείγματος σε αδιαβατικές συνθήκες υπό σταθερό όγκο (Ciccarelli & Dorofeev 2008).

Στο Σχήμα 1.3.1 απεικονίζονται οι κύριες ζώνες στις οποίες αποτελείται μια ιδεατή έκρηξη σε ένα οριζόντιο κανάλι, τόσο στην περίπτωση της επιταχυνόμενης έκρηξης (deflagration) όσο και της υπερηχητικής (detonation). Στην περίπτωση της επιταχυνόμενης έκρηξης, έχουμε δύο σημεία ασυνέχειας, το πρώτο λόγω του κύματος πίεσης (shock wave) και το δεύτερο λόγω του μετώπου της φλόγας. Έτσι η περιοχή χωρίζεται σε τρεις ζώνες: την πρώτη ζώνη η οποία βρίσκεται μπροστά από το κύμα πίεσης, στην δεύτερη η οποία βρίσκεται μεταξύ του μετώπου της φλόγας και του κύματος πίεσης και στην τρίτη η οποία βρίσκεται πίσω από το μέτωπο της φλόγας. Στην πρώτη και στη δεύτερη ζώνη βρίσκονται τα άκαυστα συστατικά ενώ στην τρίτη τα προϊόντα της καύσης. Από την άλλη μεριά, στην περίπτωση της υπερηχητικής έκρηξης διακρίνονται δύο μόνο κύριες ζώνες καθώς το κύμα πίεσης και η ζώνη αντίδρασης κινούνται μαζί. Οι αντιδράσεις καύσης πραγματοποιούνται λόγω της υψηλής πίεσης και θερμοκρασίας που προκαλεί το κύμα πίεσης.



Σχήμα 1.3.1: Σχηματική απεικόνιση επιταχυνόμενης (αριστερά) και υπερηχητικής (δεξιά) έκρηξης (Ciccarelli & Dorofeev 2008).

Μια υπερηχητική έκρηξη μπορεί να ξεκινήσει από την ύπαρξη πολύ μεγάλης ποσότητας ενέργειας σε πολύ μικρό όγκο μείγματος. Αυτό στην πράξη είναι πολύ δύσκολο να συμβεί. Συνήθως μια υπερηχητική έκρηξη (detonation) αναπτύσσεται μέσω μιας επιταχυνόμενης (deflagration) λόγω της συνεχούς αύξησης του ρυθμού καύσης. Η διαδικασία μετάβασης από μια επιταχυνόμενη έκρηξη σε μια υπερηχητική είναι γνωστή στα αγγλικά με τον όρο “deflagration to detonation transition” (DDT). Στις εργασίες των Oran & Gamezo (2007) και Ciccarelli & Dorofeev (2008) γίνονται δύο εξαιρετικές ανασκοπήσεις για πειραματικές και υπολογιστικές μελέτες του φαινομένου. Η μελέτη του φαινομένου του DDT δεν γίνεται μόνο για λόγους που έχουν να κάνουν με την ασφάλεια αλλά και

για εκμετάλλευση του φαινομένου της υπερηχητικής έκρηξης για μηχανές πρόωσης. Μια εκτενής ανασκόπηση για το θέμα αυτό παρουσιάζεται στην εργασία των Roy et al. (2004).

1.3.2 Εκρήξεις εκτόνωσης υγροποιημένου αερίου (BLEVE)

Έκρηξη εκτόνωσης υγροποιημένου αερίου (BLEVE) έχουμε στην περίπτωση αστοχίας δοχείου το οποίο περιέχει υγρό σε υψηλή πίεση και σε θερμοκρασία πολύ μεγαλύτερη της θερμοκρασίας βρασμού του σε ατμοσφαιρικές συνθήκες. Η έκθεση του υγρού στις ατμοσφαιρικές συνθήκες οδηγεί στην εξάτμιση του με αποτέλεσμα την βίαιη αύξηση του όγκου και την ανάπτυξη μεγάλων υπερπιέσεων. Σε αντίθεση με την προηγούμενη περίπτωση έκρηξης, το υγρό δεν χρειάζεται να είναι εύφλεκτο. Τυπικά παραδείγματα υγρών τα οποία οδηγούν σε τέτοιου είδους έκρηξη είναι το υγροποιημένο προπάνιο και διοξείδιο του άνθρακα, τα οποία μεταφέρονται σε δοχεία υψηλής πίεσης και ατμοσφαιρικής θερμοκρασίας. Στην περίπτωση όπου το υγρό είναι εύφλεκτο, έχουμε το σχηματισμό ανωστικής «μπάλας φωτιάς» (fireball). Η καύση πραγματοποιείται αρχικά στην επιφάνεια του διαστελλόμενου αερίου όπου γίνεται η ανάμειξη με τον περιβάλλοντα αέρα. Σε αντίθεση με τις εκρήξεις VCE, το είδος της καύσης το οποίο πραγματοποιείται είναι καύση μη προαναμεμιγμένου μείγματος ή αλλιώς καύση διάχυσης.

Στις περιπτώσεις αυτές, το υγρό συνήθως δεν καταλαμβάνει όλο τον όγκο αποθήκευσης αλλά συνυπάρχει με την αέρια φάση με την οποία βρίσκεται σε ισορροπία. Έτσι όταν το δοχείο διαρραγεί, η αέρια φάση θα διαφύγει με αποτέλεσμα την πτώση της πίεσης. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα την έναρξη εξάτμισης στην επιφάνεια υγρού-αερίου και ανάλογα με τη θερμοκρασία τον απότομο βρασμό σε όλο τον όγκο του υγρού, σε μία διαδικασία η οποία διαρκεί λίγα χιλιοστά του δευτερολέπτου. Η ενέργεια που απελευθερώνεται είναι πολύ μεγάλη, με αποτέλεσμα να προκαλεί κύμα πίεσης μεγάλης έντασης το οποίο ωθεί τα θραύσματα της δεξαμενής με μεγάλη ταχύτητα. Η ενέργεια προέρχεται κατά κύριο λόγο από την αύξηση του όγκου της υγρής φάσης λόγω εξάτμισης. Η ενέργεια αυτή ανά μονάδα όγκου είναι δεκαπλάσια της ενέργειας που θα απελευθερωνόταν μόνο από την διαστολή της αέριας φάσης που βρίσκεται πάνω από το υγρό, στην περίπτωση δηλαδή όπου δεν γινόταν εξάτμιση. Ιστορικό ατυχημάτων τέτοιου είδους παρουσιάζεται στο (AIChE 1994).

1.3.3 Κύματα πίεσης

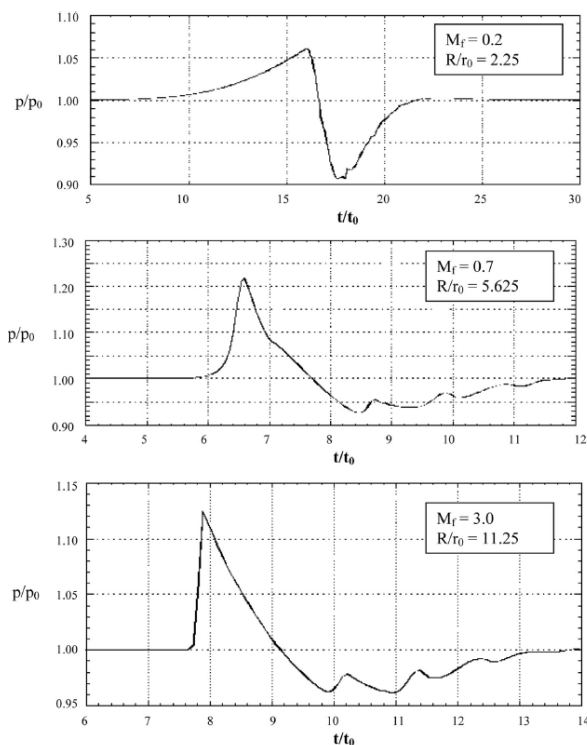
Η κύρια συνέπεια των εκρήξεων είναι η αύξηση της πίεσης. Τα κύματα πίεσης που δημιουργούνται μπορούν να κατηγοριοποιηθούν με βάση των αριθμό Mach της ταχύτητας καύσης ως εξής (Geng et al. 2015):

- Ακουστικά κύματα: $Mach < 0.35$
- Κύματα πίεσης: $0.35 < Mach < 1.00$
- Κύματα κρούσης: $Mach > 1.00$

Στο Σχήμα 1.3.2 απεικονίζεται η χρονική εξέλιξη της πίεσης σε ένα δεδομένο σημείο για τα τρία διαφορετικά είδη έκρηξης. Παρατηρούμε ότι η αύξηση της πίεσης στην περίπτωση των ακουστικών κυμάτων είναι πολύ μικρή. Εκτός της περιοχής των θετικών υπερ-πιέσεων υπάρχει και αντίστοιχη περιοχή αρνητικών υπερπιέσεων, με την μέγιστη υπο-πίεση να είναι σε απόλυτο αριθμό περίπου

ίση με την μέγιστη υπερπίεση. Στην περίπτωση των κυμάτων πίεσης, παρατηρούμε ότι η υπερπίεση η οποία αναπτύσσεται είναι σαφώς μεγαλύτερη από αυτή της περίπτωσης των ακουστικών κυμάτων. Επίσης το ο ρυθμός αύξησης της πίεσης είναι αρκετά μεγαλύτερος (μεγαλύτερη κλίση της καμπύλης). Η καμπύλη αυτή είναι χαρακτηριστική των επιταχυνόμενων εκρήξεων VCE (deflagration). Τέλος στην περίπτωση των κυμάτων κρούσεως, παρατηρούμε ότι η πίεση αυξάνει ακόμα πιο απότομα δημιουργώντας ένα αιχμηρό μέγιστο.

Συγκρίνοντας τα προφίλ πίεσης στις κατηγορίες έκρηξης που περιγράψαμε στην προηγούμενη παράγραφο, το προφίλ της επιταχυνόμενης έκρηξης είναι παρόμοιο με αυτό της δεύτερης εικόνας του παρακάτω σχήματος ενώ της υπερηχητικής έκρηξης καθώς και των εκρήξεων BLEVE, πιο κοντά στο τρίτο. Οι υπερηχητικές εκρήξεις και οι εκρήξεις BLEVE είναι πιο βίαιες μορφές έκρηξης με αποτέλεσμα η αύξηση της πίεσης να πραγματοποιείται απότομα και σε πολύ μικρό χρονικό διάστημα. Οι απλές εκρήξεις από την άλλη, μπορούν και αυτές να δώσουν μεγάλες πιέσεις, η αύξηση όμως της πίεσης γίνεται συνήθως πιο ομαλά, ενώ το χρονικό διάστημα στο οποίο η πίεση παίρνει μεγάλες τιμές είναι μεγαλύτερο.



Σχήμα 1.3.2: Τυπικά προφίλ κυμάτων πίεσης για τρεις περιπτώσεις: Ακουστικά κύματα, κύματα πίεσης, κύματα κρούσης (Geng et al. 2015).

Κεφάλαιο 2

Φυσικά φαινόμενα κατά την έκρηξη αέριου μείγματος

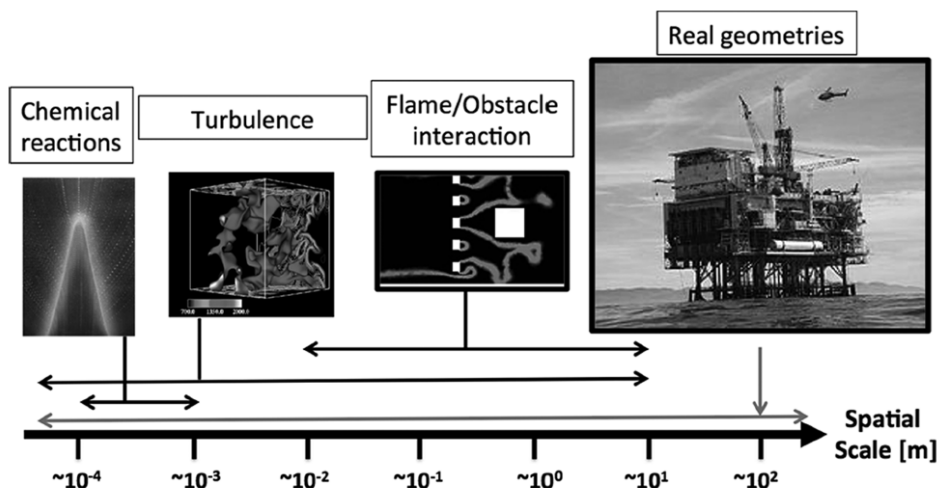
*Big whorls have little whorls,
which feed on their velocity;
and little whorls have lesser whorls,
and so on to viscosity*

Richardson (1922)

Η έκρηξη αέριου μείγματος είναι μια περίπλοκη διεργασία η οποία περιλαμβάνει μεγάλο πλήθος φυσικών φαινομένων. Η δυσκολία στη μελέτη και μοντελοποίηση της έγκειται στο γεγονός ότι εμπεριέχει πολλά φαινόμενα τα οποία λαμβάνουν χώρα σε διαφορετικές χωρικές και χρονικές κλίμακες, οι οποίες μπορεί να διαφέρουν μεταξύ τους πολλές τάξεις μεγέθους. Στο παρακάτω σχήμα απεικονίζονται διάφορες χαρακτηριστικές κλίμακες οι οποίες εμπλέκονται σε μια έκρηξη που λαμβάνει χώρα σε γεωμετρία πρακτικού ενδιαφέροντος. Τα φαινόμενα και οι κλίμακες που συναντάμε είναι:

- **Χημικές αντιδράσεις (κλίμακα 10^3 m):** Μία από τις πιο μικρές κλίμακες, είναι αυτή στην οποία πραγματοποιούνται οι χημικές αντιδράσεις της καύσης. Σε μία έκρηξη και γενικά σε μια καύση προ-αναμεμιγμένου μείγματος, οι χημικές αντιδράσεις πραγματοποιούνται σε μια πολύ λεπτή επιφάνεια (μέτωπο της φλόγας) που έχει πάχος τάξεως μεγέθους χιλιοστού. Το μέτωπο της καύσης προελαύνει στην άκαυστη περιοχή καταναλώνοντας τα αντιδρώντα της αντίδρασης.
- **Τύρβη (κλίμακα $10^5 - 10^1$ m):** Όπως θα δούμε στην Παράγραφο 2.1.3, η τύρβη αποτελείται από πολλές χαρακτηριστικές κλίμακες οι οποίες έχουν τάξεις μεγέθους από μικρόμετρα μέχρι μέτρα. Οι δίνες δηλαδή μπορεί να έχουν μέγεθος το οποίο να είναι μικρότερο και από το πάχος της φλόγας ή από την άλλη πολλές τάξεις μεγέθους μεγαλύτερο από αυτό.
- **Αλληλεπίδραση φλόγας – γεωμετρίας (κλίμακα $10^2 - 10^1$ m):** Τα γεωμετρικά εμπόδια τα οποία συναντάει το μέτωπο της φλόγας κατά την προέλαση του αυξάνουν την επιφάνεια καύσης, ενισχύουν την τύρβη και συντελούν στην ανάπτυξη διαφόρων ασταθειών. Οι αστάθειες αυτές θα συζητηθούν στη συνέχεια.

Στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε τα βασικά χαρακτηριστικά της τύρβης και της καύσης, το πώς μια στρωτή φλόγα μεταβαίνει στην τυρβώδη περιοχή, τις χαρακτηριστικές περιοχές και κλίμακες της τυρβώδους καύσης καθώς και φαινόμενα που σχετίζονται με εκρήξεις σε κλίμακες πρακτικού ενδιαφέροντος.



Σχήμα 2.0.1: Χωρικές κλίμακες οι οποίες συμπεριλαμβάνονται σε μια έκρηξη σε γεωμετρία κλίμακας πρακτικού ενδιαφέροντος (Quillatre et al. 2013).

2.1 Τυρβώδεις ροές

2.1.1 Χαρακτηριστικά της τύρβης

Το πιο συχνός τύπος ροής ο οποίος συναντάτε στην καθημερινότητα είναι οι τυρβώδεις ροές. Τυρβώδη είναι η ροή του αέρα γύρω από ένα κτήριο, η ροή γύρω από ένα αυτοκίνητο ή αεροπλάνο, η κίνηση του καπνού έξω από την καπνοδόχο και η ροή του νερού σε ένα ποτάμι ή καταρράκτη. Παρόλο που οι λέξεις «τύρβη» και «τυρβώδης» έχουν γενικά κατανοητή σημασία, ένας ακριβής ορισμός της τυρβώδους ροής είναι δύσκολο να δοθεί. Σαν αποτέλεσμα έχουν προταθεί πολλοί διαφορετικοί ορισμοί οι οποίοι πολλές φορές βασίζονται σε διαισθητικά μόνο χαρακτηριστικά (McDonough 2007). Για παράδειγμα ο Hinze (1959) ορίζει την τυρβώδη ροή ως εξής: «Τύρβη είναι η άτακτη κατάσταση της ροής στην οποία οι διάφορες ποσότητες παρουσιάζουν τυχαίες διακυμάνσεις στον χρόνο και στον χώρο, με τρόπο ώστε να μπορούν να εξαχθούν στατιστικές μέσες τιμές»¹. Λόγω της αδυναμίας ενός ακριβούς ορισμού, η τύρβη είναι καλύτερα να οριστεί με βάση τα χαρακτηριστικά της (Tennekes & Lumley 1972). Τα βασικά χαρακτηριστικά που παρουσιάζει μια τυρβώδης ροή είναι:

- Αταξία (irregularity). Οι τυρβώδεις ροές παρουσιάζουν ακανόνιστη και τυχαία συμπεριφορά. Η ταχύτητα και άλλες μεταβλητές της ροής μεταβάλλονται με φαινομενικά τυχαίο και χασοτικό τρόπο. Η ροή είναι εγγενώς μη σταθερή στο χρόνο ακόμα και αν οι οριακές συνθήκες δεν αλλάζουν. Οι τυρβώδεις ροές παρουσιάζουν μεγάλο εύρος χωρικών και χρονικών κλιμάκων. Οι μεγάλες δίνες έχουν την τάξη μεγέθους της γεωμετρίας (π.χ.

¹ Ο ακριβής ορισμός στα αγγλικά είναι ο εξής “Turbulent fluid motion is an irregular condition of the flow in which the various quantities show a random variation with time and space coordinates, so that statistically distinct average values can be discerned”, ενώ ένας πιο σύγχρονος ορισμός είναι “Turbulence is any chaotic solution to the 3-D Navier–Stokes equations that is sensitive to initial data and which occurs as a result of successive instabilities of laminar flows as a bifurcation parameter is increased through a succession of values”.

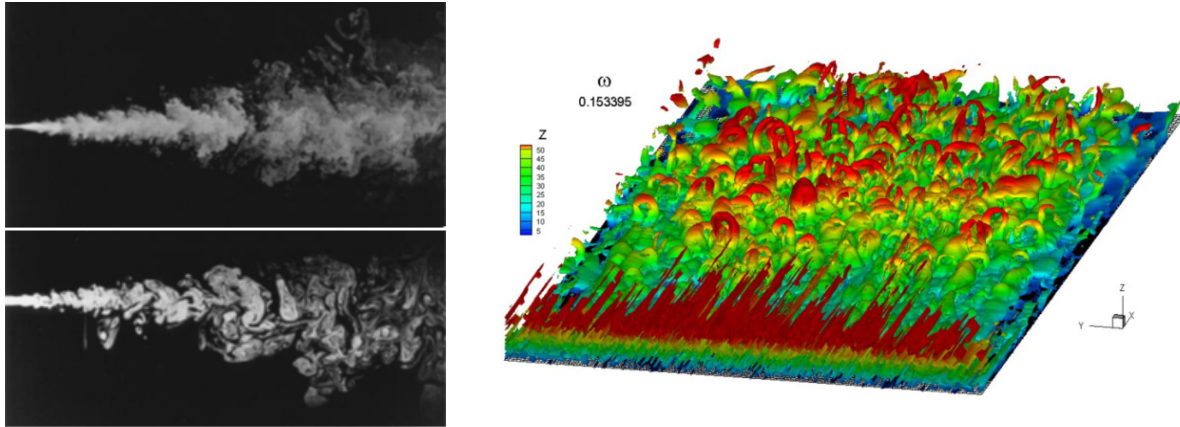
ύψος ενός κτηρίου), ενώ οι μικρές μπορεί να είναι της τάξεως του μικρομέτρου¹. Παρόλη τη φαινομενικά ακανόνιστη συμπεριφορά των τυρβωδών ροών, το φαινόμενο είναι ντετερμινιστικό και περιγράφεται από τις εξισώσεις Navier-Stokes. Η ευαισθησία των εξισώσεων αυτών στις αρχικές συνθήκες λόγω της μη γραμμικότητας τους οδηγεί στη χαοτική συμπεριφορά των λύσεων και τελικά στην τύρβη.

- Διάχυση (diffusivity). Ένα από τα κύρια χαρακτηριστικά της τυρβώδους ροής είναι η φαινομενική αύξηση της διάχυσης, τόσο της ορμής όσο και των συστατικών και της θερμότητας. Σωματίδια ρευστού τα οποία βρίσκονται αρχικά μακριά το ένα από το άλλο, πλησιάζουν και αναμειγνύονται μέσω της κίνησης των δινών. Το φαινόμενο αυτό έχει διάφορες επιπτώσεις όπως την εμπόδιση της αποκόλλησης της ροής, την αύξηση της αντίστασης σε ροές σε αγωγούς και κανάλια, την αύξηση του ρυθμού μετάδοσης θερμότητας και την αύξηση της ανάμιξης δύο διαφορετικών ρευστών. Συνεπώς, η τύρβη έχει το ίδιο αποτέλεσμα που έχει και η μοριακή διάχυση, με κύρια διαφορά ότι λαμβάνει χώρα σε πολύ μικρότερες χρονικές κλίμακες. Αυτό το χαρακτηριστικό είναι πολύ σημαντικό στη μοντελοποίηση της τύρβης.
- Τρισδιάστατη. Κύριο χαρακτηριστικό της τύρβης είναι οι υψηλές τιμές στροβιλότητας. Η επιμήκυνση των στροβίλων (vortex stretching) είναι ένας σημαντικός μηχανισμός ο οποίος απουσιάζει στις διδιάστατες ροές (Tennekes & Lumley 1972). Παρόλο που τυρβώδη χαρακτηριστικά παρουσιάζονται και σε διδιάστατες ροές, η τύρβη θεωρείται ένα εγγενώς τριδιάστατο φαινόμενο.
- Κλιμακωτή μεταφορά ενέργειας (energy cascade). Ενέργεια από τη μέση ροή αφαιρείται από τις μεγάλες δίνες, μεταφέρεται στις μικρότερες και τελικά μετατρέπεται σε εσωτερική ενέργεια (dissipation) μέσω των συνεκτικών δυνάμεων στις πιο μικρές σε κλίμακα δίνες. Αυτή η μεταφορά ενέργειας από τις μεγάλες κλίμακες στις μικρές ονομάζεται κλιμακωτή μεταφορά ενέργειας και προκαλεί ενεργειακές απώλειες.

Από την άλλη μεριά, στις μη τυρβώδεις (στρωτές) ροές η κίνηση των σωματιδίων του ρευστού γίνεται ομαλά και φαινομενικά σε παράλληλα επίπεδα, χωρίς να έχουμε μετακίνηση σωματιδίων από το ένα επίπεδο στο άλλο. Ο μόνος μηχανισμός ανάμιξης που υπάρχει είναι αυτός της μοριακής διάχυσης ο οποίος λαμβάνει χώρα σε μοριακό επίπεδο. Δεν υπάρχει συνιστώσα της ταχύτητας κάθετη στην κύρια κατεύθυνση της ροής και ως εκ τούτου δεν υπάρχουν δίνες.

Παραδείγματα δύο τυρβωδών ροών απεικονίζονται στο Σχήμα 2.1.1. Στα αριστερά απεικονίζεται η εκροή ρευστού (τύπου jet) σε ακίνητο περιβάλλον για δύο διαφορετικούς αριθμούς Reynolds και στα δεξιά χαρακτηριστικές δομές της τύρβης (ίσο-επιφάνειες στροβιλότητας) σε ροή πάνω από πόλη. Πολύ ωραίες χαρακτηριστικές απεικονίσεις πειραματικών τυρβωδών και μη ροών για ένα μεγάλο πλήθος περιπτώσεων έχουν δημοσιευτεί από τον Van Dyke (1982, "An Album of Fluid Motion"). Μια εκτενής ιστορική αναδρομή για τη μελέτη της τύρβης παρουσιάζεται από τον Κουτσοράκη (2014).

¹ Παρόλα αυτά ακόμα και οι μικρότερες δίνες είναι μεγαλύτερες από την μοριακή κλίμακα με αποτέλεσμα να μην παραβιάζεται η υπόθεση του συνεχούς.

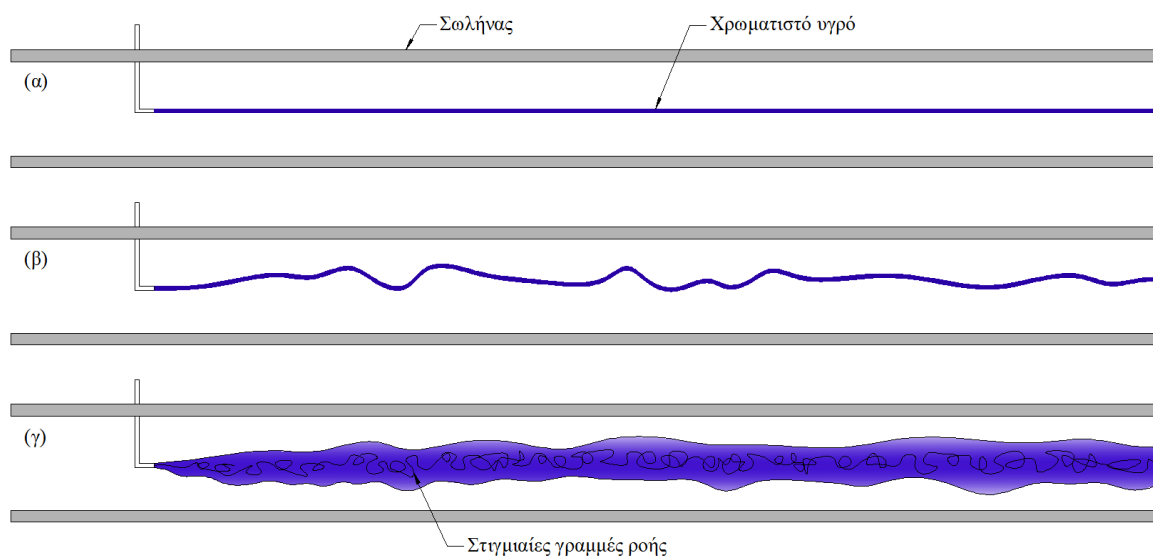


Σχήμα 2.1.1: Αριστερά: Τυρβώδης έξοδος ρευστού σε ακίνητο περιβάλλον για $Re=10000$ (πάνω) και $Re=2500$ (κάτω) (Dimotakis 2000). Δεξιά: Ίσο-επιφάνειες στροβιλότητας σε ροή πάνω από πόλη (Κουτσουράκης 2014).

Ο πρώτος που συστηματικά μελέτησε την τύρβη ήταν ο O. Reynolds. Ο Reynolds εκτέλεσε ένα πείραμα με το οποίο μελέτησε την μετάβαση από τη στρωτή στην τυρβώδη ροή (Reynolds 1883). Έκχυσε χρωματιστό υγρό μέσα σε σωλήνα και παρατήρησε την επίδραση της ροής πάνω σε αυτό (Σχήμα 2.1.2) και διατύπωσε έναν αδιάστατο αριθμού (αριθμός Reynolds) ο οποίος χαρακτήριζε το είδος της ροής:

$$Re = \frac{\rho UL}{\mu} = \frac{UL}{\nu} \quad (2.1.1)$$

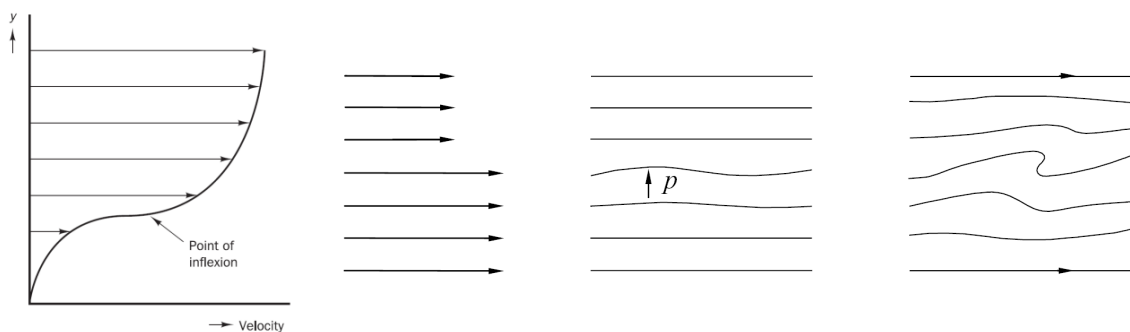
όπου L το χαρακτηριστικό μήκος της ροής (π.χ. ακτίνα του σωλήνα). Για $Re \leq 2000$ το χρωματιστό υγρό κινείται σε ευθεία γραμμή (στρωτή ροή) εμφανίζοντας μικρή ανάμειξη με το περιβάλλον ρευστό λόγω της μοριακής διάχυσης, για $2000 < Re < 2300$ η χρωματιστή γραμμή εμφανίζει διαταραχές (μετάβαση στην τύρβη), ενώ για $Re \geq 2300$ η ροή γίνεται τυρβώδη με αποτέλεσμα να έχουμε μεγάλη ανάμειξη του χρώματος με το περιβάλλον ρευστό.



Σχήμα 2.1.2: Το πείραμα του Reynolds. (α) Στρωτή ροή, $Re \leq 2000$, (β) μετάβαση σε τυρβώδη ροή, $2000 < Re < 2300$, (γ) τυρβώδης ροή $Re \geq 2300$.

Ο αριθμός Reynolds εκφράζει ουσιαστικά τον λόγο των δυνάμεων αδράνειας (ορμή) προς τις ιξώδεις δυνάμεις. Για μικρούς αριθμούς Reynolds οι ιξώδεις δυνάμεις υπερτερούν με αποτέλεσμα να αποσβένουν τις μικρές διαταραχές που εμφανίζονται και να έχουμε στρωτή ροή. Για μεγάλους αριθμούς Reynolds οι δυνάμεις αδράνειας υπερτερούν με αποτέλεσμα οι διαταραχές να συντηρούνται και να ενισχύονται οδηγώντας στη δημιουργία τύρβης. Ο κρίσιμος αριθμός Reynolds στον οποίο γίνεται η μετάβαση στην τύρβη δεν είναι σταθερός αλλά εξαρτάται από πολλούς παράγοντες όπως την ταχύτητα, το είδος της ροής (π.χ. ροή jet, ροή οριακού στρώματος, ροή σε σωλήνα), τη γεωμετρία, την τραχύτητα και τις αρχικές διαταραχές.

Το φαινόμενο της υδροδυναμικής αστάθειας και της μετάβασης στην τύρβη είναι περίπλοκο και έχει μελετηθεί ευρέως (Lin 1955, Chandrasekhar 1961, Betchov & Criminale 1967, Holmes et al. 1998, Drazin & Reid 2004). Η μετάβαση πραγματοποιείται όταν οι μικρές διαταραχές της ροής αρχίζουν να ενισχύονται και να πολλαπλασιάζονται. Η ανάλυση ευστάθειας μιας ροής υποδεικνύει τους μηχανισμούς και τις συνθήκες για την μετάβαση στην τύρβη (White 1991). Για παράδειγμα μία συνήθη ασταθή κατάσταση είναι όταν η κατανομή της ταχύτητας παρουσιάζει σημείο καμπής (Σχήμα 2.1.3). Ας υποθέσουμε την απλή περίπτωση ατριβούς ροής στην οποία υπάρχουν παράλληλες γραμμές ροής διαφορετικής ταχύτητας. Η στρέβλωση μιας γραμμής ροής λόγω κάποιας διαταραχής, οδηγεί στην μείωση της ταχύτητας και στην αύξηση της πίεσης στην μία της πλευρά και στην αύξηση της ταχύτητας και μείωση της πίεσης στην άλλη πλευρά. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα η διαταραχή να ενισχυθεί οπότε να έχουμε μία ασταθή κατάσταση. Η μάζα που μετακινείται από κάτω προς τα πάνω αντικαθίσταται από μάζα που υπάρχει στις πάνω γραμμές ροής, με αποτέλεσμα να έχουμε τη δημιουργία δίνης, του βασικού δηλαδή χαρακτηριστικού της τυρβώδους ροής.



Σχήμα 2.1.3: Συνθήκες αστάθειας για μετάβαση στην τύρβη (Versteeg & Malalasekera 2007, Law 2006).

2.1.2 Τυρβώδεις διαταραχές

Οι τυρβώδεις ροές χαρακτηρίζονται από υψηλής συχνότητας διακυμάνσεις στις μεταβλητές της ροής. Η χαοτική συμπεριφορά του ρευστού κάνει αδύνατη την περιγραφή του πεδίου ροής με αναλυτικές σχέσεις. Έτσι οι τυρβώδεις ροές περιγράφονται με στατιστικούς όρους.

Δύο όροι που χρησιμοποιούνται συχνά για να περιγράψουν απλοποιημένες τυρβώδεις ροές, είναι η «ομογενής» τύρβη και η «ισότροπη» τύρβη (McDonough, 2007). **Ομογενής τύρβη** σημαίνει ότι οι στατιστικές ιδιότητες είναι ανεξάρτητες από χωρικούς μετασχηματισμούς, δηλαδή είναι οι ίδιες σε κάθε θέση του πεδίου της ροής. Για να έχουμε ομογενή τύρβη δεν χρειάζεται υποχρεωτικά να έχουμε και σταθερό (χωρικά) πεδίο μέσης ροής. Από την άλλη **ισότροπη τύρβη** σημαίνει ότι οι

στατιστικές ιδιότητες της τύρβης είναι ανεξάρτητες από μετασχηματισμούς στροφής και ανάκλασης. Αυτό σημαίνει ότι κάθε συνιστώσα της διαταραχής της ταχύτητας έχει τις ίδιες στατιστικές ιδιότητες. Η ισότροπη τύρβη είναι πιο ισχυρή συνθήκη από την ομογενή καθώς μπορεί να έχουμε ομογενή τύρβη η οποία να είναι ανισότροπη.

Για την περιγραφή μιας τυρβώδους ροής έχουν προταθεί διάφοροι μέθοδοι. Οι πιο συχνά χρησιμοποιούμενες είναι η ανάλυση κατά Reynolds και η ανάλυση κατά Favre. Η **κατά Reynolds ανάλυση** της στιγμιαίας ταχύτητα u του ρευστού (ή και οποιουδήποτε άλλου μεγέθους της ροής) γίνεται με βάση τη μέση τιμή \bar{u} και μιας διαταραχής (fluctuation) u' ως εξής:

$$u = \bar{u} + u' \quad (2.1.2)$$

Η σχέση αυτή απεικονίζεται γραφικά στο παρακάτω σχήμα. Παρατηρούμε ότι η διαταραχή περικλείει τις ταλαντώσεις (οι οποίες οφείλονται στην τύρβη) γύρω από τη μέση ταχύτητα. Η μέση τιμή μπορεί να οριστεί από τη σχέση

$$\bar{u}(t_0) = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0 - \Delta t/2}^{t_0 + \Delta t/2} u dt \quad (2.1.3)$$

όπου Δt διάστημα χρόνου αρκούντος μεγάλο ώστε να συμπεριλαμβάνει τις τυρβώδεις διακυμάνσεις (αλλά αρκούντος μικρό ώστε να μην επηρεάζεται από τη μέση ροή). Εξ' ορισμού ισχύει ότι

$$\overline{u'} = 0 \quad (2.1.4)$$

Από τις παραπάνω δύο σχέσεις προκύπτουν οι ακόλουθες χρήσιμες ιδιότητες

$$\overline{f + g} = \bar{f} + \bar{g}, \quad \overline{f g'} = 0, \quad \overline{f g} = \bar{f} \bar{g}, \quad \overline{\frac{\partial f}{\partial s}} = \frac{\partial \bar{f}}{\partial s} \quad (2.1.5)$$

όπου f, g μεταβλητές της ροής. Χρήσιμες ποσότητες για τη στατιστική μελέτη της τύρβης είναι η μέση τετραγωνική ρίζα (root mean square, u'_{rms}) της διαταραχής η οποία ισούται με:

$$u'_{rms} = \left(\overline{u'^2} \right)^{1/2} \quad (2.1.6)$$

Γενικά $u'_{rms} \neq u_{rms}$, ενώ πολλές φορές αναγράφεται u_{rms} εννοώντας το u'_{rms} . Επειδή η μέση τιμή της διαταραχής είναι μηδέν, προκύπτει ότι η μέση τετραγωνική ρίζα ισούται με την τυπική απόκλιση της διαταραχής, η οποία λόγω του ορισμού (2.1.2) ισούται με την τυπική απόκλιση της ταχύτητας, δηλαδή:

$$u'_{rms} = \sigma_{u'} = \sigma_u \quad (2.1.7)$$

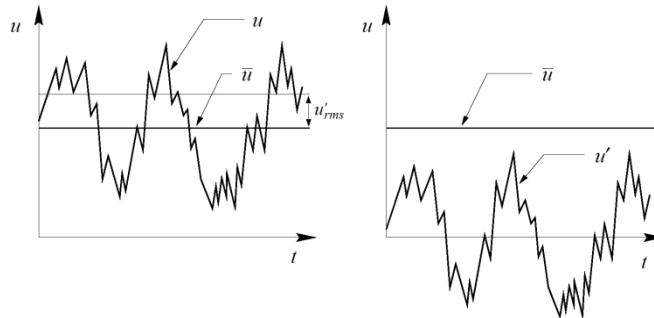
Η **κατά Favre ανάλυση** (Favre 1992), είναι παρόμοια με την κατά Reynolds και διαφέρει στο ότι η μέση τιμή, \tilde{u} , σταθμίζεται με την πυκνότητα:

$$\tilde{u} = \overline{\rho u} / \bar{\rho}, \quad u = \tilde{u} + u'' \quad (2.1.8)$$

Από τις παραπάνω σχέσεις έπονται τα εξής:

$$\tilde{u}'' = 0, \quad \overline{\rho u''} = 0, \quad \overline{\tilde{u} f} = \tilde{u} \bar{f}, \quad \overline{\rho u'' f''} = \bar{\rho} \overline{u'' f''}, \quad \overline{u''} \neq 0, \quad u' \neq u'', \quad \bar{u} \neq \tilde{u} \quad (2.1.9)$$

Η ανάλυση αυτή διευκολύνει την ολοκλήρωση των εξισώσεων που περιγράφουν την τυρβώδη ροή στην περίπτωση όπου έχουμε μεταβλητή πυκνότητα (δες Κεφάλαιο 3). Οι διάφορες μεταξύ της κατά Favre και κατά Reynolds μέσης τιμής μετρήθηκαν για την περίπτωση έκλυσης ηλίου από τους O'Hern et al. (2005) και βρέθηκαν ότι ήταν μέσα στα όρια αβεβαιότητας του πειράματος, ενώ για μη ισο-θερμοκρασιακές ροές οι διαφορές μπορεί να είναι μεγαλύτερες (Veynante & Vervisch 2002).



Σχήμα 2.1.4: Κατά Reynolds ανάλυση της στιγμιαίας ταχύτητας u (McDonough 2007).

Τέλος, η μέθοδος **LES** μπορεί να θεωρηθεί και αυτή ως ένας τρόπος ανάλυσης της τυρβώδους ροής. Στην περίπτωση αυτή, εφαρμόζεται ένα χωρικό (spatial) φίλτρο στην ταχύτητα, με αποτέλεσμα αυτή να αναλύεται σαν $u = \hat{u} + u_{sgs}$ όπου \hat{u} είναι το επιλύσιμο (resolved) μέρος της (αντίστοιχο της μέσης τιμής των προηγούμενων αναλύσεων) ενώ u_{sgs} το μη-επιλύσιμο (unresolved) ή υποπλεγματικό (sub-grid) μέρος (αντίστοιχο των διαταραχών).

Στη συνέχεια θα χρησιμοποιήσουμε για ευκολία τον συμβολισμό u' εννοώντας γενικά είτε τις διαταραχές είτε το υπο-πλεγματικό μέρος των προηγούμενων αναλύσεων.

2.1.3 Χαρακτηριστικές κλίμακες

Κύριο χαρακτηριστικό των τυρβωδών ροών είναι η ύπαρξη δινών. Οι **δίνες** είναι στροβιλοειδείς δομές οι οποίες επικάθονται στην κύρια ροή και αλληλεπιδρούν με αυτή. Μια τυρβώδης ροή αποτελείται από πολλές δίνες διαφορετικών διαμέτρων και ταχυτήτων περιστροφής. Η ταχύτητα περιστροφής είναι ένα μέτρο της έντασης των τυρβωδών διακυμάνσεων. Με βάση την ταχύτητα περιστροφής και τη διάμετρο των δινών, μπορούν να οριστούν χαρακτηριστικά μήκη και χαρακτηριστικές ταχύτητες της τύρβης.

Ο υπολογισμός των χαρακτηριστικών μηκών μπορεί να γίνει υπολογίζοντας την αυτοσυσχέτιση της ταχύτητας μεταξύ ενός δεδομένου σημείου και σημείων σε διάφορες αποστάσεις από αυτό (Peters 2000, Law 2006). Ο συντελεστής αυτοσυσχέτισης μικραίνει με την απόσταση από το δεδομένο σημείο, τείνοντας θεωρητικά στο μηδέν, καθώς οι δίνες χάνουν σταδιακά τα προγενέστερα χαρακτηριστικά τους. Το ολοκλήρωμα του συντελεστή αυτό-συσχέτισης μας δίνει την **ολοκληρωτική κλίμακα** χώρου (l_0), τη μεγαλύτερη χαρακτηριστική κλίμακα της τύρβης. Η κλίμακα αυτή σχετίζεται συνήθως με τη γεωμετρία του προβλήματος η οποία και επιβάλλει το μέγεθος των μεγαλύτερων δινών. Οι δίνες της κλίμακας αυτής περιέχουν τη μεγαλύτερη ποσότητα τυρβώδους κινητικής ενέργειας. Η χαρακτηριστική τους ταχύτητα μπορεί να οριστεί από τη σχέση:

$$u'_0 = u'_{rms} = (\overline{u'^2})^{1/2} \quad (2.1.10)$$

Η τυρβώδης (ανά μάζα) κινητική ενέργεια ορίζεται σαν:

$$k = \frac{1}{2}(\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2}) \quad (2.1.11)$$

και έχει μονάδες $J/kg = kg \cdot m^2 s^{-2} / kg = m^2 / s^2$. Στην περίπτωση ισότροπης τύρβης ($u' = v' = w'$) ισούται με:

$$k = \frac{3}{2}\overline{u'^2} = \frac{3}{2}u_0'^2 \quad (2.1.12)$$

Η θεωρία που ανέπτυξε ο Κολμογορον το 1941 για ομογενή και ισότροπη τύρβη, υποθέτει ότι υπάρχει μια σταθερή μεταφορά της ενέργειας από τις μεγάλες δίνες στις μικρότερες. Η ενέργεια αυτή τελικά καταναλώνεται από τις μικρότερες δυνατές δίνες μέσω των συνεκτικών δυνάμεων του ρευστού (ιξώδες). Η κλίμακα των δινών αυτών ονομάζεται κλίμακα Κολμογορον και το χαρακτηριστικό τους μήκος συμβολίζεται με l_k . Μεταξύ των μεγάλων l_0 και των πολύ μικρών l_k δινών, υπάρχει ένα εύρος διαφορετικών κλιμάκων στις οποίες η ενέργεια μεταφέρεται ανεξάρτητα από τη μοριακή συνεκτικότητα του ρευστού. Η περιοχή αυτή ονομάζεται **αδρανειακή υπο-περιοχή** (inertial subrange). Με βάση τη διαστατική ανάλυση ο (ανά μάζα) ρυθμός μεταφοράς ενέργειας, ο οποίος έχει μονάδες $(m^2/s^2)/s = m^2/s^3$, σε αυτή την περιοχή είναι:

$$\varepsilon \approx \frac{u_0'^3}{l_0} \approx \frac{k^{3/2}}{l_0} \quad (2.1.13)$$

Η ποσότητα αυτή ονομάζεται και ρυθμός καταστροφής της τυρβώδους ενέργειας. Ο χαρακτηριστικός χρόνος της περιόδου για την μεταφορά ενέργειας από τις μεγάλες δίνες στις μικρές (ο οποίος μπορεί να ταυτιστεί με τον χαρακτηριστικό χρόνο των δινών της ολοκληρωτικής κλίμακας) είναι:

$$\tau_0 \approx \frac{l_0}{u_0'} \approx \frac{k^{3/2} / \varepsilon}{k^{1/2}} \approx \frac{k}{\varepsilon} \quad (2.1.14)$$

Με βάση την διατήρηση της ενέργειας, η ενέργεια που μεταφέρεται από τις μεγάλες δίνες με ρυθμό ε θα πρέπει να ισούται με την ενέργεια που δαπανάται τελικά στην **κλίμακα Κολμογορον** από τις συνεκτικές δυνάμεις. Υποθέτοντας ότι οι δίνες στην κλίμακα Κολμογορον είναι στατιστικά ανεξάρτητες από τις μεγάλες δίνες και από τη μέση ροή, αναμένεται οι δίνες αυτές να εξαρτώνται μόνο από τον ρυθμό με τον οποίο εισέρχεται η ενέργεια σε αυτές και από το κινηματικό ιξώδες (Tennekes, 1972). Συνεπώς, μέσω της διαστατικής ανάλυσης, προκύπτουν τα ακόλουθα χαρακτηριστικά μεγέθη μήκους, ταχύτητας και χρόνου για την κλίμακα Κολμογορον:

$$l_k \approx \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon}\right)^{1/4}, \quad u'_k \approx (\nu\varepsilon)^{1/4}, \quad \tau_k \approx \left(\frac{\nu}{\varepsilon}\right)^{1/2} \quad (2.1.15)$$

Στην κλίμακα αυτή ο τυρβώδης αριθμός Reynolds ισούται με:

$$\text{Re}_k = \frac{u'_k l_k}{\nu} = \frac{(\nu \varepsilon)^{1/4} (\nu^3 / \varepsilon)^{1/4}}{\nu} = 1 \quad (2.1.16)$$

Τα χαρακτηριστικά μεγέθη της ολοκληρωτικής κλίμακας και της κλίμακας Kolmogorov συνοψίζονται στον παρακάτω πίνακα.

Πίνακας 2.1.1: Χαρακτηριστικές κλίμακες της τύρβης.

Κλίμακα	Μήκος	Ταχύτητα	Χρόνος
Ολοκληρωτική	$l_0 \approx \frac{k^{3/2}}{\varepsilon}$	$u'_0 = (\overline{u'^2})^{1/2} = \sqrt{\frac{2}{3}} k$	$\tau_0 \approx \frac{l_0}{u'_0} \approx \frac{k}{\varepsilon}$
Kolmogorov	$l_k \approx \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon}\right)^{1/4}$	$u'_k \approx (\nu \varepsilon)^{1/4}$	$\tau_k \approx \left(\frac{\nu}{\varepsilon}\right)^{1/2}$

Πρέπει να αναφέρουμε την ύπαρξη μίας ακόμα χωρικής κλίμακας, την **κλίμακα Taylor**. Η κλίμακα αυτή αναπαριστά την απόσταση την οποία διανύει μια δίνη της κλίμακας Kolmogorov στη διάρκεια του χαρακτηριστικού της χρόνου (Law 2006), δηλαδή

$$l_\lambda \approx u'_0 \tau_k \approx \frac{l_0}{\tau_0} \tau_k \approx \frac{l_0}{\text{Re}_0^{1/2}} \quad (2.1.17)$$

όπου

$$\text{Re}_0 = \frac{u'_0 l_0}{\nu} \quad (2.1.18)$$

ο τυρβώδης αριθμός Reynolds στην ολοκληρωτική κλίμακα (η ισότητα $\text{Re}_0 = \tau_0 / \tau_k$ αποδεικνύεται εύκολα με βάση τις σχέσεις για τα χαρακτηριστικά μεγέθη). Η παραπάνω σχέση μας λέει ότι για υψηλούς αριθμούς Reynolds, η κλίμακα Taylor βρίσκεται μεταξύ της ολοκληρωτικής κλίμακας και της κλίμακας Kolmogorov. Την κλίμακα Taylor μπορούμε να την δούμε και σαν την μεγαλύτερη κλίμακα στην οποία το ιξώδες του ρευστού επηρεάζει σημαντικά τη δυναμική της δίνης στη ροή¹.

Λόγω της υπόθεσης της ενεργειακής μεταφοράς από τις μεγάλες στις μικρές δίνες, ο ρυθμός μεταφοράς της ενέργειας ε μπορεί να υπολογιστεί μόνο με βάση τα χαρακτηριστικά της ολοκληρωτικής κλίμακας, όπως φαίνεται και από την προ-αναφερθείσα σχέση $\varepsilon \approx u_0'^3 / l_0$. Συνεπώς τα χαρακτηριστικά μεγέθη της κλίμακας Kolmogorov μπορούν να υπολογιστούν χωρίς την χρήση του ρυθμού μεταφοράς ενέργειας. Για παράδειγμα για τη χαρακτηριστική κλίμακα χρόνου θα ισχύει ότι:

$$\tau_k \approx \left(\frac{\nu}{u_0'^3 / l_0}\right)^{1/2} \approx \left(\frac{\nu \cdot l_0}{u_0'^3}\right)^{1/2} \quad (2.1.19)$$

Η εξάρτηση της τυρβώδους κινητικής ενέργειας από την κλίμακα των δινών μπορεί να αναπαρασταθεί από το φάσμα της $E(k)$ (μονάδες m^3 / s^2) συναρτήσεως του κυματαριθμού k . Εξ'

¹ Η κλίμακα αυτή όμως δεν φαίνεται να είναι σημαντική για την περιγραφή της τυρβώδους καύσης (Law 2006)

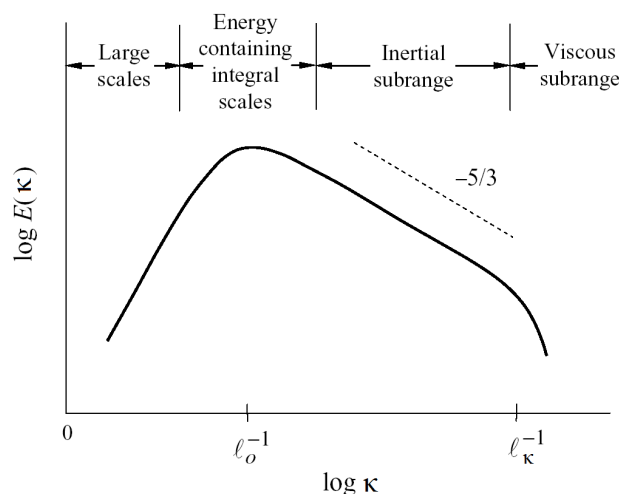
ορισμού, η τυρβώδης κινητική ενέργεια ισούται με το ολοκλήρωμα του φάσματος της για όλους τους κυματαριθμούς (Pope 2000):

$$k = \int_0^{\infty} E(\kappa) d\kappa \quad (2.1.20)$$

Ο κυματαριθμός μπορεί να θεωρηθεί σαν τον αντίστροφο της κλίμακας χώρου. Για την αδρανηϊκή υπο-περιοχή προκύπτει ότι (Law 2006):

$$E(\kappa) = \frac{dk}{d\kappa} \approx \frac{d}{d\kappa} (\varepsilon l_0)^{2/3} \approx \frac{d}{d\kappa} (\varepsilon^{2/3} \kappa^{-2/3}) \approx \varepsilon^{2/3} \kappa^{-5/3} \quad (2.1.21)$$

Η παραπάνω σχέση (η οποία μπορεί να δειχθεί και με διαστατική ανάλυση) είναι γνωστή σαν **νόμος των -5/3** για την αδρανηϊκή υπο-περιοχή της τύρβης. Το ενεργειακό φάσμα για όλο το εύρος των κυματαριθμών παρουσιάζεται στο Σχήμα 2.1.5. Για μικρούς κυματαριθμούς (μεγάλες χωρικές κλίμακες της τύρβης), η πυκνότητα ενέργειας αυξάνεται με ρυθμό ανάλογο του κ^2 και κ^4 . Σε αυτή την περιοχή η πυκνότητα ενέργειας εξαρτάται από αστάθειες μεγάλες κλίμακας οι οποίες είναι χαρακτηριστικές του εκάστοτε προβλήματος. Το μέγιστο του φάσματος παρουσιάζεται στην ολοκληρωτική κλίμακα χώρου. Οι δίνες σε αυτή την περιοχή περιέχουν την μεγαλύτερη ποσότητα κινητικής ενέργειας. Για μεγαλύτερους κυματαριθμούς (μικρές κλίμακες χώρου - αδρανηϊκή υπο-περιοχή) η πυκνότητα ενέργειας μικραίνει ακολουθώντας τον νόμο του -5/3. Το εύρος της αδρανηϊκής υπο-περιοχής αυξάνει καθώς αυξάνεται ο αριθμός Re. Ο νόμος του -5/3 ακολουθείται μέχρι την κλίμακα Kolmogorov. Η κλίμακα Kolmogorov ορίζει την αρχή της συνεκτικής υπο-περιοχής (viscous subrange) στην οποία η πυκνότητα ενέργειας μειώνεται με εκθετικό ρυθμό λόγω των συνεκτικών δυνάμεων του ρευστού.



Σχήμα 2.1.5: Φάσμα τυρβώδους κινητικής ενέργειας σε συνάρτηση με του κυματαριθμού σε log-log διάγραμμα (Law 2006).

2.2 Στρωτή καύση προ-ανάμειξης

Καύση είναι η χημική αντίδραση κατά την οποία το καύσιμο αντιδρά με το οξυγόνο με αποτέλεσμα την έκλυση ενέργειας και τον σχηματισμών προϊόντων. Η καύση είναι μια περίπλοκη χημική διεργασία η οποία περιλαμβάνει πολλές αντιδράσεις και ενδιάμεσα προϊόντα. Έτσι υπάρχουν

πολλά μοντέλα τα οποία ανάλογα με την περιπλοκότητα τους μπορούν να περιλαμβάνουν εκατοντάδες ενδιάμεσες αντιδράσεις. Χαρακτηριστικά, για την πιο απλή περίπτωση καύσης, αυτής του υδρογόνου, μπορούν να απαιτούνται ακόμα και 19 ενδιάμεσες αντιδράσεις, όπως απεικονίζεται στο παρακάτω μοντέλο (Σχήμα 2.2.1). Άλλα παραδείγματα τέτοιων μοντέλων γενικά για υδρογονάνθρακες παρουσιάζονται στην εργασία των Petrova & Williams (2006) ενώ ειδικά για υδρογόνο στην εργασία του Williams (2008). Σύγκριση μοντέλων για μια εφαρμογή υδρογόνου γίνεται στη εργασία των Mira Martinez & Jiang (2013) ενώ συγκεκριμένα για έκρηξη στην εργασία των Quillatre et al. (2013). Το πιο απλό μοντέλο καύσης είναι αυτό της μιας αντίδρασης, η οποία για την περίπτωση του υδρογόνου είναι



Παρόλη την απλότητα του, για εφαρμογές μεγάλης κλίμακας στις οποίες το μέτωπο της φλόγας δεν μπορεί να επιλυθεί, το μοντέλο της μίας αντίδρασης είναι συνήθως αρκετό για να περιγράψει την χημεία της καύσης. Τα μοντέλα πολλών αντιδράσεων χρησιμοποιούνται κυρίως όταν θέλουμε να εξετάσουμε ιδιαίτερα φαινόμενα για τα οποία απαιτείται μεγάλη ακρίβεια υπολογισμών όπως η αλληλεπίδραση φλόγας με δίνη, η αυτανάφλεξη μείγματος και η μετάβαση σε υπερηχητική έκρηξη.

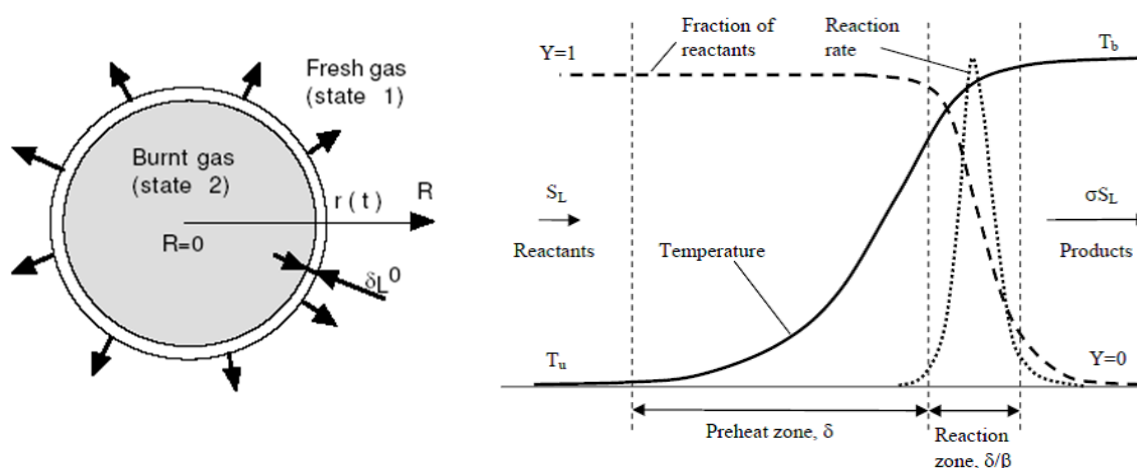
The reaction rate coefficients are in the form $k_f = AT^\beta \exp(-E_a/RT)$. Units are in moles, cubic centimetres, seconds, Kelvins and calories.				
	Reaction	A	β	E_a
1	$H_2 + O_2 \rightleftharpoons 2OH$	$1.70 \cdot 10^{13}$	0.0	47780.
2	$OH + H_2 \rightleftharpoons H_2O + H$	$1.17 \cdot 10^9$	1.3	3626.
3	$H + O_2 \rightleftharpoons OH + O$	$5.13 \cdot 10^{16}$	-0.816	16507.
4	$O + H_2 \rightleftharpoons OH + H$	$1.80 \cdot 10^{10}$	1.0	8826.
5	$H + O_2 + M \rightleftharpoons HO_2 + M^a$	$2.10 \cdot 10^{18}$	-1.0	0.
6	$H + O_2 + O_2 \rightleftharpoons HO_2 + O_2$	$6.70 \cdot 10^{19}$	-1.42	0.
7	$H + O_2 + N_2 \rightleftharpoons HO_2 + N_2$	$6.70 \cdot 10^{19}$	-1.42	0.
8	$OH + HO_2 \rightleftharpoons H_2O + O_2$	$5.00 \cdot 10^{13}$	0.0	1000.
9	$H + HO_2 \rightleftharpoons 2OH$	$2.50 \cdot 10^{14}$	0.0	1900.
10	$O + HO_2 \rightleftharpoons O_2 + OH$	$4.80 \cdot 10^{13}$	0.0	1000.
11	$2OH \rightleftharpoons O + H_2O$	$6.00 \cdot 10^8$	1.3	0.
12	$H_2 + M \rightleftharpoons H + H + M^b$	$2.23 \cdot 10^{12}$	0.5	92600.
13	$O_2 + M \rightleftharpoons O + O + M$	$1.85 \cdot 10^{11}$	0.5	95560.
14	$H + OH + M \rightleftharpoons H_2O + M^c$	$7.50 \cdot 10^{23}$	-2.6	0.
15	$H + HO_2 \rightleftharpoons H_2 + O_2$	$2.50 \cdot 10^{13}$	0.0	700.
16	$HO_2 + HO_2 \rightleftharpoons H_2O_2 + O_2$	$2.00 \cdot 10^{12}$	0.0	0.
17	$H_2O_2 + M \rightleftharpoons OH + OH + M$	$1.30 \cdot 10^{17}$	0.0	45500.
18	$H_2O_2 + H \rightleftharpoons HO_2 + H_2$	$1.60 \cdot 10^{12}$	0.0	3800.
19	$H_2O_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + HO_2$	$1.00 \cdot 10^{13}$	0.0	1800.

^a Third body efficiencies: $k_5(H_2O) = 21 k_5(Ar)$, $k_5(H_2) = 3.3 k_5(Ar)$.
^b Third body efficiencies: $k_{12}(H_2O) = 6 k_{12}(Ar)$, $k_{12}(H) = 2 k_{12}(Ar)$,
 $k_{12}(H_2) = 3 k_{12}(Ar)$. ^c Third body efficiency: $k_{14}(H_2O) = 20 k_{14}(Ar)$.

Σχήμα 2.2.1: Αντιδράσεις που εμπλέκονται στην καύση υδρογόνου (Dahoe et al. 2013).

Η **στρωτή καύση** είναι μια ιδεατή κατάσταση η οποία αν και δεν παρουσιάζεται αυτούσια σε πραγματικές εφαρμογές, είναι υψηλού ενδιαφέροντος καθώς συμβάλει στην κατανόηση του φαινομένου, στον ορισμό μεγεθών, στη σύγκριση μοντέλων με πείραμα και στην μοντελοποίηση της τυρβώδους καύσης. Στο Σχήμα 2.2.2 απεικονίζεται ένα κυκλικό μέτωπο το οποίο προελαύνει στο μείγμα καυσίμου-αέρα (άκαυστη περιοχή). Η γκρίζα περιοχή είναι η περιοχή στην οποία έχει ολοκληρωθεί η καύση οπότε και καταλαμβάνεται από τα προϊόντα της αντίδρασης. Οι χαρακτηριστικές περιοχές σε μία στρωτή φλόγα είναι οι εξής (Σχήμα 2.2.2, δεξιά):

- **Περιοχή αντιδρώντων.** Είναι η περιοχή στην οποία βρίσκονται αναμειγμένα τα αντιδρώντα της καύσης, δηλαδή το καύσιμο με το οξυγόνο. Αναφέρεται και ως *άκαυστη περιοχή*.
- **Περιοχή προθέρμανσης.** Η περιοχή αυτή βρίσκεται πολύ κοντά στο μέτωπο της φλόγας. Καταλαμβάνεται κατά κύριο λόγο από αντιδρώντα τα οποία προθερμαίνονται μέσω της θερμότητας η οποία εκπέμπεται κατά την καύση και διαχέεται σε αυτά.
- **Περιοχή αντίδρασης.** Είναι η περιοχή στην οποία λαμβάνουν χώρα οι αντιδράσεις. Το καύσιμο και το οξυγόνο καταναλώνονται με αποτέλεσμα να έχουμε τη δημιουργία των προϊόντων. Η θερμότητα η οποία εκλύεται μεταφέρεται στα προϊόντα με αποτέλεσμα τη διαστολή αυτών.
- **Περιοχή προϊόντων.** Είναι η περιοχή στην οποία η καύση έχει ολοκληρωθεί οπότε καταλαμβάνεται από τα προϊόντα της αντίδρασης. Αναφέρεται και ως *καμένη περιοχή*.



Σχήμα 2.2.2: Αριστερά: Απεικόνιση προέλασης σφαιρικού μετώπου φλόγας (Poinsot & Veynante 2005). Δεξιά: Κατανομή χαρακτηριστικών μεγεθών της καύσης στην περιοχή γύρω από το μέτωπο της φλόγας (Ciccarelli & Dorofeev 2008).

Στη συνέχεια θα αναφερθούμε σε κάποια σημαντικά χαρακτηριστικά της στρωτής φλόγας, στον λόγο επέκτασης, στην ταχύτητα στρωτής καύσης και στο πάχος της φλόγας. Όπως θα δούμε σε επόμενα κεφάλαια, τα χαρακτηριστικά αυτά είναι σημαντικές παράμετροι σε πολλά υπολογιστικά μοντέλα καύσης. Τα μεγέθη αυτά μπορούν να υπολογιστούν πειραματικά αλλά και υπολογιστικά μέσω υπολογισμών μονοδιάστατης φλόγας (π.χ. Poinsot & Veynante 2005, Κεφάλαιο 2). Ένα διαδεδομένο υπολογιστικό πακέτο το οποίο εκτελεί τέτοιου είδους υπολογισμούς είναι το CHEMKIN (2013).

2.2.1 Λόγος επέκτασης

Ένα σημαντικό μέγεθος της καύσης είναι ο **λόγος επέκτασης** (expansion ratio), ο οποίος ορίζεται από τη σχέση:

$$E = \frac{\rho_u}{\rho_b} \quad (2.2.2)$$

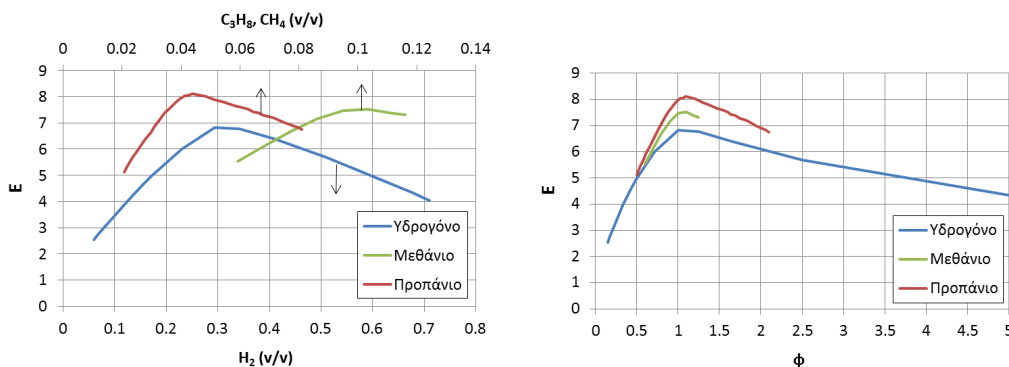
όπου ρ_u, ρ_b είναι οι πυκνότητες στην άκαυστη και στην καμένη περιοχή αντίστοιχα. Ο λόγος επέκτασης μας δείχνει ουσιαστικά πόσο πολύ αυξάνεται ο όγκος του συστήματος λόγω της έκλυσης ενέργειας. Μπορεί να υπολογιστεί τόσο πειραματικά όσο και υπολογιστικά μέσω της αδιαβατικής θερμοκρασίας φλόγας. Εξαρτάται πρωτίστως από τη συγκέντρωση του καυσίμου αλλά και από την αρχική θερμοκρασία των αντιδρώντων και είναι μεγαλύτερος της μονάδας καθώς η πυκνότητα των προϊόντων είναι μικρότερη των αντιδρώντων λόγω της αύξησης της θερμοκρασίας. Στο Σχήμα 2.2.3 απεικονίζονται οι τιμές του για τρία διαφορετικά καύσιμα, το υδρογόνο, το μεθάνιο και το προπάνιο (Zimont & Lipatnikov 1995, Molkov & Bragin 2015, Gu et al. 2000, Jomaas et al. 2007) συναρτήσει της κατ' όγκο συγκέντρωσης και του λόγου ισοδυναμίας (§Α.6). Το εύρος συγκεντρώσεων στο υδρογόνο είναι μεγαλύτερο λόγω του μεγαλύτερου εύρους των ορίων αναφλεξιμότητας. Μια αναλυτική σχέση η οποία μπορεί να περιγράψει τον λόγο επέκτασης του υδρογόνου για όλο το εύρος των συγκεντρώσεων είναι η εξής:

$$E = \begin{cases} 1 + 26.61x & , 0.000 \leq x \leq 0.040 \\ 1.148 + 19.77x + 124.3x^2 - 1364.6x^3 + 6167.65x^4 - 12712.2x^5 + 8775.5x^6 & , 0.040 < x \leq 0.338 \\ -0.288 + 89.28x - 413.97x^2 + 968.64x^3 - 1282.9x^4 + 901.14x^5 - 262.23x^6 & , 0.338 < x \leq 0.750 \\ 3.7054 - 10.8216(x - 0.75) & , 0.750 < x \leq 1.000 \end{cases} \quad (2.2.3)$$

όπου x είναι η κατ' όγκο συγκέντρωση του υδρογόνου στο μείγμα. Θεωρώντας την καταστατική εξίσωση του ιδανικού αερίου, η σχέση (2.2.2) μπορεί να γραφτεί και σαν

$$E = \frac{T_b}{T_u} \frac{n_b}{n_u} \quad (2.2.4)$$

Παρατηρούμε δηλαδή ότι ο λόγος επέκτασης εξαρτάται από την αναλογία των μολ μεταξύ της καμένης και της άκαυστης περιοχής (καθώς ένα μολ μιας οποιασδήποτε ουσίας καταλαμβάνει τον ίδιο όγκο στην ίδια πίεση και θερμοκρασία). Ο λόγος αυτός ισούται περίπου με 0.85 για καύση υδρογόνου στον αέρα ενώ για τους περισσότερους υδρογονάνθρακες έχει τιμή πολύ κοντά στην μονάδα.



Σχήμα 2.2.3: Λόγος επέκτασης σε συνάρτηση της συγκέντρωσης (αριστερά) και του λόγου ισοδυναμίας (δεξιά) για το υδρογόνο, το μεθάνιο και το προπάνιο.

2.2.2 Ταχύτητα στρωτής καύσης

Το πιο χαρακτηριστικό μέγεθος της καύσης είναι η **ταχύτητα στρωτής καύσης** (laminar flame speed, S_L), η οποία μπορεί να οριστεί με διάφορους τρόπους (Poinsot & Veynante 2005, §2.7.1). Συνήθως

την ορίζουμε σαν την σχετική ταχύτητα ως προς το άκαυστο μείγμα με την οποία ένα επίπεδο μέτωπο φλόγας κινείται προς αυτό. Θεωρώντας μια επίπεδη μονοδιάστατη φλόγα, μοντέλο καύσης μίας μη-αντιστρεπτής αντίδρασης και κάνοντας κάποιες επιπλέον παραδοχές (όπως αριθμό Lewis ίσο με την μονάδα και ίδιο μοριακό βάρος, θερμοχωρητικότητα και μοριακή διάχυση μεταξύ των στοιχείων), οδηγούμαστε στην εξής σχέση (Poinsot & Veynante 2005, §2.4):

$$S_L = -\frac{1}{\rho_u Y_f} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_f dx \quad (2.2.5)$$

όπου ρ_u και Y_f είναι η πυκνότητα και η συγκέντρωση καυσίμου στην άκαυστη περιοχή και $\dot{\omega}_f$ ο ρυθμός καύσης. Αν εφαρμόσουμε την αρχή διατήρησης της μάζας στο μέτωπο της φλόγας, προκύπτει ότι:

$$S_L \cdot \rho_u = S_b \cdot \rho_b \Rightarrow S_L = \frac{\rho_b}{\rho_u} S_b \Rightarrow S_L = \frac{1}{E} S_b \quad (2.2.6)$$

όπου ρ_b η πυκνότητα στην καμένη περιοχή και S_b η ταχύτητα στην καμένη πλευρά της φλόγας (ταχύτητα με την οποία εξέρχονται τα προϊόντα). Η ταχύτητα η οποία μετρείται συνήθως οπτικά από τους πειραματιστές είναι η S_b , οπότε μέσω της παραπάνω σχέσης γίνεται ο υπολογισμός της ταχύτητας καύσης (Law et al. 2005, Jomaas et al. 2007). Η απόδειξη της παραπάνω σχέσης και οι υποθέσεις που εμπεριέχονται σε αυτή στην περίπτωση της σφαιρικής φλόγας (όπως αυτή στο Σχήμα 2.2.2) παρουσιάζονται στο βιβλίο των Poinsot & Veynante (2005, §2.7.3), καθώς και στην εργασία των Bonhomme et al. (2013).

Η παραπάνω σχέση πρέπει να χρησιμοποιείται με προσοχή κατά την πειραματική μέτρηση της ταχύτητας της στρωτής καύσης σε μια σφαιρική φλόγα καθώς σε αυτή την περίπτωση έχουμε εξάρτηση της ταχύτητας από την καμπυλότητα της φλόγας (Lamoureaux et al. 2003). Η ταχύτητα καύσης μιας φλόγας που κινείται κυκλικά ονομάζεται ταχύτητα παραμορφωμένης φλόγας (stretched flame speed) και συμβολίζεται με $S_L(k)$. Η διαφορά της από την ταχύτητα καύσης μιας επίπεδης φλόγας, S_L^0 , δίνεται από τη σχέση :

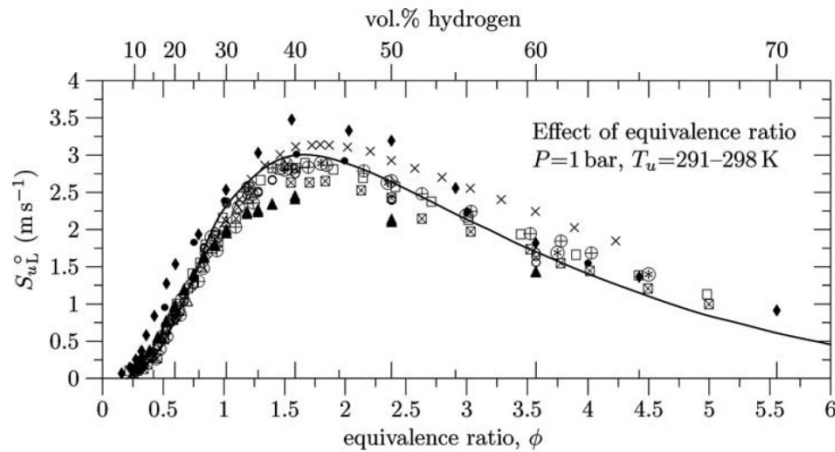
$$S_L(k) = S_L^0 - \frac{L}{E} k \quad (2.2.7)$$

όπου $k = \frac{2}{R(t)} \frac{dR(t)}{dt}$ ο ρυθμός παραμόρφωσης (strain rate) της σφαιρικής φλόγας και L

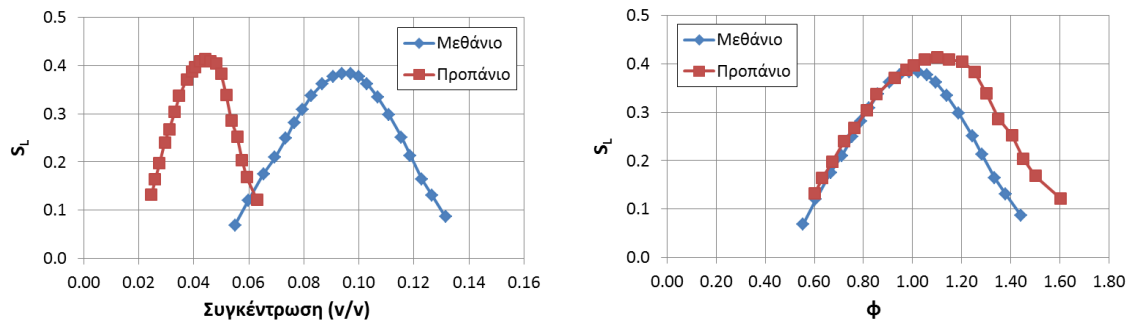
χαρακτηριστικό μήκος το οποίο ονομάζεται **μήκος του Markstein**. Το μήκος αυτό είναι της ίδιας τάξης μεγέθους με το πάχος της φλόγας, εξαρτάται από τη συγκέντρωση του καυσίμου και υποδηλώνει την ευστάθεια μιας στρωτής φλόγας (Poinsot & Veynante 2005). Μπορεί να είναι είτε θετικός είτε αρνητικός αριθμός, πράγμα που σημαίνει ότι η ταχύτητα παραμορφωμένης φλόγας μπορεί να είναι είτε μεγαλύτερη είτε μικρότερη από την ταχύτητα της επίπεδης φλόγας. Αρνητικό μήκος υποδηλώνει ασταθή φλόγα η οποία οδηγεί στην ανάπτυξη κυτταρικών δομών στην επιφάνεια της (§2.3.2). Για παράδειγμα στο υδρογόνο, το μήκος είναι αρνητικό για συγκεντρώσεις μικρότερες από περίπου 25% υποδηλώνοντας ασταθή φλόγα, και θετικό για μεγαλύτερες

(Lamoureaux et al. 2003). Στην παραπάνω σχέση το k τείνει στο μηδέν καθώς η ακτίνα τείνει στο άπειρο και η ταχύτητα $S_L(k)$ ισούται με την S_L^0 καθώς η φλόγα μπορεί να θεωρηθεί επίπεδη.

Η ταχύτητα στρωτής καύσης είναι μια εγγενής παράμετρος της φλόγας η οποία εξαρτάται κυρίως από το καύσιμο, τη συγκέντρωση, τη θερμοκρασία και την πίεση (Law 2006, §7.7). Μπορεί να υπολογιστεί τόσο πειραματικά όσο και υπολογιστικά. Στο Σχήμα 2.2.4 απεικονίζεται η ταχύτητα καύσης για το υδρογόνο σε συνάρτηση με τη συγκέντρωση, όπως έχει υπολογιστεί από διάφορες εργασίες. Αν και το μέγεθος αυτό θεωρείται μια καλά ορισμένη ποσότητα, παρατηρούμε ότι υπάρχουν αρκετές διαφορές μεταξύ των εργασιών. Η μέγιστη τιμή της κυμαίνεται γύρω από τα 3 m/s για κατ' όγκο αναλογία υδρογόνου-αέρα ίση με περίπου 40%, ενώ στη στοιχειομετρική αναλογία (29.7 %) είναι περίπου ίση με 2.3 m/s. Στο Σχήμα 2.2.5 απεικονίζεται η στρωτή ταχύτητα καύσης για το μεθάνιο (Gu et al. 2000) και το προπάνιο (Vagelopoulos et al. 1994) τόσο συναρτήσει της συγκέντρωσης όσο και του λόγου ισοδυναμίας (Παράρτημα Α.6). Παρατηρούμε ότι η μέγιστη ταχύτητα καύσης για το υδρογόνο είναι περίπου 7 φορές μεγαλύτερη απ' ό,τι αυτή του μεθανίου και του προπανίου.



Σχήμα 2.2.4: Ταχύτητα στρωτής καύσης υδρογόνου συναρτήσει του λόγου ισοδυναμίας της κατ' όγκο συγκέντρωσης, όπως έχει υπολογιστεί από διάφορες εργασίες (Dahoe 2005) σε ατμοσφαιρικές συνθήκες.



Σχήμα 2.2.5: Ταχύτητα στρωτής καύσης μεθανίου και προπανίου συναρτήσει της κατ' όγκο συγκέντρωσης (αριστερά) και του λόγου ισοδυναμίας (δεξιά) σε ατμοσφαιρικές συνθήκες.

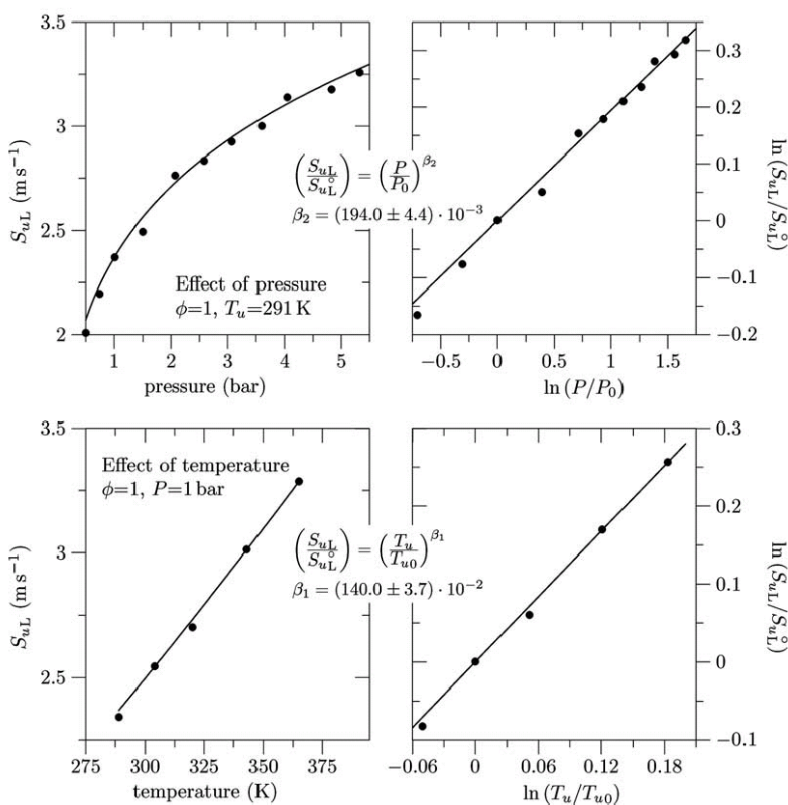
Στο Σχήμα 2.2.6 απεικονίζεται η εξάρτηση της ταχύτητας καύσης του υδρογόνου από την πίεση και τη θερμοκρασία των αντιδρώντων. Παρατηρούμε ότι η ταχύτητα αυξάνεται τόσο με την αύξηση της πίεσης όσο και της θερμοκρασίας. Καθώς εξελίσσεται η καύση, η πίεση των αντιδρώντων μπορεί αυξηθεί (πράγμα που συμβαίνει σχεδόν πάντα στις περιπτώσεις εκρήξεων) το οποίο οδηγεί και σε

αύξηση και της θερμοκρασίας. Κάνοντας την υπόθεση της αδιαβατικής συμπίεσης, μπορούμε να υπολογίσουμε την εξάρτηση της ταχύτητας στρωτής καύσης συναρτήσει μόνο της πίεσης μέσω της σχέσης (Dahoe 2005):

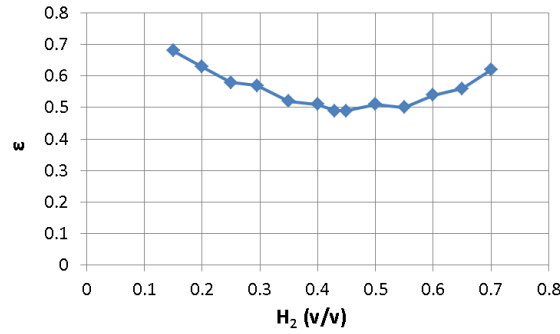
$$\frac{S_L}{S_{L0}} = \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\beta_1} \left(\frac{P}{P_0}\right)^{\beta_2} = \left(\frac{P}{P_0}\right)^{\beta_1 \frac{\gamma-1}{\gamma}} \left(\frac{P}{P_0}\right)^{\beta_2} = \left(\frac{P}{P_0}\right)^{\varepsilon} \quad (2.2.8)$$

όπου P και T η πίεση και η θερμοκρασία των αντιδρώντων ενώ ο δείκτης 0 συμβολίζει την κατάσταση αναφοράς. Ο εκθέτης ε ονομάζεται θερμο-κινητικός εκθέτης, εξαρτάται από τη συγκέντρωση και όπως είναι φανερό υπολογίζεται από τη σχέση $\varepsilon = \beta_2 + \beta_1 \left(\frac{\gamma-1}{\gamma}\right)$ όπου γ ο εκθέτης αδιαβατικής συμπίεσης. Για το υδρογόνο παίρνει τις τιμές που παρουσιάζονται στο Σχήμα 2.2.7. Η τιμή του εκθέτη ε διαφέρει από τις τιμές των εκθετών β_1 , β_2 που απεικονίζονται στο Σχήμα 2.2.6 καθώς οι εκθέτες αυτοί λαμβάνουν υπ' όψιν μόνο τη θερμοκρασία και την πίεση αντίστοιχα (ενώ ο εκθέτης ε λαμβάνει υπ' όψιν του εκτός της πίεσης και την αύξηση της θερμοκρασίας που προκαλείται από την αύξηση της πίεσης).

Γενικά, η αύξηση της θερμοκρασίας οδηγεί σε σημαντική αύξηση της ταχύτητας στρωτής καύσης. Η αύξηση όμως της πίεσης μπορεί να οδηγήσει στη μείωση της ταχύτητας όπως παρατηρείται για παράδειγμα στο μεθάνιο και το προπάνιο. Συσχετίσεις της ταχύτητας καύσης με την πίεση και τη θερμοκρασία υπάρχουν στις εργασίες των Metghalchi & Keck (1980), Gu et al. (2000), Huzayyin et al. (2008) καθώς και στο βιβλίο των Poinsot & Veynante (2005, §2.4.8).



Σχήμα 2.2.6: Ταχύτητα στρωτής καύσης υδρογόνου συναρτήσει της πίεσης και της θερμοκρασίας (Dahoe 2005).



Σχήμα 2.2.7: Θερμο-κινητικός εκθέτης συναρτήσει της συγκέντρωσης υδρογόνου (Makarov et al. 2010).

2.2.3 Πάχος φλόγας

Το πάχος της περιοχής στο οποίο λαμβάνουν χώρα οι αντιδράσεις της καύσης και το οποίο χωρίζει την άκαυστη από την καμένη περιοχή, ονομάζεται **πάχος της φλόγας** (flame thickness) και συμβολίζεται με δ_L . Το πάχος της στρωτής φλόγας είναι πολύ μικρό, της τάξεως των χιλιοστών και μπορεί να οριστεί με πολλούς τρόπους (Poinsot & Veynante 2005). Ο πιο αντιπροσωπευτικός ορισμός χρησιμοποιεί τη θερμοκρασία και είναι ο εξής:

$$\delta_L = \frac{T_b - T_u}{\max\left(\left|\frac{\partial T}{\partial x}\right|\right)} \quad (2.2.9)$$

όπου T_b , T_u η θερμοκρασία στην καμένη και στην άκαυστη περιοχή αντίστοιχα, ενώ $\partial T/\partial x$ είναι η κλίση της θερμοκρασίας καθώς πηγαίνουμε από την μία περιοχή στην άλλη. Επειδή η παραπάνω σχέση για να εφαρμοστεί απαιτεί την επίλυση των διαφορικών εξισώσεων που περιγράφουν τη φλόγα, έχουν αναπτυχθεί προσεγγιστικές σχέσεις (για παράδειγμα δεξ Poinsot & Veynante 2005, §2.5.1).

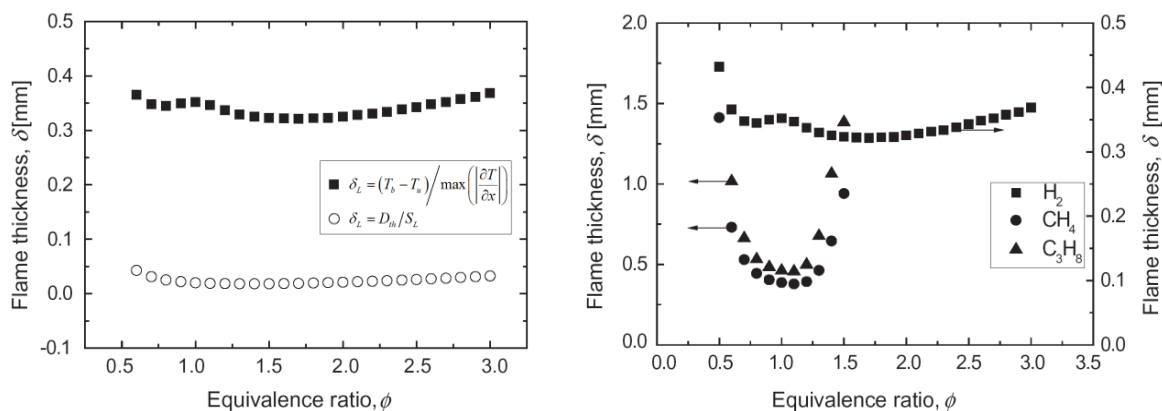
Ένας άλλος τρόπος ορισμού του πάχους της φλόγας είναι μέσω του συντελεστή διάχυσης και της στρωτής ταχύτητας καύσης:

$$\delta_L = \frac{D_{th}}{S_L} = \frac{\lambda}{\rho C_p S_L} \quad (2.2.10)$$

όπου D_{th} ο συντελεστής θερμικής διάχυσης, λ ο συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας και C_p η ειδική θερμοχωρητικότητα. Όλα τα μεγέθη λαμβάνονται στην άκαυστη περιοχή. Η παραπάνω σχέση αν και χρησιμοποιείται, δεν δίνει ακριβή αποτελέσματα και δεν συστήνεται διότι υπάρχει αβεβαιότητα στον υπολογισμό του λ/C_p και εξάρτηση από τη στρωτή ταχύτητα καύσης πράγμα που αφαιρεί την ανεξάρτητη φύση του πάχους της φλόγας (Jomaas et al. 2007)¹. Επίσης, η σχέση αυτή μπορεί να οδηγήσει σε πολύ μικρά πάχη φλόγας, τα οποία μπορεί να είναι ακόμα και μίας τάξης μεγέθους μικρότερα σε σχέση με αυτά της σχέσης (2.2.9), όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.2.8. Στο

¹ Σύμφωνα με τους Jomaas et al. (2007), επειδή η προέλαση ενός μετώπου στρωτής φλόγας εξαρτάται από τη διάχυση των συστατικών και τη χημική κινητική, οι επιπτώσεις αυτών θα πρέπει να περιγράφονται από δύο ανεξάρτητες παραμέτρους, το πάχος της φλόγας και την ταχύτητα στρωτής καύσης

σχήμα αυτό απεικονίζεται το πάχος φλόγας συναρτήσει του λόγου ισοδυναμίας για τρία διαφορετικά καύσιμα, το υδρογόνο το μεθάνιο και το προπάνιο. Το μικρότερο πάχος φλόγας το έχει το υδρογόνο το οποίο είναι περίπου ίσο με 0.35 χιλιοστά. Παρατηρούμε ότι στο υδρογόνο το πάχος φλόγας έχει μικρή εξάρτηση από τη συγκέντρωση. Από την άλλη μεριά το μεθάνιο και το προπάνιο έχουν ελάχιστο πάχος φλόγας περίπου ίσο με 0.4 χιλιοστά στη στοιχειομετρική αναλογία ενώ μπορεί να φτάνει το 1.5 χιλιοστό στους μεγάλους και μικρούς λόγους ισοδυναμίας.



Σχήμα 2.2.8: Αριστερά: Πάχος στρωτής φλόγας υδρογόνου συναρτήσει του λόγου ισοδυναμίας υπολογισμένη με δυο μεθόδους. Δεξιά: Πάχος στρωτής φλόγας υδρογόνου, μεθανίου και προπανίου συναρτήσει του λόγου ισοδυναμίας υπολογισμένο με τη βάση την κλίση θερμοκρασίας (Kim et al. 2015).

Το πάχος της φλόγας εξαρτάται επίσης από την πίεση. Για παράδειγμα στο ακετυλένιο, στο προπάνιο και στο υδρογόνο η αύξηση της πίεσης οδηγεί σε μείωση του πάχους (Jomaas et al. 2007, Law & Sung 2000). Αυτό όπως θα δούμε στην παράγραφο 2.3.2 έχει σημαντικές επιπτώσεις στην ευστάθεια της φλόγας.

Τέλος, πρέπει να αναφέρουμε μια ενδιαφέρουσα συσχέτιση μεταξύ της ταχύτητας καύσης και του πάχους της φλόγας μέσω του αριθμού Reynolds της φλόγας:

$$Re_f = \frac{\delta_L S_L}{\nu} \approx 4 \quad (2.2.11)$$

Παρατηρούμε δηλαδή ότι ο αριθμός Reynolds της φλόγας είναι σχεδόν σταθερός και ίσος με 4 (Veynante & Vervisch 2002). Αυτή η σχέση προκύπτει από διάφορες θεωρίες και χρησιμοποιείται συχνά στην ανάπτυξη μοντέλων τυρβώδους καύσης (π.χ. στο μοντέλο που περιγράφεται στην §Α.4).

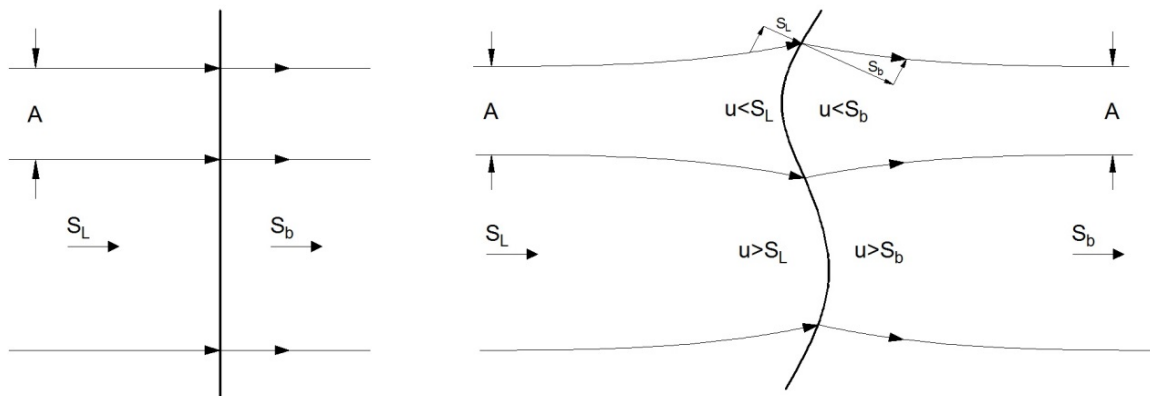
2.3 Αστάθειες μετώπου φλόγας

Η στρωτή φλόγα αποτελεί μια κατάσταση η οποία είναι εγγενώς μη σταθερή. Τυρβώδης καύση έχουμε στην περίπτωση που στο περιβάλλον στο οποίο αναπτύσσεται η φλόγα επικρατεί τύρβη, όπως για παράδειγμα σε μία μηχανή εσωτερικής καύσης ή στον καυστήρα ενός αεροστροβίλου. Τυρβώδης καύση μπορούμε όμως να έχουμε και στην περίπτωση που η φλόγα διαδίδεται σε περιβάλλον το οποίο βρίσκεται αρχικά σε ηρεμία. Σε αυτή την περίπτωση οι αστάθειες οι οποίες αναπτύσσονται παραμορφώνουν την φλόγα, αυξάνουν τον ρυθμό αντίδρασης και προκαλούν τελικά την μετάβαση στην τυρβώδη περιοχή. Οι αστάθειες αυτές παρουσιάζονται στη συνέχεια.

Περισσότερα για τις αστάθειες στις φλόγες ο αναγνώστης μπορεί να βρει στους Williams (1985), Law & Sung (2000), Law (2006), Jomaas et al. (2007) και Ciccarelli & Dorofeev (2008).

2.3.1 Υδροδυναμική αστάθεια

Η υδροδυναμική αστάθεια ανακαλύφθηκε από τους Darrieus και Landau και γι' αυτό στη βιβλιογραφία αναφέρεται και σαν **αστάθεια Darrieus-Landau**. Πρόκειται για μια αστάθεια η οποία προκαλείται από την μεταβολή της πυκνότητας η οποία παρατηρείται στην καμένη σε σχέση με την άκαυστη περιοχή. Στο Σχήμα 2.3.1 απεικονίζεται ένα απείρως μικρό μέτωπο φλόγας και οι γραμμές ροής γύρω από αυτό για δύο καταστάσεις, αυτή της επίπεδης φλόγας και αυτή της παραμορφωμένης φλόγας. Το σύστημα ταχυτήτων είναι σχετικό ως προς το μέτωπο της φλόγας. Όταν η φλόγα είναι επίπεδη, η ροή εισέρχεται σε αυτή με ταχύτητα S_L και εξέρχεται από αυτή με ταχύτητα S_b (§2.2.2), ενώ οι γραμμές ροές είναι ευθείες γραμμές. Αν στη φλόγα εμφανιστεί μια διαταραχή η οποία καμπυλώσει την επιφάνεια της, οι γραμμές ροής θα πάρουν τη μορφή που φαίνεται στο σχήμα. Η μορφή αυτή προκύπτει λαμβάνοντας υπ' όψιν ότι οι γραμμές ροής μακριά από τη φλόγα δεν θα διαταραχθούν (σταθερή διατομή A), ότι η κάθετη ταχύτητα των προϊόντων μετά το μέτωπο της φλόγας S_b είναι μεγαλύτερη από την S_L (§2.2.2) καθώς και ότι η επαπτομενική ταχύτητα στην επιφάνεια της φλόγας είναι η ίδια και στις δύο πλευρές της. Αυτά έχουν σαν αποτέλεσμα οι γραμμές ροές που ορίζουν τον ροϊκό σωλήνα εμβαδού A μακριά από τη φλόγα, να αποκλίνουν καθώς πλησιάζουν (από την άκαυστη περιοχή) το κυρτό μέρος της φλόγας και να συγκλίνουν καθώς πλησιάζουν το κοίλο. Αυτό οδηγεί στην επιβράδυνση και στην επιτάχυνση αντίστοιχα της ροής. Επειδή η ταχύτητα της φλόγας είναι σταθερή, η επιβράδυνση της ροής οδηγεί σε διείδυση του κυρτού μέρους της φλόγας πιο βαθιά στην άκαυστη περιοχή, ενώ η επιβράδυνση σε οπισθοχώρηση του κοίλου μέρους της. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα την ενίσχυση της αρχικής διαταραχής.



Σχήμα 2.3.1: Γραμμές ροής σε μια απείρως λεπτή επίπεδη (αριστερά) και καμπυλωμένη (δεξιά) φλόγα. Οι ταχύτητες του πεδίου είναι σχετικές ως προς το μέτωπο της φλόγας.

Όπως προκύπτει με ανάλυση ευστάθειας, η φλόγα είναι ασταθής σε διαταραχές όλων των μηκών κύματος. Στην πράξη όμως αυτό δεν παρατηρείται καθώς τα μικρά μήκη κύματος σταθεροποιούνται λόγω της διάχυσης και του πεπερασμένου πάχους της φλόγας. Επίσης η ίδια η καμπυλότητα της επιφάνειας (απουσία της θερμικής διαστολής των προϊόντων) είναι ένας

παράγοντας σταθεροποίησης μιας παραμορφωμένης φλόγας (Law 2006). Έτσι όταν μια φλόγα διαδίδεται σφαιρικά, γίνεται σταδιακά πιο ασταθής καθώς έχουμε μείωση της καμπυλότητας της. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα η υδροδυναμική αστάθεια να αναπτύσσεται σταδιακά και να γίνεται πιο εμφανής σε μεγαλύτερες ακτίνες (δες και Σχήμα 2.3.4). Επίσης φαινόμενα θερμοδιάχυσης μπορούν να δράσουν σταθεροποιητικά και να καθυστερήσουν την ανάπτυξη της υδροδυναμικής αστάθειας (§2.3.2). Πληροφορίες για την επίδραση της υδροδυναμικής αστάθειας σε τυρβώδεις ροές παρουσιάζονται στη §2.4.3.

2.3.2 Αστάθεια θερμοδιάχυσης

Η αστάθεια θερμοδιάχυσης προέρχεται από τον ανταγωνισμό μεταξύ της διάχυσης θερμότητας και της διάχυσης του συστατικού που βρίσκεται σε έλλειμμα (π.χ. τη διάχυση του υδρογόνου στην περίπτωση αραιού μείγματος υδρογόνου-αέρα). Ο **αριθμός Lewis** είναι ένας αδιάστατος αριθμός ο οποίος προσδιορίζει το εάν έχουμε ασταθή ή ευσταθή κατάσταση. Ορίζεται σαν τον λόγο της θερμικής προς την μοριακή διάχυση:

$$Le = \frac{D_{th}}{D} = \frac{\lambda}{\rho C_p D} \quad (2.3.1)$$

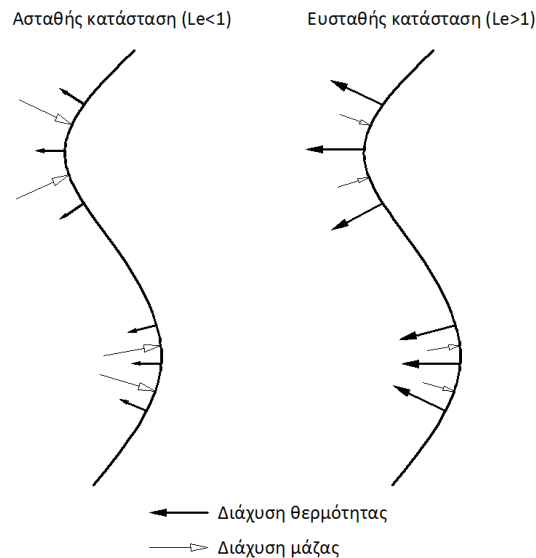
όπου D η διάχυση του συστατικού που βρίσκεται σε έλλειμμα¹. Στην περίπτωση που ο αριθμός Lewis είναι μικρότερος της μονάδας έχουμε ασταθή κατάσταση, ενώ στην περίπτωση που είναι μεγαλύτερος της μονάδας έχουμε ευσταθής κατάσταση. Γενικά, η αύξηση της θερμοκρασίας της φλόγας συμβάλει στην αύξηση της ταχύτητας καύσης. Αύξηση της ταχύτητας καύσης έχουμε και στην περίπτωση αυξημένης διάχυσης του συστατικού το οποίο βρίσκεται σε έλλειμμα καθώς με αυτό το τρόπο το μείγμα γίνεται τοπικά πιο στοιχειομετρικό.

Στο Σχήμα 2.3.2 απεικονίζεται γραφικά ο μηχανισμός της αστάθειας και της ευστάθειας. Για να το κατανοήσουμε πρέπει να λάβουμε υπ' όψιν ότι η σύγκριση γίνεται με την περίπτωση μιας αδιατάραχτης επίπεδης φλόγας στην οποία ορίζεται η στρωτή ταχύτητα καύσης (§2.2.2). Παρατηρούμε ότι το κυρτό (ως προς την άκαυστη περιοχή) μέρος της φλόγας έχει στη διάθεσή του μεγαλύτερο μέρος της άκαυστης περιοχής για ν' ανταλλάξει μάζα και ενέργεια σε σχέση με μια επίπεδη φλόγα. Έτσι για την κυρτή περιοχή, στην περίπτωση όπου η διάχυση του συστατικού που βρίσκεται σε έλλειμμα υπερσχύει της διάχυσης θερμότητας ($Le < 1$), το κέρδος για την φλόγα από την αύξηση της συγκέντρωσης υπερσχύει της ζημίας από την διάχυση της θερμότητας οπότε η ταχύτητα καύσης τοπικά αυξάνεται. Άρα το κυρτό μέρος θα εισχωρήσει ακόμα πιο βαθιά στην άκαυστη περιοχή και η διαταραχή θα ενισχυθεί. Από την άλλη αν η διάχυση θερμότητας είναι μεγαλύτερη ($Le > 1$) τότε η πτώση της θερμοκρασίας της φλόγας δεν μπορεί να αντισταθμιστεί από την αύξηση της συγκέντρωσης οπότε η ταχύτητα καύσης θα μειωθεί. Άρα το κυρτό μέρος θα οπισθοχωρήσει και η αρχική διαταραχή θα εξομαλυνθεί.

Στο κοίλο ως προς την άκαυστη περιοχή μέρος της φλόγας έχουμε αντίθετη κατάσταση από αυτή στο κυρτό. Η θερμότητα διαχέεται σε μικρότερη (άκαυστη) περιοχή σε σχέση με μια επίπεδη φλόγα, ενώ το συστατικό διαχέεται σε μεγαλύτερη περιοχή της φλόγας. Έτσι στην περίπτωση όπου

¹ Μια διαφορετική στρατηγική για τον υπολογισμό του αριθμού Lewis σε μείγματα που είναι κοντά στην στοιχειομετρία παρουσιάζεται στο (Law & Sung 2000)

η διάχυση του συστατικού που βρίσκεται σε έλλειμμα υπερισχύει της διάχυσης θερμότητας ($Le < 1$), η αύξηση της συγκέντρωσης δεν είναι αυτή που θα ήταν στην περίπτωση μιας επίπεδης φλόγας καθώς το συστατικό διαχέεται σε μεγαλύτερη περιοχή από ότι θα διαχεόταν αν η φλόγα ήταν επίπεδη. Έτσι η ταχύτητα καύσης θα μειωθεί, η κοίλη περιοχή θα οπισθοχωρήσει πιο πολύ στην καμένη περιοχή και η αρχική διαταραχή θα ενισχυθεί. Ομοίως, αν η διάχυση θερμότητας είναι μεγαλύτερη ($Le > 1$), επειδή οι απώλειες θα περιοριστούν σε μια μικρότερη περιοχή της άκαυστης περιοχής απ' ότι στην περίπτωση της επίπεδης φλόγας, η ταχύτητα καύσης θα αυξηθεί οπότε η αρχική διαταραχή θα εξομαλυνθεί.

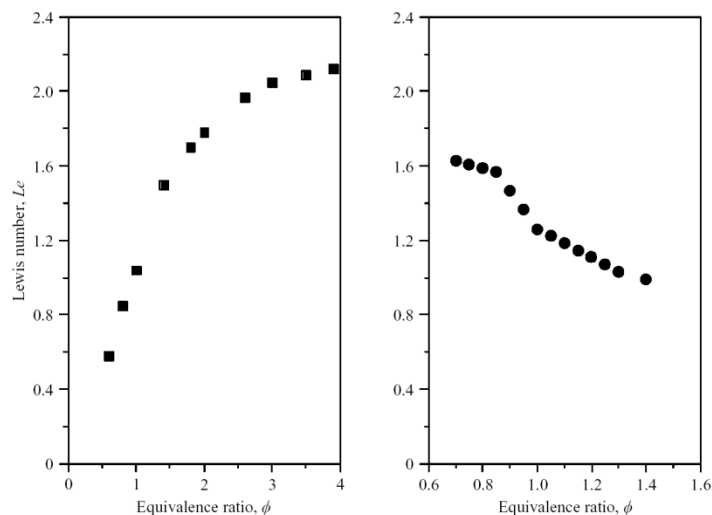


Σχήμα 2.3.2: Γραφική απεικόνιση της αστάθειας θερμοδιάχυσης (η φλόγα κινείται από δεξιά προς τα αριστερά). Το μήκος των βελών είναι ανάλογο της έντασης της διάχυσης.

Συμφασμένη με την αστάθεια θερμοδιάχυσης είναι η **επιλεκτική διάχυση** (preferential diffusion) η οποία παρουσιάζεται όταν το συστατικό που βρίσκεται σε αφθονία και αυτό που βρίσκεται σε έλλειμμα διαχέονται διαφορετικά. Η διαφορετική διάχυση οδηγεί σε τοπική διαφοροποίηση της συγκέντρωσης με τρόπο όμοιο με αυτό που παρουσιάστηκε προηγουμένως, με αποτέλεσμα να έχουμε μεταβολές στην ταχύτητα καύσης. Η επιλεκτική διάχυση μπορεί να αντιμετωπιστεί σαν ένας άλλος τρόπος για να εξηγηθεί η αστάθεια που παρουσιάστηκε στην προηγούμενη παράγραφο (Law 2006).

Πρέπει να αναφέρουμε ότι και στην περίπτωση όπου έχουμε ίση διάχυση των συστατικών και της θερμοκρασίας, η καμπύλωση της επιφάνειας της φλόγας είναι ένας παράγοντας σταθεροποίησης της φλόγας, καθώς η ταχύτητα καύσης μειώνεται στις κυρτές περιοχές και αυξάνεται στις κοίλες (Law 2006). Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα το όριο της ευστάθειας να μετατοπίζεται σε μικρότερους αριθμούς Lewis.

Στο Σχήμα 2.3.3 απεικονίζεται ο αριθμός Lewis συναρτήσει του λόγου ισοδυναμίας για το υδρογόνο και το προπάνιο. Παρατηρούμε ότι καθώς κινούμαστε στις μικρότερες συγκεντρώσεις ο αριθμός Lewis μειώνεται για το υδρογόνο και αυξάνεται για το προπάνιο. Συγκεκριμένα για το υδρογόνο ο αριθμός Lewis είναι μικρότερος της μονάδας για υπο-στοιχειομετρικές συγκεντρώσεις με αποτέλεσμα να βρισκόμαστε στην ασταθή περιοχή.



Σχήμα 2.3.3: Αριθμός Lewis σε συνάρτηση του λόγου ισοδυναμίας για το υδρογόνο (αριστερά) και το προπάνιο (δεξιά) (Jomaas et al. 2007).

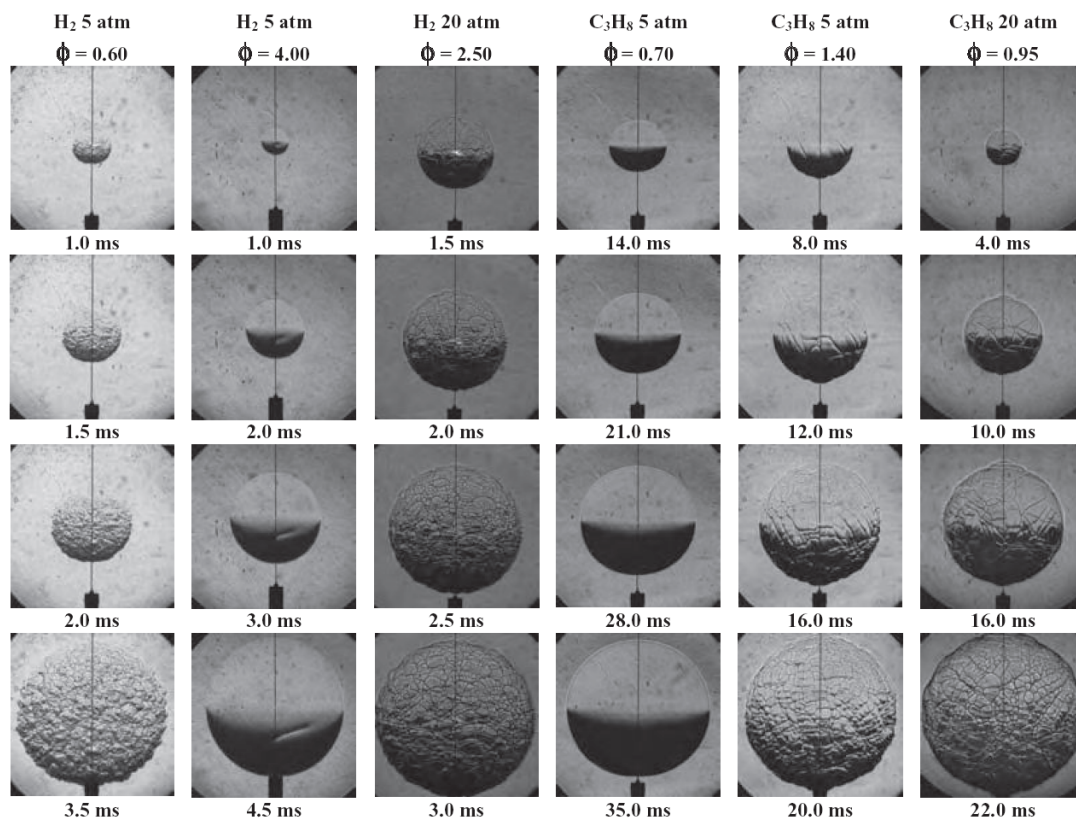
Στο Σχήμα 2.3.4 παρουσιάζεται μια φωτογραφική απεικόνιση σφαιρικής φλόγας προαναμεμειγμένου μείγματος υδρογόνου-αέρα και προπανίου-αέρα για διάφορες συγκεντρώσεις, πιέσεις και χρονικές στιγμές. Οι δύο πρώτες στήλες παρουσιάζουν την χρονική εξέλιξη της καύσης του υδρογόνου για υπο-στοιχειομετρικό και υπερ-στοιχειομετρικό μείγμα. Παρατηρούμε στην πρώτη περίπτωση το έντονο ρυτίδιασμα της επιφάνειας της φλόγας λόγω της αστάθειας θερμοδιάχυσης που αναπτύσσεται ($Le < 1$). Από την άλλη μεριά στην υπερ-στοιχειομετρική περίπτωση (δεύτερη στήλη), βλέπουμε ότι η φλόγα διατηρεί ένα σχεδόν τέλει σφαιρικό σχήμα. Αυτό οφείλεται στο ότι ο αριθμός Lewis είναι μεγαλύτερος της μονάδας με αποτέλεσμα η θερμό-διάχυση να λειτουργεί σταθεροποιητικά εξαφανίζοντας τις όποιες ατέλειες. Στην τρίτη στήλη απεικονίζεται πάλι ένα υπερ-στοιχειομετρικό μείγμα υδρογόνου σε αυξημένη αυτή τη φορά πίεση. Σε αυτή την περίπτωση παρατηρούμε ότι στην επιφάνεια της φλόγας αναπτύσσονται έντονες ανωμαλίες οι οποίες σχηματίζουν μία κυτταρική δομή (cellular structure). Το ρυτίδιασμα της επιφάνειας σε αυτή την περίπτωση οφείλεται στην ανάπτυξη της υδροδυναμικής αστάθειας. Όπως αναφέραμε στην προηγούμενη παράγραφο, η αστάθεια αυτή εξαρτάται από το πάχος της φλόγας το οποίο δρα σταθεροποιητικά. Η αύξηση της πίεσης οδήγησε στη μείωση του πάχους της φλόγας, με αποτέλεσμα η αστάθεια να αναπτύσσεται πιο γρήγορα. Η αστάθεια αυτή αναμένεται να αναπτυχθεί και στην περίπτωση της μικρότερης πίεσης (δεύτερη στήλη) για μεγαλύτερες όμως ακτίνες όπου η καμπυλότητα (που αποτελεί σταθεροποιητικό παράγοντα) θα είναι μικρότερη. Ίδια φαινόμενα παρατηρούνται και στην περίπτωση του προπανίου, με μόνη διαφορά ότι η αστάθεια θερμοδιάχυσης αναπτύσσεται στο υπερ-στοιχειομετρικό μείγμα όπου ο αριθμός Lewis γίνεται μικρότερος.

Η μετάβαση στην κυτταρική δομή χαρακτηρίζεται συνήθως μέσω ενός αδιάστατου αριθμού ο οποίος ονομάζεται αριθμός Peclet και ορίζεται ως εξής:

$$Pe = \frac{R}{\delta_L} \quad (2.3.2)$$

όπου R η ακτίνα της φλόγας και δ_L το πάχος της. Ο κρίσιμος αριθμός Peclet συμβολίζεται με Pe_c και αναφέρεται στην κρίσιμη εκείνη ακτίνα στην οποία εμφανίζεται η κυτταρική δομή. Οι Jomaas et

al. (2007) έδειξαν ότι σε φλόγες στις οποίες δεν υπάρχουν έντονα φαινόμενα θερμοδιάχυσης (όπως είναι το ακετυλένιο στο οποίο ο αριθμός Lewis είναι κοντά στην μονάδα για όλες τις τιμές των συγκεντρώσεων) ο κρίσιμος αριθμός Peclet είναι σχεδόν ανεξάρτητος της συγκέντρωσης και της πίεσης (παρόλο που το πάχος της φλόγας εξαρτάται και από τις δύο μεταβλητές), ενώ για το υδρογόνο και το προπάνιο αυξάνεται και μειώνεται αντίστοιχα σε συνάρτηση με τη συγκέντρωση λόγω της επίδρασης της αστάθειας θερμοδιάχυσης. Στο προπάνιο επίσης, ο κρίσιμος αριθμός Peclet παρέμεινε σταθερός με την πίεση για όλες τις εξεταζόμενες συγκεντρώσεις. Η κρίσιμη ακτίνα μετάβασης για το υδρογόνο σε πίεση 5 atm κυμαινόταν από 0.5 έως 2.5 cm για αραιό και πυκνό μείγμα αντίστοιχα. Άλλες χαρακτηριστικές εργασίες πάνω στην κυτταρική δομή σφαιρικών φλογών είναι αυτές των Bechtold & Matalon (1987), Bradley et al. (2000), Tse et al. (2000), Kwon et al. (2002), Law et al. (2005) και Wu et al. (2013).



Σχήμα 2.3.4: Φωτογραφική απεικόνιση σφαιρικής φλόγας προαναμεμιγμένου μείγματος υδρογόνου-αέρα και προπανίου-αέρα για διάφορες συγκεντρώσεις, πιέσεις και χρονικές στιγμές (Law 2006). Η οριζόντια διάσταση κάθε φωτογραφίας είναι 5.4 cm.

2.3.3 Αστάθειες Rayleigh-Taylor, Richtmyer-Meshkov και Kelvin-Helmholtz

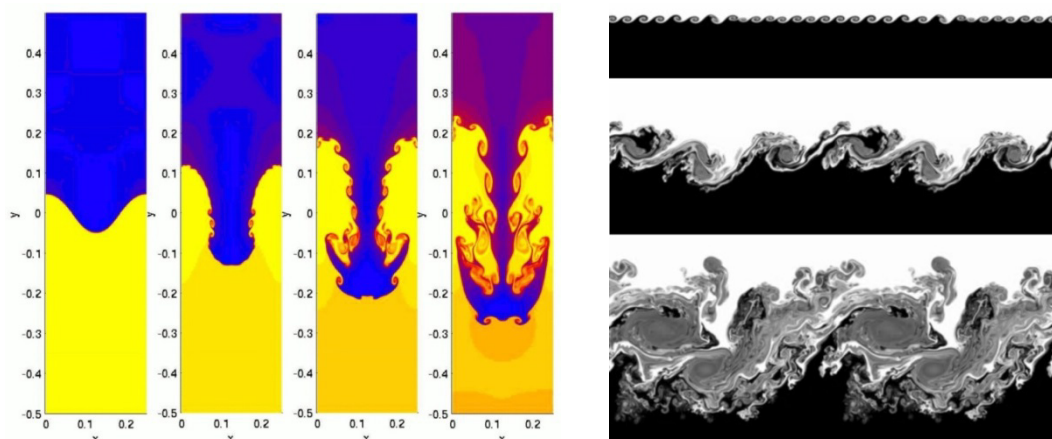
Η υδροδυναμική αστάθεια και η αστάθεια θερμοδιάχυσης που περιγράφηκαν στις προηγούμενες παραγράφους αποτελούν δύο εγγενείς αστάθειες του μετώπου της φλόγας οι οποίες παρουσιάζονται ανεξάρτητα από το χώρο μέσα στον οποίο αναπτύσσεται η φλόγα. Υπάρχουν όμως και αστάθειες οι οποίες σχετίζονται με τη γεωμετρία του χώρου και τη ροή στην οποία προελαύνει η φλόγα και οι οποίες θα περιγραφούν εν συντομία στη συνέχεια.

Η πιο σημαντική ίσως αστάθεια είναι η αστάθεια **Rayleigh-Taylor**, η οποία περιγράφηκε από τον Λόρδο Rayleigh το 1883 και τον Taylor (1950). Η αστάθεια αυτή αναπτύσσεται όταν ένα ρευστό

μικρότερης πυκνότητας ωθεί ένα άλλο μεγαλύτερης (Sharp 1984). Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα είναι αν τοποθετήσουμε μία ποσότητα νερού στο ταβάνι ενός δωματίου. Η πίεση του αέρα είναι αρκετή για να το στηρίξει, αλλά η κατάσταση είναι ασταθής και το νερό τελικά θα υποχωρήσει υπό τη δύναμη της βαρύτητας. Μια απεικόνιση της ροής που αναπτύσσεται λόγω αυτής της αστάθειας παρουσιάζεται στο Σχήμα 2.3.5. Αστάθειες τέτοιου είδους αναπτύσσονται και στις εκρήξεις *supernova* όπου διαστελλόμενο αέριο επιταχύνεται εντός ενός πυκνότερου αερίου.

Μια συγγενής αστάθεια είναι η αστάθεια **Richtmyer-Meshkov** (Brouillette 2002). Η αστάθεια αυτή αναπτύσσεται όταν η διεπιφάνεια η οποία χωρίζει δύο διαφορετικά ρευστά επιταχυνθεί απότομα λόγω κάποιας απότομης ώθησης όπως για παράδειγμα από ένα κύμα πίεσης. Κάποιες διαφορές της από την αστάθεια Rayleigh-Taylor είναι ότι οι αρχικές διαταραχές στην επιφάνεια αναπτύσσονται στην αρχή γραμμικά και όχι εκθετικά και ότι δεν υπάρχει εξάρτηση από την κατεύθυνση της επιτάχυνσης (Kumar 2003). Επίσης στην αστάθεια Rayleigh-Taylor η βαρύτητα αποτελεί μια συνεχή κινητήρια δύναμη η οποία οδηγεί την αστάθεια ενώ στην αστάθεια Richtmyer-Meshkov η κινητήρια δύναμη διαρκεί όσο και η ώθηση που δίνει π.χ. το κύμα πίεσης. Ο κύριος μηχανισμός ανάπτυξης και των δύο ασταθειών είναι ο βαροκλινικός σχηματισμός στροβιλισμών στην διεπιφάνεια λόγω του ότι η κλίση της πίεσης δεν συμπίπτει με την κλίση της πυκνότητας, δηλαδή $\nabla \rho \times \nabla p \neq 0$.

Ένα άλλο είδους αστάθειας είναι η αστάθεια **Kelvin-Helmholtz**. Η αστάθεια αυτή αναπτύσσεται όταν έχουμε τμήματα ρευστού τα οποία κινούνται παράλληλα με διαφορετικές ταχύτητες ή όταν έχουμε παράλληλη κίνηση ρευστών διαφορετικών πυκνοτήτων. Μια σχηματική απεικόνιση της αστάθειας παρουσιάζεται στο Σχήμα 2.1.3. Όπως φαίνεται από το σχήμα η αστάθεια αυτή οδηγεί στον σχηματισμό δινών και τελικά τύρβης. Σχηματισμό τέτοιων ασταθειών έχουμε και στην περίπτωση της αστάθειας Rayleigh-Taylor, όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.3.5.

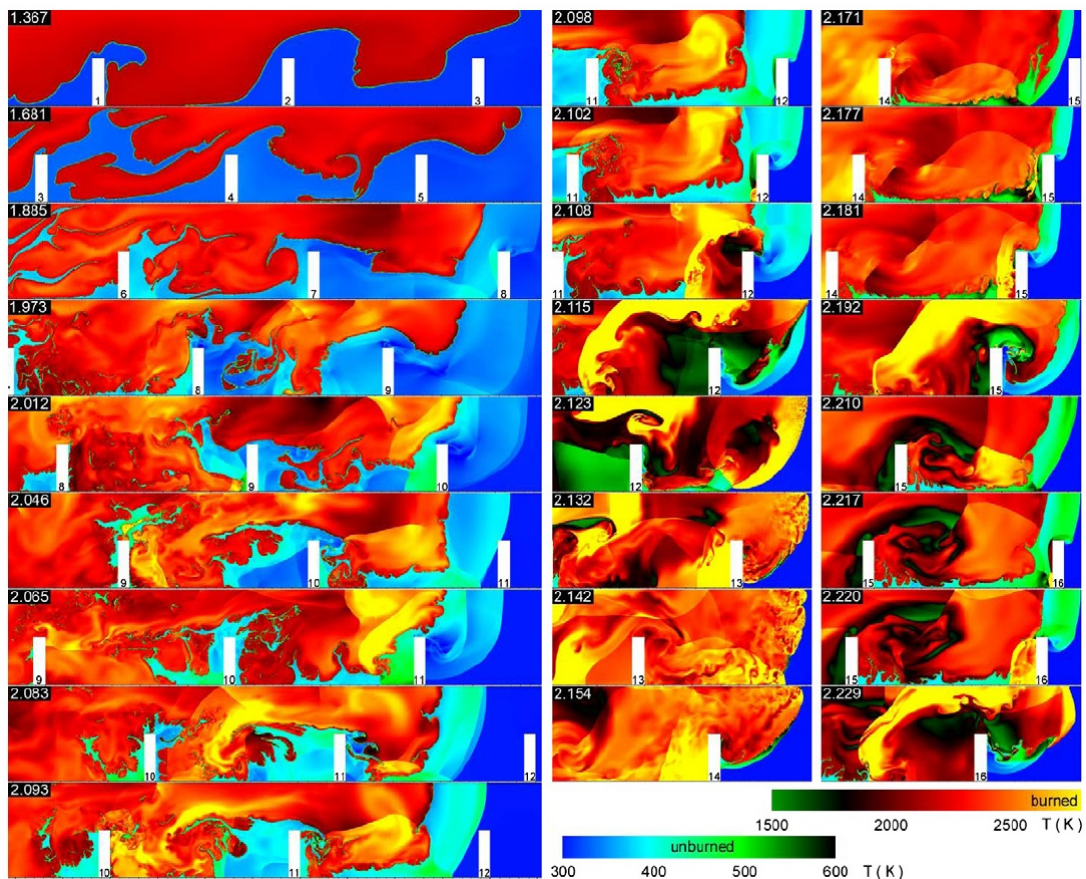


Σχήμα 2.3.5: Αριστερά: Απεικόνιση της Rayleigh-Taylor και Kelvin-Helmholtz αστάθειας όταν ένα ελαφρύτερο αέριο (κίτρινη περιοχή) συγκρατεί ένα βαρύτερο (μπλε περιοχή). Δεξιά: Kelvin-Helmholtz αστάθεια στη διεπιφάνεια ρευστών διαφορετικών ταχυτήτων.

Οι παραπάνω αστάθειες εμφανίζονται και παίζουν σημαντικό ρόλο στη διάρκεια εκρήξεων αέριου μείγματος. Γενικά, κατά την καύση προ-αναμεμειγμένου μείγματος μπορούμε να διακρίνουμε δύο περιοχές, μια υψηλής και μια χαμηλής πυκνότητας. Η περιοχή υψηλής πυκνότητας είναι αυτή των αντιδρώντων (άκαυστη περιοχή) ενώ της χαμηλής πυκνότητας είναι η περιοχή των προϊόντων (λόγω της υψηλής θερμοκρασίας, §2.2). Οι περιοχές αυτές χωρίζονται από τη διεπιφάνεια της φλόγας στην οποία πραγματοποιούνται οι χημικές αντιδράσεις. Έτσι για παράδειγμα αν η φλόγα

επιταχυνθεί λόγω της παρουσίας κάποιου εμποδίου, είναι πολύ πιθανό να εμφανιστούν οι αστάθειες Rayleigh-Taylor και Kelvin-Helmholtz καθώς η χαμηλής πυκνότητας άκαυστη περιοχή θα επιταχύνεται μέσα στα υψηλής πυκνότητας (κρύα) προϊόντα (δες και §2.6). Αστάθεια Richtmyer-Meshkov μπορεί να παρουσιαστεί στην περίπτωση ισχυρών κυμάτων πίεσης όπως γίνεται όταν πλησιάζουμε σε συνθήκες υπερηχητικής έκρηξης (detonation).

Στο Σχήμα 2.3.6 απεικονίζεται έκρηξη αέριου μείγματος υδρογόνου-αέρα σε κλειστό αγωγό με εμπόδια. Η φλόγα καθώς περνάει πάνω από τα εμπόδια επιταχύνεται με αποτέλεσμα να σχηματίζονται αστάθειες Rayleigh-Taylor και Kelvin-Helmholtz οι οποίες παραμορφώνουν την φλόγα, αυξάνουν την επιφάνεια της και οδηγούν σε περαιτέρω επιτάχυνση της λόγω της αύξησης του ρυθμού καύσης. Κύματα πίεσης είναι ορατά από τα 1.885 ms (τρίτη χρονική στιγμή στο σχήμα). Αυτά αντανακλώνονται στις επιφάνειες του αγωγού και στα εμπόδια με αποτέλεσμα να αλληλεπιδρούν με τη φλόγα αναπτύσσοντας την αστάθεια Richtmyer-Meshkov. Η ανάπτυξη των ασταθειών έχει σαν αποτέλεσμα την συνεχή επιτάχυνση της φλόγας και την μετάπτωση τελικά σε υπερηχητική έκρηξη. Για παράδειγμα τη χρονική στιγμή 2.102 ms στη βάση του εμποδίου 12 η πολύ υψηλή θερμοκρασία που έχει προκληθεί από τα κύματα πίεσης οδηγούν σε αυτανάφλεξη του μείγματος και τελικά σε υπερηχητική προέλαση της φλόγας. Τη χρονική στιγμή 2.123 ms το μέτωπο της φλόγας έχει ταυτιστεί με το κύμα πίεσης, χαρακτηριστικό των υπερηχητικών εκρήξεων, ενώ και η χαρακτηριστική κυτταρική δομή (detonation cells) αυτού του είδους έκρηξης έχει αρχίσει να σχηματίζεται.



Σχήμα 2.3.6: Απεικόνιση μετάβασης σε υπερηχητική έκρηξη αέριου μείγματος υδρογόνου-αέρα σε κλειστό αγωγό με εμπόδια (ισοϋψείς θερμοκρασίας σε διάφορες χρονικές στιγμές). Αποτέλεσμα αριθμητικής προσομοίωσης υψηλής ανάλυσης (Gamezo et al. 2007).

Συνοψίζοντας, οι αστάθειες που περιγράψαμε είναι πολύ πιθανό να αναπτυχθούν όταν η φλόγα αναπτύσσεται σε περιβάλλον σύνθετης γεωμετρίας (π.χ. εμπόδια). Αυτές οδηγούν στην επιτάχυνση της φλόγας και στην αύξηση της βιαιότητας της έκρηξης η οποία για την περίπτωση πολύ ενεργών καυσίμων όπως το υδρογόνο μπορεί να μεταβεί στην υπερηχητική περιοχή καύσης (detonation), στην πιο βίαια δηλαδή μορφή έκρηξης.

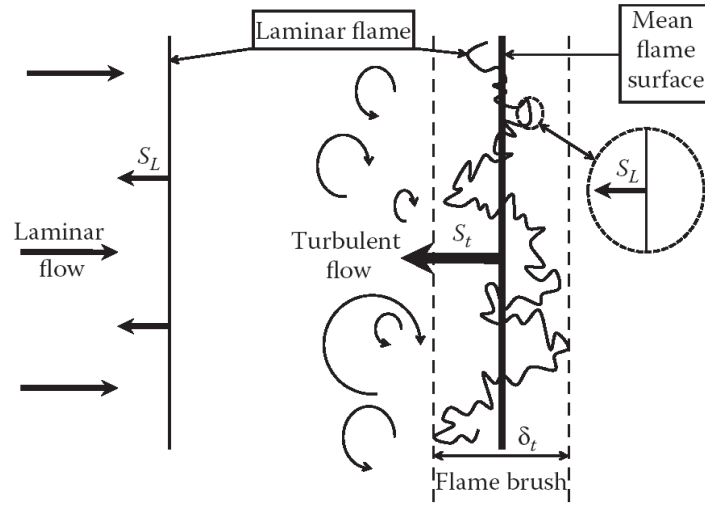
2.4 Τυρβώδης καύση

Όταν η ροή η οποία προσεγγίζεται από το μέτωπο καύσης είναι τυρβώδης, τότε ο στρωτός χαρακτήρας της καύσης που περιγράφηκε στις προηγούμενες παραγράφους διαταράσσεται σημαντικά με αποτέλεσμα να δημιουργείται ένα νέο είδος καύσης το οποίο ονομάζεται **τυρβώδης καύση**, στο οποίο τύρβη και φλόγα αλληλεπιδρούν. Η τυρβώδης καύση συναντιέται στις περισσότερες πρακτικές εφαρμογές όπως σε πυραύλους, μηχανές εσωτερικής καύσης και καυστήρες. Από την άλλη μεριά οι εφαρμογές στρωτής καύσης είναι πολύ περιορισμένες, όπως είναι η καύση σε κεριά, στους αναπτήρες και σε οικιακούς φούρνους.

Η καύση στις περιπτώσεις έκρηξης προ-αναμεμειγμένου μείγματος καυσίμου-αέρα σε χωρικές κλίμακες πρακτικού ενδιαφέροντος εντάσσεται σχεδόν πάντα στην περιοχή της τυρβώδους καύσης. Η τύρβη μπορεί είτε να προϋπάρχει στον χώρο λόγω της έκλυσης από την οποία το καύσιμο διέρρευσε στην ατμόσφαιρα ή να υπάρχει λόγω της παρουσίας εξωτερικού ανέμου. Ακόμα όμως και στην περίπτωση ακίνητου περιβάλλοντος, τύρβη δημιουργείται από το ίδιο το μέτωπο της φλόγας καθώς και από το πεδίο ροής που δημιουργεί η φλόγα στον χώρο καθώς προελαύνει αλληλεπιδρώντας με τα στερεά αντικείμενα. Ένας βασικός παράγοντας δημιουργίας τύρβης από το ίδιο το μέτωπο της φλόγας (Lipatnikov & Chomiak 2010) είναι οι αστάθειες που παρουσιάστηκαν στην παράγραφο 2.3. Ένας άλλος μηχανισμός δημιουργίας τύρβης θα παρουσιαστεί στην παράγραφο 2.4.3.

Η τυρβώδης καύση προ-αναμεμειγμένου μείγματος μπορεί να χωριστεί σε διάφορες κατηγορίες, αναλόγως των τυρβωδών χαρακτηριστικών και των χαρακτηριστικών της καύσης. Οι δύο κύριες κατηγορίες που εμφανίστηκαν πρώτες κατά τη δεκαετία του πενήντα, είναι οι κατηγορίες της **ρυτιδιασμένης φλόγας** (wrinkled flame) και της **κατανεμημένης ζώνης καύσης** (distributed reaction zone ή distributed combustion). Αρχικά, αυτές οι δύο κατηγορίες εμφανίστηκαν σαν δύο ξεχωριστές θεωρίες, αντίθετη η μία στην άλλη, για να εξηγήσουν την μορφή της τυρβώδους φλόγας ανάμειξης. Οι Karlovitz και Schelkin, υποστήριζαν την άποψη ότι η τυρβώδης φλόγα αποτελεί ένα ρυτιδιασμα (wrinkling) της στρωτής φλόγας, ή ότι αποτελείται από μία ομάδα στρωτών φλογών (flamelets) οι οποίες κινούνται τυχαία. Από την άλλη, οι Summerfield και Longwell, υποστήριζαν ότι η τυρβώδης φλόγα αποτελείται από μία πλατιά περιοχή στην οποία δεν υπάρχει σαφή διάκριση του μετώπου της φλόγας και όπου συνεπώς δεν υπάρχουν μεγάλες κλίσεις της θερμοκρασίας και των συγκεντρώσεων (Summerfield 1955). Μετά από μερικά χρόνια, οι ερευνητές κατέληξαν ότι και τα δύο παραπάνω μοντέλα μπορούν να αναπαραστήσουν την μορφή της τυρβώδους φλόγας, ανάλογα με τις συνθήκες που επικρατούν. Επιπλέον, νέες κατηγορίες καύσης προτάθηκαν, όπως θα δούμε στην συνέχεια.

Μια σχηματική απεικόνιση της στρωτής και της τυρβώδους καύσης απεικονίζεται στο Σχήμα 2.4.1. Η τυρβώδης καύση απεικονίζει την επιφάνεια μιας φλόγας η οποία ανήκει στην κατηγορία της ρυτιδιασμένης φλόγας η οποία τοπικά κινείται με την ταχύτητα της στρωτής καύσης ενώ ολικά με την ταχύτητα τυρβώδους καύσης (S_t στο σχήμα).



Σχήμα 2.4.1: Σχηματική απεικόνιση στρωτού και τυρβώδους (κατηγορίας ρυτιδιασμένης φλόγας) μετώπου φλόγας (Lipatnikov 2013).

2.4.1 Χαρακτηριστικοί αριθμοί και κατηγορίες τυρβώδους καύσης

Κατ' αναλογία των χαρακτηριστικών κλιμάκων που ορίστηκαν για τις τυρβώδεις ροές (§2.1.3), χαρακτηριστικά μεγέθη ορίζονται και για την καύση. Έτσι έχουμε τη **χαρακτηριστική ταχύτητα καύσης** η οποία συνήθως λαμβάνεται ίση με την ταχύτητα στρωτής καύσης, το **χαρακτηριστικό μήκος καύσης** το οποίο συνήθως λαμβάνεται ίσο με το πάχος της στρωτής φλόγας και τον **χαρακτηριστικό χρόνο καύσης**, τ_c . Σαν χαρακτηριστικό χρόνο καύσης θεωρούμε έναν τυπικό χρόνο στον οποίο εκτελούνται οι χημικές αντιδράσεις. Αυτός μπορεί να υπολογιστεί μέσω του νόμου του Arrhenius (Hjertager 1989, Hjertager 1993), μέσω του συντελεστή διάχυσης (Peters 2000), του κινηματικού ιξώδους (Law 2006) ή μέσω του χρόνου που χρειάζεται η φλόγα για να διασχίσει απόσταση ίση με το πάχος της (Veynante & Vervisch 2002):

$$\tau_c = \frac{D}{S_L^2} = \frac{\nu}{S_L^2} \quad (2.4.1)$$

$$\tau_c = \frac{\delta_L}{S_L} \quad (2.4.2)$$

όπου στην πρώτη εξίσωση έχει γίνει η υπόθεση για αριθμό Schmidt ίσο με τη μονάδα (ο αριθμός Schmidt αντιπροσωπεύει τον λόγο της διάχυσης της ορμής προς την διάχυση του συστατικού και ισούται με ν/D). Η μορφή της τυρβώδους φλόγας εξαρτάται από την αλληλεπίδραση που έχει με τις δίνες. Έτσι είναι φυσιολογικό να οριστούν κάποια χαρακτηριστικά μεγέθη τα οποία συγκρίνουν την ένταση της τύρβης με την ένταση της καύσης. Το πρώτο μέγεθος είναι ο **αριθμός Damköhler**, ο

οποίος συγκρίνει την ολοκληρωτική χρονική κλίμακα των δινών με τον χαρακτηριστικό χρόνο καύσης και ισούται με

$$Da = \frac{\tau_0}{\tau_c} = \frac{l_0/u'_0}{\delta_L/S_L} \quad (2.4.3)$$

Μια πρώτη κατηγοριοποίηση της τυρβώδους καύσης μπορεί να γίνει με βάση τον αριθμό αυτό. Πολύ μεγάλος αριθμός Damköhler σημαίνει ότι οι χημικές αντιδράσεις πραγματοποιούνται πολύ πιο γρήγορα από τον χρόνο κίνησης των δινών. Το μέτωπο της φλόγας παραμορφώνεται αλλά η εσωτερική της δομή δεν επηρεάζεται με αποτέλεσμα να διατηρούνται τα χαρακτηριστικά της στρωτής καύσης. Η περιοχή αυτή καύσης ονομάζεται περιοχή **φλογιδίων** (flamelet). Από την άλλη μεριά, πολύ μικρός αριθμός Damköhler σημαίνει ότι καύση πραγματοποιείται πολύ πιο αργά από ότι κινούνται οι δίνες. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα τα αντιδρώντα και τα προϊόντα να αναμειγνύονται πριν την πραγματοποίηση της καύσης, συνεπώς να επηρεάζεται η εσωτερική δομή της φλόγας. Η περιοχή αυτή ονομάζεται περιοχή **τέλειας αναμειγμένης καύσης** (perfectly stirred reactor).

Ένας δεύτερος χαρακτηριστικός αριθμός είναι ο **αριθμός Karlovitz**. Ο αριθμός αυτός είναι παρόμοιος φιλοσοφίας με τον αριθμό Damköhler καθώς συγκρίνει τη χαρακτηριστική χρονική κλίμακα της καύσης με αυτή της τύρβης, με την διαφορά ότι σαν χαρακτηριστική κλίμακα της τύρβης λαμβάνει την κλίμακα Kolmogorov:

$$Ka = Ka_L = \frac{\tau_c}{\tau_k} = \frac{\delta_L/S_L}{l_k/u'_k} = \frac{u'_k{}^2}{S_L^2} \quad (2.4.4)$$

Αυτός ο αριθμός είναι πολύ σημαντικός καθώς χαρακτηρίζει την επίδραση που έχει η μικρότερη δυνατή κλίμακα της τύρβης στην εσωτερική δομή της φλόγας. Έτσι αν ο αριθμός αυτός είναι μικρότερος της μονάδας (γνωστό και σαν κριτήριο Klimov-Williams), τότε οι χημικές αντιδράσεις εκτελούνται πολύ πιο γρήγορα σε σύγκριση με τις τυρβώδεις διαταραχές και η εσωτερική της δομή δεν επηρεάζεται, οπότε η ύπαρξη φλογιδίων (flamelets) με χαρακτηριστικά στρωτής καύσης είναι πιθανή. Από την άλλη αν ο αριθμός αυτός είναι μεγαλύτερος της μονάδας, τότε το χαρακτηριστικό μήκος των μικρότερων δινών είναι συγκρίσιμο με το πάχος της φλόγας με αποτέλεσμα οι δίνες να μπορούν να διαταράξουν την εσωτερική της δομή.

Το διάγραμμα κατηγοριοποίησης της τυρβώδους καύσης που προτάθηκε από τον Borghi (1985), βασίζεται στους λόγους τυρβωδών χαρακτηριστικών προς χαρακτηριστικών της στρωτής καύσης. Τα διαγράμματα αυτά αναφέρονται σαν διαγράμματα Borghi και διάφορες μορφές τους απεικονίζονται στο Σχήμα 2.4.2. Το διάγραμμα αυτό είναι συνήθως σε λογαριθμική κλίμακα και περιέχει στον οριζόντιο άξονα τον λόγο χαρακτηριστικών μεγεθών μήκους της τύρβης και της καύσης, ενώ στον κάθετο το λόγο χαρακτηριστικών μεγεθών ταχύτητας. Σαν χαρακτηριστικό μήκος της τύρβης λαμβάνεται η ολοκληρωτική κλίμακα χώρου της τύρβης, ενώ σαν χαρακτηριστικό μήκος της καύσης το πάχος της στρωτής φλόγας. Σαν χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης λαμβάνεται

συνήθως η μέση τετραγωνική ρίζα των διαταραχών $u'_0 = u'_{rms} = \sqrt{\frac{2}{3}}k$ (§2.1.3), ενώ σαν χαρακτηριστική ταχύτητα της καύσης η στρωτή ταχύτητα καύσης. Σύμφωνα με τον Borghi (1985), η τυρβώδης κινητική ενέργεια k πρέπει να περιλαμβάνει την επίδραση της φλόγας στην τύρβη. Μια

χρήσιμη σχέση η οποία προκύπτει εύκολα (Law 2006) από τις σχέσεις για τις κλίμακες Kolmogorov (§2.1.3) και η οποία απεικονίζεται στα διαγράμματα Borghi είναι η:

$$\frac{u'_0}{S_L} = Ka_L^{2/3} \left(\frac{l_0}{\delta_L} \right)^{1/3} \quad (2.4.5)$$

Η παραπάνω σχέση απεικονίζεται (σε λογαριθμική κλίμακα) στα διαγράμματα για $Ka_L = 1$ (ευθεία κλίσης $1/3$) το οποίο αντιπροσωπεύει το άνω όριο για το οποίο η δομή της φλόγας δεν επηρεάζεται από τις δίνες Kolmogorov.

Ο Peters (1999) πρότεινε μια περιοχή καύσης, βασιζόμενος στον τρόπο με τον οποίο αλληλεπιδρούν οι δίνες της κλίμακας Kolmogorov με τη φλόγα. Η διάκριση γίνεται αναλόγως αν οι δίνες εισέρχονται μόνο στην ζώνη προθέρμανσης της φλόγας ή αν επηρεάζουν και την ζώνη στην οποία πραγματοποιούνται οι αντιδράσεις και απελευθερώνεται η ενέργεια (ζώνη αντίδρασης). Το πάχος της ζώνης αντίδρασης (το οποίο συμβολίζεται με l_R στο παρακάτω διάγραμμα) είναι περίπου δέκα φορές μικρότερο από το «θερμικό πάχος» (l_L) της φλόγας το οποίο ορίζεται με βάση την κλίση της θερμοκρασίας. Έτσι ορίζεται ένας νέος αριθμός Karlovitz, υπολογισμένος με βάση τον χαρακτηριστικό χρόνο της ζώνης αντίδρασης, ο οποίος συμβολίζεται με Ka_R ή Ka_δ και ο οποίος μπορεί εύκολα να δειχθεί (Veynante & Vervisch 2002) ότι είναι 100 φορές περίπου μικρότερος από τον αριθμό Karlovitz (Ka ή Ka_L) του θερμικού πάχους της φλόγας. Έτσι στο διάγραμμα προστέθηκε η καμπύλη για $Ka_R = 1$ (δηλαδή $Ka \approx 100$) το οποίο αντιπροσωπεύει το άνω όριο για το οποίο η περιοχή της ζώνης αντίδρασης της φλόγας δεν επηρεάζεται από τις δίνες Kolmogorov.

Άλλες χαρακτηριστικές καμπύλες οι οποίες απεικονίζονται στα διαγράμματα αυτού του είδους είναι η καμπύλη $u'_0 = S_L$, η $Re_0 = 1$ και η $Da = 1$. Η καμπύλη $u'_0 = S_L$ χωρίζει τις περιοχές στις οποίες η ένταση της τύρβης είναι μικρότερη ή μεγαλύτερη από την ταχύτητα στρωτής καύσης. Ο διαχωρισμός αυτός καθορίζει τον βαθμό στον οποίο η τύρβη παραμορφώνει τη φλόγα. Έτσι αν $u'_0 < S_L$ τότε η τύρβη παραμορφώνει απλά το μέτωπο της φλόγας ενώ αν $u'_0 > S_L$ επιδρά σε μεγαλύτερο βαθμό σε αυτή. Ο αριθμός Re_0 είναι ο αριθμός Reynolds της ολοκληρωτικής κλίμακας της τύρβης ο οποίος ισούται με

$$Re_0 = \frac{u'_0 l_0}{\nu} = \frac{u'_0}{S_L} \frac{l_0}{\delta_L} \quad (2.4.6)$$

όπου γίνεται χρήση της σχέσης $\nu = S_L \delta_L$ η οποία έπεται από τις (2.4.1) και (2.4.2) και ισοδυναμεί με θεώρηση αριθμού Reynolds στρωτής καύσης ίσου με μονάδα (δες και §2.2.3). Συνεπώς η εξίσωση

της καμπύλης $Re_0 = 1$ στο διάγραμμα είναι η $\frac{u'_0}{S_L} = \left(\frac{l_0}{\delta_L} \right)^{-1}$. Αριθμός Re_0 ίσος με την μονάδα

υποδηλώνει πολύ ασθενή τύρβη με αποτέλεσμα το όριο αυτό να χρησιμοποιείται στα διαγράμματα σαν όριο μεταξύ στρωτής και τυρβώδους καύσης. Η καμπύλη $Da = 1$ χωρίζει το διάγραμμα σε δύο περιοχές σύμφωνα με το κριτήριο του αριθμού Damköhler που αναφέραμε στην αρχή της παραγράφου. Από τη σχέση (2.4.4) προκύπτει ότι η καμπύλη αυτή περιγράφεται στο διάγραμμα από την εξίσωση

$$\frac{u'_0}{S_L} = \frac{l_0}{\delta_L} \quad (2.4.7)$$

Τέλος, χρησιμοποιώντας τις σχέσεις για τις κλίμακες Kolmogorov (§2.1.3) και κάνοντας την θεώρηση της σχέσης $\nu = S_L \delta_L$, προκύπτει ότι αριθμός Karlovitz (2.4.4) γράφεται και σαν

$$Ka = \left(\frac{u'_0}{S_L} \right)^{3/2} \left(\frac{l_0}{\delta_L} \right)^{-1/2} \quad (2.4.8)$$

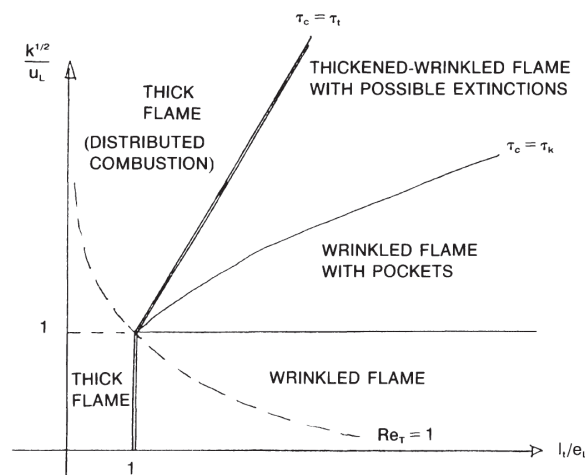
η οποία με βάση τις προαναφερθείσες σχέσεις για το Re_0 και Da οδηγεί στην εξής συσχέτιση για τα τρία βασικά αδιάστατα μεγέθη της τυρβώδους καύσης

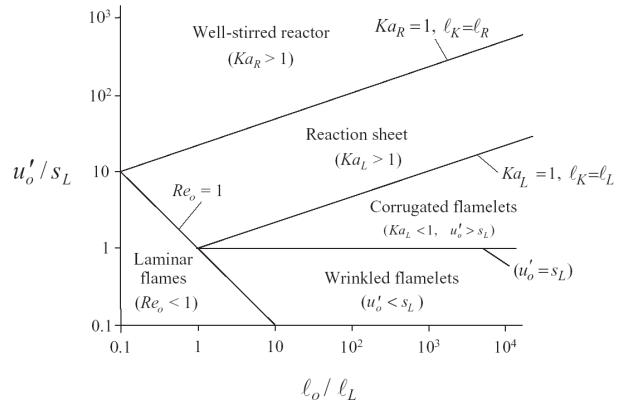
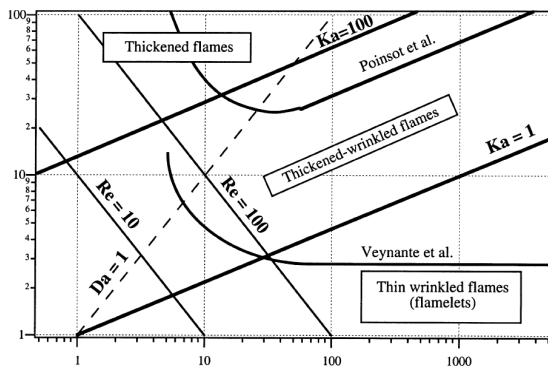
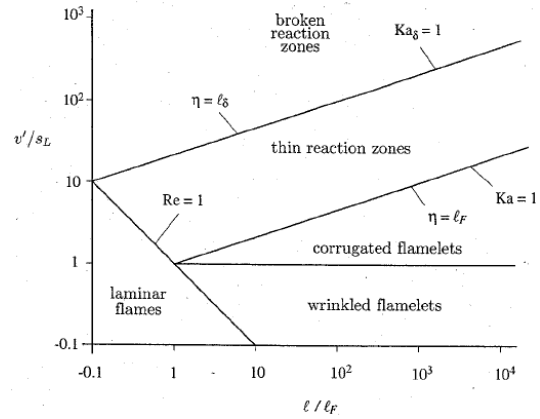
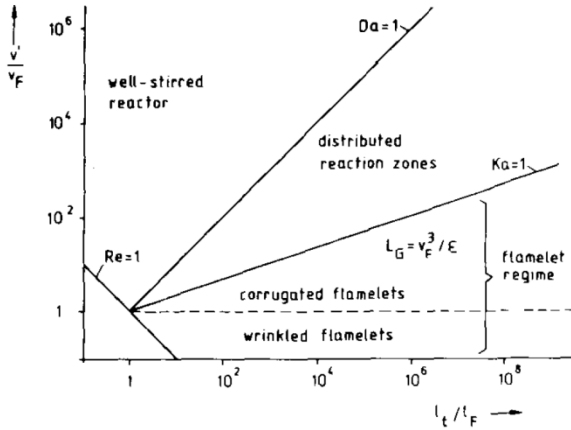
$$Re_0 = Da^2 Ka^2 \quad (2.4.9)$$

η οποία οδηγεί στο συμπέρασμα ότι μόνο δύο από τα πέντε βασικά μεγέθη (Re_0 , Da , Ka , u'_0/S_L , l_0/δ_L) είναι ανεξάρτητα. Οι σχέσεις που μας δίνουν τα Re_0 , Da , Ka συναρτήσεως των u'_0/S_L και l_0/δ_L που είναι οι άξονες του διαγράμματος Borghi συνοψίζονται στον παρακάτω πίνακα.

Πίνακας 2.4.1: Χαρακτηριστικά μεγέθη τυρβώδους καύσης συναρτήσεως των χαρακτηριστικών λόγων u'_0/S_L και l_0/δ_L του διαγράμματος Borghi.

Μέγεθος	Εξίσωση
Re_0	$Re_0 = \left(\frac{u'_0}{S_L} \right) \left(\frac{l_0}{\delta_L} \right)$
Da	$Da = \left(\frac{u'_0}{S_L} \right)^{-1} \left(\frac{l_0}{\delta_L} \right)$
Ka	$Ka = \left(\frac{u'_0}{S_L} \right)^{3/2} \left(\frac{l_0}{\delta_L} \right)^{-1/2}$





Σχήμα 2.4.2: Χρονική εξέλιξη των χαρακτηριστικών διαγραμμάτων τυρβώδους καύσης και των κατηγοριών καύσης. Από Αριστερά στα δεξιά και από πάνω προς τα κάτω: Borghi (1985), Peters (1986), Peters (1999; 2000), Veynante & Vervisch (2002), Law (2006). Στον κατακόρυφο και στον οριζόντιο άξονα έχουμε το λόγο των χαρακτηριστικών ταχυτήτων και μηκών αντίστοιχα της τύρβης και της καύσης (συμβολισμός στα διαγράμματα: l_t , l ή l_0 για την ολοκληρωτική κλίμακα χώρου της τύρβης, e_L , l_F ή l_L για το πάχος της στρωτής φλόγας, u_L , V_F ή S_L για τη στρωτή ταχύτητα καύσης). Χαρακτηριστικές καμπύλες ορίζουν τις διάφορες περιοχές της τυρβώδους καύσης.

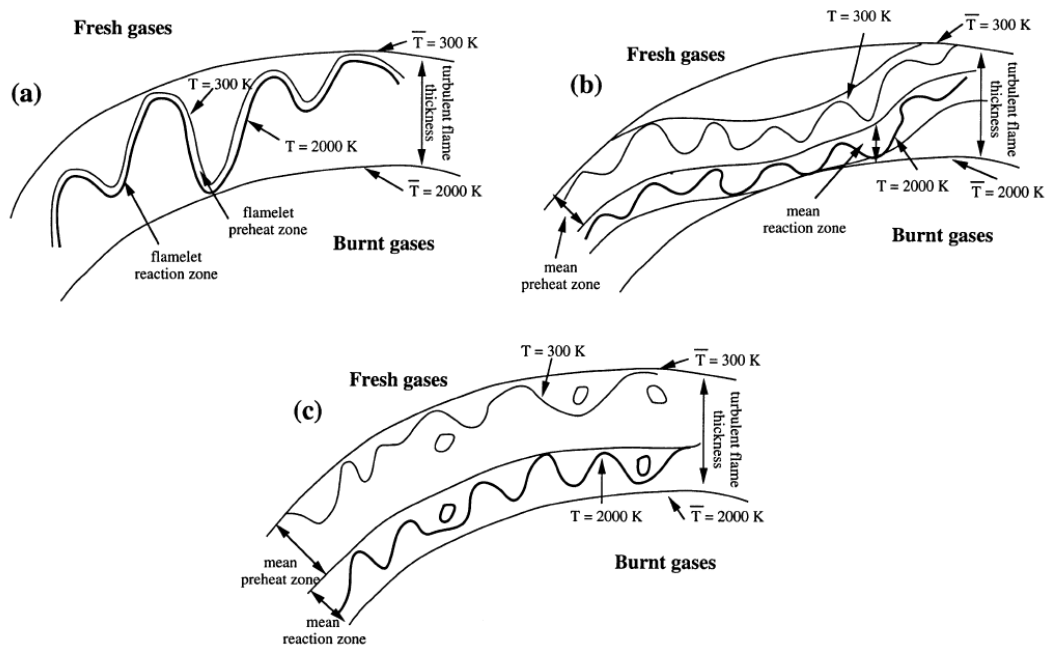
Στο Σχήμα 2.4.2 απεικονίζεται η ιστορική εξέλιξη του διαγράμματος Borghi. Παρατηρούμε ότι ίδιες περιοχές των διαγραμμάτων πολλές φορές αναφέρονται με διαφορετικά ονόματα. Συνοψίζοντας όλα τα παραπάνω, οι βασικές κατηγορίες στις οποίες χωρίζεται η τυρβώδης καύση ($Re_0 > 1$) είναι (Veynante & Vervisch 2002):

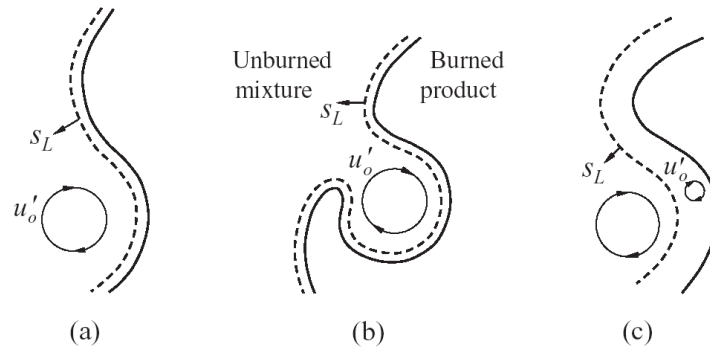
- $Ka < 1$: Περιοχή φλογιδίων (flamelets) ή λεπτής ρυτιδισμένης φλόγας (thin wrinkled flame). Στην περιοχή αυτή οι δίνες δεν επηρεάζουν την εσωτερική δομή της φλόγας αλλά επηρεάζουν μόνο την συνολική μορφή της επιφάνειάς της. Η περιοχή αυτή χωρίζεται στις εξής υποκατηγορίες:
 - $u'_0 < S_L$: Περιοχή ρυτιδιασμένης φλόγας (wrinkled flame). Στην περιοχή αυτή κυριαρχεί ο στρωτός χαρακτήρας της φλόγας, καθώς η τύρβη είναι ασθενής και δε μπορεί να επηρεάσει τη δομή της.
 - $u'_0 > S_L$: Περιοχή ρυτιδιασμένης φλόγας με θύλακες (wrinkled flame with rockets/ corrugated flames). Η τύρβη εξακολουθεί να μην μπορεί να επηρεάσει την εσωτερική δομή της φλόγας, αλληλεπιδρά όμως έντονα με αυτή οδηγώντας

σε ισχυρότερο ρυτίδιασμα της επιφάνειας της, ενώ η δημιουργία θυλάκων (δηλαδή τμημάτων καυσίμου μέσα στην καμένη περιοχή ή προϊόντων στην άκαυστη) είναι πιθανή.

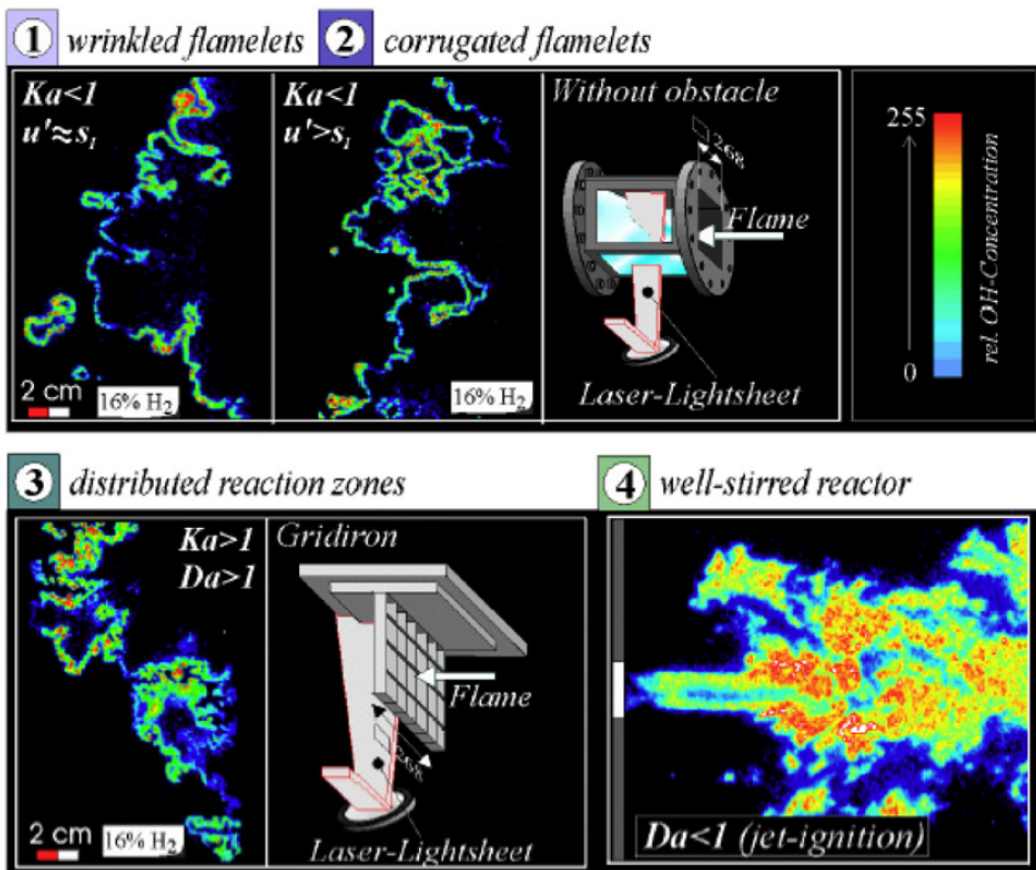
- $1 < Ka < 100$: Περιοχή *παχιάς ρυτιδιασμένης φλόγας* (thickened wrinkled flame) ή *λεπτής ζώνης αντίδρασης* (thin reaction zone ή reaction sheet) ή *παχιών φλογιδίων* (thickened flamelets). Στην περιοχή αυτή οι τυρβώδεις δομές επηρεάζουν την ζώνη προθέρμανσης της φλόγας αλλά δεν επηρεάζουν τη ζώνη αντίδρασης η οποία διατηρεί τα στρωτά χαρακτηριστικά της.
- $Ka > 100$: Περιοχή *παχιάς φλόγας* (thickened flame) ή *καλά αναμεμειγμένης καύσης* (well-stirred reactor). Στην περιοχή αυτή η τύρβη επηρεάζει την εσωτερική δομή της φλόγας, τόσο τη ζώνη προθέρμανσης όσο και τη ζώνη αντίδρασης, με αποτέλεσμα να μην διακρίνονται δομές στρωτής φλόγας. Η πιθανότητα τοπικής ή ολικής κατάσβεσης της φλόγας (flame extinction/quenching) σε αυτή την περιοχή είναι μεγάλη λόγω υπερβολικής παραμόρφωσης της φλόγας και πτώσης της θερμοκρασίας. Στην περιοχή αυτή η τύρβη είναι υπεύθυνη για την ανάμιξη του καυσίμου του οξειδωτικού και της θερμότητας, κυριαρχώντας πάνω στη θερμική και μοριακή διάχυση οι οποίες είναι υπεύθυνες για την διάδοση της φλόγας όταν η τύρβη είναι χαμηλής έντασης.

Δύο πολύ καλές γραφικές απεικονίσεις της περιοχής της φλόγας με την οποία μπορούμε να καταλάβουμε καλύτερα τις παραπάνω κατηγορίες γίνεται στο Σχήμα 2.4.3. Στο πρώτο σχήμα διακρίνεται το πάχος της φλόγας, οι περιοχές προθέρμανσης και αντίδρασης καθώς και οι θερμοκρασιακές περιοχές της κάθε περίπτωσης. Στο δεύτερο απεικονίζεται ο τρόπος με τον οποίο αλληλεπιδρά μία δίνη με το μέτωπο της φλόγας. Στο Σχήμα 2.4.4 παρουσιάζεται μια πολύ καλή πειραματική απεικόνιση της κάθε κατηγορίας στις οποίες διακρίνεται τόσο η μορφή του μετώπου φλόγας όσο και η ζώνη αντίδρασης.





Σχήμα 2.4.3: Πάνω: Γραφική απεικόνιση των τριών βασικών περιοχών τυρβώδους καύσης (Veynante & Vervisch 2002): (a) Περιοχή φλογιδίων, (b) Περιοχή παχιάς ρυτιδιασμένης φλόγας και (c) Περιοχή παχιάς φλόγας. Κάτω: Γραφική απεικόνιση αλληλεπίδρασης μιας δίνης με το μέτωπο τις φλόγας: (a) Περιοχή ρυτιδιασμένης φλόγας ($u'_0 < S_L$), (b) περιοχή ρυτιδιασμένης φλόγας με θύλακες ($u'_0 > S_L$) και (c) περιοχή παχιάς φλόγας ($Ka > 1$).



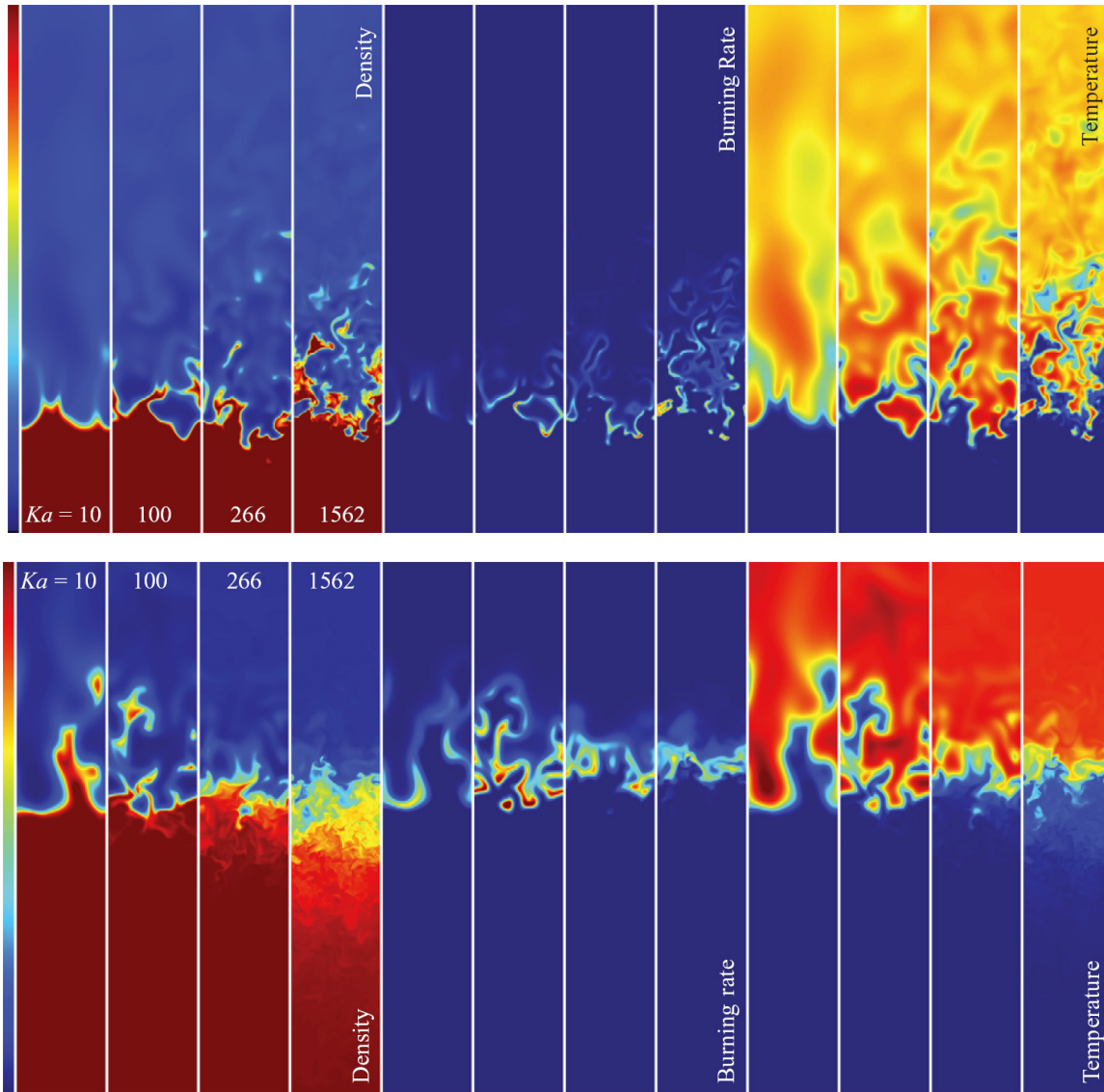
Σχήμα 2.4.4: Πειραματική απεικόνιση (μέθοδος PLIF) των διάφορων κατηγοριών τυρβώδους καύσης (Ciccarelli & Dorofeev 2008).

Η παραπάνω ανάλυση και τα διαγράμματα Borghi πρέπει να χρησιμοποιούνται ποιοτικά και με μεγάλη προσοχή καθώς έχουν προέλθει με βάση υποθέσεις οι οποίες είναι προσεγγιστικές και μπορεί να μην έχουν ισχύ. Έτσι ο άμεσος προσδιορισμός της περιοχής καύσης δεν είναι εύκολος. Κάποια από τα προβλήματα στη χρήση των διαγραμμάτων Borghi είναι τα εξής:

- Η ανάλυση έγινε με την υπόθεση ομογενούς και ισότροπης τύρβης η οποία δεν επηρεάζεται από την απελευθέρωση ενέργειας, το οποίο δεν ισχύει στις περιπτώσεις καύσης
- Οι απαιτούμενες ποσότητες δεν είναι πάντα καλά ορισμένες. Για παράδειγμα το πάχος της στρωτής φλόγας μπορεί να υπολογιστεί με διάφορους τρόπους (§2.2.3) οπότε να επηρεαστούν τα όρια ανάμεσα στις διάφορες περιοχές καύσης
- Όλα τα όρια των περιοχών τα οποία παρουσιάστηκαν είναι προσεγγιστικά και δεν έχουν προέλθει από ακριβείς υπολογισμούς. Η μετάβαση από τη μία περιοχή στην άλλη γίνεται ομαλά χωρίς να είναι απαραίτητη η ύπαρξη ενός αυστηρά ορισμένου κρίσιμου σημείου, ενώ η μετάβαση μπορεί να εξαρτάται και από άλλες συνθήκες. Έτσι τα όρια έχουν πιο πολύ την έννοια της τάξης μεγέθους. Για παράδειγμα το όριο του αριθμού Karlovitz που χωρίζει την περιοχή φλογιδίων από τις παχιές φλόγες μπορεί να είναι 0.1 ή 10 αντί για 1.
- Ασταθή φαινόμενα και φαινόμενα καμπυλότητας της φλόγας έχουν αμεληθεί. Πειραματικά και υπολογιστικά ευρήματα δείχνουν ότι οι δίνες μικρής κλίμακας έχουν μικρό χρόνο ζωής και τελικά μικρότερη επίδραση στη φλόγα από ότι αναμενόταν, οπότε το όριο του 1 για τον αριθμό Karlovitz πρέπει να αυξηθεί. Ο Driscoll (2008) αναφέρει ότι δεν υπάρχει ακόμα πειραματική επιβεβαίωση ότι οι δίνες μπορούν να εισέλθουν στη ζώνη προθέρμανσης της φλόγας λόγω της πολύ μικρής κλίμακας του φαινομένου, ενώ παραθέτει μια σειρά από αναφορές στις οποίες η περιοχή λεπτών φλογιδίων υπάρχει ακόμα για $Ka > 10$. Τα στοιχεία αυτά δείχνουν ότι οι δίνες στην περιοχή Kolmogorov είναι πολύ αδύναμες και καταστρέφονται γρήγορα από τις συνεκτικές δυνάμεις οπότε δεν είναι δυνατόν να διαταράξουν τη φλόγα. Έτσι νέα κριτήρια πρέπει να επιβληθούν για την απόκλιση από την περιοχή φλογιδίων.
- Η ανάλυση που έγινε υποθέτει μη αντιστρεπτή χημική αντίδραση ενός βήματος. Στην πραγματικότητα πολλές ενδιάμεσες αντιδράσεις με ενδιάμεσα προϊόντα εμπλέκονται στην καύση (§2.2) οι οποίες αντιστοιχούν σε ένα μεγάλο εύρος χημικών κλιμάκων μήκους. Έτσι για παράδειγμα η οξειδωση του προπανίου γίνεται σχετικά γρήγορα σε σύγκριση με τις τυρβώδεις κλίμακες ενώ από την άλλη ο σχηματισμός του διοξειδίου του άνθρακα από το μονοξείδιο γίνεται με πολύ πιο αργό ρυθμό.

Στην εργασία των Aspden et al. (2011) γίνεται υπολογιστικός προσδιορισμός (με τη μέθοδο DNS) της μετάβασης στην περιοχή της παχιάς φλόγας για προ-αναμεμειγμένο μείγμα υδρογόνου αέρα για λόγους ισοδυναμίας 0.31 και 0.4. Οι αριθμοί Karlovitz που εξετάστηκαν κυμαίνονταν από 10 έως 1562. Στο Σχήμα 2.4.5 απεικονίζεται η μορφή της φλόγας όπως αυτή υπολογίστηκε από την προσομοίωση, για λόγους ισοδυναμίας $\phi=0.31$ και $\phi=0.4$ για αριθμούς Karlovitz ίσους με 10, 100, 266 και 1562. Στην περίπτωση $\phi=0.31$, βλέπουμε ότι ακόμα και για $Ka=1562$ η φλόγα δεν εμπίπτει στην περιοχή της παχιάς φλόγας καθώς, αν και το μέτωπο της φλόγας έχει διαταραχθεί με τη δημιουργία θυλάκων να είναι ορατή, δεν έχει επηρεαστεί η εσωτερική δομή της. Από την άλλη μεριά στην περίπτωση $\phi=0.4$, η περιοχή της παχιάς φλόγας είναι σαφώς ορατή για $Ka=1562$, καθώς δεν υπάρχει σαφής επιφάνεια που να ορίζει το μέτωπο της φλόγας ενώ και ο ρυθμός καύσης έχει μειωθεί. Οι Aspden et al. (2011) κατέληξαν στο ότι η αστάθεια θερμοδιάχυσης (η οποία κυριαρχεί στην καύση αραιού μείγματος υδρογόνου) είναι υπεύθυνη για την μεγάλη απόκλιση των ορίων μετάβασης των περιοχών καύσης από τα θεωρητικά. Η αστάθεια αυτή κάνει τα χαρακτηριστικά της θεωρητικά επίπεδης και ευσταθούς φλόγας υδρογόνου να είναι μη φυσικά

καθώς μια τέτοια φλόγα δεν μπορεί πρακτικά να υπάρξει με αποτέλεσμα να αλλοιώνονται τα συνηθισμένα όρια (αριθμοί Karlovitz και Damkohler) των βασικών περιοχών καύσης.



Σχήμα 2.4.5: Υπολογιστική (DNS) απεικόνιση της φλόγας από τη καύση υδρογόνου (ισοϋψείς πυκνότητας, ρυθμού καύσης και θερμοκρασίας) για τρεις διαφορετικούς αριθμούς Karlovitz, 10, 100, 266 και 1562 για δύο διαφορετικούς λόγους ισοδυναμίας, $\phi=0.31$ (πάνω) και $\phi=0.4$ (κάτω) (Aspden et al. 2011).

Τέλος, πρέπει να αναφέρουμε την ύπαρξη κάποιων ειδικών διαγραμμάτων κατηγοριών τυρβώδους καύσης, που αφορούν τις μεθοδολογίες LES και DNS. Ένα παράδειγμα τέτοιου διαγράμματος για τη περίπτωση του LES παρουσιάζεται στην εργασία των Pitsch & De Lageneste (2002). Στις περιπτώσεις DNS, αυτό που μελετάτε είναι η αλληλεπίδραση ενός ζευγαριού δινών με το μέτωπο μια φλόγας. Παραδείγματα διαγραμμάτων που έχουν προκύψει από τέτοιες μελέτες είναι αυτά των Poinsot et al. (1991) και Vasudeo et al. (2010).

2.4.2 Τυρβώδης ταχύτητα καύσης

Κατ' αναλογία με τη στρωτή καύση, στην τυρβώδη ορίζουμε την **τυρβώδη ταχύτητα καύσης** και το **τυρβώδες πάχος φλόγας** τα οποία τα συμβολίζουμε με S_T και δ_T αντίστοιχα. Η έννοια της τυρβώδους ταχύτητας καύσης γεννήθηκε σαν επέκταση της έννοιας της στρωτής ταχύτητας καύσης. Παρόλο όμως που η στρωτή ταχύτητα καύσης είναι μια καλά ορισμένη ποσότητα δεν ισχύει το ίδιο και για την τυρβώδη (Poinsot & Veynante 2005), ενώ υπάρχουν και δυσκολίες στην πειραματική της μέτρηση. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα να μην θεωρείται εγγενής ποσότητα του φαινομένου (Borghì 1985). Μια ανασκόπηση των προβλημάτων μέτρησης της τυρβώδους ταχύτητας καύσης παρουσιάζεται στην εργασία των Bradley et al. (2011) καθώς και των Lipatnikov & Chomiak (2010, §5.2). Ο Driscoll (2008) στην εργασία ανασκόπησης του παρουσιάζει τρεις συνήθεις ορισμούς για την τυρβώδη ταχύτητα καύσης:

$$\text{Βάσει συνολικού ρυθμού κατανάλωσης (GC):} \quad S_{T,GC} = \frac{\dot{m}_u}{\rho_u A_{c=0.5}}$$

$$\text{Βάσει τοπικής ταχύτητας κατανάλωσης (LC):} \quad S_{T,LC} = S_{L0} I_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \Sigma d\eta$$

$$\text{Βάσει τοπικής ταχύτητας μετατόπισης (LD):} \quad S_{T,LD} = (V_{Flame} - V_{Gas})_{LE} \cdot \mathbf{n}_{LE}$$

επισημαίνοντας ότι για μία δεδομένη φλόγα οι παραπάνω ορισμοί δεν δίνουν την ίδια ταχύτητα καθώς και ότι δεν υπάρχει ισχυρό επιχειρήμα για την επιλογή κάποιου εκ των ορισμών. Στον πρώτο ορισμό, η τυρβώδης ταχύτητα καύσης είναι ανάλογη της παροχής των αντιδρώντων. Ο ορισμός αυτός έχει προκύψει με βάση τον ακόλουθο λογικό συλλογισμό: μια επίπεδη τυρβώδη φλόγα σε χρόνο Δt θα έχει καλύψει απόσταση ίση με $S_{T,GC} \Delta t$ έχοντας καταναλώσει όγκο αντιδρώντων ίσο με $S_{T,GC} \Delta t A_{c=0.5}$ και μάζα ίση με $m_u = \rho_u S_{T,GC} \Delta t A_{c=0.5}$ όπου $A_{c=0.5}$ η «μέση» επιφάνεια της φλόγας. Αν διαιρέσουμε την τελευταία σχέση με Δt προκύπτει ο ζητούμενος ορισμός. Σαν μέση επιφάνεια της φλόγας ορίζεται η ίσο-επιφάνεια $c=0.5$ όπου c η μεταβλητή προόδου. Στον δεύτερο ορισμό, η πυκνότητα της τυρβώδους φλόγας Σ πρέπει να είναι γνωστή ώστε να υπολογιστεί η τοπική ταχύτητα καύσης. Στον τρίτο ορισμό, σαν V_{Flame} ορίζεται η απόλυτη ταχύτητα της φλόγας ενώ σαν V_{Gas} η απόλυτη ταχύτητα των αντιδρώντων μέσα στα οποία προελαύνει η φλόγα. Ο υπολογισμός των ταχυτήτων αυτών γίνεται στην προελαύνουσα άκρη (leading edge) του μετώπου. Για παράδειγμα, η τυρβώδης ταχύτητα καύσης για την ίδια φλόγα έχει μετρηθεί 2 με 3 φορές μεγαλύτερη χρησιμοποιώντας τον τρίτο ορισμό σε σχέση με τον δεύτερο. Οι Lipatnikov & Chomiak (2010, §5.2) αναφέρουν μια σειρά από μεταβατικά και γεωμετρικά φαινόμενα λόγω των οποίων η ταχύτητα μετατόπισης είναι μεγαλύτερη από την ταχύτητα κατανάλωσης.

Η κύρια επίδραση της τύρβης στη φλόγα είναι η αύξηση τόσο του ρυθμού καύσης όσο και του φαινομενολογικού πάχους της φλόγας. Η εξάρτηση του ρυθμού καύσης από την ένταση της τύρβης (u'_0) είναι στην αρχή αναλογική, δηλαδή η αύξηση του u'_0 οδηγεί σε (σχεδόν γραμμική) αύξηση του ρυθμού καύσης. Στη συνέχεια η εξάρτηση αυτή αρχίζει να μικραίνει, δηλαδή η αύξηση της ταχύτητας είναι μικρή σε σχέση με την αύξηση του u'_0 , ένα φαινόμενο το οποίο ονομάζεται φαινόμενο κάμψης (bending effect). Τελικά για πολύ μεγάλες τιμές τύρβης θα πραγματοποιηθεί

σβέση της καύσης. Η πρόβλεψη του φαινομένου κάμψης είναι δύσκολη ενώ η πρόβλεψη της σβέσης (quenching limit) σχεδόν αδύνατη (Poinsot & Veynante 2005).

Ένας βασικός μηχανισμός αύξησης της ταχύτητας καύσης είναι η αύξηση στην επιφάνεια της φλόγας η οποία προκαλείται από την παραμόρφωση της (ρυτίδιασμα) λόγω της παρουσίας της τύρβης. Μια σχέση που μπορεί να δειχθεί εύκολα κάνοντας την υπόθεση ότι η τυρβώδης φλόγα κινείται τοπικά με την ταχύτητα στρωτής καύσης S_L είναι η:

$$\frac{S_T}{S_L} = \frac{A_T}{A} \quad (2.4.10)$$

όπου A , A_T οι επιφάνειες της στρωτής και της τυρβώδους φλόγας. Η σχέση αυτή μας λέει ότι η αύξηση της ταχύτητας τυρβώδους καύσης οφείλεται στην αύξηση της επιφάνειας της φλόγας καθώς αυξάνεται ο ρυθμός κατανάλωσης του καυσίμου. Καθώς ο λόγος των επιφανειών αυξάνει με την αύξηση του αριθμού Reynolds (περισσότερη τύρβη), το ίδιο συμβαίνει και με την ταχύτητα καύσης.

Στην τυρβώδη καύση, ο υπολογισμός της τυρβώδους ταχύτητας καύσης είναι κύριας σημασίας. Πολλές σχέσεις έχουν προταθεί στην βιβλιογραφία. Στον παρακάτω πίνακα παρουσιάζονται κάποιες από αυτές. Επιπλέον σχέσεις παρουσιάζονται στις εργασίες των Dahoe et al. (2013), Lipatnikov & Chomiak (2002) και Gülder (1990). Οι σχέσεις αυτές συνήθως βασίζονται σε θεωρητικούς συλλογισμούς που εμπεριέχουν παραδοχές, ενώ συνήθως είναι κατάλληλες μόνο για μια εκ των περιοχών καύσης. Παρόλο που οι περισσότερες έχουν αναπτυχθεί για την περιοχή των φλογιδίων, πολλές από αυτές δίνουν ικανοποιητικά αποτελέσματα και στις άλλες περιοχές καύσης. Αυτό οφείλεται τόσο στα προβλήματα που συσχετίζονται με τον ορισμό αυτών περιοχών (§2.4.1), όσο και με την επίδραση της καύσης στην τύρβη η οποία είναι κατασταλτική (Poinsot & Veynante 2005, §5.1.2). Όλες οι προτεινόμενες σχέσεις περιέχουν την ταχύτητα στρωτής καύσης και τις τυρβώδεις διαταραχές, ενώ κάποιες χρησιμοποιούν μόνο αυτά τα μεγέθη. Πολλές περιέχουν σταθερές οι οποίες έχουν υπολογιστεί με βάση συγκεκριμένα πειράματα, με αποτέλεσμα να μην έχουν καθολική ισχύ. Η σύγκριση 11 σχέσεων τυρβώδους ταχύτητας καύσης ως προς το ίδιο πείραμα που έγινε από τους Dahoe et al. (2013), φανερώνει τις σημαντικές διαφορές που μπορεί να υπάρχουν στα αποτελέσματα μεταξύ των σχέσεων αλλά και σε σύγκριση με το πείραμα.

Το πρόβλημα του υπολογισμού ενός καθολικού μοντέλου υπολογισμού της τυρβώδους ταχύτητας καύσης είναι ακόμα ανοιχτό. Οι δυσκολίες στην επίλυση αυτού του προβλήματος ξεκινάνε από την έλλειψη πλήρους κατανόησης της τύρβης, ακόμα και σε ροές χωρίς καύση. Η τυρβώδης καύση είναι ένα φαινόμενο το οποίο εξαρτάται από πλήθος παραγόντων όπως η τύρβη, η θερμοδυναμική, η χημική κινητική και η διάχυση, καθώς και από την μεταξύ τους αλληλεπίδραση. Η λεπτομερής περιγραφή όλων των παραπάνω παραγόντων δεν είναι εφικτή σε προβλήματα μέσης ή μεγάλης κλίμακας, με αποτέλεσμα να γίνεται προσπάθεια της ενσωμάτωσης τους στην έννοια της τυρβώδους ταχύτητας καύσης.

Πίνακας 2.4.2: Σχέσεις υπολογισμού τυρβώδους ταχύτητας προ-αναμεμειγμένης καύσης.

A/A	Σχέση υπολογισμού	Πληροφορίες
1	$\frac{S_T}{S_L} = 1 + \frac{u'_0}{S_L}$	Από τις πρώτες προτεινόμενες σχέσεις (1940)

2	$\frac{S_T}{S_L} = 1 + a \left(\frac{u'_0}{S_L} \right)^n$	Βελτίωση της παραπάνω σχέσης. Οι σταθερές α και n είναι της τάξης μεγέθους της μονάδας. Διάφορες τιμές έχουν προταθεί όπως α=1 και n=2
3	$\frac{S_T}{S_L} = \left\{ \beta \left[1 - (1 - \beta^{-1}) \exp \left(-a \frac{u'_0}{S_L} \right) \right] \right\}^{D-2}$	Φράκταλ μοντέλο για την περιοχή φλογιδίων (μικρή και μεσαία τύρβη). $D = 2.32 - 2.40$ (Gouldin 1987)
4	$\frac{S_T}{S_L} = \exp \left[\frac{u_0'^2}{S_T^2} \right]$	Σχέση προερχόμενη από την RNG μέθοδο (Yakhot 1988)
5	$\frac{S_T}{S_L} = 1 + C \cdot \text{Re}_{l_0}^{1/4} \left(\frac{u'_0}{S_L} \right)^{1/2}$, $\text{Re}_{l_0} = \frac{u'_0 l_0}{\nu}$ $\frac{S_T}{S_L} \propto \text{Re}_{l_0}^{1/4} \cdot \exp \left\{ 0.4 \left(\frac{u'_0}{S_L} \right)^{1/2} \right\}$ $\frac{S_T}{u'_0} \approx 6.4 \left(\frac{u'_0}{S_L} \right)^{-3/4}$	Θεωρητικές σχέσεις για την περιοχή φλογιδίων (με $C = 0.6$, βέλτιστη συμφωνία με πειράματα για $C = 0.62$), την περιοχή της ρυτιδιασμένης φλόγας με θύλακες και για την περιοχή παχιάς φλόγας. Σύγκριση με 200 πειραματικά σημεία για 15 μείγματα από 8 ερευνητικές ομάδες (Gülder 1990)
6	$\frac{S_T}{S_L} = 1 + S_L^{1/4} \left(\frac{u'_0}{S_L} \right)$	Σχέση από πειραματικά δεδομένα μειγμάτων μεθανίου και υδρογόνου, $0 \leq u'_0 \leq 2.4 \text{ m/s}$ (Leuckel et al. 1990)
7	$\frac{S_T}{u'_k} = 0.88 (K \cdot Le)^{-0.3}$, $K = 0.157 \left(\frac{u'_0}{S_L} \right)^2 \text{Re}_{l_0}^{-0.5}$	Υπολογισμός με βάση τον Karlovitz παράγοντα παραμόρφωσης (stretch factor) και του αριθμού Lewis (Bradley et al. 1992)
8	$S_T = 0.51 Da^{1/4} u'_0 = 0.51 \left(\frac{l_0 S_L^2}{u'_0 D_{th}} \right)^{1/4} u'_0 \Rightarrow$ $S_T = 0.51 D_{th}^{-1/4} l_0^{1/4} S_L^{1/2} u_0'^{3/4}$	Μοντέλο για την περιοχή φλογιδίων και παχιάς ρυτιδιασμένης φλόγας. Προσδιορισμός της σταθεράς ύστερα από σύγκριση με μεγάλο εύρος πειραμάτων (Zimont & Lipatnikov 1995), (Zimont et al. 1998)
9	$\frac{S_T}{S_L} = 1 + (1 + Da^{-2})^{-1/4} \left(\frac{u'_0}{S_L} \right)$	Θεωρητικά κατάλληλο για όλες τις κατηγορίες καύσης λόγω της εξάρτησης από τον αριθμό Da (Schmid et al. 1998)
10	$\frac{S_T}{S_L} = 1 + 0.06 Da^{0.59} \left(\frac{u'_0}{S_L} \right)$	Από πειραματική ανάλυση καύσης μεθανίου. Εξεταζόμενο εύρος τιμών: $12 \leq Da \leq 911$, $0.7 \leq \phi \leq 1.4$, $0.14 \leq u' \leq 5.87 \text{ m/s}$ (Shy et al. 2000)
11	$\frac{S_T}{S_L} = b_1 + b_2 \left(\frac{u'_0}{S_L} \right)^{b_3} \left(\frac{L}{\delta_L} \right)^{b_4} Le^{b_5}$	Γενική σχέση στην οποία μπορούν να ενταχθούν τα περισσότερα μοντέλα (Ciccarelli & Dorofeev 2008)

12	$\frac{S_T}{S_L} = 1 + C \cdot Da^a \left(\frac{u'_0}{S_L} \right)^b$	Από διαστατική ανάλυση (Dahoe et al. 2013)
----	--	--

2.4.3 Τύρβη που παράγεται από το μέτωπο της φλόγας

Η ικανότητα της φλόγας να επιταχύνεται και να αλλάζει το πεδίο ροής στην άκαυστη περιοχή, δείχθηκε θεωρητικά το 1944 από τον Darrieus και Landau μέσω της υδροδυναμικής αστάθειας (§2.3.1). Ο Scurlock το 1948 αναλύοντας πειραματικά αποτελέσματα ήταν ο πρώτος (Lipatnikov & Chomiak 2010) ο οποίος έκανε την υπόθεση της παραγόμενης από την φλόγα τύρβης. Ο Scurlock υπέθεσε ότι αυτή η τύρβη αυξάνει την ταχύτητα τυρβώδους καύσης S_T με τον ίδιο τρόπο που την αυξάνει και η τύρβη που συναντάει η φλόγα στο άκαυστο μείγμα, με αποτέλεσμα οι τυρβώδεις διακυμάνσεις από αυτές τις δύο πηγές να μπορούν να προστεθούν σε μια συνολική διακύμανση u'_i . Έτσι συμπέρανε ότι η νέα αυτή συνολική διακύμανση πρέπει να χρησιμοποιηθεί αντί της u'_0 στις σχέσεις υπολογισμού της ταχύτητας καύσης (π.χ. Πίνακας 2.4.2).

Οι Karlovitz et al. (1951) χρησιμοποίησαν την έννοια της τύρβης που παράγεται από το μέτωπο της φλόγας για να αιτιολογήσουν την απόκλιση πειραματικής μετρούμενης ταχύτητας καύσης από αυτή που προέβλεπαν τα θεωρητικά μοντέλα. Τον μηχανισμό δημιουργίας τύρβης τον θεώρησαν σε μια ρυτιδιασμένη επιφάνεια η οποία χωρίζει την καμένη από τη άκαυστη περιοχή και η οποία βρίσκεται σε τυρβώδες περιβάλλον. Λόγω της διατήρησης της μάζας, η κάθετη στην επιφάνεια ταχύτητα αυξάνει από S_L σε $E \cdot S_L$ (δες και §2.2.2), με αποτέλεσμα να έχουμε μια αύξηση της ταχύτητας στην καμένη περιοχή κατά $(E-1) \cdot S_L$ η οποία ουσιαστικά επιβάλλεται από τη φλόγα. Καθώς η επιφάνεια ρυτιδιάζει, η κατεύθυνση αυτής την ταχύτητα ταλαντώνεται με αποτέλεσμα να μπορεί να αναλυθεί σε μια μέση τιμή και σε μια διακύμανση u'_{fg} . Τη διακύμανση αυτή την ονόμασε «τύρβη που παράγεται από το μέτωπο της φλόγας». Η τύρβη αυτή διαχέεται στην άκαυστη περιοχή προκαλώντας το επιπλέον ρυτιδίασμα της επιφάνειας και κατά συνέπεια την επιτάχυνση της. Κάνοντας διάφορες υποθέσεις, τις διακυμάνσεις της τύρβης που παράγεται από το μέτωπο της φλόγας τις υπολόγισε ίσες με:

$$u'_{fg} = \frac{E-1}{\sqrt{3}} S_L \quad (2.4.11)$$

Διάφορες εργασίες στη συνέχεια αμφισβήτησαν τα αποτελέσματα του Karlovitz, αποδίδοντας τις διαφορές που παρατήρησε στην τυρβώδη ταχύτητα καύσης τόσο σε πειραματικά σφάλματα όσο και σε κακή χρήση των μοντέλων. Μια εκτενή συζήτηση για το θέμα γίνεται από τους Lipatnikov & Chomiak (2010, §2.2.1)

Σε μια φλόγα η οποία βρίσκεται ήδη στην τυρβώδη περιοχή, η υδροδυναμική αστάθεια φαίνεται να επηρεάζει την ταχύτητα τυρβώδους καύσης (παράγοντας επιπλέον τύρβη) μόνο αν η τύρβη είναι ασθενής, δηλαδή για $u'_0 < S_L$. Επιπλέον παρόλο που υπάρχουν αναφορές στις οποίες η αστάθεια χρησιμοποιείται για να εξηγηθούν πειραματικά ή υπολογιστικά αποτελέσματα τυρβωδών φλογών, δεν υπάρχουν ισχυρές αποδείξεις ότι σε μια τυρβώδη ροή μπορεί να μεταβάλει την ένταση της τύρβης στην άκαυστη περιοχή. Η μεγαλύτερη χρονική κλίμακα που χρειάζεται η αστάθεια για να

αναπτυχθεί σε σχέση με τις κλίμακες της τύρβης, είναι πιθανό να οδηγεί στην καταστολή της από τις τοπικές παραμορφώσεις της τύρβης (Lipatnikov & Chomiak 2010, §5.3). Από την άλλη μεριά όμως, σε στρωτές φλόγες, η αστάθεια αυτή παίζει κύριο ρόλο καθώς συντελεί στον σχηματισμό κυματισμών στην επιφάνεια της, στην επιτάχυνση της και τελικά στην μετάπτωσή της στην τυρβώδη περιοχή.

2.5 Εκρήξεις σε ελεύθερο περιβάλλον

Μια φλόγα η οποία επεκτείνεται σφαιρικά σε μείγμα καυσίμου-αέρα, παραμένει στη στρωτή περιοχή μόνο μέχρι λίγα εκατοστά απόσταση από το σημείο έναυσης. Η απόσταση εξαρτάται από το καύσιμο και τη συγκέντρωση. Στη συνέχεια η κυτταρική δομή που είδαμε στη §2.3.2 μπορεί να αναπτυχθεί καταλήγοντας σε κάθε περίπτωση στην εμφάνιση ανωμαλιών (ρυτίδιασμα) της επιφάνειας της φλόγας. Οι αστάθειες οι οποίες εκκινούνται σε ένα ευρύ φάσμα μηκών κύματος (από λίγα χιλιοστά μέχρι του μεγέθους της ακτίνας) προσδίδουν τελικά μια φράκταλ γεωμετρία στην επιφάνεια της σφαίρας. Η φράκταλ γεωμετρία της επιφανείας παρατηρήθηκε μεταξύ άλλων στην εργασία των Gostintsev et al. (1989) όπου αναλύθηκαν 20 πειράματα εκρήξεων διαφόρων μειγμάτων. Σε όλα τα πειράματα, μετά το πέρας της φλόγας από μια κρίσιμη ακτίνα, παρουσιάστηκε ομοιότητα (self-similarity) στην μορφή της επιφάνειας της. Η επιφάνεια της αυξανόταν $R^{1/3}$ φορές πιο γρήγορα σε σύγκριση με την τέλεια σφαίρα ίδιας ακτίνας, πράγμα που αντιστοιχεί σε φράκταλ διάσταση ίση με 2.33. Η αύξηση της επιφανείας της φλόγας οδηγεί στην λεγόμενη «αυτό-επιτάχυνση» (self-acceleration). Αυτή η επιτάχυνση μπορεί να ποσοτικοποιηθεί, με βάση τη σχέση:

$$R = R_0 + At^a \quad (2.5.1)$$

όπου A , a σταθερές, R_0 η κρίσιμη ακτίνα μετάβασης, t ο χρόνος από την έναυση και R η ακτίνα της σφαίρας. Έχουν γίνει πολλές μελέτες όσο αφορά την τιμή του εκθέτη a . Η τιμή 1.5 είναι αυτή που εμφανίζεται πιο συχνά και έχει χρησιμοποιηθεί για παράδειγμα από τους Gostintsev et al. (1989) για να προσεγγίσει τις πειραματικές ταχύτητες. Ο εκθέτης αυτός συσχετίζεται με την φράκταλ διάσταση από τη σχέση:

$$d = 1 - \frac{1}{a} \quad (2.5.2)$$

όπου d η περίσσια της φράκταλ διάστασης. Η τιμή 1.5 δίνει $d = 1/3$ δηλαδή διάσταση φράκταλ ίση με $D = 2 + d = 7/3 = 2.333$. Αν και η τιμή αυτή έχει υπολογιστεί και σε θεωρητικές εργασίες, υπάρχουν αρκετά πειραματικά αποτελέσματα στα οποία η φράκταλ διάσταση λαμβάνει άλλες τιμές. Συζήτηση για το θέμα και πρόσφατα πειραματικά αποτελέσματα παρουσιάζονται στις εργασίες των Wu et al. (2013) και Kim et al. (2015).

Οι North & Santavicca (1990) εξέτασαν πειραματικά την μορφή της επιφάνειας διαφόρων τυρβωδών φλογών για διάφορες εντάσεις τύρβης (u'_0/S_L από 0.24 έως 11.9) και αριθμών Damköhler (10 με 889) και συσχέτισαν τη φράκταλ διάσταση με τον λόγο u'_0/S_L , παράγοντας τη σχέση:

$$D_f = \frac{2.05}{u'_0/S_L + 1} + \frac{2.35}{S_L/u'_0 + 1} \quad (2.5.3)$$

Για χαμηλή έντασης τύρβη η σχέση δίνει $D_f = 2.05$ ενώ για υψηλή $D_f = 2.35$. Η παραπάνω σχέση εκφράζει την αντιπαλότητα στο ρυτιδιάσμα της φλόγας μεταξύ της ταχύτητας στρωτής καύσης και της τύρβης, αφού η πρώτη είναι ένα μέσω 'αντίστασης' της φλόγας στην παραμόρφωση που θέλουν να επιβάλλουν οι δίνες.

Σύμφωνα με την θεωρία των φράκταλ και κάνοντας χρήση της σχέσης (2.4.10), ο λόγος της τυρβώδους επιφάνειας της φλόγας A_t προς αυτή της στρωτής φλόγας A ισούται με (Gouldin 1987):

$$\frac{A_t}{A} = \frac{S_T}{S_L} = \left(\frac{\lambda_0}{\lambda_i} \right)^{D_f - 2} \quad (2.5.4)$$

όπου λ_0 το εξωτερικό κατώφλι (outer cut-off) της φράκταλ γεωμετρίας και λ_i το εσωτερικό κατώφλι (inner cut-off). Το εσωτερικό κατώφλι έχει την έννοια του ότι από μια κλίμακα και κάτω, αναμένουμε η φράκταλ δομή της φλόγας να μη διατηρείται (σε αντίθεση με τα κλασικά φράκταλ τα οποία τη διατηρούν στο άπειρο) λόγω της μοριακής διάχυσης και της καταστροφής της τύρβης στις μικρές κλίμακες. Έτσι καθώς η κλίμακα μέτρησης της επιφάνειας τείνει στο μηδέν, το εμβαδόν της επιφάνειας δεν απειρίζεται αλλά τείνει σε ένα συγκεκριμένο αριθμό. Πιθανές κλίμακες οι οποίες θα μπορούσαν να οριστούν σαν εσωτερικό κατώφλι είναι η κλίμακα Kolmogorov και το πάχος της στρωτής φλόγας. Ομοίως, το εξωτερικό κατώφλι είναι ή μέγιστη κλίμακα μήκους στην οποία διαταράσσεται η επιφάνεια, η οποία θα μπορούσε να είναι η ολοκληρωτική κλίμακα της τύρβης.

2.6 Εκρήξεις σε κλειστό χώρο με ανοίγματα

Οι εκρήξεις σε κλειστό χώρο με ανοίγματα¹ έχουν αποτελέσει αντικείμενο υψηλού ερευνητικού ενδιαφέροντος, λόγω της περιπλοκότητας του φαινομένου και λόγου του πρακτικού ενδιαφέροντος. Η έκρηξη σε έναν κλειστό χώρο μπορεί να οδηγήσει στην ανάπτυξη μεγάλων υπερπίεσεων και η εκτόνωση από ένα άνοιγμα αποτελεί ίσως το τελευταίο μέτρο ασφάλειας για να περιοριστούν οι απώλειες στην περίπτωση που όλα τα προηγούμενα μέτρα ασφαλείας έχουν αποτύχει (αποφυγή της έκλυσης, έγκυρος εντοπισμός διαρροής κτλ). Η διέξοδος των καυσαερίων για την εκτόνωση της υπερπίεσης που δημιουργείται στον εσωτερικό χώρο γίνεται με την δημιουργία οπών οι οποίες είτε είναι μόνιμα ανοικτές είτε ανοίγουν υπό την ανίχνευση αύξησης της πίεσης. Η ανίχνευση της αύξησης της πίεσης γίνεται συνήθως παθητικά, δηλαδή το υλικό που καλύπτει την έξοδο είναι χαμηλής αντοχής με αποτέλεσμα να υποχωρεί όταν υπάρξει μεταβολή της πίεσης.

Παρόλο που υπάρχουν ήδη οδηγίες και προτάσεις για το ελάχιστο μέγεθος των οπών εξόδου για δεδομένους χώρους, αυτές δεν είναι ακόμα κοινά αποδεκτές και επαρκώς αξιόπιστες (Bauwens et al. 2012). Διάφοροι ημι-εμπειρικοί μέθοδοι υπολογισμού της πίεσης στην περίπτωση μια τέτοιας

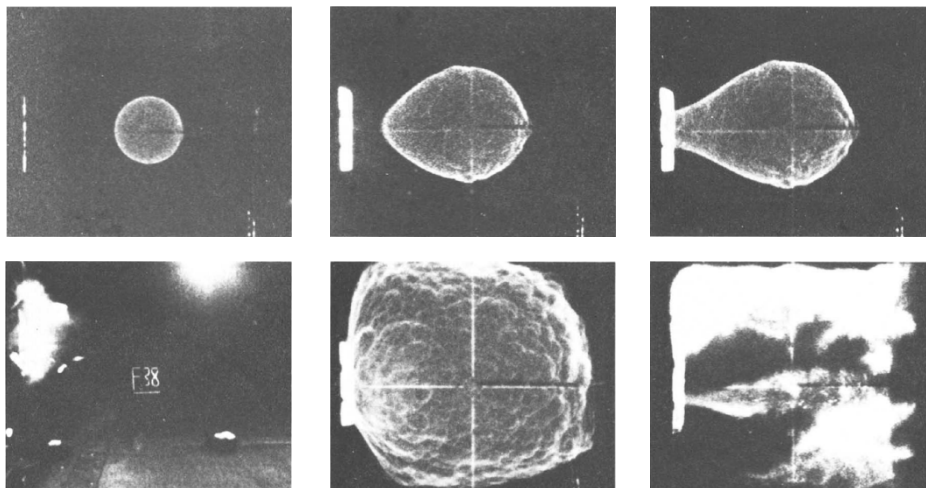
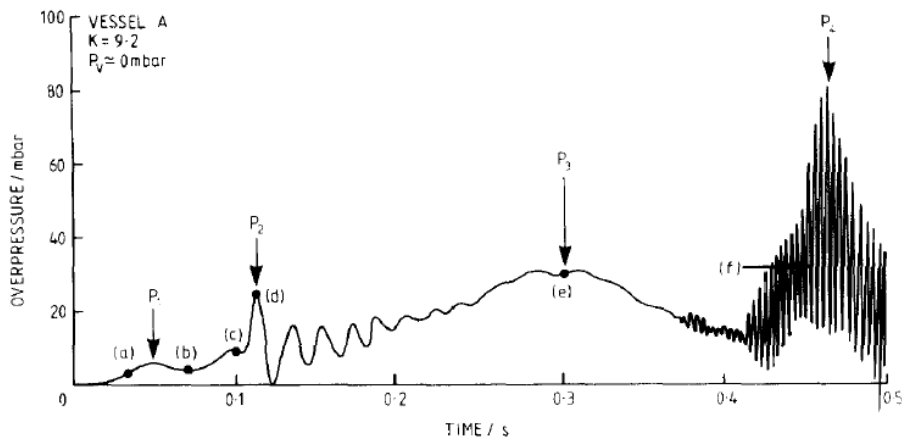
¹ Η αγγλική ορολογία του όρου είναι vented deflagrations

έκρηξης έχουν αναπτυχθεί με σκοπό την διαστασιολόγηση των ανοιγμάτων έτσι ώστε η πίεση που θα αναπτυχθεί να μην υπερβαίνει ορισμένα όρια. Κάποιες από τις μεθοδολογίες που υπάρχουν παρουσιάζονται στη συνέχεια στη §3.3.2. Προκειμένου να αναπτυχθούν και να εφαρμοστούν οι μεθοδολογίες αυτές, είναι απαραίτητο να κατανοηθούν τα βασικά χαρακτηριστικά των εκρήξεων αυτών. Έτσι πειράματα εκρήξεων σε κλειστούς χώρους με εξόδους εκτόνωσης συνεχίζονται να γίνονται με σκοπό την καλύτερη κατανόηση του φαινομένου.

Χαρακτηριστικά πειράματα που δείχνει την πολυπλοκότητα του φαινομένου πραγματοποιήθηκαν από τους Cooper et al. (1986) χρησιμοποιώντας σαν καύσιμο το φυσικό αέριο. Στο παρακάτω σχήμα απεικονίζεται η υπερπίεση που αναπτύσσεται στο εσωτερικό κυβικού δοχείου πλευράς 0.91 m μαζί με φωτογραφικές απεικονίσεις της φλόγας. Η πίεση στην οποία υποχωρεί το υλικό το οποίο κρατάει κλειστή την έξοδο εκτόνωσης είναι πολύ μικρή (0.3 mbar). Στο διάγραμμα έχουν σημειωθεί τέσσερα χαρακτηριστικά σημεία P_1 , P_2 , P_3 , P_4 τα οποία αποτελούν σημεία τοπικού μεγίστου και τα οποία συνδέονται με τέσσερις χαρακτηριστικές χρονικές στιγμές στην εξέλιξη του φαινομένου. Η πρώτη κορυφή P_1 παρατηρείται την χρονική στιγμή στην οποία η έξοδος εκτόνωσης ανοίγει. Στο σημείο αυτό η αύξηση του όγκου που προκαλείται από την καύση είναι μικρότερη της μείωσης του όγκου που προκαλείται από την εκκένωση του δοχείου (εκκένωσης που παρατηρείται λόγω της διαφοράς πίεσης μεταξύ εσωτερικού και εξωτερικού χώρου του δοχείου). Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα μετά το άνοιγμα της εξόδου η πίεση να πέφτει, με αποτέλεσμα την δημιουργία της πρώτης κορυφής P_1 στο διάγραμμα πίεσης-χρόνου. Στη συνέχεια, καθώς η φλόγα επεκτείνεται η επιφάνεια της μεγαλώνει με αποτέλεσμα να έχουμε αύξηση της ογκομετρικής παροχής. Αυτή η αύξηση δεν μπορεί να αντισταθμιστεί από την μείωση του όγκου λόγω της διαφυγής αερίου από την έξοδο με αποτέλεσμα η πίεση να αρχίσει και πάλι να αυξάνει (τμήμα μεταξύ σημείων b και c στην καμπύλη). Στο σημείο c της καμπύλης, η φλόγα και τα προϊόντα της καύσης έχουν φτάσει στο σημείο εξόδου. Λόγω της μειωμένης πυκνότητας των προϊόντων της καύσης έχουμε αύξηση της ροής όγκου που βγαίνει από το δοχείο, με αποτέλεσμα να παρατηρείται μικρή πτώση της πίεσης. Η φλόγα βγαίνοντας από το δοχείο, συναντάει φρέσκο καύσιμο το οποίο έχει ωθηθεί εκτός του δοχείου. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα την δημιουργία μιας εξωτερικής έκρηξης η οποία προκαλεί την απότομη αύξηση της πίεσης και την δημιουργία της κορυφής P_2 του διαγράμματος. Οι ταλαντώσεις της πίεσης μετά το σημείο P_2 είναι τύπου Helmholtz που οφείλονται στην παλινδρομική κίνηση των καυσαερίων που κινούνται προς και πίσω στην περιοχή του στομίου εξόδου¹. Αυτό οδηγεί σε αύξηση του ρυθμού καύσης. Ο ρυθμός καύσης αυξάνεται επίσης λόγω της τύρβης που αναπτύσσεται στο οριακό στρώμα μεταξύ των καυσαερίων που κινούνται προς την έξοδο και του καυσίμου που παραμένει εγκλωβισμένο στο δοχείο στις περιοχές κοντά στα τοιχώματα. Όταν η φλόγα τελικά ακουμπήσει τα εσωτερικά τοιχώματα του δοχείου, η πίεση θα αρχίσει να μειώνεται με αποτέλεσμα την δημιουργία της κορυφής P_3 του διαγράμματος. Τέλος οι ταλαντώσεις μεγάλης συχνότητας που παρουσιάζονται στο τέλος της καμπύλης και που οδηγούν στην δημιουργία του τελευταίου σημείου μεγίστου P_4 , δημιουργούνται λόγω ακουστικών φαινομένων (συντονισμός του δοχείου). Οι έντονες διακυμάνσεις της πίεσης έχουν σαν αποτέλεσμα την διαταραχή της φλόγας με

¹ Ταλαντώσεις αυτού του τύπου συναντιούνται και στην καθημερινή ζωή όταν φυσάμε πάνω από το στόμιο ενός άδειου μπουκαλιού ή όταν οδηγάμε γρήγορα με το παράθυρο λίγο ανοιχτό. Και στις δύο αυτές περιπτώσεις οι ταλαντώσεις είναι τέτοιας συχνότητας που οδηγούν στην παραγωγή ήχου.

αποτέλεσμα την μεγάλη αύξηση του ρυθμού καύσης στις περιοχές όπου υπάρχει ακόμα άκαυστο καύσιμο (γωνιακές περιοχές του δοχείου).



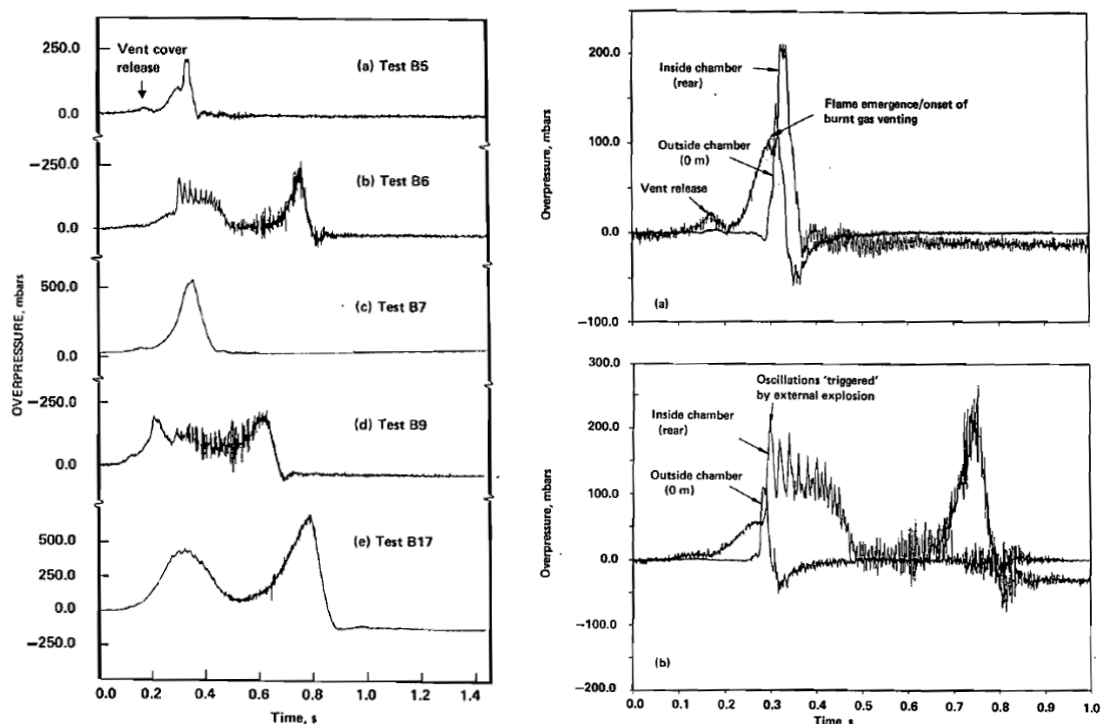
Σχήμα 2.6.1: Υπερπίεση στο εσωτερικό δοχείου 0.75m^3 συνάρτηση του χρόνου και φωτογραφικές απεικονίσεις της φλόγας στις χρονικές στιγμές a, b, c, d, e, f που σημειώνονται στην καμπύλη υπερπίεσης (Cooper et al. 1986). Όλες οι φωτογραφίες είναι από το εσωτερικό του δοχείου εκτός από την τέταρτη (σημείο d) η οποία απεικονίζει τη φλόγα την στιγμή που εξέρχεται από το δοχείο.

Η παραπάνω ανάλυση είναι ενδεικτική, καθώς τα μέγιστα που παρουσιάζονται στο διάγραμμα μπορούν να ενισχυθούν ή να εξαλειφθούν αναλόγως με τις συνθήκες του πειράματος όπως τις διαστάσεις του δοχείου, το μέγεθος της εξόδου, της πίεσης στην οποία η έξοδος ανοίγει, του καυσίμου και της περιεκτικότητας του μείγματος. Έτσι για παράδειγμα αύξηση της πίεσης στην οποία η έξοδος ανοίγει οδηγεί σε αύξηση της πρώτης κορυφής P_1 και πτώση ή ακόμα και εξαφάνιση των κορυφών P_2, P_3 .

Μια παρόμοια ανάλυση έγινε από τους Harrison & Eyre (1987) οι οποίοι έδωσαν έμφαση στην εξωτερική έκρηξη που προκαλείται από την καύση του μείγματος που διαφεύγει από το δοχείο μέσω του ανοίγματος. Τα πειράματα αυτά πραγματοποιήθηκαν σε πολύ μεγαλύτερο χώρο από τον προηγούμενο, σε ένα δωμάτιο όγκου 30m^3 με την έναυση να γίνεται σε διάφορα σημεία του δωματίου (στο κέντρο, κοντά στην έξοδο και στην απέναντι πλευρά από αυτή της εξόδου). Στα αριστερά διαγράμματα του παρακάτω σχήματος, απεικονίζονται η υπερπίεση στο εσωτερικό του δωματίου για διάφορα σενάρια. Στο πρώτο και στο τρίτο σενάριο η έναυση γίνεται στην απέναντι

πλευρά από αυτή που βρίσκεται η έξοδος ενώ στα υπόλοιπα η έναυση γίνεται στο κέντρο του δωματίου. Παρατηρούμε ότι όταν η έναυση γίνεται στο πίσω μέρος του δωματίου αναπτύσσεται μόνο ένα κύριο μέγιστο της υπερπίεσης, ενώ όταν γίνεται στο κέντρο αναπτύσσονται δύο διακριτά μέγιστα. Και στις δύο περιπτώσεις, το πρώτο μέγιστο που αναπτύσσεται οφείλεται στην εξωτερική έκρηξη. Αυτό φαίνεται από τα διαγράμματα της δεξιάς στήλης του σχήματος, όπου μαζί με την εσωτερική πίεση απεικονίζεται και η εξωτερική στην περιοχή του ανοίγματος. Παρατηρούμε την απότομη αύξηση της εξωτερικής πίεσης η οποία συμβαίνει και στα δύο σενάρια και η οποία μάλιστα μπορεί στιγμιαία να ξεπεράσει και αυτή που επικρατεί στο εσωτερικό. Από ανάλυση των φωτογραφιών του πειράματος προέκυψε ότι η χρονική στιγμή στην οποία παρατηρείται η αύξηση της εξωτερικής πίεσης συμπίπτει με την χρονική στιγμή κατά την οποία η καύση έχει επεκταθεί στο εξωτερικό του δωματίου.

Η εξωτερική έκρηξη μπορεί να επηρεάσει την εσωτερική πίεση με πολλούς τρόπους. Καταρχήν, η αύξηση της εξωτερικής πίεσης οδηγεί σε μείωση (ή και αντιστροφή) της κλίσης πίεσης στην περιοχή της εξόδου, με αποτέλεσμα να εμποδίζεται η έξοδος των καυσαερίων από το δωμάτιο και να αυξάνει η εσωτερική πίεση. Επιπλέον, η εξωτερική έκρηξη φαίνεται να εκκινεί αστάθειες οι οποίες αντικατοπτρίζονται στις ταλαντώσεις της καμπύλης υπερπίεσης-χρόνου στο εσωτερικό του δωματίου (Bauwens et al. 2009). Άλλα σημαντικά συμπεράσματα των πειραμάτων που έγιναν είναι ότι η εξωτερική υπερπίεση αυξάνει με την αύξηση της ταχύτητας εξόδου των καυσαερίων από το δωμάτιο και ότι η εξωτερική έκρηξη μπορεί να οδηγήσει σε υπερδιπλασιασμό της εσωτερικής υπερπίεσης. Το φαινόμενο αυτό είναι πιο έντονο για μεγαλύτερες εξόδους διαφυγής από ότι για μικρότερες. Επίσης είναι πιο έντονο για τις περιπτώσεις όπου η έναυση γίνεται στην απέναντι πλευρά από αυτή της εξόδου σε σύγκριση με την έναυση στο κέντρο, πράγμα λογικό αφού στην πρώτη περίπτωση περισσότερο καύσιμο προλαβαίνει να διαφύγει από την έξοδο.



Σχήμα 2.6.2: Αριστερά: Υπερπίεση στο εσωτερικού δωματίου για διάφορα σενάρια έκρηξης (στο πρώτο και στο τρίτο σενάριο η έναυση γίνεται στην απέναντι πλευρά από αυτή που βρίσκεται η έξοδος, στα υπόλοιπα

στο κέντρο του δωματίου). Δεξιά: Πίεση στο εσωτερικό και στο εξωτερικό μέρος του δωματίου για τα δύο πρώτα σενάρια (Harrison & Eyre 1987).

Το φαινόμενο της εξωτερικής έκρηξης έχει μελετηθεί και με νεώτερα πειράματα. Οι Jiang et al. (2005) εκτέλεσαν πολλά πειράματα μελετώντας την επίδραση της πίεσης στην οποία υποχωρεί το κάλυμμα εξόδου, της θέσης της έναυσης, της επιφάνειας του ανοίγματος και της συγκέντρωσης του καυσίμου. Οι Proust & Leprette (2009) επισήμαναν την σπουδαιότητα του φαινομένου εκτελώντας μια σειρά πειραμάτων με διαφορετικά δοχεία και καύσιμα. Οι Chao et al. (2011) μελέτησαν πειραματικά την μέγιστη υπερπίεση που αναπτύσσεται εξετάζοντας την επίδραση του καυσίμου, του μεγέθους του δοχείου, της θέσης της έναυσης, του μεγέθους του ανοίγματος και των εμποδίων. Τα αποτελέσματα έδειξαν την εξάρτηση της εσωτερικής πίεσης από τα χαρακτηριστικά της εξωτερικής.

Σε όλες τις περιπτώσεις, η εξωτερική έκρηξη φαίνεται να πραγματοποιείται με μεγάλη βιαιότητα. Για το γεγονός αυτό έχουν προταθεί δύο βασικά φαινόμενα. Το πρώτο αφορά την έντονη τύρβη που δημιουργείται λόγω της ροής τύπου τζετ που σχηματίζεται καθώς η φλόγα εξέρχεται από το άνοιγμα. Το δεύτερο είναι η αστάθεια Rayleigh-Taylor που ίσως αναπτύσσεται στην επιφάνεια της λόγω της επιταχυνόμενης κίνησης των χαμηλής πυκνότητας προϊόντων μέσα στα υψηλής πυκνότητας αντιδρώντα (Tsuruda & Hirano 1987). Περισσότερα για το θέμα και το πώς μπορεί αυτό να μοντελοποιηθεί παρουσιάζονται στο Κεφάλαιο 9.

Κεφάλαιο 3

Μοντελοποίηση έκρηξης αέριου μείγματος

*All models are wrong
but some are useful*
George Box, 1978

Στο κεφάλαιο αυτό θα παρουσιάσουμε αρχικά τις βασικές εξισώσεις της ρευστομηχανικής, οι οποίες περιγράφουν τα φαινόμενα μεταφοράς ρευστών, όπως είναι το φαινόμενο της έκρηξης αέριου μείγματος. Στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε τις βασικές μεθοδολογίες μοντελοποίησης της τύρβης και της καύσης. Έμφαση θα δοθεί στη μοντελοποίηση εκρήξεων για εφαρμογές πραγματικού ενδιαφέροντος. Όλα τα παραπάνω θα γίνουν στο πλαίσιο της μοντελοποίησης μέσω της μεθοδολογία της υπολογιστικής μηχανικής. Τέλος θα δοθούν και κάποια στοιχεία για απλά αναλυτικά ή εμπειρικά μοντέλα.

3.1 Εξισώσεις ροής – Μοντελοποίηση τύρβης

3.1.1 Βασικές εξισώσεις ροής

Οι βασικές εξισώσεις που περιγράφουν τη ροή ρευστών είναι η εξίσωση συνέχειας και οι εξισώσεις Navier-Stokes. Οι εξισώσεις που θα παρουσιαστούν είναι γραμμένες χρησιμοποιώντας την σύμβαση Einstein, δηλαδή επαναλαμβανόμενοι δείκτες υποδηλώνουν άθροιση.

Η **εξίσωση συνέχειας** περιγράφει την αρχή διατήρησης της μάζας και έχει τη μορφή

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0 \quad (3.1.1)$$

όπου ρ η πυκνότητα του μείγματος και u_j η j συνιστώσα ($j=1,2,3$) της ταχύτητας του μείγματος. Ο πρώτος όρος της εξίσωσης περιγράφει το ρυθμό μεταβολής της μάζας του μείγματος σε μία μονάδα όγκου (μονάδες $kg / m^3 / s$) και ο δεύτερος τη ροή μάζας που μεταφέρεται εντός ή εκτός της μονάδας όγκου.

Οι **εξισώσεις Navier-Stokes** εκφράζουν τον δεύτερο νόμο του Νεύτωνα όταν αυτός εφαρμοστεί σε ένα στοιχείο ρευστού: ο ρυθμός με τον οποίο αυξάνεται η ορμή ενός στοιχείου ρευστού ισούται με το άθροισμα των δυνάμεων που ασκούνται στο στοιχείο αυτό. Οι δυνάμεις γενικά κατηγοριοποιούνται σε επιφανειακές και ογκικές, αναλόγως αν εφαρμόζονται στην επιφάνεια ενός στοιχείου ρευστού ή αν εφαρμόζονται σε όλο τον όγκο. Οι βασικότερες επιφανειακές δυνάμεις είναι οι δυνάμεις πίεσης και οι δυνάμεις που προκαλούνται από το ιξώδες του ρευστού (δηλαδή δυνάμεις τριβής ή αλλιώς συνεκτικότητας), ενώ η βασικότερη ογκική δύναμη είναι η δύναμη της

βαρύτητας. Αν το ρευστό είναι Νευτωνικό (υπόθεση που ισχύει για τα συνήθη αέρια οπότε και για τις περιπτώσεις εκρήξεων που θα εξεταστούν στη συνέχεια) τότε οι δυνάμεις τριβής είναι ανάλογες του ρυθμού παραμόρφωσης του ρευστού. Οι εξισώσεις Navier-Stokes γράφονται στη μορφή:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i \quad (3.1.2)$$

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \delta_{ij} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \quad (3.1.3)$$

όπου για $i=1,2,3$ προκύπτουν οι εξισώσεις για κάθε συνιστώσα της ταχύτητας. Με g_i συμβολίζεται η επιτάχυνση της βαρύτητας στην κατεύθυνση i , με τ_{ij} η τάση, με p η πίεση ενώ δ_{ij} είναι η συνάρτηση Kronecker η οποία ισούται με 1 αν $i=j$ διαφορετικά με 0. Όμοια με την εξίσωση συνέχειας, ο πρώτος όρος του αριστερού μέλους της εξίσωσης εκφράζει την μεταβολή της i συνιστώσας της ορμής ανά μονάδα όγκου ενώ ο δεύτερος την ροή ορμής που εισέρχεται ή εξέρχεται από τον όγκο λόγω συναγωγής (convection). Οι όροι στο δεξί μέλος εκφράζουν τις δυνάμεις που ασκούνται στο ρευστό λόγω πίεσης, συνεκτικότητας και βαρύτητας. Οι εξισώσεις αυτές είναι οι ίδιες τόσο για την περίπτωση καύσης όσο και για ισοθερμοκρασιακή ροή. Η καύση επιδρά σε αυτή με έμμεσο τρόπο, αλλάζοντας σημαντικά τόσο την πυκνότητα όσο και τον συντελεστή συνεκτικότητας μ λόγω της αύξησης της θερμοκρασίας.

Στη περίπτωση όπου το ρευστό είναι μείγμα N συστατικών, το κάθε συστατικού περιγράφεται από την **εξίσωση διατήρησης μάζας** του συστατικού:

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j Y_k) = -\frac{\partial F_j^k}{\partial x_j} + \dot{\omega}_k \quad (3.1.4)$$

$$F_j^k = -\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \quad (3.1.5)$$

όπου Y_k το κλάσμα μάζας του συστατικού k ως προς το μείγμα, F_j^k η ροή μάζας του συστατικού λόγω μοριακής διάχυσης και $\dot{\omega}_k$ ο ρυθμός παραγωγής ή κατανάλωσης του συστατικού (μονάδες kg_k/m^3s) λόγω χημικών αντιδράσεων. Στις παραπάνω σχέσεις για τον υπολογισμό της ροής μάζας λόγω διάχυσης έχει χρησιμοποιηθεί ο νόμος του Fick¹, στον οποίο D_k είναι ο συντελεστής μοριακής διάχυσης του συστατικού k ως προς το μείγμα, ο οποίος μπορεί να υπολογιστεί συναρτήσει των συντελεστών διάχυσης της ουσίας k ως προς την ουσία j από τη σχέση:

¹ Σε περιπτώσεις πολυσυστατικών μειγμάτων στα οποία η μοριακή διάχυση είναι πολύ σημαντική, ο υπολογισμός της διάχυσης μπορεί να γίνει με μεγαλύτερη ακρίβεια χρησιμοποιώντας πιο περίπλοκα μοντέλα όπως αυτό των ταχυτήτων διάχυσης, το οποίο όμως απαιτεί την επίλυση μεγάλου συστήματος εξισώσεων (Poinsot & Veynante 2005, §1.1.4)

$$D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^N X_j / D_{kj}} \quad (3.1.6)$$

όπου X_j το κλάσμα όγκου. Συνήθως (και κυρίως σε τυρβώδεις ροές στις οποίες η μοριακή διάχυση είναι μικρή σε σχέση με την τυρβώδη), το D_k υπολογίζεται για ευκολία ως προς το συστατικό το οποίο βρίσκεται σε αφθονία, το οποίο (σε πρακτικές εφαρμογές) είναι συνήθως ο αέρας ή το άζωτο.

Το άθροισμα των N εξισώσεων (3.1.4) πρέπει να μας δίνει την αρχή διατήρησης της μάζας (3.1.1)

καθώς $\sum_{k=1}^N Y_k = 0$. Λόγω όμως του προσεγγιστικού τρόπου με τον οποίο διαχειριζόμαστε συνήθως

τον όρο διάχυσης μέσω των εξισώσεων (3.1.5) και (3.1.6), αυτό μπορεί να μη συμβεί. Αυτό που γίνεται συνήθως και το οποίο ακολουθήθηκε στην παρούσα διατριβή, είναι να χρησιμοποιούνται μόνο οι εξισώσεις διατήρησης της μάζας για τα $k-1$ συστατικά και το κλάσμα μάζας του άλλου συστατικού (έστω του $k=a$) να προκύπτει από τη σχέση $Y_a = 1 - \sum_{k \neq a} Y_k$. Το συστατικό αυτό είναι

συνήθως αυτό που βρίσκεται σε αφθονία, δηλαδή το άζωτο ή ο αέρας. Με αυτό τον τρόπο το λάθος που εισάγεται από τους όρους διάχυσης (και είναι συνήθως μικρό) απορροφάται από το συστατικό αυτό, το οποίο αφού βρίσκεται σε αφθονία, μεταβάλλεται ελάχιστα από την εισαγωγή αυτού του σφάλματος¹. Ο παραπάνω τρόπος υποδηλώνει ουσιαστικά ότι ισχύει η εξής σχέση για τον συντελεστή διάχυσης του συστατικού a :

$$\sum_{k=1}^N -F_j^k = 0 \Rightarrow \sum_{k=1}^N \rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} = 0 \Rightarrow D_a \frac{\partial Y_a}{\partial x_j} = - \sum_{k \neq a} D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \quad (3.1.7)$$

Παρατηρούμε ότι η σχέση αυτή μπορεί να δώσει διαφορετικό D_a για κάθε κατεύθυνση j . Το παραπάνω πρόβλημα είναι πιο σημαντικό στην περίπτωση όπου η ροή είναι στρωτή ή ελάχιστα τυρβώδης, καθώς η παρουσία της τύρβης (όπως θα δούμε παρακάτω) κάνει τον όρο της μοριακής διάχυσης μικρό.

Σε μη ισοθεμοκρασιακές ροές, όπως είναι οι περιπτώσεις καύσης, η θερμοκρασία προκύπτει από την **εξίσωση διατήρησης της ενέργειας**. Η εξίσωση διατήρησης της ενέργειας παράγεται από τον πρώτο νόμο της θερμοδυναμικής και δηλώνει ότι ο ρυθμός αλλαγής της ενέργειας ενός σωματιδίου ρευστού είναι το άθροισμα του ρυθμού με τον οποίο θερμότητα δίνεται στο σωματίδιο συν τον ρυθμό του έργου των δυνάμεων που ασκούνται στο σωματίδιο. Η θερμότητα μεταφέρεται είτε λόγω διάχυσης θερμότητας (νόμος του Fourier) είτε λόγω διάχυσης συστατικών διαφορετικών ενθαλπών. Οι δυνάμεις οι οποίες θεωρούμε ότι ασκούνται στο σωματίδιο είναι δυνάμεις πίεσης και συνεκτικότητας. Η εξίσωση διατήρησης της ενέργειας μπορεί να πάρει πολλές μορφές, π.χ. εξίσωση για την ενθαλπία, την εσωτερική ενέργεια, την ολική ενθαλπία, την ολική εσωτερική ενέργεια ή την θερμοκρασία. Αναλυτικά όλες οι μορφές της εξίσωσης ενέργειας παρουσιάζονται

¹Ένας άλλος τρόπος αντιμετώπισης του προβλήματος είναι η προσθήκη μιας ταχύτητας διόρθωσης στις εξισώσεις μεταφοράς των συστατικών (Poinsot & Veynante 2005, §1.1.4)

στο βιβλίο των Poinsot & Veynante (2005). Στην παρούσα διατριβή θα χρησιμοποιήσουμε την εξίσωση διατήρησης της στατικής, h , και της ολικής ενθαλπίας h_t , οι οποίες είναι:

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j h) = \frac{Dp}{Dt} - \frac{\partial}{\partial x_j} (F_j^h) + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (3.1.8)$$

$$\frac{\partial \rho h_t}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j h_t) = \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_j} (F_j^h) + \frac{\partial (u_i \tau_{ij})}{\partial x_j} \quad (3.1.9)$$

όπου

$$F_j^h = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} - \rho \sum_{k=1}^N D_k h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \quad (3.1.10)$$

Στις εξισώσεις αυτές, $\frac{Dp}{Dt} = \frac{\partial p}{\partial t} + u_j \frac{\partial p}{\partial x_j}$ είναι η ολική παράγωγος της πίεσης, h_k η ενθαλπία του

συστατικού k και F_j^h η ροή ενέργειας λόγω διάχυσης, η οποία χωρίζεται σε θερμική διάχυση (πρώτος όρος, νόμος Fourier) και σε μεταφορά ενέργειας λόγω της διάχυσης των συστατικών του μείγματος (δεύτερος όρος). Μια διαφορετική μορφή του F_j^h παρουσιάζεται στο Παράρτημα Α.1, στην οποία κάνοντας κάποιες παραδοχές απαλείφεται η θερμοκρασία από την εξίσωση (3.1.10). Στις παραπάνω εξισώσεις παρατηρούμε ότι δεν εμφανίζεται ο όρος πηγής $\dot{\omega}_k$ που σχετίζεται με τον ρυθμό καύσης. Αυτό συμβαίνει γιατί η καύση λαμβάνεται υπ' όψιν με έμμεσο τρόπο, μέσω των ενθαλπιών σχηματισμού των επί μέρους συστατικών που λαμβάνουν μέρος στην αντίδραση. Για την αποφυγή του υπολογισμού του D_a (όπου a το συστατικό για το οποίο δεν επιλύουμε την εξίσωση μεταφοράς μάζας) στον δεύτερο όρο της σχέση (3.1.10), ο όρος αυτός με τη βοήθεια της σχέσης (3.1.7) μπορεί να γραφεί και σαν

$$\begin{aligned} \rho \sum_{k=1}^N D_k h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} &= \rho \sum_{k \neq a} D_k h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} + \rho D_a h_a \frac{\partial Y_a}{\partial x_j} = \\ & \rho \sum_{k \neq a} D_k h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} - \rho h_a \sum_{k \neq a} D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} = \rho \sum_{k \neq a} D_k (h_k - h_a) \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (3.1.11)$$

Τέλος στις παραπάνω σχέσεις διατήρησης της μάζας των συστατικών και της ενέργειας, τα φαινόμενα διάχυσης δεύτερης τάξης **Soret** (διάχυση ενός συστατικού λόγω θερμοκρασιακής διαφοράς) και **Dafor** (διάχυση θερμότητας λόγω διαφοράς συγκεντρώσεων) όπως και η διάχυση λόγω κλίσης πίεσης έχουν αμεληθεί όπως γίνεται συνήθως καθώς στις περισσότερες περιπτώσεις τα φαινόμενα αυτά είναι πολύ πιο ασθενή από τη συνήθη διάχυση (με εξαίρεση ορισμένες περιπτώσεις καύσης όπου το φαινόμενο Soret ίσως να έχει σημαντική συμβολή στην περιοχή των μεγάλων θερμοκρασιακών κλίσεων της φλόγας (Law 2006, §4.1.4)).

3.1.2 Μέθοδος DNS

Η άμεση αριθμητική επίλυση των εξισώσεων που παρουσιάστηκαν στο προηγούμενο υποκεφάλαιο, ονομάζεται **μέθοδος DNS** (Direct Numerical Simulation). Πρόκειται για μια πολύ ακριβή μέθοδο, η

οποία όμως δυστυχώς δεν μπορεί να εφαρμοστεί για τυρβώδεις ροές πραγματικού ενδιαφέροντος. Ο λόγος είναι το πολύ μεγάλο εύρος χωρικών και χρονικών κλιμάκων που παρουσιάζονται στις τυρβώδεις ροές (§2.1.1), που για να επιλυθούν θα απαιτούσαν τεράστιους υπολογιστικούς πόρους. Προκειμένου να γίνει άμεση αριθμητική επίλυση των εξισώσεων, το χωρικό και χρονικό πεδίο πρέπει να διακριτοποιηθεί με πολύ υψηλή ανάλυση (δηλαδή πυκνό πλέγμα και μικρό χρονικό βήμα) ώστε η αριθμητική επίλυση των εξισώσεων να δίνει τη σωστή, από άποψη φυσικής, λύση. Με βάση τις σχέσεις των χαρακτηριστικών μεγεθών της τύρβης (§2.1.3) η χαρακτηριστική χωρική κλίμακα Kolmogorov μπορεί να γραφτεί σε συνάρτηση του αριθμού Reynolds της τύρβης σαν

$$l_k \approx \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \approx \left(\frac{\nu^3}{k^{3/2}/l_0} \right)^{1/4} \approx \left(\frac{\nu^3 l_0}{u'^3} \right)^{1/4} \approx \left(\frac{u_0'^3}{\nu^3 l_0} \right)^{-1/4} \approx \left(\text{Re}_0^3 \cdot l_0^{-4} \right)^{-1/4} \approx \frac{l_0}{\text{Re}_0^{3/4}} \quad (3.1.12)$$

ενώ ομοίως προκύπτει και η σχέση για την χρονική κλίμακα

$$\tau_k \approx \frac{\tau_0}{\text{Re}_0^{1/2}} \quad (3.1.13)$$

Για το χαρακτηριστικό μήκος Δx των υπολογιστικών κελιών πρέπει να ισχύει $\Delta x < l_k$ έτσι ώστε να λαμβάνονται υπ' όψιν και οι μικρότερες κλίμακες της τύρβης. Γράφοντας το Δx σαν l_0/N όπου N το πλήθος των κόμβων με το οποίο διακριτοποιούνται οι δίνες της ολοκληρωτικής κλίμακας, προκύπτει ότι $N > \text{Re}_0^{3/4}$. Συνεπώς όσο αυξάνεται ο αριθμός Reynolds της τύρβης, τόσο περισσότερα κελιά απαιτούνται για τη διακριτοποίηση των δινών της ολοκληρωτικής κλίμακας. Έτσι για παράδειγμα για $u' = 2$ m/s, $l_0 = 1$ m και $\nu = 1.46 \cdot 10^{-5}$ (αέρας) προκύπτει $N > 7000$, δηλαδή για να ένα τριδιάστατο πρόβλημα απαιτούνται περισσότερα από 10^{11} υπολογιστικά κελιά, το οποίο αποτελεί ένα πολύ μεγάλο νούμερο ακόμα και για τις σημερινές υπολογιστικές δυνατότητες. Αυτό κάνει τη μέθοδο DNS να εφαρμόζεται κυρίως για ροές μικρού αριθμού Reynolds. Οι Versteeg & Malalasekera (2007) αναφέρουν ότι στην πράξη ο περιορισμός των $\text{Re}_0^{9/4}$ κόμβων για μια τριδιάστατη προσομοίωση μπορεί πολλές φορές να μειωθεί ακόμα και 100 φορές, καθώς η διάχυση της τυρβώδους ενέργειας συμβαίνει στην πραγματικότητα σε κλίμακες μεγαλύτερες από την κλίμακα Kolmogorov (5 με 15 φορές μεγαλύτερες). Λεπτομέρειες για τη μέθοδο DNS αναφέρονται στην εργασία ανασκόπησης των Moïn & Mahesh (1998).

Στις περιπτώσεις καύσης, ένας επιπλέον περιορισμός στον ελάχιστο αριθμό των κελιών επιβάλλεται από το πάχος της φλόγας, καθώς το μήκος των κελιών θα πρέπει να είναι περίπου 20 φορές μικρότερο του πάχους της φλόγας για να θεωρηθεί ότι αυτή επιλύεται με ακρίβεια. Το γινόμενο του αριθμού Reynolds της τύρβης και του αριθμός Damköhler μπορεί να γραφεί σαν

$$\text{Re}_0 Da = \frac{l_0^2 S_L}{\nu \delta_L} = \left(\frac{l_0}{\delta_L} \right)^2 \quad (3.1.14)$$

Η παραπάνω σχέση οδηγεί στην εξής σχέση για το πλήθος των υπολογιστικών κελιών

$$\text{Re}_0 Da < (N/Q)^2 \quad (3.1.15)$$

όπου Q το πλήθος των κελιών στη διαφοροποίηση του πάχους της φλόγας. Έτσι για δεδομένα N και Q , η παραπάνω σχέση είναι περιοριστική για τον αριθμό Da που πρέπει να έχει η προς επίλυση φλόγα. Για μια λογική τιμή του N , π.χ. 600 και για $Q=20$, τότε για $Re_i = 200$ προκύπτει $Da = 4.5$ ο οποίος είναι αρκετά μικρός για τα περισσότερα πρακτικά προβλήματα τυρβώδους καύσης. Με βάση την παραπάνω σχέση μπορεί να σχεδιαστεί στα διαγράμματα τύπου Borghi το πεδίο εφαρμογής της μεθόδου DNS (π.χ. Poinsot & Veynante 2005, §4.6.3).

Η μέθοδος DNS συμβάλει στην κατανόηση της πολύπλοκης αλληλεπίδρασης της τύρβης με την φλόγα και στην ανάπτυξη νέων μοντέλων καύσης. Περισσότερα για τη μέθοδο αναφέρονται στην εργασία ανασκόπησης του Poinsot (1996), ενώ ένας συγκεντρωτικός πίνακας με σχετικές εργασίες παρουσιάζεται από τους Lipatnikov & Chomiak (2010). Χαρακτηριστικά παραδείγματα της εφαρμογής DNS αποτελεσμάτων για την ανάπτυξη μοντέλων καύσης είναι οι εργασίες των Colin et al. (2000) και Charlette et al. (2002).

3.1.3 Μέθοδος RANS

Στην παράγραφο 2.1.2 παρουσιάστηκαν δύο τρόποι ανάλυσης των ταχυτήτων, λαμβάνοντας μέσους όρους κατά Reynolds και κατά Favre. Η διαδικασία των μέσων όρων μπορεί να εφαρμοστεί και στις ίδιες τις εξισώσεις που περιγράφουν τη ροή με αποτέλεσμα να προκύπτουν οι μέσες χρονικά εκφράσεις των εξισώσεων. Οι νέες αυτές εξισώσεις ονομάζονται εξισώσεις Reynolds¹ και θα παρουσιαστούν στη συνέχεια. Αυτός είναι ένας τρόπος με τον οποίο γίνεται η προσπάθεια να υπολογιστούν μόνο οι μέσες τιμές των μεταβλητών (ταχύτητες, πίεση κτλ) οι οποίες συνήθως για πρακτικά προβλήματα είναι και αυτές που μας ενδιαφέρουν. Η όλη μέθοδος αναφέρεται με το όνομα **RANS** (Reynolds-Averaged Navier-Stokes).

Στη περίπτωση προβλημάτων στα οποία η πυκνότητα δεν μπορεί να θεωρηθεί σταθερή στον χώρο και στον χρόνο (όπως π.χ. είναι η περίπτωση έκλυσης υδρογόνου στην ατμόσφαιρα, οι περιπτώσεις καύσης, ή και η απλή ροή αέρα σε μεγάλες ταχύτητες λόγω φαινομένων συμπιεστότητας) η διαδικασία των μέσων τιμών κατά Reynolds προκαλεί τη δημιουργία νέων όρων στις εξισώσεις διατήρησης οι οποίοι είναι δύσκολο να μοντελοποιηθούν. Για παράδειγμα, η μέση χρονικά **εξίσωση συνέχειας** (3.1.1) χρησιμοποιώντας Reynolds ανάλυση των μεγεθών είναι:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u_j}) = \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{(\bar{\rho} + \rho')(\bar{u}_j + u'_j)}) = \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \bar{u}_j + \overline{\rho' u'_j}) = 0 \quad (3.1.16)$$

Από την άλλη μεριά η κατά Favre διαχείριση (Favre 1992) της ταχύτητας (η πυκνότητα, όπως και η πίεση, συνεχίζεται να λαμβάνεται με μέση τιμή κατά Reynolds) οδηγεί στη σχέση:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u_j}) = \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho (\tilde{u}_j + u''_j)}) = \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) = 0 \quad (3.1.17)$$

¹ Ο όρος «εξισώσεις Reynolds χρησιμοποιείται είτε έχουν χρησιμοποιηθεί μέσοι όροι κατά Reynolds είτε κατά Favre.

αφού $\overline{\rho u_j''} = 0$ (§2.1.2). Έτσι παρατηρούμε ότι δεν προκύπτει νέος όρος στην εξίσωση. Συνεπώς η κατά Favre μέση τιμή είναι αυτή που χρησιμοποιείται συνήθως στις περιπτώσεις μεταβλητής πυκνότητας και παρουσιάζεται και στη συνέχεια για τις υπόλοιπες εξισώσεις.

Η κατά Favre μέση χρονικά **εξίσωση ορμής** είναι

$$\frac{\partial \overline{\rho \tilde{u}_i}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho \tilde{u}_j \tilde{u}_i}) = -\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{\tau_{ij}}}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u_j'' \tilde{u}_i''}) + \overline{\rho} g_i \quad (3.1.18)$$

όπου (οι διακυμάνσεις της συνεκτικότητας αμελούνται)

$$\overline{\tau_{ij}} = \mu \left[\left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right] + \mu \left[\left(\frac{\partial u_i''}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j''}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k''}{\partial x_k} \right] \quad (3.1.19)$$

Ο όρος στη δεύτερη αγκύλη είναι συνήθως μικρός και αμελείται οπότε οι μέσες τάσεις δίνονται από την απλοποιημένη σχέση

$$\overline{\tau_{ij}} = \mu \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \quad (3.1.20)$$

Παρατηρούμε ότι η ολοκληρωμένη εξίσωση ορμής (3.1.18) διαφέρει από την αρχική (3.1.2) στο ότι περιέχει τις ποσότητες $\overline{\rho u_j'' \tilde{u}_i''}$ οι οποίες έχουν προέλθει από την ολοκλήρωση του όρου μεταφοράς $\rho u_j u_i$. Οι ποσότητες αυτές ονομάζονται **τάσεις Reynolds** και έχουν προκύψει στην προσπάθεια μας να αμελήσουμε τις τυρβώδεις διακυμάνσεις γράφοντας μια εξίσωση για τις μέσες τιμές των ποσοτήτων. Όπως είναι φανερό, οι όροι αυτοί είναι χαρακτηριστικοί της τύρβης και πρέπει να μοντελοποιηθούν κατάλληλα (δεν μπορούν να αμεληθούν) ώστε να προκύπτουν φυσικά σωστά αποτελέσματα. Η έννοια του «μοντέλου τύρβης» αναφέρεται στον τρόπο με τον οποίο θα περιγραφούν αυτοί οι όροι. Το πρόβλημα θεωρείται ακόμα ανοιχτό με αποτέλεσμα να υπάρχει ένα μεγάλο πλήθος μοντέλων τύρβης. Στη συνέχεια θα παρουσιαστεί σε συντομία μόνο τα μοντέλα k-ε και RNG k-ε τα οποία χρησιμοποιούνται στην παρούσα διατριβή. Περισσότερα για τα μοντέλα τύρβης ο αναγνώστης μπορεί να βρει σε κλασσικά βιβλία όπως των Launder & Sandham (2002), του Wilcox (2006) και του Pope (2000).

Η κατά Favre μέση χρονικά **εξίσωση διατήρησης μάζας** του συστατικού είναι

$$\frac{\partial \overline{\rho \tilde{Y}_k}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho \tilde{u}_j \tilde{Y}_k}) = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\overline{\rho D_k} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u_j'' \tilde{Y}_k''}) + \overline{\dot{\omega}_k} \quad (3.1.21)$$

όπου $\overline{\dot{\omega}_k}$ ο μέσος ρυθμός καύσης. Παρατηρούμε ότι, όπως και στις εξισώσεις ορμής, εμφανίζονται οι επιπλέον όροι $\overline{\rho u_j'' \tilde{Y}_k''}$ οι οποίοι και εδώ έχουν προκύψει από την ολοκλήρωση του όρου μεταφοράς $(\overline{\rho \tilde{u}_j \tilde{Y}_k})$. Η πιο κοινή πρακτική είναι οι όροι αυτοί να μοντελοποιούνται με όμοιο τρόπο όπως η μοριακή διάχυση, δηλαδή

$$\overline{\rho u_j'' \tilde{Y}_k''} = -\frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} \quad (3.1.22)$$

όπου μ_i η τυρβώδης συνεκτικότητα η οποία υπολογίζεται από το μοντέλο τύρβης (δες παρακάτω) και Sc_i ο τυρβώδης αριθμός Schmidt (κατ' αναλογία με τον αριθμό Schmidt) που ορίζεται σαν τον λόγο της τυρβώδους διάχυσης της ορμής προς την τυρβώδη διάχυση του συστατικού. Η τιμή η οποία συνήθως χρησιμοποιείται για τον τυρβώδη αριθμό Schmidt είναι 0.7, αλλά γενικά η «βέλτιστη» τιμή εξαρτάται από την εκάστοτε εφαρμογή (π.χ. δες Tominaga & Stathopoulos, 2007).

Ο όρος της μοριακής διάχυσης τέλος, είτε μοντελοποιείται σαν $-\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} = -\bar{\rho} \bar{D}_k \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j}$ (μέθοδος

που χρησιμοποιήθηκε και εδώ) είτε ενσωματώνεται στον όρο πηγής $\bar{\omega}_k$. Η αιτιολόγηση της δεύτερης περίπτωσης έχει να κάνει με το γεγονός ότι η μοριακή διάχυση παίζει σημαντικό ρόλο μόνο στην περιοχή του μετώπου της φλόγας, επηρεάζοντας την ταχύτητα καύσης. Το πάχος της φλόγας όμως με τη μέθοδο RANS συνήθως δεν επιλύεται (μέγεθος κελιών διακριτοποίησης μεγαλύτερα από το πάχος της φλόγας), με αποτέλεσμα η μοντελοποίηση που γίνεται στον ρυθμό καύσης να εμπεριέχει και την επίδραση της μοριακής διάχυσης σε αυτή και για αυτό να μην μοντελοποιείται ξεχωριστά (αφαίρεση του όρου μοριακής διάχυσης από την (3.1.21)). Σε κάθε περίπτωση πάντως στις τυρβώδεις ροές ο όρος αυτός είναι μικρός, οπότε μπορεί να αμεληθεί.

Η κατά Favre μέση χρονικά **εξίσωση διατήρησης της στατικής ενθαλπίας** είναι

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h}) = \frac{D\bar{p}}{Dt} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{F}_j^h) + \bar{\tau}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \right) \quad (3.1.23)$$

όπου

$$\bar{F}_j^h = -\bar{\lambda} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} - \bar{\rho} \sum_{k=1}^N \bar{D}_k \tilde{h}_k \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} \quad (3.1.24)$$

Ο τελευταίος όρος της εξ. (3.1.23) έχει προκύψει από την μοντελοποίηση του όρου $\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h}$ που προέκυψε από την ολοκλήρωση του όρου μεταφοράς $\rho u_j h$. Η απόδειξη της παραπάνω εξίσωσης όπως και κάποιες εναλλακτικές της μορφές που βρίσκονται στη βιβλιογραφία, παρουσιάζονται στο Παράρτημα Α.1.

3.1.3.1 Μοντέλα τύρβης

Όπως είδαμε η παραπάνω μέθοδος εισάγει στις εξισώσεις ορμής 6 νέους αγνώστους, τις τάσεις Reynolds $\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j$ οι οποίες πρέπει να προσδιοριστούν. Υπάρχουν δύο ομάδες μοντέλων τα οποία προσπαθούν να τις προσδιορίσουν ώστε να «κλείσουν» τις εξισώσεις. Η πρώτη ομάδα ονομάζεται «κλείσιμο πρώτης τάξης» (first order closure) και βασίζεται στην υπόθεση Boussinesq (Wilcox 2006), ενώ η δεύτερη ονομάζεται «κλείσιμο δεύτερης τάξης». Κύριος αντιπρόσωπος της δεύτερης ομάδας είναι το μοντέλο των τάσεων Reynolds (Reynolds Stress Model – RSM) (Launder et al. 1975) στο οποίο για κάθε τάση Reynolds $\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j$ επιλύεται και μία διαφορική εξίσωση μεταφοράς. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα το υψηλό υπολογιστικό κόστος. Επιπλέον οι εξισώσεις μεταφοράς των τάσεων εισάγουν νέους αγνώστους οι οποίοι πρέπει να μοντελοποιηθούν. Από την άλλη μεριά το μοντέλο αυτό έχει τη δυνατότητα να παράγει σε κάποιες περιπτώσεις (π.χ. όταν υπάρχει μεγάλη

ανισοτροπία των τάσεων) πολύ καλά αποτελέσματα εκεί που τα άλλα μοντέλα αποτυγχάνουν. Λόγω της πολυπλοκότητας τους όμως σπανίως χρησιμοποιούνται σε εφαρμογές μεγάλης κλίμακας. Στη συνέχεια θα αναφερθούμε μόνο στα μοντέλα πρώτης τάξης τα οποία κάνουν χρήση της υπόθεσης Boussinesq, καθώς αυτά είναι που χρησιμοποιήθηκαν και στην παρούσα διατριβή.

Όπως είδαμε στην παράγραφο 2.1, ένα βασικό χαρακτηριστικό της τύρβης είναι να εξάγει ενέργεια από τη μέση ροή, να την μεταβιβάζει από τις μεγάλες δίνες στις μικρές και τελικά να τη μετατρέπει σε θερμότητα (dissipation). Επιπλέον η τύρβη αυξάνει τη μεταφορά μάζας ορμής και θερμότητας στην κατεύθυνση κάθετη της κύριας ροής, ενισχύει δηλαδή φαινομενολογικά την διάχυση. Ανάλογα φαινόμενα συμβαίνουν (σε πολύ μικρότερο βαθμό) και στις στρωτές ροές, λόγω της συνεκτικότητας του ρευστού. Έτσι είναι φυσικό οι τάσεις Reynolds να μοντελοποιηθούν όπως οι συνεκτικές τάσεις τ_{ij} (με τις οποίες έχουν τις ίδιες μονάδες, kg/ms) στην εξ. (3.1.3). Έτσι εισάγεται η έννοια της τυρβώδους συνεκτικότητας μ_t , μέσω της οποίας οι τάσεις γράφονται

$$-\overline{\rho u_i'' u_j''} = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left(\mu_t \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} + \bar{\rho} k \right) \quad (3.1.25)$$

Η παραπάνω σχέση αποτελεί την υπόθεση Boussinesq. Ο όρος $\bar{\rho} k$ έχει προστεθεί στην εξίσωση έτσι ώστε στην περίπτωση της μη συμπιεστής ροής (όπου το άθροισμα των $\partial \tilde{u}_k / \partial x_k$ είναι μηδέν λόγω της εξίσωσης συνέχειας), αν προστεθούν οι τρεις κάθετες τάσεις να προκύπτει η εξίσωση της τυρβώδους κινητικής ενέργειας k (2.1.11). Χρησιμοποιώντας την υπόθεση Boussinesq, η μόνη διαφορά των κατά Favre εξισώσεων της ροής με τις στιγμιαίες (§3.1.1) είναι ουσιαστικά η εισαγωγή της τυρβώδους συνεκτικότητας.

Συνήθως στα μοντέλα τύρβης γίνεται η υπόθεση ότι η τυρβώδης συνεκτικότητα είναι ανάλογη μιας χαρακτηριστικής ταχύτητας και ενός χαρακτηριστικού μήκους της τύρβης. Έτσι ουσιαστικά τα μοντέλα διαφοροποιούνται ως προς τον τρόπο με τον οποίο υπολογίζονται αυτές οι ποσότητες. Τα μοντέλα τύρβης μπορούν να κατηγοριοποιηθούν με βάση το πλήθος των εξισώσεων μεταφοράς που επιλύονται προκειμένου να υπολογιστούν αυτές οι ποσότητες. Έτσι έχουμε μοντέλα τα οποία δεν απαιτούν την επίλυση καμίας επιπλέον εξίσωσης μεταφοράς (αλγεβρικά μοντέλα), τα μοντέλα που απαιτούν μία εξίσωση μεταφοράς και τα μοντέλα που απαιτούν δύο εξισώσεις μεταφοράς. Στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε ένα βασικό αλγεβρικό μοντέλο καθώς και τα μοντέλα δύο εξισώσεων k-ε και RNG k-ε, τα οποία χρησιμοποιήθηκαν στην παρούσα εργασία.

Αλγεβρικά μοντέλα

Στα αλγεβρικά μοντέλα τύρβης η τυρβώδης συνεκτικότητα υπολογίζεται με βάση τις μέσες τιμές των μεταβλητών της ροής από αλγεβρικές σχέσης χωρίς την επίλυση επιπλέον εξισώσεων μεταφοράς. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα τα μοντέλα αυτά να μην μπορούν να λάβουν υπ' όψιν τους σωστά την «ιστορία» της τύρβης καθώς αγνοείται η μεταφορά και η διάχυση της τυρβώδους κινητικής ενέργειας. Από την άλλη μεριά τα μοντέλα αυτά είναι απλά στην υλοποίηση τους και δεν απαιτούν επιπλέον υπολογιστική ισχύ.

Ο Prandtl το 1925 πρότεινε την εξής σχέση για την τυρβώδη συνεκτικότητα η οποία χρησιμοποιεί τον ρυθμό παραμόρφωσης σαν χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης:

$$\mu_t = C \bar{\rho} l_m^2 |\tilde{S}| \quad (3.1.26)$$

όπου C σταθερά, l_m το μήκος ανάμειξης και

$$|\tilde{S}| = \sqrt{2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij}}, \quad \tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.1.27)$$

$$2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij} = 2 \left(\frac{\partial \tilde{u}_1}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial \tilde{u}_2}{\partial y} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial \tilde{u}_3}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{u}_1}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{u}_2}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{u}_1}{\partial z} + \frac{\partial \tilde{u}_3}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{u}_2}{\partial z} + \frac{\partial \tilde{u}_3}{\partial y} \right)^2 \quad (3.1.28)$$

Σχέσεις για το μήκος ανάμειξης για κάποια ήδη ρών μπορούν παρουσιάζονται από τον (Rodi 1993). Άλλα γνωστά αλγεβρικά μοντέλα τα οποία είναι παραλλαγές του παραπάνω μοντέλου είναι το μοντέλο των Baldwin-Lomax και των Cebeci-Smith (Wilcox 2006).

Μοντέλα δύο εξισώσεων

Στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε το πιο γνωστό μοντέλο δύο εξισώσεων το οποίο έχει χρησιμοποιηθεί με επιτυχία σε πολλά είδη ρών, το k-ε, καθώς και μια παραλλαγή του, το RNG k-ε. Στο μοντέλο k-ε (Launder & Spalding 1974) επιλύονται δύο επιπλέον εξισώσεις μεταφοράς, μία για την τυρβώδη κινητική ενέργεια k και μια για την τυρβώδη μεταφορά ενέργειας ε . Η χαρακτηριστική ταχύτητα που χρησιμοποιεί είναι η $k^{1/2}$ ενώ το χαρακτηριστικό μήκος το $k^{3/2}/\varepsilon$ (δες και §2.1.3). Συνεπώς η τυρβώδης συνεκτικότητα υπολογίζεται από τη σχέση

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.1.29)$$

όπου $C_\mu = 0.09$. Η εξίσωση μεταφοράς για το k είναι:

$$\frac{\partial \bar{\rho} k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P + G - \bar{\rho} \varepsilon \quad (3.1.30)$$

όπου P και G αναπαριστούν την γέννηση της τυρβώδους κινητικής ενέργειας λόγω κλίσης της ταχύτητας και λόγω άνωσης αντίστοιχα:

$$G = -\frac{\mu_t}{\rho \text{Pr}_t} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} g_i$$

$$P = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \quad (3.1.31)$$

όπου σ_k ο τυρβώδης αριθμός Prandtl του k ο οποίος συνήθως λαμβάνεται ίσως με 1. Η εξίσωση μεταφοράς για το ε είναι:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} (P + C_{\varepsilon 3} G) - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.1.32)$$

όπου η συνήθη επιλογή για τις σταθερές είναι η $C_{\varepsilon 1}=1.44$ και $C_{\varepsilon 2}=1.92$ ενώ για τον αριθμό Prandtl του ε η $\sigma_{\varepsilon}=1.3$. Η σταθερά $C_{\varepsilon 3}$ καθορίζει το βαθμό στον οποίο η άνωση επηρεάζει το ε (Markatos & Pericleous 1984). Μια επιλογή η οποία χρησιμοποιήθηκε και στην παρούσα εργασία είναι (Venetsanos et al. 2010) η $C_{\varepsilon 3}=0$ αν $G \leq 0$ (ευσταθής κατάσταση) και $C_{\varepsilon 3}=1$ αν $G > 0$ (ασταθής κατάσταση). Μια άλλη επιλογή είναι η χρήση της εξίσωσης $C_{\varepsilon 3} = \tanh\left|\frac{w}{u}\right|$ (Henkes et al. 1991) όπου w είναι η συνιστώσα της ταχύτητας στην κατεύθυνση της βαρύτητας και u η συνιστώσα κάθετη σε αυτή. Η σχέση αυτή δίνει τιμή ίση με το 0 όταν η κατεύθυνση της ροής είναι κάθετη στην κατεύθυνση της βαρύτητας και 1 όταν οι κατευθύνσεις συμπίπτουν.

Το μοντέλο **RNG k-ε** αναπτύχθηκε χρησιμοποιώντας μια μαθηματική τεχνική που ονομάζεται επανα-κανονικοποίηση (renormalization) προκειμένου να ληφθούν υπ' όψιν όλες οι κλίμακες της τύρβης (Yakhot & Orszag 1986). Στο k-ε μοντέλο η τυρβώδης συνεκτικότητα καθορίζεται από μία μόνο κλίμακα μήκους, ενώ στην πραγματικότητα όλες οι κλίμακες συμβάλουν στην τύρβη. Οι εξισώσεις μεταφοράς για το k και το ε είναι παρόμοιες με αυτές του μοντέλου k-ε (με μπλε υπογραμμίζονται μόνο οι διαφορές):

$$\frac{\partial \bar{\rho} k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P + G - \bar{\rho} \varepsilon \quad (3.1.33)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_{\varepsilon}} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} (P + C_{\varepsilon 3} G) - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} - R_{\varepsilon} \quad (3.1.34)$$

όπου $\mu_{eff} = (\sqrt{\mu} + \sqrt{\mu_t})^2$ (το άθροισμα $\mu + \mu_t$ στις ολοκληρωμένες εξισώσεις ορμής αντικαθίσταται από το μ_{eff}) και το μ_t δίνεται από τη σχέση (3.1.29) του k-ε μοντέλου. Οι σταθερές του μοντέλου είναι ελαφρώς διαφορετικές από του κλασικού k-ε μοντέλου: $C_{\mu} = 0.0845$, $C_{\varepsilon 1} = 1.42$ και $C_{\varepsilon 2} = 1.68$. Ο επιπλέον όρος R_{ε} ο οποίος βελτιώνει την ακρίβεια του μοντέλου σε έντονα παραμορφωμένες ροές, δίνεται από τη σχέση

$$R_{\varepsilon} = \frac{C_{\mu} \bar{\rho} \eta^3 (1 - \eta/\eta_0) \varepsilon^2}{1 + \beta \eta^3} k \quad (3.1.35)$$

όπου $\eta = |\tilde{S}|k/\varepsilon$, $\eta_0 = 4.38$ και $\beta = 0.012$. Τέλος, οι αριθμοί σ_k , σ_{ε} , Pr_t και Sc_t δεν είναι σταθερές αλλά υπολογίζονται με βάση τη σχέση

$$\frac{\mu}{\mu_{eff}} = \left| \frac{1/\sigma_t - 1.3929}{1/\sigma - 1.3929} \right|^{0.6321} \left| \frac{1/\sigma_t + 2.3929}{1/\sigma + 2.3929} \right|^{0.3679} \quad (3.1.36)$$

όπου το σ_t είναι ένα από τα σ_k , σ_{ε} , Pr_t και Sc_t , ενώ σ είναι η αντίστοιχη τιμή της στρωτής ροής (ίση με 1 για τα σ_k και σ_{ε}). Για έντονα τυρβώδη ροή η παραπάνω σχέση δίνει $\sigma_k = \sigma_{\varepsilon} = 1/1.3929 = 0.7179$.

Άλλα πολύ γνωστά μοντέλα δύο εξισώσεων είναι το **k-ω** (Wilcox 2006; 2008) και το **SST** (Menter 1994). Το πρώτο, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι προτάθηκε αρχικά από τον Kolmogorov το 1942 και

στη συνέχεια αναπτύχθηκε από άλλους ερευνητές και κυρίως τον Wilcox. Υπάρχουν διάφορες παραλλαγές του μοντέλου. Το ω για το οποίο επιλύεται εξίσωση μεταφοράς είναι ο ρυθμός καταστροφής ανά μονάδα τυρβώδους κινητικής ενέργειας, δηλαδή ο λόγος ε/k , ο οποίος μπορεί να μεταφραστεί και σαν συχνότητα της τύρβης καθώς έχει μονάδες $1/s$. Το μοντέλο SST (Shear-Stress Transport) είναι ένας συνδυασμός των μοντέλων k-ε και k- ω . Χρησιμοποιεί το μοντέλο k- ω στις περιοχές κοντά στα τοιχώματα και το k-ε στις υπόλοιπες. Το μοντέλο αυτό έχει δείξει πολύ καλή συμπεριφορά σε ροές αντίθετης κλίσης πίεσης (adverse pressure gradient) και σε ροές διαχωρισμού (separating flows).

3.1.3.2 Σχολιασμός των κατά Favre μέσων όρων

Παρόλο που η κατά Favre μέση τιμή φαίνεται να λύνει το πρόβλημα των νέων όρων, στην ουσία είναι απλά ένας μαθηματικός φορμαλισμός, καθώς οι συσχετίσεις των διακυμάνσεων της πυκνότητας $\overline{\rho'f'}$ ουσιαστικά κρύβονται στην κατά Favre διαδικασία. Αυτό φαίνεται και από το γεγονός ότι η σχέση που συνδέει την συνήθη μέση τιμή \bar{f} με την κατά Favre \tilde{f} είναι η

$$\bar{\rho}\tilde{f} = \bar{\rho}\bar{f} + \overline{\rho'f'} \quad (3.1.37)$$

Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα η απευθείας σύγκριση μιας Favre τιμής \tilde{f} (που υπολογίζεται από την επίλυση των εξισώσεων που περιγράψαμε) με το πείραμα να μην είναι δυνατή, καθώς αυτό που μετρείται στο πείραμα είναι συνήθως η ποσότητα \tilde{f} και όχι η \bar{f} . Παρόλο που η διαφορά τους μπορεί να είναι πολύ μικρή σε ίσο-θερμοκρασιακές ροές, όπως π.χ. στο πείραμα διασποράς ηλίου των O'Hern et al. (2005), δεν ισχύει το ίδιο και για μη ίσο-θερμοκρασιακές ροές όπου οι διαφορές μπορεί να είναι μεγαλύτερες (Veynante & Vervisch 2002). Στις περιπτώσεις εκρήξεων όμως που μελετάμε στην παρούσα εργασία, το κύριο μέγεθος που συγκρίνεται με το πείραμα είναι η πίεση, στην οποία δεν χρησιμοποιείται η Favre μέση τιμή αλλά η συνήθης, συνεπώς η σύγκριση με το πείραμα είναι ασφαλής.

3.1.3.3 Σχολιασμός της μοντελοποίησης της τυρβώδους μεταφοράς

Η μοντελοποίηση των τυρβωδών ροών $\overline{\rho u_j'' Y_k''}$ και $\overline{\rho u_j'' h_k''}$ μεταφοράς των συστατικών και της ενέργειας αντίστοιχα έγινε με βάση τις σχέσεις (3.1.22) και (A.1.15), οι οποίες επαναλαμβάνονται εδώ:

$$\begin{aligned} \overline{\rho u_j'' Y_k''} &= -\frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} \\ \overline{\rho u_j'' h_k''} &= -\frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{h}_k}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (3.1.38)$$

Οι σχέσεις αυτές είναι ουσιαστικά μια επέκταση του νόμου του Fick και Fourier για την διάχυση μάζας και ενέργειας. Η ιδέα αυτού του τρόπου μοντελοποίησης έχει να κάνει με την φυσική της τύρβης. Όπως είπαμε στην παράγραφο 2.1, η τύρβη προκαλεί έντονη ανάμειξη των συστατικών και μεγαλύτερη διάχυση της θερμότητας σε σχέση με μια στρωτή ροή. Έτσι είναι φυσικό οι παραπάνω τυρβώδεις ροές να μοντελοποιηθούν με τέτοιο τρόπο ώστε να προκαλέσουν αύξηση της ανάμειξης και της διάχυσης της θερμότητας. Έτσι χρησιμοποιούνται οι νόμοι Fick και Fourier αλλά με

συντελεστή διάχυσης (μ_t/Sc_t και μ_t/Pr_t) ο οποίος εξαρτάται από την ένταση της τύρβης (μέσω του μ_t). Σε περιπτώσεις πλήρως αναπτυγμένης τύρβης, οι συντελεστές αυτές αναμένονται να είναι αρκετά μεγαλύτεροι από τους αντίστοιχους των στρωτών όρων διάχυσης D και λ . Έτσι σε τυρβώδεις ροές, πολλές φορές οι «στρωτοί» όροι αμελούνται.

Στις περιπτώσεις καύσης προ-αναμεμειγμένου μείγματος όμως, έχει παρατηρηθεί από θεωρητικές (μοντέλο Bray-Moss-Libby, Bray & Libby 1976) πειραματικές αλλά και υπολογιστικές μελέτες DNS (Veynante et al. 1997), ότι η παραπάνω μοντελοποίηση μπορεί να μην είναι σωστή, και η τυρβώδης διάχυση να έχει την αντίθετη κατεύθυνση από αυτή που προβλέπεται από τις παραπάνω σχέσεις (Bray et al. 1981, Libby & Bray 1981). Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται «τυρβώδης μεταφορά αντίθετη της κλίσης» (counter-gradient diffusion) και εμφανίζεται στην περιοχή της φλόγας με χαμηλής έντασης τύρβη. Στην χαμηλής έντασης τύρβη, η θερμική διαστολή λόγω της έκλυσης θερμότητας υπερσχύει της τύρβης με αποτέλεσμα η φλόγα να επιβάλει τη δική της δυναμική οπότε έχουμε το φαινόμενο της «διάχυσης αντίθετης της κλίσης». Από την άλλη όταν η τύρβη είναι υψηλή, το φλόγα δεν μπορεί να επιβληθεί στη ροή με αποτέλεσμα η τυρβώδης διάχυση να έχει το συνήθως πρόσημο που προβλέπουν οι σχέσεις (3.1.38). Για πρακτικές εφαρμογές, η μετάβαση από το φαινόμενο αυτό θεωρείται ότι γίνεται περίπου για $u'_0/S_L = 3$ (Veynante & Vervisch 2002, §8.3). Το φαινόμενο αυτό συνήθως αμελείται κατά την μοντελοποίηση¹, πράγμα που θα ακολουθηθεί και στην παρούσα εργασία.

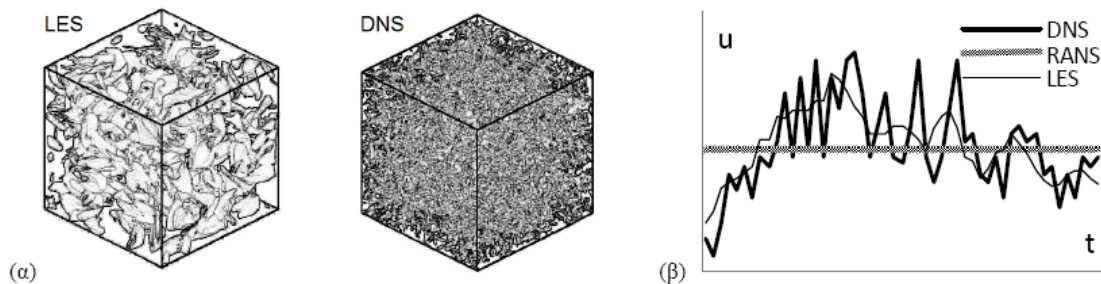
3.1.4 Μέθοδος LES

Στη μέθοδος των μεγάλων δινών (Large Eddy Simulation – LES) οι μεγάλες ασταθείς τριδιάστατες τυρβώδεις κινήσεις επιλύονται απευθείας χωρίς την ανάγκη μοντελοποίησης τους, ενώ η επίδραση των μικρότερων δομών που δεν μπορούν να επιλυθούν από το πλέγμα (υποπλεγματικές δομές) μοντελοποιούνται. Οι μεγαλύτερες δίνες (αυτές που επιλύονται) περικλείουν το μεγαλύτερο ποσοστό της ενέργειας, διατηρούν την ταυτότητά τους περισσότερο χρόνο και σχετίζονται με μακροσκοπικά χαρακτηριστικά της ροής όπως γεωμετρία και οριακές συνθήκες. Οι μικρότερες δομές θεωρείται ότι έχουν παρόμοια ισότροπη συμπεριφορά στα περισσότερα είδη τυρβωδών ροών, με αποτέλεσμα να μπορούν να μοντελοποιηθούν εύκολα με γενικό τρόπο. Το σημείο διαχωρισμού των μικρών και των μεγάλων δινών καθορίζεται από την απαίτηση να υπολογιστεί το μεγαλύτερο ποσοστό της τυρβώδους ενέργειας (συνήθως απαιτείται το 80%). Αυτό το σημείο βρίσκεται μέσα στην αδρανειακή υπο-περιοχή (Σχήμα 2.1.5) και έχει χαρακτηριστική διάσταση πολύ μεγαλύτερη από την κλίμακα Kolmogorov, οπότε μπορούν να χρησιμοποιηθούν αραιότερα πλέγματα από αυτά της μεθόδου DNS.

Το γεγονός ότι έχουμε επίλυση κάποιων τυρβωδών δομών έχει αντίκτυπο στα αποτελέσματα που δίνει η μέθοδος LES σε σύγκριση με τη μέθοδο RANS και DNS. Για παράδειγμα στο Σχήμα 3.1.1, βλέπουμε αντιπροσωπευτικές απεικονίσεις των αποτελεσμάτων που δίνουν οι τρεις μέθοδοι. Στο πρώτο μέρος του σχήματος, βλέπουμε ότι η μέθοδος LES είναι ικανή να προσομοιώσει κάποιες από τις τυρβώδεις δομές, σε μικρότερο όμως βαθμό από μια προσομοίωση DNS. Η μέθοδος RANS δεν

¹Ένας τρόπος μοντελοποίησης του που έχει εφαρμοστεί σε κάποιες εργασίες, είναι επιλύοντας επιπλέον εξισώσεις μεταφοράς για τις τυρβώδεις ροές $\overline{u_j''Y_k''}$ (Veynante & Vervisch 2002, §8.6).

είναι ικανή να εκτιμήσει τέτοιες δομές και για αυτό δεν υπάρχει αναπαράσταση της στο σχήμα. Στο δεύτερο μέρος του σχήματος απεικονίζεται η χρονοσειρά της ταχύτητας σε μια περίπτωση όπου η μέση ροή είναι σταθερή. Παρατηρούμε ότι η μέθοδος LES είναι σε θέση να εκτιμήσει τις τυρβώδεις διακυμάνσεις, καθώς η χρονοσειρά της παρουσιάζει ταλαντώσεις. Οι ταλαντώσεις αυτές είναι λιγότερο έντονες από αυτές που δίνει η μέθοδος DNS, καθώς μόνο ένα μέρος της τύρβης επιλύεται (ουσιαστικά η χρονοσειρά του LES έχει προκύψει από τη διαδικασία φιλτραρίσματος της χρονοσειράς του DNS και γι' αυτό παρουσιάζεται πιο ομαλή). Από την άλλη μεριά η μέθοδος RANS δεν μπορεί να μας δώσει τις διακυμάνσεις της ταχύτητας και αυτό που εκτιμά είναι μόνο η μέση τιμή.



Σχήμα 3.1.1: (α) Σύγκριση μεθόδου LES και DNS ως προς τον βαθμό αναπαράστασης των τυρβωδών δομών, (β) Τυπική χρονοσειρά ταχύτητας από προσομοίωση DNS, LES και RANS (Κουτσοουράκης 2014).

Από πλευράς ακρίβειας η μέθοδος LES θεωρείται ότι είναι πιο ακριβής από τα μοντέλα RANS (ακόμα και από αυτά της δεύτερης τάξης π.χ. τάσεων Reynolds) και λιγότερο ακριβής από τη μέθοδο DNS καθώς εκεί όλες οι κλίμακες της τύρβης επιλύονται. Τα βασικά βήματα της μεθόδου LES θα μπορούσαμε να πούμε ότι είναι τα εξής (Pope 2000):

- Εφαρμόζεται στην ταχύτητα ένα χωρικό φίλτρο, με αποτέλεσμα αυτή να αναλύεται σαν $u = \hat{u} + u_{sgs}$ όπου \hat{u} είναι το επιλυόμενο (resolved) μέρος της ενώ u_{sgs} το μη-επιλυόμενο (unresolved) ή αλλιώς υπο-πλεγματικό (sub-grid) μέρος. Το πεδίο των φιλτραρισμένων ταχυτήτων \hat{u} είναι τριδιάστατο και χρονικά μη σταθερό, καθώς αναπαριστά την κίνηση των μεγάλων δινών.
- Οι εξισώσεις που περιγράφουν το \hat{u} παράγονται από τις στιγμιαίες εξισώσεις (§3.1.1) με την εφαρμογή του φίλτρου. Οι εξισώσεις που προκύπτουν είναι όμοιες με τις αρχικές, με βασική όμως διαφορά ότι οι εξισώσεις ορμής περιλαμβάνουν το υπο-πλεγματικό μέρος του τανιστή των τάσεων, το οποίο προκύπτει από το υπο-πλεγματικό μέρος των ταχυτήτων.
- Το υπο-πλεγματικό μέρος των τάσεων χρήζει μοντελοποίησης. Πολύ συχνά χρησιμοποιούνται απλά μοντέλα, όπως είναι το μοντέλο Smagorinsky που θα δούμε στη συνέχεια.
- Επίλυση των εξισώσεων για τον υπολογισμό των φιλτραρισμένων ποσοτήτων.

Οι μεταβλητές στη μέθοδο μπορούν να φιλτραριστούν είτε στον φασματικό χώρο (spectral space) είτε στον φυσικό. Η φιλτραρισμένη ποσότητα για την περίπτωση σταθερής πυκνότητας ισούται με

$$\bar{f}(x) = \int f(x') F(x - x') dx' \quad (3.1.39)$$

όπου F η συνάρτηση του φίλτρου που επιλέγεται. Για την περίπτωση όπου η πυκνότητα δεν είναι σταθερή έχουμε,

$$\bar{\rho}\tilde{f}(x) = \int \rho f(x')F(x-x')dx' \quad (3.1.40)$$

Στις παραπάνω σχέσεις αλλά και στη συνέχεια χρησιμοποιούμε για ευκολία τους ίδιους συμβολισμούς \bar{f} και \tilde{f} που χρησιμοποιήθηκαν στη μέθοδο RANS, εννοώντας εδώ όμως τη φιλτραλισμένη ποσότητα και όχι τον μέσο όρο. Κάποια συνήθη φίλτρα είναι το «φίλτρο αποκοπής» (στον φασματικό χώρο) όπου διατηρούνται μόνο οι κλίμακες μήκους μεγαλύτερες από το μήκος αποκοπής, το «φίλτρο κουτιού» (στον φυσικό χώρο) το οποίο αντιστοιχεί στη μέση τιμή πάνω σε ένα κυβικό κουτί και το «φίλτρο Gauss» (στον φυσικό χώρο). Η εφαρμογή του φίλτρου στις στιγμιαίες εξισώσεις διατήρησης (§3.1.1) πρέπει να γίνει με προσοχή καθώς σε αντίθεση με τη μέθοδο RANS ισχύει ότι $\overline{f'} \neq 0$, $\overline{\tilde{f}} \neq \tilde{f}$, $\overline{f''} \neq 0$, $\overline{\tilde{f}'} \neq \tilde{f}'$. Επίσης η εναλλαγή του φίλτρου με τον τελεστή παραγωγή, δηλαδή η ισότητα $\overline{\partial f / \partial x} = \partial \bar{f} / \partial x$, ισχύει μόνο κάτω από περιοριστικές υποθέσεις και είναι λάθος για παράδειγμα όταν το μέγεθος του φίλτρου που αντιστοιχεί στο μέγεθος του υπολογιστικού κελιού μεταβάλλεται χωρικά (δηλαδή έχουμε μη-ομοιόμορφο πλέγμα). Οι Ghosal & Moyn (1995) έκαναν μια εκτίμηση του λάθους που εισάγεται για αυτό το λόγο. Συνήθως στην πράξη σφάλματα τέτοιου είδους αμελούνται και οι επιπτώσεις τους θεωρείται ότι ενσωματώνονται στο υποπλεγματικό μοντέλο. Σφάλματα έχουμε επίσης όταν το φίλτρο μεταβάλλεται με τον χρόνο, λόγω κινούμενων πλεγμάτων.

Οι εξισώσεις που προκύπτουν από τη διαδικασία φιλτραρίσματος είναι αρκετά όμοιες με αυτές της μεθόδου RANS (§3.1.3). Συνοπτικά οι εξισώσεις είναι (Poinsot & Veynante 2005):

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j) = 0 \quad (3.1.41)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{u}_i) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}(\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i\tilde{u}_j)) + \bar{\rho}g_i \quad (3.1.42)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{Y}_k) = -\frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{-\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j}}) - \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}(\widetilde{u_i Y_k} - \tilde{u}_i\tilde{Y}_k)) + \bar{\omega}_k \quad (3.1.43)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{h}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{h}) = \frac{D\bar{p}}{Dt} - \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{F}_j^h) + \bar{\tau}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}(\widetilde{u_i h} - \tilde{u}_i\tilde{h})) \quad (3.1.44)$$

Στις παραπάνω εξισώσεις οι όροι μοριακής διάχυσης, στρωτών τάσεων και ολικής παραγωγής της πίεσης μοντελοποιούνται συνήθως με παρόμοιο τρόπο με τη μέθοδο RANS. Για την μοντελοποίηση των υπόλοιπων όρων, $T_{ij} = \widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i\tilde{u}_j$, $\widetilde{u_i Y_k} - \tilde{u}_i\tilde{Y}_k$, $\widetilde{u_i h} - \tilde{u}_i\tilde{h}$ θα μπορούσαν να ακολουθηθούν λογικές που αναπτύχθηκαν στη μέθοδο RANS. Παρόλα αυτά στο LES υπάρχει επιπλέον πληροφορία λόγω της απευθείας επίλυσης των μεγάλων δινών. Έτσι τα μοντέλα μπορούν να βασιστούν σε υποθέσεις ομοιότητας, υπολογίζοντας την επίδραση των μεγάλων δινών στις μικρές.

Το πιο γνωστό και παλιό μοντέλο είναι το **μοντέλο Smagorinsky** το οποίο έχει να επιδείξει πολύ καλά αποτελέσματα. Στο μοντέλο αυτό οι υποπλεγματικές τάσεις T_{ij} μοντελοποιούνται με βάση την υπόθεση Boussinesq σύμφωνα με τη σχέση

$$T_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}T_{kk} = -\nu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) = -2\nu_t \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\tilde{S}_{ij} \right) \quad (3.1.45)$$

Το ισότροπο μέρος των υποπλεγματικών τάσεων T_{kk} ενσωματώνεται συνήθως στη φιλτραρισμένη πίεση \bar{p} (Erlebacher et al. 1992), ενώ το υποπλεγματικό κινηματικό ιξώδες ν_t μοντελοποιείται ως εξής

$$\nu_t = (C_S \Delta)^2 |\tilde{S}| = (C_S \Delta)^2 \sqrt{2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij}} \quad (3.1.46)$$

όπου Δ το πλάτος του φίλτρου το οποίο συνήθως λαμβάνεται ίσο με $V^{1/3}$ όπου V ο όγκος του υπολογιστικού κελιού και C_S η σταθερά Smagorinsky. Μία τιμή για την σταθερά γύρω από το 0.1 φαίνεται να είναι κοντά στη βέλτιστη για τις περισσότερες περιπτώσεις. Παρατηρούμε ότι καθώς πυκνώνουμε το πλέγμα το Δ μικραίνει οπότε οι υποπλεγματικές τάσεις τείνουν στο μηδέν.

Το βασικό μοντέλο το οποίο χρησιμοποιήθηκε στην παρούσα διατριβή είναι το **μοντέλο RNG LES**. Το μοντέλο αυτό αναπτύχθηκε χρησιμοποιώντας την μαθηματική τεχνική που ονομάζεται επανακανονικοποίηση (renormalization) προκειμένου να ληφθούν υπ' όψιν όλες οι κλίμακες της τύρβης (Yakhot & Orszag 1986). Έχει το πλεονέκτημα ότι θεωρητικά προβλέπει καλύτερα από τα άλλα μοντέλα τις περιπτώσεις όπου έχουμε και στρωτή ροή ή τις περιπτώσεις μετάβασης στην τύρβη. Αυτός είναι και ο κύριος λόγος που προτιμήθηκε το μοντέλο αυτό καθώς στις περιπτώσεις έκρηξης σε ακίνητο περιβάλλον στα πρώτα στάδια της έκρηξης η ροή είναι στρωτή. Επίσης έχει το πλεονέκτημα ότι δεν απαιτεί τον προσδιορισμό σταθερών, καθώς η σταθερά του Smagorinsky (αλλά και άλλες σταθερές όπως φαίνεται στη συνέχεια) που εμφανίζεται και σε αυτό το μοντέλο, παίρνει συγκεκριμένη τιμή ($C_S = 0.157$) που προκύπτει μέσα από τη θεωρία του μοντέλου. Επίσης δεν επιβαρύνει πολύ τους υπολογισμούς και δεν απαιτεί διόρθωση κοντά στο στερεό όριο. Η υποπλεγματική συνεκτικότητα μ_t δίνεται από τη χρήση των ακόλουθων εξισώσεων

$$\mu_{eff} = \mu [1 + H(x_0)]^{1/3} \quad (3.1.47)$$

$$x_0 = \frac{\mu_s^2 \mu_{eff}}{\mu^3} - 100 \quad (3.1.48)$$

$$H(x) = \begin{cases} x, & x > 0 \\ 0, & x \leq 0 \end{cases} \quad (3.1.49)$$

$$\mu_s = \bar{\rho} (C_S \Delta)^2 \sqrt{2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij}} \quad (3.1.50)$$

Οι ποσότητες $\widetilde{u_i \tilde{Y}_k} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k$ και $\widetilde{u_i \tilde{h}} - \tilde{u}_i \tilde{h}$ μοντελοποιούνται (τόσο στο μοντέλο Smagorinsky όσο και στο RNG LES) με την υπόθεση της κλίσης, όμοια με τη μέθοδο RANS (§3.1.3.3), κάνοντας χρήση της υποπλεγματικής συνεκτικότητας. Στο RNG LES για τον υπολογισμό των τυρβωδών αριθμών Prandtl και Schmidt χρησιμοποιείται η σχέση (3.1.36) που χρησιμοποιείται και στο RNG k-ε μοντέλο.

Τέλος πρέπει να αναφέρουμε ένα άλλο σημαντικό υποπλεγματικό μοντέλο, το **δυναμικό μοντέλο Smagorinsky** (dynamic Smagorinsky). Στο μοντέλο αυτό η σταθερά C_s δεν έχει σταθερή τιμή αλλά υπολογίζεται δυναμικά κατά την διάρκεια της προσομοίωσης. Έτσι η σταθερά λαμβάνει διαφορετικές τιμές από σημείο σε σημείο στο χώρο ανάλογα με τις τοπικές συνθήκες της ροής. Η βασική ιδέα είναι η σταθερά να εκτιμηθεί εφαρμόζοντας ένα δεύτερο δοκιμαστικό φίλτρο στις επιλυόμενες κλίμακες, με διάσταση μεγαλύτερη από το αρχικό φίλτρο. Το μοντέλο αυτό προτάθηκε αρχικά από τον Germano (1992) και βελτιώθηκε στη συνέχεια από τον Lilly (1992).

Περισσότερες λεπτομέρειες για τη μέθοδο LES ο αναγνώστης μπορεί να βρει στο κλασικό βιβλίο του Sagaut (2006) καθώς και στις εργασίες ανασκόπησης των Piomelli & Chasnou (1996), Lesieur & Metais (1996), Piomelli (1999), Meneveau & Katz (2000), Pitsch (2006) και Georgiadis et al. (2010). Όσο αφορά την ελληνική βιβλιογραφία μια πολύ καλή εισαγωγή στη μέθοδο γίνεται από τον Κουτσοράκη (2014).

3.1.4.1 Είδη φιλτραρίσματος και ανεξαρτησία πλέγματος

Ένας βασικός διαχωρισμός της μεθόδου LES γίνεται με βάση τον τρόπο με τον οποίο εφαρμόζεται το φίλτρο στις εξισώσεις. Έτσι, τα βήματα της μεθόδου LES που παρουσιάστηκαν στην προηγούμενη παράγραφο δεν ακολουθούνται πάντα αυστηρά. Η κύρια διαφοροποίηση είναι ότι συνήθως δεν γίνεται μια ξεχωριστή διαδικασία φιλτραρίσματος στις εξισώσεις, αλλά η διακριτοποίηση των εξισώσεων (π.χ. πεπερασμένοι όγκοι) ισοδυναμεί με ένα έμμεσο ή αλλιώς **μη-ρητό φιλτράρισμα** (implicit filtering) με μέγεθος φίλτρου Δ όσο και το μήκος των κελιών. Στην περίπτωση αυτή δεν υπάρχει κάποιο ρητό φίλτρο (explicit filter) που εφαρμόζεται στις εξισώσεις (όπως αυτά που αναφέρθηκαν προηγουμένως), αλλά γίνεται η εφαρμογή ενός άγνωστου μεν αλλά υπαρκτού φίλτρου καθώς κάθε κλίμακα μικρότερη από το πλέγμα απορρίπτεται. Το μη-ρητό αυτό φίλτρο μπορεί να κάποιες περιπτώσεις να θεωρηθεί προσεγγιστικά ότι αντιστοιχεί στο φίλτρο κουτιού. Γενικά η διαδικασία της μοντελοποίησης με ρητό φίλτρο δεν είναι τόσο άμεση και απλή όσο αυτή της μοντελοποίησης με μη-ρητό φίλτρο και γι' αυτό χρησιμοποιείται σε λίγες περιπτώσεις, είτε για θεωρητική μελέτη της μεθόδου για ανάλυση σφαλμάτων είτε για αύξηση της ακρίβειας. Η αύξηση της ακρίβειας γίνεται με αυξημένο υπολογιστικό κόστος, καθώς για το ίδιο φίλτρο μεγέθους Δ , το πλέγμα πρέπει να είναι τουλάχιστον δύο φορές πυκνότερο σε κάθε διάσταση. Αυτός είναι και ένας από τους λόγους όπου τα μη-ρητά φίλτρα έχουν επικρατήσει σε πρακτικές εφαρμογές, καθώς θεωρείται προτιμητέο το αυξημένο υπολογιστικό κόστος να διατεθεί σε πύκνωση του πλέγματος-φίλτρου στη διαδικασία μη-ρητού φιλτραρίσματος με ταυτόχρονη μείωση του μήκους του φίλτρου.

Ο τρόπος εφαρμογής του φίλτρου έχει αντίκτυπο και στην σημασία της ανεξαρτησίας πλέγματος. Στη διαδικασία ρητού φιλτραρίσματος, η πύκνωση του πλέγματος οδηγεί σε σύγκλιση στην πραγματική LES λύση (λύση των φιλτραρισμένων εξισώσεων), ενώ στη διαδικασία μη-ρητού φιλτραρίσματος η λύση θεωρείται ότι συγκλίνει στη λύση που θα έδινε η μέθοδος DNS καθώς σε κάθε πύκνωση του πλέγματος μειώνεται το πλάτος του φίλτρου (Gullbrand 2003). Η έννοια λοιπόν της ανεξαρτησίας πλέγματος δεν είναι η ίδια με αυτή της μεθόδου RANS και αυστηρή ανεξαρτησία πλέγματος μπορεί να επιτευχθεί μόνο με την εφαρμογή ρητών φίλτρων. Περισσότερα για τα θέματα της ανεξαρτησίας πλέγματος και της χρήσης ρητών φίλτρων για ανάλυση σφαλμάτων ο αναγνώστης μπορεί να βρει στις εργασίες των Meyers et al. (2003), Gullbrand & Chow (2003),

Geurts (2006), Gant (2010) και Bose et al. (2010). Στην παρούσα εργασία γίνεται χρήση αποκλειστικά μη-ρητού φιλτραρίσματος που είναι και η συνήθης πρακτική.

3.1.4.2 Διαφορές LES και URANS

Όπως περιγράψαμε στην παράγραφο §3.1.1, στη μέθοδο RANS γίνεται χρονική ολοκλήρωση των εξισώσεων και οι μεταβλητές που υπολογίζονται αποτελούν χρονικά μέσες τιμές. Γι' αυτό και η μέθοδος αυτή είναι καταλληλότερη για ροές που δεν μεταβάλλονται με τον χρόνο (steady state). Παρόλα αυτά η μέθοδος RANS μπορεί να εφαρμοστεί και για χρονομεταβαλλόμενα προβλήματα, λόγω του μεταβατικού (transient) χρονικού όρου που περιέχουν οι εξισώσεις διατήρησης. Η μέθοδος αυτή αναφέρεται πολλές φορές στη βιβλιογραφία σαν URANS (Unsteady RANS). Στη μέθοδο αυτή θεωρούμε ουσιαστικά ότι έχουμε δυο κλίμακες χρόνου, αυτή της τύρβης ως προς την οποία ολοκληρώνονται οι εξισώσεις και αυτή της ροής η οποία θεωρείται αρκετά μεγαλύτερη και στην οποία επιλύουμε. Έτσι η μέθοδος URANS μπορεί να θεωρηθεί σαν διαδοχικές RANS προσομοιώσεις διαφορετικών κάθε φορά αρχικών συνθηκών.

Καθώς οι τελικές διατυπώσεις των εξισώσεων στις μεθόδους URANS και LES είναι παρόμοιες, ενδιαφέρον έχει να αναφέρουμε τις βασικές διαφορές των δύο μεθόδων που κάνουν τελικά τα αποτελέσματα να διαφέρουν. Καταρχήν στη μέθοδο RANS έχουμε χρονικά μέσες εξισώσεις, ενώ στο LES χωρικά φιλτραρισμένες. Έτσι με την πύκνωση του πλέγματος το κλασικό (μη-ρητό) LES τείνει στο DNS καθώς η συνεισφορά του υποπλεγματικού μοντέλου τείνει στο μηδέν, ενώ στο URANS η λύση τείνει σε μία σταθερή τιμή, τη λύση των χρονικά μέσων εξισώσεων. Επίσης οι απαιτήσεις στο πλέγμα είναι διαφορετικές, καθώς στο LES απαιτείται πυκνότερο και πιο ομοιόμορφο πλέγμα. Επίσης στη μέθοδο URANS μπορεί να γίνει επίλυση σε μια ή δύο διαστάσεις καθώς και να χρησιμοποιηθούν οι συμμετρίες της γεωμετρίας λύνοντας μόνο το συμμετρικό πρόβλημα. Από την άλλη στο LES αυτό δε μπορεί να γίνει καθώς η τύρβη είναι εγγενώς τριδιάστατη, οπότε τέτοιες θεωρήσεις οδηγούν σε κατάπνιξη των δινών.

Διαφορετικές απαιτήσεις υπάρχουν επίσης ως προς το χωρικό και χρονικό σχήμα διακριτοποίησης. Όσο αφορά τη χρονική διακριτοποίηση, στο LES απαιτούνται σχήματα δεύτερης τάξης και μικρά χρονικά βήματα όπου στο RANS δεν είναι συνήθως απαραίτητα. Όσο αφορά το χωρικό σχήμα διακριτοποίησης, ενώ στη μέθοδο URANS (όπου η τυρβώδη διάχυση του μοντέλου τύρβης είναι μεγάλη) ακόμα και ένα απλό ανάντι σχήμα διακριτοποίησης μπορεί να είναι αρκετό, στο LES χρειάζονται διαφορετικά σχήματα (με πιο συνηθισμένο αυτό των κεντρικών διαφορών λόγω της πολύ χαμηλής αριθμητικής διάχυσης που παρουσιάζει), έτσι ώστε να μην καταστρέφονται οι διακυμάνσεις. Ευκαιρία είναι εδώ ν' αναφερθεί η χαρακτηριστική για τα αριθμητικά σχήματα για LES εργασία των Mittal & Moin (1997), στην οποία η χρήση του σχήματος κεντρικών διαφορών δεύτερης οδήγησε στην επίλυση 25% περισσότερης τύρβης σε σύγκριση με ανάντη σχήμα υψηλού βαθμού τα οποία λόγω της αριθμητικής διάχυσης κατέπνιγαν τους υψηλούς κυματαριθμούς. Στην ίδια εργασία αναφέρεται επίσης ότι πολλές φορές η αριθμητική διάχυση (numerical dissipation) μπορεί να είναι μεγαλύτερη ακόμα και από τη διάχυση που προκαλείται από το υποπλεγματικό μοντέλο. Σύγκριση διαφόρων αριθμητικών σχημάτων έγινε επίσης από τον Breuer (1998) επιδεικνύοντας την καταλληλότητα του σχήματος κεντρικών διαφορών. Σχήμα κεντρικών διαφορών σε LES προσομοιώσεις εκρήξεων μικρής κλίμακας έχει χρησιμοποιηθεί για παράδειγμα από τους Gubba et al. (2008; 2011). Από την άλλη μεριά τα σχήματα κεντρικών διαφορών μπορούν να

δημιουργήσουν αστάθειες στην προσομοίωση, με αποτέλεσμα να απαιτούνται πλέγματα καλής ποιότητας και ειδικές οριακές συνθήκες εξόδου. Επίσης πρέπει να αναφέρουμε ότι το σχήμα διακριτοποίησης έχει μεγαλύτερη σημασία στις εξισώσεις ορμής και όχι τόσο στις εξισώσεις μεταφοράς των συστατικών και στην εξίσωση ενέργειας, όπου σχήματα που διατηρούν την μονοτονία της λύσης (TVD σχήματα) πρέπει να προτιμούνται ώστε οι μεταβλητές αυτές να μην λαμβάνουν αφύσικες τιμές (π.χ. συγκεντρώσεις εκτός των φυσικών ορίων 0 και 1).

Τέλος μια σημαντική διαφορά υπάρχει στις οριακές συνθήκες εισόδου της ροής. Ενώ στη μέθοδο URANS αυτό που δίνεται στο όριο είναι η χρονικά μέση τιμή της ταχύτητας, στο LES πρέπει να δίνονται και οι διακυμάνσεις της, ώστε να λαμβάνεται υπ' όψιν η τύρβη που εισέρχεται στο πεδίο. Αυτό δεν είναι απλό να γίνει με ακρίβεια. Μερικές χαρακτηριστικές εργασίες για το θέμα είναι αυτές των Lund et al. (1998), Klein et al. (2003) και Xie & Castro (2008), ενώ μια πολύ καλή ανασκόπηση γίνεται από τον Κουτσοράκη (2014, §2.6.3.4).

3.1.4.3 Εναλλακτικές μεθοδολογίες LES

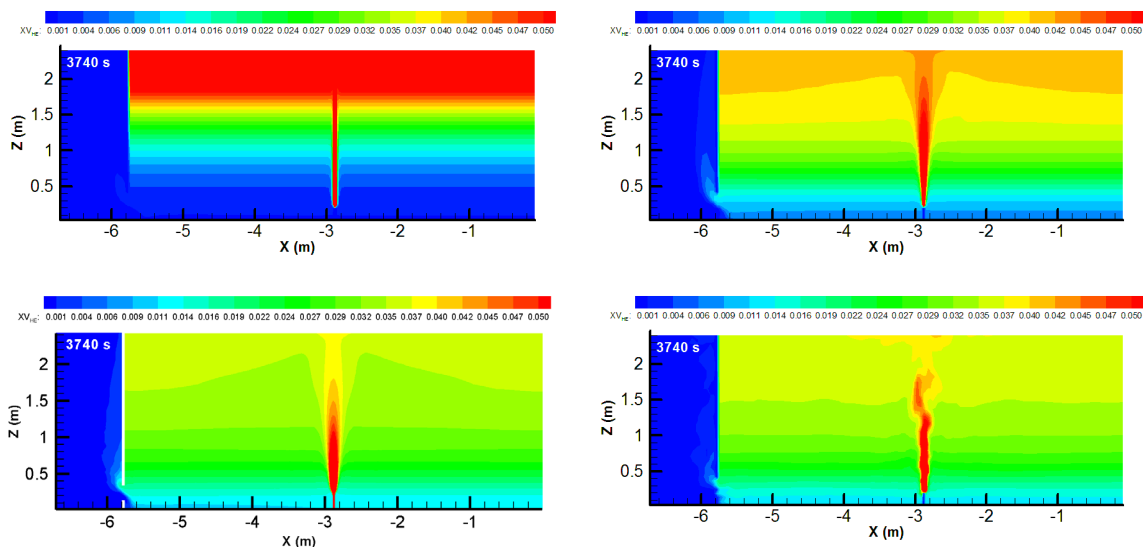
Πέρα από τη συνήθη μέθοδο του LES που παρουσιάστηκε προηγουμένως υπάρχουν και κάποιες εναλλακτικές οι οποίες θα αναφερθούν εδώ εν' συντομία και για χάριν πληρότητας. Μια εκ αυτών είναι η μέθοδος **ILES** (Implicit LES). Στη μέθοδο αυτή δεν χρησιμοποιείται υποπλεγματικό μοντέλο, αλλά αντί αυτού, χρησιμοποιούνται ειδικοί υπολογιστικοί μέθοδοι διακριτοποίησης υψηλής ακρίβειας οι οποίες σε κάποιο βαθμό αντικαθιστούν το υποπλεγματικό μοντέλο. Πρόγονος της μεθόδου αυτής ήταν η μέθοδος MILES (Monotonically Integrated LES). Περισσότερα για τη μέθοδο υπάρχουν στο βιβλίο των Grinstein et al. (2007).

Μια άλλη κατηγορία είναι το υβριδικό RANS-LES. Τα μοντέλα αυτά προσπαθούν να συνδυάσουν τα πλεονεκτήματα των δύο μεθόδων, δηλαδή την ταχύτητα της μεθόδου RANS σε ροές όπου δεν υπάρχουν μεγάλες χρονικές μεταβολές και την ακρίβεια των μοντέλων LES σε περίπλοκα φαινόμενα. Για παράδειγμα η μέθοδος RANS θα μπορούσε να εφαρμοστεί στις περιοχές κοντά στα τοιχώματα ώστε να αποφευχθεί η μεγάλη πύκνωση του πλέγματος, ενώ στις υπόλοιπες περιοχές να εφαρμοστεί η μέθοδος LES. Το πιο γνωστό ίσως μοντέλο αυτής της κατηγορίας είναι το μοντέλο **DES** (Detached Eddy Simulation). Η ιδέα στο μοντέλο αυτό (Strelets 2001) είναι να γίνεται εναλλαγή από το SST-RANS μοντέλο στο LES στις περιοχές όπου η χαρακτηριστική τυρβώδη κλίμακα μήκους που προβλέπεται από το RANS μοντέλο είναι μεγαλύτερη από το μέγεθος του πλέγματος. Το μοντέλο αυτό όμως φαίνεται να αντιμετωπίζει προβλήματα ανεξαρτησίας πλέγματος (Geurts 2006). Μια κριτική που δέχονται τα υβριδικά μοντέλα είναι το γεγονός ότι οι μεθοδολογίες RANS και LES είναι εγγενώς διαφορετικές διαδικασίες οπότε δεν μπορούν να συνεργαστούν στην ίδια μοντελοποίηση. Παρόλα αυτά έχουν εφαρμοστεί με επιτυχία σε αρκετές εφαρμογές.

Τέλος αναφέρουμε τη μέθοδο **VLES** (Very Large Eddy Simulation). Ο όρος έχει κατά καιρούς χρησιμοποιηθεί με διαφορετικές έννοιες, με αποτέλεσμα να μην είναι πάντα σαφές τι εννοείται (Κουτσοράκης 2014). Κάποιοι για παράδειγμα αναφέρουν σαν VLES οτιδήποτε μεταξύ RANS και LES συμπεριλαμβανομένων των υβριδικών μεθόδων, ενώ κάποιοι το αναφέρουν εννοώντας το URANS. Ο ορισμός όμως τον οποίο δίνουν οι περισσότεροι στο VLES είναι ότι VLES είναι το LES με αραιό πλέγμα ή διαφορετικά LES στο οποίο επιλύεται λιγότερο από το 80% της τυρβώδους κινητικής ενέργειας. Συνεπώς επιλύονται μόνο οι πολύ μεγάλες δίνες. Έτσι το VLES χρησιμοποιείται σε περιπτώσεις όπου έχουμε περιορισμένους υπολογιστικούς πόρους.

3.1.5 Παράδειγμα αποτελεσμάτων μοντέλων τύρβης σε ροή διασποράς

Στο παρακάτω σχήμα απεικονίζονται οι ισοϋψείς της κατ' όγκο συγκέντρωσης ηλίου σε μια περίπτωση έκκλισης υδρογόνου σε κλειστό χώρο. Οι ισοϋψείς έχουν προκύψει από υπολογιστική προσομοίωση με την εφαρμογή διαφόρων μεθόδων: Στρωτής ροής, k-ε, SST και LES. Στο μοντέλο στρωτής ροής δεν χρησιμοποιείται ουσιαστικά κάποιο μοντέλο τύρβης, θεωρείται δηλαδή $\mu_t = 0$. Παρατηρούμε ότι η μορφή των ισοϋψών είναι αρκετά διαφορετική μεταξύ των μοντέλων. Στο μοντέλο στρωτής ροής η διάχυση στον κατακόρυφο άξονα στον οποίο εκλύεται το ήλιο είναι πάρα πολύ μικρή. Το ήλιο κατευθύνεται κάθετα σε μια λεπτή στήλη υψηλής συγκέντρωσης. Στη συνέχεια συγκεντρώνεται στην οροφή του δωματίου, προκαλώντας έντονη διαστρωμάτωση των συγκεντρώσεων. Από την άλλη μεριά τα μοντέλα k-ε και SST προβλέπουν μεγαλύτερη διάχυση. Το ήλιο καθώς ανυψώνεται αναμειγνύεται έντονα με τον περιβάλλοντα αέρα. Η καθ' ύψος διαστρωμάτωση του είναι πολύ πιο μικρή από το μοντέλο στρωτής ροής, καθώς καταλαμβάνει όλο το ύψος του δωματίου. Το ίδιο παρατηρείται και στο LES, όπου επιπλέον διακρίνονται και οι αστάθειες της ροής (χαρακτηριστικό των LES προσομοιώσεων). Η σύγκριση των τιμών των προσομοιώσεων με το πείραμα, έδειξε ότι τα RANS και LES μοντέλα είναι αυτά που συμφωνούν με τις πειραματικές μετρήσεις, ενώ το μοντέλο στρωτής ροής αποτυγχάνει να προβλέψει τις σωστές τιμές καθώς υπο-εκτιμά την ανάμειξη που συμβαίνει. Έτσι βλέπουμε την αναγκαιότητα στη χρήση μεθόδων διαχείρισης τυρβωδών ροών. Μια πρόσφατη ανασκόπηση όσο αφορά τις μεθόδους διαχείρισης της τύρβης, γίνεται από τους Argyropoulos & Markatos (2015).



Σχήμα 3.1.2: Υπολογιστική προσομοίωση έκλυσης ηλίου ($w=0.47$ m/s, $Re=115$) σε κλειστό χώρο ($5.76 \times 2.96 \times 2.42$ m). Ισοϋψείς της κατ' όγκο συγκέντρωσης ηλίου 3740 δευτερόλεπτα μετά την έναρξη της έκλυσης για τα μοντέλα στρωτής ροής, k-ε, SST και LES.

3.2 Μοντελοποίηση καύσης

Ο βασικός στόχος των μοντέλων τυρβώδους καύσης, είναι ο υπολογισμός του μέσου (ή φιλτραρισμένου) ρυθμού καύσης $\bar{\omega}$. Ο ρυθμός καύσης $\dot{\omega}$ ορίζεται σαν τη μάζα ανά μονάδα όγκου και χρόνου συστατικού που παράγεται/καταναλώνεται μέσω της χημικής αντίδρασης. Ο ρυθμός

αυτός μπορεί να δοθεί από τον νόμο του Arrhenius συναρτήσει της θερμοκρασίας και των συγκεντρώσεων των αντιδρώντων. Ο νόμος αυτός όμως χρησιμοποιείται κυρίως σε στρωτές ροές ή σε ροές όπου το πάχος της φλόγας μπορεί να επιλυθεί (περιπτώσεις που απαιτούν πολύ πυκνό πλέγμα και με τις οποίες δεν θα ασχοληθούμε στην παρούσα διατριβή). Λόγω της έντονης μη γραμμικότητας του ρυθμού καύσης, η τιμή του μέσου ρυθμού καύσης διαφέρει σημαντικά από την τιμή που αντιστοιχεί στην μέση θερμοκρασία και στις μέσες συγκεντρώσεις, με αποτέλεσμα ο νόμος Arrhenius να μην δίνει σωστά αποτελέσματα. Έτσι, όπως θα δούμε παρακάτω, τα μοντέλα που χρησιμοποιούνται για να περιγράψουν την τυρβώδη καύση βασίζονται κυρίως σε φυσική ανάλυση του προβλήματος και όχι στην χημική κινητική που εκφράζεται από το νόμο του Arrhenius. Τα βασικά μοντέλα που χρησιμοποιούνται παρουσιάζονται στις επόμενες παραγράφους.

Στη τυρβώδη καύση και στα προβλήματα με τα οποία θα ασχοληθούμε, χρησιμοποιείται κυρίως η θεώρηση μη αντιστρεπτής καύσης σε ένα βήμα (one step irreversible reaction). Η θεώρηση αυτή είναι συνήθως αρκούντως καλή. Η μη αναστρέψιμη αντίδραση η οποία θεωρείται μπορεί να γραφεί στη μορφή



όπου s είναι η στοιχειομετρική ποσότητα οξυγόνου που απαιτείται για την καύση ενός κιλού καυσίμου.

Στην προσομοίωση της καύσης, τα προϊόντα και τα αντιδρώντα της αντίδρασης μπορούν να προσομοιωθούν σαν ξεχωριστά συστατικά επιλύοντας μια εξίσωση μεταφοράς για κάθε ένα από αυτά. Επειδή όμως αυτό μπορεί να είναι υπολογιστικά χρονοβόρο, μια προσέγγιση που χρησιμοποιείται συχνά σε τυρβώδεις καύσεις (Hjertager 1993) είναι αυτή της ίσης διάχυσης μεταξύ των συστατικών που συμμετέχουν στην αντίδραση (προϊόντα και αντιδρώντα). Με αυτό τον τρόπο μπορεί να εισαχθεί η έννοια της μεταβλητής προόδου και να επιλυθεί διαφορική εξίσωση μόνο για αυτή. Στη συνέχεια από την τιμή της μεταβλητής προόδου μπορούν να υπολογιστούν οι συγκεντρώσεις των επί μέρους συστατικών από απλές αλγεβρικές σχέσεις. Λεπτομέρειες για τη μέθοδο αυτή παρουσιάζονται στα παραρτήματα Α.2 και Α.3. Εδώ πρέπει να αναφέρουμε, ότι η επίλυση της εξίσωσης της μεταβλητής προόδου είναι αρκετή μόνο στην περίπτωση όπου το μείγμα καυσίμου-αέρα δεν αναμειγνύεται με άλλο συστατικό κατά την πορεία της καύσης, όπως είναι για παράδειγμα η περίπτωση καύσης ομογενούς μείγματος σε κλειστό δοχείο. Στις περισσότερες πρακτικές περιπτώσεις εκρήξεων όμως, το προ-αναμειγμένο μείγμα περιβάλλεται από αέρα με τον οποίο μπορεί να αναμειχθεί κατά την διάρκεια της έκρηξης με αποτέλεσμα να μεταβληθεί η σύσταση του πριν αρχίσει να καίγεται. Στις περιπτώσεις αυτές είναι απαραίτητη η επίλυση μιας επιπλέον εξίσωσης μεταφοράς πέραν της μεταβλητής προόδου. Στην παρούσα διατριβή δοκιμάστηκαν και οι δύο προσεγγίσεις, δηλαδή επίλυση για όλα τα συστατικά που συμμετέχουν στην αντίδραση (δηλαδή για την περίπτωση της καύσης υδρογόνου, επίλυση για το υδρογόνο το οξυγόνο και το νερό, ενώ το άζωτο είναι το περιβάλλον στοιχείο), όσο για της προσέγγισης της μεταβλητής προόδου.

3.2.1 Νόμος του Arrhenius

Μια άμεση μέθοδος για να τον υπολογισμό του ρυθμού καύσης είναι να υπολογιστεί μέσω του νόμου του Arrhenius:

$$\dot{\omega}_f = -A\rho^2 T^b Y_f Y_o e^{-\frac{E}{RT}} \quad (3.2.2)$$

όπου A , b σταθερές, E η ενέργεια ενεργοποίησης και R η σταθερά των τελείων αερίων. Όπως είναι φανερό ο ρυθμός καύσης είναι έντονα μη γραμμικός. Αυτό δυσκολεύει τον υπολογισμό του μέσου ρυθμού καύσης $\bar{\omega}_f$ που εμπεριέχεται στις εξισώσεις της τυρβώδους ροής της μεθόδου RANS (§3.1.3) ή LES (§3.1.4). Ένας τρόπος να υπολογιστεί ο $\bar{\omega}_f$ είναι να αναπτυχθούν οι μη γραμμικοί όροι T^b και $e^{-E/RT}$ της παραπάνω σχέσης σε σειρά. Αυτό όμως οδηγεί στην εμφάνιση νέων ποσοτήτων οι οποίες είναι δύσκολο να προσδιοριστούν (π.χ. συσχετίσεις διακυμάνσεων συγκέντρωσης-θερμοκρασίας) και δεν μπορούν να αμεληθούν, καθώς το σφάλμα που θα προκύψει είναι μεγάλο (Veynante & Vervisch 2002, §4). Για παράδειγμα ο Spalding (1971) εφάρμοσε την παραπάνω σχέση χρησιμοποιώντας τις μέσες τιμές των ποσοτήτων και το μοντέλο απέτυχε να προβλέψει τον σωστό ρυθμό καύσης. Συνεπώς η παραπάνω σχέση σπανίως χρησιμοποιείται στην τυρβώδη καύση, αλλά από την άλλη χρησιμοποιείται σε περιπτώσεις στρωτής φλόγας ή στη μέθοδο DNS.

Μια εξαίρεση αυτού, αποτελεί η περίπτωση όπου η καύση πραγματοποιείται πολύ πιο αργά σε σχέση με την κίνηση των δινών ($Da \ll 1$) με αποτέλεσμα το εσωτερικό της φλόγας να επηρεάζεται (§2.4.1). Τότε ο μέσος ρυθμός καύσης μπορεί προσεγγιστικά να εκφραστεί από το νόμο του Arrhenius χρησιμοποιώντας τις μέσες τιμές των κλασμάτων μάζας και θερμοκρασίας, αμελώντας δηλαδή τους επιπλέον όρους που προκύπτουν κατά τον υπολογισμό της μέσης τιμής (Veynante & Vervisch 2002, §5.1). Ένα παράδειγμα τέτοιας περίπτωσης είναι η καύση σε υπερηχητική ροή.

3.2.2 Μοντέλο θραύσης των δινών (Eddy break-up model, EBU)

Στο μοντέλο αυτό, το οποίο προτάθηκε από τον Spalding (1971), γίνεται η υπόθεση ότι η καύση είναι πολύ πιο γρήγορη από την κίνηση των δινών ($Da \gg 1$) με αποτέλεσμα το φαινόμενο να περιορίζεται από την τυρβώδη ανάμειξη των αντιδρώντων και των προϊόντων. Επειδή η τυρβώδη ανάμειξη είναι μια διαδικασία η οποία πραγματοποιείται από τις μεγάλες δίνες της ολοκληρωτικής κλίμακας μέχρι τις πιο μικρές της μοριακής διάχυσης, η τυρβώδη καύση θα εξαρτάται από την παροχή αντιδρώντων που θα μεταφέρουν οι δίνες αυτές. Συνεπώς ο ρυθμός της αντίδρασης μπορεί να υπολογιστεί με βάση τις διακυμάνσεις των συγκεντρώσεων και τον ρυθμό με τον οποίο «διαλύονται» (break-up) οι δίνες, ο οποίος μπορεί να εκφραστεί με βάση την τυρβώδη κινητική ενέργεια k και τον ρυθμό καταστροφής ε (2.1.14). Έτσι η σχέση που μας δίνει τον ρυθμό καύσης (στη περίπτωση όπου το οξυγόνο είναι σε περίσσια) είναι η:

$$\bar{\omega}_f = -C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\sqrt{Y_f'^2}}{\tau_t} = -C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \sqrt{Y_f'^2} \quad (3.2.3)$$

όπου C_{EBU} σταθερά του μοντέλου της τάξεως της μονάδας. Η παραπάνω σχέση μπορεί να εκφραστεί κάνοντας χρήση του κλάσματος μάζας του καυσίμου, αντικαθιστώντας δηλαδή το Y_f με c . Οι συσχετίσεις \widetilde{c}^{n^2} μπορούν είτε να μοντελοποιηθούν είτε να χρησιμοποιηθεί μια εξίσωση μεταφοράς που να τις περιγράφει. Κάνοντας την υπόθεση φλόγας μηδενικού πάχους, οι συσχετίσεις αυτές μπορούν εύκολα να υπολογιστούν καθώς $c^2 = c$:

$$\begin{aligned} \overline{\rho c^{n^2}} &= \overline{\rho(c - \tilde{c})^2} = \overline{\rho(c - \tilde{c})^2} = \overline{\rho c^2 - 2\tilde{c}\rho c + \rho \tilde{c}^2} = \overline{\rho c^2} - 2\overline{\tilde{c}\rho c} + \overline{\rho \tilde{c}^2} = \overline{\rho c^2} - 2\overline{\rho \tilde{c}} + \overline{\rho \tilde{c}^2} = \overline{\rho \tilde{c}} - \overline{\rho \tilde{c}^2} \Rightarrow \\ \overline{\rho c^{n^2}} &= \overline{\rho \tilde{c}}(1 - \tilde{c}) \end{aligned} \quad (3.2.4)$$

Η τετραγωνική ρίζα στην εξίσωση (3.2.3) είχε προστεθεί για διαστατικούς λόγους. Όμως καθώς η παράγωγος του $\overline{\dot{\omega}_f}$ ως προς \tilde{c} απειρίζεται όταν $\tilde{c} = 0$ ή $\tilde{c} = 1$, στην πράξη τελικά χρησιμοποιείται η ακόλουθη σχέση

$$\overline{\dot{\omega}_f} = -C_{EBU} \overline{\rho} \frac{1}{\tau_i} \tilde{c}(1 - \tilde{c}) = -C_{EBU} \overline{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \tilde{c}(1 - \tilde{c}) \quad (3.2.5)$$

ή για το κλάσμα μάζας του καυσίμου η

$$\overline{\dot{\omega}_f} = -C_{EBU} \overline{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \frac{\tilde{Y}_f}{Y_f^0} \left(1 - \frac{\tilde{Y}_f}{Y_f^0} \right) \quad (3.2.6)$$

όπου Y_f^0 το αρχικό κλάσμα μάζας του καυσίμου στην άκαυστη περιοχή. Ενδιαφέρον αποτελεί το γεγονός ότι ενώ το μοντέλο δημιουργήθηκε με βάση τις φαινομενολογικές ιδέες που αναφέραμε, έχει παραχθεί και θεωρητικά με βάση το μοντέλο των Bray-Moss-Libby (Bray & Libby 1976), (Libby & Bray 1980).

Το μοντέλο αυτό είναι ιδιαίτερα ελκυστικό και υπάρχει στους περισσότερους εμπορικούς κώδικες υπολογιστικής ρευστομηχανικής, καθώς ο ρυθμός καύσης μπορεί να υπολογιστεί από γνωστές ποσότητες και δεν απαιτεί επιπλέον εξισώσεις μεταφοράς. Παρόλα αυτά δεν λαμβάνει υπ' όψιν τη χημεία της αντίδρασης, πράγμα που όμως έχει γίνει από τροποποιημένα μοντέλα στα οποία η χημεία εντάσσεται στον υπολογισμό της σταθεράς C_{EBU} μέσω συνήθως της στρωτής ταχύτητας καύσης (π.χ. Saïd & Borghi 1988). Μειονέκτημα του μοντέλου αποτελεί επίσης το γεγονός ότι υπερεκτιμάται ο ρυθμός καύσης κοντά στα τοιχώματα ή σε περιοχές έντονα παραμορφωμένης ροής όπου ο λόγος ε/k είναι μεγάλος, ενώ υποθέτει ομογενή και ισότροπη τύρβη.

Ένα άλλο σημείο προς συζήτηση για το μοντέλο, είναι ο τρόπος υπολογισμού του χαρακτηριστικού χρόνου της τύρβης τ_i , καθώς η κλασική επιλογή της σχέσης $\tau_i = k/\varepsilon$ θεωρείται αυθαίρετη (Poinsot & Veynante 2005, §5.3.3). Είναι χαρακτηριστικό ότι σε πρωταρχικές εφαρμογές του μοντέλου (Spalding 1971; 1976), το τ_i υπολογίστηκε από τον αντίστροφο της μέσης κλίσης της αξονικής ταχύτητας, $|\partial \tilde{u} / \partial y|^{-1}$, το οποίο αντιστοιχεί στον ρυθμό παραμόρφωσης τον οποίο επιβάλλουν οι μεγάλες δίνες. Διαφορετική μοντελοποίηση του τ_i οδηγεί σε διαφορετικά αποτελέσματα. Στο πρόβλημα αυτό θα επανέλθουμε στη §3.2.6.

Το μοντέλο αρχικά αναπτύχθηκε για χρήση σε συνδυασμό με τη μέθοδο RANS, μπορεί όμως να επεκταθεί εύκολα και στο LES κάνοντας χρήση των φιλτραρισμένων ποσοτήτων αντί των μέσων, και χρησιμοποιώντας την εξής σχέση για τον χαρακτηριστικό χρόνο της τύρβης (Poinsot & Veynante 2005, §5.4.2):

$$\tau_t \approx \frac{l_\Delta}{u'_{sgs}} \approx \frac{\Delta}{\sqrt{k_{sgs}}} \quad (3.2.7)$$

όπου σαν χαρακτηριστικό μήκος της τύρβης λαμβάνεται το μήκος του φίλτρου Δ και σαν χαρακτηριστική ταχύτητα η ρίζα της υποπλεγματικής τυρβώδους κινητικής ενέργειας η οποία μπορεί να υπολογιστεί είτε από αλγεβρικές σχέσεις είτε επιλύοντας εξίσωση μεταφοράς. Το μοντέλο αυτό δεν έχει δοκιμαστεί αρκετά στο πλαίσιο του LES, ενώ, μέσα στη σταθερά του μοντέλου θα πρέπει να ενσωματωθούν διάφοροι παράμετροι όπως το μήκος του φίλτρου, το πάχος της φλόγας και η υποπλεγματική αύξηση της επιφάνειας της.

3.2.3 Μοντέλο απορρόφησης των δινών (Eddy dissipation concept, EDC)

Πρόκειται για ένα απλό μοντέλο που έχει χρησιμοποιηθεί ευρέως στην βιομηχανία και έχει πολλές ομοιότητες με το EBU κυρίως ως προς τις παραδοχές τις οποίες κάνει. Το μοντέλο αυτό το οποίο αναπτύχθηκε από τους Magnussen & Hjertager (1976) και είναι κατάλληλο τόσο για καύση προαναμεμειγμένου μείγματος όσο και για φλόγες διάχυσης. Έχει μελετηθεί και αναπτυχθεί για πολλά χρόνια, με αποτέλεσμα να εμφανίζονται διάφορες παραλλαγές του στη βιβλιογραφία. Η υπόθεση που κάνει είναι ότι ο κύριος μηχανισμός που ελέγχει την καύση είναι η ανάμιξη που προκαλείται από την τύρβη του πεδίου ροής και όχι η χημική κινητική. Εκφράζει τον ρυθμό με τον οποίο πραγματοποιείται η αντίδραση σε συνάρτηση της μέσης συγκέντρωσης των αντιδρώντων, την κινητική ενέργεια της τύρβης και του ρυθμού διάχυσης της. Ο ρυθμός της καύσης υπολογίζεται από τις σχέσεις:

$$\bar{\omega}_f = -A\bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} Y_{\text{lim}} \quad (3.2.8)$$

$$Y_{\text{lim}} = \min \left[\frac{\tilde{Y}_f}{\nu_f MW_f}, \frac{\tilde{Y}_{O_2}}{\nu_{O_2} MW_{O_2}}, B \frac{\sum_{i=1}^{np} \tilde{Y}_i}{\sum_{i=1}^{np} \nu_i MW_i} \right] \quad (3.2.9)$$

όπου A και B εμπειρικές σταθερές (π.χ. 4 και 0.5 κατά την εφαρμογή του μοντέλου στην εργασία των Magnussen & Hjertager (1976), ενώ για τη σταθερά B έχει χρησιμοποιηθεί και η τιμή 1 (Hjertager 1982), Y_f , Y_{O_2} και Y_i τα κλάσματα μάζας του καυσίμου του οξυγόνου και των προϊόντων αντίστοιχα (ν ο στοιχειομετρικός συντελεστής και MW το μοριακό βάρος). Η ποσότητα Y_{lim} έχει τη φυσική σημασία του ότι η ποσότητα η οποία βρίσκεται σε έλλειμμα είναι αυτή που ορίζει την ταχύτητα καύσης. Ο τρίτος όρος της ποσότητας αφορά τα προϊόντα και έχει προστεθεί για τις περιπτώσεις καύση προαναμεμειγμένου μείγματος. Σε αυτή την περίπτωση, το καύσιμο και το οξυγόνο «συνυπάρχουν στις ίδιες δίνες» με αποτέλεσμα όταν τα προϊόντα είναι σε έλλειμμα, η

καύση να ελέγχεται από τις δίνες προϊόντων υψηλής θερμοκρασίας¹. Συγκρίνοντας το με το μοντέλο EBU, παρατηρούμε ότι η μόνη διαφορά είναι στο ότι το EBU κάνει χρήση των τυρβωδών διακυμάνσεων ενώ το EDC χρησιμοποιεί αντί αυτών τα κλάσματα μάζας των συστατικών.

3.2.3.1 Παραλλαγές του μοντέλου

Μια μετατροπή του παραπάνω μοντέλου (Hjertager 1989), εισάγει ένα κριτήριο για πιθανή σβέση της καύσης λόγω μεγάλης έντασης της τύρβης, με βάση τον αριθμό Damköhler (§2.4.1). Έτσι αν ο χαρακτηριστικός χρόνος της τύρβης $\tau_0 = k / \varepsilon$ είναι κατά πολύ μικρότερος του χαρακτηριστικού χρόνου της χημικής αντίδρασης τ_c (μικρό τ_0 μεταφράζεται σε μεγάλη ένταση τύρβης), ο ρυθμός αντίδρασης τίθεται ίσος με μηδέν. Ο υπολογισμός του τ_c γίνεται από τη ακόλουθη σχέση η οποία προέρχεται από τον νόμο του Arrhenius (Hjertager 1993):

$$\tau_c = A_{ch} e^{\frac{E}{RT}} (\rho m_f)^a (\rho m_{O_2})^b \quad (3.2.10)$$

Για το υδρογόνο οι σταθερές λαμβάνονται ίσες με (Bjørn H. Hjertager 1989):

$$a = 0, b = -1.0, E / R = 9.132, A_{ch} = 2.25 \cdot 10^{-11} \quad (3.2.11)$$

Ο ρυθμός καύσης υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\begin{cases} \bar{\omega}_f = 0 & , Da < 1/D_{ie} \\ \bar{\omega}_f = -A\bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} Y_{lim} & , Da > 1/D_{ie} \end{cases} \quad (3.2.12)$$

Για τη σταθερά D_{ie} επιλέγεται η τιμή 1000, ενώ για τη σταθερά A έχουν επιλεγεί διάφορες τιμές όπως 16 (Hjertager 1989), 20 (Hjertager & Solberg 1999) και 27 (Makarov et al. 2010). Οι περιπτώσεις αυτές όπου προτείνονται υψηλές τιμές της σταθεράς A σε σύγκριση με την τιμή 4 που είχε προταθεί αρχικά (Magnussen & Hjertager 1976) αφορούν περιπτώσεις εκρήξεων. Όπως είναι φυσικό και όπως αναφέρεται από τους Veynante & Vervisch (2002), «η χρήση του μοντέλου αυτού για μεγάλες τιμές του A , είναι δύσκολο να δικαιολογηθεί». Το γεγονός αυτό σε συνδυασμό με το γεγονός ότι οι τιμές της σταθεράς αλλάζουν αρκετά από περίπτωση σε περίπτωση, κάνει την εφαρμογή του μοντέλου αυτού σε περιπτώσεις έκρηξης προβληματικό. Μια αιτία του γεγονότος αυτού είναι το ότι το μοντέλο λαμβάνει υπ' όψιν του ουσιαστικά μόνο την τύρβη και αγνοεί όλα τα υπόλοιπα φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα σε μία έκρηξη (Κεφάλαιο 2).

Μια παραλλαγή του μοντέλου αναπτύχθηκε επίσης στα πλαίσια της διδακτορικής διατριβής του Λιάκου (2000). Η παραλλαγή αυτή αποτελεί ένα συνδυασμό του αρχικού μοντέλου με τον νόμο του Arrhenius. Ο ρυθμός της αντίδρασης σε κάθε υπολογιστικό κελί ισούται με το ελάχιστο των R_{mix} και R_{kin} , όπου R_{mix} είναι ο ρυθμός καύσης στην περιοχή της ροής στην οποία ο ρυθμός καθορίζεται από την ανάμιξη λόγω τύρβης και R_{kin} ο ρυθμός καύσης στην περιοχή της ροής στην οποία ο ρυθμός καθορίζεται από την χημική κινητική. Το R_{mix} θα δίνεται από το μοντέλο EDC ενώ το R_{kin}

¹ Αν $B=0$, τότε στην περίπτωση προαναμεμιγμένου μείγματος θα είχαμε την αφύσικη συμπεριφορά το μείγμα να αναφλεγόταν ταυτόχρονα σε όλη του την έκταση. Ο τρίτος όρος της αγκύλης δηλαδή είναι αυτός που υλοποιεί την φυσική απαίτηση ύπαρξης ενός προελαύνοντος μετώπου.

από τον νόμο του Arrhenius. Με αυτό τον τρόπο λαμβάνεται υπ' όψιν και η επίδραση της τύρβης και η εξάρτηση από την χημεία. Το μοντέλο έχει δοκιμαστεί με επιτυχία τόσο για φλόγες διάχυσης (Liakos et al. 2000a) όσο και για φλόγες προανάμειξης (Liakos et al. 2000b; 2001; 2002). Το μοντέλο αυτό έχει χρησιμοποιηθεί και σε περιπτώσεις όπου η αντίδραση θεωρείται ότι πραγματοποιείται σε δύο στάδια. Σε αυτή την περίπτωση υπολογίζονται και για τις δύο αντιδράσεις ο ρυθμός αντίδρασης όπως ακριβώς υπολογίστηκε και στην περίπτωση της μίας.

Μια άλλη παραλλαγή του αρχικού μοντέλου έχει προταθεί επίσης από τους Saïd & Borghi (1988), οι οποίοι πρότειναν την εξής σχέση για τον προσδιορισμό της σταθεράς A :

$$A = c_{f_0} \left(1 + \frac{4.4}{1 + 3.2 \frac{\sqrt{k}}{S_L}} \right) \quad (3.2.13)$$

όπου c_{f_0} εμπειρική σταθερά. Οι τιμές της σταθεράς που χρησιμοποιήθηκαν από τους Baraldi et al. (2007) στην προσπάθεια να προσομοιωθούν πειραματικά αποτελέσματα έκρηξης υδρογόνου ήταν 10, 11 και 11.5 για κατ' όγκο συγκέντρωση υδρογόνου στον αέρα 10, 11 και 11.5% αντίστοιχα.

3.2.4 Το μοντέλο των Mantel και Borghi

Το μοντέλο των Mantel & Borghi (1994) επιλύει μία εξίσωση μεταφοράς για τον μέσο ρυθμό της αντίδρασης. Στην περίπτωση υψηλών αριθμών Reynolds το μοντέλο μπορεί να απλοποιηθεί και να οδηγήσει σε μία απλή αλγεβρική εξίσωση η οποία ουσιαστικά αποτελεί μία τροποποίηση του μοντέλου EBU. Ο μέσος ρυθμός καύσης δίνεται από τις σχέσεις:

$$\bar{\dot{\omega}}_f = -C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \tilde{Y}_f (Y_f^0 - \tilde{Y}_f) \quad (3.2.14)$$

$$C_{EBU} = \frac{\alpha_0 \left(1 + c \frac{S_L}{u'_0} \right)^{2\gamma}}{\beta_0 \tilde{Y}_0 \left(\frac{1}{2} - b_0 \right)} \quad (3.2.15)$$

όπου οι σταθερές του μοντέλου έχουν τις τιμές $\alpha_0 = 0.9$, $\beta_0 = 1.25$, $b_0 = 0.2$, $c = 1$ και $\gamma = 0.5$. Το μοντέλο αυτό, σε αντίθεση με το κλασικό EBU, λαμβάνει υπ' όψιν του τη χημεία της αντίδρασης μέσω της στρωτής ταχύτητας καύσης S_L .

3.2.5 Το μοντέλο του Schmid

Το μοντέλο αναπτύχθηκε από τους Schmid et al. (1998). Βασίζεται στην υπόθεση ότι η τυρβώδης ταχύτητα καύσης S_f μπορεί να θεωρηθεί σαν χαρακτηριστική παράμετρος του ρυθμού καύσης, και στο θεώρημα των Kolmogorov, Petruvski, Piskunov (KPP) το οποίο συσχετίζει την τυρβώδη ταχύτητα καύσης με τον μέσο ρυθμό καύσης. Λεπτομέρειες για την ανάπτυξη του μοντέλου υπάρχουν τόσο

στην αρχική δημοσίευση των Schmid et al. όσο και στους Liakos et al. (2002) και Λιάκος (2000). Η σχέση για τον μέσο ρυθμό καύσης στην οποία καταλήγει τελικά το μοντέλο είναι η:

$$\bar{\dot{\omega}}_f = 4.96 \frac{\varepsilon}{k} \left(\frac{S_L}{\sqrt{2/3k}} + (1 + Da^{-2})^{-1/4} \right)^2 \frac{\tilde{Y}_F}{Y_F^0} \left(1 - \frac{\tilde{Y}_F}{Y_F^0} \right) \rho_0 Y_F^0 \quad (3.2.16)$$

Το μοντέλο αυτό έχει το πλεονέκτημα ότι μπορεί και λαμβάνει υπ' όψιν του όλες τις κατηγορίες της τυρβώδους καύσης (§2.4.1) μέσω της εξάρτησης από τον αριθμό Damkohler, Da . Έτσι στην οριακή περίπτωση στην οποία ο αριθμός Damkohler είναι πολύ μεγαλύτερος της μονάδας, ο παραπάνω τύπος γίνεται

$$\bar{\dot{\omega}}_f = 4.96 \frac{\varepsilon}{k} \left(\frac{S_L}{\sqrt{2/3k}} + 1 \right)^2 \frac{\tilde{Y}_F}{Y_F^0} \left(1 - \frac{\tilde{Y}_F}{Y_F^0} \right) \rho_0 Y_F^0 \quad (3.2.17)$$

το οποίο είναι ένα επεκταμένο μοντέλο EDU που όμως λαμβάνει υπ' όψιν του τη χημεία μέσω του S_L . Από την άλλη μεριά αν ο αριθμός Damkohler είναι πολύ μικρότερος της μονάδας και $u'_0 \gg S_L$, ο ρυθμός καύσης εξαρτάται από τη χημεία και η σχέση γίνεται

$$\bar{\dot{\omega}}_f = 4.96 \frac{1}{\tau_c} \frac{\tilde{Y}_F}{Y_F^0} \left(1 - \frac{\tilde{Y}_F}{Y_F^0} \right) \rho_0 Y_F^0 \quad (3.2.18)$$

όπου τ_c ο χαρακτηριστικός χρόνος της καύσης.

3.2.6 Το πρόβλημα υπολογισμού χαρακτηριστικού χρόνου τυρβώδους φλόγας – μοντέλο INFS

Τα περισσότερα μοντέλα καύσης απαιτούν πληροφορίες για την χαρακτηριστική κλίμακα χρόνου της τυρβώδους φλόγας. Η κλίμακα αυτή, είτε λαμβάνεται ίση με τον χαρακτηριστικό χρόνο της τύρβης, είτε υπολογίζεται με βάση τον ρυθμό καταστροφής (dissipation rate) των συστατικών, είτε με βάση του ρυθμού παραμόρφωσης (stretch rate) της φλόγας. Στην πρώτη περίπτωση, ο χαρακτηριστικός χρόνος της τύρβης υπολογίζεται είτε σαν αυτόν της ολοκληρωτικής κλίμακας είτε σαν αυτόν της κλίμακας Kolmogorov. Οι ποσότητες αυτές όμως ενδέχεται να διαφέρουν σημαντικά, αφού για παράδειγμα ο λόγος του χαρακτηριστικού χρόνου της ολοκληρωτικής κλίμακας ως προς την κλίμακα Kolmogorov ισούται με $\sqrt{Re_t}$. Η χρήση τόσο της μιας κλίμακας όσο και της άλλης θεωρείται αυθαίρετη, αφού με αυτό τον τρόπο γίνεται έμμεσα η υπόθεση ότι μόνο μια κλίμακα της τύρβης (είτε η μεγάλη είτε η πολύ μικρή) επηρεάζει τη φλόγα, ενώ αυτό που αναμένεται είναι να συμμετέχουν όλες οι κλίμακες της τύρβης. Επιπλέον, η χρήση μόνο ενός χαρακτηριστικού χρόνου της τύρβης, χωρίς να λαμβάνονται υπ' όψιν χαρακτηριστικά της φλόγας δεν είναι σε συμφωνία με τη φυσική του φαινομένου, καθώς για παράδειγμα, μια λεπτή σε πάχος φλόγα παραμορφώνεται από τις δίνες διαφορετικά από ότι μια παχιά φλόγα.

Μια πιο ακριβής προσέγγιση είναι να επιλυθεί μια εξίσωση μεταφοράς για τον χαρακτηριστικό χρόνο της τυρβώδους φλόγας, όπως προτάθηκε στο μοντέλο των Mantel & Borghi (1994). Μια πιο απλή μέθοδος προτάθηκε από τους Meneveau & Poinsot (1991) στο μοντέλο ITNFS (Intermittent Turbulent Net Flame Stretch). Το μοντέλο αυτό βασίζεται σε προσομοιώσεις DNS αλληλεπίδρασης

φλόγας-δίνης και στη χρήση της θεωρίας των φράκταλ (multifractals). Η βασική ιδέα του μοντέλου είναι να υπολογιστεί ο ρυθμός παραμόρφωσης της φλόγας που προκαλείται από ένα ζεύγος δινών οι οποίες στροβιλίζονται με αντίθετη φορά. Ο ρυθμός αυτός παραμόρφωσης στη συνέχεια ολοκληρώνεται πάνω σε όλες τις δυνατές κλίμακες της τύρβης υποθέτοντας ότι κάθε κλίμακα δρα ανεξάρτητα από τις άλλες. Η κλίμακα χρόνου που προκύπτει (η οποία μπορεί να θεωρηθεί ότι ισούται με τον αντίστροφο του ρυθμού παραμόρφωσης) είναι

$$\tau_t = \frac{1}{\alpha_0 \Gamma_k \left(\frac{u'_0}{S_L^0}, \frac{l_t}{\delta_L^0} \right)} \frac{k}{\varepsilon} \quad (3.2.19)$$

όπου Γ_k η συνάρτηση αποδοτικότητας (efficiency function). Η συνάρτηση αυτή έχει προκύψει από προσέγγιση των DNS αποτελεσμάτων και δίνεται από τις σχέσεις (Poinsot & Veynante 2005, §5.3.9):

$$\log_{10}(\Gamma_k) = -\frac{1}{(s+0.4)} e^{-s-0.4} + (1 - e^{-s-0.4}) \left(\sigma_1 \left(\frac{u'_0}{S_L^0} \right) s - 0.11 \right) \quad (3.2.20)$$

$$s = \log_{10} \left(\frac{l_t}{\delta_L^0} \right), \quad \sigma_1 \left(\frac{u'_0}{S_L^0} \right) = \frac{2}{3} \left(1 - \frac{1}{2} \exp \left[- \left(\frac{u'_0}{S_L^0} \right)^{1/3} \right] \right) \quad (3.2.21)$$

Η συνάρτηση αποδοτικότητας λαμβάνει υπ' όψιν της την μειωμένη ικανότητα των μικρών δινών να παραμορφώσουν τη φλόγα καθώς όταν το l_t/δ_L^0 μειώνεται, μειώνεται και αυτή. Επίσης η αύξηση του λόγου u'_0/S_L^0 οδηγεί σε αύξηση της Γ_k , χωρίς όμως η επίδραση να είναι μεγάλη. Η σχέση (3.2.19) συνδυάζεται με τη σχέση (3.2.5) (μοντέλο EBU) για τον υπολογισμό του ρυθμού καύσης. Το νέο μοντέλο, σε αντίθεση με το κλασικό EBU, λαμβάνει υπ' όψιν του τη χημεία της αντίδρασης ενώ επιπλέον τείνει να μειώσει το ρυθμό καύσης σε περιοχές υψηλής παραμόρφωσης όπου οι κλίμακες της τύρβης είναι μικρές.

Τέτοιες συναρτήσεις αποδοτικότητας κατασκευάστηκαν με παρόμοιες τεχνικές και σε άλλες εργασίες, όπως αυτές των Colin et al. (2000) και Charlette et al. (2002) οι οποίοι τις ανέπτυξαν στα πλαίσια της μεθόδου LES και του μοντέλου της «τεχνικά παχιάς φλόγας» που παρουσιάζεται εν συντομία στη §3.2.8.1.

3.2.7 Μοντέλα που βασίζονται στην τυρβώδη ταχύτητα καύσης

Στη §2.4.2 είδαμε την έννοια της τυρβώδους ταχύτητας καύσης καθώς και σχέσεις από τις οποίες μπορεί να υπολογιστεί (Πίνακας 2.4.2). Ένα πρόβλημα στη χρήση της είναι το πώς σχετίζεται με τον μέσο ρυθμό καύσης $\bar{\omega}$ ο οποίος εμπεριέχεται στις εξισώσεις διατήρησης. Ένας τρόπος είναι να γίνει χρήση της ανάλυσης Kolmogorov-Petrovski-Piskunov (KPP) η οποία συνδέει την τυρβώδη ταχύτητα καύσης με τον ρυθμό καύσης $\bar{\omega}$. Παραδείγματα εφαρμογής της μεθόδου αυτής υπάρχουν στους Hakberg & Gosman (1985), Duclos et al. (1993), Schmid et al. (1998) και Poinsot & Veynante (2005, §5.3.10). Η μέθοδος αυτή κάνει κάποιες περιοριστικές υποθέσεις όπως το ότι η τύρβη δεν επηρεάζεται από την καύση και μπορεί να εφαρμοστεί μόνο για κάποια μοντέλα καύσης.

Μια άλλη μέθοδος είναι η μέθοδος της κλίσης. Στη μέθοδο αυτή, ο μέσος ρυθμός καύσης (ανά μονάδα όγκου) υπολογίζεται από τη σχέση

$$\bar{\dot{\omega}} = \rho_u S_T |\nabla \tilde{c}| \quad (3.2.22)$$

όπου ρ_u η πυκνότητα στην άκαυστη περιοχή και \tilde{c} η μεταβλητή προόδου. Η μέθοδος αυτή έχει χρησιμοποιηθεί εκτενώς από τον Zimont (Zimont 1979, Zimont & Lipatnikov 1995, Zimont et al. 1998). Ουσιαστικά το S_T είναι ο συνολικός ρυθμός κατανάλωσης που παρουσιάστηκε στη §2.4.2. Αν η σχέση αυτή ολοκληρωθεί σε κατεύθυνση κάθετη στη φλόγα, προκύπτει ότι ο ρυθμός καύσης ανά μονάδα επιφάνειας είναι ίσος με $\rho_u S_T$ ($kg/m^2 s$)¹. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα την επιθυμητή ιδιότητα ο συνολικός ρυθμός καύσης να είναι σταθερός ανεξάρτητα του πλήθους των κελιών που διακριτοποιούν τη φλόγα.

3.2.8 Άλλα μοντέλα

3.2.8.1 Μοντέλο τεχνικά παχιάς φλόγας

Η μέθοδος αυτή προτάθηκε αρχικά από τους Butler & O'Rourke (1977) και η ιδέα της είναι να θεωρηθεί το πάχος της φλόγας μεγαλύτερο από αυτό που είναι στην πραγματικότητα έτσι ώστε να επιλύεται στο αριθμητικό πλέγμα, κρατώντας την στρωτή ταχύτητα καύσης σταθερή. Σύμφωνα με θεωρίες για στρωτές φλόγες προανάμειξης (Williams 1985), η ταχύτητα καύσης και το πάχος της φλόγας μπορούν να προσεγγιστούν από τις σχέσεις:

$$S_L^0 \propto \sqrt{D\bar{\dot{\omega}}}, \quad \delta_L^0 \propto \frac{D}{S_L^0} \quad (3.2.23)$$

όπου D ο συντελεστής μοριακής διάχυσης και $\bar{\dot{\omega}}$ ο μέσος ρυθμός καύσης. Από την παραπάνω σχέση παρατηρούμε ότι μια αύξηση του πάχους της φλόγας κατά ένα συντελεστή F , διατηρώντας σταθερή τη στρωτή ταχύτητα καύσης, μπορεί να επιτευχθεί αν αυξήσουμε τη μοριακή διάχυση και ταυτόχρονα μειώσουμε τον ρυθμό καύσης κατά τον ίδιο συντελεστή. Έτσι με αυτόν τον τρόπο μπορεί να χρησιμοποιηθεί ο νόμος του Arrhenius, διαιρώντας απλά τον ρυθμό καύσης που προκύπτει από αυτόν με F . Αυτή η προσέγγιση είναι ιδιαίτερα ελκυστική στο πλαίσιο του LES, αν χρησιμοποιήσουμε κατάλληλο συντελεστή F έτσι ώστε η παχιά φλόγα που θα προκύψει να μπορεί να επιλυθεί απευθείας από το πλέγμα, δηλαδή επιλέγοντας $F = n\Delta/\delta_L^0$ όπου Δ η διάσταση του πλέγματος και n το επιθυμητό πλήθος των κελιών με τα οποία επιθυμούμε να διακριτοποιήσουμε τη φλόγα (συνήθως $n = 4 - 10$).

Η μέθοδος αυτή έχει πολλά πλεονεκτήματα όπως το ότι καθώς το F τείνει στο 1, η μέθοδος τείνει στο DNS, με αποτέλεσμα για παράδειγμα να μπορεί να χρησιμοποιηθεί ο ίδιος κώδικας τόσο για DNS όσο και για LES (Charlette et al. 2002). Επίσης για τον ίδιο λόγο, πολλά από τα φαινόμενα τα οποία απαιτούν μοντελοποίηση όπως αλληλεπίδραση με στερεά και αστάθειες, μπορούν να

¹ Στην περίπτωση όπου δεν επιλύεται η μεταβλητή προόδου αλλά το κλάσμα μάζας του καυσίμου, τότε ο ρυθμός καύσης ισούται με $\rho_u S_T Y_f^u$ όπου Y_f^u το κλάσμα μάζας του καυσίμου στην άκαυστη περιοχή (στη περίπτωση υποστοιχειομετρικού μείγματος)

αναπαραχθούν απευθείας, τουλάχιστον ποιοτικά. Παρόλα αυτά, παχαίνοντας την φλόγα, μεταβάλλεται ο τρόπος με τον οποίο αλληλεπιδρά με την τύρβη, καθώς ο αριθμός Damköhler, $l_0 S_L / u'_0 \delta_L^0$, μειώνεται κατά τον παράγοντα F λόγω αύξησης του δ_L^0 . Έτσι η φλόγα γίνεται λιγότερο ευαίσθητη στις τυρβώδεις κινήσεις. Επίσης, η παχιά φλόγα δεν μπορεί να παραμορφωθεί σε κλίμακες οι οποίες είναι πιο μικρές από το πλέγμα. Συνεπώς η μοντελοποίηση είναι πάλι απαραίτητη, ώστε να ληφθούν υπ' όψιν τα θέματα αυτά. Αυτό που γίνεται, είναι να χρησιμοποιηθεί μια συνάρτηση αποδοτικότητας E (όπως χρησιμοποιείται και στο μοντέλο INFS, §3.2.6), με σκοπό την αύξηση της στρωτής ταχύτητας καύσης από S_L^0 σε $S_T = ES_L^0$.

Περισσότερα για τη μέθοδο παρουσιάζονται από τους Colin et al. (2000), Charlette et al. (2002) και Poinsot & Veynante (2005, §5.4.3). Εφαρμογή του μοντέλου σε περίπτωση έκρηξης σε γεωμετρία μικρής κλίμακας έχει γίνει από τους Quillatre et al. (2013), ενώ εφαρμογή σε άλλες περιπτώσεις (βιομηχανικός καυστήρας) από τους Selle et al. (2004).

3.2.8.2 Μοντέλα επιφανειακής πυκνότητας της φλόγας

Τα μοντέλα αυτής της κατηγορίας, χρησιμοποιούνται σε φλόγες οι οποίες βρίσκονται στις περιοχές της ρυτιδιασμένης φλόγας του διαγράμματος Borghi, καθώς γίνεται η θεώρηση ότι ο ρυθμός καύσης είναι ανάλογος της επιφάνειας της φλόγας. Ο ρυθμός καύσης δίνεται συνήθως από μια σχέση της μορφής:

$$\bar{\dot{\omega}} = \rho_u S_c \Sigma \quad (3.2.24)$$

όπου ρ_u η πυκνότητα στην άκαυστη περιοχή, S_c ο μέσος ρυθμός κατανάλωσης και Σ η πυκνότητα της επιφάνειας η οποία έχει μονάδες m^2/m^3 και είναι ένα μέτρο του πόσο ρυτιδιασμένη είναι μια φλόγα. Μεγάλη τιμή της πυκνότητας επιφάνειας Σ ισοδυναμεί με μεγάλης έντασης τύρβη. Στο μοντέλο αυτό, η χημεία της καύσης ουσιαστικά ενσωματώνεται στην ποσότητα S_c ενώ η αλληλεπίδραση της φλόγας με τη τύρβη στην ποσότητα Σ . Έχουν αναπτυχθεί πολλά μοντέλα αυτής της κατηγορίας, τόσο στα πλαίσια της μεθόδου RANS όσο και στα πλαίσια του LES. Περισσότερες λεπτομέρειες για τη μέθοδο δίνονται από τους Abu-Orf & Cant (2000) και Poinsot & Veynante (2005, §5.3.6, 5.4.5).

3.2.8.3 Μοντέλα εξάπλωσης φωτιάς σε δάσος

Τα μοντέλα εξάπλωσης φωτιάς σε δάσος (forest fire models) είναι φαινομενολογικά μοντέλα στα οποία η διάδοση του μετώπου της φλόγας βασίζεται στον τρόπο με τον οποίο γίνεται η εξάπλωση της φωτιάς σε ένα δάσος. Όπως λοιπόν στη φύση ένα δέντρο αρχίζει να καίγεται όταν ένα διπλανό του δέντρο έχει πιάσει φωτιά, έτσι και σε αυτά ένα υπολογιστικό κελί αρχίζει να καίγεται μόνο αν σε ένα ή περισσότερα γειτονικά του κελιά έχει ήδη καεί μία προκαθορισμένη ποσότητα καυσίμου. Σε αυτή την αρχή βασίζονται τα μοντέλα που υπάρχουν στους υπολογιστικούς κώδικες COM3D (Yáñez et al. 2012) και b0b (Efimenko & Dorofeev 2001) των πανεπιστημίων FZK (Forschungszentrum Karlsruhe, Γερμανία) και KI (Research Center Kurchatov Institute, Ρωσία) αντίστοιχα.

Ο ρυθμός καύσης στον κώδικα COM3D υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\bar{\dot{\omega}} = \begin{cases} \frac{\rho C_g}{\Delta} (1 - c_{i,j,k}), & F_{i,j,k} > 0.25 \\ 0, & F_{i,j,k} < 0.25 \end{cases} \quad (3.2.25)$$

όπου $F_{i,j,k}$ είναι παράμετρος ελέγχου, C_g παράμετρος του μοντέλου (με διαστάσεις ταχύτητας), c η μεταβλητή προόδου και Δ το μέγεθος του υπολογιστικού κελιού. Η παράμετρος ελέγχου δίνεται από τη σχέση:

$$F_{i,j,k} = c_{i+1,j,k}^2 + c_{i-1,j,k}^2 + c_{i,j+1,k}^2 + c_{i,j-1,k}^2 + c_{i,j,k+1}^2 + c_{i,j,k-1}^2 - 3c_{i,j,k}^2 \quad (3.2.26)$$

Έτσι αν το $F_{i,j,k}$ ενός κελιού υπερβαίνει το 0.25, τότε το κελί θεωρείται ότι καίγεται, διαφορετικά θεωρείται ότι δεν έχει γίνει έναυση. Με άλλα λόγια, ένα κελί πιάνει φωτιά, μόνο αν τα γειτονικά ή κάποια από τα γειτονικά του έχουν ήδη καεί σε κάποιο συγκεκριμένο βαθμό (θυμίζουμε ότι η μεταβλητή προόδου έχει τιμή 0 στην άκαυστη περιοχή και 1 στην περιοχή που η καύση έχει ολοκληρωθεί). Η παράμετρος ελέγχου, τέλος, δίνεται από τη σχέση:

$$C_g = (A \cdot E + B) S_i \quad (3.2.27)$$

όπου $A=0.243$, $B=0.375$ σταθερές που έχουν προκύψει από σύγκριση με το πείραμα, S_i η τυρβώδης ταχύτητα καύσης και E ο συντελεστής διαστολής. Σαν S_i για τα πρώτα ms της καύσης χρησιμοποιείται η στρωτή ταχύτητα καύσης S_L ενώ για τα επόμενα υπολογίζεται από τη σχέση (Kawanabe et al. 1998):

$$S_i = S_L \left(1 + 1.25 \left(\frac{u'}{S_L} \right)^{0.7} \right) \quad (3.2.28)$$

3.3 Αναλυτικά και ημι-εμπειρικά μοντέλα εκρήξεων

Αν και στην παρούσα διατριβή ασχοληθήκαμε μόνο με τη μοντελοποίηση εκρήξεων με τη μέθοδο της υπολογιστικής μηχανικής, εδώ θα αναφέρουμε κάποια απλούστερα μοντέλα τα οποία παρουσιάζονται στη βιβλιογραφία και είναι χρήσιμα να γίνουν γρήγορες εκτιμήσεις της πίεσης. Τα μοντέλα αυτά θα τα χωρίσουμε εδώ σε δύο κατηγορίες, σε γενικής χρήσης μοντέλα και σε μοντέλα που αφορούν αποκλειστικά εκρήξεις σε κλειστούς χώρους με ανοίγματα (vented deflagrations).

3.3.1 Μοντέλα γενικής χρήσης

Τα δύο πιο γνωστά μοντέλα εκτίμησης της υπερπίεσης που αναπτύσσεται από μια έκρηξη είναι το μοντέλο ισοδυναμίας TNT (TNT equivalency) και το μοντέλο πολλαπλών ενεργειών (Multi-Energy Method) τα οποία θα περιγράψουμε συνοπτικά στη συνέχεια. Περισσότερες λεπτομέρειες για τα μοντέλα αυτά (και παρουσίαση και κάποιον άλλων) υπάρχουν στο βιβλίο του Crowl (2003), του Αμερικάνικου Ινστιτούτου Χημικών Μηχανικών (AIChE 1994) και στις αναφορές τους.

Το μοντέλο ισοδυναμίας TNT είναι ένα απλό μοντέλο το οποίο μετατρέπει την ενέργεια ενός εύφλεκτου μείγματος σε ισοδύναμη μάζα TNT. Έτσι η υπόθεση η οποία γίνεται είναι ότι όλα τα

καύσιμα συμπεριφέρονται από άποψη εκρηκτικότητας σαν το TNT. Τα βήματα της μεθόδου είναι τα εξής:

- Αρχικά γίνεται εκτίμηση της συνολικής ποσότητας του εύφλεκτου υλικού. Αυτό γίνεται, είτε με βάση τη συνολική ποσότητα που έχει διαφύγει, είτε μέσω κάποιου μοντέλου διασποράς.
- Στη συνέχεια εκτιμάται ο βαθμός απόδοσης της έκρηξης και υπολογίζεται η ισοδύναμη μάζα του TNT από απλή αναλυτική σχέση.
- Γίνεται εκτίμηση της μέγιστης υπερπίεσης (και της ώθησης) σε συνάρτηση της απόστασης, με τη χρήση διαγραμμάτων για το TNT.
- Με τη χρήση πινάκων (π.χ. Πίνακας 1.2.1, ή οι πίνακες που παρουσιάζονται από τον Crowl, 2003 §2.9.2) γίνεται εκτίμηση των συνεπειών της έκρηξης.

Μερικά από τα μειονεκτήματα της μεθόδου είναι η αβεβαιότητα στην επιλογή του βαθμού απόδοσης, καθώς και ότι θεωρείται έκρηξη σε ανοιχτό χώρο χωρίς την παρουσία εμποδίων. Επίσης, η έκρηξη η οποία θεωρείται ότι είναι τύπου υπερηχητικής έκρηξης (detonation) η οποία ξεκινάει από δεδομένο σημείο. Αυτή η θεώρηση απέχει από μια έκρηξη αέριου μείγματος, στην οποία το εύφλεκτο νέφος καταλαμβάνει μια περιοχή όπου οποία η φλόγα επεκτείνεται σταδιακά. Σαν αποτέλεσμα αυτού, οι πιέσεις συνήθως υπερεκτιμούνται κοντά στο σημείο που τοποθετείται η έκρηξη και υποεκτιμούνται μακριά. Επίσης η επιλογή της θέσης του σημείου αυτού δεν είναι προφανής, καθώς μπορεί να τοποθετηθεί είτε στο σημείο της (θεωρητικής) έναυσης είτε στο σημείο από όπου υπήρξε η διαρροή του καυσίμου είτε στο γεωμετρικό κέντρο του εύφλεκτου νέφους.

Το μοντέλο πολλαπλών ενεργειών (van Wingerden et al. 1989) αναπτύχθηκε από την TNO και επιχειρεί να καλύψει κάποια από τα μειονεκτήματα του μοντέλου ισοδυναμίας TNT. Στο μοντέλο αυτό λαμβάνονται υπ' όψιν κλειστοί χώροι και εμπόδια (congestion και confinement). Η βασική ιδέα του μοντέλου είναι ότι η ενέργεια της έκρηξης εξαρτάται περισσότερο από τα εμπόδια και από το πόσο κλειστός είναι ο χώρος παρά από το είδος του καυσίμου. Τα βασικά βήματα της μεθόδου είναι τα εξής

- Υπολογισμός της έκτασης του εύφλεκτου νέφους μέσω κάποιου μοντέλου διασποράς
- Αναγνώριση στη γεωμετρία του χώρου των σημείων στα οποία το νέφος μπορεί να εγκλωβιστεί.
- Καθορισμός των «πηγών» που μπορούν να δώσουν ισχυρά κύματα πίεσης. Τέτοιες πηγές είναι χώροι με πολλά εμπόδια, χώρος μεταξύ παράλληλων πλακών και γενικά χώροι που ευνοούν την επιτάχυνση της φλόγας καθώς και χώροι υψηλής τύρβης (π.χ. jets). Οι υπόλοιποι χώροι θεωρείται ότι δίνουν χαμηλής έντασης κύματα πίεσης.
- Υπολογισμός της ενέργειας που δίνεται από τις παραπάνω πηγές. Αυτό γίνεται υπολογίζοντας τον όγκο του εύφλεκτου νέφους που υπάρχει σε κάθε πηγή και πολλαπλασιάζοντας με το $3.5 \cdot 10^6 \text{ J/m}^3$ που είναι μια τυπική τιμή θερμογόνου δύναμης για στοιχειομετρικά μείγματα υδρογονανθράκων.
- Υπολογισμός της δύναμης των επιμέρους πηγών αντιστοιχίζοντας τις πηγές με την κλίμακα από 1 έως 10, όπου 10 θεωρείται η πιο βίαιη πηγή. Για την αντιστοίχιση αυτή υπάρχουν πολλοί κανόνες που ακολουθούνται. Η τιμή 7 είναι μια τυπική τιμή. Οι περιοχές του χώρου

στις οποίες δεν υπάρχουν πηγές αντιστοιχίζονται συνήθως στις τιμές 1 έως 3, αναλόγως με την ένταση της τύρβης.

- Υπολογισμός της υπερπίεσης και της διάρκειας αυτής σε συνάρτηση με την απόσταση από την πηγή, μέσω διαγραμμάτων, με βάση τις προηγούμενες ποσότητες.

Αβεβαιότητες της μεθόδου είναι το πότε δύο πηγές πρέπει να θεωρηθούν σαν μια αν βρίσκονται σε κοντινή απόσταση, καθώς και το πώς τα αποτελέσματα από την κάθε πηγή πρέπει να συνδυαστούν μεταξύ τους.

3.3.2 Μοντέλα εκρήξεων σε κλειστό χώρο με ανοίγματα

Οι εκρήξεις σε κλειστούς χώρους με ανοίγματα είναι μια περίπτωση υψηλού ενδιαφέροντος. Μια ενδεχόμενη έκρηξη σε κλειστό χώρο, μπορεί να αντιμετωπιστεί μόνο μέσω ανοιγμάτων από τα οποία θα εκτονωθεί η πίεση έτσι ώστε να μην ξεπεραστούν τα προκαθορισμένα όρια μέσα στο κτήριο. Η εκτίμηση της αναπτυσσόμενης υπερπίεσης σε αυτές τις περιπτώσεις είναι λοιπόν αναγκαία για τον σχεδιασμό των ανοιγμάτων εκτόνωσης της πίεσης έτσι ώστε να τηρηθούν τα όρια ασφαλείας. Για τον σκοπό αυτό έχουν αναπτυχθεί διάφορα αναλυτικά και ημι-εμπειρικά μοντέλα τα οποία θα αναφέρουμε στη συνέχεια.

Οι εμπειρικές συσχετίσεις οι οποίες χρησιμοποιούνται συχνά, είναι αυτές της παγκόσμιας μη κερδοσκοπικής οργάνωσης NFPA (National Fire Protection Association), η οποία εδρεύει στην Αμερική και έχει σκοπό στον περιορισμό των απωλειών που σχετίζονται με ατυχήματα που εμπλέκουν φωτιά. Οι οδηγίες αυτές αναπτύσσονται συνεχώς από το 1945 μέχρι σήμερα. Η τελευταία μορφή τους εκδόθηκε το 2013 και είναι ελεύθερα διαθέσιμες (NFPA 68 2013). Για τον υπολογισμό της μέγιστης υπερπίεσης, η μέθοδος λαμβάνει υπ' όψιν της μέσω ημι-εμπειρικών σχέσεων το σχήμα και τις διαστάσεις του δωματίου, την επιφάνεια του ανοίγματος, την πίεση στην οποία το κάλυμμα του ανοίγματος υποχωρεί, τη συγκέντρωση του καυσίμου, την αρχική πίεση και θερμοκρασία, την ταχύτητα στρωτής καύσης, την πυκνότητα κ.α. Η μέθοδος αυτή είναι συνήθως πολύ συντηρητική, δηλαδή προβλέπονται πιέσεις αρκετά μεγαλύτερες από τις πραγματικές (Razus & Krause 2001), ενώ και το εύρος εφαρμογών που καλύπτει είναι περιορισμένο (Sustek & Janovsky 2013).

Ένα μοντέλο το οποίο έχει αναπτυχθεί πρόσφατα είναι αυτό των Bauwens et al. (2010, 2012). Στο μοντέλο αυτό υπολογίζονται τρία διαφορετικά τοπικά μέγιστα της πίεσης, τα οποία συσχετίζονται με διαφορετικές φάσεις της έκρηξης. Το πρώτο συσχετίζεται με το μέγιστο που αναπτύσσεται λόγω της εξωτερικής έκρηξης, το δεύτερο με το μέγιστο λόγω της ύπαρξης εμποδίων και το τρίτο εξ' αιτίας των ασταθειών που αναπτύσσονται στο τελευταίο στάδιο της έκρηξης από την αλληλεπίδραση της φλόγας με τα ακουστικά κύματα και από τις ταλαντώσεις των τοιχωμάτων. Το μοντέλο είναι κατάλληλο μόνο για σχετικά μικρές υπερπιέσεις της τάξεως του 0.1 bar λόγω υποθέσεων που έχουν γίνει στο μοντέλο και λόγω των πιέσεων που αναπτύσσονται στα πειράματα που χρησιμοποιήθηκαν για την εξακρίβωση του μοντέλου. Το μοντέλο βασίζεται σε μια σχέση η οποία έχει προκύψει από τη θεώρηση ότι μέγιστη υπερπίεση αναπτύσσεται όταν ο ρυθμός αύξησης της πίεσης που προκαλεί η παραγωγή προϊόντων λόγω της καύσης γίνεται ίση με τον ρυθμό μείωσης της λόγω της ροής μάζας έξω από το δωμάτιο μέσω του ανοίγματος. Σημαντικές παράμετροι σε αυτή τη σχέση αποτελούν η πίεση έξω από το άνοιγμα, η ταχύτητα καύσης και η

επιφάνεια της φλόγας, για τις οποίες προτείνονται συγκεκριμένες σχέσεις. Παρόλο όμως που οι συγκρίσεις με τα πειράματα που έχουν γίνει δείχνουν πολύ καλή συμφωνία, φαίνεται ότι υπάρχουν δυσκολίες στην εφαρμογή του μοντέλου από άλλους ερευνητές (V. Molkon, J. Hoyer, ιδιωτική επικοινωνία).

Ένα τελευταίο μοντέλο στο οποίο αξίζει να αναφερθούμε είναι αυτό των Molkon & Bragin (2015). Το μοντέλο αυτό αναπτύσσεται συνεχώς από το 1995. Ο υπολογισμός της μέγιστης αναπτυσσόμενης υπερπίεσης γίνεται μέσω του υπολογισμού του τυρβώδους αριθμού Bradley ο οποίος εξαρτάται από ένα πλήθος παραγόντων όπως χαρακτηριστικά της γεωμετρίας και της καύσης, καθώς και ενός παράγοντα που λαμβάνει υπ' όψιν του διάφορους μηχανισμούς οι οποίοι αυξάνουν την ταχύτητα καύσης όπως είναι η τύρβη και οι αστάθειες της φλόγας. Για παραγωγή του μοντέλου, χρησιμοποιήθηκαν τα αποτελέσματα από ένα μεγάλο πλήθος πειραμάτων (76) τα οποία περιλαμβάνουν μεγάλο εύρος συνθηκών. Παρήχθησαν δύο σχέσεις εκτίμησης της μέγιστης υπερπίεσης. Η πρώτη προκύπτει με βάση την καλύτερη προσέγγιση των πειραματικών δεδομένων. Η δεύτερη είναι συντηρητική, καθώς η πίεση που προβλέπει είναι μεγαλύτερη ή ίση της πειραματικής τιμής για όλα πειράματα που εξετάστηκαν. Η πίεση της σχέσης αυτής είναι 2.6 φορές μεγαλύτερη της πίεσης που δίνει η πρώτη σχέση.

Κεφάλαιο 4

Μεθοδολογία που αναπτύχθηκε και χρησιμοποιήθηκε στη διατριβή

DNS is like you observing someone from the keyhole

Στο κεφάλαιο αυτό θα γίνει περιγραφή της μεθοδολογίας που ακολουθήθηκε με σκοπό την μοντελοποίηση και τη μελέτη φαινομένων έκρηξης προαναμεμιγμένου μείγματος καυσίμου-αέρα. Έμφαση θα δοθεί στη μοντελοποίηση της καύσης και στις αριθμητικές λεπτομέρειες, καθώς οι βασικές εξισώσεις ροής έχουν παρουσιαστεί ήδη στο προηγούμενο κεφάλαιο.

4.1 Βασικές εξισώσεις

Οι εξισώσεις οι οποίες επιλύονται είναι αυτές της συνέχειας, της ορμής, της διατήρησης των συστατικών και της ενέργειας (στατική ή ολική ενθαλπία). Οι εξισώσεις, είτε είναι ολοκληρωμένες κατά Favg όταν ακολουθείται η RANS μέθοδος (§3.1.3), είτε είναι φιλτραρισμένες όταν ακολουθείται η LES (§3.1.4). Στις προσομοιώσεις που έγιναν ακολουθήθηκε κυρίως η LES μέθοδος και συγκεκριμένα το μοντέλο RNG LES όπως παρουσιάστηκε στην παράγραφο 3.1.4. Η μέθοδος LES ακολουθήθηκε λόγω της θεωρητικής υπεροχής που παρουσιάζει καθώς μέρος της τύρβης επιλύεται. Επίσης η ταχεία ανάπτυξη της υπολογιστικής δύναμης τα τελευταία χρόνια έχει καταστήσει δυνατή την χρήση πυκνών τριδιάστατων πλεγμάτων τα οποία απαιτούνται από τη μέθοδο. Το μοντέλο RNG LES χρησιμοποιήθηκε καθώς στα πρώτα στάδια της έκρηξης η ροή βρίσκεται στη στρωτή περιοχή. Το μοντέλο αυτό θεωρείται ότι προσομοιώνει με μεγαλύτερη ακρίβεια στρωτές ροές από ότι το απλό μοντέλο του Smagorinsky, ενώ θεωρείται και πιο κατάλληλο για περιπτώσεις όπου έχουμε μετάβαση στην τύρβη. Ένας από τους σκοπούς της διατριβής είναι η αξιολόγηση της μεθόδου LES στις περιπτώσεις εκρήξεων. Για τον σκοπό αυτό, χρησιμοποιήθηκε και η μέθοδος RANS ώστε να γίνει σύγκριση των μεθόδων.

Στην περίπτωση της καύσης υδρογόνου, τα **συστατικά** για τα οποία επιλύθηκε η εξίσωση μεταφοράς είναι το υδρογόνο, το οξυγόνο και ο αέρας, ενώ το άζωτο θεωρήθηκε σαν το περιβάλλον αέριο (ambient gas). Στις περισσότερες περιπτώσεις που μελετήθηκαν, έχουμε αρχικά ομογενές μείγμα καυσίμου-αέρα το οποίο κατά τη διάρκεια της έκρηξης αναμειγνύεται με τον περιβάλλοντα αέρα. Κάνοντας την υπόθεση της ίσης διάχυσης των συστατικών (§A.2) (η οποία μπορεί να γίνει εκ του ασφαλούς στην περίπτωση της τυρβώδους καύσης), ο αριθμός των εξισώσεων μεταφοράς θα μπορούσε να μειωθεί κατά έναν, επιλύοντας μόνο μια μεταβλητή προόδου και ένα κλάσμα μείγματος (mixture fraction). Η επιλογή αυτή εξετάστηκε, χρησιμοποιώντας σαν μεταβλητή προόδου το κλάσμα μάζας του καυσίμου και σαν κλάσμα

μείγματος το κλάσμα μάζας του εξωτερικού αέρα ή του αζώτου. Στη μέθοδο αυτή αντιμετωπίστηκαν διάφορες δυσκολίες (π.χ. εμφάνιση προϊόντων σε περιοχή όπου δεν είχε ξεκινήσει η καύση, ή μη-φυσική μορφή ισοϋψών για χαμηλές τιμές συγκεντρώσεων), οι οποίες οφείλονται σε αριθμητικά σφάλματα. Αν και τελικά οι δυσκολίες ξεπεράστηκαν στον μεγαλύτερο βαθμό, η μέθοδος της επίλυσης όλων των συστατικών ξεχωριστά προτιμήθηκε λόγω μεγαλύτερης αξιοπιστίας, απλότητας και ευκολίας εφαρμογής. Επίσης η μέθοδος αυτή είναι πιο γενική και μπορεί να εφαρμοστεί για παράδειγμα και για μη-ομογενή μείγματα καυσίμου-αέρα. Η επιπλέον εξίσωση μεταφοράς που χρειάζεται να επιλυθεί προκαλεί πολύ μικρή επιβάρυνση στον συνολικό υπολογιστικό χρόνο, καθώς ο χρόνος επίλυσης της είναι μικρός σε σχέση με τον χρόνο που απαιτείται για την επίλυση των υπόλοιπων εξισώσεων και κυρίως αυτόν της πίεσης.

Τέλος, για το κλείσιμο του συστήματος των εξισώσεων και την σύνδεση της πυκνότητας με την πίεση, χρησιμοποιούμε την καταστατική εξίσωση των τελείων αερίων. Η υπόθεση του τέλειου αερίου (και του ιδανικού μείγματος) μπορεί να γίνει με ασφάλεια, λόγω των πολύ μεγάλων θερμοκρασιών που αναπτύσσονται. Συνεπώς η χρήση μιας πιο ακριβής καταστατικής εξίσωσης (π.χ. Peng-Robinson) δεν είναι αναγκαία και δεν δοκιμάστηκε.

4.2 Μοντελοποίηση καύσης

Όπως έγινε φανερό στο Κεφάλαιο 2, το φαινόμενο της έκρηξης αερίου μείγματος είναι πολύ περίπλοκο καθώς εμπλέκει πολλά φυσικά φαινόμενα. Αυτό έχει σαν συνέπεια τα περισσότερα μοντέλα καύσης τα οποία παρουσιάστηκαν στη §3.2 να μην είναι από μόνα τους κατάλληλα για τη μοντελοποίηση του φαινομένου, καθώς λαμβάνουν υπ' όψιν τους μόνο την τύρβη η οποία υπάρχει μπροστά από το μέτωπο της φλόγας. Για τη μοντελοποίηση της καύσης χρησιμοποιήθηκε ένα μοντέλο που έχει εμφανιστεί πρόσφατα στη βιβλιογραφία, το οποίο λαμβάνει υπ' όψιν τα περισσότερα φυσικά φαινόμενα τα οποία αναπτύσσονται σε μια έκρηξη προαναμεμιγμένου μείγματος αερίου καυσίμου. Το μοντέλο αυτό προτάθηκε από τους Vladimir Molkon, Dmitry Makarog και τους συνεργάτες τους και αναπτύσσεται στο πανεπιστήμιο του Ulster της Βορείου Ιρλανδίας τα τελευταία χρόνια (Molkon 2012). Το μοντέλο αυτό είναι νέο και ως εκ τούτου δεν έχει ακόμα χρησιμοποιηθεί από άλλες ερευνητικές ομάδες. Επιλέχθηκε λόγω της καλής θεωρητικής του βάσης και των καλών αποτελεσμάτων που έχει επιδείξει (Molkon et al. 2006, 2007, 2008, Xiao et al. 2012). Ένας από τους στόχους της παρούσας διατριβής ήταν η επιβεβαίωση της καλής του λειτουργίας, η ανάδειξη τυχών αδυναμιών του και η βελτίωση του.

Το μοντέλο καύσης που θα παρουσιάσουμε, είναι αυτό που χρησιμοποιείται στις προσομοιώσεις των επόμενων Κεφαλαίων. Το μοντέλο, όπως θα περιγράψουμε στη συνέχεια, διαφέρει από αυτό του Molkon (2012) ως προς τον τρόπο μοντελοποίησης της αστάθειας θερμοδιάχυσης. Στο Κεφάλαιο 9, παρουσιάζουμε και εφαρμόζουμε δύο επιπλέον καινοτόμες αλλαγές στο μοντέλο, δημιουργώντας δύο παραλλαγές του, οι οποίες όπως θα δούμε βελτιώνουν τις προβλέψεις σε μεγάλο βαθμό. Οι παραλλαγές αυτές δεν παρουσιάζονται εδώ καθώς έγινε δοκιμή τους μόνο στη περίπτωση του Κεφαλαίου 9.

Το μοντέλο βασίζεται στη μέθοδο της κλίσης η οποία παρουσιάστηκε στη §3.2.7. Σαν μεταβλητή προόδου χρησιμοποιείται το κλάσμα μάζας του καυσίμου. Ο ρυθμός καύσης για το καύσιμο δίνεται από τη σχέση:

$$\overline{\dot{\omega}}_f = \rho_u S_T |\nabla \bar{Y}_f| \quad (4.2.1)$$

Η σχέση αυτή αποτελεί όρο πηγής στην εξίσωση μεταφοράς του καυσίμου. Οι όροι πηγής για τα υπόλοιπα συστατικά τα οποία συμμετέχουν στην αντίδραση υπολογίζονται εύκολα μέσω της στοιχειομετρίας της αντίδρασης από την σχέση:

$$\overline{\dot{\omega}}_i = \frac{\nu_i MW_i}{\nu_f MW_f} \overline{\dot{\omega}}_f \quad (4.2.2)$$

όπου ν είναι ο στοιχειομετρικός συντελεστής, MW το μοριακό βάρος, i δείκτης για τα συστατικά της αντίδρασης και f δείκτης για το καύσιμο. Η πυκνότητα στην άκαυστη περιοχή ρ_u υπολογίζεται με βάση την αρχική πυκνότητα του μείγματος καυσίμου-αέρα ρ_{u0} , κάνοντας την υπόθεση της αδιαβατικής συμπίεσης έτσι ώστε να ληφθεί υπόψη η αύξηση της λόγω αύξησης της πίεσης, δηλαδή:

$$\rho_u = \rho_{u0} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{1/\gamma} \quad (4.2.3)$$

Στο μοντέλο αυτό, η μοντελοποίηση της καύσης γίνεται ουσιαστικά μέσω του προσδιορισμού της τυρβώδους ταχύτητας καύσης S_T . Σκοπός μας είναι ο υπολογισμός του S_T να λαμβάνει υπ' όψιν του όλες τις βασικές παραμέτρους οι οποίες την επηρεάζουν και οι οποίες παρουσιάστηκαν στο Κεφάλαιο 2, δηλαδή:

- Την χημεία της αντίδρασης
- Την τύρβη η οποία βρίσκεται μπροστά από το μέτωπο της φλόγας
- Την τύρβη η οποία αναπτύσσεται από το ίδιο το μέτωπο της φλόγας
- Τις αστάθειες θερμοδιάχυσης του μετώπου της φλόγας
- Την φράκταλ γεωμετρία της επιφάνειας της φλόγας

Η βασική σχέση η οποία χρησιμοποιήθηκε για αυτό το σκοπό είναι η σχέση του Yakhot (Yakhot 1988) για την τυρβώδη ταχύτητα καύσης. Η σχέση αυτή θεωρητικά λαμβάνει υπ' όψιν της όλες οι κλίμακες της τύρβης μέσω της τεχνικής της επανα-κανονικοποίησης (renormalization) που χρησιμοποιήθηκε για να παραχθεί (Yakhot & Orszag 1986). Η τεχνική της επανα-κανονικοποίησης είναι ίδια με αυτή που χρησιμοποιήθηκε για την ανάπτυξη του RNG LES (Yakhot & Orszag 1986), οπότε η μέθοδος διαχείρισης της τύρβης και το μοντέλο καύσης μπορούμε να πούμε ότι κατά μια έννοια είναι θεωρητικά συνεπή μεταξύ τους. Το γεγονός αυτό αποτέλεσε έναν επιπλέον λόγο για τον οποίο επιλέχθηκαν. Η σχέση του Yakhot για την τυρβώδη ταχύτητα καύσης είναι η εξής:

$$S_T = S_L \exp \left[\frac{u_0'^2}{S_T^2} \right] \quad (4.2.4)$$

Η κεντρική ιδέα του μοντέλου που θα χρησιμοποιήσουμε, είναι η αντικατάσταση στη σχέση αυτή της ταχύτητας στρωτής καύσης, από μια άλλη ποσότητα την οποία ονομάζουμε υποπλεγματική ταχύτητα καύσης, S_L^{sgs} , δηλαδή:

$$S_T = S_L^{sgs} \exp \left[\frac{u_0'^2}{S_T^2} \right] \quad (4.2.5)$$

Η υποπλεγματική ταχύτητα καύσης είναι μεγαλύτερη από την στρωτή ταχύτητα καύσης λόγω των φαινομένων που αναφέραμε παραπάνω και περιγράφηκαν στο Κεφάλαιο 2. Η ταχύτητα αυτή μοντελοποιείται ως ένα γινόμενο παραγόντων οι οποίοι πολλαπλασιάζουν την στρωτή ταχύτητα καύσης:

$$S_L^{sgs} = \Xi_k \cdot \Xi_{ip} \cdot \Xi_f \cdot S_L \quad (4.2.6)$$

Έτσι τελικά η σχέση που δίνει την τυρβώδη ταχύτητα καύσης είναι:

$$S_T = \Xi_k \cdot \Xi_{ip} \cdot \Xi_f \cdot S_L \cdot \exp \left[\frac{u_0'^2}{S_T^2} \right] \quad (4.2.7)$$

Οι παράγοντες Ξ περιγράφουν το ποσοστό αύξησης της ταχύτητας καύσης σε σχέση με τη σωστή, λόγω των φαινομένων που λαμβάνουν χώρα σε υποπλεγματικό επίπεδο. Ο Ξ_k περιγράφει την τύρβη που παράγεται από το μέτωπο της φλόγας, ο Ξ_{ip} την αστάθεια θερμοδιάχυσης του μετώπου της φλόγας και ο Ξ_f την αύξηση της επιφάνειας της φλόγας λόγω της φράκταλ γεωμετρίας της. Η τύρβη η οποία βρίσκεται μπροστά από το μέτωπο της φλόγας λαμβάνεται υπ' όψιν μέσω της χαρακτηριστικής ταχύτητας της τύρβης u_0' και της σχέσης του Yakhot, ενώ η χημεία της αντίδρασης μέσω της ταχύτητας στρωτής καύσης S_L . Αναλυτικά ο τρόπος με τον οποίο λαμβάνονται υπ' όψιν όλα τα παραπάνω παρουσιάζεται στη συνέχεια.

Τύρβη που παράγεται από το μέτωπο της φλόγας

Όπως αναφέραμε στη §2.4.3 και §2.5, μια φλόγα η οποία επεκτείνεται σφαιρικά σε αρχικά ακίνητο περιβάλλον, έχει την ικανότητα να δημιουργεί τύρβη με αποτέλεσμα την αύξηση του ρυθμού καύσης. Ο κύριος μηχανισμός αυτού του φαινομένου είναι η υδροδυναμική αστάθεια (§2.3.1). Το φαινόμενο αυτό λαμβάνεται υπ' όψιν στο μοντέλο μέσω του συντελεστή Ξ_k . Ο υπολογισμός του Ξ_k , βασίζεται στη θεωρητική σχέση που παρήγαγαν οι Karlovitz et al. (1951) και περιγράφηκε στη §2.4.3. Σύμφωνα με την ανάλυση τους και ακολουθώντας τη σχέση (2.4.11), η μέγιστη τιμή του συντελεστή Ξ_k επιλέγεται ίση με:

$$\Xi_k^{\max} = \frac{E - 1}{\sqrt{3}} \quad (4.2.8)$$

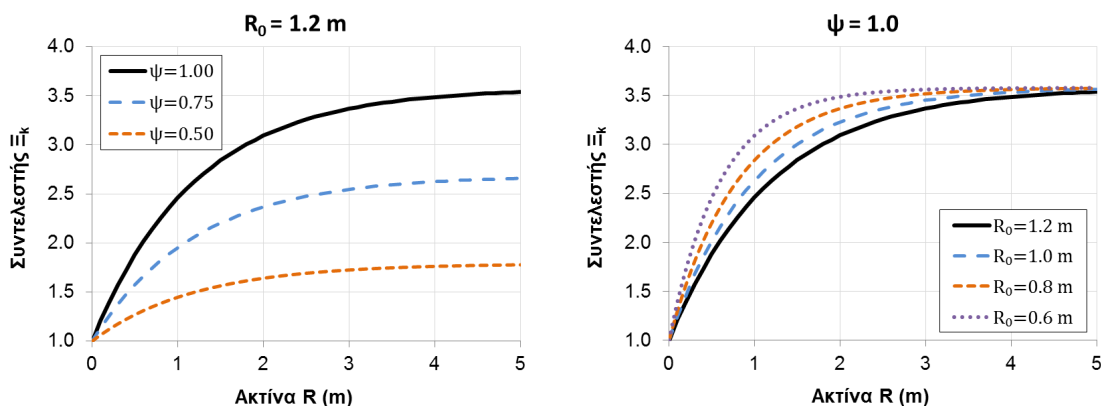
όπου E ο λόγος επέκτασης (§2.2.1). Η συσχέτιση του φαινομένου με την υδροδυναμική αστάθεια, δικαιολογεί την εξάρτηση του συντελεστή από τον λόγο επέκτασης E . Η παραπάνω θεωρητικά μέγιστη τιμή του συντελεστή Ξ_k μπορεί να μην επιτυγχάνεται πάντα, ενώ επίσης αναμένεται να χρειάζεται κάποια απόσταση από το σημείο έναυσης ώστε το φαινόμενο να έχει πλήρως

αναπτυχθεί. Για να ληφθούν αυτά υπ' όψιν, ο συντελεστής υπολογίζεται από την εξής σχέση (Molkov et al. 2006):

$$\Xi_k = 1 + (\psi \cdot \Xi_k^{\max} - 1) \cdot [1 - \exp(-R/R_0)] \quad (4.2.9)$$

όπου R η απόσταση από το σημείο έναυσης, R_0 η κρίσιμη ακτίνα μετάβασης του φαινομένου και ψ εμπειρική σταθερά. Η εμπειρική σταθερά παίρνει τιμές από 0 έως 1 και υποδηλώνει το κλάσμα της θεωρητικής μέγιστης τιμής Ξ_k^{\max} το οποίο τελικά επιτυγχάνεται. Αυτή η σταθερά έχει προταθεί (Χiao et al. 2012) ίση με 0.5 για μείγματα τα οποία είναι κοντά στη στοιχειομετρική αναλογία και ίση με 1 για αραιά μείγματα υδρογόνου-αέρα τα οποία είναι πιο ασταθή. Η κρίσιμη ακτίνα μετάβασης R_0 μπορεί να εκτιμηθεί από την εργασία των Gostintsev et al. (1989). Στην εργασία παρουσιάζονται πειραματικά αποτελέσματα από εκρήξεις που έγιναν σε αρχικά ακίνητο περιβάλλον. Σε όλα τα πειράματα παρατηρήθηκε ότι παρά την απουσία διαταραχών, το μέτωπο της φλόγας έγινε ασταθές, τυρβώδες και επιταχυνόμενο. Επίσης η ακτίνα σε συνάρτηση με τον χρόνο μπορούσε να περιγραφεί από την ίδια σχέση για όλα τα εξεταζόμενα μείγματα, χαρακτηριστικό της κοινής συμπεριφοράς στην τυρβώδη περιοχή. Για στοιχειομετρικά μείγματα υδρογόνου-αέρα, η κρίσιμη ακτίνα μετάβασης στην τυρβώδη περιοχή μετρήθηκε μεταξύ 1.0 και 1.2 m. Η τιμή της κρίσιμης ακτίνας αναμένεται να είναι μικρότερη για αραιά μείγματα υδρογόνου-αέρα τα οποία είναι πιο ασταθή (όπως και για πυκνά μείγματα προπανίου-αέρα) οπότε αναμένεται να μεταβούν στην τυρβώδη κατάσταση γρηγορότερα.

Στο παρακάτω σχήμα απεικονίζονται οι γραφικές παραστάσεις της σχέσης (4.2.9) για διάφορες τιμές των παραμέτρων ψ και R_0 . Στην αριστερή γραφική παράσταση απεικονίζεται η εξάρτηση από το ψ για δεδομένη ακτίνα R_0 και στην δεξιά η εξάρτηση από το R_0 για δεδομένο ψ . Παρατηρούμε ότι πιο σημαντική παράμετρος είναι η ψ , καθώς αυτή ορίζει τη μέγιστη τιμή του συντελεστή Ξ_k η οποία ισούται με $\psi \cdot \Xi_k^{\max}$. Από την άλλη μεριά η παράμετρος R_0 έχει μικρότερη επίδραση καθώς καθορίζει μόνο το πόσο απότομα θα γίνει η μετάβαση στη μέγιστη τιμή.



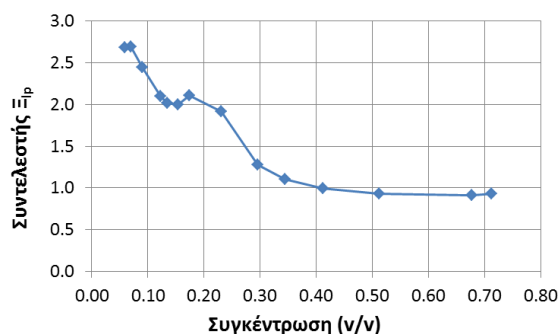
Σχήμα 4.2.1: Γραφικές παραστάσεις του συντελεστή Ξ_k συναρτήσει της απόστασης R από το σημείο έναυσης, για διάφορες τιμές των παραμέτρων ψ και R_0 .

Αστάθειες θερμοδιάχυσης

Όπως παρουσιάστηκε στη §2.3.2, η αστάθεια θερμοδιάχυσης είναι ένας σημαντικός μηχανισμός αστάθειας της φλόγας, η οποία οδηγεί αρχικά στην ανάπτυξη της κυτταρικής δομής στην επιφάνεια

της και στη συνέχεια στο ρυτίδιασμα της. Αυτά έχουν σαν αποτέλεσμα την αύξηση της επιφάνειας της φλόγας και συνεπώς την αύξηση του ρυθμού καύσης. Το φαινόμενο της αστάθειας αυτής είναι συνυφασμένο με την έννοια του προελαύνοντος σημείου (leading point concept). Σύμφωνα με αυτή την έννοια, στην τυρβώδη φλόγα υπάρχουν κάποια φλογίδια τα οποία προελαύνουν με μεγαλύτερη ταχύτητα μέσα στο άκαυστο μείγμα, καθώς η καμπυλότητα τους είναι τέτοια ώστε να μεγιστοποιείται η ταχύτητα καύσης λόγω του μηχανισμού της αστάθειας. Ο κύριος μηχανισμός αύξησης της ταχύτητας καύσης θεωρείται ότι είναι η μεταβολή της συγκέντρωσης στα προελαύνοντα φλογίδια λόγω της διαφορετικής διάχυσης των συστατικών της καύσης. Η ιδέα ότι η τυρβώδης ταχύτητα καύσης ελέγχεται στο σύνολο της από τα φλογίδια αυτά, χρησιμοποιήθηκε από τους Zimont & Lipatnikov (1995) για να υπολογιστεί η συγκέντρωση του καυσίμου σε αυτά οπότε και η νέα ταχύτητα καύσης. Ο συντελεστής αύξησης της ταχύτητας καύσης όπως αυτός προκύπτει από την εργασία τους¹, χρησιμοποιείται σαν συντελεστής Ξ_{ip} .

Στο παρακάτω σχήμα απεικονίζεται ο συντελεστής Ξ_{ip} συναρτήσει της συγκέντρωσης για την περίπτωση του υδρογόνου. Παρατηρούμε ότι σε πολύ αραιά μείγματα ο συντελεστής αυτός μπορεί να λάβει μεγάλες τιμές. Έτσι για παράδειγμα για συγκέντρωση 20% η ταχύτητα καύσης διπλασιάζεται. Παρατηρούμε επίσης ότι ακόμα και για στοιχειομετρικό μείγμα (29.6% v/v), ο συντελεστής που προκύπτει είναι μεγαλύτερος της μονάδας. Αυτό πιθανόν οφείλεται στην μεγαλύτερη διάχυση του υδρογόνου σε σύγκριση με το οξυγόνο σε συνδυασμό με το γεγονός ότι το μέγιστο της στρωτής ταχύτητας καύσης (Σχήμα 2.2.4) παρουσιάζεται για λόγο ισοδυναμίας μεγαλύτερο της μονάδας (συγκεκριμένα για $\phi=1.6$ που αντιστοιχεί σε συγκέντρωση 40%). Για τον ίδιο λόγο, ο συντελεστής Ξ_{ip} είναι ελαφρώς μικρότερος της μονάδας σε πλούσια μείγματα. Μια επιβεβαίωση της τιμής του συντελεστή αυτού για μείγμα υδρογόνου-αέρα 18%, γίνεται από την εργασία των Bauwens et al. (2011) όπου μετρήθηκε πειραματικά η ταχύτητα της καύσης στο αρχικό στάδιο μιας έκρηξης και βρέθηκε 1.96 φορές μεγαλύτερη από τη θεωρητική. Η τιμή αυτή είναι πολύ κοντά στην τιμή 2.08 η οποία προβλέπεται από το παρακάτω σχήμα.



Σχήμα 4.2.2: Συντελεστής Ξ_{ip} συναρτήσει της κατ' όγκο συγκέντρωσης υδρογόνου στον αέρα.

Για να ληφθεί υπ' όψιν η μεταβατική κατάσταση, στο μοντέλο του Molken (2012) προτείνεται ο συντελεστής αυτός να αυξάνει γραμμικά με την απόσταση έως ότου φτάσει την μέγιστη τιμή σε απόσταση $R_{ip} = R_0/2$ (όπου R_0 είναι η κρίσιμη ακτίνα που αναφέραμε στην προηγούμενη

¹ Στην εργασία των Zimont & Lipatnikov (1995) ο υπολογισμός της στρωτής ταχύτητας καύσης έγινε από πειραματικά δεδομένα

παράγραφο). Η ακτίνα που προκύπτει όμως είναι αρκετά μεγάλη και έρχεται σε αντίθεση με πειραματικά δεδομένα, στα οποία η αστάθεια εμφανίζεται πολύ γρηγορότερα. Για παράδειγμα στα πειράματα που διεξήχθησαν από τους Kim et al. (2015), αστάθεια εμφανίστηκε σε απόσταση μόλις 0.12 m από το σημείο έναυσης για στοιχειομετρικό μείγμα υδρογόνου-αέρα και 0.093 m για υποστοιχειομετρικό ($\phi=0.75$). Έτσι λοιπόν μια τροποποίηση του μοντέλου στις προσομοιώσεις που έγιναν ήταν η χρήση μικρότερης απόστασης μετάβασης για τον συντελεστή Ξ_{ip} . Η σημασία της τροποποίησης αυτής φαίνεται στη προσομοίωση του Κεφαλαίου 6.

Τέλος πρέπει να αναφέρουμε ότι η αστάθεια αυτή αν και εμφανίζεται αρχικά σε στρωτή φλόγα, έχει επίδραση και στην τυρβώδη. Όπως αναφέρεται από τους Lipatnikov & Chomiak (2005) στην εργασία ανασκόπησης τους για τη επίδραση της μοριακής διάχυσης στην τυρβώδη καύση, υπάρχουν διάφορα πειραματικά και υπολογιστικά (DNS) αποτελέσματα τα οποία δείχνουν ότι η καύση προαναμεμειγμένου μείγματος επηρεάζεται από τους διαφορετικούς συντελεστές διάχυσης μεταξύ καυσίμου, οξειδωτικού και θερμότητας, όχι μόνο παρουσία ασθενούς τύρβης αλλά και έντονης. Συγκεκριμένα, η ταχύτητα τυρβώδους καύσης αυξάνει με την μείωση του αριθμού Lewis, γεγονός το οποίο παρατηρείται έντονα στην καύση αραιού μείγματος υδρογόνου. Τα παραπάνω δικαιολογούν την διατήρηση του συντελεστή Ξ_{ip} ακόμα και όταν η φλόγα έχει μεταβεί πλήρως στην τυρβώδη περιοχή.

Φράκταλ γεωμετρίας της επιφάνειας

Όπως αναφέραμε στην §2.5, σύμφωνα με την θεωρία των φράκταλ ο λόγος της τυρβώδους επιφάνειας της φλόγας A_f προς αυτή της στρωτής φλόγας A ισούται με (Gouldin 1987):

$$\frac{A_f}{A} = \frac{S_T}{S_L} = \left(\frac{\lambda_0}{\lambda_i} \right)^{D_f-2} \quad (4.2.10)$$

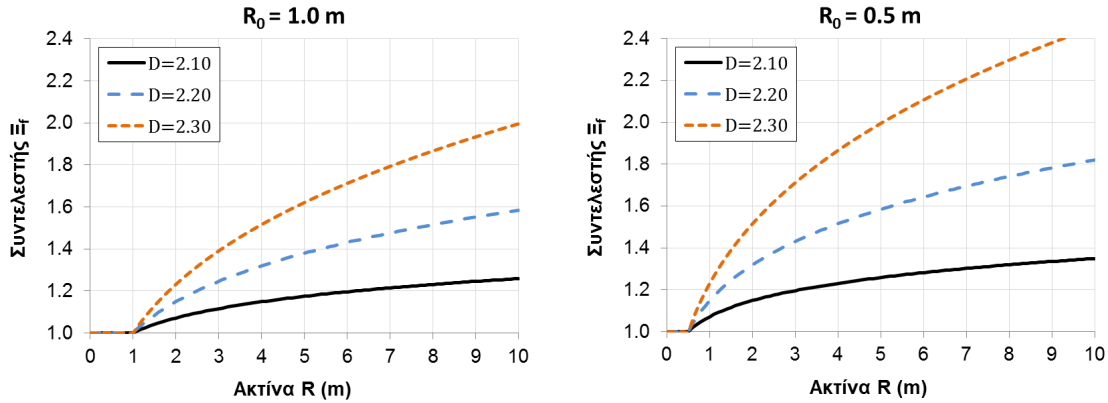
όπου λ_0 το εξωτερικό κατώφλι (outer cut-off) της φράκταλ γεωμετρίας και λ_i το εσωτερικό κατώφλι (inner cut-off). Για φλόγες οι οποίες εκτείνονται ελεύθερα σφαιρικά, το έξω κατώφλι μπορεί να θεωρηθεί ανάλογο της ακτίνας R , ενώ το εσωτερικό κατώφλι μπορεί να θεωρηθεί σταθερό. Συνεπώς, ο λόγος της τυρβώδους ταχύτητας S_T σε μία απόσταση R προς την τυρβώδη ταχύτητα στην απόσταση R_0 στην οποία η φράκταλ γεωμετρία αρχίζει να σχηματίζεται, μπορεί να προσεγγιστεί από τη σχέση:

$$\frac{S_T}{S_{T0}} = \left(\frac{R}{R_0} \right)^{D_f-2} \quad (4.2.11)$$

Η σχέση αυτή έχει προκύψει ουσιαστικά με διαίρεση των σχέσεων που προκύπτουν από την εφαρμογή της σχέσης (4.2.10) στις θέσεις R και R_0 . Τον παραπάνω λόγο ταχυτήτων τον θέτουμε ίσο με τον συντελεστή Ξ_f της σχέσης (4.2.6). Ο συντελεστής αυτός όπως είναι φανερό έχει νόημα μόνο για ακτίνες $R > R_0$, συνεπώς η τελική σχέση για τον υπολογισμό του είναι η εξής:

$$\Xi_f = \begin{cases} 1 & , \quad R \leq R_0 \\ \left(\frac{R}{R_0}\right)^{D_f-2} & , \quad R > R_0 \end{cases} \quad (4.2.12)$$

Στο παρακάτω σχήμα απεικονίζονται οι γραφικές παραστάσεις της σχέσης (4.2.12) για διάφορες τιμές της φράκταλ διάστασης D_f και δύο τιμές της κρίσιμης ακτίνας R_0 .



Σχήμα 4.2.3: Γραφικές παραστάσεις του συντελεστή Ξ_f συναρτήσει της απόστασης R από το σημείο έναυσης, για διάφορες τιμές της φράκταλ διάστασης D , για $R_0=1.0$ m (αριστερά) και $R_0=0.5$ m (δεξιά).

Τύρβη η οποία βρίσκεται μπροστά από το μέτωπο της φλόγας

Η τύρβη η οποία υπάρχει μπροστά από το μέτωπο της φλόγας και αλληλεπιδρά με αυτή λαμβάνεται υπ' όψιν μέσω της σχέσης του Yakhot και του u'_0 . Το u'_0 εκφράζει τη χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης (§2.1.3) η οποία για την περίπτωση του LES εκφράζει μόνο το υποπλεγματικό της μέρος. Ο συνήθης τρόπος υπολογισμού της είναι με βάση την τυρβώδη κινητική ενέργεια μέσω της σχέσης:

$$u'_0 = \sqrt{\frac{2}{3}k} \quad (4.2.13)$$

Η τυρβώδη κινητική ενέργεια k υπολογίζεται μέσω της εξίσωσης μεταφοράς της για τα μοντέλα τύπου k-ε. Στη μέθοδο LES μπορεί να προσδιοριστεί με βάση την υποπλεγματική συνεκτικότητα από τη σχέση:

$$k = \frac{\mu_{sgs}^2}{(\bar{\rho}C_s\Delta)^2} \quad (4.2.14)$$

Στη περίπτωση του RNG LES μοντέλου σαν μ_{sgs} λαμβάνουμε τη διαφορά $\mu_{eff} - \mu$ ενώ στο κλασικό μοντέλο Smagorinsky λαμβάνεται η ποσότητα $\bar{\rho}(C_s\Delta)^2 \sqrt{2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij}}$ οπότε στην περίπτωση αυτή η σχέση υπολογισμού του u'_0 γίνεται:

$$u'_0 = \sqrt{\frac{2}{3}}C_s\Delta\sqrt{2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij}} \quad (4.2.15)$$

Στο Κεφάλαιο 9 παρουσιάζεται μια διαφορετική προσέγγιση στον υπολογισμό του u'_0 (§9.4.1), η οποία και εφαρμόζεται για τη περίπτωση προσομοίωσης του κεφαλαίου αυτού.

Χημεία της αντίδρασης

Η χημεία της αντίδρασης, δηλαδή η εξάρτηση από το καύσιμο και από τον τρόπο με τον οποίο αυτό καίγεται, λαμβάνεται υπ' όψιν πρωτίστως μέσω της στρωτής ταχύτητας καύσης S_L στην οποία βασίζεται ο υπολογισμός της ποσότητας S_L^{sgs} στη σχέση (4.2.6). Για τον υπολογισμό της στρωτής ταχύτητας καύσης λαμβάνεται υπ' όψιν η εξάρτηση από την πίεση μέσα από τη σχέση (2.2.8) όπως αναφέραμε στην §2.2.2. Υπενθυμίζουμε ότι για την περίπτωση του υδρογόνου που μας ενδιαφέρει, αύξηση της πίεσης οδηγεί σε αύξηση της ταχύτητας στρωτής καύσης. Η χημεία της αντίδρασης λαμβάνεται επίσης υπ' όψιν και μέσω του συντελεστή επέκτασης E με βάση τον οποίο όπως είδαμε υπολογίζεται ο συντελεστής Ξ_k .

4.3 Ο κώδικας ADREA-HF

Ο κώδικας υπολογιστικής ρευστομηχανικής ο οποίος χρησιμοποιήθηκε και επεκτάθηκε για τις ανάγκες της διατριβής είναι ο κώδικας ADREA-HF (Bartzis 1991, Venetsanos et al. 2010). Ο κώδικας αυτός αναπτύσσεται από το 1980, αρχικά από τον καθηγητή Ι.Γ. Μπάρτζη και τους συνεργάτες του και στη συνέχεια από τον ερευνητή Α.Γ. Βενετσάνο, στο Εργαστήριο Περιβαλλοντικής Έρευνας (ΕΠΕΡ) του Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. «Δημόκριτος». Ιστορικά στοιχεία και συνοπτική περιγραφή του κώδικα γίνεται από τον Κουτσουράκη (2014, §4.5). Ο κώδικας εξειδικεύεται στην διασπορά αέριων μειγμάτων αλλά και πολυφασικών μειγμάτων (Γιαννίση 2016). Στην παρούσα διατριβή έγινε επέκταση του κώδικα έτσι ώστε να μπορεί να προσομοιώνει και φαινόμενα καύσης. Η επέκταση επικεντρώθηκε στην καύση προαναμεμιγμένου μείγματος με κύρια εφαρμογή τις εκρήξεις αερίων μειγμάτων. Παρόλα αυτά, αναπτύχθηκαν και δοκιμάστηκαν και τεχνικές προσομοίωσης για μη-προαναμεμιγμένα μείγματα με χρήση απλών μοντέλων. Τα μη-προαναμεμιγμένα μείγματα δεν αποτελούν αντικείμενο αυτής της διατριβής οπότε δεν θα επεκταθούμε σε αυτά.

Ο κώδικας διακριτοποιεί τις τριδιάστατες μη μόνιμες εξισώσεις μεταφοράς σε ορθογώνιο καρτεσιανό πλέγμα χρησιμοποιώντας τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων (Patankar 1980, Versteeg & Malalasekera 2007). Οι εξισώσεις ορμής επιλύονται σε μετατοπισμένο (staggered) πλέγμα. Ο κώδικας μπορεί να διαχειριστεί στερεές γεωμετρίες μεγάλης πολυπλοκότητας, ενώ το πλέγμα μπορεί να δημιουργηθεί ανεξάρτητα αυτών. Αυτό επιτυγχάνεται με χρήση της τεχνικής του πορώδους μέσου (porosities) (Moult et al. 1979, Sha 1980, Bartzis 1991). Σύμφωνα με αυτή την τεχνική, τα υπολογιστικά κελιά κατατάσσονται σε πλήρως ενεργά με πορώδες 1, σε ανενεργά που εμπεριέχονται σε στερεά σώματα της γεωμετρίας και έχουν πορώδες 0 και σε μερικώς ενεργά που έχουν πορώδες μεταξύ 0 και 1. Ως πορώδες ορίζεται ο λόγος του ελεύθερου όγκου προς τον συνολικό όγκο του κελιού. Στα μη ενεργά κελιά δεν γίνονται υπολογισμοί και δεν αποθηκεύονται στη μνήμη. Οι εξισώσεις διατήρησης επιλύονται στα πλήρως και στα μερικώς ενεργά κελιά. Στην περίπτωση των μερικώς ενεργών κελιών, η ολοκλήρωση των εξισώσεων γίνεται στον ελεύθερο όγκο τους. Τα στερεά σώματα σε κάθε μερικώς ενεργό κελί, λαμβάνονται προσεγγιστικά υπ' όψιν με βάση γεωμετρικά στοιχεία για κάθε στερεή επιφάνεια που διαπερνά το κελί, όπως είναι ο προσανατολισμός της επιφάνειας, η θέση της, η απόστασή της από το κέντρο του κελιού και η

επιφανειακή διαπερατότητα (λόγος μεταξύ της ελεύθερης επιφάνειας προς τη συνολική επιφάνεια του μετώπου του κελιού).

Η επίλυση του συστήματος των εξισώσεων συνέχειας και ορμής, γίνεται με τη χρήση μιας τροποποιημένης (Kovalets et al. 2008) μεθόδου SIMPLER (Patankar 1980). Ο αλγόριθμος βασίζεται στην επίλυση μιας εξίσωσης για την πίεση, η οποία προκύπτει από τη διακριτοποίηση της εξίσωσης συνέχειας. Για τον σχηματισμό της εξίσωσης αυτής υπολογίζονται αρχικά οι ψευδο-ταχύτητες από τις εξισώσεις ορμής. Αφού σχηματιστεί η εξίσωση της πίεσης, αυτή επιλύεται για τον προσδιορισμό της, ενώ στη συνέχεια γίνεται ο υπολογισμός των ταχυτήτων. Στη συνέχεια επιλύονται οι υπόλοιπες εξισώσεις μεταφοράς, όπως για χαρακτηριστικά της τύρβης (π.χ. k , ϵ), για τα συστατικά και για την ενέργεια. Ο αλγόριθμος είναι γρήγορος, συγκλίνει σε μικρό αριθμό επαναλήψεων και συνήθως δεν απαιτεί την επιβολή υποχαλάρωσης. Περισσότερες λεπτομέρειες για τον αλγόριθμο παρουσιάζονται στο Παράρτημα Α.5.

4.3.1 Οριακές συνθήκες

Οριακές συνθήκες χρειάζεται να επιβληθούν κυρίως στα στερεά όρια και στο σύνορο του χωρίου. Στα στερεά όρια η οριακή συνθήκη που χρησιμοποιείται συνήθως είναι αυτή της μη ολίσθησης σε συνδυασμό με συναρτήσεις τοίχου (wall functions). Οι συναρτήσεις τοίχου αν και είναι ένας προσεγγιστικός τρόπος διαχείρισης των τοιχωμάτων, μας δίνουν την δυνατότητα να χρησιμοποιούμε σχετικά αραιά πλέγματα κοντά στα τοιχώματα. Συναρτήσεις τοίχου χρησιμοποιήθηκαν και στην παρούσα διατριβή και συγκεκριμένα το παρακάτω σχήμα:

$$u^+ = \begin{cases} y^+ & , y^+ \leq 11.626 \\ \frac{1}{\kappa} \ln(Ey^+) & , y^+ > 11.626 \end{cases} \quad (4.2.16)$$

όπου $\kappa = 0.41$, $E = 9.0$, u^+ η αδιάστατη ταχύτητα και y^+ η αδιάστατη απόσταση από τον τοίχο (Versteeg & Malalasekera 2007, §3.4.2).

Στις περισσότερες περιπτώσεις που θα μελετήσουμε, το σύνορο του χωρίου είναι ανοιχτό και τοποθετείται μακριά από την περιοχή έναυση της καύσης. Έτσι λοιπόν σε αυτό πρέπει να εφαρμοστεί μια κατάλληλη οριακή συνθήκη εξόδου. Οι συνήθεις οριακές συνθήκες αντιμετωπίζουν το πρόβλημα ότι μπορεί να επιτρέψουν την αντανάκλαση των κυμάτων πίεσης στο εσωτερικό του χωρίου. Αυτό, στις περιπτώσεις έκρηξης όπου το κύριο ζητούμενο είναι ο προσδιορισμός της υπερπίεσης, μπορεί να επηρεάσει τα αποτελέσματα. Για το σκοπό αυτό, έχουν αναπτυχθεί ειδικές «μη-αντανεκλαστικές» (non-reflecting) οριακές συνθήκες (Givoli 1991). Αυτού του τύπου οι οριακές συνθήκες ενδείκνυνται για προσομοιώσεις LES όπου μέρος της τύρβης επιλύεται και η μείωση των λαθών που εισάγονται από τις οριακές συνθήκες είναι πιο σημαντική από ότι στις προσομοιώσεις τύπου RANS. Μια τέτοιου τύπου οριακή συνθήκη χρησιμοποιήθηκε και στις παρούσες προσομοιώσεις. Η οριακή αυτή συνθήκη εφαρμόστηκε για την κάθετη στο όριο συνιστώσα της ταχύτητας, αλλά γενικά μπορεί να εφαρμοστεί για οποιαδήποτε μέγεθος. Αρχικά υπολογίζεται η κάθετη συνιστώσα της ταχύτητας με βάση τη διατήρηση μάζας στο κελί. Στη συνέχεια, υπολογίζεται μια χαρακτηριστική ταχύτητα V , από την μη-μόνιμη μονοδιάστατη εξίσωση μεταφοράς:

$$\frac{\partial u_n}{\partial t} + V \frac{\partial u_n}{\partial n} = 0 \quad (4.2.17)$$

όπου u_n η συνιστώσα της ταχύτητας στην κάθετη στο όριο κατεύθυνση n . Αν η κατεύθυνση της ταχύτητας V που προκύπτει δείχνει εκτός του χωρίου, τότε σαν οριακή συνθήκη λαμβάνεται η τιμή που προέκυψε με βάση τη διατήρηση μάζας στο κελί, διαφορετικά λαμβάνεται η ταχύτητα της προηγούμενης χρονικής στιγμής. Μια παρόμοια οριακή συνθήκη περιγράφεται στο βιβλίο των Ferziger & Peric (2002, §9.2).

Για τις μη-κάθετες στο σύνορο συνιστώσες της ταχύτητας, χρησιμοποιήθηκε η συνήθη οριακή συνθήκη της μηδενικής κλίσης. Η ίδια οριακή συνθήκη χρησιμοποιήθηκε και για τα συστατικά (π.χ. για τη εξίσωση διατήρησης του κλάσματος μάζας του υδρογόνου) και την ενθαλία.

4.4 Σχήματα διακριτοποίησης στον χώρο

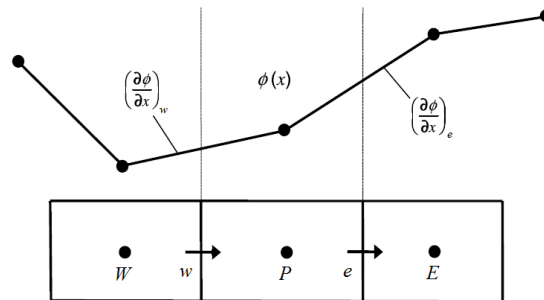
Η αριθμητική επίλυση των εξισώσεων μεταφοράς γίνεται με τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων. Στη μέθοδο αυτή, οι εξισώσεις ολοκληρώνονται πάνω σε όγκους (ή αλλιώς κελιά), που στην περίπτωση των ορθογώνιων πλεγμάτων είναι ορθογώνια παραλληλόγραμμα, οι οποίοι περιβάλλουν τους κόμβους του αριθμητικού πλέγματος. Γενικά υπάρχουν δύο μεθοδολογίες, στην πρώτη οι κόμβοι του πλέγματος βρίσκονται στο κέντρο των κελιών (cell-centered method) με αποτέλεσμα η πλευρά κάποιου κελιού να μην ισαπέχει αναγκαστικά από τους γειτονικούς κόμβους, και στη δεύτερη όπου οι πλευρές των κελιών ισαπέχουν από τους γειτονικούς κόμβους (vertex-centered method) με αποτέλεσμα οι κόμβοι να μην βρίσκονται πάντα στο κέντρο των κελιών. Στον κώδικα ADREA-HF ακολουθείτε η πρώτη μέθοδος.

Στο παρακάτω Σχήμα 4.4.1 απεικονίζεται τα υπολογιστικά κελιά γύρω από τον κόμβο P και τους γειτονικούς του W και E . Γενικά, οι τιμές των μεταβλητών ενός προβλήματος επιλύονται και αποθηκεύονται στους κόμβους του πλέγματος (W , P , E στο παραπάνω σχήμα). Οι τιμές αυτές αντιπροσωπεύουν τη μέση τιμή της μεταβλητής στο κελί. Η μέθοδος όμως των πεπερασμένων όγκων απαιτεί για την διακριτοποίηση των εξισώσεων, τις τιμές των μεταβλητών στα άκρα των κελιών. Για παράδειγμα στο παραπάνω σχήμα, χρειάζεται να είναι γνωστή η τιμή της μεταβλητής φ_e στην δεξιά πλευρά του κελιού. Το πρόβλημα λοιπόν που καλούμαστε να λύσουμε, είναι ο υπολογισμός της ποσότητας φ στα όρια του κελιού έχοντας γνωστή τη μέση τιμή της ποσότητας φ στο κελί η οποία είναι αποθηκευμένη στους κόμβους του πλέγματος. Το πρόβλημα αυτό είναι σημαντικό για την διακριτοποίηση των όρων συναγωγής των εξισώσεων οι οποίοι έχουν την γενική μορφή $\vec{u} \cdot \nabla \varphi$, οπότε θα εστιάσουμε σε αυτούς στις επόμενες παραγράφους. Οι όροι διάχυσης όλων των εξισώσεων διακριτοποιούνται με τη συνήθη τακτική των κεντρικών διαφορών.

Ο πιο άμεσος τρόπος να προέλθει η τιμή του φ_e είναι σαν μέσος όρος των κόμβων P , E δηλαδή (για την περίπτωση κόμβων που ισαπέχουν):

$$\varphi_e = \frac{\varphi_P + \varphi_E}{2} \quad (4.2.18)$$

το οποίο ονομάζεται σχήμα κεντρικών διαφορών (**CDS**: central difference scheme). Το σχήμα αυτό, δεν λαμβάνει υπ' όψιν του την κατεύθυνση της ροής και μπορεί να οδηγήσει σε αστάθειες και σε μη φυσικές λύσεις όταν εφαρμόζεται σε ροές όπου οι όροι μεταφοράς υπερέρχουν των όρων διάχυσης.



Σχήμα 4.4.1: Σχηματική απεικόνιση των κελιών του πλέγματος (σε μια κατεύθυνση) και των τιμών και παραγώγων της μεταβλητής προς επίλυση (Waterson & Deconinck 2007).

Το πιο διαδεδομένο σχήμα είναι το ανάντι πρώτης τάξης (**FOU**: first order upwind). Σε αυτό η τιμή του φ_e δίνεται από τη σχέση:

$$\varphi_e = \begin{cases} \varphi_P, & u > 0 \\ \varphi_E, & u < 0 \end{cases} \quad (4.2.19)$$

Βλέπουμε ότι η τιμή οποία λαμβάνεται είναι αυτή του κόμβου από τον οποίο έρχεται η ροή (στο σχήμα η ροή κατευθύνεται από τα αριστερά στα δεξιά συνεπώς $u > 0$). Το σχήμα αυτό είναι πολύ σταθερό και έχει εφαρμοστεί και συνεχίζεται να εφαρμόζεται με επιτυχία σε πολλές περιπτώσεις. Το μειονέκτημα του είναι ότι είναι πρώτης τάξης ακρίβειας με αποτέλεσμα να παρουσιάζει έντονα προβλήματα αριθμητικής διάχυσης όταν η ροή είναι μη ευθυγραμμισμένη με τις πλεγματικές γραμμές. Η πύκνωση του πλέγματος μειώνει το πρόβλημα, αλλά ο βαθμός της απαιτούμενης πύκνωσης είναι συνήθως απαγορευτικός για τριδιάστατες εφαρμογές μέσης ή μεγάλης κλίμακας. Για αυτούς τους λόγους προκύπτει η ανάγκη χρησιμοποίησης σχημάτων ανωτέρας τάξης τα οποία μπορούν να επιλύσουν το πρόβλημα.

Τα πιο γνωστά σχήματα ανωτέρας τάξης εκτός από το σχήμα κεντρικών διαφορών (**CDS**) είναι το γραμμικό ανάντι σχήμα δεύτερης τάξης (**LUS**: Linear Upwind Scheme ή second order upwind) στο οποίο ο προσδιορισμός της ποσότητας φ_e γίνεται με γραμμική προέκταση των τιμών από τους δύο ανάντι κόμβους P και W , το ανάντι σχήμα δεύτερης τάξης (**QUICK**: Quadratic Upwind Scheme) στο οποίο το φ_e υπολογίζεται ύστερα από τετραγωνική παρεμβολή των τιμών στους κόμβους W , P και E (δηλαδή λαμβάνονται υπόψιν δύο ανάντι κόμβοι και ένας κατάντι), το σχήμα του **Fromm** το οποίο είναι ειδικά σχεδιασμένο για να μειώνει την αριθμητική διάχυση (Fromm 1968) και το κυβικό ανάντι σχήμα (**CUS**: Cubic Upwind Scheme) (Agarwal 1981) το οποίο είναι τρίτης τάξης ακρίβειας.

Όλα τα παραπάνω σχήματα (εκτός του FOU) ανήκουν στην κατηγορία των k-schemes τα οποία υπολογίζουν την ποσότητα φ_e για την περίπτωση όπου η ροή έρχεται από τα αρνητικά (δηλαδή από τα αριστερά στο σχήμα) από τη γενική σχέση:

$$\varphi_e = \varphi_p + \frac{x_e - x_w}{2} \left\{ \frac{1+k}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_e + \frac{1-k}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_w \right\} \quad (4.2.20)$$

Η παράμετρος k παίρνει τιμές από -1 έως 1 . Για $k=1$ η σχέση δίνει το σχήμα CDS, για $k=1/2$ το QUICK, για $k=1/3$ το CUS, για $k=0$ το Fromm και για $k=-1$ το LUS. Πρέπει να αναφέρουμε ότι στην περίπτωση των μη ισαπέχοντων διαστημάτων οι τιμές του k για τα σχήματα QUICK, CUS και Fromm δεν είναι σταθερές αλλά δίνονται συναρτήσει των χαρακτηριστικών διαστάσεων του κελιού. Οι τιμές των παραγώγων στις πλευρές του κελιού (e , w) υπολογίζονται με κεντρικές διαφορές στους διπλανούς της πλευράς κόμβους.

Ένα από τα επιθυμητά χαρακτηριστικά των σχημάτων για την διακριτοποίηση του όρου μεταφοράς, είναι το σχήμα να οδηγεί σε λύση συνολικά μειούμενης διακύμανσης (Total Variation Diminishing, **TVD**). Αυτό σημαίνει ότι στην περίπτωση όπου δεν υπάρχουν πηγές στο πεδίο μας, η συνολική διακύμανση (variation) της λύσης στο νέο βήμα (ή στη νέα χρονική στιγμή), δεν πρέπει να είναι μεγαλύτερη από τη διακύμανση της λύσης στο προηγούμενο βήμα. Πρόκειται για μία φυσική απαίτηση η οποία ισοδυναμεί με την απαίτηση να μην δημιουργούνται νέα ακρότατα στη λύση, καθώς και στην απαίτηση να μην αυξάνονται τα μέγιστα και να μην μειώνονται τα ελάχιστα της λύσης του προηγούμενου βήματος.

Τα παραπάνω σχήματα είναι όλα γραμμικά, με την έννοια ότι η τιμή στις πλευρές των κελιών δίνονται σαν γραμμικές συναρτήσεις των τιμών στους κόμβους. Όπως έχει προβλεφθεί από το θεώρημα του Godunov, κανένα γραμμικό σχήμα ανώτερης τάξης δεν μπορεί να είναι φραγμένο (bounded) δηλαδή να μην παράγει νέα μέγιστα ή ελάχιστα. Συνεπώς, όλα τα παραπάνω σχήματα είναι μη φραγμένα, δηλαδή δεν ικανοποιούν την TVD απαίτηση, με αποτέλεσμα κάτω από ορισμένες συνθήκες να οδηγούν σε λύσεις οι οποίες παρουσιάζουν μη φυσικές ταλαντώσεις.

Η παραπάνω σχέση των k -schemes μπορεί να αναλυθεί σε δύο μέρη: Στο ανάντι μέρος (όρος φ_p) και στον όρο $\frac{x_e - x_w}{2} \left\{ \frac{1+k}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_e + \frac{1-k}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_w \right\}$ ο οποίος προσδίδει την αυξημένη ακρίβεια (σε σχέση με το απλό ανάντι σχήμα). Παρατηρούμε ότι ο δεύτερος αυτός όρος δεν είναι τίποτα άλλο από έναν σταθμισμένο μέσο όρο των κλίσεων $\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_e$ και $\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_w$ στις δύο πλευρές του κελιού. Μια φυσιολογική γενίκευση των k -schemes οπότε, αποτελεί η σχέση (Waterson & Deconinck 2007):

$$\varphi_e = \varphi_p + \frac{x_e - x_w}{2} f \left(\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_e, \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_w \right) \quad (4.2.21)$$

που f μη γραμμική συνάρτηση μέσου όρου δύο μεταβλητών. Η συνάρτηση αυτή πρέπει να είναι ομογενής, οπότε η προηγούμενη σχέση γράφεται καλύτερα σαν:

$$\varphi_e = \varphi_p + \frac{x_e - x_w}{2} \Psi(r) \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_w \quad (4.2.22)$$

όπου $\Psi(r) = f(r,1)$ η συνάρτηση περιορισμού (**limiter function**) και

$$r = \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_e / \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_w \quad (4.2.23)$$

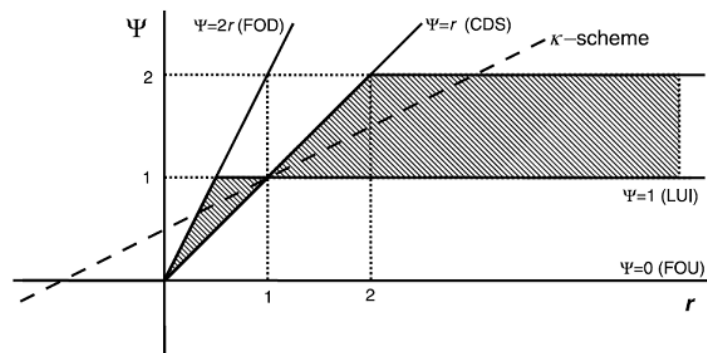
ο λόγος των κλίσεων. Παρατηρούμε ότι όλα τα k-schemes μπορούν να προκύψουν από την παραπάνω γενίκευση για

$$\Psi(r) = \frac{1+k}{2}r + \frac{1-k}{2} \quad (4.2.24)$$

Στο παρακάτω διάγραμμα, απεικονίζονται οι συνάρτησης $\Psi(r)$ για τα βασικά αριθμητικά σχήματα. Το ερώτημα που τίθεται είναι το ποια πρέπει να είναι η συνάρτηση περιορισμού έτσι ώστε το σχήμα που θα προκύψει να οδηγεί σε φυσικές λύσεις. Όπως έχουμε αναφέρει, μια από τις ιδιότητες που τα αριθμητικά σχήματα επιθυμούμε να έχουν είναι αυτή της συνολικής μειούμενης διακύμανσης έτσι ώστε αυτά να μην εισάγουν νέες μέγιστες και ελάχιστες τιμές. Αποδεικνύεται (Sweby 1984), ότι για να συμβεί αυτό, η συνάρτηση περιορισμού πρέπει να ικανοποιεί τον ακόλουθο περιορισμό (για $r \geq 0$):

$$0 \leq \Psi(r) \leq \min(2r, 2) \quad (4.2.25)$$

Στη περίπτωση όπου έχουμε ακρότατο ($r < 0$), τότε $\Psi(r) = 0$. Οι δεύτερης τάξης ακρίβειας αποδεκτές περιοχές των συναρτήσεων περιορισμού, απεικονίζονται στην σκιαγραφημένη περιοχή του παρακάτω διαγράμματος.



Σχήμα 4.4.2: Συνάρτηση περιορισμού σε συνάρτηση με τον λόγο των κλίσεων για το σχήμα ανάντη διαφορών (FOU), κατάντι διαφορών (FOD), κεντρικών διαφορών (CDS), ανάντι σχήμα δεύτερης τάξης (LUI) και σχήμα τύπου k (k-schemes). Η διαγραμμισμένη περιοχή είναι η περιοχή στην οποία πρέπει να βρίσκεται ένα δεύτερης τάξης σχήμα για να έχει την ιδιότητα της συνολικής μειούμενης διακύμανσης (TVD) (Waterson & Deconinck 2007).

Η βασική ομάδα συναρτήσεων περιορισμού αναπτύχθηκε με την λογική να χρησιμοποιούνται τα βασικά αριθμητικά σχήματα υψηλής ακρίβειας (CDS, QUICK κτλ) στις επιτρεπτές περιοχές του διαγράμματος Ψ - r , ενώ στις υπόλοιπες να περιορίζονται ώστε το σχήμα να μην χάνει την επιθυμητή ιδιότητα TVD. Ένας γενικός τύπος τέτοιων συναρτήσεων είναι ο εξής:

$$\Psi(r) = \max \left(0, \min \left(cr, \frac{1}{2}(1+k)r + \frac{1}{2}(1-k), M \right) \right) \quad (4.2.26)$$

Στην περίπτωση ισαπέχοντων διαστημάτων είναι $c = 2$. Για $k = 0$ και $M = 2$ παίρνουμε το σχήμα MUSCL (φραγμένο Fromm), για $k = \frac{1}{3}$ και $M = 2$ το σχήμα του Koren (bounded CUS), για $k = \frac{1}{2}$ και $M = 4$ το σχήμα SMART (bounded QUICK) για $k = -1$ το σχήμα Chakravarthy-Osher (bounded LUS) και για $k = 1$ το φραγμένο σχήμα κεντρικών διαφορών (bounded CD). Ακολουθεί πιο εκτενής παρουσίαση κάποιων εκ των σχημάτων καθώς και το Ψ -r διάγραμμα αυτών (Σχήμα 4.4.3).

Φραγμένο σχήμα κεντρικών διαφορών (bounded central differences)

Σε αυτό το σχήμα, η συνάρτηση περιορισμού δίνεται από τη σχέση:

$$\Psi(r) = \max(0, \min(r, 2)) \quad (4.2.27)$$

Παρατηρούμε ότι στο σχήμα αυτό οι κεντρικές διαφορές χρησιμοποιούνται μόνο για την περιοχή στην οποία ικανοποιείται ο προηγούμενος περιορισμός, δηλαδή για $0 \leq r \leq 2$. Για $r < 0$ (παρουσία τοπικού ελαχίστου ή μεγίστου) το σχήμα γίνεται ανάντι πρώτης τάξης ($\Psi(r) = 0$), ενώ για $r > 2$ (μεγάλες μεταβολές της κλίσης) το σχήμα περιορίζεται θέτοντας $\Psi(r) = 2$.

Φραγμένο ανάντι σχήμα δεύτερης τάξης (second order bounded linear upwind)

Σε αυτό το σχήμα, η συνάρτηση περιορισμού δίνεται από τη σχέση:

$$\Psi(r) = \max(0, \min(cr, 0 \cdot r + 1, 4)) = \max(0, \min(cr, 1)) \quad (4.2.28)$$

Παρατηρούμε ότι στο σχήμα αυτό όπως και προηγουμένως, το ανάντι σχήμα δεύτερης τάξης χρησιμοποιείται μόνο για την TVD περιοχή του διαγράμματος Ψ -r, δηλαδή για $r \geq 0.5$. Για $r < 0$ το σχήμα γίνεται ανάντι πρώτης τάξης ενώ για $0 \leq r \leq 0.5$ η συνάρτηση περιορισμού γίνεται ίση με $\Psi(r) = 2r$.

Αρμονικό σχήμα (Harmonic - Van Leer)

Σε αυτό το σχήμα, η συνάρτηση περιορισμού δίνεται από τη σχέση:

$$\Psi(r) = \frac{r + |r|}{r + 1} \quad (4.2.29)$$

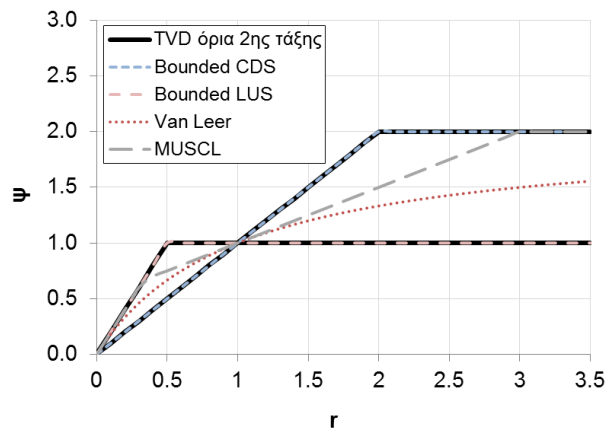
Το σχήμα που προκύπτει είναι ουσιαστικά ένα ασυμπτωτικό Fromm. Το όνομα του το πήρε από το ότι λαμβάνει τον αρμονικό μέσο μεταξύ των κλίσεων $\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)_e$ και $\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)_w$. Και αυτό το σχήμα μεταπίπτει σε ανάντι πρώτης τάξης στην περίπτωση όπου $r < 0$.

Σχήμα MUSCL

Σε αυτό το σχήμα, η συνάρτηση περιορισμού δίνεται από τη σχέση:

$$\Psi(r) = \max\left(0, \min\left(2r, \frac{r+1}{2}, 2\right)\right) \quad (4.2.30)$$

Το σχήμα αυτό ακολουθεί το σχήμα Fromm όσο το δυνατόν περισσότερο ώστε να μένει μέσα στην TVD περιοχή. Συνδυάζει αυξημένη ακρίβεια σε ομαλές ροές, καλή αναπαράσταση των απότομων κλίσεων και καλή σύγκλιση.



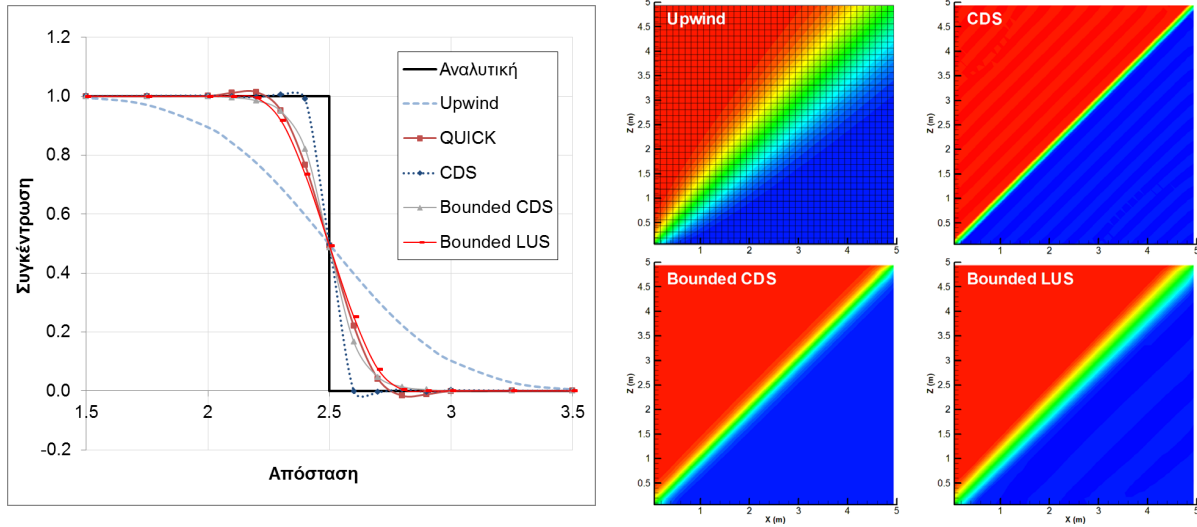
Σχήμα 4.4.3: Διάγραμμα Ψ - r για το φραγμένο σχήμα κεντρικών διαφορών (bounded CDS), το φραγμένο ανάντι σχήμα δεύτερης τάξης (bounded LUS), το σχήμα Van Leer και το σχήμα MUSCL.

Τέλος, πρέπει να αναφέρουμε ότι όλα τα σχήματα έχουν υλοποιηθεί με την τεχνική του καθυστερημένης διόρθωσης (deferred correction) (Khosla & Rubin 1974). Έτσι, ο δεύτερος όρος του δεξιά μέλους της εξίσωσης (4.2.22) λαμβάνεται στην διακριτοποίηση σαν όρος πηγής, με αποτέλεσμα να παραμένει μόνο το ανάντι κομμάτι του σχήματος. Οι μεταβλητές του όρου πηγής λαμβάνουν τις τιμές της προηγούμενης επανάληψης. Έτσι, όταν η επαναληπτική διαδικασία συγκλίνει, η λύση που προκύπτει είναι η ίδια είτε είχαμε ακολουθήσει την παραπάνω τεχνική είτε όχι.

Προκειμένου να εξετάσουμε την ακρίβεια αυτών των σχημάτων, την υπεροχή τους σε σύγκριση με το απλό ανάντι σχήμα, αλλά και την ορθότητα της υλοποίησής τους στον κώδικα ADREA-HF, επιλύθηκε το πρόβλημα της ροής διαγώνιας διεύθυνσης σε σχέση με το πλέγμα. Το χωρίο που θεωρήθηκε είναι τετραγωνικό πλευράς 5 μέτρων (διδιάστατο). Οι συνιστώσες της ταχύτητας είναι ίσες με 2 m/s. Το πλήθος των κελιών από τα οποία αποτελούνταν το πλέγμα ήταν 1600 (40 σε κάθε κατεύθυνση). Στο χωρίο αυτό επιλύθηκε το πρόβλημα μεταφοράς μιας ουσίας απουσίας διάχυσης. Οι οριακές συνθήκες για την ουσία είναι σταθερής τιμής (Dirichlet) ίσης με 1 για την επάνω και την αριστερά πλευρά του χωρίου και ίση με 0 για την κάτω και δεξιά πλευρά. Η θεωρητική λύση για το κλάσμα μάζας της ουσίας στο άνω μισό από την κύρια διαγώνιο είναι η τιμή 1, ενώ στο κάτω μισό η τιμή μηδέν. Το πρόβλημα αυτό είναι γνωστό για την αριθμητική διάχυση που παρουσιάζει. Στο Σχήμα 4.4.4 απεικονίζονται οι συγκεντρώσεις κατά μήκος της δευτερεύουσας διαγώνιου για πέντε διαφορετικά αριθμητικά σχήματα μαζί με την αναλυτική λύση του προβλήματος. Στο ίδιο σχήμα απεικονίζονται και οι ισοϋψείς των συγκεντρώσεων για κάποια από αυτά.

Παρατηρούμε ότι το ανάντι σχήμα έχει μεγάλη απόκλιση από την αναλυτική λύση παρουσιάζοντας μεγάλη αριθμητική διάχυση. Από την άλλη το σχήμα κεντρικών διαφορών (CDS) παρουσιάζει την μικρότερη διάχυση. Παρόλα αυτά το σχήμα αυτό προβλέπει τιμές εκτός των ορίων του 0 και του 1, λόγω κάποιων μικρών ταλαντώσεων που εμφανίζονται στη λύση. Το ίδιο παρατηρείται και για το σχήμα QUICK. Από την άλλη μεριά, τα φραγμένα σχήματα (bounded CDS και bounded LUS) παρουσιάζουν πολύ καλή συμπεριφορά αποφεύγοντας τις ταλαντώσεις αλλά και τις μη φυσικές τιμές στη λύση. Τα σχήματα αυτά, αν και υπολείπονται ελαφρώς σε ακρίβεια από το μη-φραγμένο σχήμα κεντρικών διαφορών, είναι σαφώς ανώτερα του απλού ανάντη σχήματος. Παρόμοια συμπεριφορά αναμένεται και για τα υπόλοιπα φραγμένα σχήματα δεύτερης τάξης που

παρουσιάσαμε. Δύο χαρακτηριστικές εργασίες στις οποίες γίνεται σύγκριση πολλών αριθμητικών σχημάτων, είναι αυτές των Patel & Markatos (1986) και Patel et al. (1987).



Σχήμα 4.4.4: Σύγκριση αριθμητικών σχημάτων διακριτοποίησης για το πρόβλημα της διαγώνιας ροής σε πλάκα. Αριστερά: Συγκέντρωση κατά μήκος της δευτερεύουσας διαγωνίου (γραμμή $y=-x+5$). Δεξιά: Ισοϋψείς (τιμές από 0 έως 1) του κλάσματος μάζας. Οι ισοϋψείς του σχήματος QUICK οι οποίες δεν παρουσιάζονται είναι παρόμοιες με αυτές του Bounded LUS. Στο πρώτο σχήμα απεικονίζεται και το πλέγμα.

Στη παρούσα διατριβή, για τις εξισώσεις ορμής χρησιμοποιήθηκε κυρίως το σχήμα των φραγμένων κεντρικών διαφορών, λόγω της μεθόδου LES (δες και §3.1.4.2). Σε κάποιες περιπτώσεις δοκιμάστηκαν και άλλα σχήματα όπως το MUSCL χωρίς να παρατηρηθούν διαφορές στα αποτελέσματα. Δοκιμάστηκε επίσης και το μη-φραγμένο σχήμα κεντρικών διαφορών, συγκρίνοντας το με αυτό των φραγμένων στη περίπτωση του Κεφαλαίου 6 (§6.3.4). Το σχήμα των μη-φραγμένων κεντρικών διαφορών δοκιμάστηκε και σε κάποιες εκ των άλλων προσομοιώσεων που έγιναν, χωρίς να παρατηρηθούν ιδιαίτερες διαφοροποιήσεις στα αποτελέσματα. Τέλος, για τους όρους μεταφοράς των εξισώσεων διατήρησης των συστατικών και της ενέργειας χρησιμοποιήθηκε το σχήμα των φραγμένων ανάντι διαφορών δεύτερης τάξης.

4.5 Σχήμα διακριτοποίησης στον χρόνο – διαχείριση όρου πηγής

Η γενική εξίσωση διατήρησης μιας ποσότητας φ μπορεί να γραφτεί στη μορφή:

$$\frac{\partial \rho \varphi}{\partial t} = F(\varphi, t) \quad (4.2.31)$$

Για τη διακριτοποίηση του χρονικού όρου χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος **Crank-Nicolson**. Στη μέθοδο αυτή, αν n είναι η τρέχουσα χρονική στιγμή (για την οποία είναι γνωστά όλα τα μεγέθη) και $n+1$ η επόμενη, η διακριτοποίηση γίνεται τη χρονική στιγμή $n+1/2$ χρησιμοποιώντας σχήμα κεντρικών διαφορών για τον χρονικό όρο. Ως εκ τούτου, η διακριτοποίηση είναι δεύτερης τάξης ακρίβειας. Το δεξί μέρος, υπολογίζεται σαν μέσος όρος της ποσότητας F τη χρονική στιγμή n και $n+1$, δηλαδή:

$$\frac{(\rho \varphi)^{n+1} - (\rho \varphi)^n}{\Delta t} = 0.5F(\varphi^{n+1}, t^{n+1}) + 0.5F(\varphi^n, t^n) \quad (4.2.32)$$

Παρατηρούμε ότι το δεξί μέλος αποτελείται από όρους οι οποίοι περιέχουν και ποσότητες στη νέα χρονική στιγμή οι οποίοι είναι άγνωστοι. Ως εκ τούτου, η μέθοδος Crank-Nicolson οδηγεί στην ανάγκη επίλυσης ενός συστήματος εξισώσεων. Το σχήμα θεωρείται ότι ανήκει σε μια ενδιάμεση κατηγορία από αυτή των ρητών (explicit) και μη-ρητών (implicit) μεθόδων, καθώς παρόλο που οδηγεί στη δημιουργία συστήματος, απαιτεί περιορισμό στο χρονικό βήμα για να είναι ευσταθές. Ο περιορισμός αυτός όμως είναι πιο ασθενής σε σχέση με αυτόν των ρητών σχημάτων (Ferziger & Peric 2002).

Στις εξισώσεις διατήρησης των συστατικών που συμμετέχουν στη χημική αντίδραση (3.1.4), είναι πολύ σημαντική η διαχείριση του **όρου πηγής** $\dot{\omega}_k$. Ο όρος αυτός υπολογίζεται από το μοντέλο καύσης και ως εκ τούτου μπορεί σε κάποια χρονική στιγμή να πάρει πολύ μεγάλες τιμές. Αυτό που πρέπει να προσεχθεί σε αυτή την περίπτωση, είναι οι τιμές που θα προκύψουν από τις εξισώσεις διατήρησης να μην ξεπεράσουν τα φυσικά όρια μέσα στα οποία πρέπει να κινηθούν. Το πρώτο φυσικό όριο είναι ότι τα κλάσματα μάζας δεν πρέπει να γίνουν μικρότερα του μηδενός. Αυτό είναι ιδιαίτερα σημαντικό για τα κλάσματα μάζας του καυσίμου και του οξυγόνου. Τα στοιχεία αυτά καταναλώνονται οπότε ο όρος πηγής είναι αρνητικός με αποτέλεσμα να υπάρχει ο κίνδυνος η επίλυση της εξίσωσης διατήρησης να οδηγήσει σε αρνητική λύση. Η συνήθης πρακτική η οποία ακολουθείται είναι αυτή της γραμμικοποίησης του όρου πηγής. Ακολουθώντας τη μέθοδο αυτή, ο όρος πηγής S γράφεται ως εξής:

$$S^{new} = \frac{S}{\max(Y_k, \varepsilon)} Y_k \quad (4.2.33)$$

όπου Y_k το κλάσμα μάζας του συστατικού k και ε ένας πολύ μικρός αριθμός (π.χ. 10^{-6}). Με αυτόν τον τρόπο ουσιαστικά εισάγουμε στο σύστημα μία επιπλέον λύση, τη μηδενική, στην οποία και συγκλίνει η επαναληπτική επίλυση του συστήματος των εξισώσεων. Στην πράξη, επειδή η μεταβλητή Y_k είναι άγνωστος και εμφανίζεται και στον παρανομαστή της σχέσης, η υλοποίηση της μεθόδου γίνεται ως εξής:

$$S^{new} = \frac{S}{\max(Y_k^i, \varepsilon)} Y_k^{i+1} \quad (4.2.34)$$

όπου Y_k^{i+1} η (άγνωστη) τιμή του κλάσματος μάζας στη νέα επανάληψη (της τρέχουσας χρονικής στιγμής) και Y_k^i η τιμή της προηγούμενης επανάληψης. Έτσι ουσιαστικά η ποσότητα $S/\max(Y_k^n, \varepsilon)$ προστίθεται στον πίνακα των συντελεστών του συστήματος και ο όρος πηγής εξαφανίζεται. Η σύγκλιση του αλγορίθμου (για την τρέχουσα χρονική στιγμή) εξασφαλίζει ότι $Y_k^{i+1} \approx Y_k^i$ οπότε και την ισοδυναμία των σχέσεων (4.2.33) και (4.2.34).

Παρόμοια τακτική μπορεί να εφαρμοστεί και στην περίπτωση των προϊόντων της καύσης όπου ο όρος πηγής είναι θετικός, έτσι ώστε το κλάσμα μάζας να μην ξεπερνάει τη θεωρητική μέγιστη τιμή. Η θεωρητική μέγιστη αυτή τιμή όμως δεν είναι εύκολο να προσδιοριστεί στις περιπτώσεις όπου έχουμε μη ομογενές μείγμα καυσίμου-αέρα ή σε περιπτώσεις όπου κατά τη διάρκεια της καύσης το αρχικό προαναμεμιγμένο μείγμα αναμειγνύεται με φρέσκο αέρα (όπως είναι οι περιπτώσεις που θα εξετάσουμε). Ως εκ τούτου, απαιτείται η γνώση του πραγματικού ρυθμού καύσης έτσι ώστε τα προϊόντα να μην ξεπεράσουν τα φυσικά όρια. Τα φυσικά αυτά όρια κινδυνεύουν να παραβιαστούν

στην περίπτωση όπου ο ρυθμός καύσης είναι πολύ μεγάλος σε σύγκριση με το χρονικό βήμα και σε σύγκριση με το καύσιμο που έχει απομείνει. Η λύση της προσαρμογής του χρονικού βήματος δεν ενδείκνυται, καθώς μπορεί να οδηγήσει σε υπερβολικά μικρό βήμα ενώ υπάρχουν και δυσκολίες στην εύρεση του σωστού βήματος. Μια άλλη λύση είναι ο προσδιορισμός του σωστού ρυθμού καύσης από την εξίσωση (4.2.34) η οποία όπως είπαμε μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να περιορίσει τον όρο πηγής (οπότε τον ρυθμό καύσης) για τα αντιδρώντα. Αυτή η λύση, αν και φαίνεται σαν η πιο προφανής, δοκιμάστηκε και δεν οδήγησε σε πλήρη αντιμετώπιση του προβλήματος καθώς τα κλάσματα μάζας των προϊόντων ξεπερνούσαν και πάλι τις θεωρητικές μέγιστες τιμές, πιθανόν λόγω της πεπερασμένης ακρίβειας των επαναληπτικών μεθόδων.

Εδώ πρέπει να αναφέρουμε ότι ο σωστός υπολογισμός του κλάσματος μάζας των προϊόντων είναι πολύ σημαντικός, καθώς από αυτόν εξαρτάται η ενέργεια που θα απελευθερωθεί οπότε και οι αναπτυσσόμενες θερμοκρασίες, καθώς αυτά υπολογίζονται μέσω των ενθαλπών σχηματισμού και όχι προσθέτοντας κάποιον όρο πηγής λόγω καύσης στην εξίσωση της ενέργειας (δες και §3.1.1). Συνεπώς, μεγαλύτερη παραγωγή προϊόντων από αυτή που επιβάλλει η στοιχειομετρία της αντίδρασης, οδηγεί σε αύξηση της θερμοκρασίας.

Όπως είναι φανερό, το πρόβλημα αρχικά δημιουργείται (εκτός λόγου του πεπερασμένου χρονικού βήματος που αναφέραμε) λόγω του μη-ρητού (implicit) τρόπου με τον οποίο επιλύονται οι εξισώσεις. Η επιλογή μιας ρητής (explicit) μεθόδου θα μπορούσε να είναι μια λύση καθώς ο όρος πηγής θα μπορούσε να διορθωθεί στην περίπτωση όπου οδηγεί σε αρνητικές τιμές συγκεντρώσεων των αντιδρώντων ώστε να τις μηδενίζει. Ο διορθωμένος αυτός όρος πηγής θα μπορούσε στη συνέχεια να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό του σωστού ρυθμού καύσης ώστε να εφαρμοστεί με ασφάλεια και στις εξισώσεις διατήρησης των προϊόντων. Η λύση αυτή δοκιμάστηκε αλλά οδήγησε σε σημαντική αύξηση των επαναλήψεων για τη σύγκλιση των μεγεθών στην κάθε χρονική στιγμή.

Η λύση η οποία τελικά υλοποιήθηκε και εφαρμόστηκε με επιτυχία, ήταν η τεχνική του **κλασματικού βήματος** (fractional step ή operator splitting) (Leveque 2004 §17, Ferziger & Peric 2002 §7.4.1). Η τεχνική αυτή παρουσιάζει πολλές παραλλαγές. Εδώ θα περιγράψουμε τη μέθοδο που εφαρμόσαμε στην παρούσα διατριβή. Αρχικά ξεχωρίζουμε από το δεξί μέλος της εξίσωσης (4.2.31) τον όρο πηγής λόγω καύσης, δηλαδή:

$$\frac{\partial \rho \varphi}{\partial t} = F'(\varphi, t) + \dot{\omega} \quad (4.2.35)$$

Στη συνέχεια η εξίσωση επιλύεται σε δύο χρόνους. Αρχικά επιλύουμε την εξίσωση διατηρώντας στο δεξί μέλος μόνο τον όρο καύσης, ενώ στη συνέχεια επιλύουμε την εξίσωση χωρίς αυτόν. Και τις δύο εξισώσεις τις διακριτοποιούμε με τη μέθοδο Crank-Nicolson, δηλαδή έχουμε:

$$\frac{\rho^n \varphi^{n'} - \rho^n \varphi^n}{\Delta t} = 0.5 \dot{\omega}^{n+1} + 0.5 \dot{\omega}^n \quad (4.2.36)$$

$$\frac{\rho^n \varphi^{n+1} - \rho^n \varphi^{n'}}{\Delta t} = 0.5 F'(\varphi^{n+1}, t^{n+1}) + 0.5 F'(\varphi^n, t^n) \quad (4.2.37)$$

Παρατηρούμε ότι το άθροισμα των εξισώσεων μας δίνει την διακριτοποιημένη εξίσωση που θα είχαμε αν δεν εφαρμόζαμε τη μέθοδο του κλασματικού βήματος. Στο αριστερό μέρος των

εξισώσεων εμφανίζεται μόνο η πυκνότητα ρ^n η οποία αναφέρεται στην παλιά χρονική στιγμή. Αυτό συμβαίνει γιατί οι εξισώσεις που επιλύονται είναι στη μη-συντηρητική (non-conservative) τους μορφή¹. Εκτελώντας την παραπάνω διάσπαση, αυτό που πετυχαίνουμε είναι η ανεξαρτητοποίηση του μηχανισμού της καύσης από τους υπόλοιπους μηχανισμούς (π.χ. μηχανισμός μεταφοράς). Έτσι σε κάθε χρονική στιγμή, γίνεται η θεώρηση ότι πρώτα λαμβάνει χώρα η καύση και στη συνέχεια η μεταφορά. Αυτή η διαδικασία μπορεί να οδηγήσει θεωρητικά σε μείωση της ακρίβειας της χρονικής διακριτοποίησης σε πρώτης τάξης, ακόμα και αν οι επί μέρους μέθοδοι διακριτοποίησης είναι δεύτερης τάξης. Στην πράξη όμως η μείωση της ακρίβειας είναι μικρή και ουσιαστικά η δεύτερη τάξη ακρίβειας διατηρείτε (Leveque 2004, §17.5).

Με τη διαδικασία του κλασματικού βήματος, το πρόβλημα που παρουσιάσαμε προηγουμένως αντιμετωπίζεται πολύ εύκολα, καθώς ο όρος πηγής απεμπλέκεται από την εξίσωση μεταφοράς. Η εξίσωση (4.2.36) στην οποία παρουσιάζεται επιλύεται αλγεβρικά χρησιμοποιώντας σαν $\dot{\omega}^{n+1}$ την τιμή της τελευταίας επανάληψης. Η εξίσωση αυτή επιλύεται πρώτα για το στοιχείο το οποίο βρίσκεται σε έλλειμμα, δηλαδή για το καύσιμο αν έχουμε υπο-στοιχειομετρικό μείγμα, ή για το οξυγόνο αν έχουμε υπερ-στοιχειομετρικό μείγμα. Στην περίπτωση όπου η ποσότητα $\varphi^{n'}$ υπολογιστεί αρνητική, ο ρυθμός καύσης διορθώνεται έτσι ώστε η ποσότητα $\varphi^{n'}$ να μηδενίζεται. Αυτός ο διορθωμένος ρυθμός καύσης χρησιμοποιείται στη συνέχεια για τα υπόλοιπα στοιχεία της καύσης. Με τον τρόπο αυτό, ο όρος πηγής είναι συνεπής μεταξύ των συστατικών της αντίδρασης και όλα τα στοιχεία έχουν τιμές εντός των θεωρητικών ορίων.

4.6 Επίλυση γραμμικών συστημάτων

Ένα μεγάλο μέρος του υπολογιστικού χρόνου (πολλές φορές το μεγαλύτερο) αφιερώνεται στην επίλυση των γραμμικών συστημάτων που προκύπτουν από την διακριτοποίηση των εξισώσεων. Στην περίπτωση μας, το πιο σημαντικό και δύσκολο προς επίλυση σύστημα είναι αυτό που προκύπτει από την διακριτοποίηση της εξίσωσης της πίεσης. Άλλα συστήματα που χρειάζονται να επιλυθούν είναι αυτά των εξισώσεων διατήρησης για τα συστατικά και για την ενέργεια (καθώς χρησιμοποιούμε τη μέθοδο Crank-Nicolson για τη διακριτοποίηση του χρονικού όρου), τα οποία όμως επιλύονται πιο εύκολα με αποτέλεσμα ακόμα και οι απλές μέθοδοι Gauss-Seidel ή Jacobi να συγκλίνουν σε μικρό αριθμό επαναλήψεων.

Τα συστήματα αυτά είναι μεγάλα σε μέγεθος και αραιά (λίγα μη μηδενικά στοιχεία στον πίνακα των συντελεστών σε σχέση με το συνολικό μέγεθος τους) και για την επίλυση τους χρησιμοποιούνται μέθοδοι που βασίζονται στη μέθοδο προβολής στον υπόχωρο Krylov (Krylov subspace methods) (Saad 2003, Barrett et al. 1994). Αντιπροσωπευτικά παραδείγματα των μεθόδων αυτών είναι οι αλγόριθμοι BiCGstab και GMRES οι οποίοι είναι ενσωματωμένοι στον κώδικα ADREA-HF. Οι αλγόριθμοι αυτού του είδους είναι επαναληπτικοί και μπορούν να επιτύχουν ταχύτατη σύγκλιση αν

¹ Στην πραγματικότητα διακριτοποιείται η συντηρητική μορφή των εξισώσεων και στη συνέχεια αφαιρείται από αυτή η διακριτοποιημένη εξίσωση της συνέχειας, με αποτέλεσμα η πυκνότητα στη νέα χρονική στιγμή να απαλείφεται (§A.5).

συνδυαστούν με τη **μέθοδο της προσταθεροποίησης** (preconditioning) (Benzi 2002). Με τη μέθοδο της προσταθεροποίησης αντί να επιλυθεί το σύστημα

$$Ax = b \quad (4.2.38)$$

όπου A ο $n \times n$ πίνακας των συντελεστών, x ο $1 \times n$ πίνακας των αγνώστων και b ο $1 \times n$ πίνακας σταθερών, επιλύεται το

$$M^{-1}Ax = M^{-1}b \quad (4.2.39)$$

όπου M είναι ο πίνακας της προσταθεροποίησης (preconditioner). Με την κατάλληλη επιλογή του M μπορεί να επιτευχθεί καλύτερη κατάσταση του συστήματος οπότε και ταχύτερη σύγκλιση των επαναληπτικών μεθόδων. Η μόνη αλλαγή που επιφέρει ουσιαστικά η χρήση προσταθεροποιητή στους αλγορίθμους των BiCGstab και GMRES είναι η ανάγκη για την επίλυση ενός επιπλέον συστήματος με πίνακα συντελεστών τον M (προσταθεροποιημένο σύστημα) σε κάθε επανάληψη της μεθόδου. Σαν M μπορεί να επιλεγεί μία προσέγγιση του A . Γενικά όσο πιο καλή είναι αυτή η προσέγγιση τόσο πιο πολύς χρόνος απαιτείται για την επίλυση του προσταθεροποιημένου συστήματος αλλά και τόσο πιο γρήγορη είναι η σύγκλιση της λύσης του αρχικού. Μία ευρέως χρησιμοποιούμενη μέθοδος προσταθεροποίησης είναι η μέθοδος της προσεγγιστικής παραγοντοποίησης ILU. Στη μέθοδο αυτή σαν πίνακας προσταθεροποίησης M επιλέγεται το γινόμενο ενός άνω τριγωνικού με έναν κάτω τριγωνικό πίνακα οι οποίοι έχουν δημιουργηθεί με εφαρμογή της απαλοιφής Gauss στον αρχικό πίνακα A απορρίπτοντας στοιχεία που εμφανίζονται σε θέσεις όπου ο A έχει μηδενικά στοιχεία. Η παραπάνω μέθοδος ονομάζεται ILU(0), ενώ υπάρχουν και οι παραλλαγές ILU(1), ILU(2) οι οποίες επιτρέπουν την εμφάνιση στοιχείων στους τριγωνικούς πίνακες και σε θέσεις στις οποίες ο A είχε μηδενικά στοιχεία. Έχοντας τον πίνακα M σε γινόμενο ενός άνω και ενός κάτω τριγωνικού πίνακα, υπολογίζεται εύκολα η λύση του προσταθεροποιημένου συστήματος εφαρμόζοντας μία μπρος και μία πίσω αντικατάσταση.

Αρχικά, ο κώδικας ADREA-HF περιείχε μόνο τη μέθοδο BiCGstab και στη διάρκεια της διδακτορικής διατριβής έγινε ενσωμάτωση και της μεθόδου GMRES με επανεκκίνηση. Η σύγκριση των δύο μεθόδων¹ δεν έδειξε ξεκάθαρη υπεροχή της μιας μεθόδου έναντι της άλλης, καθώς σε κάποια προβλήματα ήταν πιο γρήγορη η μια μέθοδος και σε κάποια άλλα η άλλη. Το γεγονός αυτό σε συνδυασμό με το ότι η μέθοδος GMRES απαιτεί για την επανεκκίνηση τον καθορισμό της διάστασης του υποχώρου Krylov του οποίου η βέλτιστη τιμή δεν είναι γνωστή, οδήγησε τελικά στην χρησιμοποίηση της μεθόδου BiCGstab. Ο προσταθεροποιητής ο οποίος επιλέχτηκε ήταν ο ILU(0) καθώς οι δοκιμές με άλλου τύπου προσταθεροποιητές δεν έδειξαν κάποια καθολική υπεροχή κάποιας μεθόδου, καθώς οι μέθοδοι ILU(1), ILU(2) οδηγούσαν σε γρηγορότερη σύγκλιση του αλγορίθμου, με μεγαλύτερο όμως υπολογιστικό κόστος ανά επανάληψη λόγω του αυξημένου πλήθους πράξεων που απαιτούν.

¹ Οι δοκιμές τόσο για τη μέθοδο επίλυσης όσο και για τον προσταθεροποιητή έγιναν σε περιπτώσεις διασποράς υδρογόνου

4.7 Παραλληλοποίηση του κώδικα

Λόγω των αυξημένων υπολογιστικών απαιτήσεων των προβλημάτων καύσης και της μεθόδου LES, μία από τις πρώτες εργασίες που έγιναν στα πλαίσια της διδακτορικής διατριβής είναι αυτή της παραλληλοποίησης του κώδικα. Με την παραλληλοποίηση έχουμε την δυνατότητα να χρησιμοποιούμε αρκούντως πυκνά πλέγματα σε λογικούς υπολογιστικούς χρόνους. Ο κώδικας παραλληλοποιήθηκε τόσο για χρήση σε υπολογιστικό περιβάλλον κοινής μνήμης (shared memory) όσο και κατανεμημένης (distributed memory). Τυπικό παράδειγμα περιβάλλοντος κοινής μνήμης είναι οι σύγχρονοι πολύ-πύρινοι επεξεργαστές η χρήση των οποίων έχει διαδοθεί την τελευταία δεκαετία. Παράδειγμα περιβάλλοντος κατανεμημένης μνήμης είναι οι σύγχρονες συστοιχίες υπερ-υπολογιστών (computer clusters) που αποτελούνται από εκατοντάδες ή και χιλιάδες επεξεργαστές οι οποίοι διασυνδέονται συνήθως μέσω ενός γρήγορου δικτύου (π.χ. infiniband, myrinet), όσο και μικρές συστοιχίες επιτραπέζιων υπολογιστών οι οποίοι διασυνδέονται μέσω απλού Ethernet δικτύου (Beowulf cluster). Φυσικά τα δύο συστήματα μπορούν να συνδυαστούν μεταξύ τους αφού ένα σύστημα κατανεμημένης μνήμης μπορεί να αποτελείται από επιμέρους συστήματα κοινής μνήμης.

Ο τρόπος με τον οποίο παραλληλοποιείται ένας κώδικας διαφέρει σημαντικά αναλόγως με το σύστημα το οποίο θα χρησιμοποιηθεί. Στα συστήματα κοινής μνήμης όλοι οι επεξεργαστές έχουν πρόσβαση στην ίδια μνήμη, ενώ στα κατανεμημένης κάθε επεξεργαστής βλέπει μόνο τη δική του μνήμη. Όπως είναι φανερό, η παραλληλοποίηση σε συστήματα κατανεμημένης μνήμης είναι πιο επίπονη καθώς πρέπει να ληφθούν υπ' όψιν και θέματα διαχείρισης μνήμης. Δεδομένα τα οποία βρίσκονται αποθηκευμένα στη μνήμη κάποιου εκ των υπολογιστικών κόμβων του συστήματος, μπορεί να χρειαστούν από έναν άλλο κόμβο ο οποίος όμως δεν έχει άμεση πρόσβαση σε αυτά.

4.7.1 Παραλληλοποίηση για συστήματα κοινής μνήμης

Ο ποιο διαδεδομένος τρόπος παραλληλίας για συστήματα κοινής μνήμης, είναι με χρήση της προγραμματιστικής διεπιφάνειας (API) **OpenMP**. Το OpenMP υποστηρίζεται από τις γλώσσες προγραμματισμού Fortran και C/C++ και μπορεί να τρέξει ανεξάρτητα από την αρχιτεκτονική του συστήματος και του λειτουργικού που χρησιμοποιείται. Είναι γενικά ένας εύκολος και γρήγορος τρόπος παραλληλοποίησης ενός προγράμματος καθώς δεν απαιτεί μεγάλες αλλαγές στον κώδικα. Χρειάζεται όμως μεγάλη προσοχή για να αποφευχθούν λάθη τα οποία μπορεί να είναι δύσκολο να βρεθούν και να οδηγούν σε λάθος αποτελέσματα. Η παραλληλοποίηση αφορά κυρίως στους βρόγχους επανάληψης (do loops) με την χρήση εντολών του OpenMP (γνωστών ως OMP-directives) πριν την έναρξη τέτοιων βρόγχων. Αυτό που επιτυγχάνεται με αυτόν τον τρόπο είναι οι επαναλήψεις του βρόγχου να μοιράζονται μεταξύ των επεξεργασιών και να εκτελούνται παράλληλα. Ουσιαστικά δημιουργούνται τόσα νήματα όσα έχει ορίσει ο χρήστης τα οποία διαμοιράζονται από το λειτουργικό σύστημα στους διαθέσιμους επεξεργαστές. Έτσι, για παράδειγμα για έναν βρόγχο 1000 επαναλήψεων και για επιλεγόμενο πλήθος νημάτων 2, κάθε νήμα θα αναλάβει 500 επαναλήψεις. Το ποιες ακριβώς επαναλήψεις θα εκτελέσει το κάθε νήμα μπορεί να αποφασιστεί από το χρήστη, διαφορετικά καθορίζεται από το OpenMP. Φυσικά, οι βρόγχοι οι οποίοι επιχειρούνται να διασπαστούν πρέπει να μπορούν να παραλληλοποιηθούν, δηλαδή η κάθε επανάληψη να είναι ανεξάρτητη από τις προηγούμενες. Αυτό σημαίνει πως μεγέθη

που υπολογίζονται σε μία επανάληψη του βρόγχου δεν πρέπει να χρειάζονται στις επόμενες επαναλήψεις.

Ένας κώδικας υπολογιστικής μηχανικής αποτελείται από δύο βασικά στάδια υπολογισμών στους οποίους αφιερώνεται ο περισσότερος υπολογιστικός χρόνος, το στάδιο της διακριτοποίησης των εξισώσεων και το στάδιο της επίλυσης γραμμικών συστημάτων. Το στάδιο της διακριτοποίησης των εξισώσεων είναι ένα στάδιο το οποίο περιλαμβάνει βρόγχους που αφορούν το σύνολο των πεπερασμένων όγκων της διακριτοποίησης του χωρίου. Κάθε επανάληψη αυτών των βρόχων είναι ανεξάρτητη από τις προηγούμενες. Έτσι, το κομμάτι αυτού του κώδικα μπορεί να παραλληλοποιηθεί σχετικά απλά μέσω του OpenMP.

Το δεύτερο μεγάλο στάδιο ενός κώδικα υπολογιστικής μηχανικής, το οποίο αποτελεί και το πιο χρονοβόρο τμήμα, είναι αυτό της επίλυσης των αλγεβρικών γραμμικών συστημάτων που προκύπτουν από την διακριτοποίηση των εξισώσεων. Όπως αναφέραμε στην §4.6, η κύρια μέθοδος επίλυσης αυτών των συστημάτων είναι οι μέθοδος BiCGstab ή GMRES. Οι πράξεις που απαιτούν οι επαναληπτικές μέθοδοι αυτού του τύπου είναι ουσιαστικά η πράξη του εσωτερικού γινομένου δύο διανυσμάτων, του πολλαπλασιασμού διανύσματος επί πίνακα, την κατασκευή του προσταθεροποιητή και τη λύση του προσταθεροποιημένου συστήματος. Ο πολλαπλασιασμός πίνακα επί διάνυσμα είναι μια πράξη που μπορεί να παραλληλοποιηθεί εύκολα, αφού υλοποιείται με βρόγχο του οποίου η κάθε επανάληψη δεν εξαρτάται από την προηγούμενη. Η πράξη του εσωτερικού γινομένου μπορεί και αυτή να παραλληλοποιηθεί εύκολα, με την διαφορά ότι απαιτεί στο τέλος της άθροιση των επιμέρους εσωτερικών γινομένων που έχουν υπολογιστεί από κάθε επεξεργαστή. Η δυσκολία έγκειται στην παραλληλοποίηση του προσταθεροποιητή (με την έννοια παραλληλοποίηση του προσταθεροποιητή εννοούμε την παραλληλοποίηση της κατασκευής του και της λύσης του προσταθεροποιημένου συστήματος). Τόσο η μέθοδος ILU όσο και άλλοι αποδοτικοί τρόποι προσταθεροποίησης έχουν μία φυσική σειριακότητα στις πράξεις που εκτελούν με αποτέλεσμα η παραλληλοποίηση τους να είναι δύσκολη. Από την άλλη μεριά προσταθεροποιητές που είναι εύκολο να παραλληλοποιηθούν δεν ενδείκνυνται για χρήση σε έναν μόνο επεξεργαστή (σειριακοί υπολογισμοί), αφού ο χρόνος που απαιτούν είναι μεγαλύτερος από τους δύσκολα παραλληλοποιήσιμους προσταθεροποιητές όπως οι τύπου ILU (Saad 1994).

Ο **προσταθεροποιητής** ο οποίος επιλέχθηκε να χρησιμοποιηθεί στους παράλληλους υπολογισμούς είναι μία block παραλλαγή του ILU. Ο πίνακας A χωρίζεται σε τμηματικά (block) διαγώνιους πίνακες οι οποίοι αλληλεπικαλύπτονται σε βάθος ενός στοιχείου και οι οποίοι είναι σε πλήθος όσοι και οι πυρήνες στους οποίους θέλουμε να τρέξουμε το πρόβλημα μας. Στη συνέχεια η μέθοδος ILU εφαρμόζεται σε κάθε τμήμα του πίνακα ξεχωριστά. Με αυτό τον τρόπο πετυχαίνουμε την παραλληλία τόσο της δημιουργίας του προσταθεροποιητή όσο και της επίλυσης του προσταθεροποιημένου συστήματος. Ο προσταθεροποιητής αυτός είναι απλός και εύκολα υλοποιήσιμος και δίνει ικανοποιητικά αποτελέσματα. Το μειονέκτημα του είναι ότι με την αύξηση του αριθμού των επεξεργαστών η ποιότητα του προσταθεροποιητή μπορεί να μειωθεί, με αποτέλεσμα να απαιτούνται περισσότερες επαναλήψεις για την σύγκλιση του αρχικού συστήματος. Παρόλα αυτά δοκιμές σε μέχρι και 240 πυρήνες έδειξαν αμελητέα αύξηση των επαναλήψεων (δες §4.7.2).

4.7.2 Παραλληλοποίηση για συστήματα κατανεμημένης μνήμης

Στα συστήματα κατανεμημένης μνήμης, ο κάθε επεξεργαστής (ή η κάθε ομάδα επεξεργαστών) έχει την δική του μνήμη, δηλαδή διαχειρίζεται τα δικά του δεδομένα. Σε έναν κώδικα όμως ο οποίος δεν μπορεί να χωριστεί σε τελείως ανεξάρτητα τμήματα, ο ένας επεξεργαστής χρειάζεται δεδομένα που διαχειρίζεται κάποιος άλλος. Έτσι, η επικοινωνία μεταξύ των επεξεργαστών που έχουν πρόσβαση σε διαφορετική μνήμη είναι αναγκαία προκειμένου να μεταφερθούν τα απαραίτητα δεδομένα. Η επικοινωνία αυτή επιτυγχάνεται ρητά, μέσω ενός τοπικού κοινού δικτύου. Έτσι τα δεδομένα μεταφέρονται από τον έναν υπολογιστή στον άλλο και αποθηκεύονται στη μνήμη του δεύτερου ώστε να επεξεργαστούν. Αυτή η μεταφορά των δεδομένων κοστίζει σε υπολογιστικό χρόνο, ειδικά αν το δίκτυο είναι αργό (π.χ. απλό Ethernet) με μεγάλο χρόνο απόκρισης (latency). Αυτός είναι ένας από τους βασικούς λόγους για τους οποίους μπορεί η μείωση του υπολογιστικού χρόνου από την χρήση περισσότερων επεξεργαστών, να απέχει από τη μέγιστη θεωρητική. Η επικοινωνία μεταξύ των υπολογιστικών κόμβων γίνεται με τη χρήση ενός πρωτοκόλλου επικοινωνίας. Το πιο γνωστό και ευρύ χρησιμοποιούμενο πρωτόκολλο είναι το MPI (Message Passing Interface).

Το **MPI** είναι ανεξάρτητο της γλώσσας προγραμματισμού, του υπολογιστικού συστήματος και του λειτουργικού που χρησιμοποιείται και η χρήση του γίνεται με κλήση των συναρτήσεων του MPI μέσα από τον κώδικα του προγράμματος. Με τον τρόπο αυτό μεταβλητές, τις τιμές των οποίων γνωρίζει μόνο ένας επεξεργαστής, μπορούν να γίνουν γνωστές και στους υπόλοιπους κατά την διάρκεια εκτέλεσης του προγράμματος. Όταν ένα πρόγραμμα εκτελείται παράλληλα μέσω του MPI, ο κάθε επεξεργαστής τρέχει το δικό του στιγμιότυπο του προγράμματος οπότε δημιουργεί τις δικές του μεταβλητές. Το κάθε πρόγραμμα σταματάει προσωρινά την εκτέλεση του όταν συναντήσει εντολή του MPI, ώστε να επικοινωνήσει με τον κατάλληλο επεξεργαστή για να δώσει ή να πάρει δεδομένα. Όταν επιτευχθεί η επικοινωνία το πρόγραμμα συνεχίζει κανονικά την εκτέλεση του. Αυτό είναι ένα παράδειγμα συγχρονισμένης επικοινωνίας. Υπάρχουν και συναρτήσεις του MPI οι οποίες επιτρέπουν την ασύγχρονη επικοινωνία των κόμβων. Σε αυτή την περίπτωση, η μεταφορά των δεδομένων γίνεται ταυτόχρονα με την εκτέλεση του κώδικα. Όταν ο κώδικας χρειαστεί τα δεδομένα που μεταφέρονται, γίνεται έλεγχος (τον οποίο πρέπει να έχουμε φροντίσει να γίνεται στον κώδικα μέσω της εκτέλεσης της κατάλληλης συνάρτησης του MPI) για το κατά πόσο αυτά έχουν μεταφερθεί, ώστε να συνεχίσει η εκτέλεση του προγράμματος. Η ασύγχρονη επικοινωνία είναι πιο επίπονη στον προγραμματισμό αλλά μπορεί να επιφέρει μεγάλα οφέλη επιτάχυνσης του υπολογιστικού χρόνου καθώς το κόστος της επικοινωνίας «κρύβεται» πίσω από το κόστος των υπολογισμών και αποτελεί μάλλον προαπαιτούμενο για να καταφέρει ένας κώδικας να τρέξει σε χιλιάδες επεξεργαστές χωρίς πτώση της απόδοσης της παραλληλίας.

Η παραλληλοποίηση του κώδικα ADREA-HF για υπολογιστικά συστήματα κατανεμημένης μνήμης έγινε με τη μέθοδο της κατάτμησης του χωρίου (**domain decomposition**). Με τη μέθοδο αυτή, το συνολικό χωρίο επίλυσης χωρίζεται σε υποχωρία, συνήθως τόσα όσα είναι και το επιθυμητό πλήθος επεξεργαστών. Με αυτό τον τρόπο, ο κάθε επεξεργαστής είναι υπεύθυνος μόνο για τους υπολογισμούς του χωρίου το οποίο έχει αναλάβει. Στην περίπτωση μας, τα υποχωρία τα οποία σχηματίζονται έχουν ορθογώνιο σχήμα, όπως και το ολικό χωρίο. Ο κώδικας ο οποίος αναπτύχθηκε, χωρίζει αυτόματα το συνολικό χωρίο σε υποχωρία, διαιρώντας τις τρεις χωρικές κατευθύνσεις με το κατάλληλο νούμερο με βάση το συνολικό πλήθος χωρίων το οποίο επιθυμούμε να διαιρέσουμε το

χωρίο. Αρχικά, το πλήθος των υποχωρίων αναλύεται σε μορφή πρώτων παραγόντων. Στη συνέχεια οι πρώτοι αυτοί παράγοντες συνδυάζονται κατάλληλα ώστε να δώσουν τρεις μόνο παράγοντες. Οι τρεις αυτοί παράγοντες χωρίζουν τις τρεις χωρικές κατευθύνσεις σε ισάριθμο αριθμό τμημάτων, τα οποία τμήματα ορίζουν τα υποχωρία. Έτσι είναι φανερό ότι στην περίπτωση όπου το πλήθος των υποχωρίων είναι πρώτος αριθμός, μόνο η μία χωρική κατεύθυνση θα διακριτοποιηθεί σε υποχωρία. Σε κάθε άλλη περίπτωση, τα όρια των υποχωρίων (δηλαδή οι τρεις παράγοντες στους οποίους αναλύεται το πλήθος των υποχωρίων) προσδιορίζονται με τέτοιο τρόπο ώστε αυτά να έχουν όσο το δυνατόν κυβικό σχήμα. Με την παραπάνω μέθοδο κατάτμησης του χωρίου, τα υποχωρία τα οποία δημιουργούνται έχουν σχεδόν τον ίδιο αριθμό κελιών¹. Προσοχή χρειάζεται στην περίπτωση όπου έχουμε πολλά μη-ενεργά κελιά (§4.3) τα οποία δεν κατανέμονται ομοιόμορφα στο χωρίο, καθώς ο τρόπος που περιγράψαμε δεν λαμβάνει υπ' όψιν του αν ένα κελί είναι ενεργό ή όχι. Στα μη-ενεργά κελιά δεν γίνονται υπολογισμοί με αποτέλεσμα να δημιουργείται ανισορροπία στους υπολογισμούς στην περίπτωση όπου το πλήθος των ενεργών κελιών μεταξύ των υποχωρίων δεν είναι ίδιο. Μία από τις βελτιώσεις λοιπόν που μπορεί να γίνουν στον αλγόριθμο κατάτμησης του χωρίου, είναι ο χωρισμός να λαμβάνει υπ' όψιν τα μη-ενεργά κελιά, έτσι ώστε να έχουμε καλύτερη ισορροπία στους υπολογισμούς (work balance) στις περιπτώσεις περίπλοκης γεωμετρίας.

Η **επικοινωνία** μεταξύ των επεξεργαστών στην περίπτωση των αρχιτεκτονικών κατανεμημένης μνήμης γίνεται, όπως είπαμε μέσω δικτύου και ο χρόνος για να πραγματοποιηθεί αυτό δεν είναι αμελητέος. Καθυστέρηση έχουμε τόσο για την προετοιμασία αποστολής ενός νέου μηνύματος (latency) όσο και κατά την διάρκεια την μεταφοράς του λόγω της περιορισμένης χωρητικότητας του διαύλου του δικτύου (bandwidth). Για τον λόγο αυτό, η μεταφορά των δεδομένων μεταξύ των επεξεργαστών πρέπει να είναι περιορισμένη και να γίνεται μόνο όταν είναι απολύτως απαραίτητη. Έτσι, ο χωρισμός των χωρίων σε υποχωρία πρέπει να γίνεται κατά τέτοιο τρόπο ώστε να ικανοποιούνται δύο βασικές απαιτήσεις: τα χωρία να έχουν περίπου τον ίδιο αριθμό κελιών (πεπερασμένων όγκων) και οι διεπιφάνειες που τα χωρίζουν να είναι όσο το δυνατόν πιο μικρές. Με την πρώτη απαίτηση επιτυγχάνεται ο ισοκαταμερισμός του φορτίου εργασίας στους επεξεργαστές, έτσι ώστε η αναμονή ενός επεξεργαστή για την ανάκτηση δεδομένων από κάποιον άλλο να είναι μικρή. Με την δεύτερη απαίτηση επιτυγχάνεται μείωση του όγκου των δεδομένων που μεταφέρονται μεταξύ των υποχωρίων και επομένως μειώνεται ο χρόνος επικοινωνίας.

Η επικοινωνία μεταξύ των επεξεργαστών μπορεί να χωριστεί σε δύο ομάδες: επικοινωνία ανάμεσα σε δύο επεξεργαστές (point to point communication) και επικοινωνία ανάμεσα σε όλους τους επεξεργαστές (collective communication). Η πρώτη περίπτωση είναι η περίπτωση στην οποία δύο γειτονικά χωρία ανταλλάσσουν δεδομένα στο σύνορο τους, ενώ η δεύτερη είναι η περίπτωση κατά την οποία απαιτείται να γίνει μία ολική πράξη (π.χ. άθροιση) κάποιας μεταβλητής πάνω σε όλα τα κελιά του πλέγματος. Ανταλλαγή δεδομένων στο σύνορο των χωρίων πραγματοποιείται προκειμένου να μεταφερθούν τιμές μεταβλητών που έχουν υπολογιστεί στο ένα χωρίο και χρειάζονται στο άλλο. Κάτι τέτοιο για παράδειγμα χρειάζεται στην στιγμή όπου οι τιμές των ταχυτήτων και της πίεσης έχουν υπολογιστεί στο τέλος μιας επανάληψης από κάθε επεξεργαστή,

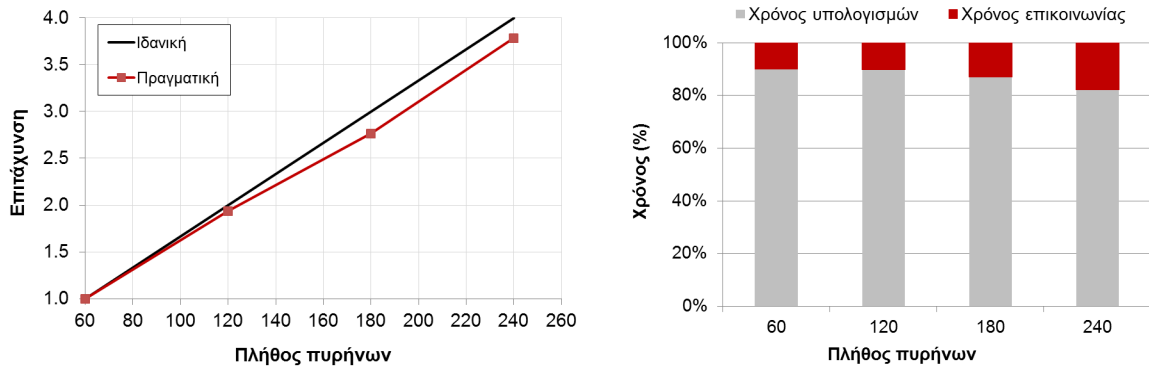
¹ Για να έχουν ακριβώς (και όχι σχεδόν) το ίδιο πλήθος κελιών, θα πρέπει ο κάθε ένας από τους παράγοντες στους οποίους αναλύθηκε το συνολικό πλήθος των χωρίων να διαιρεί ακριβώς το πλήθος των κελιών που υπάρχουν στην κατεύθυνση που θα αντιστοιχηθούν.

και πρέπει να ενημερωθούν οι τιμές αυτές στο σύνορο των χωρίων, προκειμένου να γίνει στην επόμενη επανάληψη η διακριτοποίηση των εξισώσεων. Επικοινωνία μεταξύ των επεξεργαστών απαιτείται επίσης στις μεθόδους Bi-CGstab και GMRES για να γίνει ο πολλαπλασιασμός πίνακα επί διάνυσμα. Από την άλλη μεριά, επικοινωνία ανάμεσα σε όλους τους επεξεργαστές χρειάζεται, εκτός από τις ολικές αθροίσεις μεταβλητών στα κελιά του πλέγματος, στην πράξη του εσωτερικού γινομένου κατά την επίλυση των γραμμικών συστημάτων με μεθόδους τύπου Bi-CGstab. Κάθε επεξεργαστής υπολογίζει το τμήμα του εσωτερικού γινομένου που αφορά το χωρίο που έχει αναλάβει και στο τέλος γίνεται μια άθροιση των τιμών αυτών πάνω σε όλα τα χωρία. Παρόλο που το μέγεθος των δεδομένων που χρειάζεται να διακινηθούν είναι μικρό, η επικοινωνία για αυτή τη λειτουργία μπορεί να είναι σημαντική αν ο χρόνος απόκρισης (latency) του δικτύου είναι μεγάλος καθώς η πράξη του εσωτερικού γινομένου εκτελείται πολλές φορές.

Ο **προσταθεροποιητής** που χρησιμοποιείται είναι παρόμοιος με αυτόν που περιγράφηκε στην προηγούμενη παράγραφο για τα συστήματα κοινής μνήμης. Μια διαφορά εδώ είναι ότι ο πίνακας A χωρίζεται σε τμήματα με βάση τα φυσικά χωρία (υποπλέγματα) στα οποία έχει διαιρεθεί το συνολικό χωρίο (πλέγμα), ενώ στην προηγούμενη περίπτωση γίνεται αλγεβρικός διαχωρισμός στο επίπεδο των εξισώσεων χωρίς να εμπλέκεται άμεσα ο φυσικός χώρος στον οποίο οι εξισώσεις αυτές αναφέρονται. Επίσης, στην περίπτωση των συστημάτων κατανεμημένης μνήμης τα χωρία δεν αλληλεπικαλύπτονται όπως συμβαίνει στην περίπτωση της κοινής μνήμης. Έγιναν δοκιμές στις οποίες υπήρχε φυσική αλληλοεπικάλυψη των υποχωρίων χωρίς όμως να παρουσιαστεί ταχύτερη σύγκλιση, σε αντίθεση με τα συστήματα κατανεμημένης μνήμης όπου η αλληλοεπικάλυψη φάνηκε να είναι σημαντική.

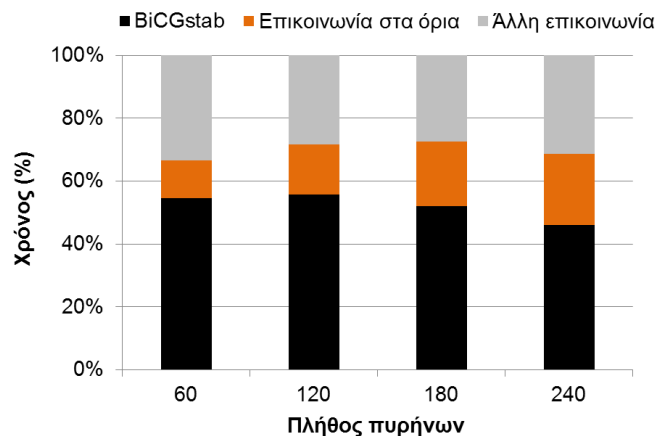
Γενικά, από όλα τα παραπάνω συμπεραίνεται ότι η παραλληλία για αρχιτεκτονικές κατανεμημένης μνήμης σε αντίθεση με την παραλληλία για αρχιτεκτονικές κοινής μνήμης, είναι πιο δύσκολη και αφορά όλη την έκταση του κώδικα, από την κατασκευή του πλέγματος μέχρι την αποθήκευση των αποτελεσμάτων για μετά-επεξεργασία, πράγμα που οφείλεται στην μη άμεση πρόσβαση του κάθε επεξεργαστή στο σύνολο των δεδομένων. Η λογική της παραλληλίας είναι τελείως διαφορετική και δεν βασίζεται στον απλό παραλληλισμό των βρόχων επανάληψης.

Στο παρακάτω σχήμα, απεικονίζεται η επιτάχυνση (speedup) στον υπολογιστικό χρόνο και ο χρόνος επικοινωνίας σαν ποσοστό του συνολικού χρόνου, σε συνάρτηση με το πλήθος των πυρήνων. Η περίπτωση αυτή αφορά LES προσομοίωση πάνω από πόλη (Michel-Stadt, Κουτσουράκης 2014) με συνολικό πλήθος υπολογιστικών κελιών περίπου 15 εκατομμύρια. Παρατηρούμε ότι η επιτάχυνση στους υπολογισμούς είναι σχεδόν ιδεατή όταν αυξάνουμε το πλήθος των πυρήνων από 60 σε 120, ενώ απομακρύνεται από την ιδεατή όταν οι πυρήνες αυξηθούν σε 180 και 240. Παρόλα αυτά ακόμα και σε αυτό το πλήθος πυρήνων η επιτάχυνση είναι ικανοποιητική. Στο δεξί μέρος του σχήματος απεικονίζεται ο χρόνος υπολογισμών και ο χρόνος επικοινωνίας σαν ποσοστό του συνολικού χρόνου εκτέλεσης. Παρατηρούμε ότι ο χρόνος επικοινωνίας αυξάνει καθώς αυξάνεται το πλήθος των επεξεργαστών πράγμα που δικαιολογεί και την πτώση της απόδοσης στην παραλληλία. Η αύξηση των αριθμητικών κελιών αναμένεται να δώσει καλύτερη επιτάχυνση στο ίδιο πλήθος επεξεργαστών, καθώς ο επιπλέον υπολογιστικός χρόνος που συνεπάγεται το πυκνότερο πλέγμα είναι μεγαλύτερος του επιπλέον χρόνου επικοινωνίας.



Σχήμα 4.7.1: Επιτάχυνση (speedup) υπολογιστικού χρόνου (αριστερά) και χρόνος επικοινωνίας σαν ποσοστό του συνολικού χρόνου (δεξιά) σε συνάρτηση με το πλήθος των πυρήνων.

Στο Σχήμα 4.7.2 γίνεται μια απεικόνιση των λειτουργιών στις οποίες αφιερώνεται ο χρόνος επικοινωνίας. Παρατηρούμε ότι σε όλες τις περιπτώσεις, σχεδόν ο μισός χρόνος επικοινωνίας δαπανάται για την επίλυση του συστήματος των εξισώσεων από τη BiCGstab. Ο χρόνος αυτός αφιερώνεται κυρίως στο κόστος επικοινωνίας για τον υπολογισμό του εσωτερικού γινομένου και του πολλαπλασιασμού πίνακα με διάνυσμα, με το κόστος επικοινωνίας για το εσωτερικό γινόμενο να είναι περίπου 2.5 φορές μεγαλύτερος του κόστους πολλαπλασιασμού. Το κόστος για την λοιπή επικοινωνία παρατηρούμε ότι είναι μη-αμελητέο. Αυτό το κόστος περιλαμβάνει την επικοινωνία όλων των υποχωριών για τον υπολογισμό ολικών αθροισμάτων ή ολικών μέγιστων και ελαχίστων. Επίσης το κόστος αυτό περιλαμβάνει το κόστος λόγω άνισου φόρτου εργασίας μεταξύ των υποχωριών. Τέλος ο χρόνος επικοινωνίας στα όρια αναφέρεται στον χρόνο που δαπανάται για την ανταλλαγή δεδομένων μεταξύ γειτονικών χωριών.



Σχήμα 4.7.2: Χρόνος επικοινωνίας της BiCGstab, της ανταλλαγής δεδομένων στα όρια και των λοιπών λειτουργιών, σαν ποσοστό του συνολικού κόστους επικοινωνίας.

Στο πρόβλημα αυτό, το μεγαλύτερο ποσοστό του χρόνου (περίπου 62%), αναλώνεται στην επίλυση του συστήματος για τον υπολογισμό της πίεσης. Οπότε η αποδοτική παραλληλοποίηση αυτού του τμήματος του κώδικα είναι μεγάλης σημασίας. Όσο αφορά τον προσταθεροποιητή, η πτώση στην απόδοση του λόγω της αύξηση του αριθμού των επεξεργαστών (από την αύξηση του κατακερματισμού του σε κατά μέρους διαγώνιους πίνακες) ήταν πολύ μικρή, καθώς ο μέσος αριθμός επαναλήψεων που χρειάστηκε η BiCGstab για να συγκλίνει ήταν 63.8 για την περίπτωση των 60 πυρήνων και 66 για την περίπτωση των 240 (Πίνακας 4.7.1).

Πίνακας 4.7.1: Στοιχεία για την επίλυση του συστήματος των εξισώσεων πίεσης σε συνάρτηση με το πλήθος των πυρήνων.

Πλήθος πυρήνων	Μέσο πλήθος επαναλήψεων BiCGstab	Μέσος χρόνος επίλυσης του συστήματος (s)	Ποσοστό του συνολικού χρόνου στη BiCGstab (μαζί με χρόνο επικοινωνίας)
60	63.8	4.17	64.5 %
120	64.6	2.16	62.7 %
180	65.6	1.48	61.2 %
240	66.0	1.05	59.5 %

Για τους υπολογισμούς αυτούς χρησιμοποιήθηκε το εθνικό υπερ-υπολογιστικό σύστημα ARIS (<https://hpc.grnet.gr/>). Το σύστημα αποτελείται συνολικά από 426 κόμβους. Κάθε κόμβος διαθέτει 64GB μνήμης και 2 επεξεργαστές Intel Xeon E5-2680v2 οι οποίοι αποτελούνται από 10 πραγματικούς πυρήνες. Στους παραπάνω υπολογισμούς χρησιμοποιήθηκαν όλοι οι πυρήνες κάθε κόμβου (20), οπότε οι περιπτώσεις των 60, 120, 180 και 240 πυρήνων αντιστοιχούν σε χρήση 3, 6, 9 και 12 κόμβων αντίστοιχα. Οι κόμβοι διασυνδέονται μεταξύ τους με δίκτυο Infiniband FDR.

Κεφάλαιο 5

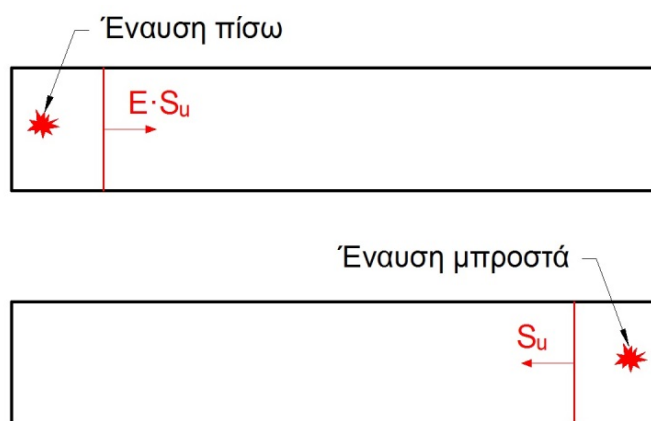
Εξακρίβωση της παρούσας μεθοδολογίας

Τα σημαντικότερα προβλήματα που αντιμετωπίζουμε, δεν μπορούν να λυθούν με το ίδιο επίπεδο σκέψης που είχαμε όταν τα δημιουργήσαμε
Albert Einstein

Στο κεφάλαιο αυτό θα γίνει εξακρίβωση (verification) του κώδικα που αναπτύχθηκε σε απλές περιπτώσεις στις οποίες είναι δυνατή η εξαγωγή αναλυτικής λύσης έτσι ώστε να γίνει σύγκριση με αυτή. Με αυτό τον τρόπο επιβεβαιώνεται η ορθότητα της μεθοδολογίας (τόσο του θεωρητικού μοντέλου όσο και της αριθμητικής μεθόδου), ώστε να προχωρήσουμε στη συνέχεια στη μελέτη πιο περίπλοκων σεναρίων. Θα εξεταστούν δύο περιπτώσεις: (α) μία μονοδιάστατη έκρηξη σε ευθύγραμμο ημι-ανοιχτό κανάλι στην οποία υπάρχει αναλυτική λύση της ταχύτητας μετάδοσης της φλόγας και (β) μια τριδιάστατη έκρηξη σε κλειστό χώρο στην οποία μπορεί να προσδιοριστεί αναλυτικά η τελική θερμοκρασία και πίεση και στην οποία υπάρχουν και πειραματικά δεδομένα.

5.1 Μονοδιάστατη έκρηξη σε ευθύγραμμο ημι-ανοιχτό κανάλι

Στο Σχήμα 5.1.1 απεικονίζεται η γεωμετρία του προβλήματος. Πρόκειται για μια μονοδιάστατη προέλαση μετώπου καύσης σε αγωγό ο οποίος στην μια πλευρά του είναι ανοιχτός. Εξετάστηκαν δύο περιπτώσεις έναυσης, μία στο πίσω μέρος του αγωγού και μία στο μπροστινό το οποίο βρίσκεται ανοιχτό στην ατμόσφαιρα. Και στις δύο περιπτώσεις θεωρούμε ότι η ταχύτητα καύσης είναι σταθερή και ίση S_u .



Σχήμα 5.1.1: Σχηματική απεικόνιση εξεταζόμενων σεναρίων.

Στη περίπτωση όπου η έναυση γίνεται στο μπροστινό (ανοιχτό) μέρος του αγωγού, τότε το μέτωπο της φλόγας θα κινηθεί με ταχύτητα ίση με S_u προς το εσωτερικό του αγωγού καταναλώνοντας τα αντιδρώντα με ρυθμό $\rho_u S_u$, ενώ τα προϊόντα της αντίδρασης θα κινούνται προς την αντίθετη κατεύθυνση, δηλαδή προς τον εξωτερικό χώρο, με ταχύτητα ίση με ES_u (§2.2.2) όπου E ο λόγος επέκτασης (§2.2.1).

Στη περίπτωση όπου η έναυση γίνεται στο πίσω μέρος του αγωγού, τότε το μέτωπο της φλόγας θα κινηθεί με ταχύτητα ίση με ES_u . Την ταχύτητα αυτή μπορούμε να την δούμε σαν το άθροισμα της ταχύτητας καύσης S_u με την ταχύτητα λόγω της διαστολής των προϊόντων η οποία ωθεί το άκαυστο μείγμα και το μέτωπο της φλόγας προς τη έξοδο του αγωγού. Η ταχύτητα λόγω διαστολής μπορεί να εκφραστεί σαν

$$S_e = \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{\Delta V}{A\Delta t} = \frac{V_b - V_u}{A\Delta t} \quad (5.1.1)$$

όπου V_u ο όγκος των αντιδρώντων ο οποίος καταναλώνεται από τη φλόγα σε χρόνο Δt , V_b ο όγκος των προϊόντων που προκύπτει και A το εμβαδό της διατομής. Ισχύει ότι

$$V_b - V_u = \frac{m}{\rho_b} - V_u = \frac{m}{\rho_u/E} - V_u = EV_u - V_u = (E-1)V_u \quad (5.1.2)$$

Όμως $S_u = V_u/A\Delta t$, οπότε οι δύο προηγούμενες σχέσεις δίνουν

$$S_e = \frac{(E-1)V_u}{A\Delta t} = S_u (E-1) \quad (5.1.3)$$

Έτσι τελικά η ταχύτητα του μετώπου ισούται με:

$$S_u + S_e = S_u + S_u (E-1) = ES_u \quad (5.1.4)$$

Οι δύο αυτές περιπτώσεις θα εξεταστούν αριθμητικά στη συνέχεια.

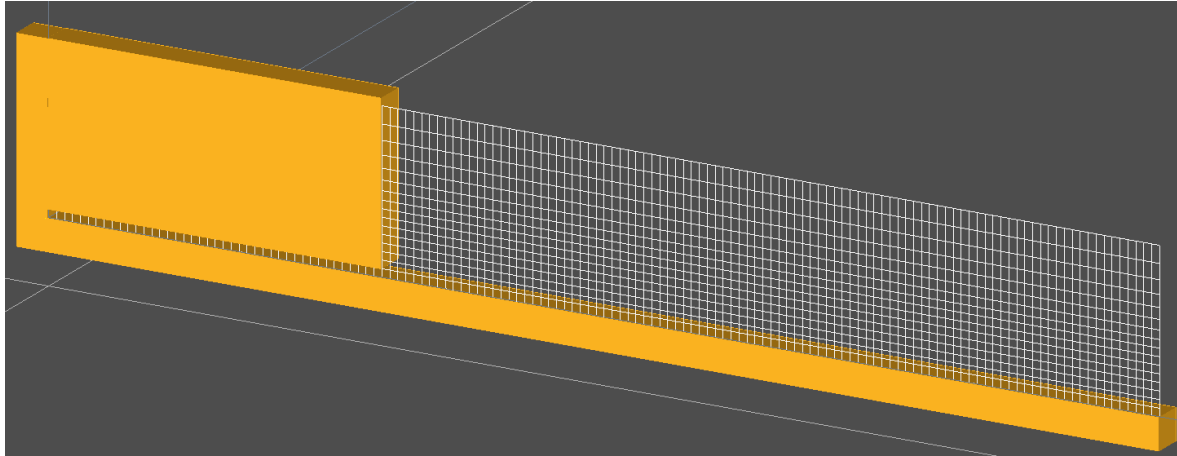
5.1.1 Λεπτομέρειες προσομοίωσης και εξεταζόμενα σενάρια

Για να ελαχιστοποιηθεί η επίδραση των οριακών συνθηκών στο άνοιγμα του αγωγού στη λύση (κυρίως στην περίπτωση όπου έχουμε έναυση στο μπροστά μέρος), το χωρίο επεκτάθηκε εκτός αυτού τόσο οριζόντια όσο και κατακόρυφα. Μια άποψη του υπολογιστικού χωρίου όσο και του πλέγματος απεικονίζεται στο παρακάτω σχήμα. Ο αγωγός έχει μήκος 1.05 m και περιέχει ομογενές μείγμα υδρογόνου-αέρα στο πρώτο 1.00 m του μήκους του. Το πλέγμα είναι διδιάστατο και επεκτείνεται οριζόντια μέχρι τα 3.5 m και κατακόρυφα μέχρι τα 0.5 m. Το εσωτερικό του αγωγού διακριτοποιήθηκε μόνο με ένα κελί στην κατακόρυφη διεύθυνση καθώς η αναλυτική λύση που παρουσιάσαμε ισχύει μόνο στην μονοδιάστατη περίπτωση.

Η **μοντελοποίηση της έναυσης** έγινε με φυσικό τρόπο. Στο κελί έναυση της καύσης, υπολογίζεται ο χρόνος *DTIGNI* που χρειάζεται για να καεί πλήρως η ποσότητα του καυσίμου που υπάρχει στο κελί αυτό από τη σχέση:

$$DTIGNI = \frac{Dx}{S_{tot}} \quad (5.1.5)$$

όπου Dx το μήκος του κελιού και S_{tot} η ταχύτητα καύσης η οποία τίθεται ίση με S_u στην περίπτωση όπου έχουμε έναυση στο μπροστά (ανοιχτό) μέρος του αγωγού και με ES_u στην περίπτωση που έχουμε έναυση στο πίσω. Στη συνέχεια, και με βάση τον χρόνο αυτό, υπολογίζεται ο ρυθμός καύσης (ο οποίος επιβάλλεται στο κελί έναυσης) έτσι ώστε η καύση στο κελί έναυσης να έχει ολοκληρωθεί στον χρόνο αυτό.



Σχήμα 5.1.2: Υπολογιστικό χωρίο προσομοίωσης σε ημι-ανοιχτό κανάλι.

Εξετάστηκαν διάφορες περιπτώσεις οι οποίες συνοψίζονται στους παρακάτω πίνακες (Πίνακας 5.1.1 για έναυση στο πίσω μέρος, Πίνακας 5.1.2 για έναυση στο μπροστά). Τα περισσότερα σενάρια εξετάστηκαν στην περίπτωση έναυσης στο πίσω μέρος του αγωγού. Τα σενάρια που εξετάστηκαν μόνο σε αυτή τη περίπτωση, δεν αναμένεται να οδηγήσουν σε διαφορετικά συμπεράσματα στη περίπτωση αλλαγής του σημείου έναυσης. Οι περιπτώσεις διαφέρουν μεταξύ τους τόσο σε φυσικές παραμέτρους, όπως η συγκέντρωση του μείγματος και η ταχύτητα καύσης, όσο και σε υπολογιστικές όπως τα σχήματα διακριτοποίησης και η πυκνότητα του πλέγματος. Συγκεκριμένα:

- Εξετάστηκαν διαφορετικά πλέγματα για να μελετηθεί η επίδραση τους στα αποτελέσματα.
- Εξετάστηκε η επίδραση της τάξεως διακριτοποίησης των χρονικών και χωρικών παραγώγων.
- Εξετάστηκαν διαφορετικές συγκεντρώσεις μείγματος. Για κάθε συγκέντρωση, προκύπτει διαφορετική ταχύτητα καύσης και λόγος επέκτασης καθώς αποτελούν συνάρτηση της συγκέντρωσης.
- Εξετάστηκε η επίδραση διαφορετικής ταχύτητας έναυσης της καύσης (παράμετρος DTIGNI).

Σε όλες τις περιπτώσεις επιλύθηκαν οι εξισώσεις διατήρησης της συνέχειας, της ορμής, της ενέργειας και της διατήρησης των συστατικών του μείγματος (υδρογόνο, οξυγόνο και νερό) χωρίς τη χρήση κάποιου μοντέλου τύρβης. Ο ρυθμός καύσης μοντελοποιήθηκε με τη μέθοδο της κλίσης (3.2.22). Για τη χρονική διακριτοποίηση δεύτερης τάξης χρησιμοποιήθηκε το σχήμα Crank-Nicolson, ενώ για τη διακριτοποίηση πρώτης τάξης οι πίσω διαφορές. Για τη χωρική διακριτοποίηση δεύτερης τάξης, στις εξισώσεις ορμής χρησιμοποιήθηκε το σχήμα φραγμένων κεντρικών διαφορών (bounded

central differences) ενώ στις υπόλοιπες εξισώσεις, το σχήμα των φραγμένων πίσω διαφορών δεύτερης τάξης (bounded second order upwind). Για διακριτοποίηση πρώτης τάξης χρησιμοποιήθηκαν οι ανάντη διαφορές σε όλες τις εξισώσεις. Το χρονικό βήμα καθορίζεται από τον αριθμό CFL ο οποίος επιλέχτηκε ίσος με 0.1.

Πίνακας 5.1.1: Σενάρια που εξετάστηκαν στην περίπτωση έναυσης στο πίσω μέρος του αγωγού. Η περίπτωση 1 αποτελεί τη βασική περίπτωση. Οι υπόλοιπες περιπτώσεις ομαδοποιούνται ως προς την παράμετρο που εξετάζεται σε σχέση με το βασικό σενάριο (οι αλλαγές ως προς τη βασική περίπτωση 1 τονίζονται με bold γραμματοσειρά).

A/A	H ₂ (%v/v)	S _u (m/s)	E ¹	Πλέγμα / Dx (m)	Χρονική Διακριτοποίηση	Χωρική Διακριτοποίηση	DTIGNI	Σχόλιο
1	18 %	1.0	5.32	Μεσαίο/ 0.025	2 ^{ης} τάξης	2 ^{ης} τάξης	$Dx/(ES_u)$	Βασικό σενάριο
2α	18 %	1.0	5.32	Αραιό/ 0.050	2 ^{ης} τάξης	2 ^{ης} τάξης	$Dx/(ES_u)$	Εξέταση διαφορετικών πλεγμάτων
2β	18 %	1.0	5.32	Πυκνό/ 0.0125	2 ^{ης} τάξης	2 ^{ης} τάξης	$Dx/(ES_u)$	
3α	18 %	1.0	5.32	Μεσαίο/ 0.025	2 ^{ης} τάξης	1^{ης} τάξης	$Dx/(ES_u)$	Εξέταση επίδρασης της τάξης διακριτοποίησης
3β	18 %	1.0	5.32	Μεσαίο/ 0.025	1^{ης} τάξης	2 ^{ης} τάξης	$Dx/(ES_u)$	
3γ	18 %	1.0	5.32	Μεσαίο/ 0.025	1^{ης} τάξης	1^{ης} τάξης	$Dx/(ES_u)$	
4	15 %	0.8	4.70	Μεσαίο/ 0.025	2 ^{ης} τάξης	2 ^{ης} τάξης	$Dx/(ES_u)$	Διαφορετική συγκέντρωση
5α	18 %	1.0	5.32	Μεσαίο/ 0.025	2 ^{ης} τάξης	2 ^{ης} τάξης	4Dx/(ES_u)	Εξέταση διαφορετικής ταχύτητας έναυσης
5β	18 %	1.0	5.32	Μεσαίο/ 0.025	2 ^{ης} τάξης	2 ^{ης} τάξης	0.25Dx/(ES_u)	

Πίνακας 5.1.2: Σενάρια που εξετάστηκαν στην περίπτωση έναυσης στο μπροστά (ανοιχτό) μέρος του αγωγού.

A/A	H ₂ (%v/v)	S _u (m/s)	E ¹	Πλέγμα / Dx (m)	Χρονική Διακριτοποίηση	Χωρική Διακριτοποίηση	DTIGNI	Σχόλιο
1	18 %	1.0	5.32	Μεσαίο/ 0.025	2 ^{ης} τάξης	2 ^{ης} τάξης	Dx/S_u	Βασικό σενάριο
2α	18 %	1.0	5.32	Αραιό/ 0.050	2 ^{ης} τάξης	2 ^{ης} τάξης	Dx/S_u	Εξέταση διαφορετικών πλεγμάτων
2β	18 %	1.0	5.32	Πυκνό/ 0.0125	2 ^{ης} τάξης	2 ^{ης} τάξης	Dx/S_u	

¹ Ο λόγος επέκτασης που παρουσιάζεται και χρησιμοποιήθηκε για τον υπολογισμό του DTIGNI και της αναλυτικής λύσης είναι αυτός που προκύπτει από την προσομοίωση (λόγος πυκνοτήτων)

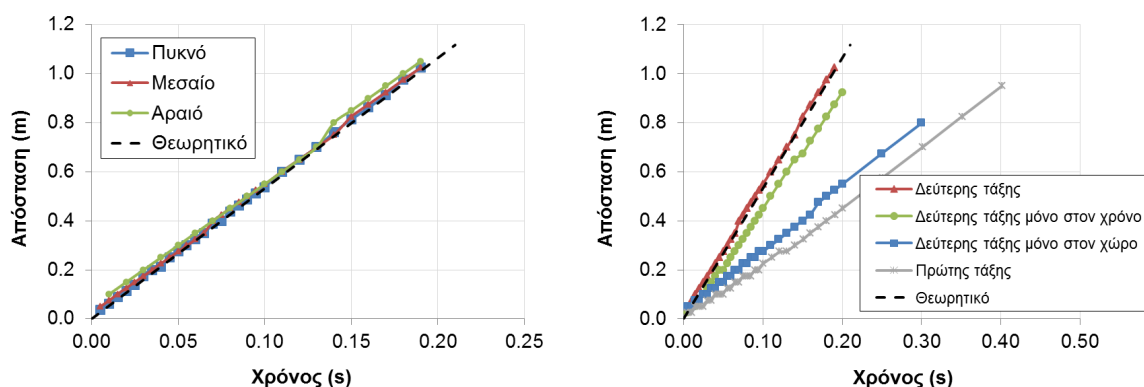
3α	15 %	0.80	4.70	Πυκνό/ 0.0125	2 ^{ης} τάξης	2 ^{ης} τάξης	Dx/S_u	Διαφορετική συγκέντρωση
3β	21 %	1.30	5.91	Πυκνό/ 0.0125	2 ^{ης} τάξης	2 ^{ης} τάξης	Dx/S_u	
3γ	29 %	2.00	7.35	Πυκνό/ 0.0125	2 ^{ης} τάξης	2 ^{ης} τάξης	Dx/S_u	

5.1.2 Έναυση στο πίσω μέρος του καναλιού

Στο σενάριο αυτό η έναυση γίνεται στο πίσω μέρος του αγωγού, στο πρώτο δηλαδή κελί. Στα παρακάτω σχήματα, απεικονίζεται η απόσταση της φλόγας από το σημείο έναυσης σε συνάρτηση με τον χρόνο. Στα διαγράμματα αυτά απεικονίζεται επίσης η θεωρητική καμπύλη όπως έχει προκύψει από τον υπολογισμό της ταχύτητας της φλόγας η οποία όπως είπαμε για την περίπτωση αυτή ισούται με ES_u .

Στο Σχήμα 5.1.3 (αριστερά) απεικονίζονται τα αποτελέσματα για τα διάφορα πλέγματα. Παρατηρούμε ότι όλα τα πλέγματα δίνουν πολύ καλά αποτελέσματα με σχετικό σφάλμα μικρότερο του 1% (Πίνακας 5.1.3). Οι καμπύλες είναι σχεδόν ευθύγραμμες σε όλο τους το μήκος, δηλαδή η ταχύτητα καύσης είναι σταθερή όπως προβλέπεται θεωρητικά. Κάποιες μικρές αποκλίσεις από την ευθεία, κυρίως στο αραιό πλέγμα, οφείλονται σε σφάλματα μέτρησης της ακριβούς θέσης της φλόγας.

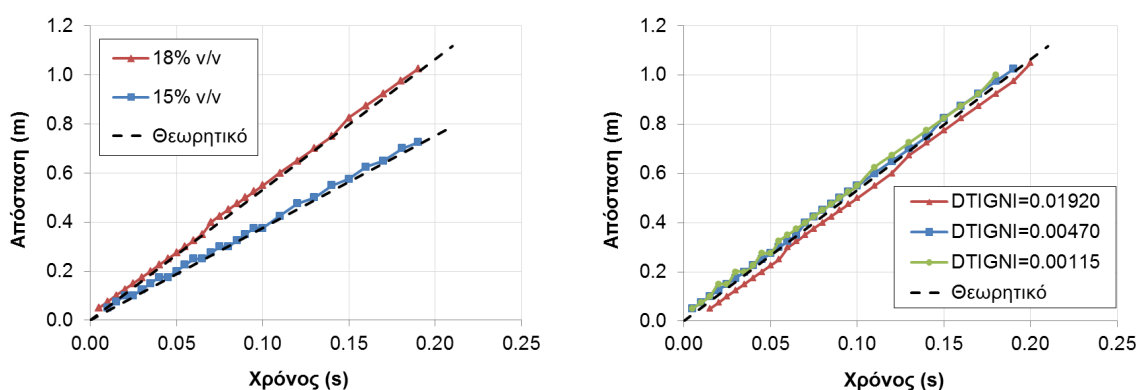
Στο Σχήμα 5.1.3 (δεξιά) απεικονίζονται τα αποτελέσματα για τα διάφορα αριθμητικά σχήματα. Παρατηρούμε ότι η χρήση σχημάτων πρώτης τάξης ακρίβειας επηρεάζει τα αποτελέσματα σε μεγάλο βαθμό. Μεγαλύτερης σημασίας φαίνεται να είναι η διακριτοποίηση στον χρόνο από ότι στο χώρο. Η απόκλιση από την αναλυτική λύση φτάνει μέχρι και το 56% όταν χρησιμοποιηθεί σχήμα πρώτης τάξης ακρίβειας τόσο στο χρόνο όσο και στο χώρο (Πίνακας 5.1.3).



Σχήμα 5.1.3: Απόσταση του μετώπου της φλόγας από το σημείο έναυσης σε συνάρτηση με τον χρόνο για (αριστερά) τρία διαφορετικά πλέγματα (περιπτώσεις 1, 2α, 2β - Πίνακας 5.1.1) και (δεξιά) για διάφορες περιπτώσεις χρονικής και χωρικής ακρίβειας διακριτοποίησης (περιπτώσεις 1, 3α, 3β, 3γ - Πίνακας 5.1.1).

Στο Σχήμα 5.1.4 (αριστερά) απεικονίζονται τα αποτελέσματα για δύο διαφορετικές συγκεντρώσεις, 18% και 15%. Αυτό το σενάριο εξετάστηκε καθώς η διαφορετική συγκέντρωση προκαλεί και διαφορετική ταχύτητα καύσης. Παρατηρούμε ότι και στις δύο περιπτώσεις η συμφωνία με τη θεωρία είναι πολύ καλή.

Στο Σχήμα 5.1.4 (δεξιά) απεικονίζονται τα αποτελέσματα για διαφορετικούς χρόνους έναυσης της καύσης. Ο χρόνος 0.0047 αντιστοιχεί στον χρόνο ο οποίος υπολογίζεται με βάση το μοντέλο που περιγράφηκε στη §5.1.1 ενώ οι άλλοι δύο αντιστοιχούν σε περίπου τετραπλάσιο και υποτετραπλάσιο χρόνο. Μικρή διαφορά παρατηρείται μόνο στην περίπτωση της πολύ αργής έναυσης της καύσης καθώς σε αυτή τη περίπτωση η καμπύλη απόστασης-χρόνου έχει μετατοπιστεί ελαφρά προς τα κάτω. Η μέση ταχύτητα όμως (κλίση της ευθείας) δεν αλλάζει σημαντικά. Η μικρή ευαισθησία του τρόπου αυτού έναυσης από την παράμετρο του μοντέλου (DTIGNI) αποτελεί πλεονέκτημα του μοντέλου σε σύγκριση με άλλους τρόπους έναυσης στους οποίους π.χ. η καύση ξεκινάει θεωρώντας ότι ένα δεδομένο ποσοστό καυσίμου στο κελί έναυσης έχει καεί ακαριαία, και οι οποίοι, όταν δοκιμάστηκαν, παρουσίασαν σημαντική ευαισθησία από το ποσοστό καυσίμου που θα επιλεγεί.



Σχήμα 5.1.4: Απόσταση του μετώπου της φλόγας από το σημείο έναυσης σε συνάρτηση με τον χρόνο για (αριστερά) δυο διαφορετικές ταχύτητες καύσης (περιπτώσεις 1, 4 - Πίνακας 5.1.1) και (δεξιά) για διαφορετικούς χρόνους έναυσης (περιπτώσεις 1, 5α, 5β - Πίνακας 5.1.1).

Πίνακας 5.1.3: Σύγκριση θεωρητικής και υπολογιστικής ταχύτητα καύσης στις περιπτώσεις που εξετάστηκαν για έναυση στο πίσω μέρος του καναλιού.

A/A (Πίνακας 5.1.1)	Παράμετρος που εξετάστηκε	Θεωρητική ταχύτητα καύσης (m/s)	Υπολογιστική ταχύτητα καύσης ¹ (m/s)	Σφάλμα (%)
1	Βασικό σενάριο	5.323	5.286	0.70
2α	Αραιό πλέγμα	5.323	5.278	0.85
2β	Πυκνό πλέγμα	5.323	5.338	0.28
3α	1 ^{ης} τάξης ως προς τον χώρο	5.323	4.595	13.7
3β	1 ^{ης} τάξης ως προς τον χρόνο	5.323	2.542	52.2
3γ	1 ^{ης} τάξης ως τον χώρο και τον χρόνο	5.323	2.336	56.1
4	Μείωση συγκέντρωσης	3.761	3.816	1.45
5α	Πιο γρήγορη έναυση	5.323	5.429	1.99
5β	Πιο αργή έναυση	5.323	5.286	0.70

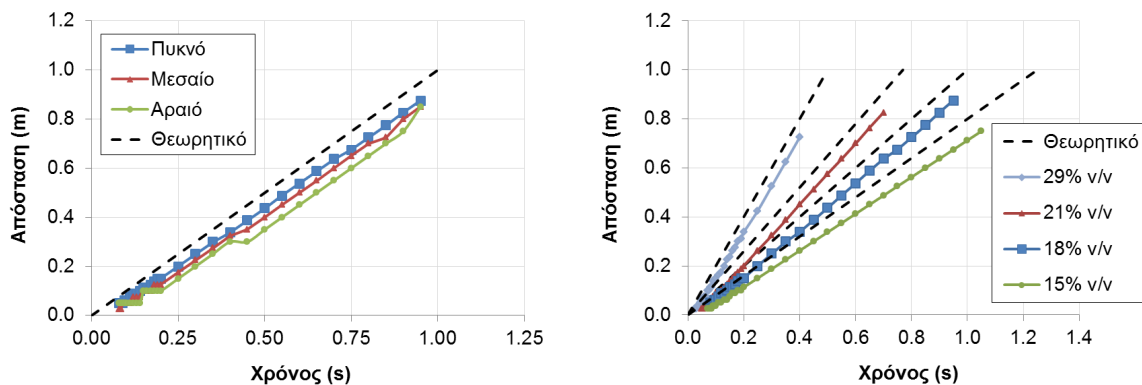
¹ Μέση ταχύτητα η οποία υπολογίστηκε με βάση τον χρόνο στον οποίο η φλόγα διέσχισε όλο το μείγμα

5.1.3 Έναυση στο μπροστά μέρος του καναλιού

Στο σενάριο αυτό η έναυση γίνεται στο τέλος του μείγματος, στο 1 m του αγωγού, κοντά δηλαδή στην έξοδο. Στα παρακάτω σχήματα, απεικονίζεται η απόσταση της φλόγας από το σημείο έναυσης σε συνάρτηση με τον χρόνο. Στα διαγράμματα αυτά απεικονίζεται επίσης η θεωρητική καμπύλη όπως έχει προκύψει από τον υπολογισμό της ταχύτητας της φλόγας η οποία όπως είπαμε για την περίπτωση αυτή ισούται με S_u . Στο σενάριο αυτό εξετάστηκε η ανεξαρτησία πλέγματος και διάφορες τιμές συγκεντρώσεων (Πίνακας 5.1.2).

Στο Σχήμα 5.1.5 (αριστερά) απεικονίζονται τα αποτελέσματα για τα διάφορα πλέγματα. Παρατηρούμε ότι σε σχέση με την προηγούμενη περίπτωση (έναυση στο πίσω μέρος), υπάρχει μια μικρή απόκλιση των αποτελεσμάτων μεταξύ των πλεγμάτων. Παρόλα αυτά το μεσαίο και το πυκνό πλέγμα δίνουν ίδιο σχετικό σφάλμα, 5.17% (Πίνακας 5.1.4). Το σφάλμα αυτό είναι αρκετά μεγαλύτερο από το αντίστοιχο της έναυσης στο πίσω μέρος.

Στο Σχήμα 5.1.5 (δεξιά) απεικονίζονται τα αποτελέσματα για τις διάφορες τιμές των συγκεντρώσεων. Οι αποκλίσεις από τα θεωρητικά αποτελέσματα είναι παρόμοιες για όλες τις συγκεντρώσεις και κυμαίνονται από 5.17 έως 7.53% (Πίνακας 5.1.4). Την μεγαλύτερη απόκλιση την παρουσιάζει η περίπτωση 15% v/v. Παρατηρούμε ότι δεν υπάρχει κάποια προφανής συσχέτιση μεταξύ σφάλματος και συγκέντρωσης.



Σχήμα 5.1.5: Απόσταση του μετώπου της φλόγας από το σημείο έναυσης σε συνάρτηση με τον χρόνο για (αριστερά) τρία διαφορετικά πλέγματα (περιπτώσεις 1, 2α, 2β - Πίνακας 5.1.2) και (δεξιά) για τέσσερις διαφορετικές συγκεντρώσεις (περιπτώσεις 1, 3α, 3β, 3γ - Πίνακας 5.1.2).

Πίνακας 5.1.4: Σύγκριση θεωρητικής και υπολογιστικής ταχύτητα καύσης στις περιπτώσεις που εξετάστηκαν για έναυση στο μπροστά μέρος του καναλιού.

A/A (Πίνακας 5.1.1)	Παράμετρος που εξετάστηκε	Θεωρητική ταχύτητα καύσης (m/s)	Υπολογιστική ταχύτητα καύσης ¹ (m/s)	Σφάλμα (%)
1	Βασικό σενάριο	1.00	0.95	5.17
2α	Αραιό πλέγμα	1.00	0.92	8.05
2β	Πυκνό πλέγμα	1.00	0.95	5.17
3α	Συγκέντρωση 15 %	0.80	0.74	7.53

¹ Μέση ταχύτητα η οποία υπολογίστηκε με βάση τον χρόνο στον οποίο η φλόγα διέσχισε το μεγαλύτερο μέρος του μείγματος

3β	Συγκέντρωση 21 %	1.30	1.23	5.33
3γ	Συγκέντρωση 29 %	2.00	1.87	6.67

Προκειμένου να διαπιστώσουμε γιατί η απόκλιση από τη θεωρητική λύση είναι μεγαλύτερη σε αυτή την περίπτωση έναυσης, δοκιμάστηκαν και κάποιες επιπλέον περιπτώσεις. Πρώτα δοκιμάστηκε η επίδραση του σχήματος διακριτοποίησης της κλίσης της μεταβλητής προόδου (ή του κλάσματος μάζας) η οποία εμπεριέχεται στον τύπο του ρυθμού καύσης (3.2.22). Η κλίση αυτή διακριτοποιείται με κεντρικές διαφορές δεύτερης τάξης, αλλά δοκιμάστηκαν και κεντρικές διαφορές τέταρτης τάξης για την περίπτωση συγκέντρωσης 15% (3α). Η χρήση του σχήματος αυτού διακριτοποίησης βελτίωσε τα αποτελέσματα αλλά όχι τόσο όσο είναι η ακρίβεια που επιτεύχθηκε στην περίπτωση της έναυσης στο πίσω μέρος. Συγκεκριμένα το σφάλμα έπεσε από το 7.53 στο 5.49%.

Μια άλλη δοκιμή που έγινε είναι η επίδραση της ταχύτητας καύσης χωρίς όμως να μεταβληθεί η συγκέντρωση του μείγματος. Κάτι τέτοιο μπορεί να μην είναι φυσικά ορθό, αλλά μπορεί να μας βοηθήσει να κατανοήσουμε τι είναι αυτό που προκαλεί την απόκλιση από τη θεωρία. Έτσι λοιπόν δοκιμάστηκε πάλι η περίπτωση συγκέντρωσης 15% (3α) αλλά μεγαλώνοντας την ταχύτητα καύσης από τα 0.8 στα 2.0 m/s. Με αυτό τον τρόπο μεγαλώνουμε την ταχύτητα καύσης αλλά διατηρούμε τον βαθμό επέκτασης E σταθερό. Σε αυτή την περίπτωση το σφάλμα έπεσε από το 7.53 στο 4.44%. Λόγω της μεγάλης μείωσης του σφάλματος δοκιμάστηκε τέλος και ακόμα μικρότερη συγκέντρωση, 10%, διατηρώντας την ταχύτητα καύσης στα 2.0 m/s. Το σφάλμα σε αυτή την περίπτωση ακόμα παραπάνω, στο 2.94%. Συμπεραίνουμε οπότε, ότι ο μεγάλος λόγος επέκτασης είναι αυτός στον οποίο οφείλεται κυρίως η απόκλιση από τη θεωρία. Ο λόγος όμως που συμβαίνει αυτό, δεν είναι εμφανής και ίσως έχει να κάνει με το ότι η περίπτωση που προσομοιώνουμε διαφέρει από την ιδεατή κατάσταση της απείρως λεπτής φλόγας από την οποία έχει προκύψει η θεωρητική λύση.

5.1.4 Συμπεράσματα

Από τις παραπάνω προσομοιώσεις συμπεραίνουμε την ορθότητα του μοντέλου μας, στα όρια που καλύπτει το σενάριο που εξετάστηκε, καθώς το βασικό μοντέλο είναι σε θέση να αναπαράγει την θεωρητική λύση. Η συμφωνία με τη θεωρητική λύση ήταν εξαιρετική για την περίπτωση της έναυσης στο πίσω μέρος του αγωγού και ικανοποιητική για την περίπτωση της έναυσης στο μπροστά. Επίσης όπως φάνηκε, επιτυγχάνεται εύκολα ανεξαρτησία πλέγματος χωρίς να χρειάζεται υπερβολικά μεγάλος αριθμός υπολογιστικών κελιών, πράγμα σημαντικό. Τέλος η χρήση δεύτερης τάξης ακρίβειας διακριτοποίησης τόσο στον χρόνο όσο και στον χώρο φαίνεται ότι είναι απαραίτητη.

Οι περιπτώσεις που θα εξεταστούν στα επόμενα κεφάλαια είναι περιπτώσεις οι οποίες προσεγγίζουν περισσότερο την περίπτωση έναυσης στο πίσω μέρος του αγωγού και όχι στο μπροστά. Επίσης στις περιπτώσεις τυρβώδους καύσης η ταχύτητα καύσης είναι συνήθως μεγαλύτερη από τις ταχύτητες που εξετάστηκαν εδώ. Έτσι το σφάλμα που παρουσιάστηκε στην περίπτωση της έναυσης στο μπροστά μέρος του αγωγού αναμένεται να είναι πολύ μικρότερο και να μην έχει επίδραση στα αποτελέσματα.

5.2 Τριδιάστατη προσομοίωση έκρηξης σε κλειστό χώρο

Στο παράγραφο αυτή, θα γίνει προσομοίωση έκρηξης σε εντελώς κλειστό χώρο. Για την περίπτωση που θα μελετήσουμε υπάρχουν και πειραματικά αποτελέσματα. Αν και θα γίνει σύγκριση με την πειραματική καμπύλη υπερπίεσης, ο κύριος σκοπός είναι η εξακρίβωση του μοντέλου συγκρίνοντας με αναλυτικές λύσεις.

5.2.1 Χαρακτηριστικές θερμοκρασίες και πιέσεις

Σε μια **έκρηξη σε κλειστό χώρο** το συνολικό έργο είναι μηδέν. Αν θεωρήσουμε αδιαβατικό σύστημα, δηλαδή ότι δεν υπάρχουν απώλειες θερμότητας από τα τοιχώματα, τότε από τον πρώτο θερμοδυναμικό νόμο προκύπτει ότι η εσωτερική ενέργεια του συστήματος παραμένει σταθερή. Θεωρώντας επίσης ιδανικό αέριο (θεώρηση η οποία μπορεί να γίνει για τις θερμοκρασίες και τις πιέσεις που μελετάμε), η εσωτερική ενέργεια εξαρτάται μόνο από τη θερμοκρασία οπότε η θερμοκρασία μπορεί να υπολογιστεί μονοσήμαντα με βάση τη σχέση

$$u = u_f + \int_{T_0}^T c_v(T) dT \quad (5.2.1)$$

όπου u_f η εσωτερική ενέργεια σχηματισμού και c_v η ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερό όγκο. Η θερμοκρασία αυτή ονομάζεται **αδιαβατική θερμοκρασία καύσης υπό σταθερό όγκο**. Με βάση την παραπάνω σχέση μπορεί να υπολογιστεί η τελική θερμοκρασία μετά την έκρηξη. Επειδή ο όγκος μένει σταθερός και η μάζα διατηρείται, η τελική πυκνότητα μετά την έκρηξη θα είναι ίδια με την αρχική. Συνεπώς από την καταστατική εξίσωση μπορεί να υπολογιστεί και η τελική πίεση του συστήματος¹.

Αν θεωρήσουμε **έκρηξη σε ανοιχτό χώρο υπό σταθερή πίεση** η οποία πραγματοποιείται αδιαβατικά, τότε από τον πρώτο θερμοδυναμικό νόμο για ανοιχτά συστήματα προκύπτει ότι η ενθαλπία του μείγματος παραμένει σταθερή. Έτσι λοιπόν ομοίως με την περίπτωση του κλειστού χώρου, η θερμοκρασία μπορεί να υπολογιστεί με βάση την ενθαλπία του μείγματος από τη σχέση

$$h = h_f + \int_{T_0}^T c_p(T) dT \quad (5.2.2)$$

όπου h_f η ενθαλπία σχηματισμού και c_p η ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερό όγκο. Η θερμοκρασία αυτή ονομάζεται **αδιαβατική θερμοκρασία καύσης υπό σταθερή πίεση**. Είναι προφανές ότι η θερμοκρασία αυτή θα είναι μικρότερη από την αδιαβατική θερμοκρασία καύσης υπό σταθερό όγκο, καθώς στη καύση υπό σταθερή πίεση έχουμε και παραγωγή έργου.

¹ Στην περίπτωση όπου δεν είχαμε τέλειο αέριο θα είχαμε εξάρτηση του c_v από την πίεση, οπότε η τελική πίεση και θερμοκρασία θα υπολογιζόντουσαν μέσα από μια επαναληπτική διαδικασία μεταξύ της σχέσης (5.2.1) και της καταστατικής εξίσωσης.

5.2.2 Φυσική του φαινομένου

Στα πρώτα στάδια της έκρηξης κοντά στο σημείο έναυσης, η καύση ουσιαστικά γίνεται υπό σταθερή πίεση η οποία είναι ίση με την αρχική, P_0 . Συνεπώς η θερμοκρασία η οποία αναπτύσσεται στην περιοχή αυτή είναι η θερμοκρασία αδιαβατικής φλόγας υπό σταθερή πίεση $T_{ad,p}$. Στη συνέχεια και καθώς η καύση εξελίσσεται, η πίεση αρχίζει να αυξάνει με αποτέλεσμα τα προϊόντα του αρχικού σταδίου της έκρηξης να αρχίσουν να συμπιέζονται στον αρχικό τους όγκο λαμβάνοντας την αρχική πυκνότητα των αντιδρώντων. Το έργο όμως το οποίο λαμβάνουν από την συμπίεση είναι μεγαλύτερο από το έργο που έδωσαν λόγω της διαστολής τους στο αρχικό στάδιο της έκρηξης καθώς η συμπίεση γίνεται υπό συνεχώς αυξανόμενη πίεση από P_0 έως P_1 ενώ η διαστολή στην χαμηλή πίεση P_0 . Από την άλλη μεριά, το μείγμα το οποίο καίγεται προς το τέλος πρώτα συμπιέζεται λόγω της συνεχώς αυξανόμενης πίεσης και στη συνέχεια διαστέλλεται λόγω καύσης στον αρχικό του όγκο. Εδώ όμως το έργο της συμπίεσης είναι μικρότερο από αυτό της εκτόνωσης, καθώς η εκτόνωση πραγματοποιείται σε μεγαλύτερη πίεση. Συνεπώς, το μείγμα που καίγεται τελευταίο χάνει κάποια από την ενέργεια του ενώ το μείγμα που καίγεται πρώτο κερδίζει ενέργεια η οποία είναι επιπλέον της ενέργειας που απελευθερώνεται λόγω καύσης. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα την δημιουργία θερμοκρασιακής διαφοράς μεταξύ των σημείων όπου η καύση πραγματοποιήθηκε πρώτα και των σημείων που πραγματοποιείται τελευταία, η οποία μπορεί να είναι ακόμα και αρκετές εκατοντάδες βαθμοί (Lewis & Elbe 1987, §V.15).

Συνεπώς, για την εξακρίβωση του μοντέλου μας θα γίνουν οι ακόλουθες συγκρίσεις

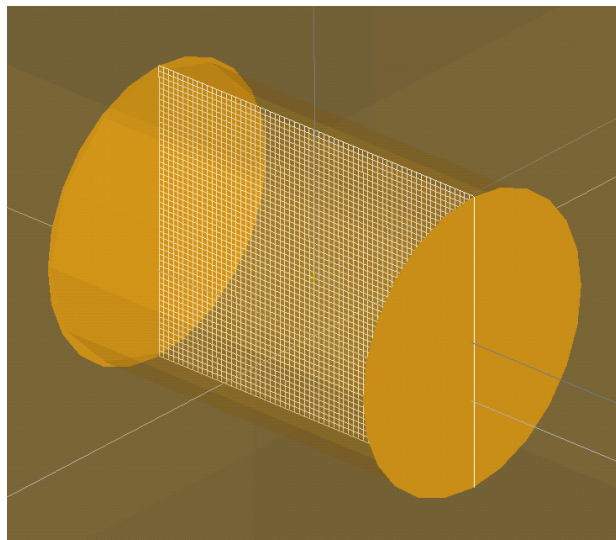
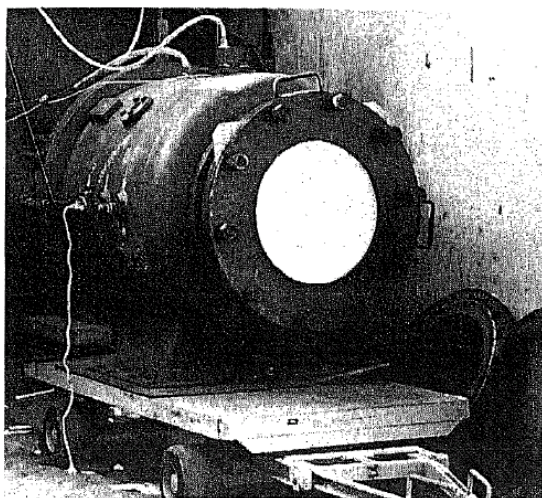
- Σύγκριση της θερμοκρασίας των προϊόντων στο αρχικό στάδιο της έκρηξης με την αδιαβατική θερμοκρασία καύσης υπό σταθερή πίεση, $T_{ad,p}$
- Σύγκριση της θερμοκρασίας μετά το τέλος της έκρηξης με την αδιαβατική θερμοκρασία καύσης υπό σταθερό όγκο, $T_{ad,v}$ (για να πραγματοποιηθεί αυτή η σύγκριση θα πρέπει να έχει αποκατασταθεί η θερμική ισορροπία).
- Σύγκριση της μέγιστης θερμοκρασίας κατά τη διάρκεια της έκρηξης με τη θερμοκρασία που θα είχαν τα προϊόντα αν τα συμπιέζαμε αδιαβατικά από την αρχική πίεση και από τη θερμοκρασία $T_{ad,p}$ (δηλαδή σαν να είχαμε καύση υπό σταθερό όγκο) στην εκάστοτε πίεση του συστήματος. Σύμφωνα με την ανάλυση που έγινε προηγουμένως, η θερμοκρασία που προκύπτει από τη αδιαβατική συμπίεση είναι η θεωρητικώς μέγιστη θερμοκρασία που αναπτύσσεται γύρω από το σημείο έναυσης όταν η έκρηξη ολοκληρώνεται.
- Σύγκριση της πίεσης μετά το τέλος της έκρηξης με την πίεση που αντιστοιχεί στην αδιαβατική θερμοκρασία καύσης υπό σταθερό όγκο, $P_{ad,v}$.

5.2.3 Λεπτομέρειες προσομοίωσης και αποτελέσματα

Η πειραματική διάταξη απεικονίζεται στο Σχήμα 5.2.1 (αριστερά). Πρόκειται για ένα σχεδόν κυλινδρικό δοχείο το οποίο έχει εσωτερική διάμετρο 0.97 m και όγκο 0.95 m³. Το δοχείο αυτό μοντελοποιήθηκε σαν ένας κύλινδρος ίδια εσωτερικής διαμέτρου και μήκους 1.2856 m, όπως απεικονίζεται στο Σχήμα 5.2.1 (δεξιά). Στο εσωτερικό του υπάρχει ομογενές μείγμα υδρογόνου

αέρα 29.44%. Η έναυση γίνεται στο κέντρο του μείγματος. Η αρχική πίεση και θερμοκρασία είναι ίσες με 101,800 Pa και με 281 K αντίστοιχα.

Το βασικό πλέγμα που χρησιμοποιήθηκε και απεικονίζεται επίσης στο σχήμα είναι ομοιόμορφο και έχει ανάλυση 0.02 m και συνολικό πλήθος κελιών 124,345. Δοκιμάστηκαν άλλα δύο πλέγματα, ένα πιο αραιό ανάλυσης 0.037 m με πλήθος κελιών 19,635, και ένα πυκνότερο ανάλυσης 0.01 με πλήθος κελιών 946,473.



Σχήμα 5.2.1: Αριστερά: Απεικόνιση της πειραματικής διάταξης. Δεξιά: Υπολογιστικό μοντέλο της γεωμετρίας και το πλέγμα σε ΧΖ επίπεδο (δεξιά).

Το μοντέλο καύσης που χρησιμοποιήθηκε είναι αυτό που παρουσιάστηκε στη §4.2 ενώ για την τύρβη ακολουθήθηκε η μέθοδος LES. Οι παράμετροι του μοντέλου καύσης που χρησιμοποιήθηκαν παρουσιάζονται τον παρακάτω πίνακα. Εδώ, δε θα σταθούμε τόσο στο μοντέλο καύσης καθώς αυτό επηρεάζει μόνο τη δυναμική του φαινομένου και όχι τις χαρακτηριστικές πιέσεις και θερμοκρασίες τις οποίες θέλουμε να συγκρίνουμε με τη θεωρία. Το ίδιο ισχύει για την γεωμετρία του δοχείου. Για τη χρονική διακριτοποίηση χρησιμοποιήθηκε το σχήμα Crank-Nicolson ενώ για τη χωρική διακριτοποίηση των εξισώσεων ορμής χρησιμοποιήθηκε το σχήμα φραγμένων κεντρικών διαφορών (bounded central differences) ενώ για τις υπόλοιπες εξισώσεις φραγμένες πίσω διαφορές δεύτερης τάξης (bounded second order upwind). Ο αριθμός CFL επιλέχτηκε ίσως με 0.1 το οποίο για την περίπτωση του πλέγματος ανάλυσης 0.02 m έδωσε χρονικά βήματα γύρω από $7.0e-005$ s. Η μοντελοποίηση της έναυσης έγινε με παρόμοιο τρόπο με την προηγούμενη περίπτωση (§5.1.1). Ο χρόνος έναυσης υπολογίστηκε από τη σχέση $DTIGNI = 0.5Dx/(ES_{u0})$ ($8.0e-04$ για το βασικό πλέγμα).

Πίνακας 5.2.1: Παράμετροι μοντέλου καύσης.

Παράμετρος	Τιμή
Στρωτή ταχύτητα καύσης S_{L0}	2.00 m/s
Εκθέτης ε	0.58
Λόγος επέκτασης E	7.3
Σταθερά ψ	1.00

Ακτίνα R_0	1.00 m
Συντελεστής Ξ_{lp}	1.00
Ακτίνα R_{lp}	-
Διάσταση φράκταλ	-

Στο Σχήμα 5.2.2 απεικονίζεται η μέγιστη θερμοκρασία σε συνάρτηση με τον χρόνο (αριστερά μέχρι τα 0.07 s, δεξιά μέχρι 3.0 s) όπως αυτή εκτιμήθηκε από το μοντέλο. Στο ίδιο σχήμα απεικονίζονται και οι θεωρητικές αδιαβατικές θερμοκρασίες καύσης¹. Η αδιαβατική θερμοκρασία καύσης υπό σταθερή πίεση για το μείγμα αυτό είναι ίση με $T_{ad,p}=2502.12$ K ενώ υπό σταθερό όγκο με $T_{ad,v}=3021.63$ K. Εκτός από τις αδιαβατικές αυτές θερμοκρασίες στο σχήμα απεικονίζεται επίσης η θερμοκρασία από την αδιαβατική συμπίεση των προϊόντων από τη θερμοκρασία $T_{ad,v}$ και από την αρχική πίεση στην (εκτιμώμενη από το μοντέλο) πίεση που αντιστοιχεί στην κάθε χρονική στιγμή. Με βάση την ανάλυση που έγινε στην προηγούμενη παράγραφο, η θερμοκρασία αυτή ισούται με τη μέγιστη θερμοκρασία που επικρατεί σε κάθε χρονική στιγμή. Η μέγιστη αυτή θερμοκρασία αναπτύσσεται στην περιοχή η οποία κάηκε πρώτη, δηλαδή στην περιοχή του σημείου έναυσης.

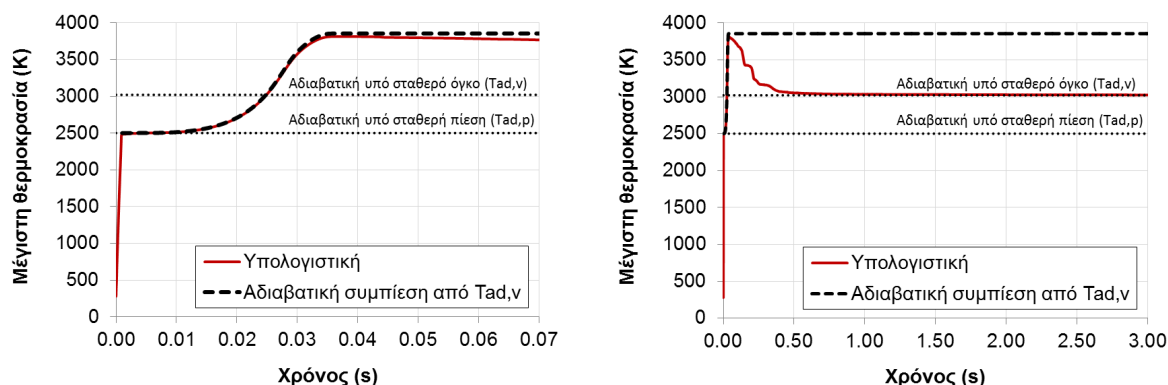
Παρατηρούμε ότι στην πρώτη φάση της έκρηξης, από 0 μέχρι 0.01 s, η θερμοκρασία έχει σταθερή τιμή (αν εξαιρέσουμε το μικρό μεταβατικό στάδιο της έναυσης) και ίση με την αδιαβατική θερμοκρασία υπό σταθερή πίεση, κάτι που είναι σε συμφωνία με τη θεωρία. Στη συνέχεια η θερμοκρασία ανεβαίνει, λόγω αύξησης της πίεσης στο δοχείο. Αυτό μπορεί να επιβεβαιωθεί από το Σχήμα 5.2.3 στο οποίο η καμπύλη της μέγιστης θερμοκρασίας απεικονίζεται μαζί με την καμπύλη της πίεσης. Η αύξηση της πίεσης οδηγεί στην συμπίεση των προϊόντων που έχουν παραχθεί, συνεπώς στην αύξηση της θερμοκρασίας τους πάνω από την $T_{ad,p}$. Η μέγιστη θερμοκρασία που αναπτύσσεται στο μείγμα είναι 3873.69 K. Ο θεωρητικός υπολογισμός της θερμοκρασίας μέσω της θεώρησης της αδιαβατικής συμπίεσης των προϊόντων, παρατηρούμε ότι είναι σε εξαιρετική συμφωνία με τα αποτελέσματα της μέγιστης θερμοκρασίας². Παρέκκλιση έχουμε μόνο μετά τα 0.04 s, καθώς σε αυτή τη χρονική στιγμή η καύση έχει ολοκληρωθεί και θερμική ισορροπία αρχίζει να αποκαθίσταται στο μείγμα (η μέγιστη θερμοκρασία μειώνεται σταδιακά μέχρι το μείγμα να αποκτήσει ομοιόμορφη θερμοκρασία). Παρατηρούμε ότι στα 0.50 s η θερμοκρασία έχει πέσει στη θερμοκρασία αδιαβατικής καύσης υπό σταθερό όγκο όπου και σταθεροποιείτε. Η θερμοκρασία αυτή είναι η θερμοκρασία που θεωρητικός αναμέναμε να έχει όλο το μείγμα με την ολοκλήρωση της καύσης αν αγνοούσαμε τα μεταβατικά φαινόμενα.

Τα παραπάνω επιβεβαιώνεται και από τις ισούψεις της θερμοκρασίας που παρουσιάζονται στο Σχήμα 5.2.4, σε επίπεδο που περνάει από το σημείο έναυσης. Η μεγαλύτερη θερμοκρασία στο κέντρο των προϊόντων είναι εμφανής. Από τα 0.035 s όπου η καύση έχει ολοκληρωθεί και μετά, η θερμοκρασία αρχίζει να διαχέεται και οι διαφορές να εξομαλύνονται. Στα 0.050 s το μείγμα έχει

¹ Οι θερμοκρασίες αυτές υπολογίστηκαν μέσω του θερμοδυναμικού πακέτου του κώδικα ώστε η σύγκριση με την προσομοίωση να μην εμπεριέχει λάθη σε εκτιμήσεις θερμοδυναμικών μεγεθών (π.χ. σχέση για το $C_p(T)$).

² Οι ελάχιστες διαφορές που παρατηρούνται προς το τέλος της καύσης (μέγιστη θερμοκρασία που επιτυγχάνεται ελάχιστα μικρότερη από τη θεωρητική της αδιαβατικής συμπίεσης) οφείλονται στο ότι στην προσομοίωση η συμπίεση δεν είναι αυστηρώς αδιαβατική λόγω της ύπαρξης θερμικών απωλειών στο υπόλοιπο μείγμα.

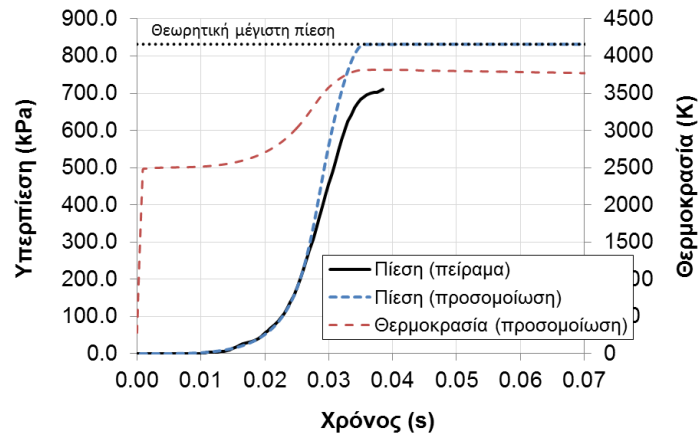
παντού σχεδόν την ίδια θερμοκρασία. Συνοψίζοντας λοιπόν, παρατηρούμε και ότι η συμφωνία μεταξύ προσομοίωσης και θεωρίας είναι εξαιρετική όσο αφορά τα τρία πρώτα σημεία που παρουσιάστηκαν στο τέλος της §5.2.2.



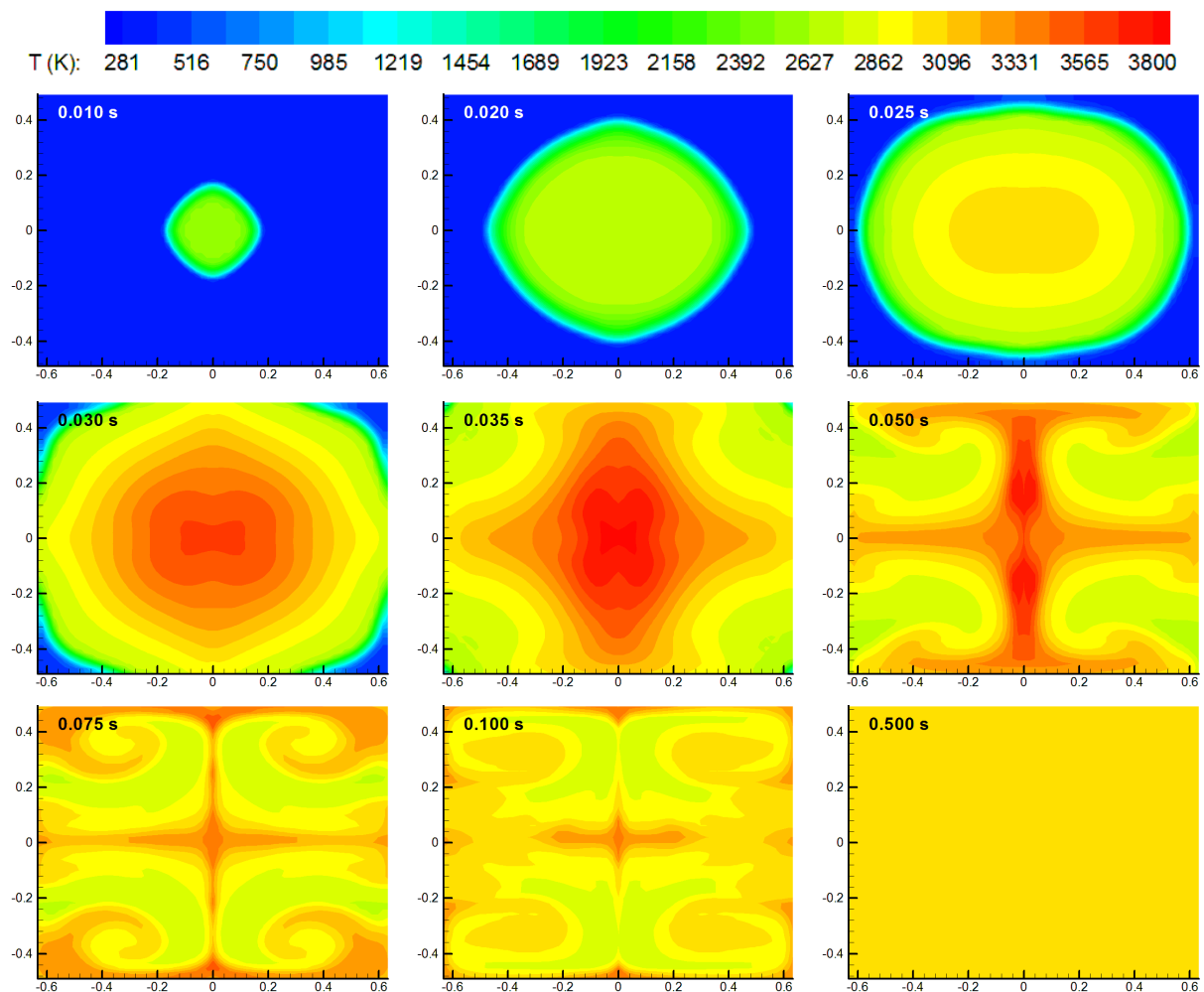
Σχήμα 5.2.2: Υπολογιστικά εκτιμώμενη μέγιστη θερμοκρασία συναρτήσει του χρόνου, αριστερά έως 0.07 s και δεξιά έως 3.00 s. Στο σχήμα απεικονίζονται επίσης (με διακεκομμένες γραμμές) οι θεωρητικές τιμές της αδιαβατικής θερμοκρασίας φλόγας υπό σταθερή πίεση ($T_{ad,p}$) και υπό σταθερό όγκο ($T_{ad,v}$) καθώς και η προβλεπόμενη θεωρητικά θερμοκρασία από την αδιαβατική συμπίεση από την αρχική πίεση και από θερμοκρασία $T_{ad,v}$ στην (εκτιμώμενη) πίεση που αντιστοιχεί στην κάθε χρονική στιγμή.

Το τελευταίο σημείο παρουσιάστηκε στη §5.2.2 αφορά τη σύγκριση των πιέσεων στο τέλος της καύσης. Στο Σχήμα 5.2.3 απεικονίζεται η χρονική εξέλιξη της πίεσης μέσα στο δοχείο. Παρατηρούμε η προβλεπόμενη μέγιστη πίεση είναι σε εξαιρετική συμφωνία με την θεωρητικά μέγιστη (§5.2.1). Η σύγκριση προσομοίωσης με πειράματος είναι επίσης ικανοποιητική. Παρατηρούμε ότι η μέγιστη πίεση που επιτυγχάνεται είναι μεγαλύτερη από την πειραματική. Αυτό οφείλεται κυρίως το απλοποιημένο μοντέλο χημείας μιας αντίδρασης το οποίο χρησιμοποιήθηκε. Στην πραγματικότητα και λόγω της πολύ υψηλής θερμοκρασίας που αναπτύσσεται παρατηρείται το φαινόμενο του διαχωρισμού των προϊόντων (dissociation) (Versteeg & Malalasekera 2007, §12.8) το οποίο μπορεί να καταναλώσει σημαντική ποσότητα ενέργειας με αποτέλεσμα να μειώνεται η τελική θερμοκρασία και πίεση στο δοχείο. Για να παράδειγμα η αδιαβατική θερμοκρασία καύσης υπό σταθερή πίεση αναμένεται να πέσει από τους περίπου 2500 K στους 2380 K θεωρώντας ακριβή καύση (Baraldi et al. 2010). Συνεπώς στο τέλος της καύσης διάφορα άλλα χημικά στοιχεία και ενώσεις υπάρχουν στο μείγμα όπως OH, O, H και NO. Συνεπώς η θεώρηση ενός πιο περίπλοκου μοντέλου χημικών αντιδράσεων σε αυτή την περίπτωση είναι απαραίτητη εάν θέλουμε να υπολογίσουμε την τελική πίεση με μεγαλύτερη ακρίβεια, όπως για παράδειγμα γίνεται στην εργασία των Quillatre et al. (2013).

Παρατηρώντας την καμπύλη υπερπίεσης (Σχήμα 5.2.3) και τις ισοϋψείς της θερμοκρασίας (Σχήμα 5.2.4), παρατηρούμε ότι η μεγάλη αύξηση της πίεσης στο δοχείο ξεκινάει περίπου στα 0.025 s όπου το μεγαλύτερο μέρος των αντιδρώντων έχει καταναλωθεί και η φλόγα έχει αρχίσει να ακουμπάει τα τοιχώματα. Συνεπώς το μείγμα το οποίο καίγεται τελευταίο είναι και αυτό που συνεισφέρει περισσότερο στην αύξηση της πίεσης στο δοχείο το οποίο είναι σε συμφωνία με την ανάλυση που έγινε στη §5.2.2.



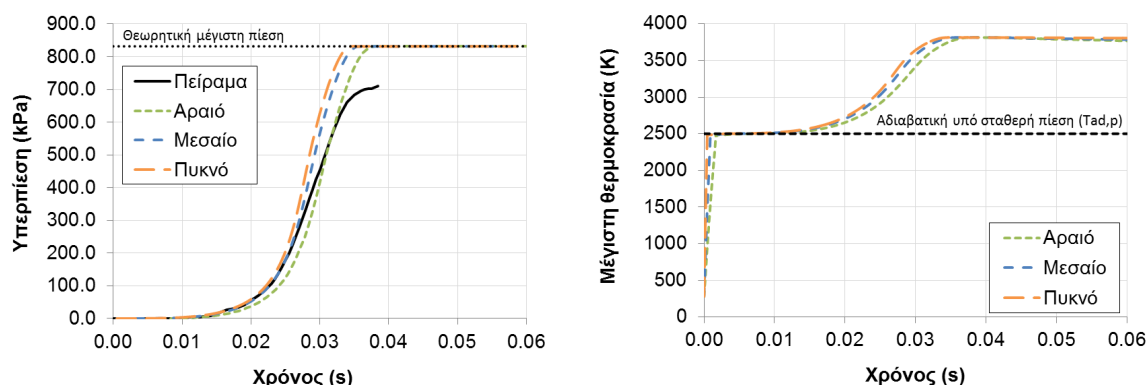
Σχήμα 5.2.3: Υπερπίεση και μέγιστη θερμοκρασία στο δοχείο σε συνάρτηση με το χρόνο.



Σχήμα 5.2.4: Ισοϋψείς θερμοκρασίας για διάφορες χρονικές στιγμές σε επίπεδο ΧΖ που περνάει από το κέντρο του δοχείου.

Τέλος, στο Σχήμα 5.2.5 απεικονίζεται η πίεση και η μέγιστη θερμοκρασία για τρία διαφορετικά πλέγματα, το μεσαίο (το οποίο χρησιμοποιήθηκε στα αποτελέσματα που παρουσιάστηκαν), το αραιό και το πυκνό. Παρατηρούμε ότι υπάρχει μια μικρή διαφορά στο προφίλ της πίεσης και θερμοκρασίας μεταξύ αραιού και μεσαίου πλέγματος. Η διαφορά μεταξύ μεσαίου και πυκνού είναι

αρκετά μικρότερη. Συνεπώς μπορούμε να συμπεράνουμε με ασφάλεια ότι τα αποτελέσματα μας είναι ανεξάρτητα του πλέγματος.



Σχήμα 5.2.5: Ανεξαρτησία πλέγματος – Σύγκριση πίεσης και μέγιστης θερμοκρασίας για τρία διαφορετικά πλέγματα (αραιό: 0.037, μεσαίο: 0.020, πυκνό: 0.010).

5.2.3.1 Απώλειες θερμότητας από τα τοιχώματα

Μια επιπλέον πιθανή αιτία υπερεκτίμησης της πίεσης σε σύγκριση με το πείραμα (εκτός αυτής που αναφέρθηκε στην προηγούμενη παράγραφο) είναι το γεγονός ότι αμελήθηκαν οι απώλειες θερμότητας από τα τοιχώματα του δοχείου, καθώς σαν οριακή συνθήκη για τη θερμοκρασία στα τοιχώματα επιλέχτηκε αυτή της μηδενικής κλίσης (zero gradient). Για να εξετάσουμε το γεγονός αυτό, πραγματοποιήθηκαν δύο επιπλέον προσομοιώσεις. Στην πρώτη, επιλύεται η μονοδιάστατη εξίσωση ενέργειας μέσα στο στερεό όριο. Θεωρήθηκαν δύο στρώματα, ένα στρώμα σιδήρου πάχους 0.01 m, θερμικής αγωγιμότητας 30 J/m/s/K, ειδικής θερμοχωρητικότητας 500 J/kg/K και πυκνότητας 8000 kg/m³, το οποίο ακολουθείται από ένα στρώμα αέρα πάχους 2.0 m θερμικής αγωγιμότητας 0.0254 J/m/s/K. Σαν οριακή συνθήκη στο τέλος του στρώματος αέρα επιλέχτηκε σταθερή θερμοκρασία 281 K. Στη δεύτερη προσομοίωση επιλέχτηκε οριακή συνθήκη στο τοίχωμα σταθερής θερμοκρασίας 281 K.

Η συνθήκη της σταθερής θερμοκρασίας και η συνθήκη μηδενικής κλίσης, αποτελούν ουσιαστικά τις δύο ακραίες περιπτώσεις απωλειών θερμότητας, καθώς στην πρώτη οι απώλειες θερμότητας είναι μέγιστες λόγω της μέγιστης διαφοράς θερμοκρασίας με το τοίχωμα (το τοίχωμα έχει σταθερή θερμοκρασία και δεν ζεσταίνεται από το μείγμα) ενώ στη δεύτερη οι απώλειες είναι μηδενικές. Συνεπώς η περίπτωση που επιλύεται η μετάδοση θερμότητας μέσα στο τοίχωμα μπορεί να θεωρηθεί σαν ενδιάμεση αυτών των δύο καταστάσεων.

Στο Σχήμα 5.2.6 απεικονίζεται η πίεση και η θερμοκρασία για τις τρεις οριακές συνθήκες θερμοκρασίας στο τοίχωμα:

1. Μηδενική κλίση
2. Σταθερή θερμοκρασία
3. Επίλυση μέσα στο τοίχωμα της μονοδιάστατης εξίσωσης μεταφοράς θερμότητας

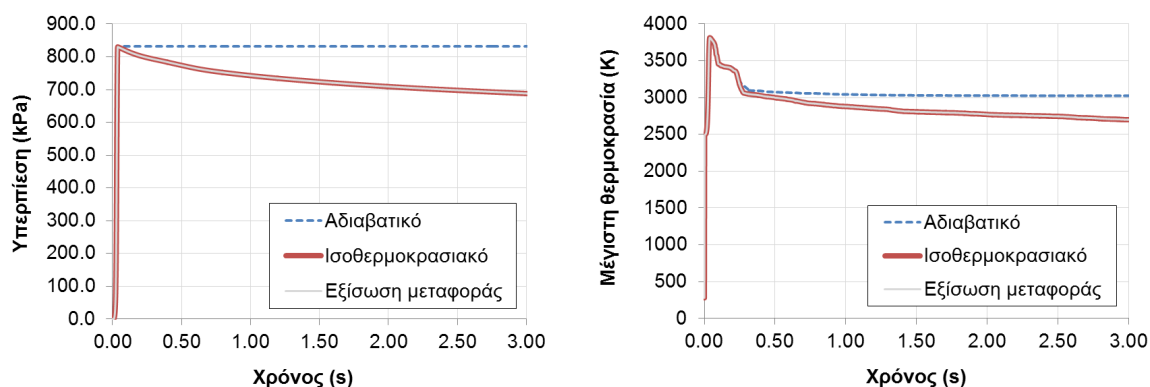
Παρατηρούμε ότι τα αποτελέσματα μεταξύ της δεύτερης και της τρίτης περίπτωσης ταυτίζονται. Αυτό οφείλεται στον πολύ μικρό συντελεστή του υλικού που επιλέχτηκε. Ο συντελεστής θερμικής διάχυσης ισούται με:

$$\alpha = \frac{k}{\rho C_p} \quad (5.2.3)$$

όπου k η θερμική αγωγιμότητα του υλικού. Οι ιδιότητες του υλικού που επιλέχθηκαν και αναφέρθηκαν προηγουμένως (οι οποίες αντιστοιχούν σε αυτές του σιδήρου), δίνουν συντελεστή θερμικής διάχυσης ίσο με $7.5 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$. Η τιμή αυτή είναι πολύ μικρή, με αποτέλεσμα η θερμότητα να διαχέεται με πολύ αργό ρυθμό στο υλικό. Συνεπώς η θερμοκρασία του αυξάνεται ελάχιστα κατά στο μικρό χρονικό διάστημα που μελετάμε οπότε τα αποτελέσματα δεν διαφέρουν σε σύγκριση με την περίπτωση της σταθερής θερμοκρασίας.

Στο σχήμα παρατηρούμε επίσης ότι η πτώση της πίεσης και της θερμοκρασίας γίνεται με πολύ αργό ρυθμό, ενώ μέχρι σχεδόν τα 0.1 s τα αποτελέσματα είναι ταυτόσημα και στις τρεις περιπτώσεις. Συμπεραίνονται λοιπόν τα ακόλουθα:

- Η οριακή συνθήκη της θερμοκρασίας δεν επηρεάζει την εξέλιξη της έκρηξης. Αυτό οφείλεται στο ότι η φλόγα έρχεται σε επαφή με τα τοιχώματα του δοχείου μόνο στο τέλος της έκρηξης. Αν η φλόγα βρισκόταν σε επαφή με τα τοιχώματα κατά τη διάρκεια της έκρηξης για αρκετό χρονικό διάστημα οι διαφορές μπορεί να ήταν μεγαλύτερες.
- Η πτώση της θερμοκρασίας γίνεται με πολύ αργό ρυθμό σε σχέση με τη διάρκεια της έκρηξης. Συνεπώς για να έχουμε επίδραση των απωλειών θερμότητας από τα τοιχώματα θα πρέπει (εκτός της προηγούμενης παρατήρησης) η έκρηξη να γίνεται με αργό σχετικά ρυθμό. Επειδή όμως συνήθως ο χαρακτηριστικός χρόνος μιας έκρηξης είναι πολύ μικρός (και ειδικά στην τυρβώδη καύση του υδρογόνου), οι απώλειες θερμότητας αγνοούνται.



Σχήμα 5.2.6: Προφίλ πίεσης (αριστερά) και μέγιστης θερμοκρασίας (δεξιά) για τρεις περιπτώσεις: Αδιαβατικά τοιχώματα, ισοθερμοκρασιακά τοιχώματα (281 K) και επίλυση μέσα στο τοίχωμα της μονοδιάστατης εξίσωσης μεταφοράς θερμότητας.

Τέλος, ένας επιπλέον παράγοντας μειώσεις της θερμοκρασίας είναι η μετάδοση θερμότητας μέσω ακτινοβολίας. Η επίδραση της ακτινοβολίας δεν μελετήθηκε καθώς, όμοια με την περίπτωση μετάδοσης θερμότητας με συναγωγή και αγωγή που παρουσιάσαμε προηγουμένως, δεν αναμένεται να έχει μεγάλη επίδραση στα αποτελέσματα λόγω της σύντομης διάρκειας των εκρήξεων. Ως εκ τούτου και λαμβάνοντας υπ' όψιν την πολυπλοκότητα των περισσότερων μοντέλων ακτινοβολίας και την επιβάρυνση στον υπολογιστικό χρόνο, γενικά αμελούνται σε περιπτώσεις σαν και αυτές που εξετάζουμε στην παρούσα διατριβή.

5.2.4 Συμπεράσματα

Από τις παραπάνω προσομοιώσεις διαπιστώνεται η ορθότητα του μοντέλου μας, στα όρια που καλύπτει το σενάριο που εξετάστηκε, καθώς αυτό αναπαράγει με πάρα πολύ καλή ακρίβεια τις θεωρητικές λύσεις τόσο των τιμών της θερμοκρασίας όσο και της πίεσης. Επίσης επιβεβαιώθηκε η καλή συμπεριφορά του ως προς την ανεξαρτησία πλέγματος που είχε επισημανθεί και στο προηγούμενο σενάριο (§5.1). Τέλος όσο αφορά τις απώλειες θερμότητας με συναγωγή από το ρευστό στα τοιχώματα, διαπιστώθηκε ότι αυτές δεν επηρεάζουν την πορεία της έκρηξης και μπορούν να αμεληθούν.

Κεφάλαιο 6

Προσομοίωση έκρηξης μικρής κλίμακας σε αγωγό με εμπόδια

An expert is a man who has made all the mistakes which can be made.

Niels Bohr

Στο κεφάλαιο αυτό θα γίνει προσομοίωση έκρηξης αέριου μείγματος υδρογόνου-αέρα σε αγωγό μικρής κλίμακας με εμπόδια. Ο βασικός σκοπός της προσομοίωσης είναι η αξιολόγηση της μεθοδολογίας που περιγράφηκε στο Κεφάλαιο 4 σε περιβάλλον μικρής κλίμακας ώστε να εξαιρέσουμε τα φαινόμενα που εμφανίζονται σε μεγαλύτερες κλίμακες και να επικεντρωθούμε στην αξιολόγηση της μοντελοποίησης της αστάθειας θερμοδιάχυσης και της αλληλεπίδρασης της φλόγας με την τύρβη. Έτσι στη μοντελοποίηση αυτή θα δοθεί η δυνατότητα να αξιολογήσουμε την τροποποίηση του μοντέλου καύσης που αναφέραμε στη §4.2 και αφορά την κρίσιμη ακτίνα μετάβασης στην αστάθεια αυτή.

6.1 Εισαγωγή

Το πείραμα που θα προσομοιώσουμε διεξήχθη στο πανεπιστήμιο του Σύδνεϋ. Αναλυτική περιγραφή του πειράματος με παρουσίαση αποτελεσμάτων γίνεται στην εργασία των Masri et al. (2012), ενώ κάποια επιπλέον αποτελέσματα υπάρχουν σε εργασίες υπολογιστικών προσομοιώσεων που θα αναφέρουμε στη συνέχεια καθώς και στην διδακτορική διατριβή του Gubba (2009). Πραγματοποιήθηκε μια σειρά πολλών πειραμάτων στην γεωμετρία που παρουσιάζεται στο Σχήμα 6.1.1 και Σχήμα 6.2.1. Πρόκειται για έναν ευθύγραμμο αγωγό, στον οποίο υπάρχει η δυνατότητα να τοποθετηθούν κάθετα τρεις σειρές εμποδίων (κατακόρυφη δοκοί), καθώς και ένα μεγαλύτερο εμπόδιο τετραγωνικής διατομής. Ο αγωγός είναι ανοιχτός στο ένα του άκρο. Το μήκος του είναι 250 mm και η διατομή του τετραγωνική με μήκος πλευράς 50 mm. Αναλυτικά οι διαστάσεις της γεωμετρίας φαίνονται στο σχήμα. Ομογενές μείγμα καυσίμου-αέρα καταλαμβάνει όλο το μήκος του αγωγού με την ανάφλεξη να πραγματοποιείται στο πίσω μέρος του. Πρόκειται για καλά ελεγχόμενα πειράματα με καλή επαναληψιμότητα (Gubba et al. 2011). Τα πειράματα αφορούσαν διάφορες διατάξεις των εμποδίων και διάφορα καύσιμα (προπάνιο και φυσικό αέριο σε στοιχειομετρική αναλογία, και υδρογόνο σε λόγο ισοδυναμίας καυσίμου-αέρα 0.7 ώστε να αποφευχθούν πολύ μεγάλες πιέσεις). Εμείς θα μελετήσουμε πρωτίστως την έκρηξη υδρογόνου, στη διάταξη στην οποία υπάρχουν και οι τρεις σειρές εμποδίων καθώς με αυτή τη διάταξη αναπτύσσεται πιο έντονη τύρβη. Σαν τελευταίο εμπόδιο χρησιμοποιήθηκε το εμπόδιο πλευράς 12 mm, καθώς για αυτή την πειραματική διάταξη υπάρχει διαθέσιμη η χρονική εξέλιξη της πίεσης. Για

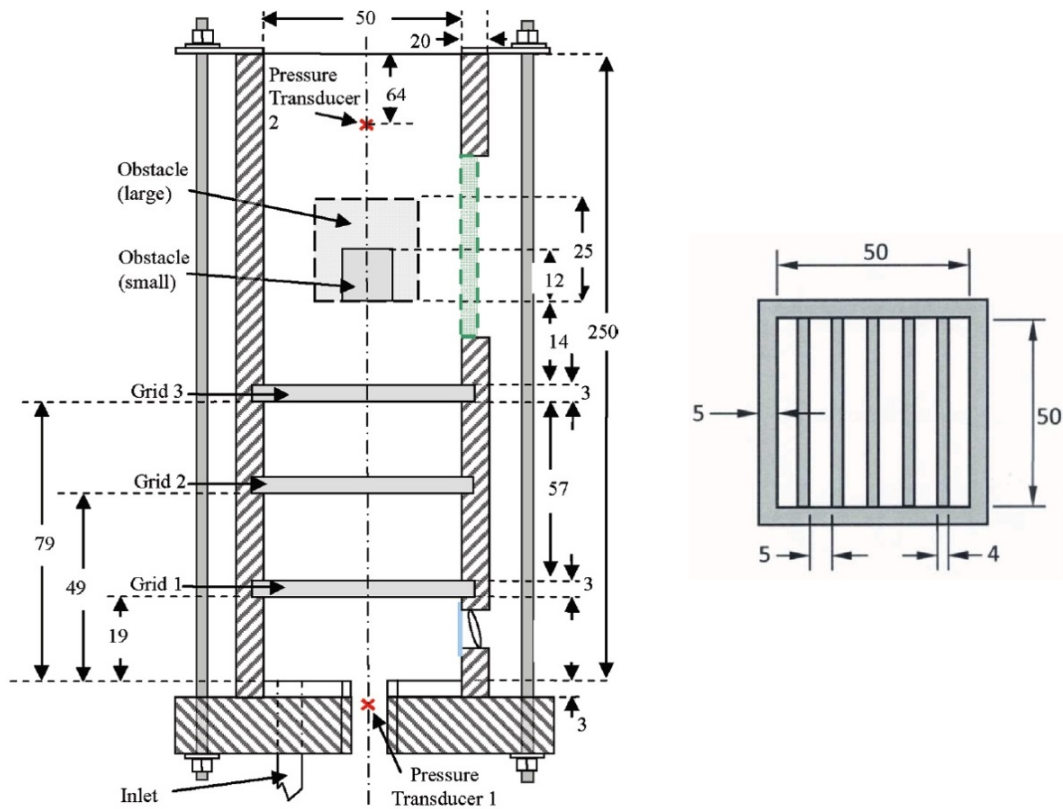
την ίδια διάταξη εξετάσαμε και την περίπτωση όπου το καύσιμο είναι το προπάνιο, έτσι ώστε να αναδειχθεί η ικανότητα του μοντέλου να προσομοιώνει εκρήξεις και άλλων αερίων καυσίμων και να τονιστεί η ανάγκη μοντελοποίησης της αστάθειας θερμοδιάχυσης στην περίπτωση του υδρογόνου.

Οι Gubba et al. (2008; 2011) εκτέλεσαν LES προσομοιώσεις του πειράματος αυτού για την περίπτωση του προπανίου (στοιχειομετρική αναλογία) για διάφορες διατάξεις των εμποδίων. Το υποπλεγματικό μοντέλο που χρησιμοποίησαν είναι το δυναμικό μοντέλο Smagorinsky, ενώ θεωρήθηκε χημική αντίδραση μιας εξίσωσης. Το μοντέλο καύσης που χρησιμοποιήθηκε στην πρώτη εργασία ήταν ένας συνδυασμός του μοντέλου θραύσης των δινών (EBU) και μοντέλου επιφανειακής πυκνότητας φλόγας, ενώ στη δεύτερη ένα νεότερο και πιο προχωρημένο δυναμικό μοντέλο επιφανειακής πυκνότητας φλόγας. Το πλέγμα που χρησιμοποίησαν είχε 2.7 εκατομμύρια κελιά (90x90x336) ενώ δοκιμάστηκε και πλέγμα 3.6 εκατομμυρίων χωρίς σημαντικές αλλαγές στα αποτελέσματα. Η συμφωνία με το πείραμα ήταν γενικά πολύ καλή.

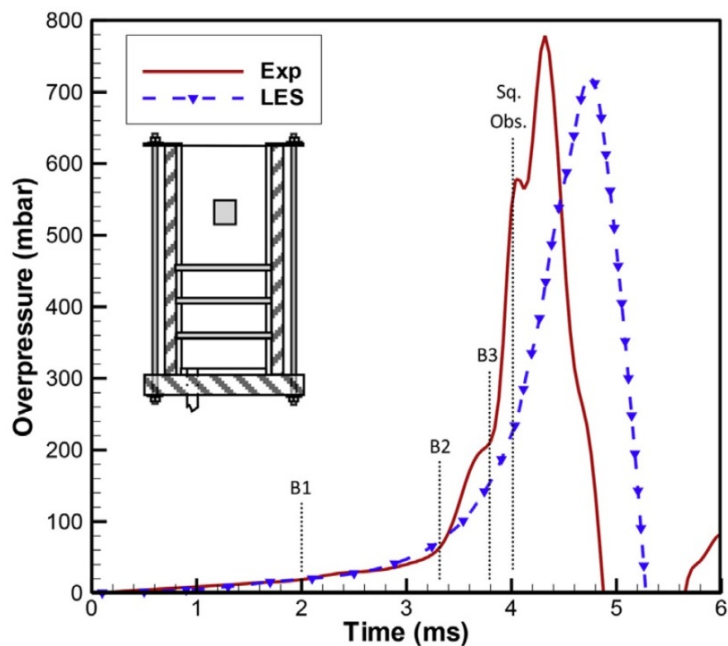
Οι Quillatre et al. (2013) προσομοίωσαν διάφορες περιπτώσεις του πειράματος χρησιμοποιώντας τη μέθοδο LES. Το υποπλεγματικό μοντέλο τύρβης που χρησιμοποίησαν είναι το WALE ενώ για μοντέλο καύσης το μοντέλο της τεχνικά παχιάς φλόγας (§3.2.8.1) των Colin et al. (2000). Το πλέγμα που χρησιμοποιήθηκε ήταν πολύ πυκνό (λόγω των απαιτήσεων του μοντέλου καύσης) καθώς αποτελούντο από 20 εκατομμύρια τετράεδρα. Το μοντέλο χημείας που χρησιμοποιήθηκε ήταν σύνθετο δύο αντιδράσεων το οποίο λάμβανε υπ' όψιν του τη μειωμένη (σε σύγκριση με το απλό μοντέλο μιας αντίδρασης) θερμοκρασία αδιαβατικής φλόγας αλλά και τη διαφορετική μοριακή διάχυση των συστατικών και της θερμότητας. Τα αποτελέσματα σε σύγκριση με το πείραμα ήταν πολύ καλά. Στην εργασία μελετήθηκε για την περίπτωση του προπανίου η επίδραση που θα είχε είτε η χρήση του σύνηθες απλού μοντέλου μιας χημικής αντίδρασης, είτε μοντέλου δύο αντιδράσεων αλλά θεωρώντας ίση διάχυση μεταξύ των συστατικών. Και τα δύο αυτά μοντέλα βρέθηκαν να υπερεκτιμούν την ταχύτητα καύσης και συνεπώς την πίεση.

Οι Abdel-Raheem et al. (2015) εκτέλεσαν LES προσομοιώσεις του πειράματος αυτού για την περίπτωση του υδρογόνου (στοιχειομετρική αναλογία) για διάφορες διατάξεις των εμποδίων χρησιμοποιώντας το δυναμικό μοντέλο των Gubba et al. (2008; 2011) και τον ίδιο κώδικα CFD (PUFFIN). Δοκιμάστηκαν διάφοροι τρόποι μοντελοποίησης της έναυσης έτσι ώστε να υπάρχει η καλύτερη δυνατή συμφωνία με το πείραμα. Τα αποτελέσματα είχαν γενικά καλή συμφωνία, αν και παρατηρείται μια υποεκτίμηση του ρυθμού αύξησης της πίεσης.

Στο Σχήμα 6.1.2 απεικονίζεται η πειραματική καμπύλη υπερπίεσης (κόκκινη συνεχής γραμμή) μαζί με υπολογιστικά αποτελέσματα (μπλε διακεκομμένη) των Abdel-Raheem et al. (2015) για την περίπτωση που μελετάμε στο παρόν κεφάλαιο. Στο σχήμα απεικονίζονται επίσης οι χαρακτηριστικές χρονικές στιγμές στις οποίες η φλόγα φτάνει στις τρεις σειρές εμποδίων (B1, B2, B2) καθώς και στο εμπόδιο τετραγωνικής διατομής. Παρατηρούμε ότι η πίεση αρχίζει να αυξάνει με μεγαλύτερο ρυθμό αφού η φλόγα φτάνει τη δεύτερη σειρά εμποδίων και με ακόμα μεγαλύτερο όταν φτάσει την τρίτη σειρά. Τη χρονική στιγμή όπου η φλόγα φτάνει το τετραγωνικό εμπόδιο παρατηρείται μια μικρή πτώση πίεσης (γύρω από τα περίπου 600 mbar) και στη συνέχεια συνεχίζει να αυξάνει. Η μικρή αυτή πτώση πίεσης δεν έχει αναπαραχθεί από την προσομοίωση των Abdel-Raheem et al. (2015) αλλά ούτε από την προσομοίωση στην εργασία των Quillatre et al. (2013).



Σχήμα 6.1.1: Σχεδιαστική απεικόνιση της πειραματικής διάταξης (Masri et al. 2012). Αριστερά φαίνεται η κάτοψη (XY επίπεδο) του αγωγού και των εμποδίων. Δεξιά απεικονίζεται η σειρά εμποδίων (η οποία τοποθετείται κάθετα στις θέσεις Grid 1, Grid 2, Grid 3) σε XZ επίπεδο. Όλες οι διαστάσεις είναι σε mm.



Σχήμα 6.1.2: Πειραματική καμπύλη υπερπίεσης (κόκκινη συνεχής γραμμή) μαζί με υπολογιστικά αποτελέσματα (μπλε διακεκομμένη) των Abdel-Raheem et al. (2015). Στο σχήμα απεικονίζονται επίσης με κάθετες μαύρες διακεκομμένες γραμμές οι χρονικές στιγμές στις οποίες η φλόγα περνάει από τα εμπόδια.

6.2 Δεδομένα μοντελοποίησης

Το μοντέλο το οποίο χρησιμοποιήθηκε για την προσομοίωση του φαινομένου παρουσιάστηκε στο Κεφάλαιο 4. Ο Πίνακας 6.2.1 απεικονίζει τις τιμές των κυρίων παραμέτρων του μοντέλου καύσης που χρησιμοποιήθηκαν για τα δύο καύσιμα. Όπως θα δούμε και στη συνέχεια, ο συντελεστής Ξ_k λαμβάνει μικρές τιμές καθώς η κρίσιμη ακτίνα R_0 είναι αρκετά μεγαλύτερη του μήκους του αγωγού. Έτσι οι τιμές των παραμέτρων ψ και E από τις οποίες εξαρτάται το Ξ_k δεν έχουν σημαντική επίδραση στην μοντελοποίηση αυτή αλλά παρουσιάζονται για λόγους πληρότητας. Ομοίως το υπομοντέλο φράκταλ (συντελεστής Ξ_f) έχει νόημα μόνο για ακτίνες μεγαλύτερες της κρίσιμης οπότε η τιμή του Ξ_f είναι ίση με 1. Από την άλλη η αστάθεια θερμοδιάχυσης (συντελεστής Ξ_{ip}) για την περίπτωση του υδρογόνου αναπτύσσεται σε μικρή απόσταση από την έναυση οπότε η τιμή της είναι πολύ σημαντική. Ο συντελεστής Ξ_{ip} τέθηκε ίσος με 2.00 σύμφωνα με το Σχήμα 4.2.2. Λόγω της μικρής κλίμακας της γεωμετρίας, η κρίσιμη ακτίνα μετάβασης στην τιμή αυτή αναμένεται να έχει σημαντική επιρροή στα αποτελέσματα. Όπως αναφέραμε στην §4.2, στο αρχικό μοντέλο του Molkon (2012) προτείνεται ο συντελεστής αυτός να αυξάνει γραμμικά με την απόσταση έως ότου φτάσει την μέγιστη τιμή σε απόσταση $R_0/2$. Η απόσταση όμως που προκύπτει είναι αρκετά μεγάλη και έρχεται σε αντίθεση με πειραματικά δεδομένα στα οποία η αστάθεια εμφανίζεται πολύ γρηγορότερα. Συνεπώς, εδώ δοκιμάστηκαν δύο τιμές για την κρίσιμη ακτίνα στην οποία ο συντελεστής Ξ_{ip} φτάνει τη μέγιστη τιμή του, η τιμή 0.25 m και η τιμή 0.10 m η οποία επιλέχτηκε με βάση τα πειραματικά δεδομένα των Kim et al. (2015) (§4.2). Στην περίπτωση του προπανίου το οποίο βρίσκεται σε στοιχειομετρική αναλογία με τον αέρα, η αστάθεια θερμοδιάχυσης δεν παρουσιάζεται καθώς ο αριθμός Lewis είναι μεγαλύτερος της μονάδας (Σχήμα 2.3.3).

Πίνακας 6.2.1: Παράμετροι μοντέλου καύσης.

Παράμετρος	Υδρογόνο	Προπάνιο
Στρωτή ταχύτητα καύσης S_{L0}	1.28 m/s	0.384 m/s
Εκθέτης ε	0.60	-0.26
Λόγος επέκτασης E	6.5	8.0
Σταθερά ψ	1.00	1.00
Ακτίνα R_0	1.0 m	4.0 m
Συντελεστής Ξ_{ip}	2.0	1.00
Ακτίνα R_{ip}	0.10 m / 0.25 m	-
Διάσταση φράκταλ	-	-

Στο Σχήμα 6.2.1 απεικονίζεται η γεωμετρία του προβλήματος όπως αυτή προσομοιώθηκε. Δοκιμάστηκαν δύο πλέγματα τα οποία απεικονίζονται στο Σχήμα 6.2.2. Τα βασικά χαρακτηριστικά αυτών συνοψίζονται στον παρακάτω πίνακα. Στο Πλέγμα 1 όλα τα κελιά που βρίσκονται μέσα στον αγωγό είναι κυβικά πλευράς 1.0 mm, ενώ εκτός αυτού τα κελιά αυξάνουν σταδιακά με έναν παράγοντα αραίωσης ίσο με 1.12. Στο Πλέγμα 2, τα κελιά είναι κυβικά με πλευρά 0.6 mm στα

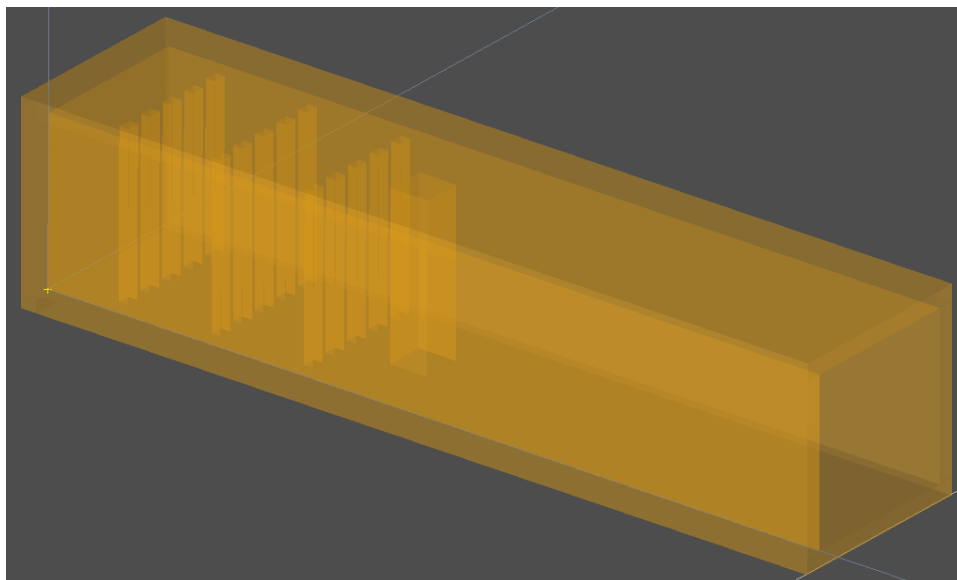
πρώτα 0.138 m του αγωγού. Στη συνέχεια, προκειμένου να μην αυξηθεί πολύ ο αριθμός των κελιών, η οριζόντια διάσταση τους επεκτάθηκε (παράγοντας αραίωσης 1.01) μέχρι τη θέση 0.176 m στην οποία έγινε ίση με 1.0 mm. Η διάσταση αυτή κρατήθηκε σταθερή μέχρι το τέλος του αγωγού. Εκτός του αγωγού έγινε πάλι επέκταση όλων των διαστάσεων των κελιών κατά 1.12 όπως και στο Πλέγμα 1. Και στις δύο περιπτώσεις το πλέγμα επεκτάθηκε κατά 0.5 m έξω από την έξοδο του αγωγού στην διεύθυνση αυτού, και κατά 0.2 m στις υπόλοιπες διαστάσεις. Πρέπει να αναφέρουμε ότι προκειμένου να διατηρηθεί το συνολικό πλήθος κελιών σε αποδεκτά επίπεδα και επειδή ο κώδικας δεν έχει δυνατότητες πολλαπλών πλεγμάτων (multi-block), τα κελιά που βρίσκονται πάνω κάτω δεξιά και αριστερά του αγωγού απενεργοποιήθηκαν έτσι ώστε να μην γίνεται επίλυση σε αυτά. Η άποψη του υπολογιστικού χωρίου εκτός του αγωγού φαίνεται στο Σχήμα 6.2.3.

Πίνακας 6.2.2: Χαρακτηριστικά των πλεγμάτων που δοκιμάστηκαν.

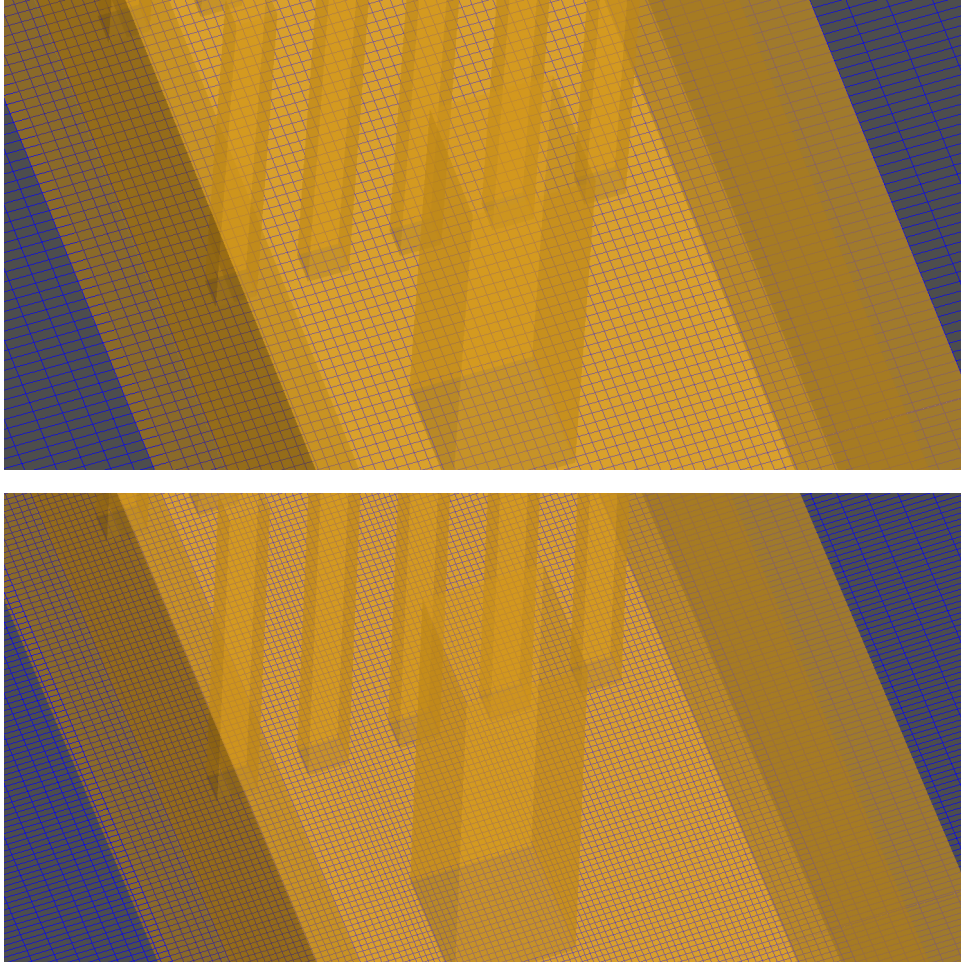
Πλέγμα (Grid)	Πλήθος ενεργών κελιών	Χαρακτηριστικό μήκος (mm)
Πλέγμα 1 (Μεσαίο)	1,085,663	1.0
Πλέγμα 2 (Πυκνό)	3,204,169	0.6

Το χρονικό βήμα ελεγχόταν από τον αριθμό CFL ο οποίος τέθηκε ίσως με 0.2. Επειδή η επιτάχυνση της φλόγας στην διάρκεια της έκρηξης ήταν μεγάλη, το χρονικό βήμα ήταν της τάξεως του 10^{-5} στα πρώτα στάδια της έκρηξης και έπεφτε στην τάξη του 10^{-7} τη στιγμή της μέγιστης πίεσης. Δοκιμάστηκε και CFL ίσο με 0.1 με αμελητέα μεταβολή στα αποτελέσματα. Η έναυση έγινε σε ένα κελί και μοντελοποιήθηκε κατά τέτοιο τρόπο ώστε το καύσιμο σε αυτό να καεί μέσα σε ένα συγκεκριμένο χρονικό διάστημα. Το διάστημα αυτό τέθηκε ίσο με $1.2 \cdot 10^{-5}$ για το Πλέγμα 1 και $0.76 \cdot 10^{-5}$ για το Πλέγμα 2.

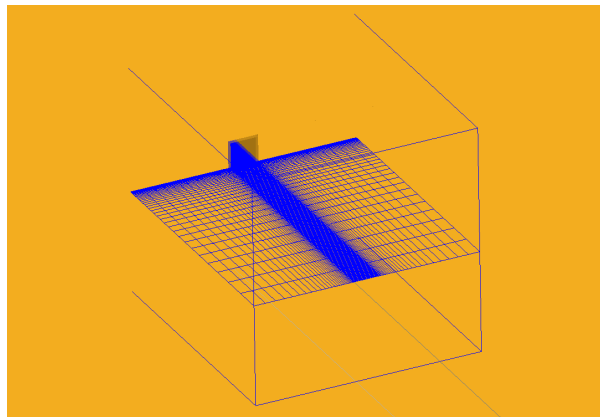
Όλες οι προσομοιώσεις έγιναν σε έναν σύγχρονο επεξεργαστή (Intel Xeon E5-2637 v2, 3.5GHz) χρησιμοποιώντας και τους 4 πυρήνες του. Ο υπολογιστικός χρόνος ήταν περίπου 2 ημέρες για το Πλέγμα 1 και 14 ημέρες για το Πλέγμα 2.



Σχήμα 6.2.1: Άποψη της γεωμετρίας όπως αυτή προσομοιώθηκε.



Σχήμα 6.2.2: Άποψη των αριθμητικών πλεγμάτων 1.0 (μέση) και 3.4 (κάτω) εκατομμυρίων κελιών.



Σχήμα 6.2.3: Άποψη του χωρίου επίλυσης εκτός του αγωγού.

6.3 Αποτελέσματα

Η περίπτωση που θα εξετάσουμε σε μεγαλύτερο βάθος είναι η περίπτωση του υδρογόνου καθώς σε αυτό εστιάζει η παρούσα διατριβή. Έτσι τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στη συνέχεια αφορούν αυτή την περίπτωση, ενώ η περίπτωση του προπανίου παρουσιάζεται μόνο στην §6.3.5.

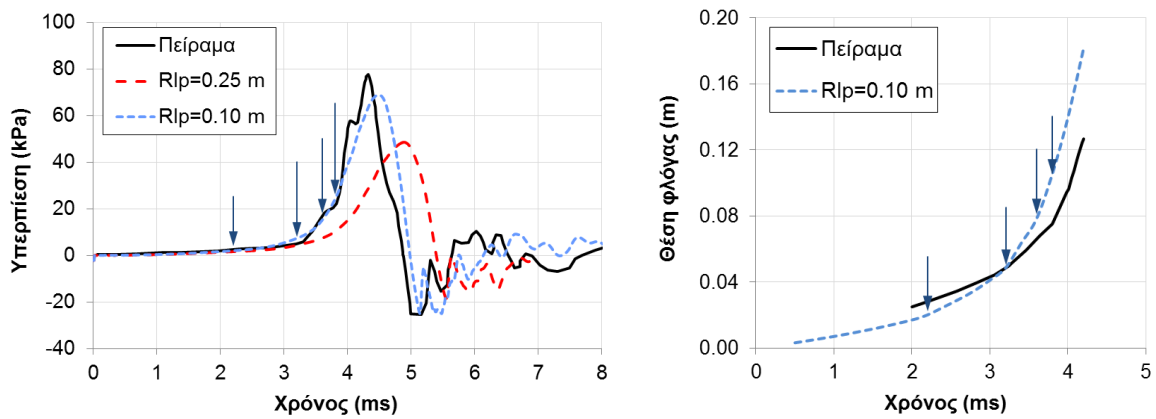
Στο Σχήμα 6.3.1 παρουσιάζονται τα υπολογιστικά αποτελέσματα της υπερπίεσης συναρτήσει του χρόνου στη βάση του αγωγού για δύο διαφορετικές ακτίνες μετάβασης R_{ip} , 0.10 m και 0.25 m, για το Πλέγμα 1. Παρατηρούμε ότι η συμφωνία με το πείραμα στην περίπτωση των 0.10 m είναι πάρα πολύ καλή καθώς η μέγιστη πίεση βρέθηκε ίση με 68.9 kPa η οποία είναι μόλις 1.13 φορές πιο μικρή από την πειραματική (σχετικό σφάλμα με το πείραμα 11.2%). Από την άλλη παρατηρούμε ότι η τιμή $R_{ip} = 0.25$ m υποεκτιμά αρκετά την πίεση (1.6 φορές – σχετικό σφάλμα 41.9%). Ο λόγος για την σημαντική αυτή διαφορά οφείλεται στο μικρό μήκος του αγωγού (0.25 m) το οποίο είναι συγκρίσιμο με την ακτίνα μετάβασης. Συνεπώς, η κρίσιμη ακτίνα μετάβασης με την οποία επιτεύχθηκε η καλύτερη συμφωνία με το πείραμα είναι αυτή η οποία αναμέναμε με βάση την πειραματική εργασία των Kim et al. (2015) και όχι η τιμή που προτείνεται από τον Molkon (2012). Ο ρυθμός αύξησης της πίεσης είναι γενικά σε καλή συμφωνία με το πείραμα, αν και παρατηρείται μια υποεκτίμηση του κυρίως μετά τα 3.79 ms. Αυτή η υποεκτίμηση παρατηρείται και στην προσομοίωση των Abdel-Raheem et al. (2015) (Σχήμα 6.1.2). Γενικά η μορφή της καμπύλης υπερπίεσης είναι παρόμοια στις δύο προσομοιώσεις. Επίσης, στο Σχήμα 6.3.1, παρατηρούμε ότι ο ρυθμός μείωσης της πίεσης όπως και η μετέπειτα μορφή της καμπύλης είναι επίσης σε πολύ καλή συμφωνία με το πείραμα.

Τα βέλη υποδεικνύουν τους χρόνους στους οποίους η φλόγα φτάνει τα εμπόδια. Η μορφή της φλόγας τις χρονικές αυτές στιγμές (2.2, 3.2, 3.6, 3.8 ms) απεικονίζεται στο Σχήμα 6.3.2. Παρατηρούμε ότι η αρχική αύξηση της πίεσης συμβαίνει καθώς η φλόγα κινείται από τη δεύτερη στην τρίτη σειρά εμποδίων. Όπως φαίνεται στο Σχήμα 6.3.2 στο διάστημα αυτό η επιφάνεια της έχει αυξηθεί σημαντικά λόγω της ύπαρξης των εμποδίων με αποτέλεσμα να αυξάνει ο συνολικός ρυθμός καύσης. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα την έντονη επιτάχυνση της φλόγας, όπως φαίνεται και από το διάγραμμα θέσης-χρόνου (Σχήμα 6.3.1). Στη συνέχεια καθώς η φλόγα περνάει από την τρίτη σειρά εμποδίων η επιφάνεια της αυξάνει περαιτέρω με αποτέλεσμα την επιπλέον αύξηση της πίεσης.

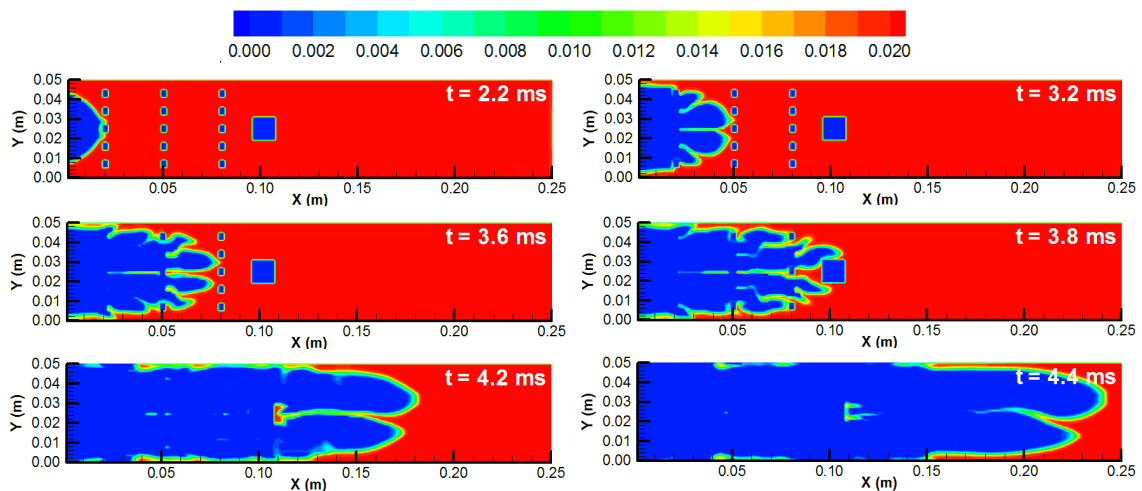
Η συμφωνία όσον αφορά την θέση της φλόγας είναι ικανοποιητική καθώς προβλέπεται ποιοτικά η μορφή της καμπύλης. Παρατηρούμε ότι αρχικά υπάρχει μια καθυστέρηση στη θέση στην οποία βρίσκεται η φλόγα σε σχέση με το πείραμα. Η ταχύτητα της φλόγας όμως είναι μεγαλύτερη (μεγαλύτερη κλίση της καμπύλης) οπότε τελικά στα 3.2 ms η φλόγα της προσομοίωσης φτάνει τη φλόγα του πειράματος και την προσπερνά. Στο τελικό στάδιο η ταχύτητα με την οποία κινούνται οι δύο φλόγες φαίνεται να είναι οι ίδιες. Η μορφή αυτή της καμπύλης ίσως να οφείλεται στον τρόπο με τον οποίο μοντελοποιήθηκε η αστάθεια θερμοδιάχυσης. Ο συντελεστής Ξ_{ip} θεωρήθηκε ότι αυξάνει γραμμικά από τη θέση έναυσης της καύσης μέχρι τη θέση 0.1 cm στην οποία έχει φτάσει περίπου στα 4 ms. Αν θεωρούσαμε ότι ο συντελεστής αυτός αρχίζει να αυξάνει λίγο αργότερα και όχι από την αρχή της καύσης ή αν θεωρούσαμε μια άλλη μορφή μετάβασης, πιο αργή στην αρχή και πιο απότομη στο τέλος, η συμφωνία με το πείραμα ίσως να βελτιωνόταν.

Στο Σχήμα 6.3.3 απεικονίζονται οι ισοϋψείς του ρυθμού καύσης μαζί με πειραματική απεικόνιση της φλόγας. Παρατηρούμε ότι η συμφωνία όσο αφορά την μορφή της φλόγας είναι πάρα πολύ καλή. Στη χρονική στιγμή 3.0 ms παρατηρούμε την ύπαρξη δύο κεντρικών σφαιρικών γεωμετρικών καθώς και δύο μικρότερων τα οποία μόλις έχουν σχηματιστεί λόγω του περάσματος από τα εμπόδια. Στη χρονική στιγμή 3.6 ms παρατηρούμε τον σχηματισμό τεσσάρων μεγάλων φλογιδίων

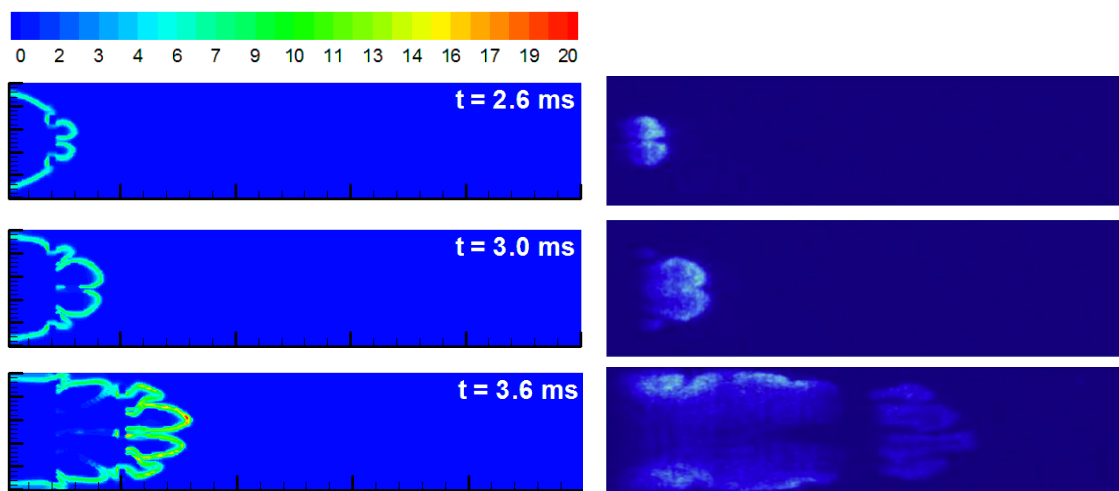
τα οποία προελαύνουν στο άκαυστο μείγμα. Τέλος, τη χρονική στιγμή 4.0 ms όπου η φλόγα έχει περάσει από το κεντρικό εμπόδιο τετραγωνικής διατομής είναι ορατές δύο βασικές περιοχές καύσης, τόσο στην προσομοίωση όσο και στο πείραμα.

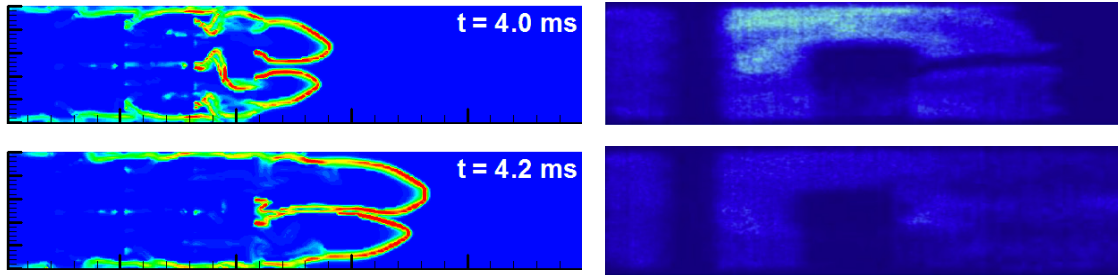


Σχήμα 6.3.1: Σύγκριση με το πείραμα των υπολογιστικών αποτελεσμάτων (Πλέγμα 1) της υπερπίεσης συναρτήσει του χρόνου για δύο διαφορετικές ακτίνες μετάβασης στην αστάθεια θερμοδιάχυσης και της θέσης φλόγας. Τα βέλη υποδεικνύουν τους χρόνους στους οποίους η φλόγα φτάνει τα εμπόδια (Σχήμα 6.3.2).



Σχήμα 6.3.2: Απεικόνιση επιφάνειας φλόγας (ισοϋψείς κλάσματος μάζας υδρογόνου στο κεντρικό ΧΖ επίπεδο - Πλέγμα 1) σε διάφορες χρονικές στιγμές.

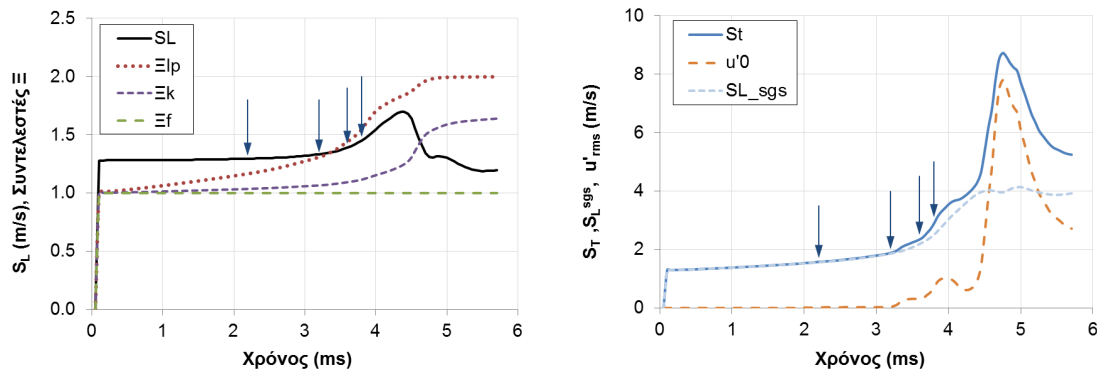




Σχήμα 6.3.3: Ισοϋψείς ρυθμού καύσης ($\text{kmole/m}^3/\text{s}$) στο κεντρικό XZ επίπεδο (αριστερά) και απεικόνιση της φλόγας μέσω OH στο πείραμα (δεξιά - Abdel-Raheem et al. 2015) σε διάφορες χρονικές στιγμές. Στο πείραμα στα δύο τελευταία στιγμιότυπα απεικονίζεται άλλο τμήμα του αγωγού από ότι στα τρία πρώτα.

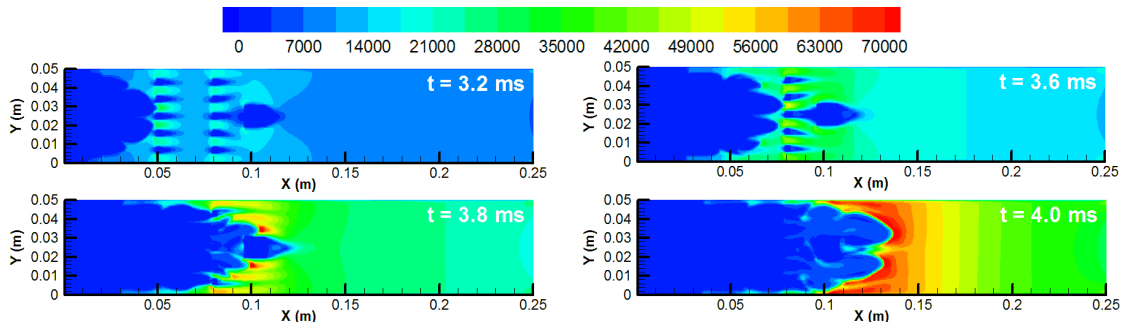
Στο Σχήμα 6.3.4 απεικονίζονται τα βασικά χαρακτηριστικά του μοντέλου καύσης που χρησιμοποιήσαμε για την περίπτωση $R_{lp} = 0.10$ m. Όλα τα μεγέθη υπολογίστηκαν σαν μέσες τιμές στην περιοχή του πάχους της φλόγας. Στο αριστερό διάγραμμα του σχήματος, απεικονίζεται η στρωτή ταχύτητα καύσης και οι συντελεστές Ξ . Παρατηρούμε ότι η στρωτή ταχύτητα καύσης αρχίζει να αυξάνει περίπου στα 3.5 ms λόγω της αύξησης της πίεσης που παρατηρείται την ίδια χρονική στιγμή. Η αύξηση συνεχίζεται μέχρι τα περίπου 4.3 ms χρόνος ο οποίος αντιστοιχεί στο μέγιστο της πίεσης. Παρατηρούμε ότι μέχρι εκείνη τη χρονική στιγμή, ο μόνος συντελεστής Ξ που συμβάλει σημαντικά στον ρυθμό καύσης είναι ο συντελεστής Ξ_{lp} . Ο συντελεστής Ξ_f είναι ίσος με την μονάδα σε όλη τη διάρκεια της έκρηξης λόγω της μικρής κλίμακας της γεωμετρίας, ενώ ο συντελεστής Ξ_k αυξάνει καθυστερημένα.

Στο δεξιό διάγραμμα του σχήματος, απεικονίζεται η τυρβώδη ταχύτητα καύσης S_T , η χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης u'_0 (υποπλεγματική τύρβη) και η ποσότητα S_L^{sgs} της σχέσης (4.2.6) που είναι το γινόμενο των συντελεστών Ξ με την ταχύτητα στρωτής καύσης. Παρατηρούμε ότι μέχρι περίπου τα 3.0 ms η συνεισφορά της υποπλεγματικής τύρβης στην ταχύτητα τυρβώδους καύσης είναι σχεδόν μηδενική. Η χρονική αυτή στιγμή αντιστοιχεί στη στιγμή όπου η φλόγα φτάνει τη δεύτερη σειρά εμποδίων. Στη συνέχεια η u'_0 αρχίζει να αυξάνει σταδιακά, λαμβάνοντας όμως και πάλι πολύ μικρές τιμές. Η μεγάλη αύξηση αρχίζει στα 4.35 ms. Τη χρονική αυτή στιγμή η φλόγα βρίσκεται πολύ κοντά στο στόμιο εξόδου του αγωγού.



Σχήμα 6.3.4: Ταχύτητα στρωτής καύσης μαζί με τους συντελεστές Ξ (αριστερά) και τυρβώδους ταχύτητα καύσης S_T μαζί με τη χαρακτηριστική ταχύτητα τύρβης u'_0 και το S_L^{sgs} (δεξιά) συναρτήσει του χρόνου για την περίπτωση $R_{lp} = 0.10$ m. Οι ποσότητες είναι μέσες τιμές στο πάχος ($c = 0.2 - 0.8$) της φλόγας. Τα βέλη υποδεικνύουν τους χρόνους στους οποίους η φλόγα φτάνει τα εμπόδια (Σχήμα 6.3.2).

Ενδιαφέρον τέλος παρουσιάζει ο αριθμός Reynolds της ροής. Στο παρακάτω σχήμα απεικονίζονται ισούψεις του αριθμού αυτού σε διάφορες χρονικές στιγμές. Το χαρακτηριστικό μήκος για τον υπολογισμό λήφθηκε ίσο με 0.01 m. Παρατηρούμε ότι πίσω από τη φλόγα ο αριθμός Reynolds λαμβάνει πολύ μικρές τιμές σε όλες σχεδόν τις χρονικές στιγμές. Η ιδιότητα της φλόγας να κάνει μια τυρβώδη ροή λιγότερο τυρβώδη (laminarization) είναι γνωστή και οφείλεται στην μείωση της πυκνότητας λόγω διαστολής των προϊόντων και της αύξησης της μοριακής συνεκτικότητας λόγω της αύξησης της θερμοκρασίας. Στην περίπτωση που μελετάμε η πυκνότητα έχει μειωθεί περίπου 6 φορές ενώ η μοριακή συνεκτικότητα έχει αυξηθεί 3.5 φορές. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα στην διεπιφάνεια της φλόγας να εμφανίζεται μια ασυνέχεια ως προς τον αριθμό Reynolds.



Σχήμα 6.3.5: Ισοϋψείς αριθμού Reynolds (χαρακτηριστικό μήκος $L=0.01$ m) στο κεντρικό XY επίπεδο σε διάφορες χρονικές στιγμές για το RNG LES μοντέλο.

6.3.1 Μηχανισμός αύξησης της πίεσης

Παρόλο που η τυρβώδης καύση ελέγχεται από φαινόμενα τα οποία λαμβάνουν χώρα σε πολύ μικρές κλίμακες (χημικές αντιδράσεις, διάχυση, αλληλεπίδραση με τύρβη), η αύξηση της πίεσης σε ένα δοχείο με άνοιγμα όπως αυτό που μελετάμε, μπορεί να εξηγηθεί με μια πιο μακροσκοπική προσέγγιση. Η αύξηση της πίεσης παρατηρείται λόγω του ανταγωνισμού μεταξύ δυο φαινομένων: του ρυθμού καύσης και του ρυθμού με τον οποίο η ροή εξέρχεται από το δοχείο. Από την μία μεριά, τα προϊόντα της καύσης που δημιουργούνται μέσα στο δοχείο και αντικαθιστούν τα αντιδρώντα, έχουν μικρότερη πυκνότητα από αυτά με αποτέλεσμα να καταλαμβάνουν μεγαλύτερο όγκο κάτι το οποίο οδηγεί σε αύξηση της πίεσης. Από την άλλη μεριά η ροή μάζας η οποία δημιουργείται στο άνοιγμα του δοχείου, τείνει να μειώσει την πίεση στο εσωτερικό. Έτσι λοιπόν όταν η αύξηση του όγκου λόγω καύσης είναι μεγαλύτερη από την μείωση λόγω διαφυγής στην έξοδο, τότε η πίεση θα αυξάνει, ενώ στην αντίθετη περίπτωση θα μειώνεται.

Ο ρυθμός μείωσης του όγκου στο εσωτερικό του δοχείου μπορεί εύκολα να υπολογιστεί με βάση την ογκομετρική παροχή στη διατομή εξόδου του αγωγού ως εξής:

$$\dot{V}_{vent} = \iint_{S_{vent}} u_n ds \quad (6.3.1)$$

όπου S_{vent} είναι η επιφάνεια της εξόδου, u_n η κάθετη ταχύτητα σε αυτή και \dot{V}_{vent} η ογκομετρική παροχή (m^3/s).

Ο ρυθμός αύξησης του όγκου λόγω καύσης μπορεί να προσδιοριστεί με βάση την πυκνότητα των αντιδρώντων ρ_u και προϊόντων ρ_b . Ο όγκος των αντιδρώντων συνδέεται με τον όγκο των προϊόντων μέσω του λόγου επέκτασης $E = \rho_u / \rho_b$ μέσω της σχέσης:

$$V_u = \frac{V_b}{E} \quad (6.3.2)$$

Η αύξηση του όγκου λόγω καύσης ισούται με τη διαφορά του όγκου των προϊόντων μείον των αντιδρώντων. Συνεπώς ο ρυθμός αύξησης του όγκου λόγω καύσης \dot{V}_{comb} ισούται με:

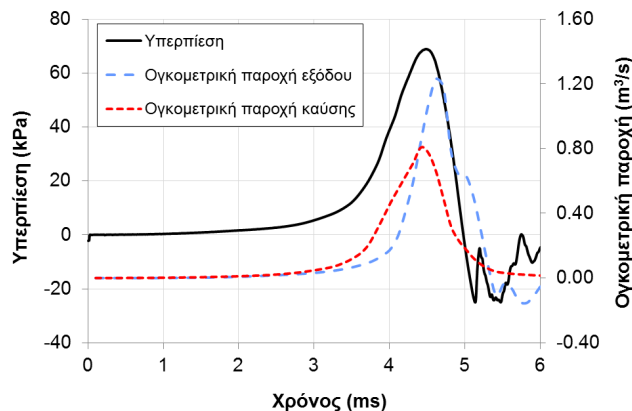
$$\dot{V}_{comb} = \frac{\partial V_b}{\partial t} - \frac{\partial V_u}{\partial t} = \frac{\partial V_b}{\partial t} - \frac{1}{E} \frac{\partial V_b}{\partial t} = \left(1 - \frac{1}{E}\right) \frac{\partial V_b}{\partial t} \quad (6.3.3)$$

Ο ρυθμός μεταβολής του όγκου των προϊόντων μπορεί να υπολογιστεί από τον ρυθμό παραγωγής των προϊόντων (π.χ. του νερού) ως εξής:

$$\frac{\partial V_b}{\partial t} = \frac{\overline{\dot{\omega}_{H_2O}}}{\rho_b Y_{H_2O}^b} \quad (6.3.4)$$

όπου $\overline{\dot{\omega}_{H_2O}}$ ο μέσος ρυθμός παραγωγής νερού λόγω καύσης (kg/s) και $Y_{H_2O}^b$ το κλάσμα μάζας του νερού στα προϊόντα. Αν η παραπάνω σχέση ολοκληρωθεί σε όλη την επιφάνεια της φλόγας, τότε η σχέση (6.3.3) θα μας δώσει τον συνολικό ρυθμό αύξησης του όγκου λόγω καύσης.

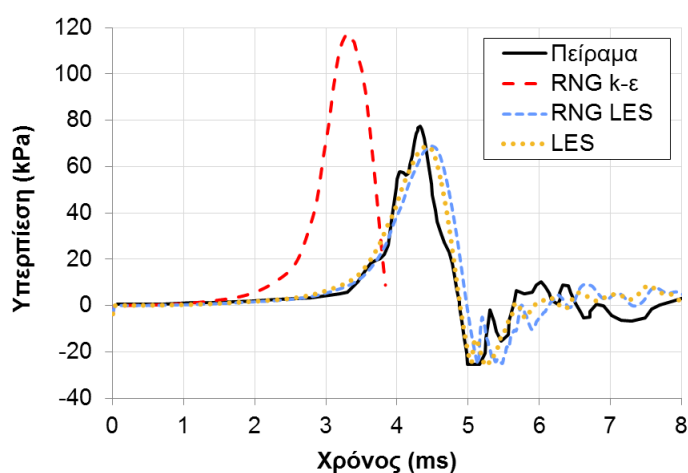
Συνεπώς αν $\dot{V}_{comb} > \dot{V}_{vent}$ τότε η καύση υπερिशύει και η πίεση στο εσωτερικό του δοχείου αυξάνει, ενώ αν $\dot{V}_{comb} < \dot{V}_{vent}$ τότε ο ρυθμός καύσης δεν είναι αρκετά μεγάλος για να διατηρήσει την πίεση οπότε αυτή μειώνεται. Ο υπολογισμός των \dot{V}_{comb} , \dot{V}_{vent} έγινε για την περίπτωση που μελετάμε και οι τιμές τους συναρτήσει του χρόνου παρουσιάζονται στο ακόλουθο σχήμα μαζί με τις τιμές της πίεσης. Από το διάγραμμα παρατηρούμε ότι ο μηχανισμός ο οποίος περιγράψαμε λειτουργεί ακριβώς όπως αναμέναμε. Παρατηρούμε δηλαδή ότι στο διάστημα μέχρι περίπου τα 4.4 ms στα οποία η πίεση αυξάνει, η ογκομετρική παροχή λόγω καύσης η οποία υπολογίζεται από τη σχέση (6.3.3) είναι μεγαλύτερη της ογκομετρικής παροχής εξόδου. Τη χρονική στιγμή όπου οι δύο αυτές παροχές γίνονται ίσες, η πίεση αρχίζει να σταθεροποιείται λαμβάνοντας τη μέγιστη τιμή της. Στη συνέχεια η ογκομετρική παροχή εξόδου γίνεται μεγαλύτερη, με αποτέλεσμα την πτώση της πίεσης. Η παραπάνω αιτιολόγηση παρατηρούμε ότι δεν ισχύει μετά τα 5 ms αφού η φλόγα έχει εξέλθει από το δοχείο και η υπερπίεση λαμβάνει αρνητικές τιμές. Το γεγονός αυτό βλέπουμε ότι οδηγεί τελικά σε αρνητική ογκομετρική παροχή εξόδου που σημαίνει αναστροφή της κατεύθυνσης της ροής.



Σχήμα 6.3.6: Υπερπίεση στο εσωτερικό του δοχείου μαζί με την ογκομετρική παροχή στην έξοδο του αγωγού και την ογκομετρική παροχή λόγω καύσης.

6.3.2 Σύγκριση μεθόδων τύρβης

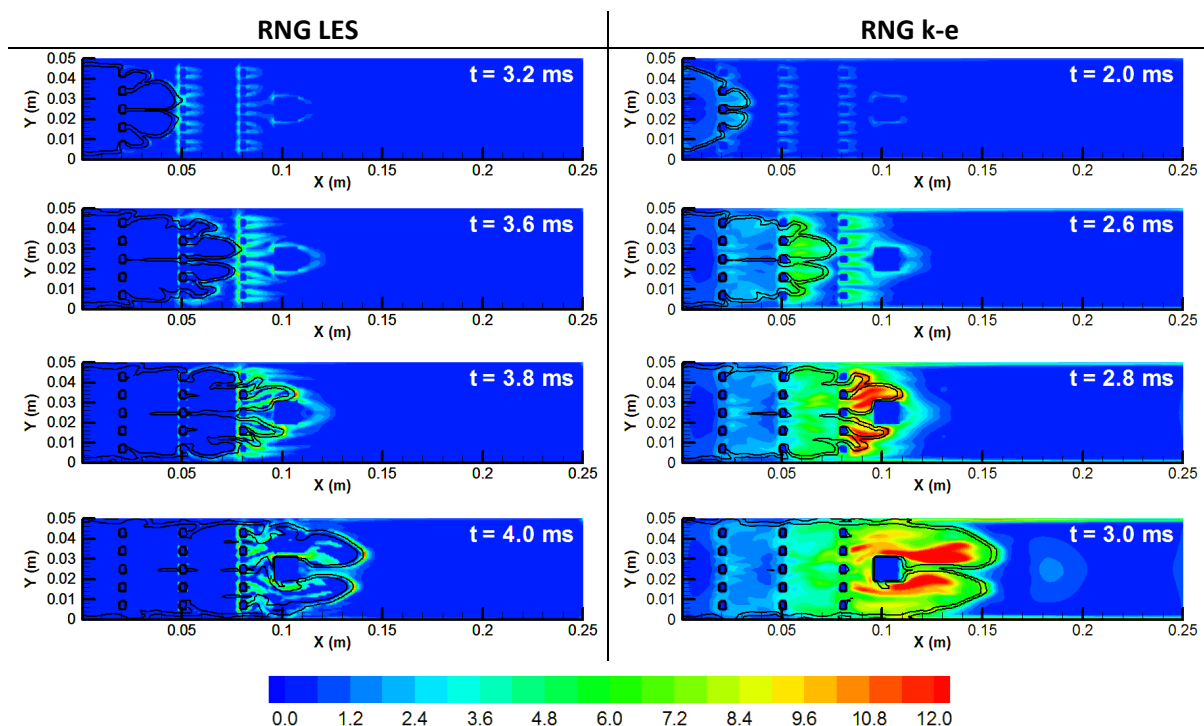
Στο παρακάτω σχήμα απεικονίζεται η καμπύλη υπερπίεσης συναρτήσει του χρόνου, για δύο υποπλεγματικά μοντέλα της μεθόδου LES, το RNG LES και το Smagorinsky LES, και για το μοντέλο τύρβης RNG k-ε της μεθόδου RANS. Παρατηρούμε ότι το Smagorinsky LES υποπλεγματικό μοντέλο δίνει σχεδόν ίδια αποτελέσματα με το RNG LES. Από την άλλη, το RNG k-ε παρουσιάζει διαφορετική συμπεριφορά, καθώς η πίεση αρχίζει να αυξάνει στα 2 ms, πολύ πιο νωρίς σε σχέση με το πείραμα που η αύξηση συμβαίνει στα 3 ms. Η μέγιστη πίεση που προβλέπεται από το μοντέλο είναι αρκετά μεγάλη και ίση με 1.5 φορές την πειραματική. Συνεπώς, σε αντίθεση με τη μέθοδο LES, η συμφωνία με το πείραμα συνολικά δεν είναι καλή. Μια εξήγηση για αυτή τη συμπεριφορά μπορούμε να έχουμε αν συγκρίνουμε τις χαρακτηριστικές ταχύτητες τύρβης οι οποίες υπολογίζονται από το κάθε μοντέλο.



Σχήμα 6.3.7: Σύγκριση με το πείραμα των υπολογιστικών αποτελεσμάτων (Πλέγμα 1) της υπερπίεσης συναρτήσει του χρόνου για τις περιπτώσεις του RNG LES, Smagorinsky LES (LES στη λεζάντα) και RNG k-ε.

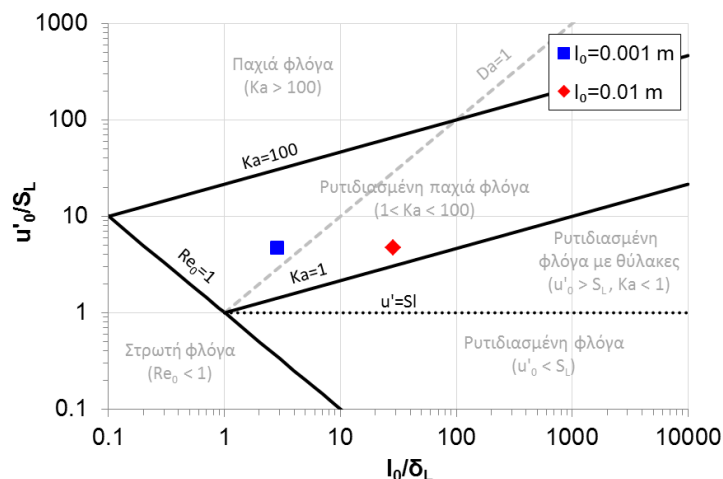
Στο Σχήμα 6.3.8 απεικονίζονται οι ισοϋψείς της χαρακτηριστικής ταχύτητας τύρβης u'_0 μαζί με τα όρια της φλόγας για το RNG LES και το RNG k-ε μοντέλο. Παρατηρούμε ότι αρχικά, τα δύο μοντέλα προβλέπουν πανομοιότιμες τιμές για το u'_0 . Όταν όμως η φλόγα έχει περάσει από τη δεύτερη σειρά εμποδίων και πλησιάζει την τρίτη, το RNG k-ε μοντέλο αρχίζει να προβλέπει αρκετά μεγαλύτερες τιμές. Αυτό έχει σαν συνέπεια την αύξηση της ταχύτητα τυρβώδους καύσης λόγω της εξάρτησης της (μέσω της σχέσης του Yakhot, §4.2) από το u'_0 , οπότε την επιτάχυνση της φλόγας και την αύξηση της πίεσης. Στη συνέχεια καθώς οι ταχύτητες της ροής αυξάνουν, οι τιμές του u'_0 για το RNG k-ε γίνονται ακόμα και διπλάσιες των τιμών του RNG LES μοντέλου.

Εδώ θα πρέπει να αναφέρουμε ότι το γεγονός ότι ένα RANS μοντέλο τύρβης προβλέπει μεγαλύτερες τιμές u'_0 από το LES, είναι λογικό, καθώς στη μέθοδο RANS η ποσότητα u'_0 αναφέρεται σε όλο το κομμάτι της τύρβης, ενώ στο LES λαμβάνουμε υπ' όψιν στον υπολογισμό της μόνο το υποπλεγματικό της μέρος. Το γεγονός ότι η μέθοδος LES είχε καλύτερη συμφωνία με το πείραμα, δεν καθιστά το μοντέλο k-ε μη κατάλληλο για τέτοιου είδους προσομοιώσεις. Το συμπέρασμα όμως που μπορεί να βγει είναι ότι ο συνδυασμός του μοντέλου καύσης με το k-ε μοντέλο, δεν είναι κατάλληλος για τη συγκεκριμένη εφαρμογή.



Σχήμα 6.3.8: Ισοϋψείς χαρακτηριστικής ταχύτητας τύρβης u'_0 μαζί με τα όρια της φλόγας ($c = 0.2, 0.8$) για το RNG LES (αριστερά) και το RNG k-e μοντέλο (δεξιά) στο κεντρικό XY επίπεδο σε διάφορες χρονικές στιγμές.

Στο Σχήμα 6.3.9 παρουσιάζεται το διάγραμμα (τύπου Borghi) των κατηγοριών της τυρβώδους καύσης (§2.4.1). Σε αυτό έχουν τοποθετηθεί δύο σημεία που αντιστοιχούν στις συνθήκες καύσης της περίπτωσης μας. Μια από τις παραμέτρους του διαγράμματος που απαιτείται για τον προσδιορισμό της κατηγορίας καύσης είναι η ολοκληρωτική κλίμακα μήκους της τύρβης l_0 . Στην περίπτωση της LES μεθόδου η κλίμακα αυτή πρέπει να προσδιοριστεί με βάση το επιλύσιμο μέρος της τύρβης, μέσω υπολογισμού των χωρικών συσχετίσεων των διακυμάνσεων. Αυτό όμως δεν είναι εύκολο να προσδιοριστεί και μάλιστα για ένα τόσο έντονα μεταβατικό φαινόμενο. Για το σκοπό αυτό δοκιμάστηκαν δύο τιμές του μήκους αυτού, 0.001 και 0.01 m, οι οποίες αντιστοιχούν στο χαρακτηριστικό μήκος των κελιών (το οποίο ουσιαστικά είναι η διάσταση του φίλτρου) και στη χαρακτηριστική κλίμακα της γεωμετρίας ώστε να προσδιοριστεί έστω και προσεγγιστικά η περιοχή του διαγράμματος στην οποία κινείται η φλόγα. Τα διαγράμματα αυτού του τύπου όπως αναφέρθηκε και στη §2.4.1 είναι ποιοτικά και τα όρια μεταξύ των περιοχών όχι ακριβώς καθορισμένα, οπότε ο ακριβής προσδιορισμός ενός σημείου σε αυτό δεν είναι ιδιαίτερης σημασίας. Σαν χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης λήφθηκε η τιμή 6.0 m/s η οποία είναι μια μέση τιμή η οποία παρουσιάζεται (Σχήμα 6.3.8). Η αντικατάσταση της τιμής αυτής με μια μεγαλύτερη (π.χ. 12) δεν μεταβάλλει την περιοχή στην οποία βρίσκονται τα σημεία. Όπως βλέπουμε και τα δύο σημεία βρίσκονται μέσα στην περιοχή της ρυτιδιασμένης παχιάς φλόγα. Αυτό σημαίνει ότι ίσως κάποιες δίνες να μεταβάλουν τη δομή της φλόγας εισερχόμενες στη ζώνη προθέρμανσης. Βλέπουμε συνεπώς, ότι η μέθοδος που ακολουθήθηκε (RNG LES σε συνδυασμό με το μοντέλο καύσης) είναι ικανή να περιγράψει με αρκετά καλή ακρίβεια τη φλόγα στην περιοχή αυτή.



Σχήμα 6.3.9: Διάγραμμα τύπου Borghi κατηγοριών τυρβώδους καύσης. Απεικόνιση των σημείων που αντιστοιχούν στην περίπτωση που εξετάζουμε για δυο διαφορετικά χαρακτηριστικά μήκη τύρβης l_0 (τιμές υπόλοιπων παραμέτρων: $u'_0 = 6 \text{ m/s}$, $\delta_L = 0.35 \cdot 10^{-3}$, $S_L = 1.28 \text{ m/s}$).

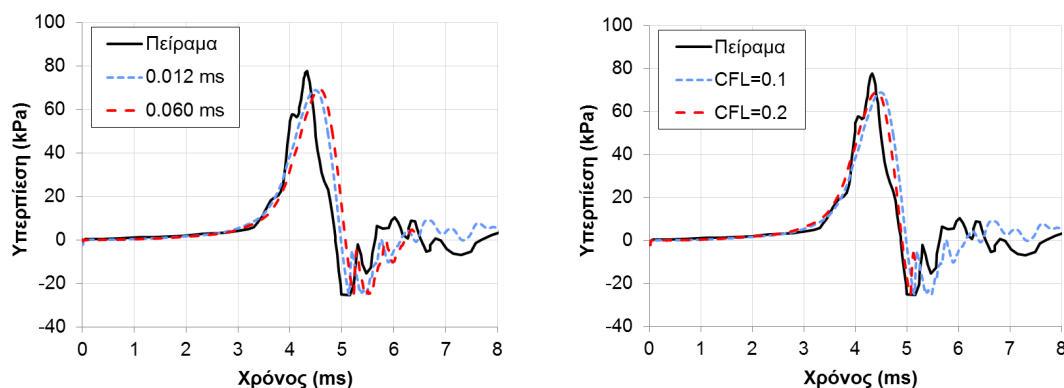
6.3.3 Ευαισθησία σε χρονικές παραμέτρους

Εξετάστηκαν δύο διαφορετικές παράμετροι έτσι ώστε να βεβαιωθούμε ότι τα αποτελέσματα μας είναι ανεξάρτητα αυτών. Πρώτα δοκιμάστηκε η ευαισθησία των αποτελεσμάτων στην χρονική διάρκεια της έναυσης. Η τιμή η οποία χρησιμοποιήθηκε στα μέχρι τώρα αποτελέσματα ήταν ίση με 0.012 ms. Εδώ δοκιμάσαμε την τιμή 0.06 ms, η οποία είναι 5 φορές μεγαλύτερη και η οποία μπορεί να προκύψει (σύμφωνα και με τα όσα είπαμε στη §5.1) από τη σχέση

$$DTINGI = \frac{Dx/2}{E \cdot S_{L0}} \quad (6.3.5)$$

όπου Dx το μήκος του κελιού στο οποίο γίνεται η έναυση. Στο παρακάτω Σχήμα 6.3.10 (αριστερά) απεικονίζονται τα αποτελέσματα για αυτούς τους δύο χρόνους. Παρατηρούμε ότι οι διαφορές στις καμπύλες είναι αμελητέες. Το γεγονός ότι τα αποτελέσματα δεν είναι ευαίσθητα ως προς τη χρονική διάρκεια που θα επιλεγεί, αποτελεί πλεονέκτημα της μεθόδου.

Η δεύτερη χρονική παράμετρος για την οποία εξετάστηκε η ευαισθησία των αποτελεσμάτων σε αυτή, είναι ο αριθμός CFL ο οποίος ορίζει το χρονικό βήμα. Το χρονικό βήμα είναι μια σημαντική παράμετρος στις προσομοιώσεις έκρηξης λόγω της έντονης μη-μόνιμης φύσης του φαινομένου. Επίσης στις περιπτώσεις καύσης, πρέπει να εξασφαλίζεται ότι το χρονικό βήμα είναι αρκετά μικρότερο από τον χρόνο που χρειάζεται το καύσιμο που βρίσκεται σε ένα κελί για να καταναλωθεί πλήρως, ώστε να προβλέπεται με ακρίβεια η μεταβατικότητα του φαινομένου. Η τιμή η οποία χρησιμοποιήθηκε στα μέχρι τώρα αποτελέσματα ήταν ίση με 0.1 ενώ εδώ δοκιμάσαμε την τιμή 0.2. Στο παρακάτω σχήμα (δεξιά) απεικονίζονται τα αποτελέσματα για αυτές τις δύο τιμές του αριθμού CFL. Παρατηρούμε ότι η διαφορές στα αποτελέσματα είναι αμελητέες. Συνεπώς μπορούμε να θεωρήσουμε με ασφάλεια ότι τα αποτελέσματα μας είναι ανεξάρτητα του χρονικού βήματος.



Σχήμα 6.3.10: Σύγκριση της καμπύλης υπερπίεσης για διαφορετική χρονική διάρκεια έναυσης της καύσης (αριστερά) και για διαφορετικούς αριθμούς CFL (δεξιά).

6.3.4 Ανάλυση LES

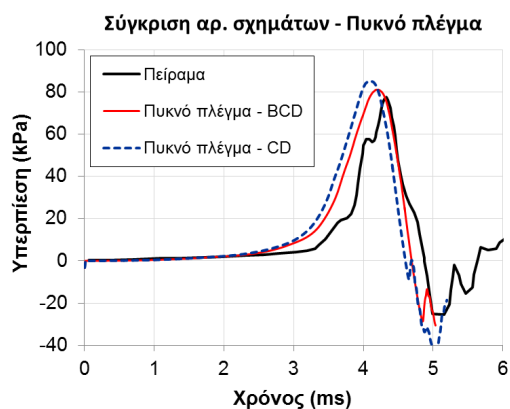
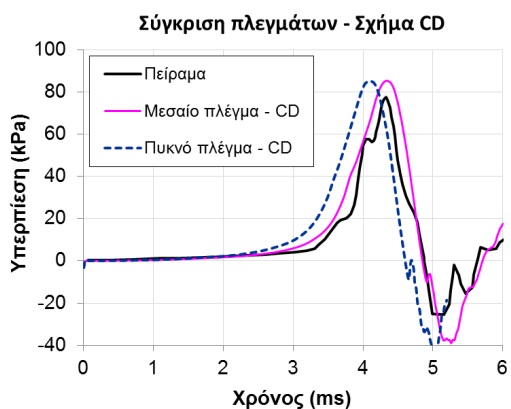
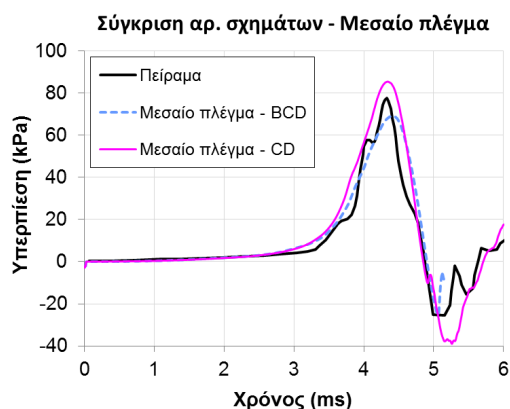
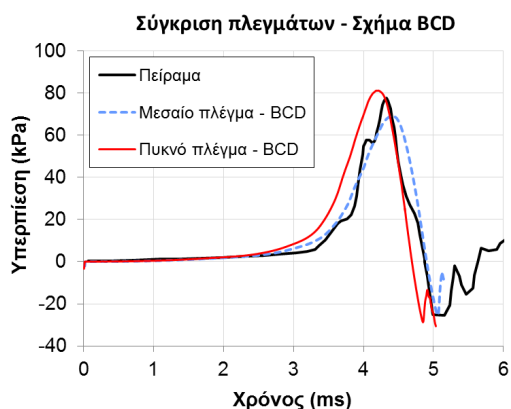
Δύο σημαντικές παράμετροι σε μια προσομοίωση LES είναι η πυκνότητα του πλέγματος και το σχήμα διακριτοποίησης των όρων μεταφοράς. Όπως αναφέραμε στη §3.1.4.2, η πυκνότητα του πλέγματος έχει σημασία για το ποσοστό της τύρβης το οποίο θα επιλυθεί, ενώ το σχήμα διακριτοποίησης των όρων μεταφοράς στην ελαχιστοποίηση της αριθμητικής διάχυσης ώστε να μην γίνεται απόσβεση των επιλυόμενων τυρβωδών διακυμάνσεων. Το αριθμητικό σχήμα που χρησιμοποιήθηκε μέχρι τώρα για τους όρους μεταφοράς των εξισώσεων ορμής (οι οποίες έχουν και την μεγαλύτερη σημασία), ήταν το φραγμένο σχήμα κεντρικών διαφορών. Το σχήμα αυτό επιλέχτηκε λόγω της ευστάθειας του καθώς έχει την επιθυμητή ιδιότητα της συνολικά μειούμενης διακύμανσης (TVD, §4.4), ενώ διατηρεί όπου μπορεί την ακρίβεια των κεντρικών διαφορών. Παρόλα αυτά για να διατηρηθεί η TVD ιδιότητα, όλα τα σχήματα αυτή της κατηγορίας στα ακρότατα ισοδυναμούν με το απλό ανάντη σχήμα, με αποτέλεσμα η ακρίβεια τους να μειώνεται. Έτσι το σχήμα των κεντρικών διαφορών αλλά και άλλα πιο ειδικά σχήματα διακριτοποίησης υψηλής ακρίβειας είναι αυτά που προτιμούνται σε μια LES προσομοίωση. Για παράδειγμα στην περίπτωση της έκρηξης που μελετάμε, το σχήμα κεντρικών διαφορών χρησιμοποιείται στις προσομοιώσεις των Gubba (2009), Gubba et al. (2008, 2011) και Abdel-Raheem et al. (2015), ενώ σε άλλες περιπτώσεις έκρηξης μικρής κλίμακας ένα είδος σχήματος φραγμένων κεντρικών διαφορών χρησιμοποιείται από τους Di Sarli et al. (2009, 2009b, 2012).

Το κλασικό σχήμα κεντρικών διαφορών σε συνδυασμό με τη μέθοδο LES έχει χρησιμοποιηθεί με ιδιαίτερη επιτυχία στον κώδικα ADREA-HF που χρησιμοποιούμε, τόσο σε προσομοιώσεις LES σε κανάλια και οδικές χαράδρες όσο και σε προσομοιώσεις διασποράς υδρογόνου (Κουτσουράκης 2014). Στην παρούσα παράγραφο θα εξετάσουμε τη συμπεριφορά του για την περίπτωση έκρηξης που μελετάμε. Η σύγκριση των αριθμητικών σχημάτων θα γίνει και στα δύο πλέγματα (μεσαίο και πυκνό - Πίνακας 6.2.2). Υπενθυμίζουμε ότι όλα τα αποτελέσματα που έχουμε παρουσιάσει μέχρι τώρα έχουν παραχθεί με το μεσαίο πλέγμα και το σχήμα φραγμένων κεντρικών διαφορών.

Στο Σχήμα 6.3.11 παρουσιάζονται οι καμπύλες της υπερπίεσης συναρτήσει του χρόνου για τα δύο πλέγματα (μεσαίο και πυκνό) και τα δύο σχήματα διακριτοποίησης (BCD: φραγμένες κεντρικές διαφορές, CD: συνήθεις κεντρικές διαφορές δεύτερης τάξης). Σε κάθε διάγραμμα του σχήματος γίνεται είτε σύγκριση των πλεγμάτων για το ίδιο σχήμα διακριτοποίησης, είτε σύγκριση των σχημάτων διακριτοποίησης για το ίδιο πλέγμα. Έτσι προκύπτουν συνολικά τέσσερα διαγράμματα.

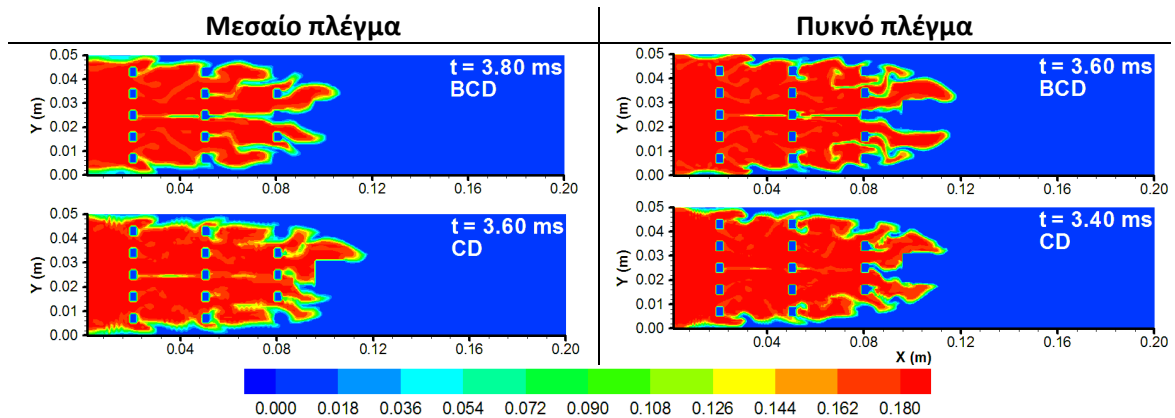
Στο **πρώτο διάγραμμα** (πάνω αριστερά), γίνεται σύγκριση των πλεγμάτων για το σχήμα των φραγμένων κεντρικών διαφορών. Δύο είναι οι κύριες διαφορές που παρατηρούνται στο πυκνό πλέγμα σε σύγκριση με το μεσαίο. Πρώτον, ο χρόνος στον οποίο η πίεση αρχίζει να αυξάνει είναι πιο μικρός όπως και ο χρόνος στον οποίο επιτυγχάνεται η μέγιστη υπερπίεση. Δεύτερον, η μέγιστη υπερπίεση είναι μεγαλύτερη (συγκεκριμένα 1.17 φορές) με αποτέλεσμα να επιτυγχάνεται πολύ καλύτερη συμφωνία με το πείραμα.

Στο **δεύτερο διάγραμμα** (πάνω δεξιά) γίνεται σύγκριση των δύο αριθμητικών σχημάτων διακριτοποίησης στο μεσαίο πλέγμα. Παρατηρούμε ότι η αλλαγή του σχήματος από το BCD στο CD οδηγεί σε αύξηση της μέγιστης υπερπίεσης κατά 1.24 φορές. Η διαφορά αυτή μπορεί να θεωρηθεί σαν το αποτέλεσμα της επιπλέον τύρβης που επιλύεται. Στο **τρίτο διάγραμμα** (κάτω αριστερά) απεικονίζεται η σύγκριση των πλεγμάτων για το CD σχήμα. Διαφορά υπάρχει μόνο ως προς τον χρόνο στον οποίο το μέγιστο επιτυγχάνεται, η οποία όπως είδαμε παρουσιάζεται και στο BCD σχήμα. Σε αντίθεση όμως με το BCD σχήμα, η μέγιστη υπερπίεση που προβλέπεται είναι η ίδια και για τα δύο πλέγματα. Αυτό είναι ένα σημαντικό αποτέλεσμα, καθώς φαίνεται ότι το CD σχήμα επιτυγχάνει καλύτερη ανεξαρτησία πλέγματος σε σχέση με το BCD. Ένας πιθανός λόγος για αυτό, είναι η μεγαλύτερη αριθμητική διάχυση που έχει το BCD σχήμα σε σχέση με το CD σχήμα, η οποία μειώνεται με την πύκνωση του πλέγματος με αποτέλεσμα να προκαλούνται διαφοροποιήσεις στα αποτελέσματα. Τέλος στο **τέταρτο διάγραμμα** (κάτω δεξιά) γίνεται η σύγκριση των δύο αριθμητικών σχημάτων στο πυκνό πλέγμα. Παρατηρούμε ότι οι καμπύλες είναι αρκετά πιο κοντά η μια στην άλλη από ότι στην περίπτωση του μεσαίου πλέγματος, για τον λόγο που αναφέραμε προηγουμένως. Η μέγιστη υπερπίεση στο BCD σχήμα είναι ελάχιστα μικρότερη από αυτή του CD σχήματος. Περαιτέρω πύκνωση του πλέγματος αναμένεται να κάνει τις δύο καμπύλες να ταυτιστούν.

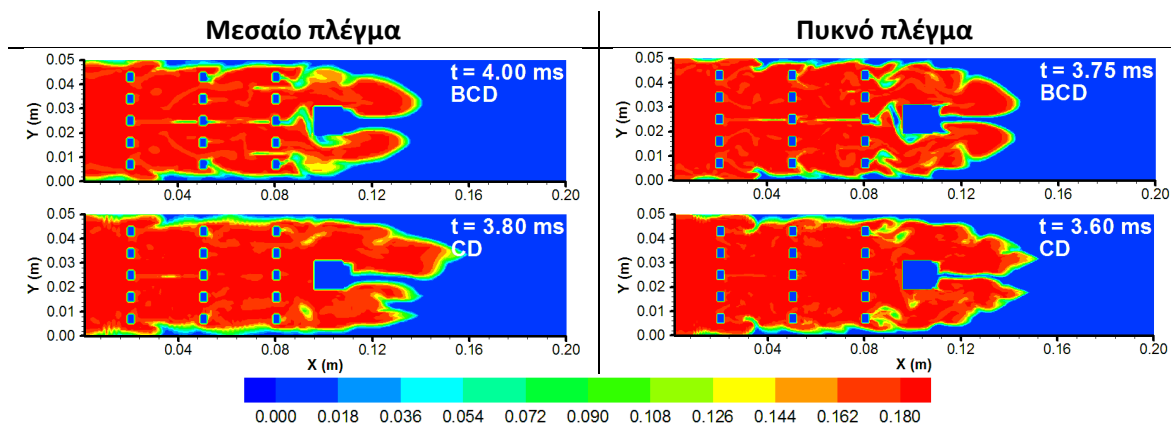


Σχήμα 6.3.11: Σύγκριση των υπολογιστικών αποτελεσμάτων για δύο διαφορετικά πλέγματα και δύο διαφορετικά αριθμητικά σχήματα διακριτοποίησης των όρων συναγωγής των εξισώσεων ορμής (BCD: φραγμένες κεντρικές διαφορές, CD: συνήθεις κεντρικές διαφορές δεύτερης τάξης).

Στο Σχήμα 6.3.12 και Σχήμα 6.3.13 απεικονίζεται η μορφή της φλόγας τη στιγμή που φτάνει το κεντρικό εμπόδιο και τη στιγμή που το έχει ξεπεράσει, για τα δύο πλέγματα και τα δύο σχήματα διακριτοποίησης. Παρατηρούμε τη μεγαλύτερη λεπτομέρεια στην απεικόνιση της επιφάνειας της φλόγας στις περιπτώσεις του πυκνού πλέγματος. Η κύρια διαφορά παρατηρείται μεταξύ των σχημάτων διακριτοποίησης. Το σχήμα των κλασικών κεντρικών διαφορών (CD), οδηγεί σε πιο ακανόνιστη μορφή της φλόγας με μεγαλύτερες ασυμμετρίες, κυρίως αφού η φλόγα έχει ξεπεράσει το κεντρικό εμπόδιο.



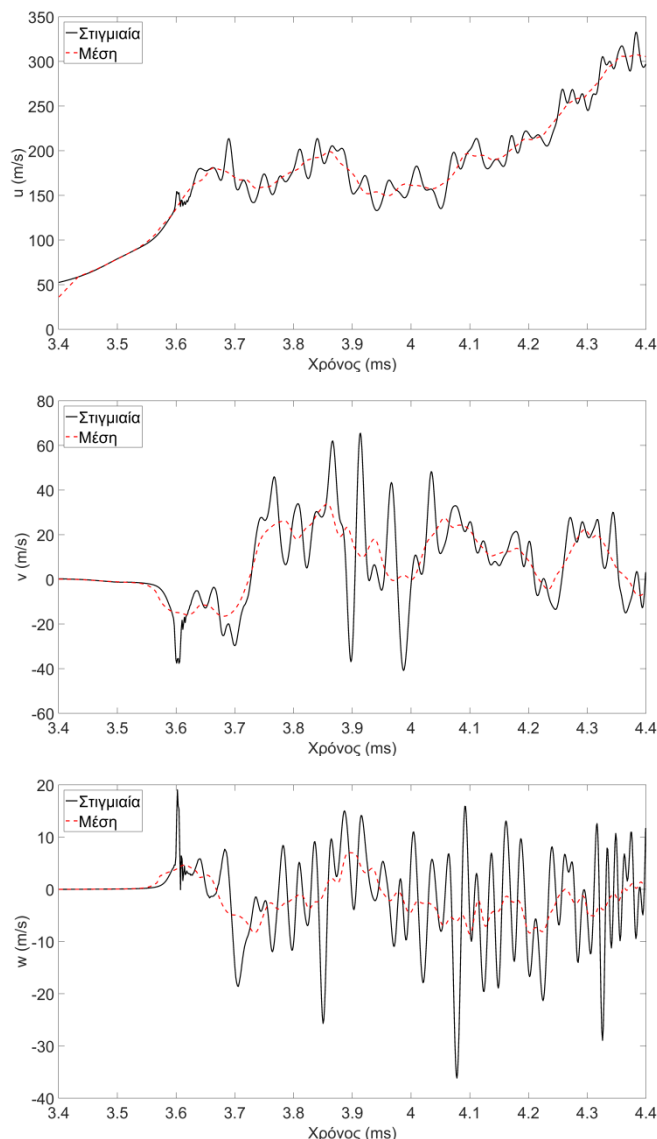
Σχήμα 6.3.12: Απεικόνιση της μορφής της φλόγας (ισοϋψείς κλάσματος μάζας νερού) όταν φτάνει στο κεντρικό εμπόδιο, για δύο πλέγματα και για δύο αριθμητικά σχήματα διακριτοποίησης.



Σχήμα 6.3.13: Απεικόνιση της μορφής της φλόγας (ισοϋψείς κλάσματος μάζας νερού) μετά το κεντρικό εμπόδιο, για δύο πλέγματα και για δύο αριθμητικά σχήματα διακριτοποίησης.

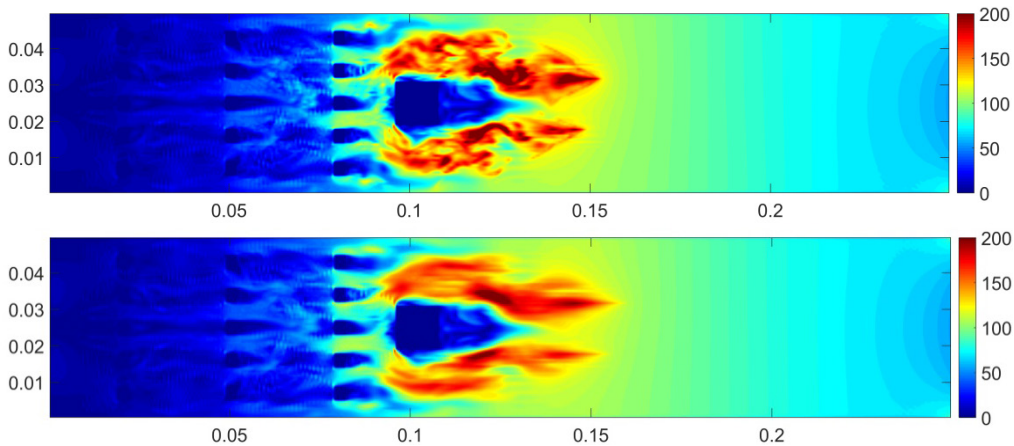
Στο παρακάτω Σχήμα 6.3.14 απεικονίζονται οι χρονοσειρές των συνιστωσών της ταχύτητας σε σημείο που βρίσκεται μετά το κεντρικό εμπόδιο. Στα διαγράμματα αυτά απεικονίζονται τόσο οι στιγμιαίες καμπύλες όσο και οι μέσες. Οι στιγμιαίες ταχύτητες παρατηρούμε ότι αναπτύσσουν έντονες ταλαντώσεις, κυρίως στην v και στην w συνιστώσα της ροής, οι οποίες μπορούν να ερμηνευτούν σαν τυρβώδεις διακυμάνσεις οι οποίες επιλύονται από τη μέθοδο LES που χρησιμοποιούμε. Οι ταλαντώσεις αυτές ξεκινάνε περίπου τη στιγμή που η φλόγα φτάνει το σημείο στο οποίο αναπτύσσονται οι ταχύτητες αυτές. Το γεγονός ότι το φαινόμενο που εξετάζουμε είναι έντονα μεταβατικό, κάνουν τον υπολογισμό της μέσης ροής μη τετριμμένο. Στα παρακάτω

διαγράμματα οι μέσες καμπύλες υπολογίστηκαν με βάση την τεχνική των ‘κινούμενων μέσων’ (moving average). Κάθε σημείο της μέσης καμπύλης υπολογίζεται σαν μέσος όρος 51 σημείων της στιγμιαίας καμπύλης. Τα σημεία αυτά είναι το σημείο της χρονικής στιγμής που θέλουμε να υπολογίσουμε τη μέση τιμή, τα 25 επόμενα και τα 25 προηγούμενα σημεία του. Με αυτό τον τρόπο το χρονικό διάστημα μέσα στο οποίο λαμβάνεται η μέση τιμή ισούται με 0.05 ms. Το χρονικό αυτό διάστημα δεν είναι εύκολο να καθορισθεί. Επιλέχτηκε ίσο με αυτή την τιμή μετά από την εξέταση διάφορων χρονοσειρών, αλλά και με βάση τη βιβλιογραφία. Για παράδειγμα οι Gubba et al. (2011) και Quillatre et al. (2013) επέλεξαν για τις προσομοιώσεις τους στην ίδια γεωμετρία (με καύσιμο το προπάνιο) χρονικό βήμα ίσο με 0.25 και 0.1 ms αντίστοιχα. Χρονικό βήμα ίσο με 0.1 ms επιλέχτηκε και στην εργασία των Di Sarli et al. (2012) για την προσομοίωση άλλου πειράματος παρόμοιας κλίμακας. Το χρονικό βήμα που επιλέξαμε εμείς είναι μικρότερο από τα παραπάνω, καθώς η περίπτωση του υδρογόνου που εξετάζουμε εξελίσσεται πιο γρήγορα (άρα η μέση ροή μεταβάλλεται γρηγορότερα) λόγω της μεγαλύτερης ταχύτητας καύσης.



Σχήμα 6.3.14: Χρονοσειρές (στιγμιαία και μέση) των συνιστωσών της ταχύτητας στο σημείο $x=0.1446$, $\gamma=0.01557$ (πυκνό πλέγμα, σχήμα CD).

Στο Σχήμα 6.3.15 απεικονίζονται οι ισοϋψείς του στιγμιαίου και του μέσου μέτρου της ταχύτητας στο κεντρικό XY επίπεδο στη χρονική στιγμή 3.6 ms, στη οποία η φλόγα έχει ξεπεράσει το κεντρικό εμπόδιο (όπως φαίνεται στο Σχήμα 6.3.13). Στο πάνω διάγραμμα του σχήματος στο οποίο απεικονίζονται οι στιγμιαίες ταχύτητες, παρατηρούμε το ακανόνιστο σχήμα των ισοϋψών το οποίο οφείλεται στην τύρβη που έχει αναπτυχθεί στην περιοχή γύρω από κεντρικό εμπόδιο. Οι μεγαλύτερες τιμές αναπτύσσονται στην περιοχή αυτή και τοπικά ξεπερνούν τα 200 m/s. Στο κάτω διάγραμμα απεικονίζονται οι μέσες τιμές των ταχυτήτων. Για να παραχθεί το διάγραμμα αυτό η διαδικασία των 'κινούμενων μέσων' που περιγράψαμε προηγουμένως εφαρμόστηκε σε κάθε σημείο του πλέγματος (δηλαδή για κάθε χρονοσειρά) του επιπέδου αυτού. Παρατηρούμε ότι οι ισοϋψείς αυτές αποτελούν μια καλή προσέγγιση των στιγμιαίων ταχυτήτων, πράγμα που ενισχύει τη μέθοδο που ακολουθήθηκε για την εξαγωγή των μέσων τιμών.



Σχήμα 6.3.15: Ισοϋψείς στιγμιαίου (πάνω) και μέσου (κάτω) μέτρου της ταχύτητας (m/s) στο κεντρικό XY επίπεδο στη χρονική στιγμή 3.6 ms (πυκνό πλέγμα, σχήμα CD).

Έχοντας υπολογίσει τη χρονοσειρά της μέσης ταχύτητας, μπορούμε εύκολα να υπολογίσουμε τόσο την τυρβώδη κινητική ενέργεια όσο και την χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης και την ένταση της. Η τυρβώδη κινητική ενέργεια υπολογίζεται από τη σχέση (δες και §2.1.3):

$$k(t) = \frac{1}{2} \left(\overline{(u - \bar{u})^2} + \overline{(v - \bar{v})^2} + \overline{(w - \bar{w})^2} \right) \quad (6.3.6)$$

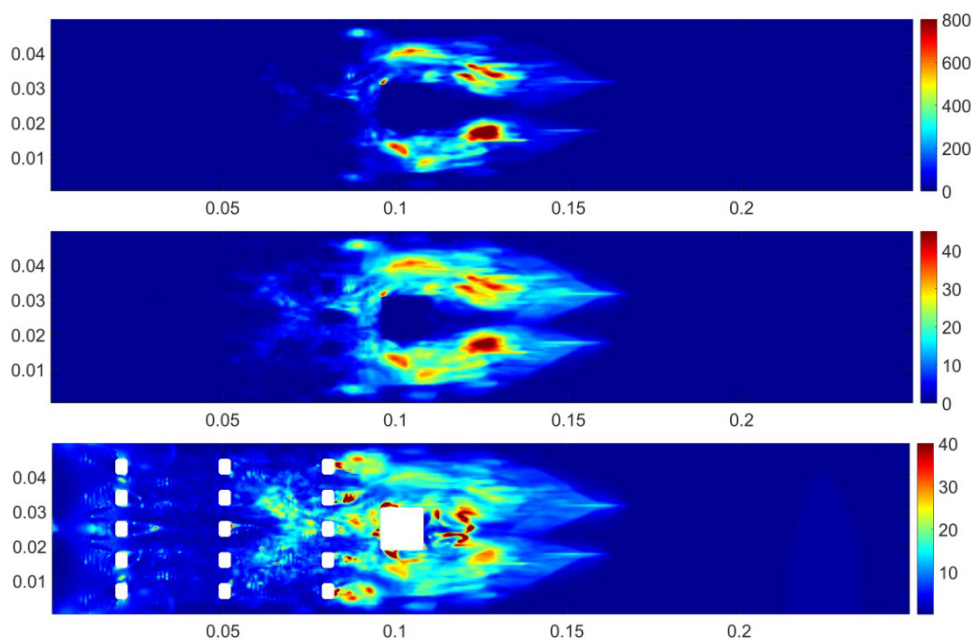
όπου u, v, w οι στιγμιαίες τιμές των ταχυτήτων και $\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}$ οι μέσες. Επειδή το φαινόμενο είναι μεταβατικό η τιμή του k εξαρτάται από τον χρόνο. Συνεπώς οι μέσες τιμές $\overline{(u - \bar{u})^2}, \overline{(v - \bar{v})^2}, \overline{(w - \bar{w})^2}$ υπολογίζονται με τη μέθοδο των 'κινούμενων μέσων', όπως ακριβώς έγινε και για τον υπολογισμό των $\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}$. Η χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης και η ένταση της τύρβης, μπορούν να προσδιοριστούν από τις σχέσεις:

$$u'_0(t) = \sqrt{\overline{(u - \bar{u})^2 + (v - \bar{v})^2 + (w - \bar{w})^2}} = \sqrt{2k(t)} \quad (6.3.7)$$

$$I(t) = \frac{\sqrt{2k(t)}}{U(t)} \quad (6.3.8)$$

όπου $U(t)$ το μέτρο της μέσης ταχύτητας στη χρονική στιγμή t .

Στο Σχήμα 6.3.16 παρουσιάζονται οι ισοϋψείς της τυρβώδους κινητικής ενέργειας, της χαρακτηριστικής ταχύτητας της τύρβης και της έντασης της τύρβης (επί της εκατό) τη χρονική στιγμή 3.6 ms σε XY επίπεδο που περνάει από το κέντρο του αγωγού. Παρατηρούμε ότι οι μεγαλύτερες τιμές της τυρβώδους κινητικής ενέργειας αναπτύσσονται στην περιοχή όπου αναπτύσσονται και οι μεγαλύτερες ταχύτητες, δηλαδή γύρω από το κεντρικό εμπόδιο. Οι μέγιστες τιμές που παρουσιάζονται είναι της τάξεως των $1000 \text{ m}^2/\text{s}^2$. Όπως είναι φυσικό, στην ίδια περιοχή αναπτύσσονται και οι μεγαλύτερες τιμές της χαρακτηριστικής ταχύτητας της τύρβης u'_0 . Η μέση τιμή της είναι περίπου ίση με 20 m/s, ενώ υπάρχουν και περιοχές στις οποίες η ταχύτητα αυτή φτάνει τα 45 m/s. Στην περιοχή του μετώπου της φλόγας οι τιμές αυτές είναι μικρότερες και κυμαίνονται γύρω από τα 5 m/s. Όσο αφορά την ένταση της τύρβης, οι τιμές της είναι αρκετά μεγάλες, καθώς στην περιοχή γύρω από κεντρικό εμπόδιο κυμαίνονται γύρω από το 15%, με τις μέγιστες τιμές σε ορισμένες περιοχές να φτάνουν το 30-40%. Υψηλές τιμές της έντασης παρουσιάζονται και σε περιοχές στις οποίες η τυρβώδη κινητική ενέργεια και οι ταχύτητες δεν είναι πολύ μεγάλες, όπως στην περιοχή μεταξύ δεύτερης και τρίτης σειράς εμποδίων.

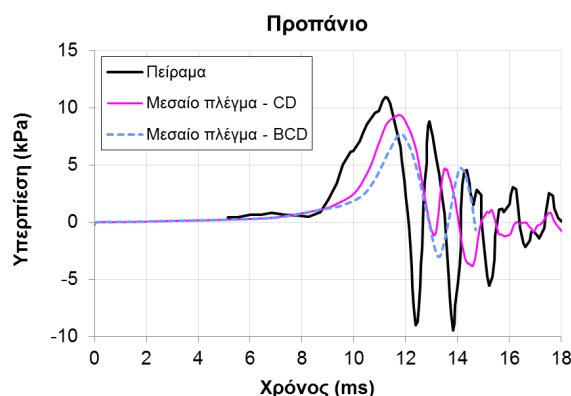


Σχήμα 6.3.16: Ισοϋψείς τυρβώδους κινητικής ενέργειας (πάνω) χαρακτηριστικής ταχύτητας της τύρβης (μέση) και έντασης της τύρβης (κάτω, %) στο κεντρικό XY επίπεδο στη χρονική στιγμή 3.6 ms (πυκνό πλέγμα, σχήμα CD).

6.3.5 Περίπτωση προπανίου

Για να επιβεβαιώσουμε το μοντέλο καύσης που χρησιμοποιήσαμε και στην περίπτωση άλλων καυσίμων, και για να φανεί η αναγκαιότητα της μοντελοποίησης της αστάθειας θερμοδιάχυσης στην περίπτωση του υδρογόνου, προχωρήσαμε στην προσομοίωση της περίπτωσης όπου σαν καύσιμο λαμβάνεται το προπάνιο (σε στοιχειομετρική αναλογία με τον αέρα). Σε αυτή την περίπτωση ο συντελεστής Ξ_{ip} του μοντέλου τέθηκε ίσος με 1 (στη περίπτωση του υδρογόνου ο συντελεστής αυτός ήταν ίσος με 2) επειδή η αστάθεια θερμοδιάχυσης δεν παρουσιάζεται στην καύση στοιχειομετρικών μειγμάτων προπανίου-αέρα καθώς ο αριθμός Lewis είναι μεγαλύτερος της μονάδας.

Στο παρακάτω σχήμα απεικονίζονται τα αποτελέσματα της προσομοίωσης τόσο στην περίπτωση του σχήματος των φραγμένων κεντρικών διαφορών (BCD) όσο και στην περίπτωση που χρησιμοποιήθηκαν οι συνήθεις κεντρικές διαφορές (CD). Παρατηρούμε ότι τα αποτελέσματα είναι σε πολύ καλή συμφωνία με το πείραμα. Συγκρίνοντας τα δύο σχήματα διακριτοποίησης, παρατηρούμε ότι οι διαφορές είναι παρόμοιες με αυτές που συναντήσαμε στην περίπτωση του υδρογόνου (Σχήμα 6.3.11). Στην περίπτωση των CD η συμφωνία με το πείραμα είναι καλύτερη καθώς η μέγιστη υπερπίεση προβλέπεται με μεγαλύτερη ακρίβεια. Παρόλα αυτά υπάρχει μια υποεκτίμηση της ίση με 15%, ενώ το πλάτος των μετέπειτα ταλαντώσεων υποεκτιμάτε περισσότερο.



Σχήμα 6.3.17: Σύγκριση με το πείραμα των υπολογιστικών αποτελεσμάτων (Πλέγμα 1) της υπερπίεσης συναρτήσει του χρόνου για δύο διαφορετικά αριθμητικά σχήματα διακριτοποίησης των όρων συναγωγής των εξισώσεων ορμής (BCD: φραγμένες κεντρικές διαφορές, CD: συνήθεις κεντρικές διαφορές δεύτερης τάξης).

Τέλος συγκρίνοντας τις υπερπίεσεις που αναπτύσσονται στο υδρογόνο και στο προπάνιο, παρατηρούμε ότι η μέγιστη υπερπίεση στο υδρογόνο φτάνει σχεδόν τα 80 kPa, ενώ στο προπάνιο τα 11kPa. Συνεπώς στο υδρογόνο αναπτύσσεται 8 φορές μεγαλύτερη υπερπίεση. Αυτό όπως είδαμε οφείλεται στην αστάθεια θερμοδιάχυσης που εμφανίζεται στην περίπτωση του υδρογόνου και η οποία ουσιαστικά διπλασιάζει την ταχύτητα καύσης της, στην μεγαλύτερη ταχύτητα στρωτής καύσης (3.3 φορές μεγαλύτερη) καθώς και από το γεγονός ότι η ταχύτητα στρωτής καύσης αυξάνει με την πίεση στην περίπτωση του υδρογόνου αυξάνοντας την έως και 1.3 φορές στην περίπτωση που εξετάσαμε. Παρατηρούμε ότι το γινόμενο των τιμών αυτών ισούται με 8.58, τιμή η οποία είναι πολύ κοντά στον λόγο των μέγιστων πιέσεων που αναπτύσσονται στα δύο καύσιμα.

6.4 Συμπεράσματα

Στο Κεφάλαιο αυτό έγινε αξιολόγηση της μεθοδολογίας μας στην περίπτωση έκρηξης αέριου μείγματος σε μικρής κλίμακας αγωγό με εμπόδια, για την οποία υπάρχουν διαθέσιμα πειραματικά αποτελέσματα. Εξετάστηκε κυρίως η περίπτωση του υδρογόνου, αλλά πραγματοποιήθηκαν και προσομοιώσεις για το προπάνιο.

Καταρχήν, η σύγκριση με το πείραμα έδειξε ότι η μεθοδολογία που ακολουθήθηκε είναι σε θέση να προσομοιώσει με πολύ καλή ακρίβεια τις υπερπίεσεις που αναπτύσσονται κατά τη διάρκεια της έκρηξης, τόσο στην περίπτωση του υδρογόνου, όσο και του προπανίου. Από τις προσομοιώσεις που έγιναν αναδείχτηκε η σημασία της μοντελοποίησης της αστάθειας θερμοδιάχυσης, η οποία

αναπτύσσεται στις περιπτώσεις όπου ο αριθμός Lewis είναι μικρότερος της μονάδας και η οποία λαμβάνεται υπ' όψιν στο μοντέλο καύσης μέσω του συντελεστή Ξ_{ip} . Για την περίπτωση του υδρογόνου στο οποίο η αστάθεια αυτή είναι έντονη, η τιμή του συντελεστή αυτού πρέπει να είναι ίση με 2 (§4.2) ενώ στην περίπτωση του προπανίου στο οποίο η αστάθεια αυτή απουσιάζει ο συντελεστής αυτός ισούται με 1 (που σημαίνει ότι ο συντελεστής αυτός δεν έχει επίδραση στο μοντέλο καύσης). Στην περίπτωση του υδρογόνου, δείξαμε ότι σημαντική παράμετρος για τη μοντελοποίηση της αστάθειας θερμοδιάχυσης είναι ο ορισμός της κρίσιμης απόστασης η οποία απαιτείται για να δημιουργηθεί η αστάθεια αυτή. Βασιζόμενοι στην εργασία των Kim et al. (2015), η ακτίνα αυτή τέθηκε ίση με 0.1 cm, τιμή για την οποία λάβαμε καλύτερη συμφωνία με το πείραμα σε σύγκριση με τις μεγαλύτερες τιμές (π.χ. 0.25 cm) που προτείνονται από τον Molkon (2012).

Στη περίπτωση του υδρογόνου, πραγματοποιήθηκε σύγκριση της μεθόδου LES με το μοντέλο τύρβης RNG k-ε. Το μοντέλο RNG k-ε οδήγησε σε μεγάλη υπερεκτίμηση της πίεσης που αναπτύσσεται στον αγωγό λόγω των έντονης τύρβης που προβλέπει. Πρέπει να επισημάνουμε ότι το γεγονός αυτό δεν πρέπει να μας οδηγήσει στο συμπέρασμα ότι το μοντέλο αυτό είναι ακατάλληλο για την προσομοίωση αυτού του φαινομένου, αλλά στο συμπέρασμα ότι ο συνδυασμός του με το μοντέλο καύσης δεν είναι ο κατάλληλος. Η χρήση κάποιου άλλου μοντέλου καύσης και κυρίως κάποιας άλλης εξίσωσης που να συνδέει την ταχύτητα καύσης με τις τυρβώδεις διακυμάνσεις αντί της σχέσης του Yakhot που χρησιμοποιήσαμε εδώ, ίσως να έδινε καλύτερα αποτελέσματα.

Μελετήθηκαν δύο σχήματα διακριτοποίησης των όρων συναγωγής, οι φραγμένες κεντρικές διαφορές και οι συνήθεις κεντρικές διαφορές, μελετώντας την επίδραση που έχει η πυκνωση του πλέγματος στην καμπύλη υπερπίεσης για τα σχήματα αυτά. Το σχήμα των συνήθεις κεντρικών διαφορών έδειξε να είναι λιγότερο ευαίσθητο ως προς το πλέγμα καθώς η καμπύλη υπερπίεσης απλά μετατοπίστηκε ελαφρώς ως προς τον χρόνο χωρίς να αλλάξει ούτε το μέγιστο της ούτε η μορφή της, σε αντίθεση με το σχήμα των φραγμένων κεντρικών διαφορών στο οποίο η πυκνωση του πλέγματος οδήγησε σε αύξηση της μέγιστης υπερπίεσης. Στο πυκνό πλέγμα, τα δύο σχήματα έδωσαν σχεδόν τα ίδια αποτελέσματα, πράγμα το οποίο μπορεί να μας οδηγήσει στο συμπέρασμα ότι επιτυγχάνεται ανεξαρτησία πλέγματος. Αυτό βέβαια θα πρέπει να επιβεβαιωθεί εξετάζοντας ακόμα πυκνότερα πλέγματα.

Για το πυκνό πλέγμα και το σχήμα των κεντρικών διαφορών πραγματοποιήθηκε μια τυπική ανάλυση των αποτελεσμάτων που προκύπτουν από μια LES προσομοίωση. Έτσι παρουσιάστηκαν χρονοσειρές των ταχυτήτων και υπολογίστηκαν οι τυρβώδεις διαταραχές, η τυρβώδεις κινητική ενέργεια και η ένταση της τύρβης που επιλύεται από τη μέθοδο των μεγάλων δινών. Τα αποτελέσματα που δείξαμε αποτελούν ένα μικρό κλάσμα της ανάλυσης που μπορεί να γίνει από μια και μόνο προσομοίωση LES, και παρουσιάστηκαν για να αναδείξουμε τις δυνατότητες που προκύπτουν για εις βάθος μελέτη του φαινομένου από την εφαρμογή της μεθόδου αυτής.

Κεφάλαιο 7

Προσομοίωση έκρηξης μεγάλης κλίμακας σε ελεύθερο περιβάλλον

Imagination is more important than knowledge

Albert Einstein

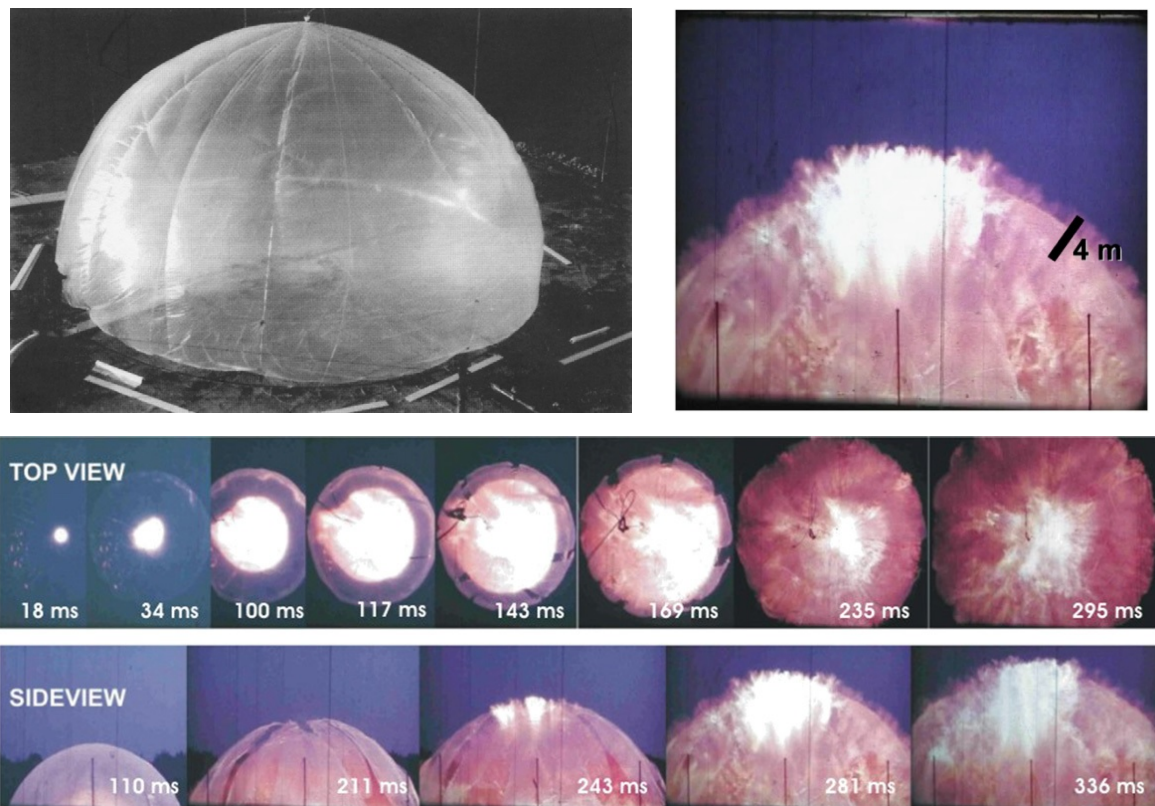
Στο κεφάλαιο αυτό θα γίνει προσομοίωση έκρηξης αέριου μείγματος υδρογόνου-αέρα σε ελεύθερο περιβάλλον. Σκοπός της προσομοίωσης αυτής είναι η αξιολόγηση της μεθοδολογίας που περιγράφηκε στο Κεφάλαιο 4 σε εκρήξεις μεγάλης κλίμακας. Πρόκειται για το μεγαλύτερο πείραμα έκρηξης υδρογόνου που έχει καταγραφεί, αφού το αρχικό μείγμα καταλαμβάνει ημισφαίριο διαμέτρου 20 μέτρων. Αρχικά θα εξεταστούν κάποιες αριθμητικές παράμετροι, όπως είναι το πλέγμα και το μέγεθος του υπολογιστικού χωρίου. Στη συνέχεια θα αξιολογηθεί το μοντέλο καύσης που παρουσιάσαμε και θα γίνει σύγκριση με κάποια άλλα μοντέλα. Τέλος θα γίνει σύγκριση μεταξύ των μεθόδων LES και RANS.

7.1 Εισαγωγή

Το πείραμα που θα προσομοιώσουμε διαξεύχθηκε στη Γερμανία (από το Fraunhofer Institute for Propellants and Explosives) το 1983 και είχε σαν κύριο σκοπό την μελέτη της εξάρτησης της ταχύτητας της φλόγας από το αρχικό μέγεθος του μείγματος. Το μείγμα είναι σχεδόν στοιχειομετρικό και περιορίζεται από ένα ημισφαίριο (το οποίο είναι από πολυαιθυλένιο, λεπτού πάχους), όπως φαίνεται στο Σχήμα 7.1.1. Το ημισφαίριο αυτό εδράζεται στο έδαφος σε 16 σημεία με τη βοήθεια ενός δικτύου συρμάτων, ώστε αντισταθμιστούν οι ανωστικές δυνάμεις. Διεξήχθησαν διάφορα πειράματα (Molkon et al. 2006) με ακτίνες 1.53, 2.88, 5.0 και 10.0 μέτρα. Εδώ θα εξετάσουμε την περίπτωση των 10.0 m στο οποίο η συγκέντρωση υδρογόνου ήταν 29.7% v/v (ονομασία πειράματος GHT 34). Η έναυση του μείγματος γίνεται στο έδαφος, στο κέντρο του κύκλου που σχηματίζει το ημισφαίριο με αυτό. Καθώς η καύση εξελίσσεται, το περίβλημα του ημισφαιρίου τεντώνεται και σπάει τη στιγμή που η φλόγα έχει φτάσει περίπου στη μισή ακτίνα. Στη συνέχεια το άκαυστο μείγμα όντας ελεύθερο και εξαιτίας της αυξημένης πίεσης, αρχίζει και εξαπλώνεται φτάνοντας σε απόσταση (μέχρι να καεί ολόκληρο) έως τη διπλάσια ακτίνα. Η μέγιστη ταχύτητα του μετώπου της φλόγας μετρήθηκε ίση με 84 m/s ενώ η αρχική ίση με 2.39 m/s. Το σφάλμα στη μέτρηση της ταχύτητας είναι 5% χωρίς να λαμβάνονται υπ' όψιν οι ασυμμετρίες στο σχήμα της φλόγας. Η φλόγα κατέστη ορατή προσθέτοντας σκόνη NaCl στο μείγμα.

Η πίεση μετρήθηκε σε διάφορες αποστάσεις από το σημείο έναυσης. Η χρονική εξέλιξη της πίεσης στις αποστάσεις 2, 5, 8, 18, 35 και 80 μέτρα είναι διαθέσιμη για σύγκριση. Όπως θα δούμε και στη

συνέχεια στα πειραματικά αποτελέσματα, η πίεση σε όλους τους αισθητήρες οι οποίοι βρισκόταν μέσα στο μείγμα απέτυχε να επανέλθει στη ατμοσφαιρικά επίπεδα μετά το τέλος της έκρηξης, με εξαίρεση τον αισθητήρα που βρισκόταν στα 5 m. Αυτό είναι ένδειξη ότι παρά τα μέτρα τα οποία πάρθηκαν για να προστατευτούν οι αισθητήρες από τη θερμότητα, κάποιος από αυτούς τελικά επήλθαν σε αστοχία. Αν και η σύγκριση των υπολογιστικών αποτελεσμάτων με τους αισθητήρες αυτούς δεν είναι αξιόπιστη, τα αποτελέσματα θα παρουσιαστούν και για αυτούς για λόγους πληρότητας.



Σχήμα 7.1.1: Αρχική μορφή ημισφαιρίου στο οποίο υπάρχει το μείγμα υδρογόνου-αέρα (πάνω αριστερά) και φωτογραφίες από το πείραμα κατά τη διάρκεια της έκρηξης (Molkon et al. 2006; 2007).

Το πείραμα αυτό έχει προσομοιωθεί ξανά από τους Molkon et al. (2006; 2007) και García et al. (2010). Στην εργασία των Molkon et al. (2006) γίνεται σύγκριση δύο μοντέλων, ενός μοντέλου που βασίζεται στη σχέση του Yakhot για την τυρβώδη ταχύτητα καύσης και ενός μοντέλου που βασίζεται στη φράκταλ θεωρία. Το πρώτο μοντέλο παρουσίασε καλύτερη συμπεριφορά σε σχέση με το δεύτερο. Στο φράκταλ μοντέλο δοκιμάστηκαν δύο τιμές της φράκταλ διάστασης, 2.22 και 2.33 και βρέθηκε ότι η τιμή 2.22 δίνει καλύτερα αποτελέσματα. Στην εργασία των García et al. (2010) γίνεται σύγκριση 6 διαφορετικών μοντέλων υπολογιστικής μηχανικής, από 6 διαφορετικές ερευνητικές ομάδες. Τα αποτελέσματα ήταν αρκετά διαφορετικά μεταξύ των μοντέλων αν και συνολικά η ακρίβεια πρόγνωσης της μέγιστης υπερπίεσης θεωρήθηκε ικανοποιητική. Οι συγγραφείς τελικά δεν μπόρεσαν να καταλήξουν ότι κάποιο συγκεκριμένο μοντέλο τύρβης ή καύσης υπερέφερε συνολικά των υπολοίπων. Επίσης αναφέρουν ότι τα αποτελέσματα φαίνεται να είναι ευαίσθητα ως προς τις οριακές συνθήκες και το πλέγμα καθώς και από τις αρχικές υποθέσεις για την προέλαση της φλόγας, καταλήγοντας ότι πρέπει να γίνουν περισσότερες μελέτες πάνω σε αυτά τα ζητήματα.

Συνεπώς, πέραν της αξιολόγησης της μεθοδολογίας που ακολουθήθηκε, αυτό που προσπαθούμε να επιτύχουμε από την παρούσα προσομοίωση είναι να ελεγχθεί η συμπεριφορά και η επίδραση των μοντέλων τύρβης και καύσης όσο και διαφόρων αριθμητικών λεπτομερειών χρησιμοποιώντας τον ίδιο κώδικα υπολογιστικής μηχανικής έτσι ώστε η σύγκριση να είναι απαλλαγμένη από τυχόν διαφορές σε αριθμητικές παραμέτρους όπως είναι το πλέγμα και τα σχήματα διακριτοποίησης.

7.2 Δεδομένα μοντελοποίησης

Το **βασικό μοντέλο** το οποίο χρησιμοποιήθηκε για την προσομοίωση του φαινομένου παρουσιάστηκε στο Κεφάλαιο 4. Ο Πίνακας 7.2.1 απεικονίζει τις τιμές των κυρίων παραμέτρων του μοντέλου καύσης που χρησιμοποιήθηκαν. Η παράμετρος ψ επιλέχθηκε ίση με 0.5, όπως προτείνουν οι Xiao et al. (2012) για στοιχειομετρικά μείγματα, ενώ η χαρακτηριστική ακτίνα R_0 ίση με 1.2. Ο συντελεστής Ξ_{ip} τέθηκε ίσως με 1.25 σύμφωνα με το Σχήμα 4.2.2. Παρατηρούμε ότι το γινόμενο του συντελεστή αυτού (ο οποίος ουσιαστικά επιβάλλεται από την αρχή της έκρηξης) με την στρωτή ταχύτητα καύσης ισούται με 2.45 m/s, τιμή η οποία είναι πολύ κοντά στην πειραματικά μετρούμενη ταχύτητα της φλόγας (2.39 m/s) στο αρχικό στάδιο της έκρηξης. Λόγω του μεγάλου όγκου του μείγματος η τιμή της κρίσιμης ακτίνας (τόσο της R_0 όσο και της R_{ip}) δεν αναμένεται να έχει επιρροή στα αποτελέσματα.

Όπως βλέπουμε από τον πίνακα δοκιμάστηκαν διάφορες τιμές της φράκταλ διάστασης, ώστε να μελετηθεί η επίδραση της αποτελέσματα. Επίσης, εξετάστηκε και η σχέση (2.5.3) των North & Santavicca (1990) η οποία προβλέπει την φράκταλ διάσταση με βάση τον λόγο u'_0/S_L .

Πίνακας 7.2.1: Παράμετροι μοντέλου καύσης

Παράμετρος	Τιμή
Στρωτή ταχύτητα καύσης S_{L0}	1.96 m/s
Εκθέτης ε	0.565
Λόγος επέκτασης E	7.2
Σταθερά ψ	0.50
Ακτίνα R_0	1.2 m
Συντελεστής Ξ_{ip}	1.25
Ακτίνα R_{ip}	0.1 m
Διάσταση φράκταλ	2.10-2.30

Το **δεύτερο μοντέλο** το οποίο δοκιμάστηκε αποτελεί μια απλοποιημένη έκδοση του βασικού το οποίο δεν περιλαμβάνει το fractal υπομοντέλο, ώστε να εξεταστεί η επίδραση του στα αποτελέσματα. Η τυρβώδης ταχύτητα καύσης υπολογίζεται από τη σχέση:

$$S_T = \Xi_k \cdot S_L \cdot \exp\left[\frac{u_0'^2}{S_T^2}\right] \quad (7.2.1)$$

Η απλοποιημένη αυτή έκδοση του μοντέλου έχει χρησιμοποιηθεί και από τους Molkon et al. (2006), με σταθερά ψ ίση με 1. Η ίδια τιμή χρησιμοποιήθηκε και εδώ. Η διαφορετική τιμή της σταθεράς αυτής σε σχέση με το αρχικό μοντέλο μπορεί να αιτιολογηθεί από το γεγονός ότι τα δύο αυτά μοντέλα αν και φαινομενολογικά είναι παρόμοια είναι ουσιαστικά διαφορετικά. Στο απλοποιημένο μοντέλο η σταθερά Ξ_k πρέπει να θεωρηθεί σαν ένας γενικός συντελεστής ρυθμισμού της φλόγας ο οποίος περιλαμβάνει τόσο τα φαινόμενα που σχετίζονται με τον συντελεστή Ξ_{ip} όσο και της φράκταλ γεωμετρίας της φλόγας τα οποία μοντελοποιούνται ξεχωριστά στο βασικό μοντέλο. Συνεπώς η σταθερά ψ πρέπει να είναι μεγαλύτερη στο απλοποιημένο μοντέλο σε σχέση με το βασικό.

Το **τρίτο μοντέλο** καύσης το οποίο δοκιμάστηκε είναι το μοντέλο απορρόφησης των δινών (EDC) το οποίο παρουσιάστηκε στη §3.2.3. Για ευκολία επαναλαμβάνουμε εδώ τη σχέση που χρησιμοποιήθηκε για τον υπολογισμό του ρυθμού καύσης:

$$\bar{\omega}_f = -A\bar{\rho}\frac{\varepsilon}{k} \min \left[\frac{\tilde{Y}_f}{\nu_f MW_f}, \frac{\tilde{Y}_{O_2}}{\nu_{O_2} MW_{O_2}}, B \frac{\sum_{i=1}^{np} \tilde{Y}_i}{\sum_{i=1}^{np} \nu_i MW_i} \right] \quad (7.2.2)$$

Η σταθερά A η οποία χρησιμοποιήθηκε ήταν η 1.8 για την οποία υπήρχε καλύτερη συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα, ενώ η σταθερά B τέθηκε ίση με 1.

Όσο αφορά τη **μοντελοποίηση της τύρβης**, εξετάστηκαν τρία μοντέλα σε συνδυασμό με το βασικό μοντέλο καύσης: το RNG μοντέλο, το k-ε και το RNG k-ε. Το απλοποιημένο μοντέλο καύσης χρησιμοποιήθηκε μόνο σε συνδυασμό με το RNG LES ενώ το EDC με το RNG k-ε. Η επιλογή του k-ε μοντέλου τύρβης για το EDC μοντέλο έγινε λόγω της έντονης εξάρτησης του μοντέλου αυτού από τις τιμές του k και ε καθώς και λόγω του γεγονότος ότι το μοντέλο χρησιμοποιείται ευρέως σε συνδυασμό με το k-ε. Ο παρακάτω πίνακας συνοψίζει τις προσομοιώσεις που έγιναν όσο αφορά τα μοντέλα τύρβης και καύσης.

Πίνακας 7.2.2: Συνδυασμοί μοντέλων τύρβης και καύσης που εξετάστηκαν

Μοντέλο καύσης \ Μοντέλο τύρβης	RNG LES	k-ε	RNG k-ε
Βασικό μοντέλο	✓	✓	✓
Απλοποιημένο μοντέλο	✓		
EDC			✓

7.2.1 Υπολογιστικές λεπτομέρειες

Δοκιμάστηκαν διάφορα μεγέθη υπολογιστικού χωρίου και διάφορα πλέγματα για να εξασφαλίσουμε ότι τα αποτελέσματα είναι ανεξάρτητα αυτών. Στους παρακάτω πίνακες απεικονίζονται τα μεγέθη του υπολογιστικού χωρίου και τα χαρακτηριστικά των πλεγμάτων που χρησιμοποιήθηκαν. Το πλέγμα είναι ομοιόμορφο εντός του ημισφαιρίου στο Πλέγμα 1 και Πλέγμα 2 ενώ εκτός αυτού το πλέγμα αραιώνει σταδιακά (συντελεστές επέκτασης 1.04, 1.08 και 1.12) ώστε

να μειωθεί ο υπολογιστικός χρόνος. Στο Πλέγμα 3 το μέγεθος των κελιών αρχίζει να αυξάνει από το κέντρο του ημισφαιρίου (με μικρό όμως συντελεστή επέκτασης εντός του ημισφαιρίου, 1.025) καθώς στο κέντρο του χρησιμοποιείται κελί πολύ μικρού μεγέθους.

Πίνακας 7.2.3: Διαστάσεις υπολογιστικών χωρίων που δοκιμάστηκαν.

Χωρίο (Domain)	Μήκος (m)	Πλάτος (m)	Ύψος (m)
Χωρίο 1	200	200	100
Χωρίο 2	300	300	150
Χωρίο 3	400	400	200

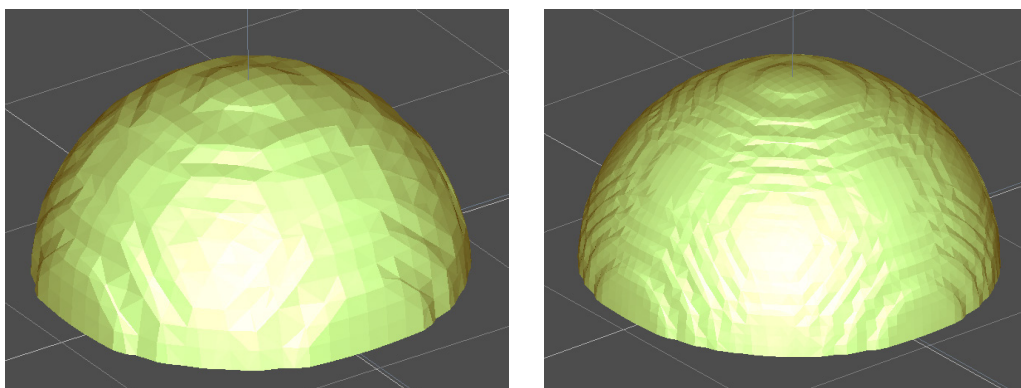
Πίνακας 7.2.4: Χαρακτηριστικά των πλεγμάτων που δοκιμάστηκαν (το πλήθος αναφέρεται στο Χωρίο 1).

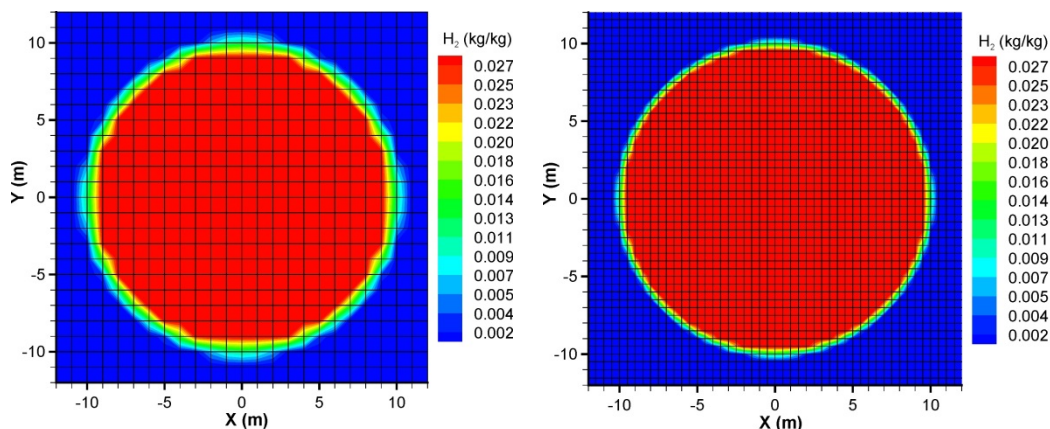
Πλέγμα (Grid)	Πλήθος ενεργών κελιών	Μέγεθος κελιών εντός του ημισφαιρίου (m)
Πλέγμα 1 (Αραιό)	442,225	1.0
Πλέγμα 2 (Μεσαίο)	953,127	0.5
Πλέγμα 3 (Πυκνό)	1,371,791	0.25 – 0.50

Όπως αναφέρθηκε στη §4.3, το πλέγμα που χρησιμοποιεί ο κώδικας ADREA-HF είναι καρτεσιανό. Συνεπώς μια αρχική δυσκολία στην μοντελοποίηση αυτού του φαινομένου ήταν η ακριβής αναπαράσταση στο πλέγμα αυτό των αρχικών συνθηκών (κλάσματος μάζας των συστατικών) του ημισφαιρίου. Για να οριστούν με ακρίβεια οι αρχικές συνθήκες, χρησιμοποιήθηκε ο εξής αλγόριθμος:

- Στα κελιά τα οποία βρίσκονται ολόκληρα εντός του ημισφαιρίου, το κλάσμα μάζας υπολογίζεται με βάση την αρχική κατ' όγκο συγκέντρωση 29.7%.
- Στα κελιά τα οποία τέμνονται από το ημισφαίριο, υπολογίζεται αρχικά το τμήμα του όγκου τους το οποίο βρίσκεται μέσα στο ημισφαίριο (δηλαδή ο όγκος της τομής κελιού-σφαίρας). Ύστερα, η μάζα η οποία βρίσκεται μέσα σε αυτόν τον όγκο κατανέμεται σε όλο τον όγκο του κελιού και υπολογίζονται τα νέα κλάσματα μάζας.

Με τον παραπάνω τρόπο διασφαλίζουμε ότι η συνολική μάζα θα είναι η ίδια με τη θεωρητική του πειράματος. Στο παρακάτω σχήμα απεικονίζονται οι ισοεπιφάνειες του υδρογόνου και οι ισοϋψείς του στο επίπεδο του εδάφους για δύο διαφορετικά πλέγματα. Παρατηρούμε ότι ακόμα και στο αραιό πλέγμα, η σφαιρική γεωμετρία αναπαρίσταται πολύ καλά.





Σχήμα 7.2.1: Αρχικές συνθήκες: Ισοεπιφάνειες υδρογόνου 0.02 kg/kg (πάνω) και ισοϋψείς υδρογόνου στο επίπεδο του εδάφους μαζί με το πλέγμα (κάτω) για το Πλέγμα 1 (αριστερά) και το Πλέγμα 2 (δεξιά).

Η αρχική θερμοκρασία και πίεση ορίστηκαν ίσες με αυτές του πειράματος, δηλαδή 283 K και 98,900 Pa. Στην περίπτωση των k-ε μοντέλων τύρβης οι αρχικές τιμές των ποσοτήτων k και ε τέθηκαν ίσες με 10^{-6} . Το χρονικό βήμα ελεγχόταν από τον αριθμό CFL ο οποίος τέθηκε ίσος με 0.1. Το χρονικό βήμα ήταν της τάξεως του 10^{-3} για το Πλέγμα 1, ενώ οι εσωτερικές επαναλήψεις για την σύγκλιση μιας χρονικής στιγμής κυμαινόντουσαν γύρω από το 5. Η έναυση έγινε σε ένα κελί και μοντελοποιήθηκε κατά τέτοιο τρόπο ώστε το καύσιμο σε αυτό να καεί μέσα σε ένα συγκεκριμένο χρονικό διάστημα. Το διάστημα αυτό υπολογίστηκε (σύμφωνα και με τα όσα είπαμε στο §5.1) από τη σχέση:

$$DTINGI = \frac{Dx/2}{E \cdot S_{L0}} \quad (7.2.3)$$

όπου Dx το μήκος του κελιού στο οποίο γίνεται η έναυση.

Όλες οι προσομοιώσεις έγιναν σε έναν σύγχρονο επεξεργαστή (Intel i7-2600K, 3.4GHz) χρησιμοποιώντας και τους 4 πυρήνες του. Ο υπολογιστικός χρόνος ήταν περίπου 14, 27 και 57 ώρες για το Πλέγμα 1, 2 και 3 αντίστοιχα (Χωρίς 1), χρησιμοποιώντας τη μέθοδο RNG LES μαζί με το δεύτερο (απλοποιημένο) μοντέλο καύσης.

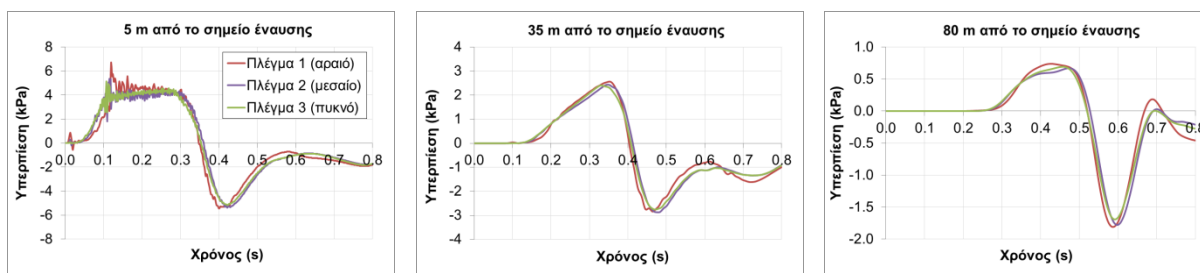
7.3 Αποτελέσματα

7.3.1 Ανεξαρτησία πλέγματος και μέγεθος χωρίου

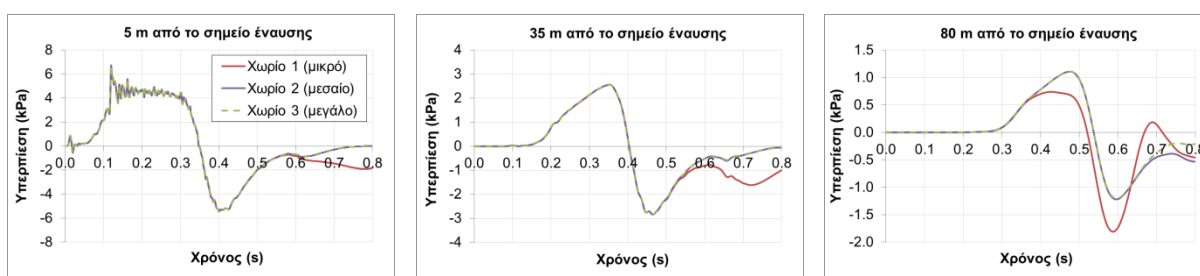
Η ανεξαρτησία πλέγματος και μεγέθους χωρίου έγινε χρησιμοποιώντας τη μέθοδο RNG LES μαζί με το δεύτερο (απλοποιημένο) μοντέλο καύσης. Στο Σχήμα 7.3.1 απεικονίζεται η ανεξαρτησία πλέγματος, η οποία έγινε χρησιμοποιώντας το Χωρίο 1 (Πίνακας 7.2.3). Στο σχήμα απεικονίζεται η υπερπίεση σε συνάρτηση με τον χρόνο σε τρεις αποστάσεις από το σημείο έναυσης. Παρατηρούμε ότι επιτυγχάνεται πολύ καλή ανεξαρτησία πλέγματος καθώς τα αποτελέσματα είναι σχεδόν ταυτόσημα. Συνεπώς ακόμα και το αραιό Πλέγμα 1 είναι αρκετό για την παρούσα προσομοίωση. Το γεγονός αυτό μπορεί να φαίνεται εκ πρώτης όψεως παράξενο αλλά μπορεί να αιτιολογηθεί με διάφορους λόγους. Πρώτον, όπως σχολιάστηκε στην §3.2.7, η μέθοδος της κλίσης που

χρησιμοποιούμε για τον όρο πηγής έχει θεωρητικά καλή συμπεριφορά όσο αφορά την ανεξαρτησία πλέγματος, καθώς ο ρυθμός καύσης είναι ανεξαρτήτος του πλήθους των κελιών στα οποία διακριτοποιείται το πάχος της φλόγας. Δεύτερον, η γεωμετρία του προβλήματος είναι απλή καθώς δεν υπάρχουν εμπόδια τα οποία θα χρειαζόντουσαν πυκνότερο πλέγμα για να επιλυθεί με ακρίβεια η ροή γύρω από αυτά. Τρίτον, όπως θα δούμε και στην επόμενη παράγραφο, στην παρούσα προσομοίωση ο ρυθμός καύσης που υπολογίζει το μοντέλο καύσης έχει ασθενή εξάρτηση από τις μεταβλητές της ροής, γεγονός που διευκολύνει την ανεξαρτησία πλέγματος. Παρόλο που η ανεξαρτησία πλέγματος όσον αφορά την πίεση λαμβάνεται με το Πλέγμα 1, στη επόμενη παράγραφο τα περισσότερα αποτελέσματα (εκτός των αντίστοιχων διαγραμμάτων πίεσης-χρόνου) παρουσιάζονται για το Πλέγμα 2 λόγω της καλύτερης απεικόνισης που προσφέρει το πιο πυκνό πλέγμα.

Στο Σχήμα 7.3.2 απεικονίζεται η ανεξαρτησία ως προς το μέγεθος του χωρίου. Στο σχήμα απεικονίζεται η υπερπίεση σε συνάρτηση με τον χρόνο σε τρεις αποστάσεις από το σημείο έναυσης. Παρατηρούμε ότι το μέγεθος του χωρίου έχει μεγάλη επίδραση στα αποτελέσματα όσο αφορά την πίεση στα 80 m καθώς η θέση αυτή βρίσκεται κοντά στα όρια του χωρίου. Το Χωρίο 1 δίνει αρκετά διαφορετική καμπύλη σε σχέση με το Χωρίο 2 και το Χωρίο 3 στη θέση αυτή. Στα 5 m και 35 m το Χωρίο 1 διαφοροποιείται επίσης στο τέλος της καμπύλης. Παρατηρούμε ότι η πίεση αποτυγχάνει να επιστρέψει στα ατμοσφαιρικά επίπεδα όπως είναι το αναμενόμενο και όπως συμβαίνει όταν χρησιμοποιούμε μεγαλύτερα χωρία. Συγκρίνοντας τα χωρία 2 και 3, παρατηρούμε ότι τα αποτελέσματα ταυτίζονται σε όλα τα σημεία εκτός από το τέλος της καμπύλης στα 80 m. Η διαφορά αυτή όμως δεν είναι σημαντική και εκ τούτου στις προσομοιώσεις που παρουσιάζονται στη συνέχεια, χρησιμοποιήθηκε το Χωρίο 2.



Σχήμα 7.3.1: Υπερπίεση (kPa) σε συνάρτηση με τον χρόνο στα 5, 35 και 80 m από το σημείο έναυσης για τρία διαφορετικά πλέγματα (Χωρίο 1).



Σχήμα 7.3.2: Υπερπίεση (kPa) σε συνάρτηση με τον χρόνο στα 5, 35 και 80 m από το σημείο έναυσης για τρία διαφορετικά μεγέθη χωρίου (Πλέγμα 1).

7.3.2 Αποτελέσματα βασικού μοντέλου - Διερεύνηση της τιμής της φράκταλ διάστασης

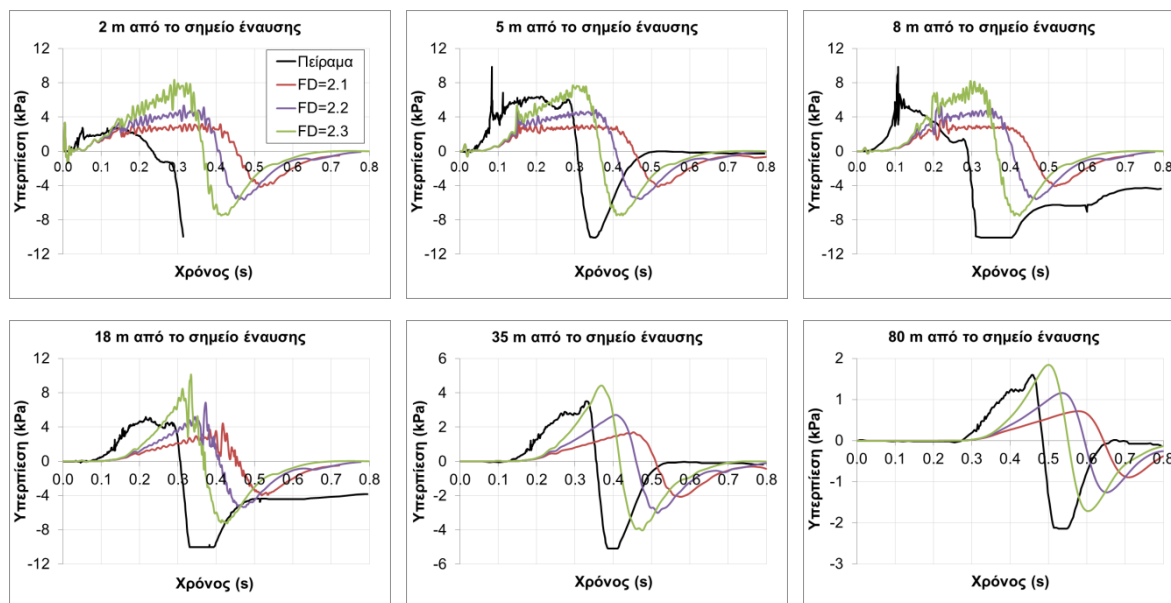
Στο Σχήμα 7.3.3 παρουσιάζεται η υπερπίεση συναρτήσει του χρόνου, σε έξι αποστάσεις από το σημείο έναυσης. Στο σχήμα απεικονίζεται τόσο η πειραματική καμπύλη όσο και οι προβλέψεις του βασικού μοντέλου καύσης για τρεις τιμές της διάστασης φράκταλ. Η μέθοδος που ακολουθήθηκε για την τύρβη είναι η RNG LES. Παρατηρούμε ότι υπάρχει μια απόκλιση των προβλέψεων από το πείραμα ως προς τον χρόνο στον οποίο αυξάνει η πίεση. Αυτό μπορεί να οφείλεται σε δύο λόγους. Ο πρώτος λόγος είναι το γεγονός ότι στο πείραμα υπάρχει το περίβλημα που συγκρατεί το μείγμα και το οποίο υποχωρεί σε μετέπειτα της έναυσης χρονική στιγμή. Αυτό μπορεί να οδηγήσει σε μεγαλύτερη και πιο γρήγορη αύξηση της πίεσης σε σύγκριση με την προσομοίωση στην οποία το περίβλημα αμελήθηκε. Ο δεύτερος λόγος είναι ο τρόπος με τον οποίο έγινε η έναυση στο πείραμα και με τον οποίο την μοντελοποιούμε. Ο τρόπος μοντελοποίησης της έναυσης που επιλέξαμε βασίζεται σε φυσικά χαρακτηριστικά, όπως φαίνεται από τη σχέση (7.2.3). Ένας εναλλακτικός τρόπος έναυσης που χρησιμοποιείται από πολλούς είναι να θεωρηθεί στον χρόνο μηδέν ότι έχει καεί εξ ολοκλήρου ένα μέρος της ποσότητας που βρίσκεται στο κελί όπου τοποθετείται η έναυση. Ο τρόπος αυτός όμως είναι αυθαίρετος και εμπεριέχει τις αβεβαιότητες της πραγματικής έναυσης στο ποσοστό στο οποίο θα επιλεγεί ότι έχει καεί. Ένα μεγάλο ποσοστό μπορεί να μετακινήσει όλη την καμπύλη προς μικρότερους χρόνους, ενώ ένα μικρότερο προς μεγαλύτερους. Συνεπώς το ποσοστό αυτό χρησιμοποιείται έτσι ώστε να ταιριάζουν καλύτερα τα υπολογιστικά αποτελέσματα με τα πειραματικά. Παρόλο που αυτός ο τρόπος έναυσης υλοποιήθηκε στον κώδικα, τελικά προτιμήσαμε να χρησιμοποιήσουμε την άλλη μέθοδο έναυσης η οποία είναι πιο φυσική και η οποία για το μεγαλύτερο πλήθος περιπτώσεων που εξετάσαμε έδωσε καλά αποτελέσματα. Εξάλλου, αυτό που ενδιαφέρει πιο πολύ είναι η γενική μορφή της καμπύλης υπερπίεσης και όχι το αν είναι ελαφρώς μετατοπισμένη ως προς την πειραματική.

Η σύγκριση με το πείραμα θα επικεντρωθεί στις θέσεις 5, 35 και 80 m. Στις υπόλοιπες θέσεις παρατηρούμε ότι η πειραματική καμπύλη παρουσιάζει περίεργη συμπεριφορά, αποτυγχάνοντας να επιστρέψει στην ατμοσφαιρική πίεση μετά το τέλος της έκρηξης. Αυτό που είναι πιθανό να έχει συμβεί είναι ότι οι αισθητήρες έχουν αποτύχει λόγω της υψηλής θερμοκρασίας στην οποία εκτίθενται. Στον αισθητήρα που βρίσκεται στα 5 m τέθηκαν επιπλέον μέτρα προστασίας για την θερμότητα και ως εκ τούτου αυτός φαίνεται ότι δεν αστόχησε. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται παρόλα αυτά για όλες τις θέσεις για λόγους πληρότητας και σύγκρισης των προβλέψεων μεταξύ των διαφορετικών θέσεων.

Συγκρίνοντας τα αποτελέσματα από τις διαφορετικές τιμές της φράκταλ διάστασης (FD), παρατηρούμε ότι η αύξηση της διάστασης προκαλεί μεγαλύτερες υπερπίεσεις. Αυτό είναι φυσικό και αναμενόμενο καθώς μεγαλύτερη διάσταση σημαίνει μεγαλύτερος ρυθμός καύσης και ως εκ τούτου μεγαλύτερες πιέσεις. Η καλύτερη συμφωνία με το πείραμα επιτυγχάνεται για φράκταλ διάσταση ίση με 2.3, η οποία είναι πολύ κοντά στις μέγιστες τιμές της διάστασης που εμφανίζονται στη βιβλιογραφία. Αυτό είναι λογικό λόγω της έντονης τύρβης που αναμένεται να αναπτυχθεί λόγω της μεγάλης κλίμακας της έκρηξης.

Συγκρίνοντας τα αποτελέσματα για $FD=2.3$ με τα πειραματικά, παρατηρούμε ότι η συμφωνία είναι πολύ καλή. Στις θέσεις 35 και 80 m το μοντέλο προβλέπει πολύ καλά τον ρυθμό με τον οποίο

αυξάνει η πίεση. Στη θέση των 5 m ο ρυθμός είναι ελαφρώς χαμηλότερος, πράγμα που ίσως να οφείλεται στην ύπαρξη του περιβλήματος στο πείραμα. Όσο αφορά τη μέγιστη υπερπίεση, η συμφωνία με το πείραμα είναι ικανοποιητική αν και υπάρχει μια μικρή υπερεκτίμηση. Στα 5 m το σφάλμα είναι περίπου 14.4 % (αμελούμε την αιχμηρή αύξηση της πίεσης λίγο πριν τα 0.1 s που παρατηρείται στο πείραμα) στα 35 m 23.1% και στα 80 m 16.3% (Πίνακας 7.3.1). Μια αιτία των διαφορών αυτών είναι η υπερεκτίμηση της ενέργειας που απελευθερώνεται λόγω του απλοποιημένου μοντέλου καύσης το οποίο δεν λαμβάνει υπ' όψιν του τον σχηματισμό άλλων προϊόντων πέραν του νερού (όπως αναφέραμε και στην §5.2.3). Από άποψη ασφάλειας πάντως, η πρόβλεψη βρίσκεται στην ασφαλή πλευρά καθώς οι πιέσεις δεν υποεκτιμώνται.

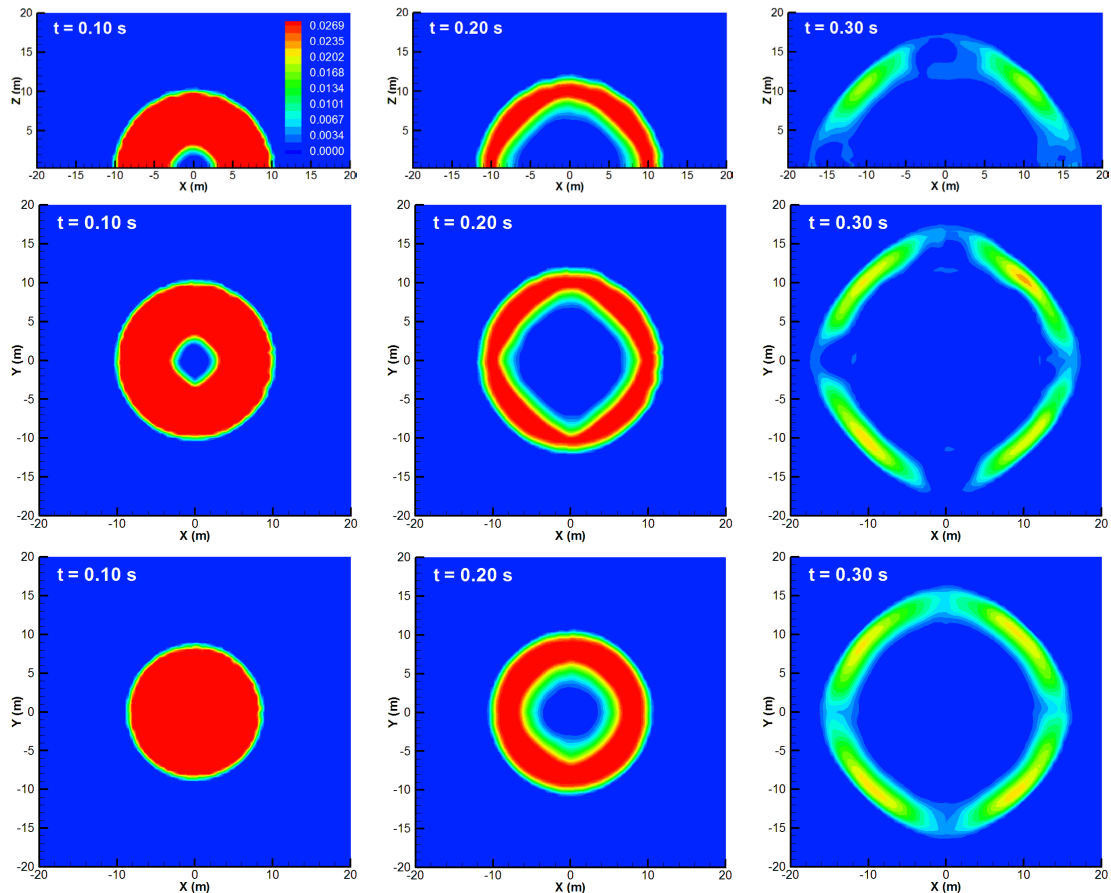


Σχήμα 7.3.3: Υπερπίεση (kPa) σε συνάρτηση με τον χρόνο στα 2, 5, 8, 18, 35 και 80 m από το σημείο έναυσης για τρία διαφορετικά μεγέθη χωρίου (Πλέγμα 1, Χωρίο 2).

Πίνακας 7.3.1: Μέγιστες υπερπίεσεις σε πείραμα και προσομοίωση.

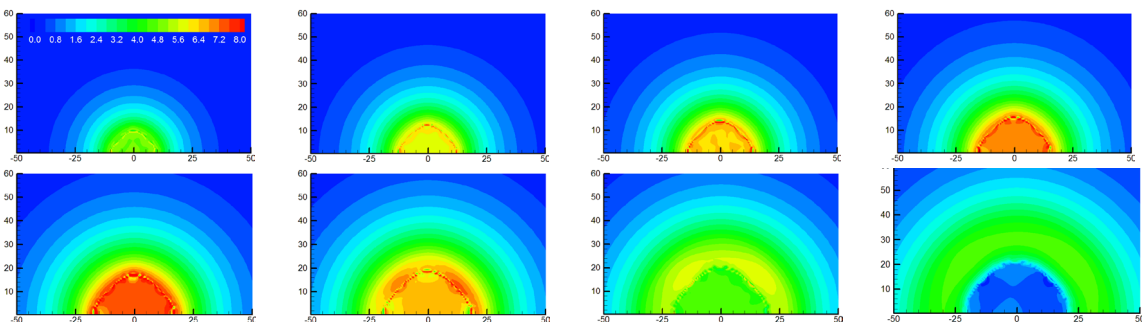
Θέση	Μέγιστη υπερπίεση (kPa) – Πείραμα	Μέγιστη υπερπίεση (kPa) – Προσομοίωση (FD=2.3)	Σχετικό σφάλμα
5 m	6.38	7.30	14.4 %
35 m	3.51	4.32	23.1 %
80 m	1.60	1.86	16.3 %

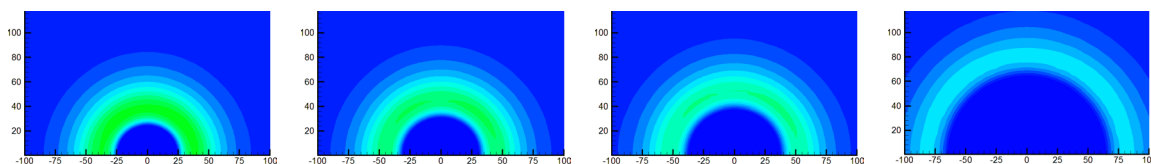
Στο ίδιο σχήμα (Σχήμα 7.3.3) παρατηρούμε ότι στην προσομοίωση (FD=2.3) στη θέση των 8 m, η πίεση αρχίζει εκτονώνεται περίπου στα 0.35 s. Το σημείο αυτό είναι το σημείο όπου όλη η μάζα του υδρογόνου έχει καταναλωθεί. Αυτό επιβεβαιώνεται από το Σχήμα 7.3.4 όπου απεικονίζονται οι ισοψείς του υδρογόνου σε διάφορες χρονικές στιγμές και σε διάφορα επίπεδα. Παρατηρούμε ότι το υδρογόνο καταναλώνεται σφαιρικά όπως αναμενόταν και ότι στα 0.30 s έχει απομείνει μικρή ποσότητα αυτού. Στα 0.20 s η φλόγα βρίσκεται περίπου στα 8 m. Η υπερπίεση τη χρονική αυτή στιγμή είναι περίπου η μισή της μέγιστης τόσο στα 5 m όσο και 8 m ενώ στα 35 m και 80 m είναι σχεδόν μηδενική.



Σχήμα 7.3.4: Ισοϋψείς κλάσματος μάζας υδρογόνου για τρεις χρονικές στιγμές σε τρία διαφορετικά επίπεδα, στο XZ που περνάει από το κέντρο του ημισφαιρίου (πάνω) στο XY που περνάει από τη βάση του ημισφαιρίου (μέση) και στο XY στα Z=5.25 m (κάτω).

Στο Σχήμα 7.3.5 απεικονίζονται οι ισοϋψείς της υπερπίεσης σε διάφορες χρονικές στιγμές στο κατακόρυφο επίπεδο που περνάει από το κέντρο της έκρηξης. Τα όρια είναι ισοϋψών είναι σχεδόν τέλειοι κύκλοι. Παρατηρούμε ότι η πίεση αυξάνει σχεδόν ομοιόμορφα μέσα στο όγκο στον οποίο γίνεται η καύση. Στις 6 πρώτες χρονικές στιγμές είναι ορατό ένα τόξο στο οποίο η πίεση λαμβάνει ελαφρώς μεγαλύτερες τιμές. Στο τόξο αυτό βρίσκεται στην κάθε χρονική στιγμή το μέτωπο της φλόγας το οποίο και προκαλεί την αυξημένη πίεση λόγω της καύσης που εξελίσσεται. Στα 0.36 s στα οποία η καύση έχει ολοκληρωθεί (τελευταία εικόνα μεσαίας γραμμής στο σχήμα) παρατηρείται η ραγδαία πτώση της πίεσης που συμβαίνει λόγω της ξαφνικής εκτόνωσης. Στις επόμενες χρονικές τιμές τα κύματα πίεσης συνεχίζουν τα ταξιδεύουν προς τα έξω χάνοντας σταδιακά την ενέργειά τους. Στα 0.50 s έχουν φτάσει περίπου στη θέση των 80 m, σημείο που ταυτίζεται με την μέγιστη πίεση στο σημείο αυτό όπως είδαμε στα διαγράμματα της υπερπίεσης (Σχήμα 7.3.3).

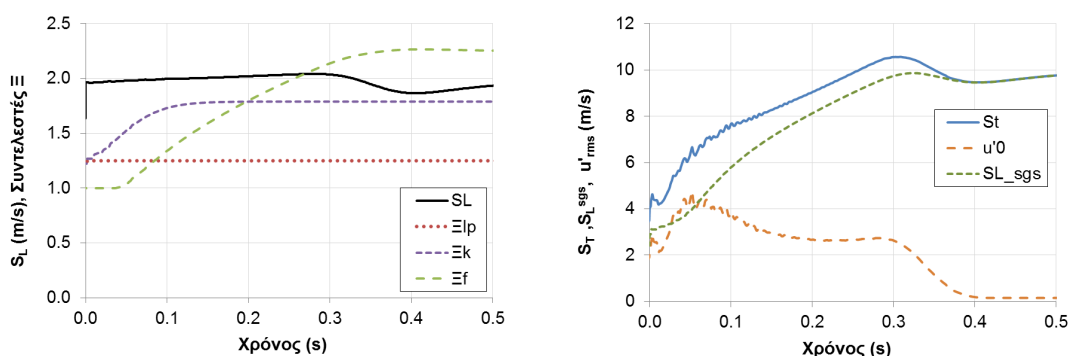




Σχήμα 7.3.5: Ισοϋψείς υπερπίεσης (από 0 έως 8 kPa) σε XZ επίπεδο που περνάει από το κέντρο του ημισφαιρίου στις χρονικές στιγμές 0.20, 0.24, 0.26, 0.28 s (πάνω γραμμή) 0.30, 0.32, 0.34, 0.36 s (μεσαία γραμμή) και 0.38, 0.40, 0.42, 0.50 s (κάτω γραμμή). Στην τελευταία γραμμή τα όρια του οριζόντιου άξονα έχουν αυξηθεί.

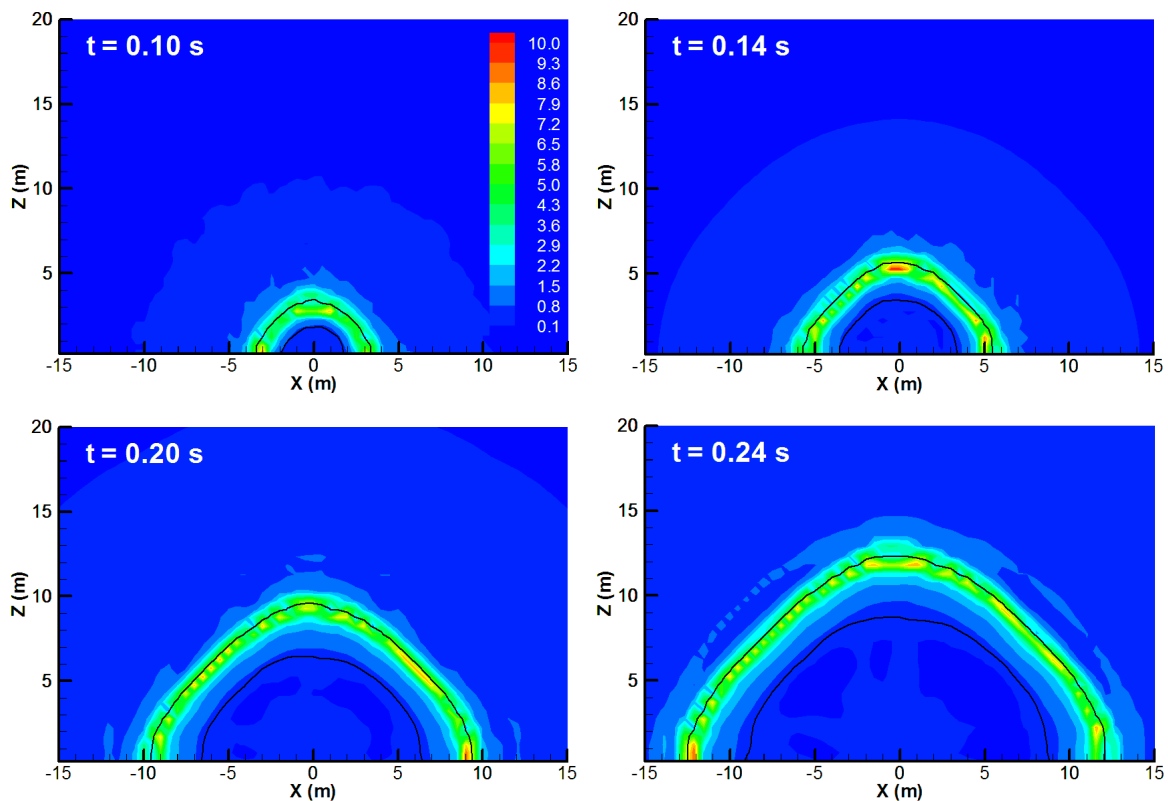
Στο Σχήμα 7.3.6 απεικονίζονται τα βασικά χαρακτηριστικά του μοντέλου καύσης που χρησιμοποιήσαμε. Όλα τα μεγέθη υπολογίστηκαν σαν μέσες τιμές στην περιοχή του πάχους της φλόγας. Στο αριστερό διάγραμμα του σχήματος, απεικονίζεται η στρωτή ταχύτητα καύσης και οι συντελεστές Ξ . Παρατηρούμε ότι η στρωτή ταχύτητα καύσης αυξάνει ελαφρά με τον χρόνο λόγω της εξάρτησης που υπάρχει από την πίεση. Στη συνέχεια και μετά τα 0.32 s έχουμε μείωση της ταχύτητας λόγω πτώσης της πίεσης καθώς η καύση έχει σχεδόν ολοκληρωθεί. Τα μεγέθη μετά την ολοκλήρωση της καύσης όμως δεν έχουν ιδιαίτερη σημασία καθώς στην περιοχή που έχουν υπολογιστεί δεν υπάρχει πια φλόγα (υπάρχει όμως διεπιφάνεια μεταξύ προϊόντων και αέρα και για αυτό έχουν μη μηδενικές τιμές). Ο συντελεστής Ξ_{ip} διατηρεί σταθερή τιμή σε όλη τη διάρκεια της έκρηξης, ενώ οι συντελεστές Ξ_k και Ξ_f αυξάνουν. Στα πρώτα στάδια της έκρηξης ο ρυθμός καύσης αυξάνει πρωτίστως λόγω της τύρβης που παράγεται από το μέτωπο της φλόγας και δευτερευόντως λόγω της φράκταλ γεωμετρίας της φλόγας, ενώ στις επόμενες χρονικές στιγμές (μετά τα 0.2 s περίπου) αυξάνει μόνο λόγω της φράκταλ γεωμετρίας.

Στο δεξιά διάγραμμα του σχήματος, απεικονίζεται η τυρβώδη ταχύτητα καύσης S_T , η χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης u'_0 (υποπλεγματική τύρβη) και η ποσότητα S_L^{sgs} της σχέσης (4.2.6) που ισούται με το γινόμενο των συντελεστών Ξ με την ταχύτητα στρωτής καύσης. Παρατηρούμε ότι σε όλη τη διάρκεια της έκρηξης η τυρβώδης ταχύτητα καύσης είναι αρκετές φορές μεγαλύτερη (2 μέχρι 5) από την ταχύτητα στρωτής καύσης αλλά μεγαλύτερη και από την S_L^{sgs} λόγω της εξάρτησης της από την τύρβη μέσω της σχέσης του Yakhot. Παρατηρούμε ότι οι τιμές της u'_0 είναι μεγαλύτερες στα πρώτα στάδια της έκρηξης όπου το S_L^{sgs} έχει ακόμα σχετικά μικρές τιμές. Για το λόγω αυτό η καμπύλη της S_T απέχει περισσότερο από την καμπύλη του S_L^{sgs} στην αρχή της έκρηξης (γύρω στα 0.05 s), ενώ όσο περνάει ο χρόνος οι καμπύλες συγκλίνουν.



Σχήμα 7.3.6: Ταχύτητα στρωτής καύσης μαζί με τους συντελεστές Ξ (αριστερά) και τυρβώδης ταχύτητα καύσης S_T μαζί με τη χαρακτηριστική ταχύτητα τύρβης u'_0 και το S_L^{sgs} (δεξιά) συναρτήσει του χρόνου. Οι ποσότητες είναι μέσες τιμές στο πάχος ($c = 0.05 - 0.95$) της φλόγας.

Στο Σχήμα 7.3.7 απεικονίζονται οι ισοϋψείς της χαρακτηριστικής (υποπλεγματικής) ταχύτητας τύρβης u'_0 . Στο ίδιο σχήμα με μαύρες γραμμές απεικονίζονται τα όρια της φλόγας (τιμές μεταβλητής προόδου c 0.05 και 0.95). Η μέση τιμή του u'_0 ισούται περίπου με 5 m/s. Η τιμή αυτή είναι μεγαλύτερη από αυτή που φαίνεται στο Σχήμα 7.3.6 καθώς εκεί έγινε ολοκλήρωση στο πάχος της φλόγας. Όπως βλέπουμε όμως στο Σχήμα 7.3.7, η τύρβη παράγεται κυρίως μπροστά από το μέτωπο της φλόγας και στο 'έξω' μισό του πάχους της. Αυτό είναι περισσότερο ορατό στις μετέπειτα χρονικές στιγμές (0.20 και 0.24 s). Στις αρχικές χρονικές τιμές και κυρίως στα 0.1 s μεγάλες τιμές παρατηρούνται σχεδόν σε όλο το πάχος της φλόγας. Το γεγονός αυτό δικαιολογεί το μέγιστο που παρατηρείται στη μέση τιμή του u'_0 στη φλόγα στα 0.05 περίπου δευτερόλεπτα (Σχήμα 7.3.6). Το γεγονός ότι η φλόγα βρίσκεται κοντά στο έδαφος ίσως είναι η εξήγηση αυτών, καθώς η πρόσκρουση των προϊόντων στο έδαφος δημιουργεί επιπλέον τύρβη στο πίσω μέρος της φλόγας με αποτέλεσμα ο μέσος όρος στο πάχος της να είναι μεγαλύτερος. Από την άλλη όταν το μέτωπο της φλόγας έχει απομακρυνθεί από το έδαφος, αυτή δεν επηρεάζεται από αυτό με αποτέλεσμα οι ισοϋψείς του u'_0 να έχουν την μορφή που είδαμε.

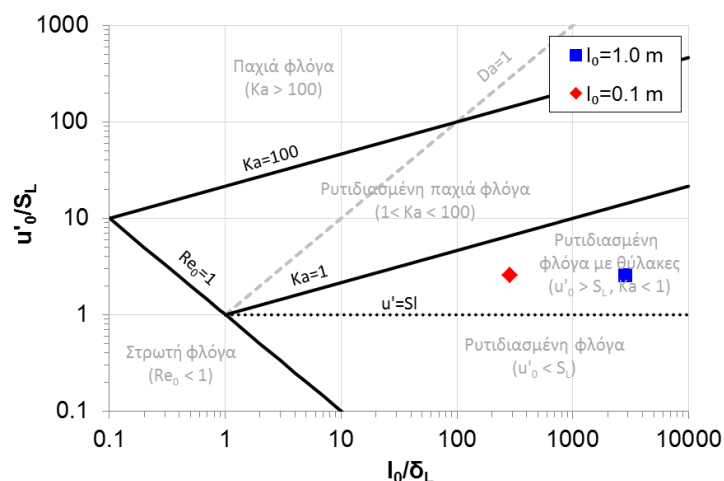


Σχήμα 7.3.7: Ισοϋψείς χαρακτηριστικής ταχύτητας (υποπλεγματικής) τύρβης u'_0 μαζί με τα όρια της φλόγας ($c = 0.05, 0.95$) σε τέσσερις χρονικές στιγμές στο XZ επίπεδο που περνάει από το κέντρο του ημισφαιρίου.

Στο Σχήμα 7.3.8 παρουσιάζεται το διάγραμμα (τύπου Borghi) των κατηγοριών της τυρβώδους καύσης (§2.4.1). Σε αυτό έχουν τοποθετηθεί δύο σημεία που αντιστοιχούν στις συνθήκες καύσης της περίπτωσης μας. Μια από τις παραμέτρους του διαγράμματος που απαιτείται για τον

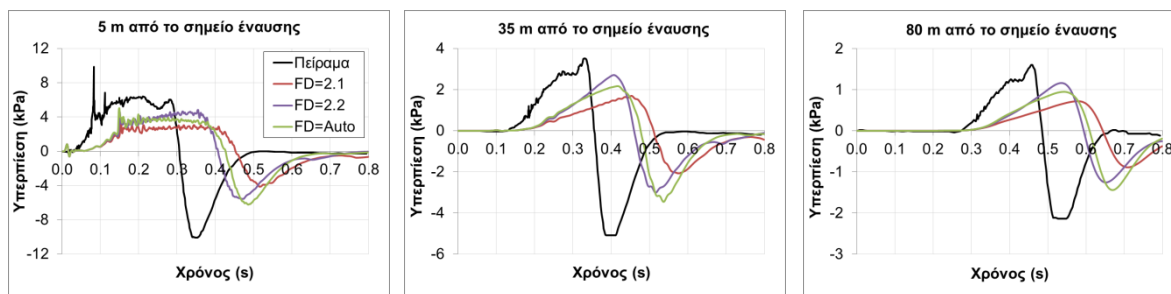
προσδιορισμό της κατηγορίας καύσης είναι η ολοκληρωτική κλίμακα μήκους της τύρβης l_0 . Η κλίμακα αυτή στην περίπτωση της μεθόδου LES πρέπει να προσδιοριστεί με βάση το επιλύσιμο μέρος της τύρβης, μέσω υπολογισμού των χωρικών συσχετίσεων των διακυμάνσεων. Αυτό όμως δεν είναι εύκολο να προσδιοριστεί και μάλιστα για ένα τόσο έντονα μεταβατικό φαινόμενο. Για το σκοπό αυτό δοκιμάστηκαν δύο τιμές του μήκους αυτού, 0.1 και 1.0 m, οι οποίες επιλέχτηκαν με βάση τη χαρακτηριστική κλίμακα της γεωμετρίας ώστε να προσδιοριστεί έστω και προσεγγιστικά η περιοχή του διαγράμματος στην οποία κινείται η φλόγα¹. Τα διαγράμματα αυτού του τύπου όπως αναφέρθηκε και στη §2.4.1 είναι ποιοτικά και τα όρια μεταξύ των περιοχών όχι ακριβώς καθορισμένα, οπότε ο ακριβής προσδιορισμός ενός σημείου σε αυτό δεν είναι ιδιαίτερης σημασίας. Όπως βλέπουμε και τα δύο σημεία που υπολογίστηκαν βρίσκονται μέσα στην περιοχή της ρυτιδιασμένης φλόγας με θύλακες. Αυτό έρχεται σε συμφωνία με την κοινή αίσθηση ότι η φλόγα σε μια ελεύθερη έκρηξη σε ακίνητο περιβάλλον θα έπρεπε να ανήκει σε μια κατηγορία ρυτιδιασμένης φλόγας. Το γεγονός αυτό δικαιολογεί και τη χρήση του μοντέλου καύσης που χρησιμοποιήθηκε, καθώς αυτό βασίζεται σε αυτή την υπόθεση, ότι δηλαδή ο κύριος μηχανισμός αύξησης της ταχύτητας καύσης είναι η αύξηση της επιφάνειας της φλόγας λόγω του ρυτιδιάσματος της το οποίο μοντελοποιείται με βάση τους συντελεστές ρυτιδιάσματος Ξ_k και Ξ_f αλλά και με βάση τη σχέση του Yakhot.

Τέλος, στο Σχήμα 7.3.9 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα από την χρήση της ημι-εμπειρικής σχέσης για την διάσταση φράκταλ (2.5.3) των North & Santavicca (1990). Στο ίδιο σχήμα απεικονίζονται ξανά τα αποτελέσματα για σταθερές τιμές της φράκταλ διάστασης ίσης με 2.1 και 2.2. Παρατηρούμε ότι τα αποτελέσματα από τη χρήση της ημι-εμπειρικής σχέσης είναι μεταξύ των αποτελεσμάτων για σταθερή διάσταση 2.1 και 2.2. Βλέπουμε λοιπόν ότι η σχέση αυτή αποτυγχάνει να προβλέψει την τιμή 2.3 για την οποία είχαμε την καλύτερη συμφωνία με το πείραμα.



Σχήμα 7.3.8: Διάγραμμα τύπου Borghi κατηγοριών τυρβώδους καύσης. Απεικόνιση των σημείων που αντιστοιχούν στην περίπτωση που εξετάζουμε για δυο διαφορετικά χαρακτηριστικά μήκη τύρβης l_0 (τιμές υπόλοιπων παραμέτρων: $u'_0 = 5 \text{ m/s}$, $\delta_L = 0.35 \cdot 10^{-3}$, $S_L = 1.96 \text{ m/s}$).

¹ Όπως θα δούμε στην επόμενη παράγραφο, πραγματοποιήθηκε και προσομοίωση με χρήση του μοντέλου κ-ε. Στο μοντέλο αυτό η ολοκληρωτική κλίμακα χώρου μπορεί να προσδιοριστεί εύκολα με βάση τη σχέση (2.1.13). Η κλίμακα που προέκυψε από το μοντέλο αυτό κυμαινόταν κυρίως μεταξύ των τιμών 0.1 και 1.0 m.

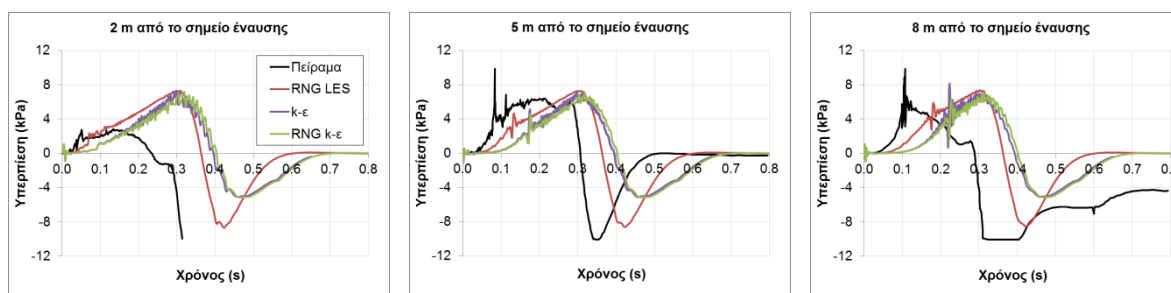


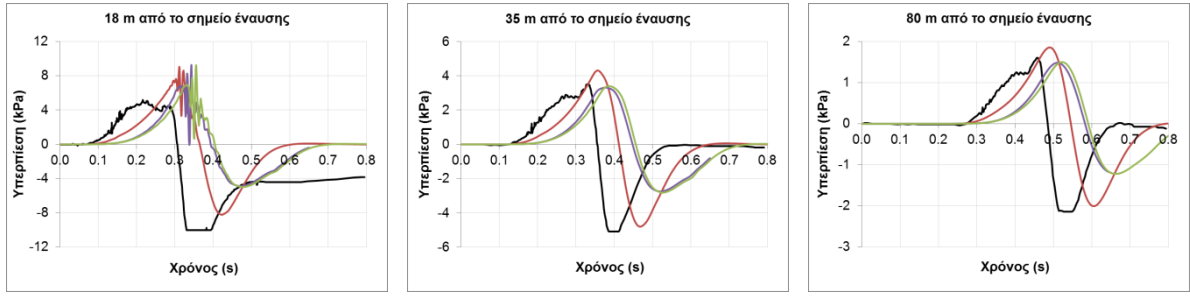
Σχήμα 7.3.9: Υπερπίεση (kPa) σε συνάρτηση με τον χρόνο στα 2, 5, 8, 18, 35 και 80 m από το σημείο έναυσης. Αξιολόγηση της ημι-εμπειρικής σχέσης για την φράκταλ διάσταση (FD=Auto) και σύγκριση με τις τιμές 2.1 και 2.2.

7.3.3 Σύγκριση μεθόδων τύρβης

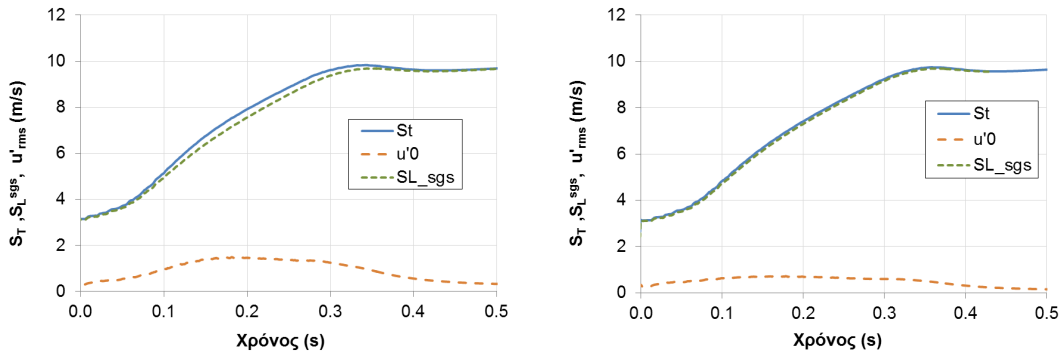
Στο Σχήμα 7.3.10 απεικονίζεται η υπερπίεση σε συνάρτηση με τον χρόνο για τη μέθοδο RNG LES και για τα μοντέλα τύρβης k-ε και RNG k-ε. Για τις προσομοιώσεις αυτές χρησιμοποιήθηκε το Πλέγμα 2 και το Χωρίο 2. Παρατηρούμε ότι τα αποτελέσματα του k-ε και RNG k-ε μοντέλου σχεδόν ταυτίζονται σε όλες τις θέσεις. Συγκρίνοντας τα μοντέλα αυτά με το RNG LES οι διαφορές είναι μικρές. Στο k-ε και στο RNG k-ε μοντέλο παρατηρείται μια μικρή καθυστέρηση ως προς τον χρόνο στον οποίο η πίεση αρχίζει να αυξάνει. Η αύξηση της πίεσης συμβαίνει επίσης με ελαφρά αργότερο ρυθμό σε σχέση με το RNG LES. Αυτό έχει σαν συνέπεια η μέγιστη υπερπίεση στα 35 και 80 m να είναι μικρότερη με αποτέλεσμα να επιτυγχάνεται καλύτερη συμφωνία με το πείραμα. Από την άλλη η ελάχιστη πίεση υπερεκτιμάται σε όλες τις θέσεις.

Το ότι τα μοντέλα k-ε έδωσαν αποτελέσματα παρόμοια με αυτά του RNG LES, έχει να κάνει με το γεγονός ότι το φαινόμενο καθοδηγείται ουσιαστικά από τον ρυθμό καύσης και από το γεγονός της ασθενούς εξάρτησης του ρυθμού καύσης από τη χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης u'_0 (όπως αναφέραμε και στη §7.3.2). Όπως απεικονίζεται στο Σχήμα 7.3.11, η τυρβώδης ταχύτητα καύσης σχεδόν ταυτίζεται με την ποσότητα S_L^{SGS} για τα k-ε μοντέλα, καθώς η χαρακτηριστική ταχύτητα τύρβης είναι πολύ μικρή. Όπως είδαμε στο Σχήμα 7.3.6 για την περίπτωση του RNG LES, η χαρακτηριστική ταχύτητα τύρβης παίζει σημαντικό ρόλο στα πρώτα στάδια της έκρηξης στα οποία η S_L^{SGS} ήταν ακόμα μικρή. Το γεγονός λοιπόν ότι οι τιμές της u'_0 στα k-ε μοντέλα είναι μικρές, οδηγεί στην καθυστερημένη αύξηση της πίεσης που παρατηρήσαμε στο Σχήμα 7.3.10.



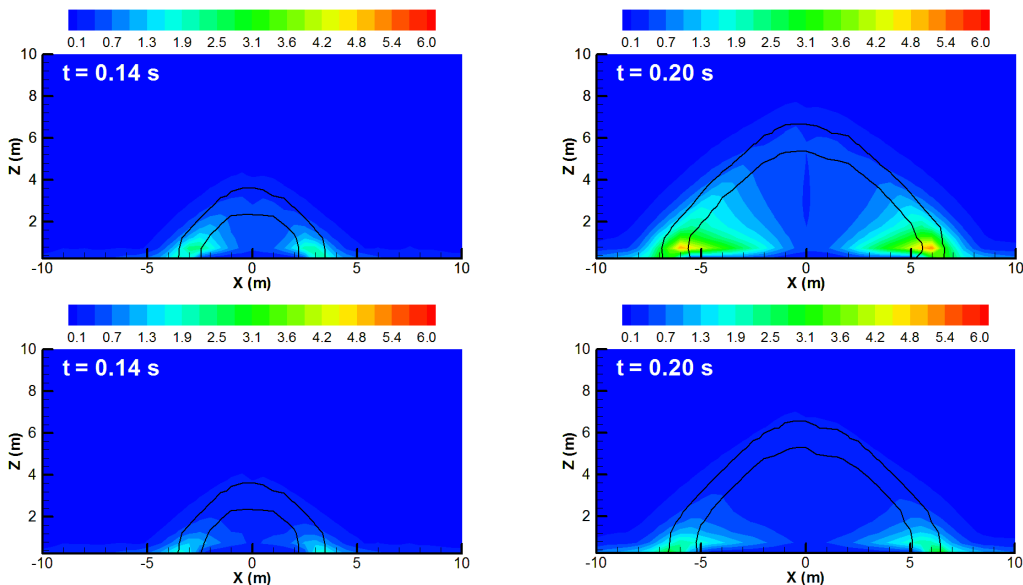


Σχήμα 7.3.10: Υπερπίεση (kPa) σε συνάρτηση με τον χρόνο στα 2, 5, 8, 18, 35 και 80 m από το σημείο έναυσης για τη μέθοδο RNG LES και για τα μοντέλα τύρβης k-ε και RNG k-ε (Πλέγμα 2, Χωρίο 2).



Σχήμα 7.3.11: Τυρβώδης ταχύτητα καύσης S_T μαζί με τη χαρακτηριστική ταχύτητα τύρβης u'_0 και το S_L^{sgs} συναρτήσει του χρόνου για το k-ε μοντέλο (αριστερά) και το RNG k-ε (δεξιά). Οι ποσότητες είναι μέσες τιμές στο πάχος ($c = 0.05 - 0.95$) της φλόγας.

Στο Σχήμα 7.3.12 απεικονίζονται οι ισοϋψείς της χαρακτηριστικής ταχύτητας τύρβης (μαζί με τα όρια της φλόγας) για το k-ε και το RNG k-ε μοντέλο. Παρατηρούμε ότι εκτός των μικρότερων τιμών συγκριτικά με το RNG LES (Σχήμα 7.3.7), η μορφή των ισοϋψών είναι επίσης αρκετά διαφορετική. Η τύρβη που προβλέπει το μοντέλο παράγεται λόγω της επαφής της φλόγας με το έδαφος και όχι λόγω του πεδίου ροής που αναπτύσσεται γύρω από το μέτωπο της.

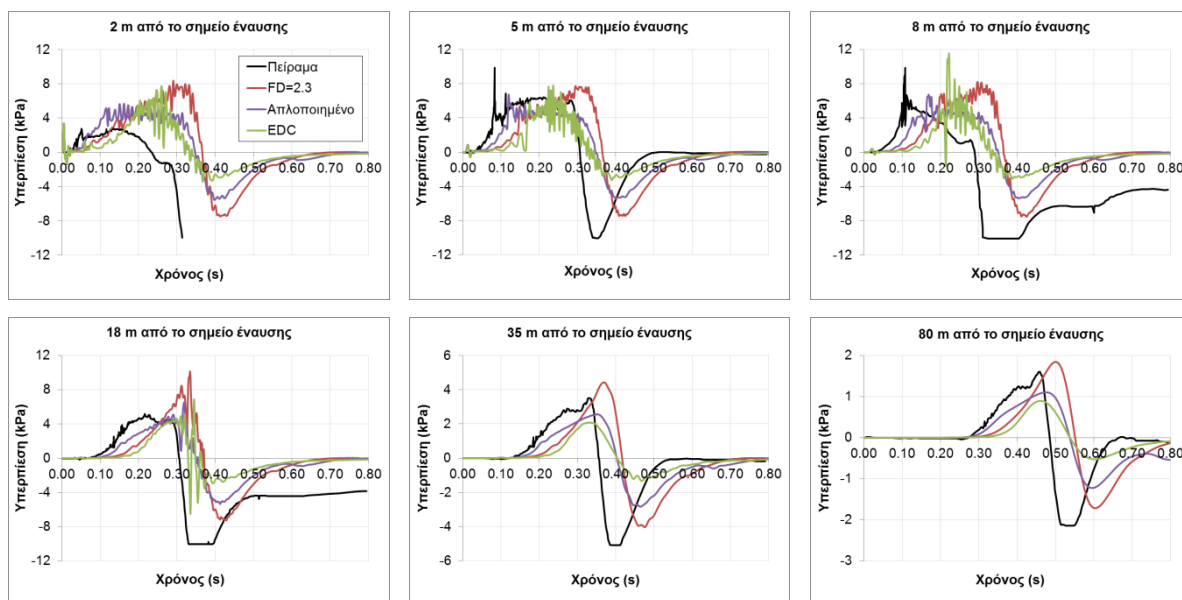


Σχήμα 7.3.12: Ισοϋψείς χαρακτηριστικής ταχύτητας τύρβης u'_0 μαζί με τα όρια της φλόγας ($c = 0.05, 0.95$) για το k-ε μοντέλο (πάνω) και το RNG k-ε μοντέλο (κάτω) σε δύο χρονικές στιγμές στο XZ επίπεδο που περνάει από το κέντρο του ημισφαιρίου.

7.3.4 Σύγκριση μοντέλων καύσης

Στο Σχήμα 7.3.13 απεικονίζεται η υπερπίεση σε συνάρτηση με τον χρόνο για τα μοντέλα καύσης που αναφέραμε στην §7.2, χρησιμοποιώντας το Πλέγμα 1 και το Χωρίο 2. Συγκρίνοντας πρώτα το βασικό μοντέλο (FD=2.3) με το απλοποιημένο, παρατηρούμε ότι το δεύτερο επιτυγχάνει καλύτερο ρυθμό αύξησης της πίεσης στα πρώτα στάδια της έκρηξης, ενώ επίσης υπάρχει και καλύτερη συμφωνία με το πείραμα όσον αφορά τον χρόνο στον οποίο η πίεση αρχίζει να αυξάνει. Αυτό οφείλεται στην μεγαλύτερη τιμή της σταθεράς ψ που χρησιμοποιήθηκε στο απλοποιημένο μοντέλο. Από την άλλη, ο ρυθμός αύξησης υποεκτιμάται στις θέσεις των 35 και 80 m. Αυτό οφείλεται όπως θα δούμε στη συνέχεια, στην αποτυχία του μοντέλου να προβλέψει μέχρι τέλους την επιτάχυνση της φλόγας. Όσο αφορά την μέγιστη και την ελάχιστη πίεση, παρατηρούμε ότι η μέγιστη υποεκτιμάτε στα 5, 35 και 80 m ενώ η ελάχιστη υπερεκτιμάται.

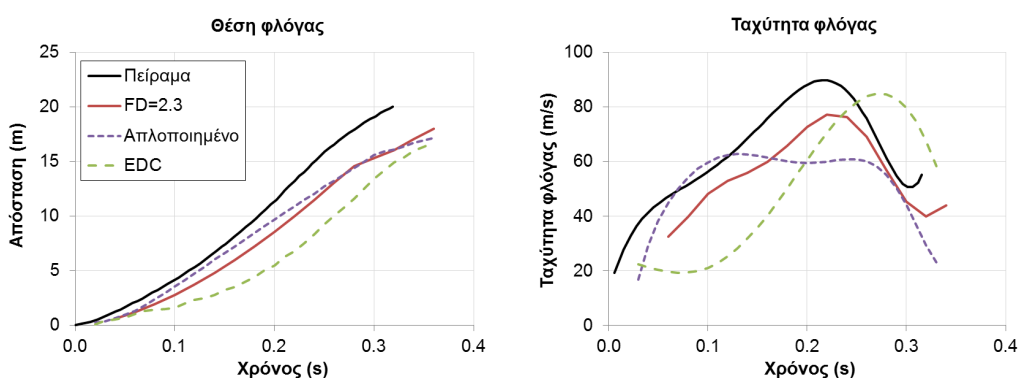
Όσο αφορά το μοντέλο EDC, παρατηρούμε ότι αυτό παρουσιάζει αρκετά έντονες διακυμάνσεις. Η εξάρτηση του μοντέλου από τον λόγο ε/k είναι πιθανώς υπεύθυνη για αυτό. Ο ρυθμός με τον οποίο αυξάνει η πίεση είναι σε αρκετά καλή συμφωνία με το πείραμα, κυρίως στα 35 και 80 μέτρα. Η μέγιστη πίεση όμως υποεκτιμάται σημαντικά σε αυτές τις θέσεις και η ελάχιστη υπερεκτιμάται. Το μοντέλο αυτό παρουσιάζει έντονη εξάρτηση τόσο από την τιμή της σταθεράς του A όσο και από το πλέγμα και τις αρχικές τιμές του k και του ε . Επίσης η τύρβη που παράγεται κοντά στο έδαφος από το μοντέλο k - ε (Σχήμα 7.3.12), οδήγησε στην ανάγκη χρήσης οριακής συνθήκης ολίσθησης στο έδαφος ώστε να αποφευχθεί ο αφύσικα μεγάλος ρυθμός καύσης που δημιουργούταν. Όλα τα παραπάνω συνάγουν στο συμπέρασμα ότι το μοντέλο αυτό δεν είναι κατάλληλο (τουλάχιστον στην μορφή που χρησιμοποιήθηκε) για προσομοιώσεις εκρήξεων σε ελεύθερο περιβάλλον.



Σχήμα 7.3.13: Υπερπίεση (kPa) σε συνάρτηση με τον χρόνο στα 2, 5, 8, 18, 35 και 80 m από το σημείο έναυσης για τρία μοντέλα καύσης (Πλέγμα 1, Χωρίο 2).

Σχήμα 7.3.14 παρουσιάζεται η θέση και η ταχύτητα της φλόγας συναρτήσει του χρόνου για τα τρία μοντέλα καύσης. Η ταχύτητα καύσης υπολογίστηκε σαν την παράγωγο ενός πολυωνύμου μεγάλου βαθμού το οποίο προσεγγίζει την συνάρτηση θέσης της φλόγας, ώστε να αποφευχθούν οι

ταλαντώσεις οι οποίες οφείλονται στο μη-ακριβή υπολογισμό της θέσης. Παρατηρούμε ότι η συμφωνία με το πείραμα όσο αφορά τις απόλυτες τιμές δεν είναι καλή για κανένα μοντέλο. Σε αυτό συμβάλει το γεγονός ότι η μέτρηση της ακριβούς θέσης στο πείραμα ήταν δύσκολη όπως αναφέρεται από τους Molton et al. (2007), καθώς έγινε οπτικά με αποτέλεσμα να υπάρχει ποσοστό λάθους. Το βασικό μοντέλο (FD=2.3) παρουσιάζει την καλύτερη συμφωνία με το πείραμα, καθώς αναπαριστά την γενική μορφή της καμπύλης. Παρατηρούμε ότι το μοντέλο αυτό προβλέπει την επιτάχυνση της φλόγας μέχρι τα περίπου 0.22 s, ενώ το απλοποιημένο μοντέλο προβλέπει επιτάχυνση της φλόγας μόνο μέχρι τα 0.12 s. Η απουσία του φράκταλ υπομοντέλου είναι υπεύθυνη για αυτή τη διαφορά. Από το γεγονός αυτό φαίνεται η σημασία που έχει το φράκταλ υπομοντέλο σε προσομοιώσεις εκρήξεως μεγάλης κλίμακας. Το μοντέλο EDC καταφέρνει και αυτό να προβλέψει την επιτάχυνση της φλόγας, προβλέποντας μάλιστα καλύτερα την μέγιστη τιμή της ταχύτητας. Η επιτάχυνση της φλόγας όμως στο μοντέλο αυτό ξεκινάει αρκετά καθυστερημένα σε σχέση με το πείραμα ενώ φαίνεται επίσης ότι την υπερεκτιμά.



Σχήμα 7.3.14: Θέση και ταχύτητα φλόγας για τα τρία μοντέλα καύσης που δοκιμάστηκαν.

7.4 Συμπεράσματα

Στο κεφάλαιο αυτό έγινε προσομοίωση μιας έκρηξης μεγάλης κλίμακας αέριου μείγματος υδρογόνου-αέρα. Το βασικό μοντέλο καύσης αξιολογήθηκε ενάντια των πειραματικών αποτελεσμάτων. Η συνολική συμπεριφορά του μοντέλου κρίνεται πάρα πολύ καλή.

Αρχικά, επιτεύχθηκε ανεξαρτησία πλέγματος με σχετικά λίγα κελιά (μήκος κελιών 1.0 m) πράγμα που είναι πολύ σημαντικό για να έχουμε μικρό υπολογιστικό χρόνο που ήταν ένας από τους στόχους της μεθόδου που αναπτύχθηκε. Τα όρια του υπολογιστικού χωρίου βρέθηκαν ότι πρέπει να τοποθετούνται περίπου σε απόσταση 1.875 φορές της απόστασης του τελευταίου σημείου ενδιαφέροντος (εδώ αισθητήρα των 80 m) έτσι ώστε τα αποτελέσματα να μην επηρεάζονται από αυτά.

Έγινε παραμετρική ανάλυση όσο αφορά τη φράκταλ διάσταση και βρέθηκε ότι η καλύτερη συμφωνία με το πείραμα επιτυγχάνεται για διάσταση ίση με 2.3, τιμή η οποία δικαιολογείται από τη μεγάλη κλίμακα της έκρηξης. Η ημι-εμπειρική σχέση των North & Santavicca (1990) απέτυχε να προβλέψει την τιμή αυτή και ως εκ τούτου η σχέση αυτή δεν συνιστάται να χρησιμοποιείται για παρόμοιες προσομοιώσεις. Η σημασία του φράκταλ υπομοντέλου καύσης φάνηκε συγκρίνοντας τα αποτελέσματα του μοντέλου με ένα απλοποιημένο μοντέλο καύσης, καθώς το απλοποιημένο μοντέλο απέτυχε να προβλέψει τη συνεχόμενη επιτάχυνση της φλόγας.

Η ανάλυση που έγινε έδειξε ότι η επιτάχυνση της φλόγας οφείλεται κυρίως σε φαινόμενα που συμβαίνουν σε κλίμακες συγκρίσιμες με το πάχος της φλόγας, όπως είναι η τύρβη που αναπτύσσεται από το μέτωπο της φλόγας και η φράκταλ δομή της φλόγας. Η συνεισφορά του επιλυόμενου μέρους της τύρβης όπως και της υποπλεγματικής τύρβης είναι μικρές. Η υποπλεγματική τύρβη που προβλέπεται αναπτύσσεται γύρω από το μέτωπο της φλόγας όπως αναμενόταν.

Η αντικατάσταση της μεθόδου LES από μοντέλα τύπου RANS (k-ε και RNG k-ε) έφερε μόνο μικρές αλλαγές στα αποτελέσματα. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι το φαινόμενο καθοδηγείται ουσιαστικά από τον ρυθμό καύσης στον οποίο η χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης έχει μικρή συνεισφορά λόγω των μικρών τιμών της. Η χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης υποεκτιμάται στα μοντέλα τύπου RANS σε σχέση με το LES. Επίσης τα μοντέλα RANS προβλέπουν τις μεγαλύτερες τιμές κυρίως κοντά στο έδαφος λόγω της επαφής με την κινούμενη φλόγα και όχι στο μέτωπο της φλόγας όπως συμβαίνει στο LES.

Τέλος, δοκιμάστηκε ένα κλασικό μοντέλο καύσης, το μοντέλο απορρόφησης των δινών (EDC). Το μοντέλο αυτό είχε γενικά τη χειρότερη συμφωνία με το πείραμα, καθώς ουσιαστικά κατάφερε να προβλέψει μόνο την επιτάχυνση της φλόγας ποιοτικά. Το γεγονός αυτό σε συνδυασμό με τις διάφορες αριθμητικές δυσκολίες που αντιμετωπίστηκαν (οριακές και αρχικές συνθήκες, πλέγμα, σταθερά του μοντέλου), κάνουν τη χρήση αυτού του μοντέλου για περιπτώσεις όπως η συγκεκριμένη προβληματική.

Κεφάλαιο 8

Προσομοίωση έκρηξης σε μοντέλο οδικής σήραγγας

Επιτυχία είναι να προχωράς από αποτυχία σε αποτυχία, χωρίς να χάνεις τον ενθουσιασμό σου

Winston Churchill

Στο κεφάλαιο αυτό θα γίνει προσομοίωση έκρηξης αέριου μείγματος υδρογόνου-αέρα σε μοντέλο σήραγγας. Οι διαστάσεις της σήραγγας είναι το 1/5 αυτών μιας τυπικής οδικής σήραγγας. Εξετάστηκαν δύο σενάρια, ένα στο οποίο η σήραγγα είναι τελείως άδεια και ένα στο οποίο υπάρχουν τέσσερα μοντέλα αυτοκινήτων. Σκοπός της προσομοίωσης αυτής είναι η αξιολόγηση της μεθοδολογίας που περιγράφηκε στο Κεφάλαιο 4 σε περιπτώσεις έκρηξης σε σήραγγα όπου η γεωμετρία επιβάλλει σημαντικό περιορισμό στην επέκταση της φλόγας.

8.1 Εισαγωγή

Όπως αναφέραμε στο Κεφάλαιο 1, το υδρογόνο αποτελεί ένα ιδιαίτερα ελκυστικό εναλλακτικό καύσιμο για τα οχήματα. Σε κάποιες χώρες χρησιμοποιείται ήδη σε λεωφορεία για τις δημόσιες μεταφορές, ενώ και τα πρώτα υδρογονοκίνητα αυτοκίνητα έχουν κάνει την εμφάνιση τους, κυρίως στο Τόκιο και στον Σαν Φρανσίσκο όπου ένα ολόκληρο δίκτυο από πρατήρια παροχής υδρογόνου για τον ανεφοδιασμό των οχημάτων έχει αρχίζει να αναπτύσσεται. Λόγω του εύφλεκτου όμως χαρακτήρα του υδρογόνου, ο κίνδυνος από ένα πιθανό ατύχημα αυτοκινήτων πρέπει να εξεταστεί. Ο κίνδυνος αυτός είναι αυξημένος στην περίπτωση ατυχήματος αυτοκινήτων σε μια σήραγγα καθώς μια πιθανή διαρροή υδρογόνου θα οδηγήσει στον εγκλωβισμό του στη σήραγγα και πιθανόν στον σχηματισμό ενός εύφλεκτου νέφους.

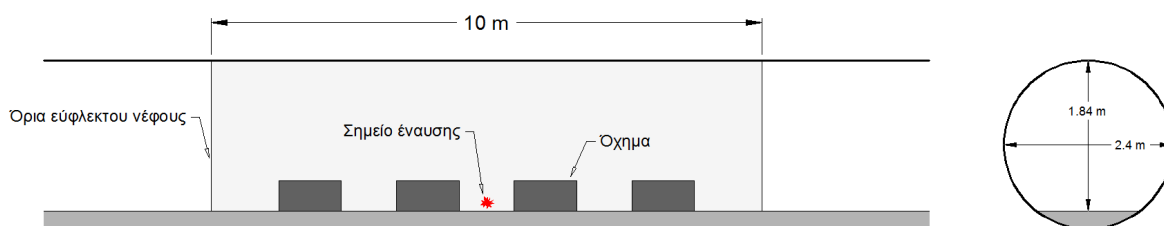
Το πείραμα που θα προσομοιώσουμε αναπαριστά σε κλίμακα (1/5) μια τυπική οδική σήραγγα. Λεπτομέρειες για το πείραμα παρουσιάζονται από τους Sato et al. (2006) και Groethe et al. (2007), ενώ φωτογραφίες από αυτό απεικονίζονται στο Σχήμα 8.1.1. Το μήκος της σήραγγας είναι 78.6 m και η εγκάρσια τομή είναι τμήμα κύκλου διαμέτρου 2.4 m (Σχήμα 8.1.2). Στο πείραμα εξετάστηκαν διάφορα σενάρια που αφορούσαν διαφορετικές συγκεντρώσεις υδρογόνου και κατανομής οχημάτων. Εμείς θα προσομοιώσουμε δύο περιπτώσεις, στις οποίες η συγκέντρωση του υδρογόνου στο μείγμα με τον αέρα είναι 30% κατ' όγκο. Στη μια περίπτωση η σήραγγα είναι τελείως άδεια και στην άλλη έχουν τοποθετηθεί τέσσερα μοντέλα οχημάτων (ορθογώνια παραλληλόγραμμα) μέσα στην περιοχή του εύφλεκτου μείγματος κατά μήκος της κεντρικής γραμμής. Οι διαστάσεις των οχημάτων ήταν 0.94 x 0.362 x 0.343 m (μήκος x πλάτος x ύψος) ενώ η μεταξύ τους απόσταση ήταν

ίση με 1.52 m. Το μείγμα υδρογόνου-αέρα βρίσκεται σε περιοχή μήκους 10 m γύρω από το κέντρο της σήραγγας. Η έναυση πραγματοποιείται στο κέντρο του μείγματος.

Οι Molkon et al. (2008) προσομοίωσαν το σενάριο της άδειας σήραγγας, για δύο τιμές συγκεντρώσεων υδρογόνου. Το μοντέλο καύσης που χρησιμοποίησαν είναι παρόμοιο με το μοντέλο που παρουσιάσαμε στη §4.2 και χρησιμοποιούμε εδώ. Οι διαφορές έχουν να κάνουν στο ότι στο μοντέλο εκείνο δεν γίνεται χρήση του συντελεστή Ξ_{RT} , στον τρόπο υπολογισμού του συντελεστή Ξ_k για ακτίνες μεγαλύτερες της κρίσιμης καθώς στον τρόπο υπολογισμού της φράκταλ διάστασης. Οι Baraldi et al. (2009) προσομοίωσαν επίσης τα ίδια σενάρια που θα εξετάσουμε και εμείς. Στην εργασία τους γίνεται σύγκριση πέντε διαφορετικών μεθοδολογιών προσομοίωσης και μοντέλων καύσης. Συνολικά η συμφωνία με το πείραμα ήταν καλή. Παρόλα αυτά όπως επισημαίνεται από τους συγγραφείς, τα αποτελέσματα του πειράματος ήταν γνωστά κατά τη διάρκεια των προσομοιώσεων με αποτέλεσμα να υπάρχει η δυνατότητα προσαρμογής των μοντέλων σε αυτά.



Σχήμα 8.1.1: Φωτογραφίες από το πείραμα (Groethe et al. 2007).



Σχήμα 8.1.2: Σχηματική απεικόνιση της γεωμετρίας.

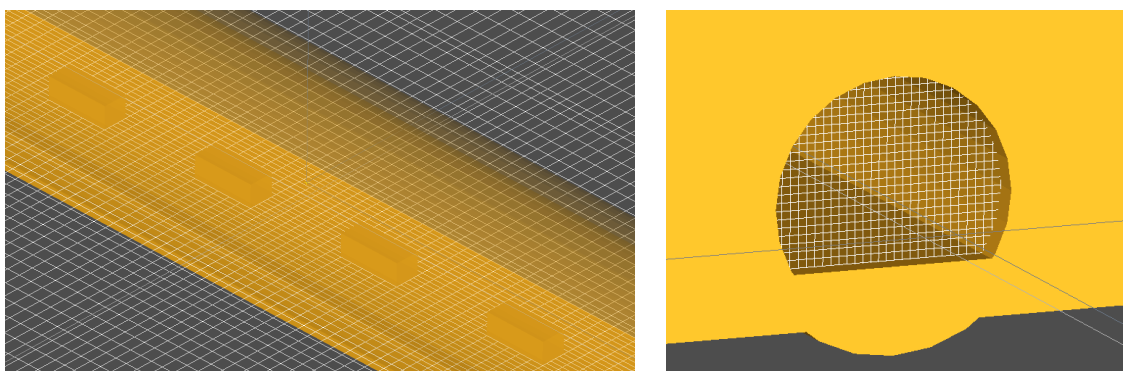
8.2 Δεδομένα μοντελοποίησης

Το μοντέλο το οποίο χρησιμοποιήθηκε για την προσομοίωση του φαινομένου παρουσιάστηκε στο Κεφάλαιο 4. Στον παρακάτω πίνακα απεικονίζονται οι τιμές των κυρίων παραμέτρων του μοντέλου καύσης που χρησιμοποιήθηκαν. Όπως βλέπουμε από τον πίνακα, η φράκταλ διάσταση υπολογίστηκε δυναμικά συναρτήσει του λόγου u'_0/S_L από τη σχέση (2.5.3) των North & Santavicca (1990). Στη §8.3.3 εξετάζεται η ευαισθησία του μοντέλου τόσο στη σταθερά ψ όσο και στην τιμή της φράκταλ διάστασης.

Πίνακας 8.2.1: Παράμετροι μοντέλου καύσης.

Παράμετρος	Τιμή
Στρωτή ταχύτητα καύσης S_{L0}	1.96 m/s
Εκθέτης ε	0.565
Λόγος επέκτασης E	7.2
Σταθερά ψ	0.6
Ακτίνα R_0	1.0 m
Συντελεστής Ξ_{ip}	1.25
Ακτίνα R_{ip}	0.10 m
Διάσταση φράκταλ	North & Santavicca (1990), σχέση (2.5.3)

Στο Σχήμα 8.2.1 απεικονίζεται η γεωμετρία του προβλήματος όπως αυτή χρησιμοποιήθηκε στις προσομοιώσεις. Στο ίδιο σχήμα απεικονίζονται δύο απόψεις του πλέγματος. Το βασικό πλέγμα που χρησιμοποιήθηκε αποτελείται από 558,819 κελιά. Οι διαστάσεις των κελιών μέσα στη σήραγγα κατά την y (εγκάρσια) και z (κατακόρυφη) κατεύθυνση είναι ίσες με περίπου 0.08 m. Κατά την διαμήκη κατεύθυνση της σήραγγας τα κελιά έχουν μήκος 0.18 m στην περιοχή γύρω από το σημείο έναυσης και φτάνουν τα 0.20 m σε απόσταση 20 m από το κέντρο της σήραγγας. Από τα 20 m και μετά η διάσταση τους αυξάνει κατά παράγοντα αραιώσης 1.06 προκειμένου να μειωθεί ο συνολικός αριθμός κελιών καθώς στην περιοχή αυτή δεν αναμένεται να βρεθεί εύφλεκτο μείγμα (η καύση θα έχει ολοκληρωθεί). Πρέπει να αναφέρουμε ότι προκειμένου να διατηρηθεί το συνολικό πλήθος κελιών σε αποδεκτά επίπεδα και επειδή ο κώδικας δεν έχει δυνατότητες πολλαπλών πλεγμάτων (multi-block), τα κελιά που βρίσκονται πάνω, κάτω, δεξιά και αριστερά της σήραγγας απενεργοποιήθηκαν έτσι ώστε να μην γίνεται επίλυση σε αυτά (όμοια με την προσομοίωση στο Κεφάλαιο 6).



Σχήμα 8.2.1: Άποψη της γεωμετρίας και του πλέγματος σε XY και YZ επίπεδα.

Εκτός από το βασικό πλέγμα, δοκιμάστηκαν άλλα δύο πλέγματα ώστε να εξεταστεί η επίδραση τους στα αποτελέσματα. Στον παρακάτω πίνακα παρουσιάζονται τα βασικά χαρακτηριστικά των πλεγμάτων. Με Δx συμβολίζεται η χαρακτηριστική διάσταση των κελιών στη διαμήκη κατεύθυνση της σήραγγας στην περιοχή μέσα στο εύφλεκτο μείγμα, ενώ με Δy και Δz η χαρακτηριστική

διάσταση στην εγκάρσια και κατακόρυφη διεύθυνση, η οποία είναι σταθερή στο εσωτερικό της σήραγγας. Έτσι το Πλέγμα 2 διαφέρει από το Πλέγμα 1 μόνο ως προς την x-διάσταση των κελιών στην περιοχή του εύφλεκτου νέφους, γι' αυτό η αύξηση του συνολικού πλήθους κελιών είναι μικρή. Το Πλέγμα 3 διαφέρει από το Πλέγμα 2 ως προς την y και z -διάσταση των κελιών στο εσωτερικό της σήραγγας.

Πίνακας 8.2.2: Χαρακτηριστικά των πλεγμάτων που δοκιμάστηκαν.

Πλέγμα (Grid)	Πλήθος ενεργών κελιών	Δx	$\Delta y, \Delta z$
Πλέγμα 1	558,819	0.18	0.08
Πλέγμα 2	615,853	0.08	0.08
Πλέγμα 3	1,359,589	0.08	0.05

Το χρονικό βήμα ελεγχόταν από τον αριθμό CFL ο οποίος τέθηκε ίσος με 0.2. Επειδή η φλόγα επιταχύνεται κατά τη διάρκεια της έκρηξης και η ταχύτητα αυξάνει, το χρονικό βήμα δεν ήταν σταθερό αλλά κυμάνθηκε μεταξύ 10^{-4} και $2 \cdot 10^{-4}$. Δοκιμάστηκε και CFL ίσο με 0.1 με αμελητέα μεταβολή στα αποτελέσματα. Η έναυση έγινε σε ένα κελί και μοντελοποιήθηκε κατά τέτοιο τρόπο ώστε το καύσιμο σε αυτό να καεί μέσα σε ένα συγκεκριμένο χρονικό διάστημα. Το διάστημα αυτό υπολογίστηκε από τη σχέση (δες και §5.1)

$$DTINGI = \frac{Dx/2}{E \cdot S_{L0}} \quad (8.2.1)$$

όπου Dx το μήκος του κελιού στο οποίο γίνεται η έναυση. Για το Πλέγμα 1 το διάστημα έναυσης είναι ίσο με 0.0028 s.

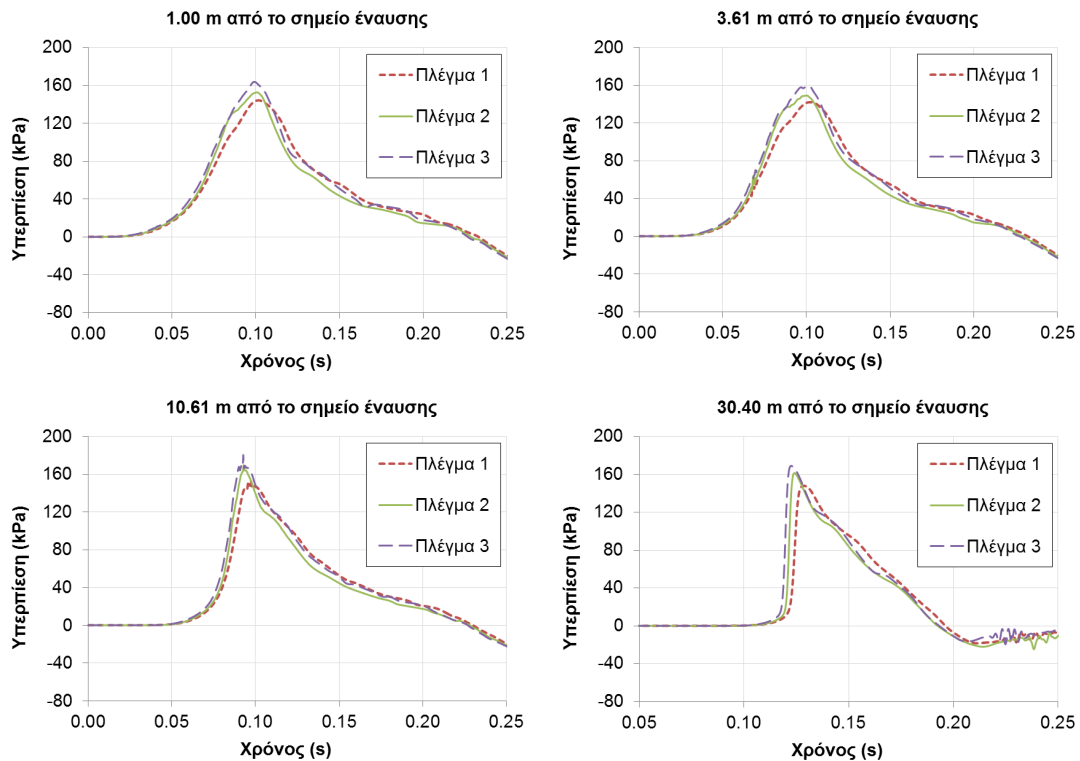
8.3 Αποτελέσματα

8.3.1 Ανεξαρτησία πλέγματος

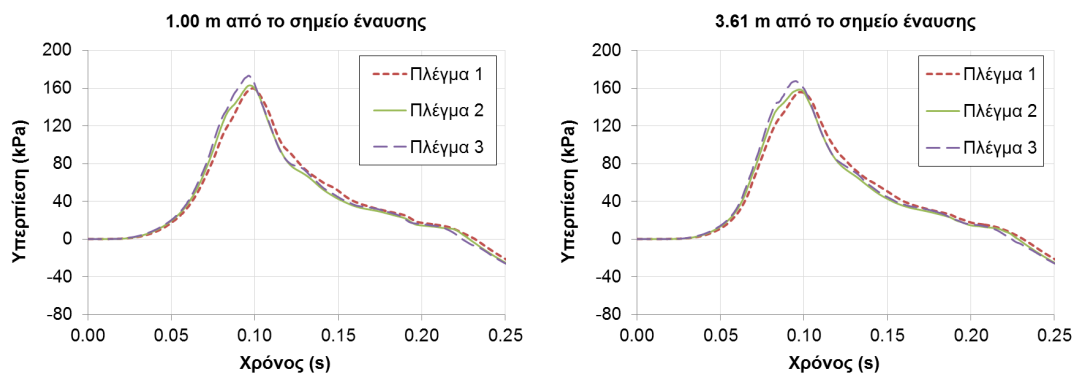
Στο Σχήμα 8.3.1 απεικονίζεται η χρονική εξέλιξη της υπερπίεσης στο εσωτερικό της σήραγγας σε τέσσερις διαφορετικές θέσεις για τα τρία πλέγματα (Πίνακας 8.2.2) και την περίπτωση της άδειας σήραγγας. Παρατηρούμε ότι για όλα τα πλέγματα οι καμπύλες υπερπίεσης είναι πολύ κοντά η μία στην άλλη. Παρόλα αυτά παρουσιάζονται κάποιες διαφορές στον ρυθμό με τον οποίο αυξάνει η πίεση ο οποίος είναι ελαφρώς μεγαλύτερος για το Πλέγμα 2 και το Πλέγμα 3. Αυτή η συμπεριφορά είναι δικαιολογημένη λόγω της μικρότερης αριθμητικής διάχυσης στο πυκνότερο πλέγμα. Ο μεγαλύτερος ρυθμός αύξησης της πίεσης στα πιο πυκνά πλέγματα οδηγεί και σε μεγαλύτερη μέγιστη υπερπίεση. Ο λόγος της μέγιστης πίεσης στο Πλέγμα 3 προς τη μέγιστη πίεση στο Πλέγμα 1 κυμαίνεται μεταξύ 1.14 και 1.18 για τις τέσσερις αποστάσεις από το σημείο έναυσης.

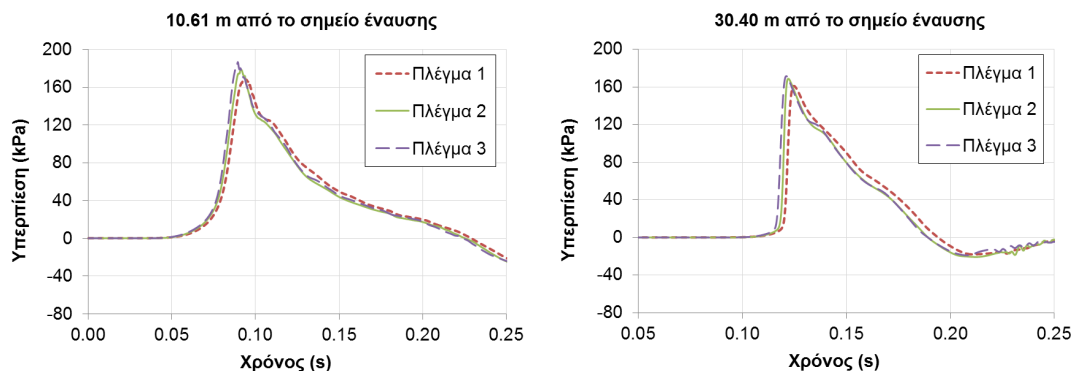
Στο Σχήμα 8.3.2 απεικονίζονται τα ίδια διαγράμματα για την περίπτωση με τα οχήματα. Παρατηρούμε ότι και εδώ οι καμπύλες είναι πολύ κοντά η μία στην άλλη. Η απόκλιση μεταξύ των πλεγμάτων είναι μικρότερη με τον λόγο της μέγιστης πίεσης στο Πλέγμα 3 προς τη μέγιστη πίεση στο Πλέγμα 1 να κυμαίνεται μεταξύ 1.07 και 1.10 για τις τέσσερις αποστάσεις από το σημείο έναυσης.

Γενικά η συμπεριφορά του μοντέλου ως προς την ανεξαρτησία πλέγματος μπορεί να χαρακτηριστεί πολύ καλή. Το γεγονός ότι οι διαφορές που παρατηρούνται είναι μεγαλύτερες από τις διαφορές που παρατηρήθηκαν στην ανεξαρτησία πλέγματος της ελεύθερης έκρηξης (§7.3.1), ίσως έχει να κάνει με την καμπυλότητα της σήραγγας και με τη μέθοδο του πορώδους (§4.3) που χρησιμοποιούμε για να περιγράψουμε μια τέτοια γεωμετρία σε καρτεσιανό πλέγμα, καθώς η πύκνωση του πλέγματος οδηγεί και σε πιο ακριβή περιγραφή της. Επειδή οι διαφορές στα αποτελέσματα είναι μικρές, η ανάλυση και οι επόμενες προσομοιώσεις που θα παρουσιαστούν γίνονται με το Πλέγμα 1.



Σχήμα 8.3.1: Χρονική εξέλιξη της υπερπίεσης σε τέσσερις αποστάσεις από το σημείο έναυσης για τρία διαφορετικά πλέγματα – περίπτωση άδειας σήραγγας.





Σχήμα 8.3.2: Χρονική εξέλιξη της υπερπίεσης σε τέσσερις αποστάσεις από το σημείο έναυσης για τρία διαφορετικά πλέγματα – περίπτωση με οχήματα.

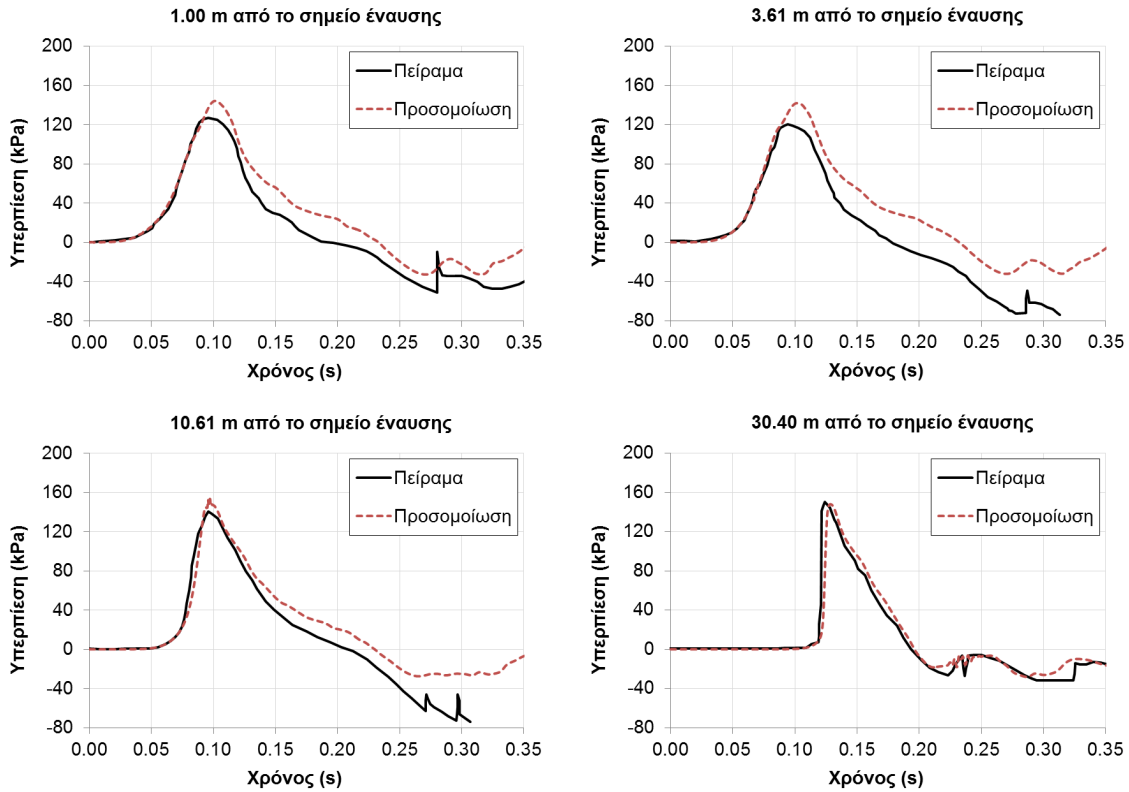
8.3.2 Βασικά αποτελέσματα

Στο Σχήμα 8.3.3 απεικονίζονται τα υπολογιστικά αποτελέσματα μαζί με τα πειραματικά. Παρατηρούμε ότι η συμφωνία με τα πείραμα είναι πολύ καλή. Δύο βασικές παράμετροι οι οποίες χρησιμοποιούνται για να αξιολογηθούν τα μοντέλα καύσης, είναι ο λόγος των υπερπίεσεων μεταξύ πειράματος και προσομοίωσης και ο λόγος των ρυθμών αύξησης της πίεσης. Ο ρυθμός αύξησης της πίεσης μπορεί να υπολογιστεί από τη σχέση:

$$\frac{dp}{dt} = \frac{p_{\max} - 0.1p_{\max}}{t_{p_{\max}} - t_{0.1p_{\max}}} \quad (8.3.1)$$

όπου p_{\max} η μέγιστη υπερπίεση, $t_{p_{\max}}$ ο χρόνος στον οποίο αυτή επιτυγχάνεται και $t_{0.1p_{\max}}$ ο χρόνος στον οποίο επιτυγχάνεται το 10% της μέγιστης υπερπίεσης. Στους παρακάτω πίνακες παρουσιάζονται οι τιμές των υπερπίεσεων και των ρυθμών αύξησης για το πείραμα και την προσομοίωση. Όσο αφορά τη μέγιστη υπερπίεση παρατηρούμε ότι υπάρχει υπερεκτίμηση στις τρεις πρώτες θέσεις, με την μεγαλύτερη να παρατηρείται στη δεύτερη θέση όπου ο λόγος της υπολογιστικής με την πειραματική υπερπίεση ισούται με 1.18. Στην τελευταία θέση η συμφωνία μεταξύ πειράματος και προσομοίωσης είναι εξαιρετική καθώς και από τα δύο προβλέπεται τιμή ίση με 150 kPa. Πρέπει να αναφέρουμε όμως ότι στη θέση αυτή, το πλέγμα κατά την x κατεύθυνση είναι αραιό (για να μειωθεί ο υπολογιστικός χρόνος), καθώς οι πιέσεις που μας ενδιαφέρουν πρωτίστως είναι αυτές που αναπτύσσονται γύρω από το εύφλεκτο νέφος. Πύκνωση του πλέγματος στο σημείο αυτό αναμένεται να οδηγήσει σε μικρή αύξηση της πίεσης.

Όσον αφορά τον ρυθμό αύξησης της πίεσης παρατηρούμε ότι η συμφωνία με το πείραμα είναι επίσης πολύ καλή. Στις δύο πρώτες θέσεις ο ρυθμός αύξησης είναι σχεδόν όσος και ο πειραματικός ενώ στην τρίτη θέση υπερεκτιμάται κατά 1.11 φορές. Στην τελευταία θέση υπάρχει αρκετά μεγάλη υποεκτίμηση. Η υποεκτίμηση είναι ορατή και στο διάγραμμα πίεσης-χρόνου καθώς στο πείραμα έχουμε κατακόρυφη αύξηση της πίεσης ενώ στην προσομοίωση η πίεση αποκλίνει ελαφρώς από την κατακόρυφο. Όπως αναφέραμε και προηγουμένως, πύκνωση του πλέγματος στο σημείο αυτό αναμένεται να οδηγήσει σε αύξηση του ρυθμού ανόδου οπότε σε καλύτερη συμφωνία με το πείραμα.



Σχήμα 8.3.3: Σύγκριση πειράματος και προσομοίωσης της χρονικής εξέλιξης της υπερπίεσης σε τέσσερις αποστάσεις από το σημείο έναυσης.

Πίνακας 8.3.1: Μέγιστη υπερπίεση σε διάφορες θέσεις της σήραγγας.

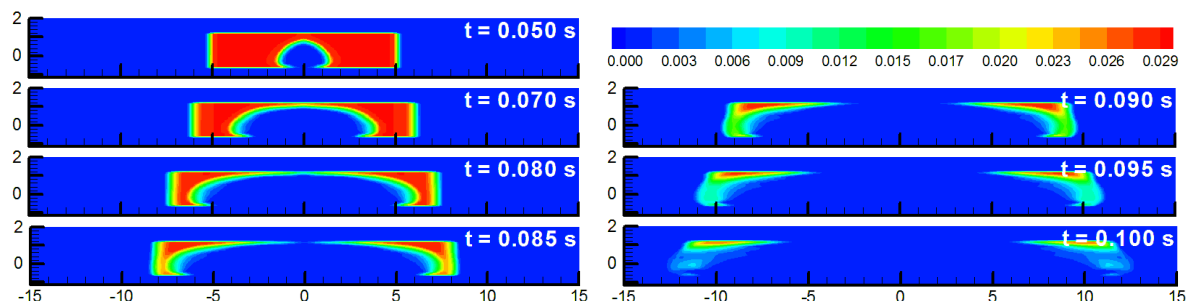
Θέση (m)	Προσομοίωση (kPa)	Πείραμα (kPa)	Λόγος
1.00	144.3	126.9	1.14
3.61	142.0	120.1	1.18
10.61	152.5	140.7	1.08
30.40	150.0	150.0	1.00

Πίνακας 8.3.2: Ρυθμός αύξησης της πίεσης σε διάφορες θέσεις της σήραγγας.

Θέση (m)	Προσομοίωση (kPa/s)	Πείραμα (kPa/s)	Λόγος
1.00	2422	2402	1.01
3.61	2610	2535	1.03
10.61	5564	5001	1.11
30.40	17614	28398	0.62

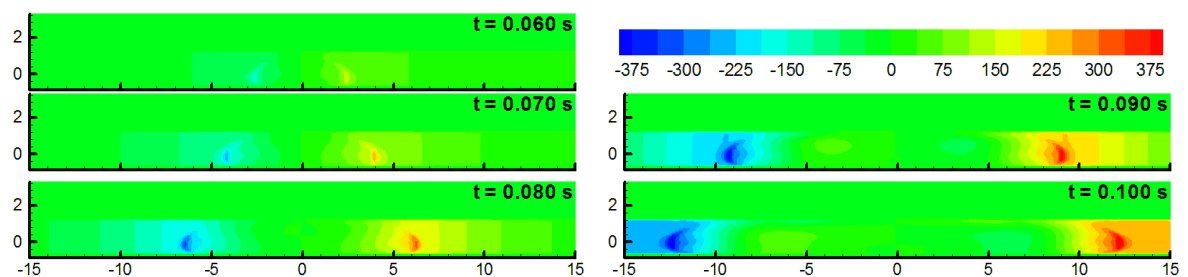
Στο Σχήμα 8.3.4 απεικονίζονται οι ισοϋψείς του κλάσματος μάζας του υδρογόνου για διάφορες χρονικές στιγμές. Παρατηρούμε ότι αρχικά η φλόγα επεκτείνεται σφαιρικά μέχρι περίπου τα 0.050 s. Στη συνέχεια, λόγω της αύξησης της πίεσης και του πεδίου ροής που δημιουργείται, η φλόγα προελαύνει κυρίως προς την διαμήκη κατεύθυνση της σήραγγας. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα μικρές ποσότητες άκαυστου μείγματος να παραμένουν κοντά στην οροφή όταν σχεδόν όλο το υπόλοιπο μείγμα έχει καταναλωθεί (0.1 s). Στα παραπάνω συμβάλει και το γεγονός ότι η έναυση έγινε κοντά στο έδαφος. Στο σχήμα βλέπουμε επίσης ότι το μείγμα υδρογόνου-αέρα, το οποίο αρχικά

βρισκόταν στην περιοχή -5 με 5 m, ωθείται σε μεγαλύτερες αποστάσεις φτάνοντας ακόμα και σε απόσταση 10 m από το σημείο έναυσης. Παρά την μετατόπιση του άκαυστου μείγματος, δεν παρατηρείται ιδιαίτερη ανάμειξη του με τον περιβάλλοντα αέρα. Τέλος, παρατηρούμε ότι στα 0.1 s όλο το μείγμα έχει σχεδόν καταναλωθεί, χρόνος που ταυτίζεται με τον χρόνο στον οποίο εμφανίζεται το μέγιστο της πίεσης στις τρεις θέσεις που βρίσκονται μέσα στην περιοχή που πραγματοποιείται η καύση (1, 3.61 και 10.61 m).



Σχήμα 8.3.4: Ισοϋψείς κλάσματος μάζας υδρογόνου σε διάφορες χρονικές στιγμές, στο XZ επίπεδο που περνάει από το κέντρο της σήραγγας.

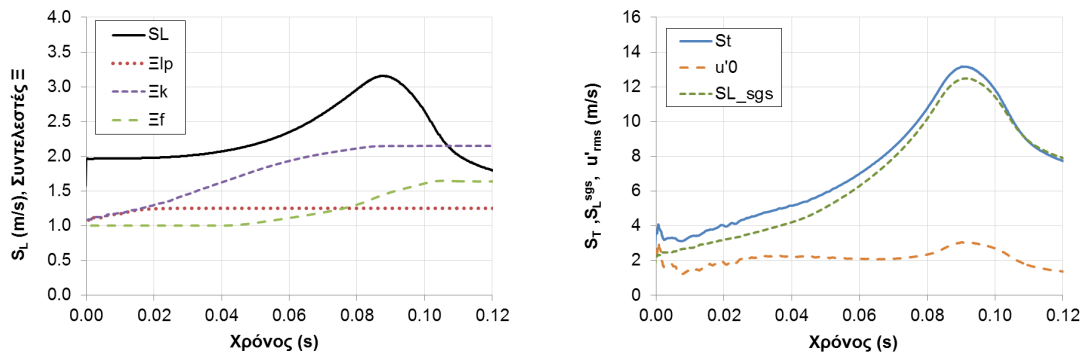
Στο Σχήμα 8.3.5 παρουσιάζονται οι ισοϋψείς της U-συνιστώσας της ταχύτητας σε διάφορες χρονικές στιγμές. Παρατηρούμε την επιτάχυνση η οποία συμβαίνει καθώς η καύση εξελίσσεται. Οι μεγαλύτερες ταχύτητες αναπτύσσονται όπως είναι φυσιολογικό στην περιοχή όπου βρίσκεται το μέτωπο της φλόγας. Η μέγιστη ταχύτητα η οποία αναπτύσσεται τη χρονική στιγμή 0.1 s είναι ίση με 450 m/s.



Σχήμα 8.3.5: Ισοϋψείς U-συνιστώσας της ταχύτητας σε διάφορες χρονικές στιγμές, σε XZ επίπεδο που περνάει από το κέντρο της σήραγγας.

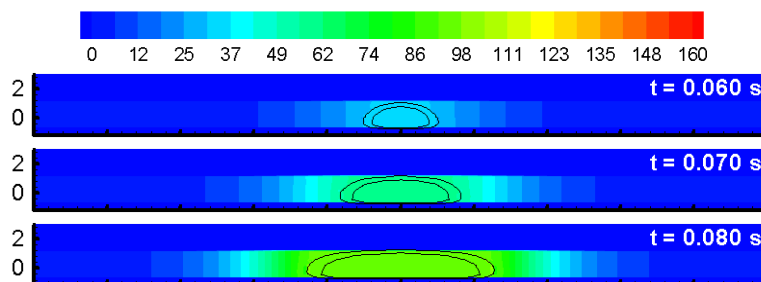
Στο Σχήμα 8.3.6 απεικονίζονται τα βασικά χαρακτηριστικά του μοντέλου καύσης που χρησιμοποιήσαμε. Όλα τα μεγέθη υπολογίστηκαν σαν μέσες τιμές στην περιοχή του πάχους της φλόγας. Στο αριστερό διάγραμμα, απεικονίζεται η στρωτή ταχύτητα καύσης και οι συντελεστές Ξ . Παρατηρούμε ότι η στρωτή ταχύτητα καύσης αυξάνει σημαντικά με τον χρόνο λόγω της αύξησης της πίεσης. Το φαινόμενο το οποίο έχει την μεγαλύτερη συνεισφορά στην αύξηση της ταχύτητας καύσης είναι η τύρβη που παράγεται από το μέτωπο της φλόγας, καθώς ο συντελεστής Ξ_k φτάνει την τιμή 2.15. Σημαντική είναι και η συνεισφορά του συντελεστή Ξ_f για τη φράκταλ επιφάνεια της φλόγας ο οποίος όμως λαμβάνει σημαντικές τιμές μόνο στο τελευταίο στάδιο της έκρηξης, με την μέγιστη να είναι ίση με 1.65 (όπου και σταθεροποιείται καθώς η καύση στη συνέχεια έχει ολοκληρωθεί). Από την άλλη, η συνεισφορά του συντελεστή Ξ_{ip} είναι μικρή λόγω του ότι το μείγμα είναι σχεδόν στοιχειομετρικό με αποτέλεσμα να μην παρουσιάζονται μεγάλες αστάθειες λόγω διαφορετικής μοριακής διάχυσης.

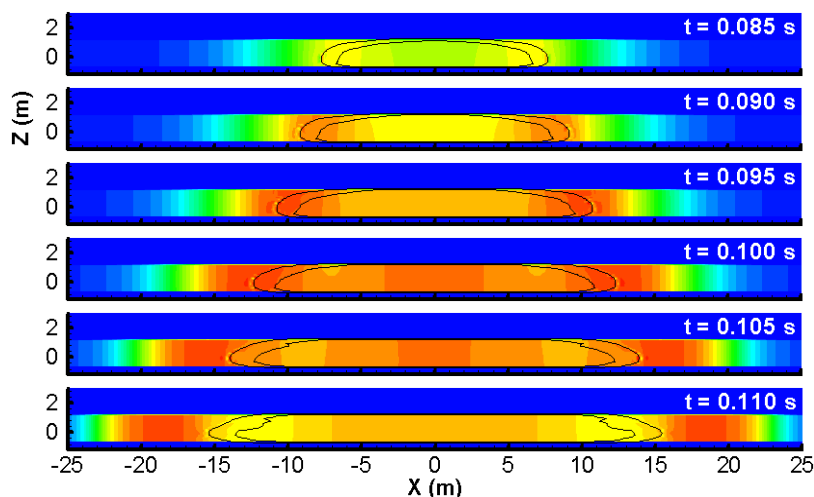
Στο δεξιά διάγραμμα του σχήματος (Σχήμα 8.3.6), απεικονίζεται η τυρβώδης ταχύτητα καύσης S_T , η χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης u'_0 (υποπλεγματική τύρβη) και η ποσότητα S_L^{sgs} της σχέσης (4.2.6) που ισούται με το γινόμενο των συντελεστών Ξ με την ταχύτητα στρωτής καύσης. Παρατηρούμε ότι σε όλη τη διάρκεια της έκρηξης η τυρβώδης ταχύτητα καύσης είναι αρκετά μεγαλύτερη (έως και 4.5 φορές) από την ταχύτητα στρωτής καύσης αλλά μεγαλύτερη και από την S_L^{sgs} λόγω της εξάρτησης της από την τύρβη μέσω της σχέσης του Yakhot. Η διαφορά όμως της S_T από την S_L^{sgs} δεν είναι μεγάλη καθώς οι τιμές της u'_0 είναι σχετικά μικρές. Παρατηρούμε ότι οι μέσες τιμές στην επιφάνεια της φλόγας είναι περίπου σταθερές γύρω από τα 2 m/s μέχρι τα 0.08 s, ενώ στη συνέχεια παρουσιάζουν ένα μέγιστο στο οποίο είναι ίσο με 3 m/s. Συνεπώς η συνεισφορά στην ταχύτητα τυρβώδους καύσης της υποπλεγματικής τύρβης είναι μικρή. Εδώ θα πρέπει να υπενθυμίσουμε ότι η τύρβη αυτή, είναι αυτή που προβλέπεται από το υποπλεγματικό μοντέλο μέσω του επιλυόμενου πεδίου ροής και όχι αυτή που πραγματικά αναπτύσσεται από τη φλόγα. Αυτή που πραγματικά αναπτύσσεται είναι μεγαλύτερη και δεν μπορεί να προβλεφθεί από το μοντέλο λόγω του γεγονότος ότι το πλέγμα μας είναι αρκετές τάξεις μεγαλύτερο από το πάχος της φλόγας. Αυτός είναι και ο λόγος για τον οποίο εισήχθησαν οι συντελεστές Ξ στο μοντέλο.



Σχήμα 8.3.6: Ταχύτητα στρωτής καύσης μαζί με τους συντελεστές Ξ (αριστερά) και τυρβώδης ταχύτητα καύσης S_T μαζί με τη χαρακτηριστική ταχύτητα τύρβης u'_0 και το S_L^{sgs} (δεξιά) συναρτήσει του χρόνου. Οι ποσότητες είναι μέσες τιμές στο πάχος ($c = 0.05 - 0.95$) της φλόγας.

Τέλος, στο παρακάτω σχήμα απεικονίζονται οι ισοϋψείς της πίεσης σε διάφορες χρονικές στιγμές, μαζί με τα όρια του (αριθμητικού) πάχους της φλόγας. Παρατηρούμε ότι αρχικά η πίεση αυξάνει με έναν ομοιόμορφο τρόπο γύρω από το σημείο έναυσης. Στη συνέχεια και καθώς η ταχύτητα της φλόγας αυξάνει, η μεγαλύτερη αύξηση της πίεσης συμβαίνει στα όρια της φλόγας όπου πραγματοποιείται η καύση. Έτσι δημιουργείται σταδιακά ένα μέτωπο υψηλής πίεσης, το οποίο προελαύνει μέσα στη σήραγγα.



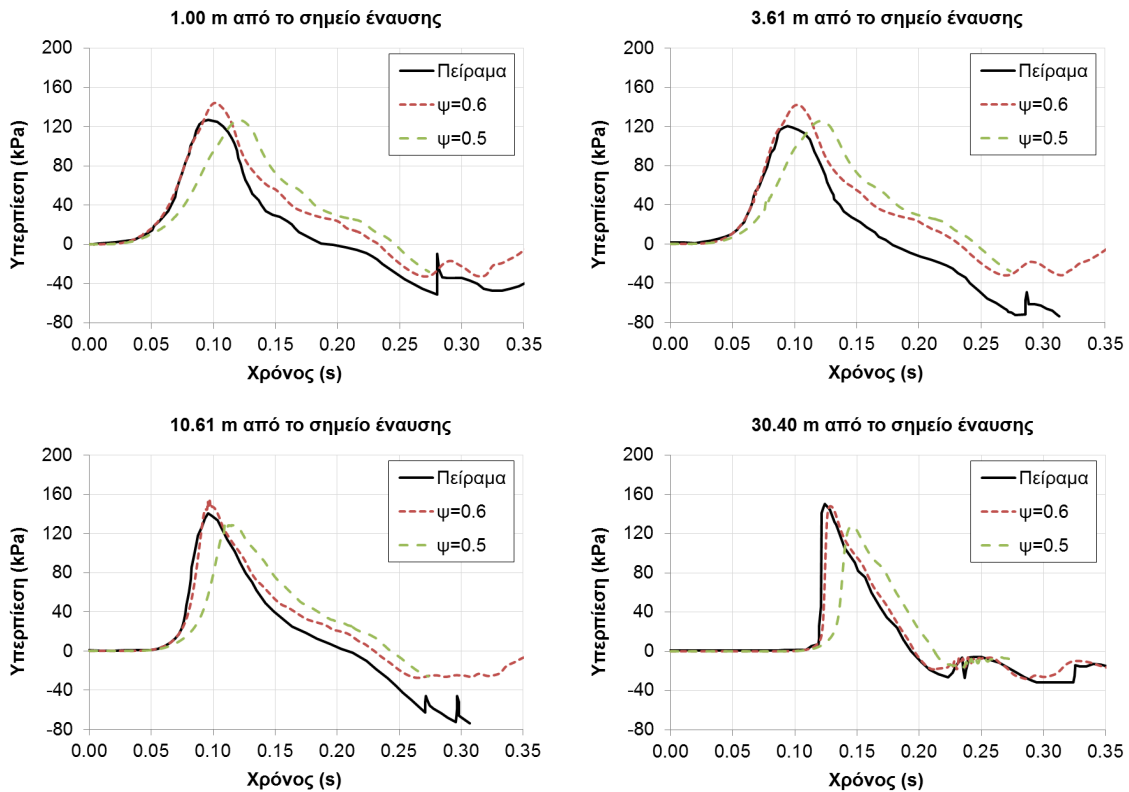


Σχήμα 8.3.7: Ισοϋψείς υπερπίεσης (kPa) μαζί με την επιφάνεια της φλόγας ($c = 0.1, 0.9$) για διάφορες χρονικές στιγμές, στο ΧΖ επίπεδο που περνάει από το κέντρο της σήραγγας.

8.3.3 Διερεύνηση παραμέτρων μοντέλου καύσης

Στη παράγραφο αυτή θα εξετάσουμε την ευαισθησία του μοντέλου καύσης σε δύο βασικές παραμέτρους του: την παράμετρο ψ και τη φράκταλ διάσταση D_f . Όπως είδαμε στη §4.2 η παράμετρος ψ παίρνει τιμές από 0 έως 1 και υποδηλώνει το κλάσμα του θεωρητικά μέγιστου συντελεστή αύξησης της ταχύτητας της φλόγας λόγω της τύρβης που παράγεται από αυτή. Η ακριβής τιμή του ψ συνεπώς δεν είναι γνωστή και εξαρτάται πρωτίστως από τη συγκέντρωση του μείγματος αλλά και από την εκάστοτε εφαρμογή καθώς μπορούμε να πούμε ότι εμπεριέχει πολλές από τις αβεβαιότητες του μοντέλου καύσης.

Στο παρακάτω σχήμα γίνεται σύγκριση των αποτελεσμάτων που προκύπτουν με χρήση της τιμής 0.6 που χρησιμοποιήθηκε μέχρι τώρα με την τιμή 0.5. Όπως ήταν αναμενόμενο, η μείωση της τιμής του ψ οδηγεί σε πτώση τόσο του ρυθμού αύξησης της πίεσης όσο και της μέγιστης υπερπίεσης που επιτυγχάνεται, λόγω της μείωσης του συντελεστή Ξ_k . Όπως είδαμε στην προηγούμενη παράγραφο, στη συγκεκριμένη εφαρμογή ο συντελεστής αυτός είναι ο κύριος συντελεστής ο οποίος αυξάνει την ταχύτητα της καύσης και ως εκ τούτου η μείωση του έχει επίδραση στα αποτελέσματα. Ο λόγος των μέγιστων πιέσεων μεταξύ των τιμών 0.5 και 0.6 είναι 1.14, 1.13, 1.19 και 1.16 στις τέσσερις θέσεις του διαγράμματος. Παρατηρούμε ότι ενώ η τιμή του ψ μειώθηκε κατά 1.2 φορές, η μέγιστη υπερπίεση μειώθηκε κατά ένα μικρότερο παράγοντα. Η μείωση αυτή οδηγεί σε καλύτερη συμφωνία με το πείραμα όσο αφορά τη μέγιστη υπερπίεση στις δύο πρώτες θέσεις, ενώ η συμφωνία στην τρίτη θέση είναι παρόμοια με αυτή της τιμής $\psi = 0.6$. Μπορεί από άποψη ασφάλειας η σωστή πρόγνωση της μέγιστης τιμής να είναι και η πιο σημαντική, η σωστή πρόβλεψη όμως του ρυθμού αύξησης της πίεσης υποδηλώνει την ορθή πρόβλεψη της δυναμικής του φαινομένου δηλαδή την ορθή πρόβλεψη του ρυθμού αύξησης της καύσης. Το γεγονός λοιπόν ότι ο ρυθμός αύξησης της πίεσης προβλέπεται πολύ καλά από το μοντέλο για $\psi = 0.6$, μας κατευθύνει να αναζητήσουμε άλλους τρόπους για να πετύχουμε καλύτερη συμφωνία στη μέγιστη υπερπίεση, από ότι μειώνοντας τον συντελεστή αυτό.

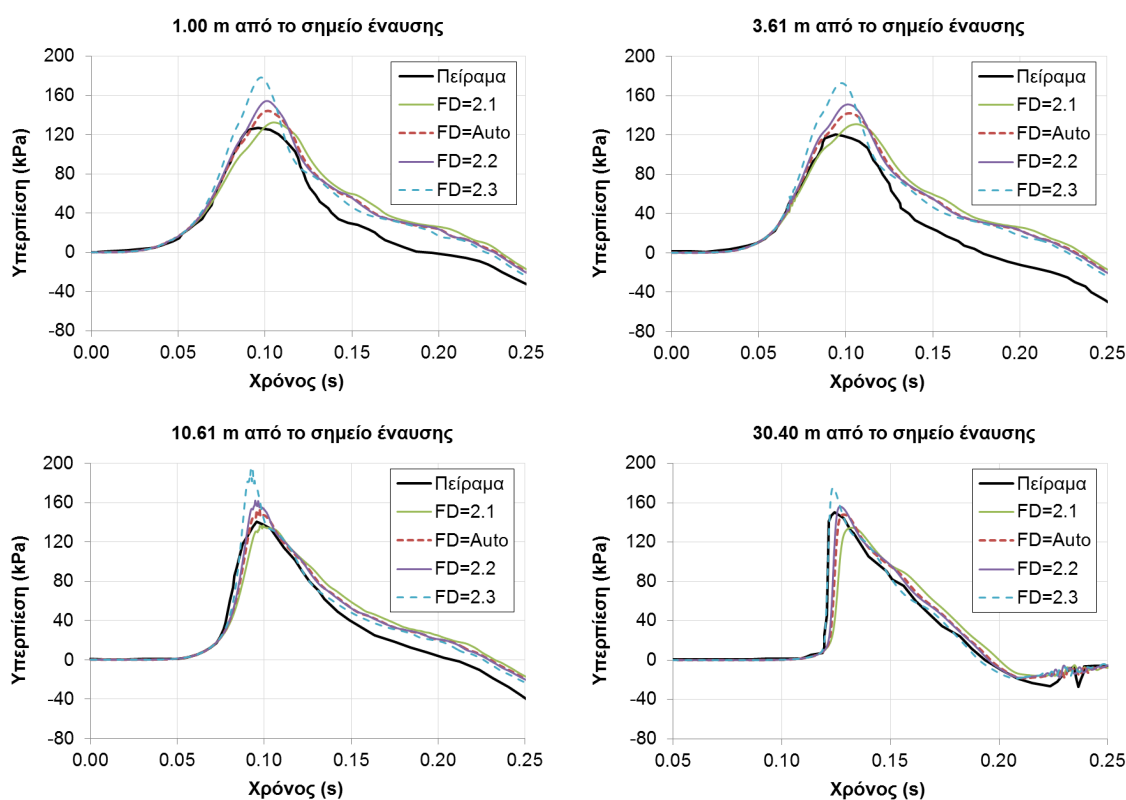


Σχήμα 8.3.8: Επίδραση της σταθεράς ψ του μοντέλου καύσης στις καμπύλες υπερπίεσης σε τέσσερις αποστάσεις από το σημείο έναυσης.

Ένας συντελεστής του οποίου η επίδραση στον ρυθμό καύσης γίνεται μεγαλύτερη καθώς η έκρηξη εξελίσσεται (όπως φάνηκε και στο Σχήμα 8.3.6), είναι ο συντελεστής Ξ_f . Η κύρια παράμετρος η οποία ορίζει την τιμή του συντελεστή αυτού είναι η φράκταλ διάσταση. Στο παρακάτω σχήμα γίνεται διερεύνηση των αποτελεσμάτων για διάφορες τιμές της φράκταλ διάστασης. Δοκιμάστηκαν οι τιμές 2.1, 2.2 και 2.3. Στο σχήμα απεικονίζονται επίσης τα αποτελέσματα για την περίπτωση όπου η φράκταλ διάσταση υπολογίζεται δυναμικά με βάση τη σχέση (2.5.3), όπως έγινε στις προσομοιώσεις που παρουσιάστηκαν μέχρι τώρα. Η μέση τιμή της φράκταλ διάστασης που προέβλεψε το μοντέλο αυτό ισούται με 2.18. Για τον λόγο αυτό, όπως φαίνεται στο σχήμα, ο δυναμικός τρόπος υπολογισμού της μέσω της σχέσης των North & Santavicca (1990) (FD=Auto στα διαγράμματα) προβλέπει καμπύλη υπερπίεσης η οποία είναι πολύ κοντά στην περίπτωση όπου η φράκταλ διάσταση τέθηκε σταθερή και ίση με 2.2.

Όπως ήταν αναμενόμενο, η αύξηση της φράκταλ διάστασης οδηγεί σε ταχύτερο ρυθμό αύξησης της πίεσης και σε μεγαλύτερη μέγιστη τιμή. Η επίδραση που έχει στην καμπύλη αφορά κυρίως σε χρόνους μεγαλύτερους των 0.07 s. Παρατηρούμε ότι καμία τιμή της φράκταλ διάστασης δεν καταφέρνει να προβλέψει με μεγαλύτερη ακρίβεια τη μορφή της καμπύλης και την τιμή της μέγιστης υπερπίεσης στις δύο πρώτες θέσεις. Η τιμή 2.1 φαίνεται να προβλέπει πιο σωστή τιμή μέγιστης υπερπίεσης στις τρεις πρώτες θέσεις, η μορφή όμως της καμπύλης πριν από το σημείο μεγίστου διαφέρει από το πείραμα. Όσο αφορά την ευαισθησία των αποτελεσμάτων στη φράκταλ διάσταση, παρατηρούμε ότι μια αύξηση στην τιμή της κατά περίπου 10% (από 2.1 στο 2.3) οδηγεί σε αύξηση της μέγιστης υπερπίεσης κατά 30-35%. Βλέπουμε δηλαδή ότι ευαισθησία του μοντέλου στην τιμή αυτή είναι αρκετά μεγάλη.

Μια άλλη παρατήρηση που πρέπει να κάνουμε είναι ότι η τιμή με την οποία επιτυγχάνεται καλύτερη συμφωνία με το πείραμα είναι η 2.18, ενώ στην περίπτωση έκρηξης που μελετήθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο η τιμή αυτή ήταν ίση με 2.3. Αυτό μπορεί να δικαιολογηθεί από το γεγονός ότι στην προηγούμενη περίπτωση η έκρηξη ήταν ελεύθερη να αναπτυχθεί στο ανοιχτό περιβάλλον καθώς και στο ότι η κλίμακα της έκρηξης ήταν μεγαλύτερη. Επίσης παρατηρούμε ότι η σχέση των North & Santavica (1990) κατάφερε να προβλέψει τιμή της διάστασης για την οποία υπάρχει καλή συμφωνία με το πείραμα, ενώ στην περίπτωση του προηγούμενου κεφαλαίου δεν τα κατάφερε. Το γεγονός αυτό οφείλεται στο ότι στη σχέση αυτή, η φράκταλ διάσταση υπολογίζεται με βάση την ταχύτητα στρωτής καύσης και τη u'_0 . Η τιμή της ταχύτητας στρωτής καύσης είναι η ίδια και στις δύο περιπτώσεις ενώ οι τιμές του u'_0 που προκύπτουν είναι παρόμοιες. Συνεπώς και στις δύο περιπτώσεις έκρηξης η τιμή που προέβλεψε η ημι-εμπειρική σχέση ήταν μεταξύ 2.15 και 2.2.

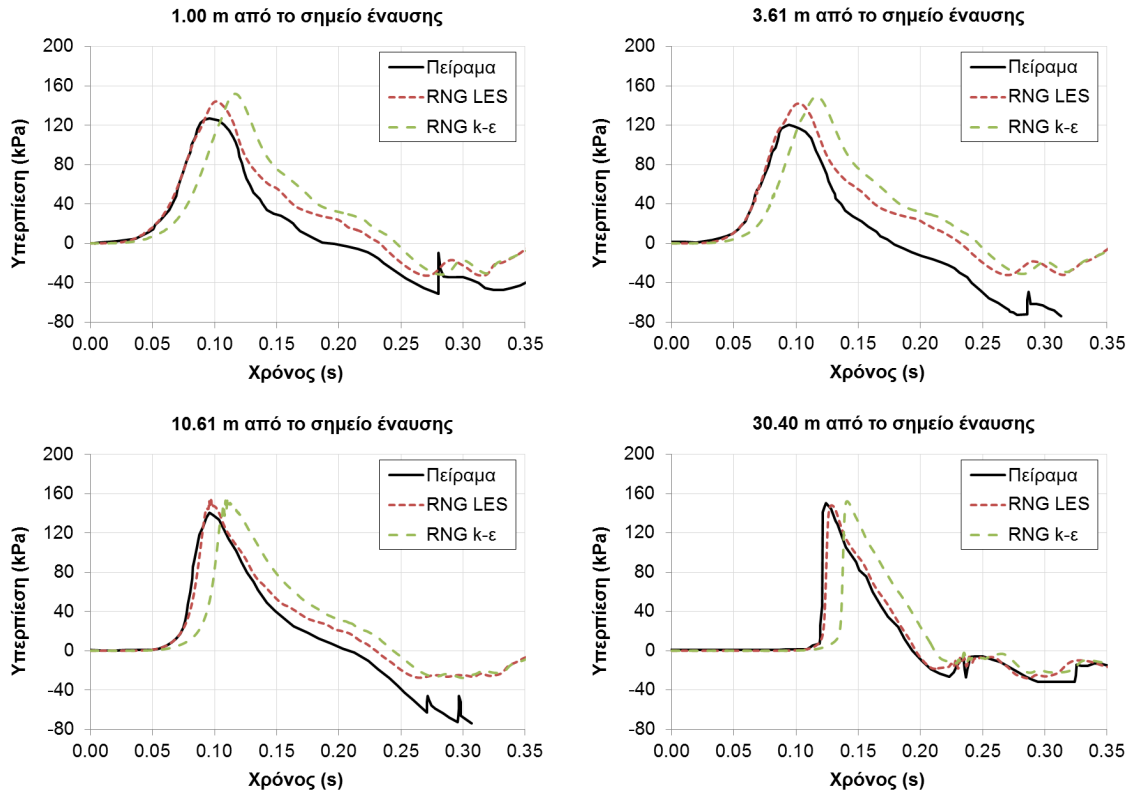


Σχήμα 8.3.9: Επίδραση της φράκταλ διάστασης (FD) του μοντέλου καύσης στις καμπύλες υπερπίεσης σε τέσσερις αποστάσεις από το σημείο έναυσης.

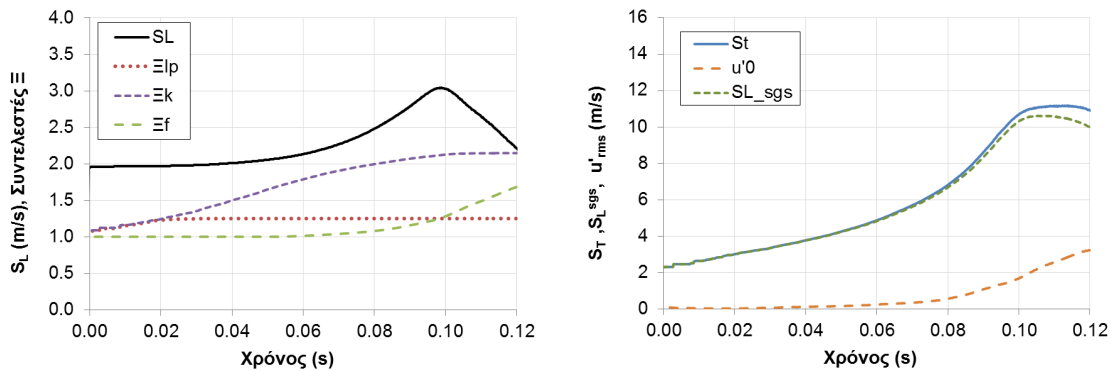
8.3.4 Σύγκριση μεθόδων τύρβης

Στο Σχήμα 8.3.10 γίνεται σύγκριση της υπερπίεσης μεταξύ της RNG LES προσομοίωσης και του μοντέλου RNG k-ε. Παρατηρούμε ότι, όπως και στην περίπτωση του προηγούμενου κεφαλαίου (§7.3.3), η κύρια διαφορά μεταξύ των δύο μεθόδων έγκειται στη χρονική καθυστέρηση με την οποία αυξάνει η πίεση στην περίπτωση του RNG k-ε. Ο λόγος για αυτή τη συμπεριφορά ήταν πάλι οι χαμηλότερες τιμές του u'_0 που προβλέπονται από το μοντέλο k-ε σε σύγκριση με το LES. Στο Σχήμα 8.3.11 παρουσιάζονται τα διαγράμματα που απεικονίζουν την χρονική εξέλιξη των βασικών στοιχείων του μοντέλου καύσης για την περίπτωση του k-ε μοντέλου. Τα αντίστοιχα διαγράμματα για την περίπτωση του LES παρουσιάστηκαν στο Σχήμα 8.3.6. Από τα διαγράμματα αυτά είναι

φανερές οι πολύ μικρές τιμές του u'_0 που αναπτύσσονται στην περιοχή της φλόγας. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα μέχρι περίπου τα 0.08 s οι καμπύλες της τυρβώδους ταχύτητας καύσης με την ταχύτητα S_L^{sgs} να ταυτίζονται. Μετά τα 0.08 s το u'_0 αρχίζει να αυξάνει σταδιακά φτάνοντας την τιμή 3 m/s τη χρονική στιγμή 0.16 s στην οποία αναπτύσσεται η μέγιστη υπερπίεση.



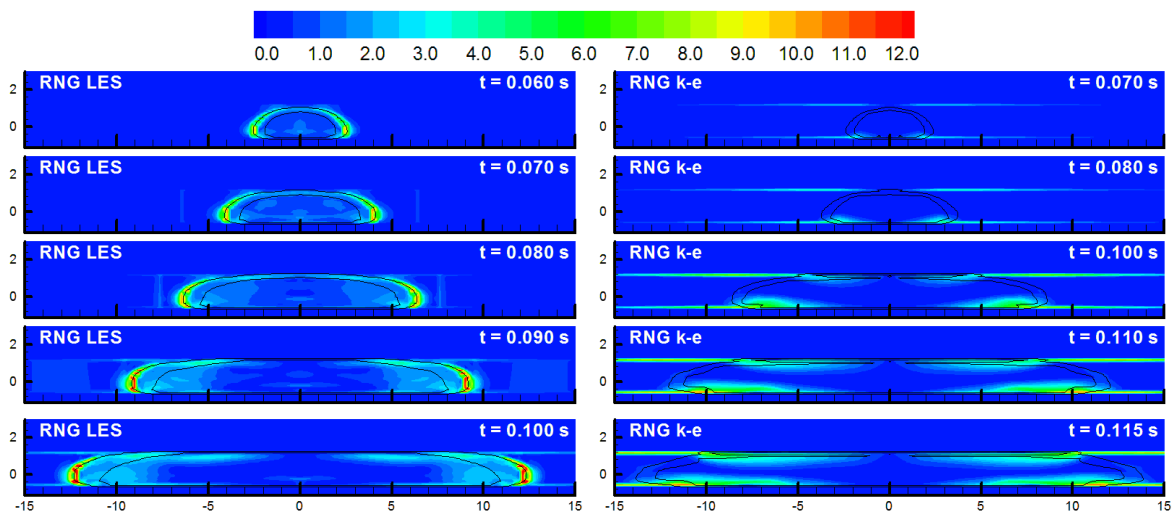
Σχήμα 8.3.10: Σύγκριση της χρονικής εξέλιξης της υπερπίεσης σε τέσσερις αποστάσεις από το σημείο έναυσης για το RNG LES και το RNG k-ε μοντέλο τύρβης.



Σχήμα 8.3.11: Ταχύτητα στρωτής καύσης μαζί με τους συντελεστές Ξ (αριστερά) και τυρβώδης ταχύτητα καύσης S_T μαζί με τη χαρακτηριστική ταχύτητα τύρβης u'_0 και το S_L^{sgs} (δεξιά) συναρτήσει του χρόνου. Οι ποσότητες είναι μέσες τιμές στο πάχος ($c = 0.05 - 0.95$) της φλόγας.

Στο Σχήμα 8.3.12 απεικονίζονται οι ισοϋψείς της χαρακτηριστικής ταχύτητας τύρβης u'_0 για τις περιπτώσεις του RNG LES και RNG k-ε. Στο ίδιο σχήμα με μαύρες γραμμές απεικονίζονται τα όρια της φλόγας. Παρατηρούμε ότι η μορφή των ισοϋψών είναι παρόμοια με την περίπτωση της ελεύθερης έκρηξης που παρουσιάστηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο (Σχήμα 7.3.7). Στην περίπτωση

του LES η τύρβη παράγεται στο μέτωπο της φλόγας και κυρίως στο μπροστά μέρος του πάχους της. Από την άλλη στο RNG k-ε μοντέλο οι μεγαλύτερες τιμές του u'_0 παρουσιάζονται λόγω της επαφής της φλόγας με τα τοιχώματα της σήραγγας και όχι λόγω του πεδίου ροής που αναπτύσσεται γύρω από το μέτωπο της. Παρατηρούμε επίσης ότι στο RNG k-ε μοντέλο η φλόγα έχει μια περίεργη μορφή στην οροφή της σήραγγας στις χρονικές στιγμές 0.10 και 0.11 s. Αυτό συμβαίνει εξ' αιτίας των υψηλών τιμών του u'_0 οι οποίες αναπτύσσονται εκεί και οι οποίες επιταχύνουν την καύση στα σημεία αυτά. Συνεπώς η φλόγα αναπτύσσεται πιο γρήγορα κατά μήκος της οροφής από ότι στα αμέσως χαμηλότερα επίπεδα.

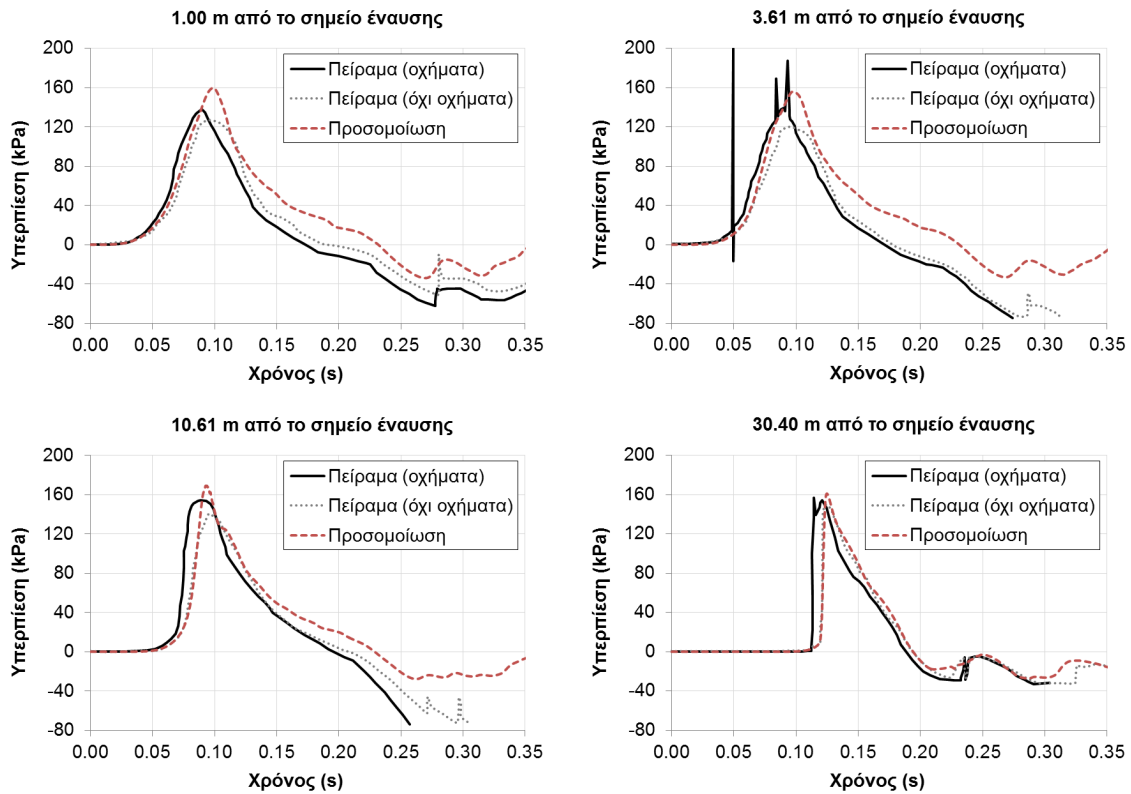


Σχήμα 8.3.12: Ισοϋψείς χαρακτηριστικής ταχύτητας τύρβης u'_0 (m/s) μαζί με τα όρια της φλόγας ($c = 0.1, 0.9$) για το RNG LES (αριστερά) και το RNG k-ε μοντέλο (δεξιά) σε διάφορες χρονικές στιγμές στο XZ επίπεδο που περνάει από το κέντρο της σήραγγας.

8.3.5 Σενάριο με οχήματα

Στο παρακάτω σχήμα απεικονίζονται τα υπολογιστικά αποτελέσματα για την περίπτωση του σεναρίου με τα οχήματα. Στα διαγράμματα του σχήματος απεικονίζονται τόσο οι πειραματικές καμπύλες του σεναρίου με τα οχήματα όσο και του σεναρίου χωρίς αυτά. Καταρχήν, παρατηρούμε ότι οι πειραματικές καμπύλες υπερπίεσης είναι παρόμοιες και στα δύο σενάρια. Η μέγιστη υπερπίεση είναι μεγαλύτερη στην περίπτωση με τα εμπόδια, οι διαφορές όμως είναι μικρές (8, 16, 10 και 4 % σε κάθε θέση)¹. Το γεγονός αυτό, το οποίο προβλέπεται και από την προσομοίωση, υποδεικνύει ότι η συνεισφορά της τύρβης που αναπτύσσεται από τα οχήματα είναι μικρή και ότι οι βασικές αιτίες αύξησης της ταχύτητας τυρβώδους καύσης είναι ίδιες με αυτές της περίπτωσης της άδειας σήραγγας, δηλαδή φαινόμενα που έχουν να κάνουν με το ίδιο το μέτωπο της φλόγας.

¹ Τα τρία τοπικά μέγιστα που υπάρχουν στα πειραματικά αποτελέσματα της θέσης 3.61 m έχουν αγνοηθεί καθώς δεν φαίνεται να έχουν φυσική προέλευση και πιθανότητα έχουν προκύψει από σφάλμα στις μετρήσεις (η αύξηση της πίεσης είναι πάρα πολύ απότομη και επίσης τα μέγιστα αυτά απουσιάζουν από τις υπόλοιπες μετρήσεις)



Σχήμα 8.3.13: Σύγκριση πειράματος και προσομοίωσης της χρονικής εξέλιξης της υπερπίεσης σε τέσσερις αποστάσεις από το σημείο έναυσης.

Οι τιμές της μέγιστης υπερπίεσης καθώς και του ρυθμού αύξησης της πίεσης στο πείραμα και στην προσομοίωση παρουσιάζονται στον παρακάτω πίνακα. Σε παρένθεση φαίνονται επίσης οι αντίστοιχες τιμές για το σενάριο της άδειας σήραγγας. Συγκρίνοντας τα δύο σενάρια, παρατηρούμε ότι τόσο οι τιμές της υπερπίεσης όσο και του ρυθμού αύξησης της είναι μεγαλύτερες σε όλες τις θέσεις και στο πείραμα και στην προσομοίωση. Η συμφωνία μεταξύ πειράματος και προσομοίωσης είναι ικανοποιητική με το ίδιο περίπου σφάλμα με αυτή της περίπτωσης της άδειας σήραγγας.

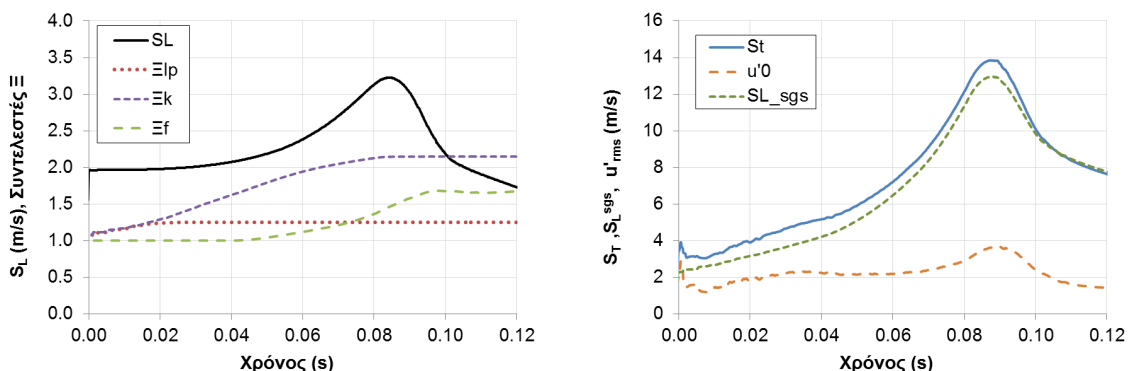
Πίνακας 8.3.3: Μέγιστη υπερπίεση σε διάφορες θέσεις της σήραγγας στο σενάριο με οχήματα (σε παρένθεση παρουσιάζονται οι αντίστοιχες τιμές του σεναρίου χωρίς οχήματα).

Θέση (m)	Προσομοίωση (kPa)	Πείραμα (kPa)	Λόγος
1.00	159.8 (144.3)	137.7 (126.9)	1.16 (1.14)
3.61	155.8 (142.0)	139.2 (120.1)	1.12 (1.18)
10.61	169.0 (152.5)	154.3 (140.7)	1.10 (1.08)
30.40	161.0 (150.0)	156.7 (150.0)	1.03 (1.00)

Πίνακας 8.3.4: Ρυθμός αύξησης της πίεσης σε διάφορες θέσεις της σήραγγας στο σενάριο με οχήματα (σε παρένθεση παρουσιάζονται οι αντίστοιχες τιμές του σεναρίου χωρίς οχήματα).

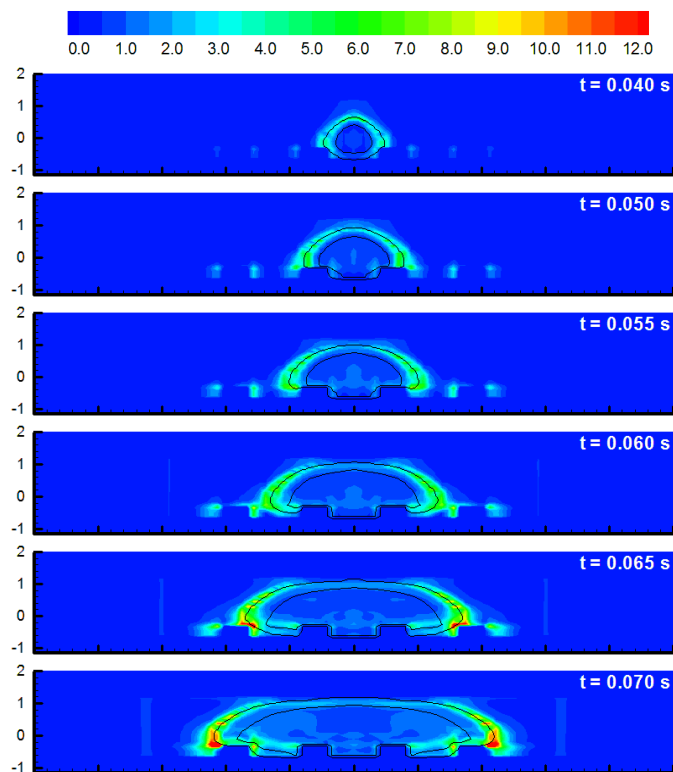
Θέση (m)	Προσομοίωση (kPa/s)	Πείραμα (kPa/s)	Λόγος
1.00	2908 (2422)	2754 (2402)	1.06 (1.01)
3.61	3192 (2610)	3016 (2535)	1.06 (1.03)
10.61	6992 (5564)	6148 (5001)	1.14 (1.11)
30.40	29514 (17614)	108228 (28398)	0.27 (0.62)

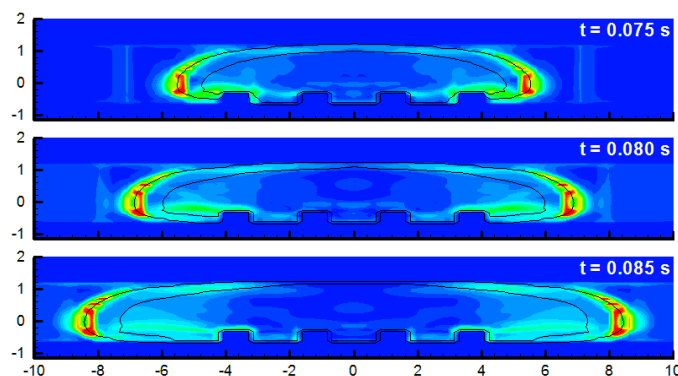
Στο παρακάτω σχήμα παρουσιάζονται τα διαγράμματα που απεικονίζουν την χρονική εξέλιξη των βασικών στοιχείων του μοντέλου καύσης για την περίπτωση με οχήματα. Παρατηρούμε ότι τα διαγράμματα αυτά είναι σχεδόν ίδια με αυτά της περίπτωσης χωρίς οχήματα (Σχήμα 8.3.6). Η χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης λαμβάνει ελάχιστα μεγαλύτερες τιμές κυρίως προς το τέλος της έκρηξης γεγονός το οποίο οδηγεί σε ελάχιστα μεγαλύτερη ταχύτητα τυρβώδους καύσης.



Σχήμα 8.3.14: Ταχύτητα στρωτής καύσης μαζί με τους συντελεστές ξ (αριστερά) και τυρβώδους ταχύτητα καύσης S_T μαζί με τη χαρακτηριστική ταχύτητα τύρβης u'_0 και το S_L^{sgs} (δεξιά) συναρτήσει του χρόνου. Οι ποσότητες είναι μέσες τιμές στο πάχος ($c = 0.05 - 0.95$) της φλόγας - σενάριο με οχήματα.

Στο παρακάτω σχήμα απεικονίζονται οι ισοϋψείς της χαρακτηριστικής ταχύτητας τύρβης u'_0 στο σενάριο με οχήματα. Στο ίδιο σχήμα με μαύρες γραμμές απεικονίζονται τα όρια της φλόγας. Παρατηρούμε ότι η μορφή των ισοϋψών είναι παρόμοια με αυτή του σεναρίου χωρίς οχήματα (Σχήμα 8.3.12), ενώ επίσης οι τιμές της ταχύτητας είναι παρόμοιες. Η κύρια διαφορά που παρατηρούμε είναι ότι καθώς η έκρηξη εξελίσσεται, η χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης αυξάνει κατάντη της φλόγας στην περιοχή γύρω από τα οχήματα λόγω του πεδίου ροής που αναπτύσσεται.





Σχήμα 8.3.15: Ισοϋψείς χαρακτηριστικής ταχύτητας τύρβης u'_0 (m/s) μαζί με τα όρια της φλόγας ($c = 0.1, 0.9$) σε διάφορες χρονικές στιγμές στο XZ επίπεδο που περνάει από τον κεντρικό άξονα της σήραγγας - σενάριο με οχήματα.

8.4 Συμπεράσματα

Στο κεφάλαιο αυτό έγινε προσομοίωση έκρηξης προαναμεμιγμένου μείγματος υδρογόνου-αέρα σε μοντέλο σήραγγας. Σκοπός του κεφαλαίου ήταν η αξιολόγηση της μεθοδολογίας που αναπτύχθηκε στην σωστή πρόβλεψη των αναπτυσσόμενων υπερπίεσεων. Η συνολική συμπεριφορά του μοντέλου κρίνεται πάρα πολύ καλή.

Αρχικά πραγματοποιήθηκε ανεξαρτησία πλέγματος και, όπως και στη περίπτωση του προηγούμενου κεφαλαίου, φάνηκε ότι τα αποτελέσματα δεν έχουν μεγάλη εξάρτηση από το πλέγμα. Στη συνέχεια έγινε σύγκριση των αναπτυσσόμενων πιέσεων με το πείραμα. Η σύγκριση έγινε με βάση δύο μεγέθη τα οποία έχουν πρωταρχική σημασία στο φαινόμενο που εξετάζουμε. Το ένα είναι ο ρυθμός αύξησης της πίεσης και το άλλο η μέγιστη υπερπίεση. Ως προς το πρώτο μέγεθος η συμφωνία με το πείραμα ήταν πάρα πολύ καλή. Ως προς τις μέγιστες υπερπίεσεις το μοντέλο υπερεκτιμά το πείραμα έως και 18%.

Δοκιμάστηκε η ευαισθησία του μοντέλου σε δύο βασικές παραμέτρους του, τη σταθερά ψ και τη φράκταλ διάσταση. Αλλαγή στην παράμετρο ψ επηρεάζει γενικά τη καμπύλη υπερπίεσης καθώς μεταβάλλει τόσο τον ρυθμό αύξησης της πίεσης όσο και τη μέγιστη τιμή της. Η μείωση της σταθεράς ψ κατά περίπου 17% (από 0.6 σε 0.5) οδήγησε σε περίπου αντίστοιχη μείωση της μέγιστης υπερπίεσης. Ο ρυθμός αύξησης της πίεσης όμως επηρεάστηκε σε μεγαλύτερο βαθμό παρουσιάζοντας πτώση. Η ευαισθησία στη φράκταλ διάσταση επηρέασε την καμπύλη υπερπίεσης σε μικρότερο χρονικό εύρος σε σχέση με την παράμετρο ψ , αλλά σε μεγαλύτερο βαθμό. Μια αύξηση στην τιμή της κατά περίπου 10% (από 2.1 στο 2.3) οδηγεί σε αύξηση της μέγιστης υπερπίεσης κατά 30-35%. Η τιμή που έδωσε την καλύτερη συμφωνία με το πείραμα ήταν η 2.18 η οποία προβλέφθηκε και από την ημι-εμπειρική σχέση των North & Santavicca (1990).

Η ανάλυση που έγινε ως προς τους μηχανισμούς οι οποίοι οδηγούν στην αύξηση του ρυθμού καύσης και στην επιτάχυνση της φλόγας έδειξε ότι αυτή οφείλεται κυρίως σε φαινόμενα που συμβαίνουν σε κλίμακες συγκρίσιμες με το πάχος της φλόγας, όπως είναι η τύρβη που αναπτύσσεται από το μέτωπο της φλόγας και η φράκταλ δομή της φλόγας. Η συνεισφορά του επιλυόμενου μέρους της τύρβης όπως και της υποπλεγματικής τύρβης είναι μικρές, ακόμα και στο σενάριο με τα οχήματα. Τα παραπάνω επιβεβαιώνονται και από το γεγονός ότι στο σενάριο με τα

οχήματα οι καμπύλες υπερπίεσης ήταν παρόμοιες με τις καμπύλες του σεναρίου χωρίς αυτοκίνητα, γεγονός που παρουσιάζεται στο πείραμα και επιβεβαιώθηκε από την προσομοίωση.

Η αντικατάσταση της μεθόδου LES από τη μέθοδο RANS και το μοντέλο RNG k-ε, δεν έφερε μεγάλες αλλαγές στα αποτελέσματα καθώς εμφανίστηκε μόνο μια μικρή καθυστέρηση στον χρόνο εμφάνισης της μέγιστης υπερπίεσης. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι το φαινόμενο καθοδηγείται ουσιαστικά από τον ρυθμό καύσης στον οποίο η χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης έχει μικρή συνεισφορά λόγω των μικρών τιμών της. Η χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης που προβλέπεται από τις δύο μεθοδολογίες είναι διαφορετική. Στη μέθοδο LES προβλέπονται μεγαλύτερες τιμές, κυρίως στα πρώτα στάδια του φαινομένου. Οι τιμές αυτές εμφανίζονται γύρω από το μέτωπο της φλόγας, ενώ στη RANS μέθοδο οι μεγαλύτερες τιμές προβλέπονται κοντά στα τοιχώματα, κυρίως στα σημεία επαφής της κινούμενης φλόγας με αυτά.

Κεφάλαιο 9

Προσομοίωση έκρηξης σε δοχείο με άνοιγμα

Για να φθάσει κάποιος στην αλήθεια, είναι απαραίτητο, έστω μια φορά στη ζωή του, να αμφιβάλει για τα πάντα, όσο το δυνατόν περισσότερο

René Descartes

Στο κεφάλαιο αυτό θα γίνει προσομοίωση έκρηξης αέριου μείγματος υδρογόνου-αέρα σε δοχείο με άνοιγμα. Σκοπός της προσομοίωσης αυτής είναι η αξιολόγηση της μεθοδολογίας που περιγράφηκε στο Κεφάλαιο 4 στην περίπτωση έκρηξης σε κλειστούς χώρους με ανοίγματα, η οποία όπως είδαμε στην §2.6 παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον.

9.1 Εισαγωγή

9.1.1 Ανάλυση πειράματος

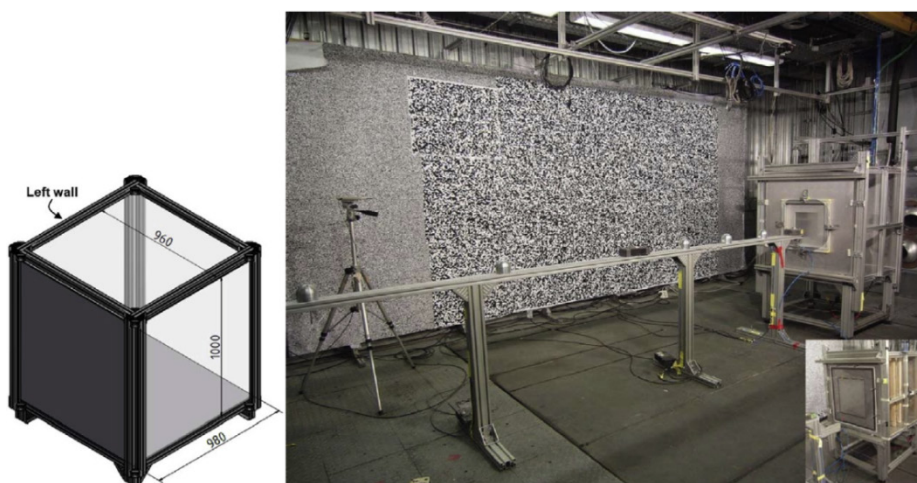
Η περίπτωση της έκρηξης σε κλειστό χώρο με ανοίγματα είναι ιδιαίτερης σημασίας καθώς τα ανοίγματα αποτελούν το τελευταίο μέτρο ασφάλειας, έτσι ώστε η πίεση που θα αναπτυχθεί να μην ξεπεράσει το όριο αντοχής της κατασκευής. Η μοντελοποίηση τέτοιων περιπτώσεων δεν είναι εύκολη λόγω της πολυπλοκότητας του φαινομένου (§2.6). Για τον σκοπό αυτό έχουν διεξαχθεί πολλά πειράματα τα οποία χρησιμεύουν τόσο στη μελέτη του φαινομένου όσο και στην ανάπτυξη νέων υπολογιστικών μοντέλων. Ένα τέτοιο πείραμα διεξήχθη από το ινστιτούτο KIT στη Γερμανία και αφορά τη μελέτη έκρηξης αέριου μείγματος υδρογόνου-αέρα σε δοχείο πλευράς περίπου 1 m^3 με ένα άνοιγμα (Kuznetsov et al. 2015).

Το πείραμα αυτό επιλέχτηκε καθώς πρόκειται για ένα σύγχρονο πείραμα με διαθέσιμα πολλά πειραματικά αποτελέσματα. Πρόκειται για ένα πείραμα υψηλής αξιοπιστίας, καθώς υπήρχαν διαθέσιμα τα αποτελέσματα από την μελέτη επαναληψιμότητας του. Η πίεση μετρήθηκε όχι μόνο στο εσωτερικό αλλά και στο εξωτερικό μέρος του δοχείου, έτσι ώστε να μελετηθεί το φαινόμενο της εξωτερικής έκρηξης (§2.6). Επίσης υπάρχει φωτογραφική απεικόνιση της φλόγας σε όλη τη διάρκεια του φαινομένου. Αυτό δεν είναι εύκολο να γίνει λόγω του ότι η φλόγα υδρογόνου είναι συνήθως μη-ορατή (Schefer et al. 2009). Στο συγκεκριμένο πείραμα χρησιμοποιήθηκε μια τεχνική η οποία εκμεταλλεύεται το γεγονός ότι οι ακτίνες φωτός εκτρέπονται όταν συναντάνε αέρια διαφορετικών πυκνοτήτων¹. Στο πείραμα εξετάστηκαν διάφορες περιπτώσεις τόσο ομογενών όσο

¹ Η μέθοδος ονομάζεται «schlieren (BOS)»

και ανομοιογενών μειγμάτων. Στο κεφάλαιο αυτό θα προσομοιώσουμε την περίπτωση ομογενούς μείγματος υδρογόνου-αέρα συγκέντρωσης 18% κατ' όγκο.

Στο Σχήμα 9.1.1 απεικονίζεται το δοχείο μέσα στο οποίο γίνεται η έκρηξη, όπως και μια φωτογραφία από τον χώρο του πειράματος. Οι ακριβείς διαστάσεις του δοχείου είναι 0.98 x 0.96 x 1.00 m, ενώ το άνοιγμα είναι 0.5 x 0.5 m και είναι τοποθετημένο στο κέντρο της μπροστινής πλευράς του. Η έναυση της καύσης, στην περίπτωση που θα εξετάσουμε, έγινε στο πίσω μέρος του δοχείου, στο κέντρο της πλευράς που βρίσκεται απέναντι από το άνοιγμα. Όπως φαίνεται από τη φωτογραφία, το δοχείο βρίσκεται μέσα σε ένα μεγάλο δωμάτιο, διαστάσεων 5.5 x 8.5 x 3.4 m, στους τοίχους του οποίου έχει τοποθετηθεί υλικό το οποίο απορροφά τα κύματα πίεσης που δημιουργούνται. Η απόσταση του από τον δεξιό τοίχο είναι 1.94 m, από τον πίσω 1.95 m και από τον αριστερό 2.6 m, ενώ από το έδαφος απέχει 0.62 m.

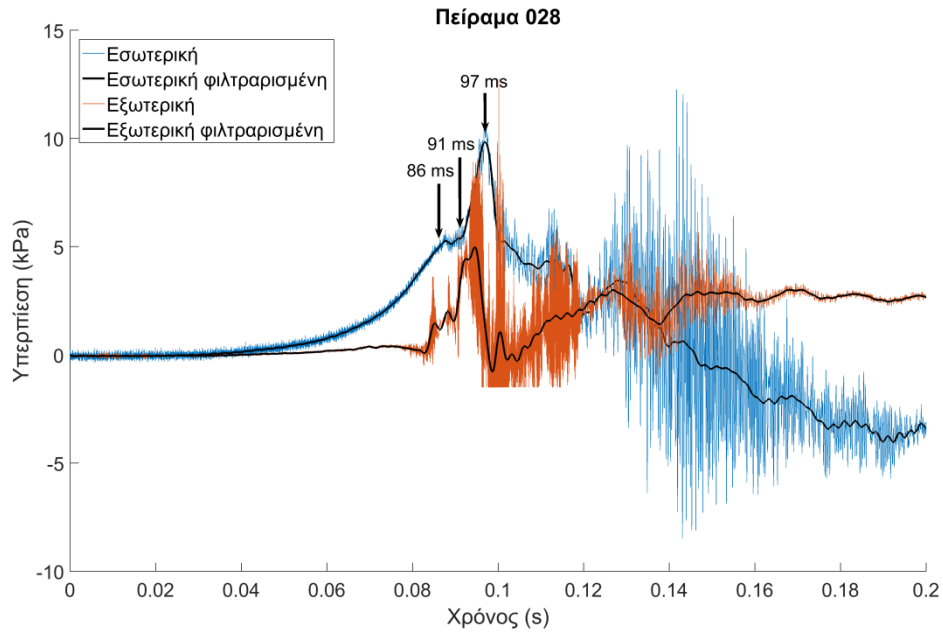


Σχήμα 9.1.1: Σχηματική απεικόνιση του δοχείου στο οποίο πραγματοποιείται η έκρηξη (αριστερά) και φωτογραφία από τον χώρο του πειράματος (δεξιά) (Kuznetsov et al. 2015).

Στο Σχήμα 9.1.2 απεικονίζονται οι καμπύλες υπερπίεσης εντός και εκτός δοχείου, όπως μετρήθηκαν στο πείραμα. Η πίεση μέσα στο δοχείο μετρήθηκε στο κέντρο της βάσης του, ενώ εκτός αυτού 0.24 m από το κέντρο του ανοίγματος. Στο σχήμα απεικονίζονται τόσο οι στιγμιαίες όσο και οι φιλτραρισμένες τιμές, οι οποίες υπολογίστηκαν με εφαρμογή του μετασχηματισμού Fourier. Το φίλτρο που χρησιμοποιήθηκε είναι χαμηλής διαπερατότητας συχνότητας 400 Hz (που σημαίνει ότι αποκόπτονται οι ταλαντώσεις συχνότητας μεγαλύτερης των 400 Hz).

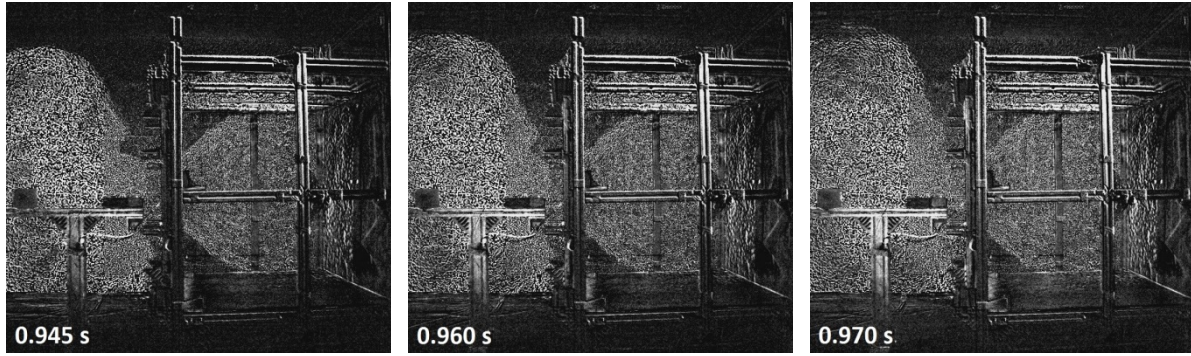
Τα βέλη υποδεικνύουν τρεις χαρακτηριστικές χρονικές στιγμές. Η μορφή της φλόγας σε αυτές αλλά και σε άλλες χρονικές στιγμές απεικονίζεται στο Σχήμα 9.1.3. Στην πρώτη χρονική στιγμή (86 ms) η φλόγα εξέρχεται από το άνοιγμα, ενώ στη δεύτερη (91 ms) πραγματοποιείται η απότομη αύξηση της εξωτερικής πίεσης. Ο χρόνος στον οποίο αρχίζει η απότομη αυτή αύξηση ισούται με 90 ms. Όπως είναι φανερό, η αύξηση αυτή παρατηρείται λόγω της εξωτερικής έκρηξης από την καύση του μείγματος υδρογόνου-αέρα που έχει ωθηθεί εκτός του δοχείου. Στο διάγραμμα της υπερπίεσης είναι φανερό ότι η απότομη αύξηση της εξωτερικής πίεσης προηγείται της απότομης αύξησης της εσωτερικής, με αποτέλεσμα να θεωρείται η κινητήριος δύναμη της αύξησης της πίεσης στο εσωτερικό (δες και §2.6). Η πίεση στο εσωτερικό του δοχείου πριν τη στιγμή της εξωτερικής έκρηξης, ισούται με περίπου 5kPa, ενώ μετά την εξωτερική έκρηξη η υπερπίεση διπλασιάζεται φτάνοντας τα 10 kPa τη χρονική στιγμή των 97 ms.

Στο διάγραμμα της υπερπίεσης παρατηρούμε ότι αναπτύσσονται έντονες ταλαντώσεις, μετά το σημείο όπου η πίεση έχει λάβει τη μέγιστη τιμή. Οι ταλαντώσεις αυτές οφείλονται στις αστάθειες που δημιουργούνται κατά την καύση του καυσίμου που έχει απομείνει στο εσωτερικό του δοχείου, λόγω της αλληλεπίδρασης με τα ακουστικά κύματα και λόγω των ταλαντώσεων του περιβλήματος του δοχείου.



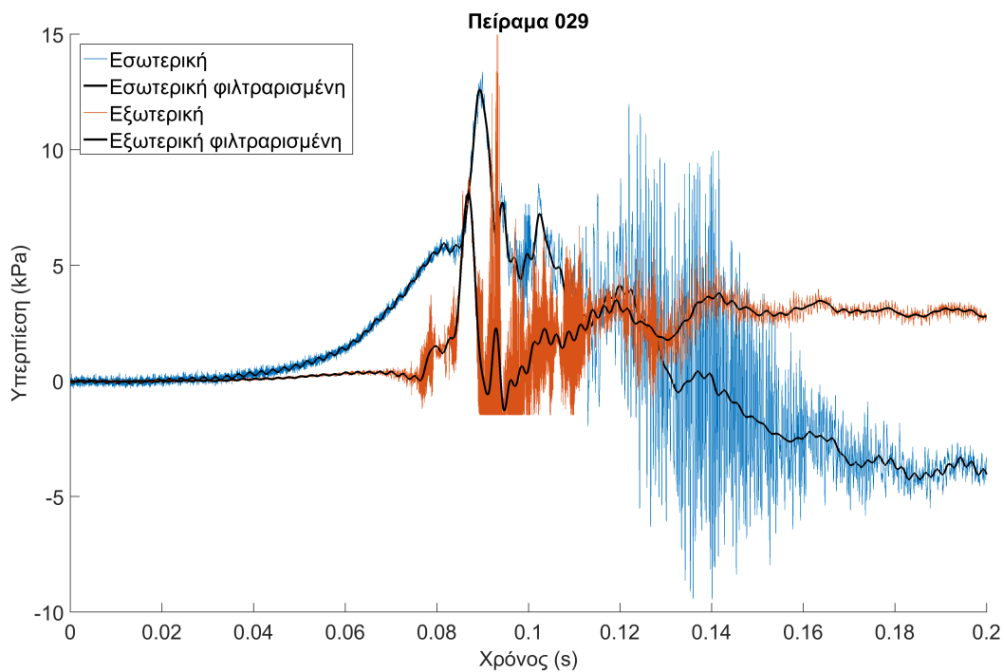
Σχήμα 9.1.2: Υπερπίεση μέσα και έξω από το δοχείο, όπως καταγράφηκε στο πείραμα 028. Με μαύρες καμπύλες απεικονίζονται οι φιλτραρισμένες τιμές. Τα βέλη υποδεικνύουν τις χρονικές στιγμές 86 και 91 ms (δες και Σχήμα 9.1.3).



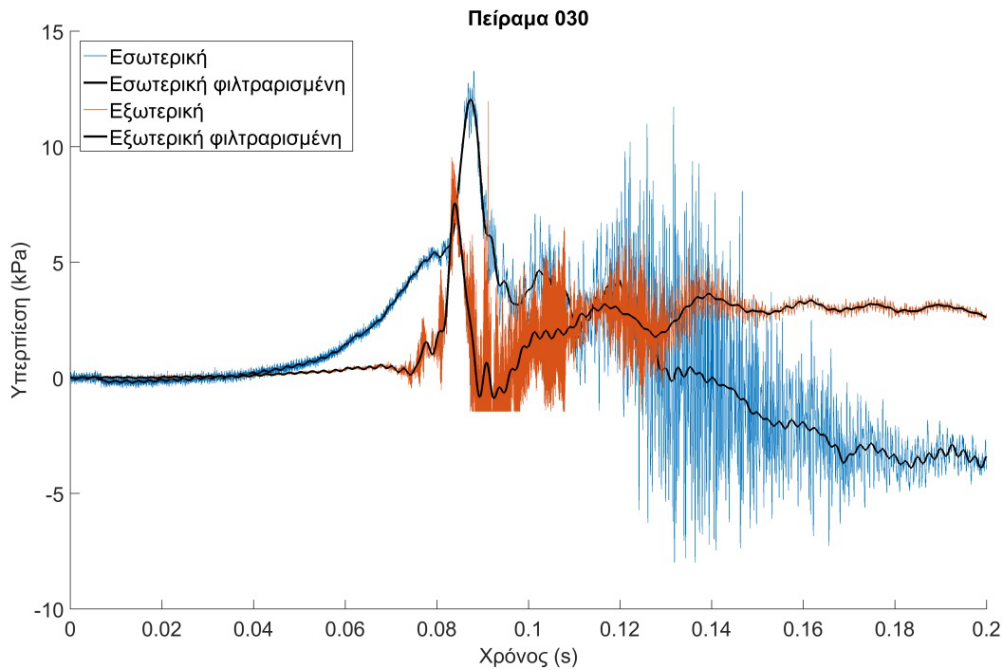


Σχήμα 9.1.3: Απεικόνιση της φλόγας σε διάφορες χρονικές στιγμές μετά την έναρξη της (Kuznetsov et al. 2015).

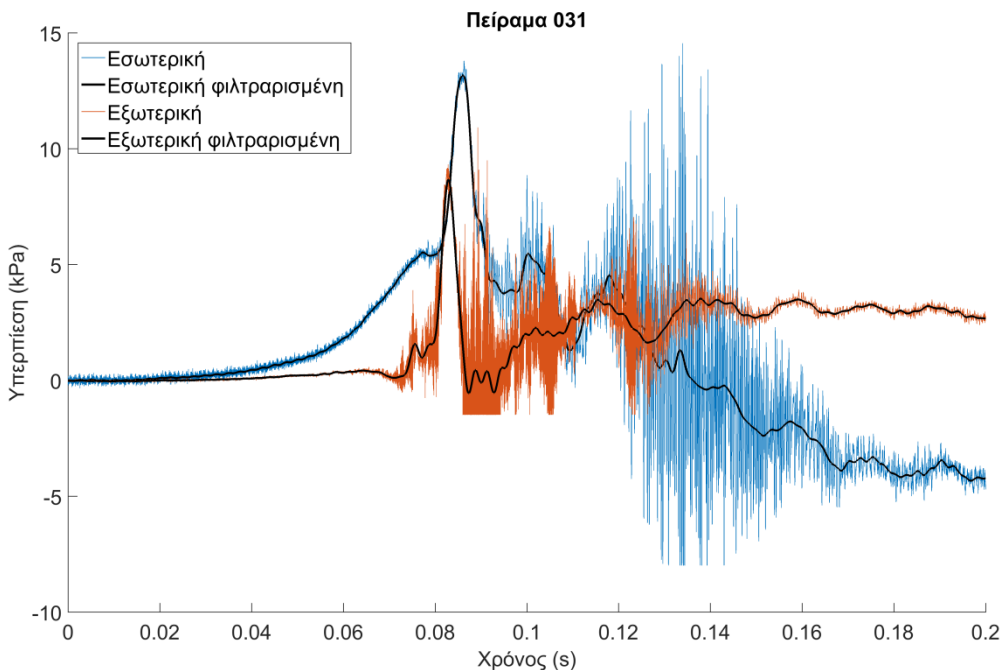
Το συγκεκριμένο πείραμα επαναλήφθηκε τρεις φορές. Οι κωδικοί των πειραμάτων είναι 028, 029, 030 και 031. Στο Σχήμα 9.1.4, Σχήμα 9.1.5 και Σχήμα 9.1.6, απεικονίζεται η υπερπίεση μέσα και έξω από το δοχείο, για τα πειράματα 029, 030 και 031 αντίστοιχα. Παρατηρούμε ότι η γενική μορφή των καμπυλών είναι η ίδια με αυτή του πειράματος 028 (Σχήμα 9.1.2). Η επίδραση της εξωτερικής έκρηξης στην πίεση μέσα στο δοχείο είναι φανερή σε όλα τα πειράματα. Η εξωτερική πίεση αυξάνει τη στιγμή που η πίεση στο εσωτερικό έχει σταθεροποιηθεί προκαλώντας την απότομη αύξηση της.



Σχήμα 9.1.4: Υπερπίεση μέσα και έξω από το δοχείο, όπως καταγράφηκε στο πείραμα 029. Με μαύρες καμπύλες απεικονίζονται οι φιλτραρισμένες τιμές.



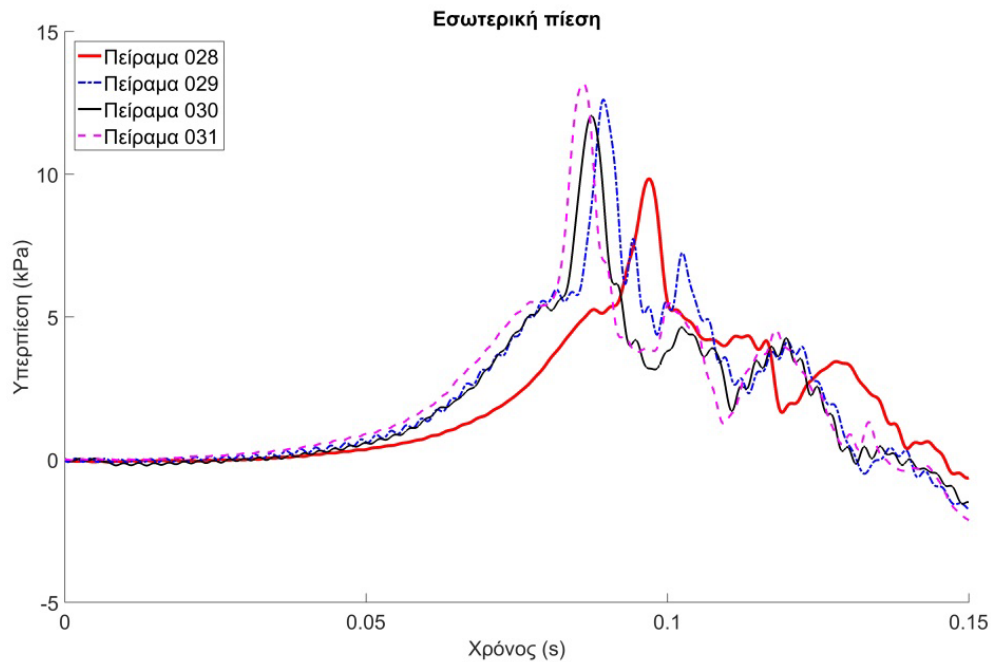
Σχήμα 9.1.5: Υπερπίεση μέσα και έξω από το δοχείο, όπως καταγράφηκε στο πείραμα 030. Με μαύρες καμπύλες απεικονίζονται οι φιλτραρισμένες τιμές.



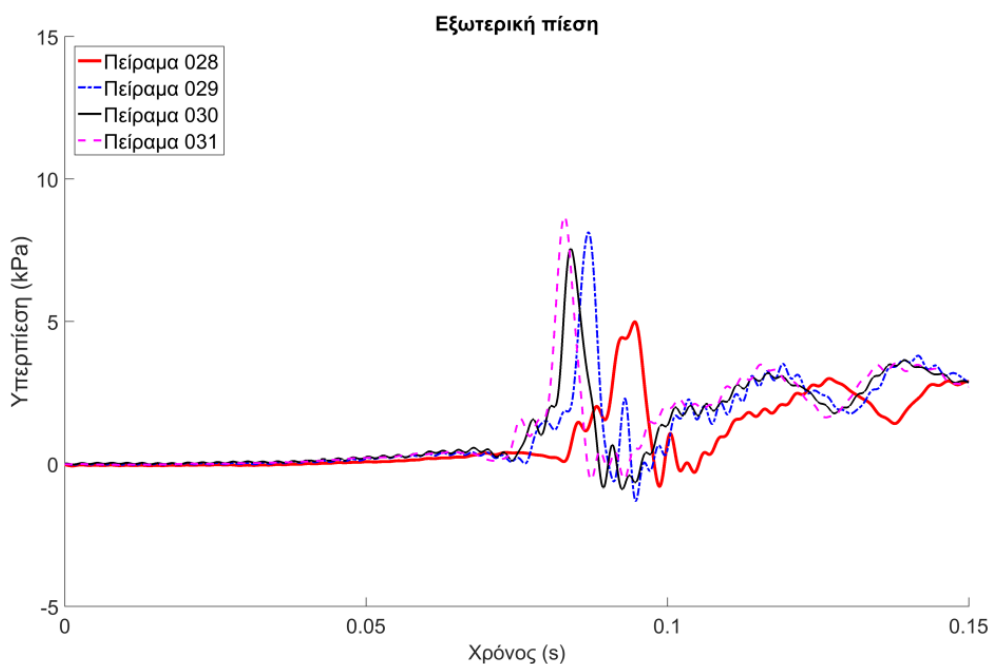
Σχήμα 9.1.6: Υπερπίεση μέσα και έξω από το δοχείο, όπως καταγράφηκε στο πείραμα 031. Με μαύρες καμπύλες απεικονίζονται οι φιλτραρισμένες τιμές.

Στο Σχήμα 9.1.7 και στο Σχήμα 9.1.8 απεικονίζονται συγκεντρωτικά οι φιλτραρισμένες τιμές της πίεσης στο εσωτερικό και στο εξωτερικό του δοχείου αντίστοιχα, για τις τέσσερις επαναλήψεις του πειράματος. Παρατηρούμε ότι υπάρχει μια μικρή απόκλιση ως προς τις τιμές της μέγιστης υπερπίεσης, καθώς και των ρυθμών αύξησης της πίεσης. Τα Πειράματα 029, 030, 031 παρουσιάζουν την μεγαλύτερη ομοιότητα, τουλάχιστον μέχρι το σημείο της μέγιστης υπερπίεσης, ενώ το Πείραμα 028 αποκλίνει αρκετά από τα υπόλοιπα, αν και ποιοτικά είναι όμοιο.

Στα επόμενα κεφάλαια, στις συγκρίσεις που θα γίνουν με το πείραμα, οι πειραματικές καμπύλες που θα παρουσιαστούν θα αφορούν το Πείραμα 030, καθώς είναι ένα από τα τρία πειράματα τα οποία έδωσαν παρόμοια αποτελέσματα. Επιπλέον, το πείραμα αυτό έδωσε ποιοτικά πολύ όμοια καμπύλη υπερπίεσης σε όλη την έκταση της με το Πείραμα 031.



Σχήμα 9.1.7: Υπερπίεση στο εσωτερικό του δοχείου, όπως καταγράφηκε στις τέσσερις επαναλήψεις του πειράματος (φιλτραρισμένες τιμές).



Σχήμα 9.1.8: Υπερπίεση έξω από το άνοιγμα, όπως καταγράφηκε στις τέσσερις επαναλήψεις του πειράματος (φιλτραρισμένες τιμές).

9.1.2 Μέθοδοι μοντελοποίησης εξωτερικής έκρηξης

Αρχικά, το μοντέλο που χρησιμοποιήθηκε ήταν αυτό το οποίο χρησιμοποιήθηκε και στις προσομοιώσεις που παρουσιάσαμε στα προηγούμενα κεφάλαια. Όπως θα δούμε όμως στη συνέχεια, το μοντέλο αυτό αποτυγχάνει να προβλέψει τη βιαιότητα της εξωτερικής έκρηξης και τη μορφή της φλόγας έξω από το άνοιγμα. Η δυσκολία της πρόβλεψης της εξωτερικής έκρηξης έχει παρουσιαστεί σε διάφορες εργασίες.

Οι Molkon & Makarou (2006) προσομοίωσαν μια μεγάλης κλίμακας έκρηξης μεθανίου σε δωμάτιο μήκους 10 μέτρων με άνοιγμα. Το αρχικό τους μοντέλο καύσης υποεκτιμούσε τη μέγιστη υπερπίεση που αναπτυσσόταν στο εσωτερικό κατά 4.5 σχεδόν φορές. Για αυτό το λόγο δοκίμασαν να αυξήσουν τον ρυθμό καύσης είτε στο εσωτερικό του δωματίου είτε στο εξωτερικό. Η πίεση προβλέφθηκε επιτυχώς μόνο στη δεύτερη περίπτωση, κατά την οποία διπλασίασαν τον ρυθμό καύσης στην περιοχή του ανοίγματος. Η επιτάχυνση της καύσης στην περιοχή αυτή αιτιολογήθηκε ότι προκαλείται λόγω της έντονης τύρβης που αναπτύσσεται στο σημείο αυτό από την ροή τύπου τζετ που δημιουργείται καθώς η φλόγα εξέρχεται του ανοίγματος.

Οι Bauwens et al. (2011) προσομοίωσαν την έκρηξη μείγματος υδρογόνου-αέρα σε δωμάτιο διαστάσεων $4.6 \times 4.6 \times 3.0$ m με ένα άνοιγμα. Εδώ η προσέγγιση που χρησιμοποιήθηκε για να εκτιμηθεί σωστά η εξωτερική έκρηξη, ήταν μέσω της μοντελοποίησης της αστάθειας Rayleigh-Taylor που αναπτύσσεται καθώς τα μικρής πυκνότητας προϊόντα επιταχύνονται μέσα στα μεγάλης πυκνότητας αντιδρώντα. Στο μοντέλο καύσης που χρησιμοποίησαν συμπεριέλαβαν έναν συντελεστή επιτάχυνσης της φλόγας ο οποίος λαμβάνει υπ' όψιν του την αστάθεια Rayleigh-Taylor. Ο συντελεστής αυτός υπολογίζεται μέσω μιας εξίσωσης μεταφοράς η οποία λαμβάνει υπ' όψιν της τόσο την παραγωγή όσο και την καταστολή που πραγματοποιείται όταν μεταβαίνουμε από την ασταθή στην ευσταθή κατάσταση. Μειονέκτημα του μοντέλου αποτελεί το γεγονός ότι απαιτείται ο υπολογισμός του κυματαριθμού που σχετίζεται με την αστάθεια αυτή καθώς και της επιτάχυνσης του μετώπου της φλόγας. Για να ξεπεραστούν αυτές οι δυσκολίες το μοντέλο χρησιμοποιήθηκε υποθέτοντας σταθερούς ρυθμούς παραγωγής και καταστολής της αστάθειας. Το μοντέλο παρουσίασε πολύ καλή συμφωνία με το πείραμα, χωρίς όμως να παρουσιάζονται σημαντικές λεπτομέρειες όπως, το πώς η μοντελοποίηση της αστάθειας επηρεάζει τα αποτελέσματα, και τις τιμές βασικών παραμέτρων του μοντέλου.

Μια άλλη προσπάθεια μοντελοποίησης της αστάθειας Rayleigh-Taylor έτσι ώστε να προβλεφθεί σωστά το φαινόμενο της εξωτερικής έκρηξης, έχει γίνει από τους Keenan et al. (2014). Στο μοντέλο που ανέπτυξαν επιλύεται μια εξίσωση μεταφοράς για την αύξηση της επιφάνειας της φλόγας η οποία συντελείται λόγω της αστάθειας. Για τον υπολογισμό του όρου πηγής της εξίσωσης απαιτείται ο υπολογισμός του χαρακτηριστικού μήκους της αστάθειας καθώς και του ρυθμού αύξησης της. Το μοντέλο εφαρμόστηκε στις ίδιες περιπτώσεις με αυτές που εφαρμόστηκε και το μοντέλο των Bauwens et al. (2011). Η συμφωνία με το πείραμα όμως δεν ήταν τόσο καλή, αν και υπήρχε βελτίωση σε σχέση με το αρχικό μοντέλο το οποίο δεν λάμβανε υπ' όψιν την αστάθεια αυτή.

Εμείς, αρχικά θα δοκιμάσουμε το μοντέλο που χρησιμοποιήθηκε στα προηγούμενα κεφάλαια χωρίς να κάνουμε κάποια ειδική μοντελοποίηση της εξωτερικής έκρηξης. Τα αποτελέσματα αυτά παρουσιάζονται στη §9.3. Όπως θα δούμε σε αυτή τη παράγραφο, το μοντέλο αποτυγχάνει να

προβλέψει σωστά την εξωτερική έκρηξη. Έτσι στη §9.4 και §9.5, παρουσιάζονται δύο τροποποιήσεις που δοκιμάστηκαν στο μοντέλο καύσης, έτσι ώστε να προβλεφθεί καλύτερα το φαινόμενο, καθώς και τα αποτελέσματα από τις τροποποιήσεις αυτές.

9.2 Δεδομένα μοντελοποίησης

Το μοντέλο το οποίο χρησιμοποιήθηκε αρχικά για την προσομοίωση του φαινομένου παρουσιάστηκε στο Κεφάλαιο 4. Ο Πίνακας 9.2.1 απεικονίζει τις τιμές των κυρίων παραμέτρων του μοντέλου καύσης που χρησιμοποιήθηκαν. Καθότι το μήκος του δοχείου είναι 1 m (όση και η κρίσιμη ακτίνα), το φράκταλ υπομοντέλο (συντελεστής Ξ_f) δεν έχει επίδραση στα αποτελέσματα και για αυτό αμελήθηκε σε αυτή την προσομοίωση.

Πίνακας 9.2.1: Παράμετροι μοντέλου καύσης.

Παράμετρος	Τιμές
Στρωτή ταχύτητα καύσης S_{L0}	0.64 m/s
Εκθέτης ε	0.66
Λόγος επέκτασης E	5.2
Σταθερά ψ	0.90
Ακτίνα R_0	1.0 m
Συντελεστής Ξ_{ip}	1.96
Ακτίνα R_{ip}	0.10 m
Διάσταση φράκταλ	-

Στο Σχήμα 9.2.1 απεικονίζεται η γεωμετρία του προβλήματος όπως αυτή προσομοιώθηκε. Στο ίδιο σχήμα απεικονίζεται το πλέγμα. Δοκιμάστηκαν δύο πλέγματα. Τα βασικά χαρακτηριστικά τους συνοψίζονται στον παρακάτω πίνακα. Το πλέγμα είναι σχεδόν ομοιόμορφο μέσα στο δοχείο, καθώς και στην περιοχή έξω από το άνοιγμα (μέχρι περίπου 1 m από αυτό). Μετά από αυτή τη περιοχή, οι διαστάσεις των κελιών αυξάνουν κατά παράγοντα αραίωσης 1.08 προκειμένου να μειωθεί ο συνολικός αριθμός κελιών.

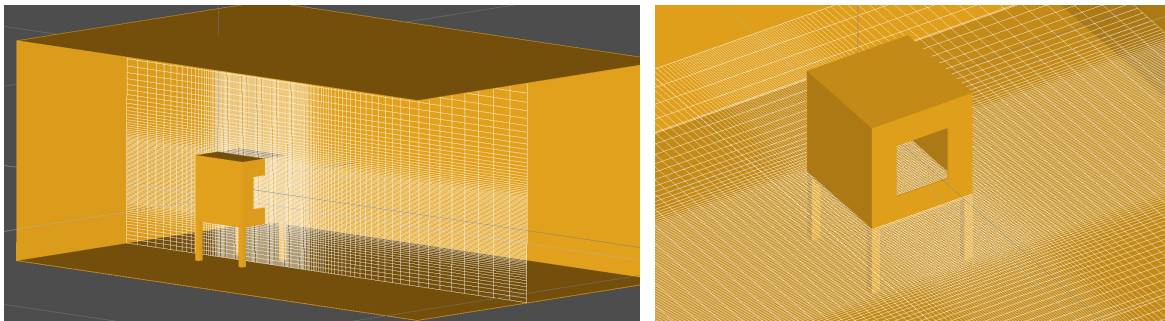
Πίνακας 9.2.2: Χαρακτηριστικά των πλεγμάτων που δοκιμάστηκαν.

Πλέγμα (Grid)	Πλήθος ενεργών κελιών	Χαρακτηριστικό μήκος κελιών μέσα στο δοχείο (m)
Πλέγμα 1	1,438,770	0.020
Πλέγμα 2	2,656,742	0.015

Το χρονικό βήμα ελέγχεται από τον αριθμό CFL ο οποίος τέθηκε ίσος με 0.2. Επειδή η επιτάχυνση της φλόγας στη διάρκεια της έκρηξης ήταν μεγάλη, το χρονικό βήμα ήταν της τάξεως του $5 \cdot 10^{-4}$ στα πρώτα στάδια της έκρηξης και έπεφτε στην τάξη του 10^{-5} τη στιγμή της μέγιστης πίεσης (Πλέγμα 1). Δοκιμάστηκε και CFL ίσο με 0.1 με αμελητέα μεταβολή στα αποτελέσματα. Η έναυση έγινε σε ένα κελί και μοντελοποιήθηκε κατά τέτοιο τρόπο ώστε το καύσιμο σε αυτό να καεί μέσα σε ένα

συγκεκριμένο χρονικό διάστημα. Το διάστημα αυτό τέθηκε ίσο με $3.0 \cdot 10^{-3}$ για το Πλέγμα 1 και $2.0 \cdot 10^{-3}$ για το Πλέγμα 2.

Τέλος, πρέπει να αναφέρουμε πως το γεγονός ότι το δωμάτιο μέσα στο οποίο τοποθετήθηκε το δοχείο στην προσομοίωση ήταν τελείως κλειστό, ίσως να επηρεάζει τις τιμές της πίεσης στα τελευταία στάδια της έκρηξης. Ο λόγος για αυτό, είναι το γεγονός ότι στο δωμάτιο του πειράματος, υπήρχαν κάποια μικρά ανοίγματα από τα οποία η πίεση μπορούσε να εκτονωθεί. Επιπλέον, όπως αναφέραμε στη §9.1.1, στο εσωτερικού του δωματίου είχε τοποθετηθεί ειδικό υλικό το οποίο απορροφούσε τα κύματα πίεσης. Αυτό, δεν μπορεί να αναπαρασταθεί στη προσομοίωση από την οριακή συνθήκη μη-ολίσθησης που χρησιμοποιείται στα τοιχώματα. Για να βεβαιωθούμε λοιπόν ότι τα παραπάνω δεν επηρεάζουν τις τιμές της πίεσης στο στάδιο της εξωτερικής έκρηξης που μας ενδιαφέρει, πραγματοποιήθηκε μια προσομοίωση χωρίς το δωμάτιο, κατά την οποία το πλέγμα επεκτάθηκε και κατά την οποία επιβλήθηκε η «μη-αντανακλαστική» οριακή συνθήκη στα όρια του. Τα αποτελέσματα μέχρι και το σημείο της εξωτερικής έκρηξης παρέμειναν σχεδόν τα ίδια, παρατηρώντας αλλαγές μόνο μετά το σημείο της μέγιστης υπερπίεσης. Συνεπώς, επειδή ο πρωταρχικός στόχος της προσομοίωσης αυτής είναι η σωστή πρόβλεψη του φαινομένου μέχρι και το σημείο της εξωτερικής έκρηξης, δεν επιχειρήθηκε να γίνει πιο λεπτομερείς περιγραφή του δωματίου.



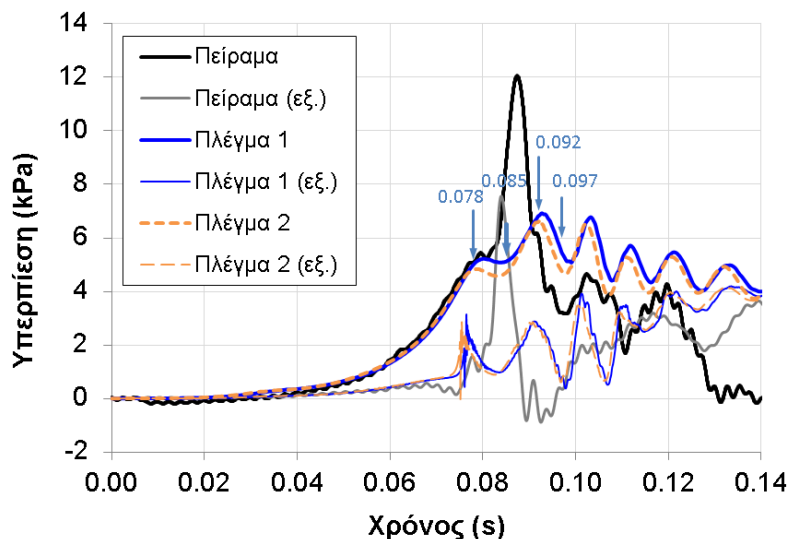
Σχήμα 9.2.1: Άποψη της γεωμετρίας και του πλέγματος (Πλέγμα 1).

9.3 Αποτελέσματα βασικού μοντέλου καύσης

Στο Σχήμα 9.3.1 απεικονίζεται η υπερπίεση σε συνάρτηση με τον χρόνο στο εσωτερικό και στο εξωτερικό του δοχείου, στο πείραμα και στην προσομοίωση. Καταρχήν, όσον αφορά τα δύο πλέγματα που χρησιμοποιήθηκαν, παρατηρούμε ότι η καμπύλη τόσο της εσωτερικής όσο και της εξωτερικής υπερπίεσης, είναι σχεδόν η ίδια. Συνεπώς το Πλέγμα 1 μπορεί να θεωρηθεί ανεξάρτητο, οπότε θα χρησιμοποιηθεί στις μετέπειτα προσομοιώσεις.

Συγκρίνοντας με το πείραμα, παρατηρούμε ότι μέχρι περίπου τα 0.078 s, η εκτιμώμενη καμπύλη της εσωτερικής υπερπίεσης ταυτίζεται με αυτή του πειράματος. Στα 0.078 s η πίεση αρχίζει να σταθεροποιείται, κάτι το οποίο συμβαίνει και στο πείραμα. Η πίεση όμως διατηρείται σταθερή για ένα μεγαλύτερο χρονικό διάστημα στη προσομοίωση από ότι στο πείραμα. Η πίεση αρχίζει να αυξάνει περίπου στη χρονική στιγμή 0.085 s. Ο προβλεπόμενος ρυθμός αύξησης της είναι αρκετά μικρότερος σε σχέση με το πείραμα. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα η μέγιστη υπερπίεση που τελικά προβλέπεται να είναι αρκετά μικρότερη της πειραματικής. Η πειραματικά μέγιστη υπερπίεση ισούται με 12 kPa ενώ στη προσομοίωση η μέγιστη υπερπίεση που προβλέπεται είναι ίση με 7 kPa,

η οποία επιτυγχάνεται τη χρονική στιγμή 0.092 s. Στη συνέχεια στη προσομοίωση παρουσιάζονται ταλαντώσεις οι οποίες αποσβένουν σχετικά αργά. Στο πείραμα από την άλλη η πίεση μετά το μέγιστο μειώνεται το ίδιο απότομα όπως και αυξήθηκε, ενώ στη συνέχεια μειώνεται με μικρότερο ρυθμό παρουσιάζοντας κάποιες αυξομειώσεις.



Σχήμα 9.3.1: Σύγκριση πειράματος και προσομοίωσης (για τα δύο πλέγματα) της χρονικής εξέλιξης της υπερπίεσης στο εσωτερικό του δοχείου και έξω από το άνοιγμα. Στο διάγραμμα σημειώνονται με βέλη χαρακτηριστικές χρονικές στιγμές, στις οποίες η μορφή της φλόγας απεικονίζεται στο Σχήμα 9.3.2.

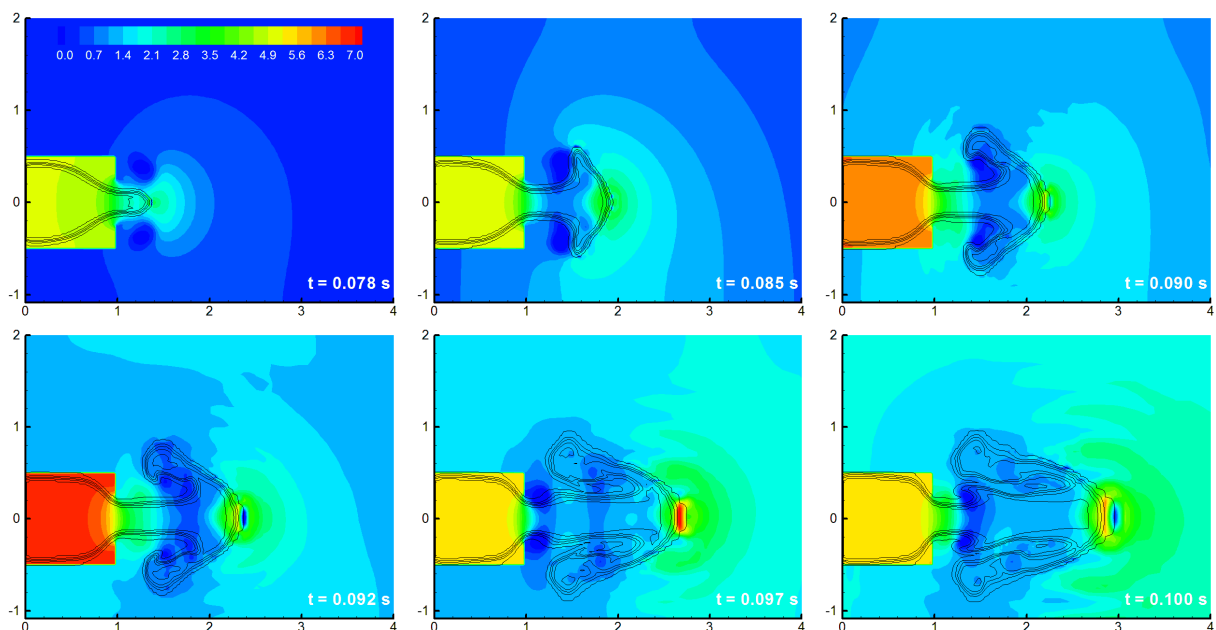
Η υπερπίεση που αναπτύσσεται έξω από το άνοιγμα παρουσιάζει διαφορές σε σχέση με το πείραμα. Στην προσομοίωση, τη χρονική στιγμή 0.078 s κατά την οποία η πίεση στο εσωτερικό αρχίζει η σταθεροποιείται, η εξωτερική πίεση παρουσιάζει απότομη αύξηση. Παρόμοια αύξηση παρατηρείται στην αντίστοιχη χρονική στιγμή και στο πείραμα. Στη συνέχεια όμως, η πίεση μειώνεται σταδιακά και αργότερα αυξάνει επίσης σταδιακά φτάνοντας τα 2.8 kPa τη χρονική στιγμή 0.091 s. Στο πείραμα από την άλλη, μετά την αρχική μικρή αύξηση, η πίεση παρουσιάζει μια μικρή ταλάντωση και στη συνέχεια αυξάνει απότομα φτάνοντας την τιμή των 7.56 kPa στα περίπου 0.084 s. Μετά από το σημείο μεγίστου, οι καμπύλες υπερπίεσης είναι αρκετά διαφορετικές, με την καμπύλη της προσομοίωσης να παρουσιάζει ταλαντώσεις μεγάλου πλάτους.

Όπως αναφέραμε και στην περιγραφή του πειράματος (§9.1), η απότομη αύξηση της πίεσης έξω από το άνοιγμα η οποία οφείλεται στην εξωτερική έκρηξη, είναι αυτή που οδηγεί στη μεγάλη αύξηση της πίεσης στο εσωτερικό του δοχείου. Στην προσομοίωση παρατηρούμε ότι η απότομη αυτή αύξηση της πίεσης δεν μπορεί να προβλεφθεί, με αποτέλεσμα η πίεση στο εσωτερικό να αυξάνει αρκετά λιγότερο σε σύγκριση με το πείραμα. Η αδυναμία της σωστής εκτίμησης του φαινομένου της εξωτερικής έκρηξης, φαίνεται καλύτερα αν μελετήσουμε τη μορφή της φλόγας σε διάφορες χρονικές στιγμές, η οποία παρουσιάζεται στο Σχήμα 9.3.2.

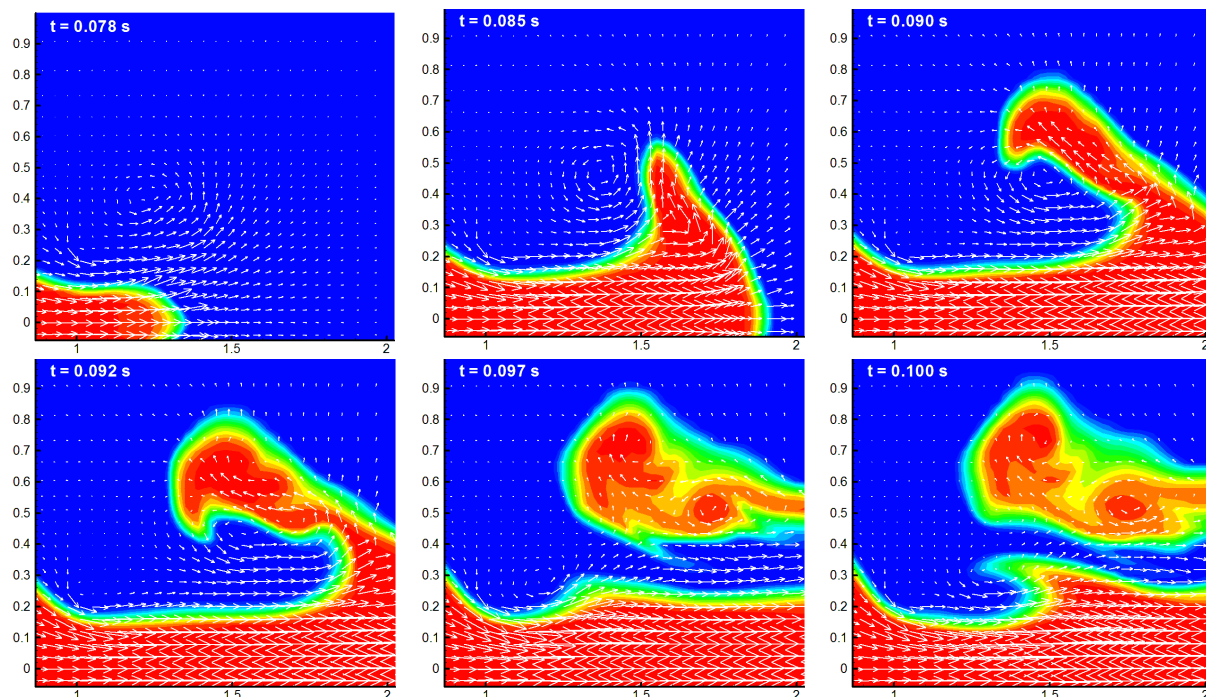
Στο Σχήμα 9.3.2, απεικονίζονται οι ισοϋψείς της πίεσης μαζί με το περίγραμμα της φλόγας σε διάφορες χρονικές στιγμές. Τα σημεία πάνω στην καμπύλη υπερπίεσης στα οποία αντιστοιχούν κάποια από αυτά τα διαγράμματα έχουν σημειωθεί με βέλη στο Σχήμα 9.3.1. Από το παρακάτω σχήμα, βλέπουμε ότι τη χρονική στιγμή 0.078 s η φλόγα έχει εξέλθει του ανοίγματος. Παρατηρούμε ότι αυτός είναι ο λόγος που κατά τη χρονική αυτή στιγμή η πίεση αρχίζει να σταθεροποιείται, το

οποίο είναι σε συμφωνία με το πείραμα. Τη χρονική στιγμή 0.085 s κατά την οποία η πίεση στο δοχείο είναι ακόμα σταθερή, το μέτωπο της φλόγας διευρύνεται αποκτώντας μια μορφή μανιταριού. Στις επόμενες χρονικές στιγμές κατά τις οποίες η πίεση αυξάνεται, υπάρχει περιτύλιξη των άκρων του μετώπου της φλόγας γύρω από τις δίνες που έχουν δημιουργηθεί στη περιοχή αυτή. Οι δίνες αυτές αντικατοπτρίζονται στο σχήμα υπό την μορφή περιοχών χαμηλής πίεσης. Φαίνονται επίσης στο Σχήμα 9.3.3 στο οποίο απεικονίζονται τα βέλη της ταχύτητας μαζί με την μορφή της φλόγας στη περιοχή αυτή. Μετά τη χρονική στιγμή κατά την οποία επιτυγχάνεται η μέγιστη πίεση (0.092 s) η φλόγα αρχίζει να επιμηκύνεται κατά την οριζόντια κατεύθυνση λαμβάνοντας την μορφή που φαίνεται στο Σχήμα 9.3.2. Συγκρίνοντας με το πείραμα (Σχήμα 9.1.3), παρατηρούμε ότι η μορφή της φλόγας είναι αρκετά διαφορετική, καθώς σε αυτό η φλόγα δεν παρουσιάζει την μορφή μανιταριού που προβλέφθηκε στη προσομοίωση. Επίσης η φλόγα επεκτείνεται περισσότερο σφαιρικά και όχι αξονικά.

Όσον αφορά την μορφή των ισοψών της υπερπίεσης παρατηρούμε ότι, τις χρονικές στιγμές 0.090 και 0.092 s, αναπτύσσεται ένας ενδιαφέρων σχηματισμός εκτός του δοχείου καθώς δημιουργούνται τρεις περιοχές: μία περιοχή υψηλής πίεσης η οποία αναπτύσσεται έξω ακριβώς από το δοχείο, μια περιοχή χαμηλής πίεσης μετά από αυτή και τέλος μια περιοχή πάλι υψηλής πίεσης στο μπροστά μέτωπο της φλόγας. Στη συνέχεια, στη χρονική στιγμή 0.097 s, η πίεση στη πρώτη περιοχή μειώνεται καθώς δημιουργούνται περιοχές χαμηλής πίεσης εκατέρωθεν του ανοίγματος, αλλά τη χρονική στιγμή 0.100 s αυξάνεται και πάλι.

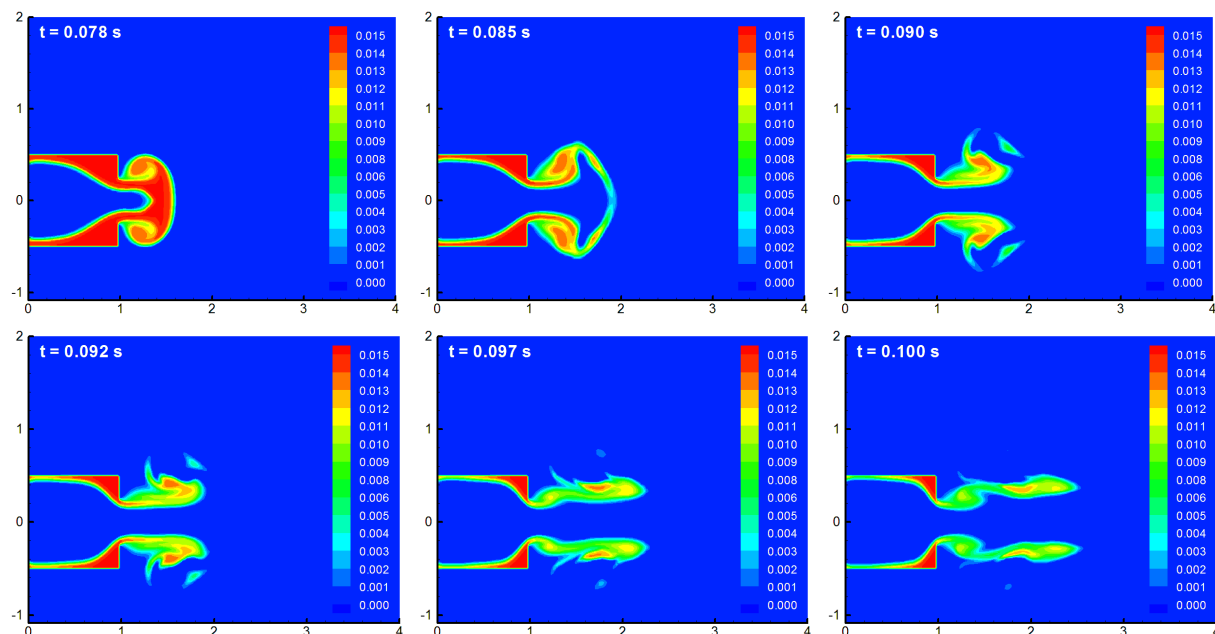


Σχήμα 9.3.2: Ισοψείς υπερπίεσης (kPa) μαζί με το περίγραμμα της φλόγας στο XZ επίπεδο που περνάει από το κέντρο του δοχείου.



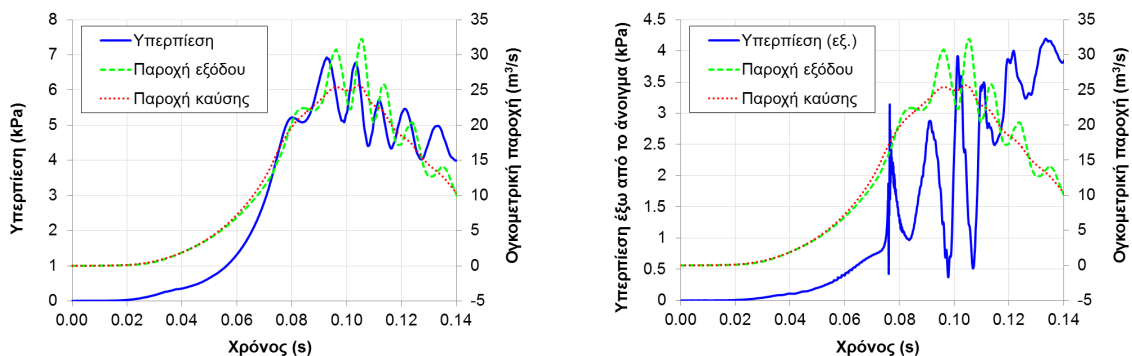
Σχήμα 9.3.3: Βέλη ταχύτητας μαζί με τη μορφή της φλόγας (ισοϋψείς κλάσματος μάζας υδρογόνου) στο XZ επίπεδο που περνάει από το κέντρο του δοχείου.

Στο Σχήμα 9.3.4 απεικονίζονται οι ισοϋψείς του κλάσματος μάζας του υδρογόνου, στις ίδιες χρονικές στιγμές με αυτές των προηγούμενων διαγραμμάτων ισοϋψών. Παρατηρούμε ότι άκαυστο καύσιμο παραμένει στον χώρο τόσο εκτός όσο και εντός του δοχείου. Το υδρογόνο που βρίσκεται εκτός του δοχείου και καίγεται σε μετέπειτα χρονικές στιγμές, ίσως να ευθύνεται για τις ταλαντώσεις που παρουσιάζονται στη καμπύλη της εξωτερικής υπερπίεσης μετά τη χρονική στιγμή των 0.097 s (Σχήμα 9.3.1). Οι ταλαντώσεις αυτές φαίνεται να ευθύνονται με τη σειρά τους για τις ταλαντώσεις στη πίεση στο εσωτερικό του δοχείου, καθώς συμβαίνουν σε ελαφρώς πιο σύντομο χρόνο σε σχέση με τις αντίστοιχες στο εσωτερικό. Στα συμπεράσματα αυτά συνεπικουρεί το Σχήμα 9.3.5.



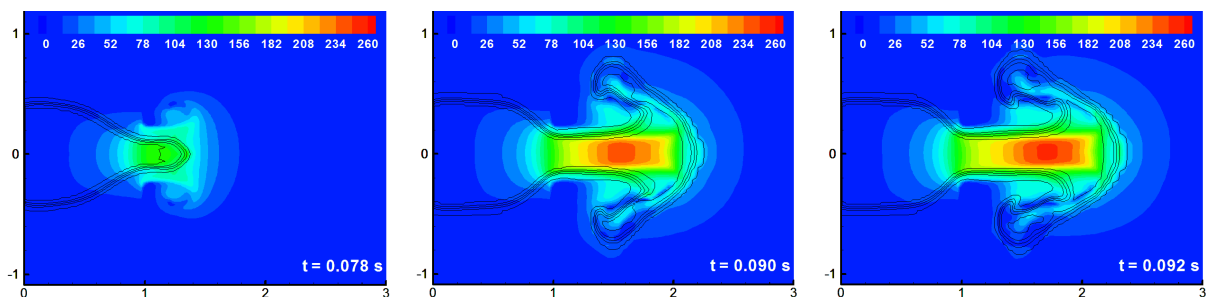
Σχήμα 9.3.4: Ισοϋψείς υπερπίεσης (kPa) μαζί με το περίγραμμα της φλόγας στο ΧΖ επίπεδο που περνάει από το κέντρο του δοχείου.

Στο Σχήμα 9.3.5 (αριστερά) απεικονίζεται η καμπύλη υπερπίεσης στο εσωτερικό του δοχείου, μαζί με την ογκομετρική παροχή στην έξοδο του και την ογκομετρική παροχή λόγω καύσης. Παρόμοιο διάγραμμα παρουσιάστηκε και στην §6.3.1 για τη περίπτωση έκρηξης σε αγωγό με εμπόδια (όπου παρουσιάστηκε και ο τρόπος υπολογισμού της παροχής λόγω καύσης). Καταρχάς παρατηρούμε ότι η πίεση αυξάνεται όταν η παροχή λόγω καύσης γίνεται μεγαλύτερη της παροχής εξόδου από το άνοιγμα, και μειώνεται στην αντίθετη περίπτωση. Η παροχή εξόδου εμφανίζει ταλαντώσεις παρόμοιες με αυτές της πίεσης, ενώ από την άλλη η παροχή καύσης είναι πιο ομαλή, εμφανίζοντας τη μέγιστη τιμή της περίπου στα 0.100 s. Οι ταλαντώσεις στην παροχή εξόδου μπορούν να δικαιολογηθούν από τις ταλαντώσεις της εξωτερικής πίεσης, καθότι όπως είναι φυσιολογικό, μια αύξηση της πίεσης στη περιοχή του ανοίγματος οδηγεί σε μείωση της ροής σε αυτό. Αυτό επιβεβαιώνεται στο Σχήμα 9.3.5, στο δεξί διάγραμμα, όπου απεικονίζονται οι ογκομετρικές παροχές μαζί με την υπερπίεση έξω από το άνοιγμα. Παρατηρούμε ότι τα σημεία όπου η υπερπίεση παρουσιάζει τοπικό μέγιστο, ταυτίζονται με τα σημεία στα οποία η παροχή εξόδου είτε μειώνεται, είτε σταματάει να αυξάνεται. Εξάιρεση αποτελεί το πρώτο μέγιστο της πίεσης, το οποίο δε φαίνεται να επηρεάζει τη παροχή. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι η αύξηση της πίεσης είναι απότομη και διατηρείται για μικρό χρονικό διάστημα.



Σχήμα 9.3.5: Ογκομετρική παροχή στην έξοδο του δοχείου και ογκομετρική παροχή λόγω καύσης, μαζί με την υπερπίεση στο εσωτερικό (αριστερά) και στο εξωτερικό (δεξιά) του δοχείου.

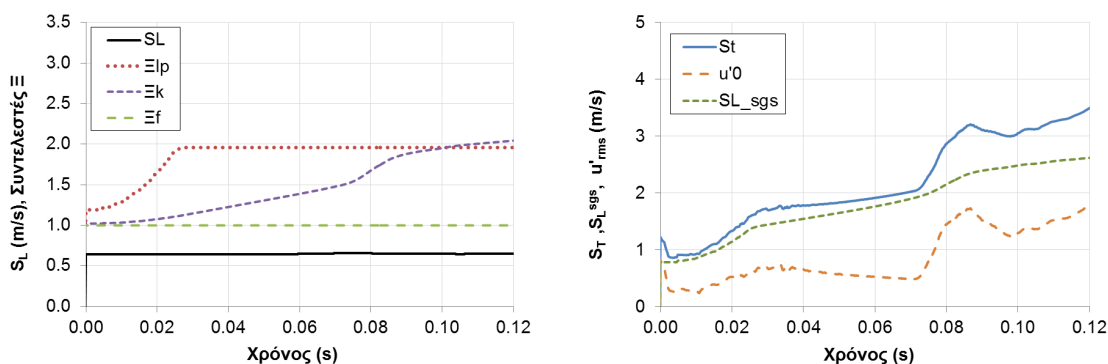
Στο Σχήμα 9.3.6, παρουσιάζονται οι ισοϋψείς του μέτρου της ταχύτητας σε τρεις χρονικές στιγμές. Βλέπουμε ότι, τη χρονική στιγμή 0.078 s κατά την οποία η φλόγα έχει εξέλθει από το άνοιγμα, το μέτρο της ταχύτητας στην περιοχή είναι ίσο με περίπου 130 m/s. Στη συνέχεια υπάρχει επιτάχυνση της ροής φτάνοντας σε τιμές μέχρι και 260 m/s. Σε όλες τις χρονικές στιγμές πάντως η ταχύτητα είναι μικρότερη από αυτή του ήχου.



Σχήμα 9.3.6: Ισοϋψείς του μέτρου της ταχύτητας (m/s) μαζί με το περίγραμμα της φλόγας στο ΧΖ επίπεδο που περνάει από το κέντρο του δοχείου.

Στο Σχήμα 9.3.7 απεικονίζονται τα βασικά χαρακτηριστικά του μοντέλου καύσης που χρησιμοποιήσαμε. Όλα τα μεγέθη υπολογίστηκαν σαν μέσες τιμές στην περιοχή του πάχους της φλόγας. Στο αριστερό διάγραμμα του σχήματος, απεικονίζεται η στρωτή ταχύτητα καύσης και οι συντελεστές Ξ . Παρατηρούμε ότι οι συντελεστές οι οποίοι έχουν τη μεγαλύτερη συνεισφορά στην αύξηση της ταχύτητα καύσης είναι αρχικά ο Ξ_{ip} και στη συνέχεια ο Ξ_k . Ο συντελεστής Ξ_{ip} λαμβάνει τη μέγιστη τιμή του σχετικά γρήγορα, καθώς όπως έχουμε δει η αστάθεια θερμοδιάχυσης αναπτύσσεται σε μικρό χρονικό διάστημα. Από την άλλη, ο Ξ_k ο οποίος σχετίζεται με τη τύρβη που αναπτύσσεται από την ίδια τη φλόγα αυξάνει με μικρότερο ρυθμό λαμβάνοντας τη μέγιστη τιμή προς το τέλος της έκρηξης. Οι δύο αυτοί παράγοντες, αυξάνουν τελικά τη ταχύτητα της στρωτής καύσης κατά 4 φορές.

Στο δεξιό διάγραμμα του σχήματος, απεικονίζεται η τυρβώδης ταχύτητα καύσης S_T , η χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης u'_0 (υποπλεγματική τύρβη) και η ποσότητα S_L^{sgs} της σχέσης (4.2.6), που ισούται με το γινόμενο των συντελεστών Ξ με την ταχύτητα στρωτής καύσης. Παρατηρούμε ότι σε όλη τη διάρκεια της έκρηξης η τυρβώδης ταχύτητα καύσης είναι αρκετά μεγαλύτερη από την ταχύτητα στρωτής καύσης αλλά μεγαλύτερη και από την S_L^{sgs} λόγω της εξάρτησης της από την τύρβη μέσω της σχέσης του Yakhot. Η διαφορά της S_T από την S_L^{sgs} δεν είναι αρχικά μεγάλη καθώς οι τιμές της u'_0 είναι σχετικά μικρές. Παρατηρούμε ότι οι μέσες τιμές στην επιφάνεια της φλόγας είναι περίπου ίσες με 0.5 m/s μέχρι τα 0.07 s. Στη συνέχεια και καθώς η φλόγα έχει εξέλθει του ανοίγματος, οι τιμές αυξάνουν φτάνοντας τη μέγιστη τιμή των 1.7 m/s τη χρονική στιγμή των 0.089 s. Συνεπώς η συνεισφορά της υποπλεγματικής τύρβης στην ταχύτητα τυρβώδους καύσης είναι σημαντική μόνο κατά τη διάρκεια της εξωτερικής έκρηξης και είναι αυτή που οδηγεί στη δημιουργία του δεύτερου μεγίστου στην καμπύλη της εξωτερικής πίεσης (χρονική στιγμή 0.091 s, Σχήμα 9.3.1).

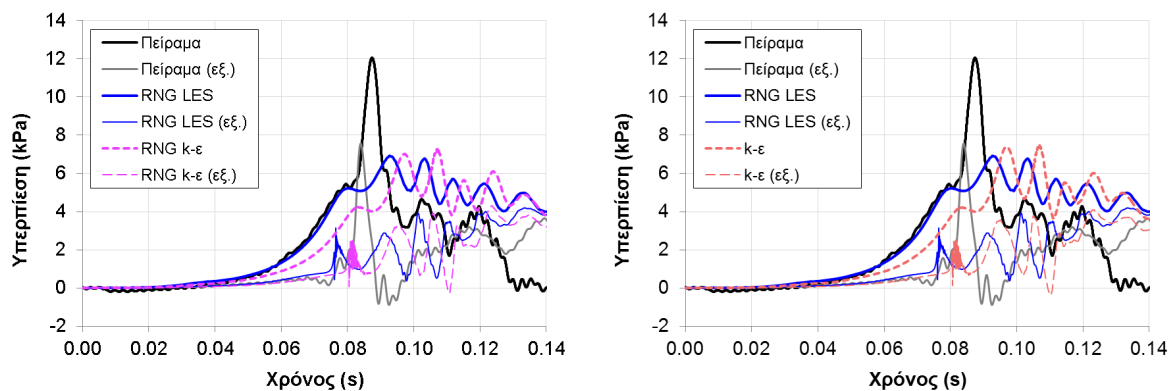


Σχήμα 9.3.7: Ταχύτητα στρωτής καύσης μαζί με τους συντελεστές Ξ (αριστερά) και τυρβώδης ταχύτητα καύσης S_T μαζί με τη χαρακτηριστική ταχύτητα τύρβης u'_0 και το S_L^{sgs} (δεξιά) συναρτήσει του χρόνου. Οι ποσότητες είναι μέσες τιμές στο πάχος ($c = 0.2 - 0.8$) της φλόγας.

9.3.1 Σύγκριση μεθόδων τύρβης

Προκειμένου να εξετάσουμε το κατά πόσο μια αλλαγή στη μέθοδο που ακολουθείται για τη τύρβη βελτιώνει τη πρόβλεψη του υπολογιστικού μοντέλου, δοκιμάστηκαν τα μοντέλα τύπου RANS k-ε και RNG k-ε. Στο παρακάτω Σχήμα 9.3.8 γίνεται σύγκριση των μοντέλων αυτών τόσο με το πείραμα όσο και με την LES προσομοίωση.

Το RNG k-ε και το k-ε μοντέλο δίνουν σχεδόν ίδια αποτελέσματα. Συγκρίνοντας τα με το LES, παρατηρούμε ότι η πίεση αυξάνει καθυστερημένα υποεκτιμώντας τις τιμές του πειράματος. Η πίεση σταθεροποιείται τη χρονική στιγμή 0.08 s, καθώς η φλόγα εξέρχεται του ανοίγματος. Η πίεση αυτή ισούται με περίπου 4 kPa και είναι μικρότερη από την αντίστοιχη πίεση του πειράματος η οποία είναι ίση με 5.3 kPa. Στη συνέχεια η πίεση έξω από το άνοιγμα αυξάνει, οδηγώντας σε αύξηση και της εσωτερικής πίεσης. Η αύξηση αυτή όμως, όπως και στη περίπτωση του LES, είναι μικρότερη της πειραματικής. Στη συνέχεια παρουσιάζονται ταλαντώσεις όμοιες με αυτές που παρουσιάστηκαν στη προσομοίωση LES.

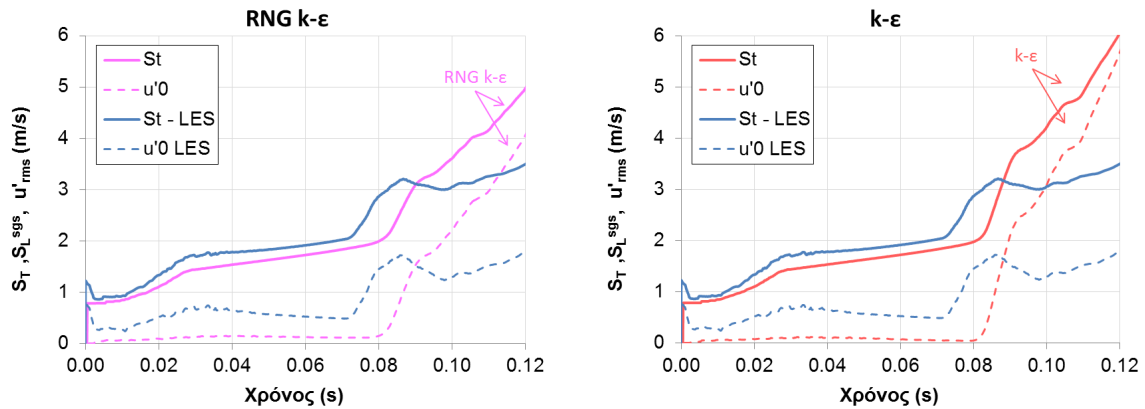


Σχήμα 9.3.8: Σύγκριση RNG LES με RNG k-ε (αριστερά) και RNG LES με k-ε (δεξιά) της χρονικής εξέλιξης της υπερπίεσης στο εσωτερικό του δοχείου και έξω από άνοιγμα.

Οι διαφορές μεταξύ του LES και των k-ε μοντέλων μπορούν να εξηγηθούν αν εξετάσουμε τις τιμές της τυρβώδους ταχύτητας καύσης και της χαρακτηριστικής ταχύτητας της τύρβης. Στο Σχήμα 9.3.9 απεικονίζονται τα μεγέθη αυτά για το RNG k-ε και το k-ε μοντέλο, μαζί με τις αντίστοιχες τιμές του RNG LES. Παρατηρούμε ότι υπάρχουν σημαντικές διαφορές μεταξύ του LES και των RANS μοντέλων όσο αφορά το u'_0 . Στα πρώτα στάδια της έκρηξης, οι τιμές που προβλέπονται από τα RANS μοντέλα είναι σχεδόν μηδενικές. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα η τυρβώδης ταχύτητα καύσης να είναι ελαφρώς μικρότερη σε σχέση με το LES. Αυτό αντικατοπτρίζεται στην χρονική καθυστέρηση της καμπύλης υπερπίεσης που παρουσιάζει το RNG k-ε και το k-ε μοντέλο σε σχέση με το LES.

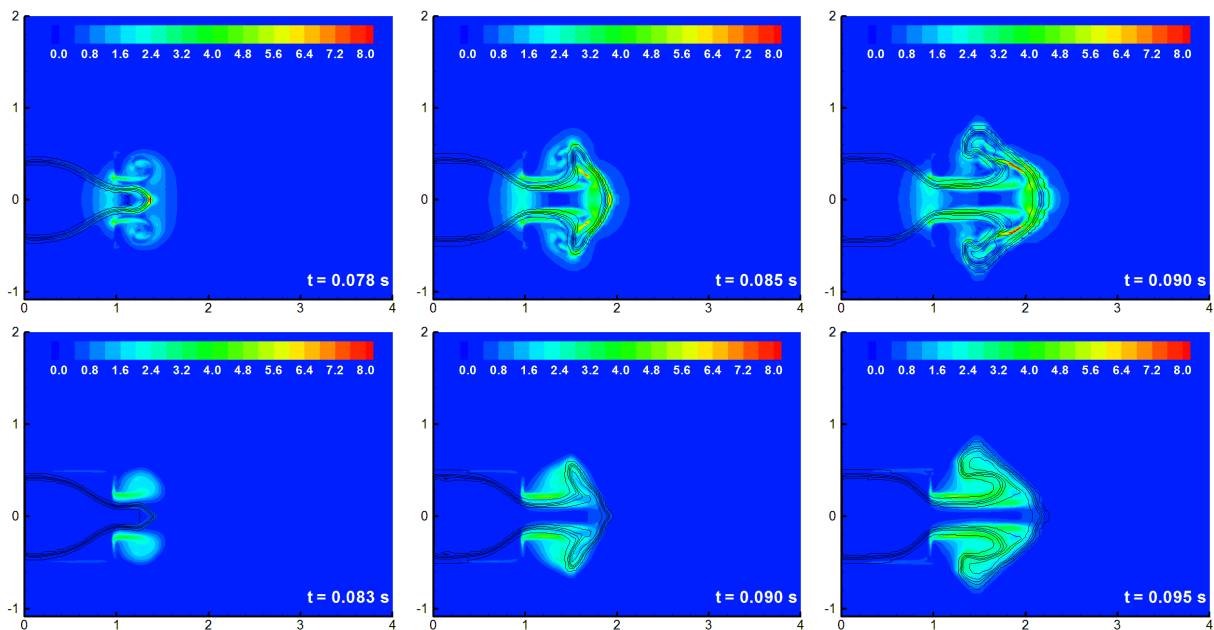
Όταν η φλόγα εξέρχεται του ανοίγματος, παρατηρείται μεγάλη αύξηση στη τιμή του u'_0 . Οι τιμές αυτές ξεπερνάνε τελικά τις αντίστοιχες του LES, με αποτέλεσμα να προβλέπεται μεγαλύτερη ταχύτητα τυρβώδους καύσης. Παρατηρούμε δηλαδή, ότι η βιαιότητα της εξωτερικής έκρηξης αναπαριστάται καλύτερα στα RANS μοντέλα. Αυτό δεν είναι άμεσα ορατό στις καμπύλες υπερπίεσης, λόγω της χαμηλότερης πίεσης που προβλέπεται στο εσωτερικό τη στιγμή που η φλόγα εξέρχεται από το άνοιγμα. Αν υπολογίσουμε όμως τη διαφορά της μέγιστης υπερπίεσης από την υπερπίεση που υπάρχει στο εσωτερικό τη χρονική στιγμή που η φλόγα εξέρχεται από το δοχείο, θα

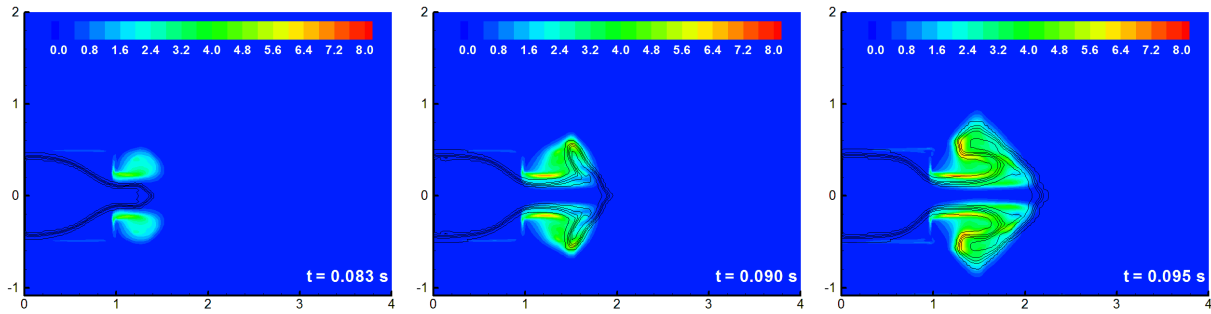
δούμε ότι αυτή ισούται με 1.5 kPa στη περίπτωση του LES, με 2.9 kPa στη περίπτωση του RNG k-ε και με 3.4 kPa στη περίπτωση του k-ε, ενώ η αντίστοιχη διαφορά στο πείραμα ισούται με 6.7 kPa.



Σχήμα 9.3.9: Турβώδης ταχύτητα καύσης S_T μαζί με τη χαρακτηριστική ταχύτητα τύρβης u'_0 για το RNG k-ε (αριστερά) και το k-ε μοντέλο τύρβης (δεξιά). Οι ποσότητες είναι μέσες τιμές στο πάχος ($c = 0.2 - 0.8$) της φλόγας. Στα διαγράμματα επαναλαμβάνονται για σύγκριση και οι αντίστοιχες τιμές του RNG LES.

Στο Σχήμα 9.3.10 απεικονίζονται οι ισοϋψείς της χαρακτηριστικής ταχύτητας τύρβης μαζί με το μέτωπο της φλόγας για το LES (πάνω σειρά στο σχήμα), RNG k-ε (μεσαία σειρά) και k-ε (κάτω σειρά). Οι μεγαλύτερες τιμές που προβλέπονται από τα RANS μοντέλα είναι και εδώ ορατές, με το k-ε μοντέλο να προβλέπει μεγαλύτερες και από το RNG k-ε. Επίσης η μορφή των ισοϋψών μεταξύ LES και RANS μοντέλων είναι διαφορετική. Στα RANS μοντέλα οι μεγαλύτερες τιμές προβλέπονται πάνω και κάτω από τη φλόγα, στις περιοχές ανακυκλοφορίας. Από την άλλη στο LES, παρουσιάζονται κυρίως γύρω από το μέτωπο της φλόγας, κάτι το οποίο είχαμε δει και στις προσομοιώσεις που παρουσιάστηκαν στα προηγούμενα κεφάλαια. Παρά τις διαφορές που παρουσιάζουν οι ισοϋψείς, η μορφή της επιφάνειας της φλόγας δεν διαφέρει πολύ, με αποτέλεσμα να μην προβλέπεται πάλι η πειραματική μορφή της φλόγας.





Σχήμα 9.3.10: Ισοϋψείς χαρακτηριστικής ταχύτητας τύρβης (m/s) μαζί με το περίγραμμα της φλόγας στο XZ επίπεδο που περνάει από το κέντρο του δοχείου για το RNG LES (πάνω) RNG k-ε (μέση) και k-ε μοντέλο (κάτω).

Από τις προσομοιώσεις που έγιναν, συμπεραίνουμε ότι το μοντέλο δεν μπορεί να περιγράψει με ακρίβεια το φαινόμενο της εξωτερικής έκρηξης. Προκειμένου να βελτιώσουμε την πρόβλεψη μας, δοκιμάσαμε να κάνουμε κάποιες αλλαγές στο μοντέλο καύσης. Δοκιμάστηκαν δύο ανεξάρτητες τροποποιήσεις του μοντέλου. Η πρώτη αφορά τη μέθοδο LES, ενώ η δεύτερη αφορά τη περίπτωση του k-ε μοντέλου. Στις επόμενες παραγράφους γίνεται περιγραφή των νέων μοντέλων και παρουσιάζονται τα αποτελέσματα από την εφαρμογή τους.

9.4 Τροποποίηση μοντέλου καύσης στη περίπτωση του LES

9.4.1 Περιγραφή του νέου μοντέλου

Όπως αναφέραμε στη §4.2, η τύρβη η οποία υπάρχει μπροστά από το μέτωπο της φλόγας και αλληλεπιδρά με αυτή, λαμβάνεται υπ' όψιν μέσω της σχέσης του Yakhot και του u'_0 . Το u'_0 εκφράζει τη χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης, η οποία για την περίπτωση του LES εκφράζει μόνο το υποπλεγματικό της μέρος. Η ποσότητα αυτή υπολογίζεται από τη σχέση:

$$u'_0 = \sqrt{\frac{2}{3}k} \quad (9.4.1)$$

όπου k η τυρβώδης κινητική ενέργεια η οποία στη μέθοδο LES υπολογίζεται με βάση την υποπλεγματική συνεκτικότητα από τη σχέση:

$$k = \frac{\mu_{sgs}^2}{(\bar{\rho}C_s\Delta)^2} \quad (9.4.2)$$

Ο παραπάνω τρόπος υπολογισμού της u'_0 αν και φαίνεται προφανής και χρησιμοποιείται σχεδόν κατά κανόνα, παρουσιάζει κάποια προβλήματα. Κατ' αρχάς, παρόλο που η τιμή του u'_0 πρέπει να υπολογίζεται στη άκαυστη περιοχή, αυτό στην πράξη είναι δύσκολο να γίνει, με αποτέλεσμα να υπολογίζεται μέσα στην περιοχή της φλόγας με βάση τα τοπικά τυρβώδη χαρακτηριστικά. Κατά τους Poinsot & Veynante (2005, §5.1.2) η ερμηνεία των τιμών του u'_0 υπολογισμένες μέσα στη φλόγα, αποτελεί ένα ανοιχτό ερώτημα, και η μη φυσική συμπεριφορά κάποιων μοντέλων μπορεί να οφείλεται σε αυτό.

Ερωτήματα για τον τρόπο υπολογισμού του u'_0 υπάρχουν και στη μέθοδο LES. Μια από τις πρώτες εργασίες στις οποίες τέθηκε το πρόβλημα υπολογισμού του u'_0 στις περιπτώσεις καύσης ήταν η πολύ γνωστή εργασία των Colin et al. (2000). Στην εργασία αυτή διατυπώνονται μια σειρά από επιχειρήματα μέσω των οποίων αμφισβητείται η χρήση της συνήθους σχέσης υπολογισμού του u'_0 μέσω του ρυθμού παραμόρφωσης (μοντέλο Smagorinsky). Το βασικό επιχείρημα είναι ότι το μοντέλο Smagorinsky έχει αναπτυχθεί πρωτίστως για ισοθερμοκρασιακές ροές, με αποτέλεσμα στην περίπτωση της καύσης να επηρεάζεται άμεσα από την θερμική διαστολή που λαμβάνει χώρα στην περιοχή της φλόγας. Μια συνέπεια αυτού είναι να μη μπορεί να προβλεφθεί σωστή ταχύτητα καύσης στην περίπτωση χαμηλής τύρβης. Συνεπώς σαν u'_0 πρέπει να λαμβάνεται το πραγματικό υποπλεγματικό μέρος της τύρβης, το οποίο δεν πρέπει να επηρεάζεται από την εκλυόμενη θερμότητα. Στην εργασία τους αναπτύχθηκε ένα νέο μοντέλο υπολογισμού της χαρακτηριστικής ταχύτητας της τύρβης u'_0 , μέσω του επιλυόμενου πεδίου ροής και συγκεκριμένα μέσω της Λαπλασιανής του πεδίου στροβιλότητας. Η σχέση η οποία προτείνεται είναι η εξής:

$$\bar{u}'_0 = c\Delta^3 \left[\nabla^2 (\nabla \times \bar{u}) \right] = c\Delta^3 \left[\nabla \times (\nabla^2 (\bar{u})) \right] \quad (9.4.3)$$

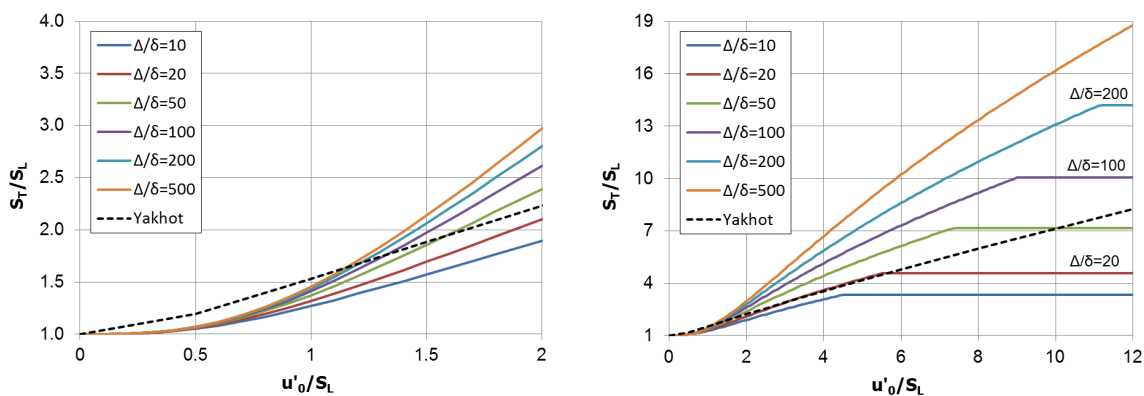
Στη σχέση αυτή ο τελεστής ∇^2 εφαρμόζεται σε κάθε συνιστώσα του διανύσματος $\nabla \times \bar{u}$ (πρώτη ισότητα) ή του διανύσματος \bar{u} (δεύτερη ισότητα), έτσι ώστε να προκύψουν οι τρεις συνιστώσες του \bar{u}'_0 . Η σταθερά c υπολογίστηκε ίση με 2 με βάση το φάσμα Kolmogorov (Colin et al. 2000). Η σχέση αυτή, εξάγει με φυσικό τρόπο το διαστελλόμενο μέρος του πεδίου ταχυτήτων από τον υπολογισμό του \bar{u}'_0 . Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα οι τυρβώδεις διακυμάνσεις να είναι μηδέν σε περιοχές ογκομετρικής διαστολής μηδενικής στροβιλότητας, όπως είναι η περίπτωση μιας επίπεδης στρωτής φλόγας. Κάποιες υπολογιστικές λεπτομέρειες για τον υπολογισμό των δεύτερων παραγώγων παρουσιάζονται στη §Α.5. Στη εργασία των Colin et al. (2000) η σύγκριση του LES μοντέλου με DNS προσομοιώσεις, όπως και η σύγκριση με πείραμα, έδωσε πολύ καλά αποτελέσματα.

Η παραπάνω σχέση χρησιμοποιήθηκε με επιτυχία και από τους Charlette et al. (2002). Στην εργασία αυτή αναπτύσσεται επίσης, στα πλαίσια της μεθόδου LES, μια νέα σχέση που συνδέει την τυρβώδη ταχύτητα καύσης με τις τυρβώδεις διακυμάνσεις, η οποία είναι:

$$S_T = S_L \left(1 + \min \left[\frac{\Delta}{\delta_L}, \Gamma \frac{u'_0}{S_L} \right] \right)^\beta \quad (9.4.4)$$

Δ είναι το χαρακτηριστικό μήκος του κελιού, δ_L το πάχος της στρωτής φλόγας, β σταθερά που προτείνεται ίση με 0.5 και Γ η συνάρτηση αποδοτικότητας (efficiency function) η οποία λαμβάνει υπ' όψιν της τις επιδράσεις στην φλόγα όλων των κλιμάκων που είναι μικρότερες του Δ . Η συνάρτηση αυτή έχει προσδιοριστεί μέσω DNS ανάλυσης στοιχειωδών αλληλεπιδράσεων φλόγας-δίνης. Περισσότερες λεπτομέρειες για το μοντέλο δίνονται στο Παράρτημα Α.4 όπου παρουσιάζονται και οι σχέσεις που δίνουν τη συνάρτηση αποδοτικότητας. Η τυρβώδης ταχύτητα καύσης που δίνεται από την παραπάνω σχέση, αποτελεί τελικά συνάρτηση δύο βασικών παραμέτρων, του λόγου μηκών Δ/δ_L και του λόγου ταχυτήτων u'_0/S_L . Στα παρακάτω διαγράμματα (Σχήμα 9.4.1) απεικονίζεται ο λόγος S_T/S_L συναρτήσει του u'_0/S_L , για διάφορες

τιμές του λόγου Δ/δ_L . Παρατηρούμε ότι η αύξηση του Δ/δ_L προκαλεί αύξηση του λόγου S_T/S_L , πράγμα φυσιολογικό καθώς η υποπλεγματική τύρβη μεγαλώνει. Στα ίδια διαγράμματα απεικονίζεται η καμπύλη που δίνει η σχέση του Yakhot. Παρατηρούμε ότι για μικρής έντασης τύρβη ($u'_0/S_L < 1.2$) η σχέση του Yakhot προβλέπει μεγαλύτερες τιμές S_T/S_L . Για μεγαλύτερες όμως τιμές του u'_0/S_L και για τις περιπτώσεις όπου ο λόγος Δ/δ_L είναι περίπου μικρότερος από 20, η σχέση του Yakhot προβλέπει μικρότερες τιμές. Μια άλλη σημαντική διαφορά μεταξύ των δύο σχέσεων είναι ότι η σχέση του Yakhot είναι γνησίως αύξουσα συνάρτηση, ενώ από την άλλη η σχέση των Charlette et al. (2002) για μεγάλες τιμές του u'_0/S_L συγκλίνει σε μία σταθερή τιμή. Αυτό αποτελεί πλεονέκτημα του μοντέλου των Charlette et al. (2002) καθώς η σύγκλιση αυτή παρουσιάζεται και πειραματικά και οφείλεται στο γεγονός ότι από μιας έντασης τύρβη και πάνω η καύση σταματάει να επιταχύνεται και τελικά μπορεί να έχουμε και σβέση της φλόγας.



Σχήμα 9.4.1: Γραφικές παραστάσεις της σχέσης του των Charlette et al. (2002) για τον λόγο S_T/S_L συναρτήσει του u'_0/S_L , για διάφορες τιμές του Δ/δ_L . Με μαύρη διακεκομμένη γραμμή απεικονίζεται ο λόγος S_T/S_L της σχέσης του Yakhot. Τα δύο διαγράμματα διαφέρουν ως προς το εύρος τιμών του οριζώντιου άξονα.

Προκειμένου να βελτιώσουμε το μοντέλο καύσης που έχουμε χρησιμοποιήσει μέχρι τώρα και το οποίο έδωσε πολύ καλά αποτελέσματα στις προηγούμενες προσομοιώσεις, δοκιμάσαμε αρχικά να αλλάξουμε τον τρόπο υπολογισμού της χαρακτηριστικής ταχύτητας τύρβης u'_0 , χρησιμοποιώντας τη σχέση (9.4.3) στη θέση της σχέσης (9.4.1). Ο λόγος για αυτό, ήταν το γεγονός ότι η νέα σχέση για το u'_0 αναμένεται να δώσει μεγάλες τιμές στη περιοχή εκτός του ανοίγματος λόγω των δινών που δημιουργούνται. Αυτό θα έχει σαν αποτέλεσμα την αύξηση της ταχύτητας καύσης στη περιοχή αυτή, το οποίο είναι επιθυμητό καθώς όπως είδαμε η ένταση της εξωτερικής έκρηξης υποεκτιμάτε στο αρχικό μοντέλο.

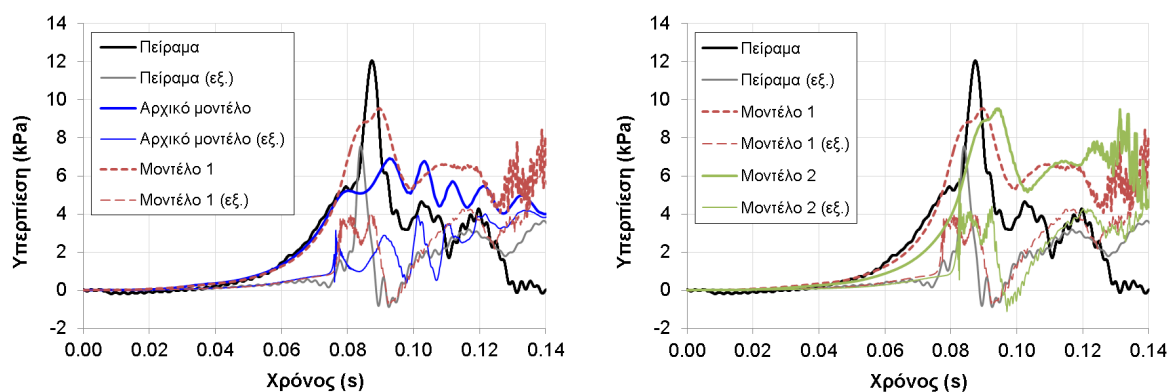
Στη συνέχεια δοκιμάστηκε, επιπλέον της παραπάνω αλλαγής, η αντικατάσταση της σχέσης του Yakhot για τη τυρβώδη ταχύτητα καύσης, με τη σχέση των Charlette et al. (2002). Αυτό έγινε για διάφορους λόγους. Πρώτον, η σχέση αυτή είναι πιο σύγχρονη από την αντίστοιχη του Yakhot, λαμβάνοντας υπ' όψιν περισσότερες παραμέτρους για τον υπολογισμό της ταχύτητας τυρβώδους καύσης, οπότε μπορεί να θεωρηθεί πιο ακριβής. Δεύτερον, έχει αναπτυχθεί ειδικά στο πλαίσιο της μεθόδου LES την οποία χρησιμοποιούμε. Τρίτον, η σχέση αυτή έχει χρησιμοποιηθεί (Charlette et al. 2002) σε συνδυασμό με τον νέο τρόπο υπολογισμού του u'_0 και τέταρτον, έχει χρησιμοποιηθεί επιτυχώς σε προσομοιώσεις έκρηξης μικρής κλίμακας (Di Sarli et al. 2009, 2012, 2013, Wen et al.

2012). Στη σχέση (9.4.4) των Charlette et al. (2002), σαν ταχύτητα στρωτής καύσης S_L χρησιμοποιήσαμε την ταχύτητα S_L^{sgs} της σχέσης (4.2.6). Η αρχική σχέση δηλαδή των Charlette et al. (2002) τροποποιείται με ανάλογο τρόπο με την τροποποίηση που έγινε στη σχέση του Yakhot, για την παραγωγή του τελικού μοντέλου.

9.4.2 Αποτελέσματα

Στο Σχήμα 9.4.2 απεικονίζονται οι καμπύλες υπερπίεσης για τα νέα μοντέλα, μαζί με το αρχικό μοντέλο (LES) και το πείραμα. Σαν Μοντέλο 1 αναφέρουμε το μοντέλο καύσης στο οποίο η μόνη αλλαγή που έγινε είναι στον τρόπο υπολογισμού του u'_0 , ενώ σαν Μοντέλο 2 το μοντέλο καύσης στο οποίο εκτός από την αλλαγή αυτή έγινε και αλλαγή της σχέσης μέσω της οποίας υπολογίζουμε την ταχύτητα τυρβώδους καύσης (σχέση του Charlette αντί της σχέσης του Yakhot). Σαν αρχικό μοντέλο αναφέρουμε το μοντέλο καύσης που χρησιμοποιήθηκε στις προηγούμενες προσομοιώσεις σε συνδυασμό με τη μέθοδο LES.

Στο αριστερό διάγραμμα του σχήματος, γίνεται σύγκριση του Μοντέλου 1 με το αρχικό μοντέλο και το πείραμα. Παρατηρούμε ότι τα αποτελέσματα έχουν βελτιωθεί αρκετά σε σχέση με το αρχικό μοντέλο. Καταρχήν, η μέγιστη υπερπίεση που επιτυγχάνεται στο εσωτερικό του δοχείου είναι αυξημένη, πλησιάζοντας την πειραματική. Παρόλα αυτά υπάρχει ακόμα υποεκτίμηση του πειράματος. Επιπλέον, ο ρυθμός αύξησης της πίεσης προβλέπεται με αρκετά καλύτερη ακρίβεια. Μια βασική διαφορά σε σχέση με το πείραμα, έχει να κάνει με τη σταθεροποίηση της πίεσης η οποία συμβαίνει στο πείραμα όταν η φλόγα εξέρχεται από το άνοιγμα (περίπου στα 0.08 s). Αυτό δεν προβλέπεται στη προσομοίωση, καθώς η αύξηση της πίεσης είναι συνεχής. Όσο αφορά την εξωτερική υπερπίεση, παρατηρούμε ότι και αυτή έχει βελτιωθεί σε σχέση με την αντίστοιχη του αρχικού μοντέλου. Η εξωτερική πίεση αυξάνει απότομα τη χρονική στιγμή 0.078 s φτάνοντας τα 3.78 kPa, η οποία διατηρείται για ένα χρονικό διάστημα. Στη συνέχεια όμως η πίεση παρουσιάζει μια μικρή πτώση (περίπου στα 0.084 s) και στη συνέχεια αυξάνει ξανά, κάτι το οποίο δεν παρατηρείται στο πείραμα. Στα 0.087 s η εξωτερική πίεση παρουσιάζει απότομη πτώση η οποία οδηγεί σε πτώση και της εσωτερικής πίεσης, όπως συμβαίνει και στο πείραμα.

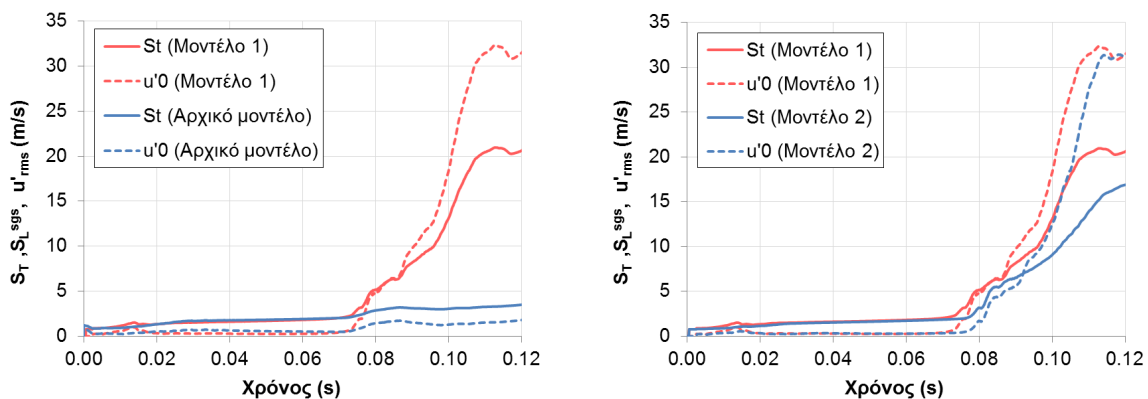


Σχήμα 9.4.2: Σύγκριση της χρονικής εξέλιξης της υπερπίεσης στο εσωτερικό του δοχείου και έξω από άνοιγμα για το αρχικό και τα τροποποιημένα μοντέλα καύσης.

Στο δεξί διάγραμμα του σχήματος, γίνεται σύγκριση του Μοντέλου 2 με το Μοντέλο 1. Παρατηρούμε ότι τα αποτελέσματα είναι παρόμοια. Η μόνη αλλαγή που παρατηρείται είναι η μικρή

μετατόπιση στο χρόνο στο Μοντέλο 2. Η καθυστέρηση αυτή στον χρόνο μπορεί να δικαιολογηθεί από το Σχήμα 9.4.1. Στο σχήμα αυτό βλέπουμε ότι για πολύ μικρές τιμές του λόγου $u'_0/S_L < 1.2$, η τυρβώδης ταχύτητα καύσης που δίνει η εξίσωση του Yakhot είναι μεγαλύτερη από αυτή της σχέσης του Charlette. Μικρές τιμές του λόγου αυτού παρουσιάζονται στα πρώτα στάδια της έκρηξης, με αποτέλεσμα να προκαλείται η χρονική καθυστέρηση που είδαμε. Η παράμετρος του μοντέλου Δ/δ_L είναι στη περίπτωση μας περίπου ίση με 54 ($\Delta = 0.02\text{ m}$, $\delta_L = 0.37\text{ mm}$). Άρα (με βάση το Σχήμα 9.4.1) για u'_0/S_L μεταξύ 1.5 και 10 η σχέση του Charlette δίνει μεγαλύτερες τιμές τυρβώδους ταχύτητας καύσης από αυτή του Yakhot, ενώ για τιμές μεγαλύτερες από 10, ξαναδίνει μικρότερες.

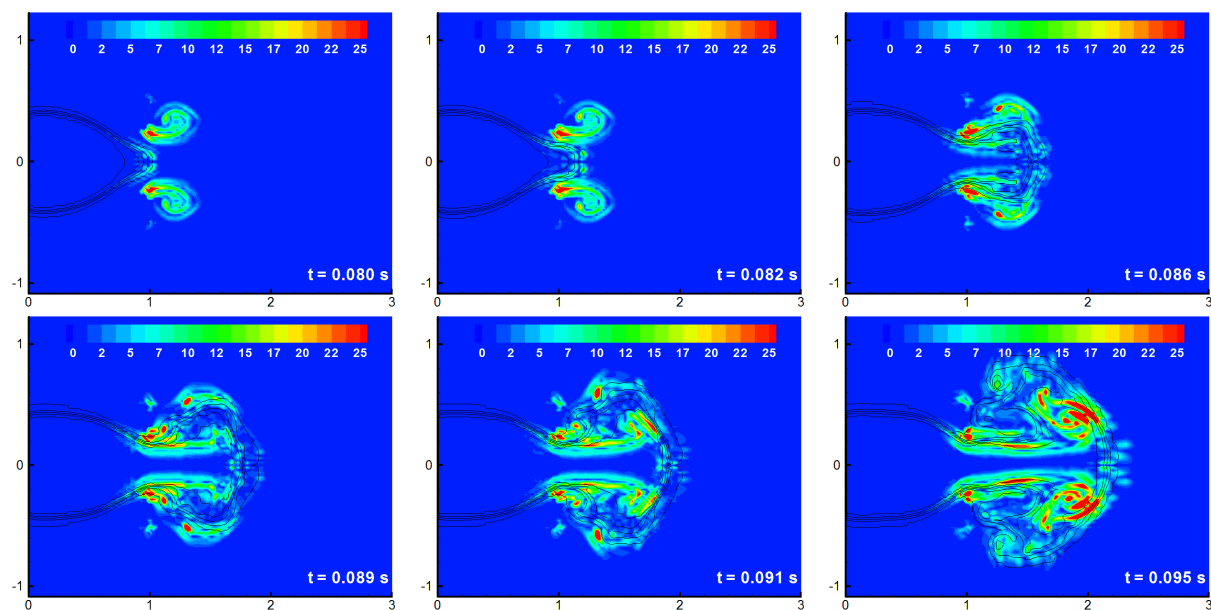
Στο Σχήμα 9.4.3 απεικονίζονται η ταχύτητα τυρβώδους καύσης και η χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης. Στο αριστερό διάγραμμα γίνεται σύγκριση μεταξύ του Μοντέλου 1 και του αρχικού μοντέλου. Παρατηρούμε τις πολύ μεγαλύτερες τιμές του u'_0 που προβλέπονται από το Μοντέλο 1. Τη χρονική στιγμή 0.078 s, κατά την οποία υπάρχει η μεγάλη αύξηση της εξωτερικής πίεσης, οι τιμές είναι περίπου ίδιες, λίγο αργότερα όμως, στα 0.08 s η τιμή του u'_0 στο Μοντέλο 1 έχει γίνει 3.4 φορές μεγαλύτερη. Στα 0.090 s στα οποία παρατηρείται το μέγιστο της πίεσης, η τιμή του u'_0 έχει φτάσει τα 7 m/s. Οι μεγαλύτερες τιμές του u'_0 συγκριτικά με το αρχικό μοντέλο, οδηγούν όπως είναι φυσιολογικό και απεικονίζεται στο σχήμα, σε μεγαλύτερες τιμές της τυρβώδους ταχύτητας καύσης S_T . Στο δεξί διάγραμμα του σχήματος, γίνεται σύγκριση των ίδιων μεγεθών μεταξύ του Μοντέλου 1 και του Μοντέλου 2. Παρατηρούμε ότι γενικά οι καμπύλες του Μοντέλου 2 είναι όμοιες με αυτές του Μοντέλου 1, παρουσιάζοντας μια χρονική καθυστέρηση όμοια με αυτή που είδαμε στις καμπύλες υπερπίεσης. Διαφορά υπάρχει μόνο στη τυρβώδη ταχύτητα καύσης μετά τα 0.10 s, όπου όμως η καύση έχει σχεδόν ολοκληρωθεί.



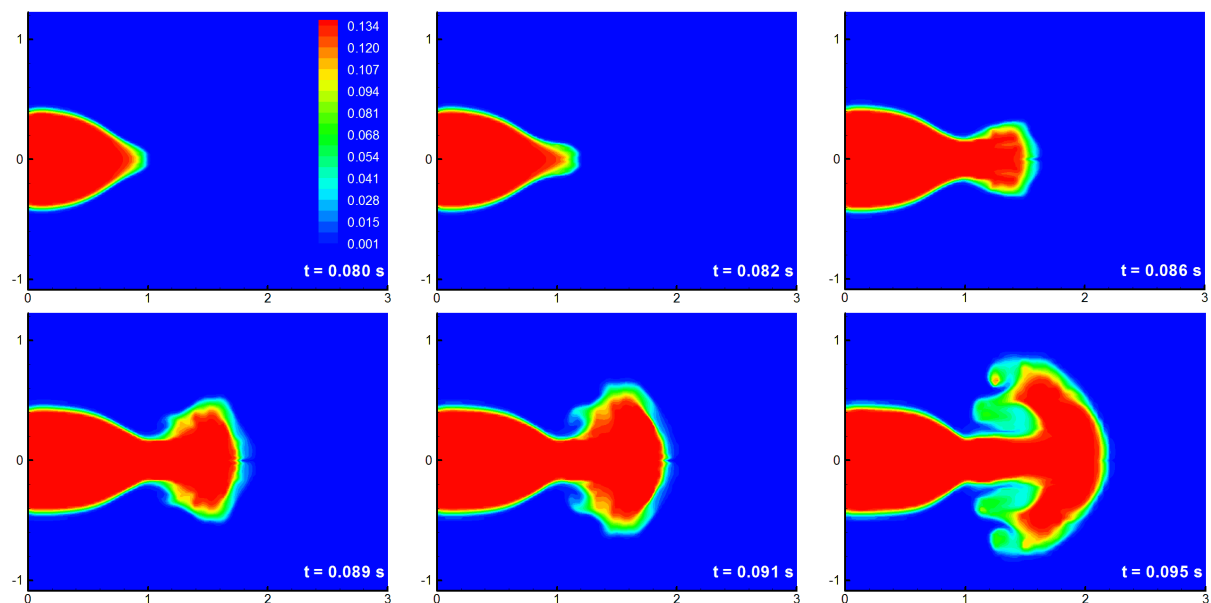
Σχήμα 9.4.3: Τυρβώδης ταχύτητα καύσης S_T και χαρακτηριστική ταχύτητα τύρβης u'_0 στα διάφορα μοντέλα. Οι ποσότητες είναι μέσες τιμές στο πάχος ($c = 0.2 - 0.8$) της φλόγας.

Καλύτερη απεικόνιση των τιμών του u'_0 έχουμε μέσω των ισοϋψών, οι οποίες παρουσιάζονται στο παρακάτω Σχήμα 9.4.4 για το Μοντέλο 2. Παρατηρούμε ότι τη στιγμή κατά την οποία η φλόγα εξέρχεται του δοχείου (0.080 και 0.082 s) οι μεγάλες τιμές του u'_0 παρουσιάζονται εκατέρωθεν του ανοίγματος, με τις ισοϋψείς να παίρνουν την μορφή της δίνης η οποία δημιουργείται στα σημεία αυτά. Αυξημένες τιμές στις χρονικές αυτές στιγμές παρατηρούνται και στην κορυφή της φλόγας όπου η τιμή του u'_0 ισούται με περίπου 10 m/s. Στη χρονική στιγμή 0.086 s οι μεγαλύτερες τιμές αναπτύσσονται περιμετρικά της φλόγας, ενώ στις επόμενες χρονικές στιγμές οι ισοϋψείς

παρουσιάζουν πιο ακανόνιστη μορφή. Στα διαγράμματα του σχήματος αυτού παρουσιάζεται επίσης η μορφή της φλόγας, η οποία απεικονίζεται καλύτερα στο Σχήμα 9.4.5. Παρατηρούμε ότι η φλόγα επεκτείνεται πρωτίστως σφαιρικά. Η μορφή της είναι αρκετά διαφορετική από ότι στο αρχικό μοντέλο (Σχήμα 9.3.2) καθώς δεν παρατηρείται ούτε μορφή μανιταριού ούτε μεγάλη επιμήκυνση της. Έτσι η μορφή της είναι πολύ πιο κοντά σε αυτή του πειράματος (Σχήμα 9.1.3).



Σχήμα 9.4.4: Ισοϋψείς χαρακτηριστικής ταχύτητας τύρβης (m/s) μαζί με το περίγραμμα της φλόγας στο ΧΖ επίπεδο που περνάει από το κέντρο του δοχείου, για το Μοντέλο 2.



Σχήμα 9.4.5: Ισοϋψείς κλάσματος μάζας νερού στο ΧΖ επίπεδο που περνάει από το κέντρο του δοχείου, για το Μοντέλο 2.

Μειονέκτημα της νέας σχέσης υπολογισμού του u'_0 , αποτελεί το γεγονός ότι προβλέπει πολύ μεγάλες τιμές του u'_0 κοντά στα τοιχώματα. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα την παρουσίαση έντονων ταλαντώσεων της πίεσης όταν η φλόγα ακουμπάει το εσωτερικό του δοχείου. Οι ταλαντώσεις αυτές είναι ορατές στο Σχήμα 9.4.2 μετά τα 0.12 s και δεν πρέπει να συσχετιστούν με τις ταλαντώσεις που

παρουσιάζονται στο πείραμα (Σχήμα 9.1.2), καθώς η φυσική τους προέλευση είναι τέτοια που δεν μπορεί να προβλεφθεί από το υπάρχον μοντέλο.

Πλεονέκτημα των νέων μοντέλων αποτελεί το γεγονός ότι όσο η φλόγα κινείται μέσα στο δοχείο, τα αποτελέσματα είναι ίδια ή παρόμοια με αυτά του αρχικού μοντέλου. Αυτό φάνηκε τόσο στις καμπύλες υπερπίεσης (Σχήμα 9.4.2) όσο και στις τιμές των u'_0 και S_T (Σχήμα 9.4.3). Το γεγονός αυτό σημαίνει ότι είναι πιθανό αν τα μοντέλα εφαρμοστούν στις περιπτώσεις των προηγούμενων κεφαλαίων, να δώσουν το ίδιο καλά αποτελέσματα με αυτά που έδωσε το αρχικό μοντέλο.

9.5 Τροποποίηση μοντέλου καύσης στη περίπτωση του k-ε

Εξετάζοντας τη μορφή των ισοϋψών του u'_0 έξω από δοχείο για το RNG LES, RNG k-ε και k-ε (Σχήμα 9.3.10), παρατηρούμε ότι η μορφή τους στη περίπτωση των RANS μοντέλων είναι πιο «επιθυμητή» όσον αφορά την ανάγκη της πιο σωστής πρόβλεψης της εξωτερικής έκρηξης, καθώς: α) οι μεγάλες τιμές αναπτύσσονται στις περιοχές όπου αναμένουμε να επιταχύνεται ο ρυθμός καύσης, δηλαδή εκατέρωθεν του ανοίγματος και β) αν ο ρυθμός καύσης αυξηθεί στις περιοχές αυτές, τότε η μορφή της φλόγας ενδέχεται να πλησιάσει αυτή του πειράματος, καθώς θα επιμηκυνθεί λιγότερο στην οριζόντια κατεύθυνση και περισσότερο στις άλλες, διαταράσσοντας την έντονη μορφή μανιταριού που είδαμε (§9.3) ότι αναπτύσσεται και η οποία δεν συμφωνεί με το πείραμα. Επιπλέον, η διαφορετική μορφή των ισοϋψών που αναπτύσσονται από τα μοντέλα RNG k-ε και k-ε, φάνηκε στη §9.3.1 να βελτιώνει την πρόγνωση της βιαιότητας της εξωτερικής έκρηξης. Όλα τα παραπάνω λοιπόν, μας έκαναν να αναρωτηθούμε πως θα μπορούσαμε να βελτιώσουμε τη πρόβλεψη των μοντέλων αυτών, καθώς και το αν θα μπορούσε να γίνει κάποια αλλαγή στο μοντέλο καύσης έτσι ώστε να προβλέψει με μεγαλύτερη ακρίβεια το φαινόμενο.

9.5.1 Περιγραφή του νέου μοντέλου

Μια κριτική που θα μπορούσε να γίνει στο μοντέλο καύσης που παρουσιάσαμε στη §4.2, είναι η επιλογή της αντικατάστασης της ταχύτητας στρωτής καύσης S_L , από την ταχύτητα S_L^{sgs} . Η αντικατάσταση αυτή θυμίζουμε ότι έγινε για να ληφθούν υπ' όψιν, στα πλαίσια της μεθόδου LES, τα διάφορα φαινόμενα τα οποία συμβαίνουν σε υποπλεγματική κλίμακα και τα οποία δεν μπορούν να επιλυθούν απευθείας, όπως είναι η τύρβη που αναπτύσσεται από το μέτωπο της φλόγας και η αστάθεια θερμοδιάχυσης. Η ταχύτητα S_L^{sgs} είναι αυξημένη σε σχέση με την S_L κατά τους παράγοντες Ξ , δηλαδή:

$$S_L^{sgs} = \Xi_k \cdot \Xi_{lp} \cdot \Xi_f \cdot S_L \quad (9.5.1)$$

Η ταχύτητα S_L^{sgs} είναι αυτή που στην συνέχεια χρησιμοποιείται στη σχέση του Yakhot για τον υπολογισμό της ταχύτητας τυρβώδους καύσης, έτσι ώστε να ληφθεί υπ' όψιν η τύρβη που υπάρχει μπροστά από το μέτωπο της φλόγας μέσω της χαρακτηριστικής ταχύτητας u'_0 , δηλαδή:

$$S_T = S_L^{sgs} \exp \left[\frac{u'_0{}^2}{S_T^2} \right] \quad (9.5.2)$$

Η σχέση του Yakhot, όπως και οι περισσότερες σχέσεις υπολογισμού της ταχύτητας τυρβώδους καύσης (Πίνακας 2.4.2) μπορούν να γραφούν στη μορφή:

$$\frac{S_T}{S_L} = f\left(\frac{u'_0}{S_L}\right) \quad (9.5.3)$$

Η συνάρτηση f αποτελεί αύξουσα συνάρτηση του u'_0/S_L καθώς αυξημένη τύρβη (μεγάλο u'_0) οδηγεί σε μεγαλύτερη παραμόρφωση της φλόγας οπότε σε αύξηση της ταχύτητας καύσης (μέχρι ενός ορίου, §2.4). Από την άλλη, όπως έχουμε πει, το μέτωπο της φλόγας αντιστέκεται στις παραμορφώσεις που προσπαθεί να επιβάλει η τύρβη. Ένα μέτρο της αντίστασης αυτής είναι η ταχύτητα στρωτής φλόγας S_L . Αύξηση λοιπόν του S_L οδηγεί σε μείωση του λόγου u'_0/S_L και συνεπώς σε μείωση του λόγου S_T/S_L .

Οι σχέσεις (9.5.3) για την ταχύτητα τυρβώδους καύσης, δημιουργούνται με βάση τη ταχύτητα στρωτής καύσης. Αντικαθιστώντας, στο μοντέλο που χρησιμοποιούμε, την ταχύτητα στρωτής καύσης S_L με μια άλλη, την S_L^{sgs} , αλλοιώνουμε τη σχέση αυτή οπότε και την εξάρτηση της S_T από την S_L . Μια μετατροπή λοιπόν που μπορεί να γίνει στο μοντέλο, είναι η ταχύτητα S_T να υπολογίζεται με βάση την S_L , και στην συνέχεια να γίνεται ο πολλαπλασιασμός με τους παράγοντες Ξ , δηλαδή:

$$S'_T = S_L \exp\left[\frac{u'^2_0}{S'^2_T}\right] \quad (9.5.4)$$

$$S_T = \Xi_k \cdot \Xi_{ip} \cdot \Xi_f \cdot S'_T \quad (9.5.5)$$

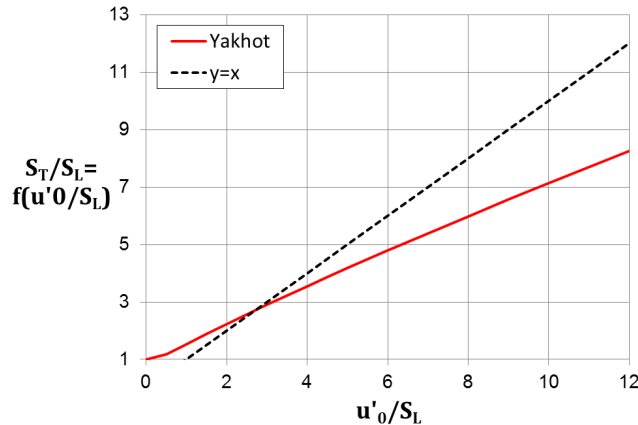
Εδώ, θα πρέπει να εξετάσουμε τι αλλαγές αναμένεται να επιφέρει η παραπάνω αλλαγή στα αποτελέσματα. Η ταχύτητα στρωτής καύσης που χρησιμοποιούμε στο τροποποιημένο μοντέλο, είναι προφανώς μικρότερη από την ταχύτητα S_L^{sgs} . Ας υποθέσουμε λοιπόν ότι $S_L^{sgs} = a \cdot S_L$ ($a > 1$) και ότι έχουμε δεδομένες τιμές S_L και u'_0 . Αν εφαρμόσουμε τη σχέση (9.5.3) στη περίπτωση του αρχικού μοντέλου και του τροποποιημένου μοντέλου, τότε έχουμε αντίστοιχα τις σχέσεις:

$$\frac{S_T}{S_L^{sgs}} = f\left(\frac{u'_0}{S_L^{sgs}}\right) \Rightarrow S_T = f\left(\frac{u'_0}{S_L^{sgs}}\right) \cdot S_L^{sgs} \Rightarrow S_T = f\left(\frac{u'_0}{a \cdot S_L}\right) \cdot a \cdot S_L \quad (9.5.6)$$

$$\frac{S_T}{S_L} = f\left(\frac{u'_0}{S_L}\right) \Rightarrow S_T = f\left(\frac{u'_0}{S_L}\right) \cdot S_L \quad (9.5.7)$$

Συνεπώς, για να δούμε πως θα μεταβληθεί η ταχύτητα τυρβώδους καύσης στο τροποποιημένο μοντέλο, θα πρέπει να συγκρίνουμε την ποσότητα $f\left(\frac{u'_0}{S_L}\right)$ με την ποσότητα $a \cdot f\left(\frac{u'_0}{a \cdot S_L}\right)$. Στο παρακάτω διάγραμμα απεικονίζεται η εξίσωση του Yakhot μαζί με την ευθεία $y = x$. Παρατηρούμε καταρχάς, ότι η καμπύλη που δίνει η εξίσωση του Yakhot μπορεί να προσεγγιστεί, τμηματικά, από ευθείες. Επίσης παρατηρούμε ότι η κλίση της καμπύλης στα διάφορα σημεία της, είναι μικρότερη

από αυτή της ευθείας $y=x$. Αυτό σημαίνει ότι $f\left(\frac{u'_0}{a \cdot S_L}\right) < \frac{1}{\alpha} f\left(\frac{u'_0}{S_L}\right)$. Συνεπώς $\alpha \cdot f\left(\frac{u'_0}{a \cdot S_L}\right) < f\left(\frac{u'_0}{S_L}\right)$, το οποίο σημαίνει ότι το τροποποιημένο μοντέλο, θα δώσει μεγαλύτερη ταχύτητα τυρβώδους καύσης.



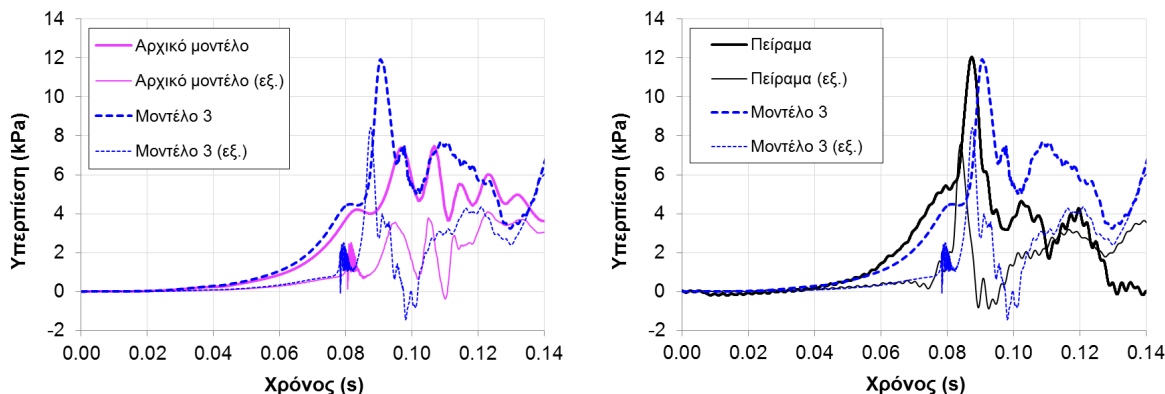
Σχήμα 9.5.1: Σύγκριση της χρονικής εξέλιξης της υπερπίεσης στο εσωτερικό του δοχείου και έξω από άνοιγμα για το αρχικό και τα τροποποιημένα μοντέλα καύσης.

Για παράδειγμα, ας θεωρήσουμε $u'_0 = 5 \text{ m/s}$, τιμή η οποία όπως είδαμε στο Σχήμα 9.3.10 αναπτύσσεται στη περιοχή έξω από το άνοιγμα στη περίπτωση του k-ε μοντέλου. Η ταχύτητα στρωτής καύσης είναι ίση με $S_L = 0.64 \text{ m/s}$ (Πίνακας 9.2.1), ενώ ο συντελεστής α ο οποίος ισούται με το γινόμενο των συντελεστών Ξ είναι περίπου ίσος με 3 (Σχήμα 9.3.7). Συνεπώς για το αρχικό μοντέλο, έχουμε ότι $u'_0/S_L^{sgs} = 2.6$ για το οποίο από τη σχέση του Yakhot προκύπτει ότι $S_T/S_L^{sgs} = 2.6 \Rightarrow S_T = 5 \text{ m/s}$, ενώ για το τροποποιημένο $u'_0/S_L = 7.8$ για το οποίο προκύπτει $S'_T/S_L = 5.8 \Rightarrow S'_T = 3.7 \text{ m/s}$ και $S_T = 3 \cdot S'_T = 11.1 \text{ m/s}$. Παρατηρούμε δηλαδή ότι στο νέο μοντέλο προβλέπεται σε αυτή τη περίπτωση 2.2 φορές μεγαλύτερη ταχύτητα τυρβώδους καύσης. Η διαφορά αυτή μικραίνει καθώς μικραίνει το u'_0 επειδή η συνάρτηση f τείνει στο 1.

9.5.2 Αποτελέσματα

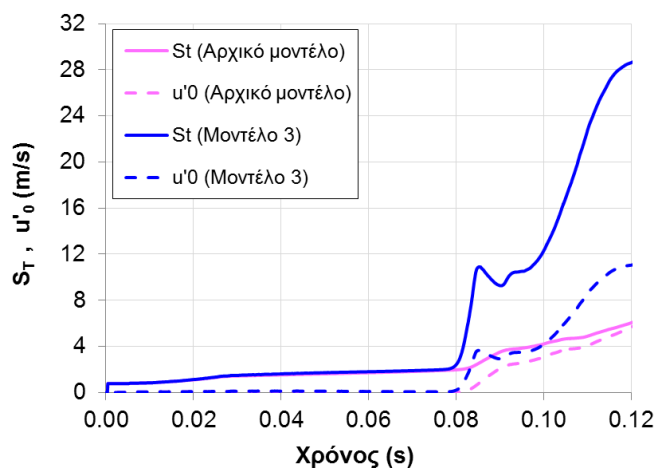
Στο παρακάτω Σχήμα 9.5.2, απεικονίζονται οι καμπύλες υπερπίεσης για το μοντέλο που περιγράψαμε στη προηγούμενη παράγραφο (Μοντέλο 3). Στο αριστερό διάγραμμα γίνεται η σύγκριση με το αρχικό μοντέλο καύσης (και το k-ε μοντέλο τύρβης), ενώ στο δεξί με το πείραμα. Παρατηρούμε ότι τόσο η εσωτερική όσο και η εξωτερική υπερπίεση διαφέρει αρκετά από το αρχικό μοντέλο και είναι σε πάρα πολύ καλή συμφωνία με το πείραμα. Η πίεση στο εσωτερικό αυξάνει αρχικά με παρόμοιο ρυθμό με αυτό του πειράματος και στα 0.08 s αρχίζει να σταθεροποιείται. Η χρονική αυτή στιγμή ταυτίζεται με τη στιγμή κατά την οποία η φλόγα εξέρχεται του ανοίγματος. Η ίδια συμπεριφορά παρουσιάζεται και στο πείραμα. Υπενθυμίζουμε ότι η σταθεροποίηση αυτή της πίεσης δεν είχε προβλεφθεί από τα προηγούμενα βελτιωμένα Μοντέλα 2 και 3 (§9.4). Στα 0.082 s η πίεση έξω από το άνοιγμα αρχίζει να αυξάνει λόγω της εξωτερικής έκρηξης, με αποτέλεσμα στα 0.085 s να έχουμε αύξηση και της εσωτερικής πίεσης. Η πίεση τόσο στο εσωτερικό όσο και στο

εξωτερικό αυξάνει με πολύ μεγάλο ρυθμό, όμοιο με αυτόν του πειράματος. Η μέγιστη πίεση η οποία επιτυγχάνεται στο εσωτερικό είναι ίση με 11.9 kPa στα 0.090 s. Στη συνέχεια η πίεση μειώνεται με απότομο ρυθμό, μέχρι τα 0.095 s όπου παρατηρείται μια μικρή αύξηση της. Αυτή φαίνεται να προκαλείται από την μικρή αύξηση της πίεσης στο εξωτερικό του δοχείου και δεν παρουσιάζεται στο πείραμα.

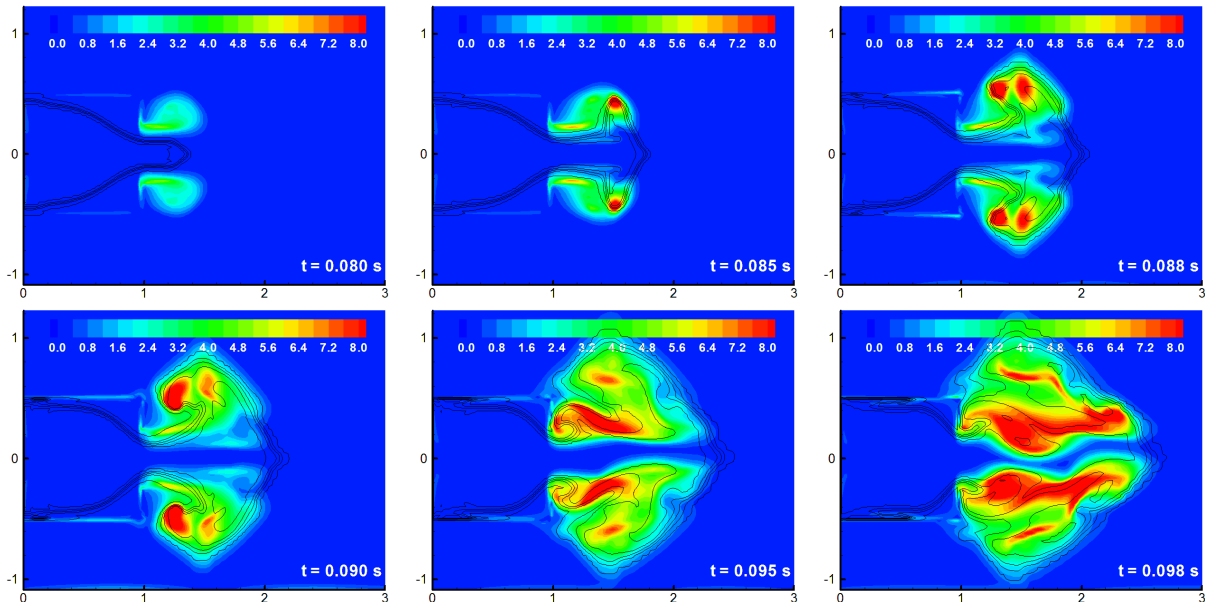


Σχήμα 9.5.2: Σύγκριση της χρονικής εξέλιξης της υπερπίεσης στο εσωτερικό του δοχείου και έξω από άνοιγμα για το αρχικό και τα τροποποιημένα μοντέλα καύσης.

Στο Σχήμα 9.5.3 απεικονίζονται η ταχύτητα τυρβώδους καύσης S_T και η χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης u'_0 για το αρχικό και για το νέο μοντέλο (Μοντέλο 3). Μέχρι τα περίπου 0.08 s τα αποτελέσματα ταυτίζονται. Στη συνέχεια παρατηρούμε μεγάλη αύξηση της ταχύτητας τυρβώδους καύσης, η οποία όπως είδαμε οφείλεται στην μετατροπή που έγινε στο μοντέλο καύσης. Αυτό οδηγεί σε αύξηση της χαρακτηριστικής ταχύτητα της τύρβης u'_0 . Η αύξηση αυτή είναι ορατή και στο Σχήμα 9.5.4, στο οποίο απεικονίζονται οι ισοϋψείς της μαζί με το περίγραμμα της φλόγας. Παρατηρούμε ότι σε ορισμένες περιοχές αναπτύσσονται πιο μεγάλες τιμές οι οποίες φτάνουν μέχρι και τα 12 m/s.

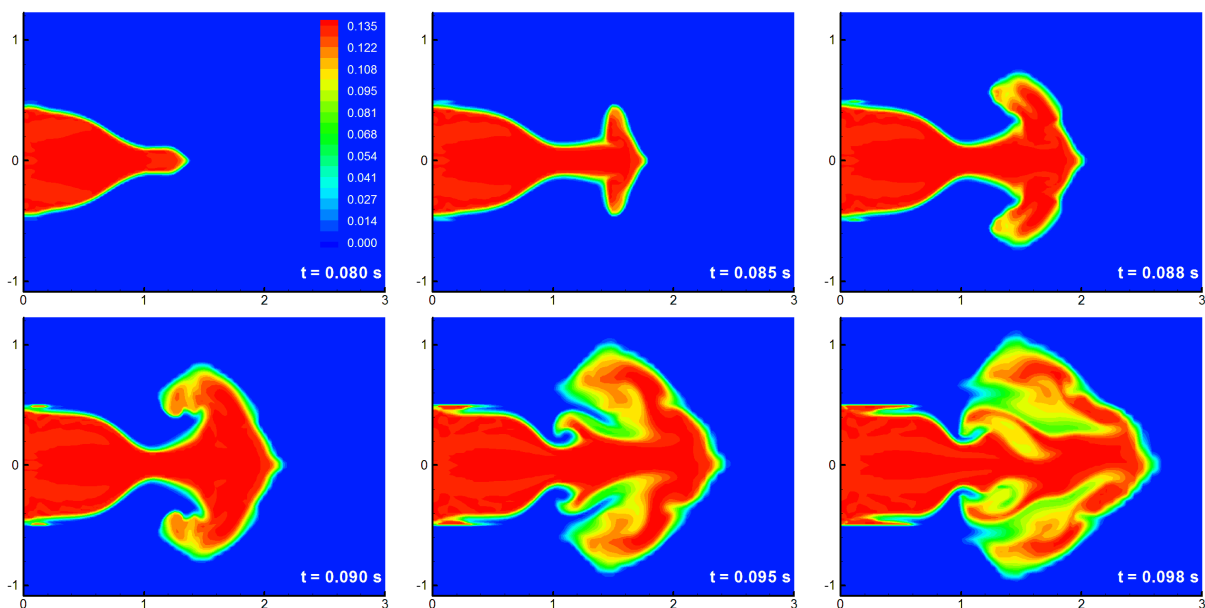


Σχήμα 9.5.3: Τυρβώδης ταχύτητα καύσης S_T και χαρακτηριστική ταχύτητα τύρβης u'_0 στο αρχικό και στο νέο μοντέλο (Μοντέλο 3). Οι ποσότητες είναι μέσες τιμές στο πάχος ($c = 0.2 - 0.8$) της φλόγας.



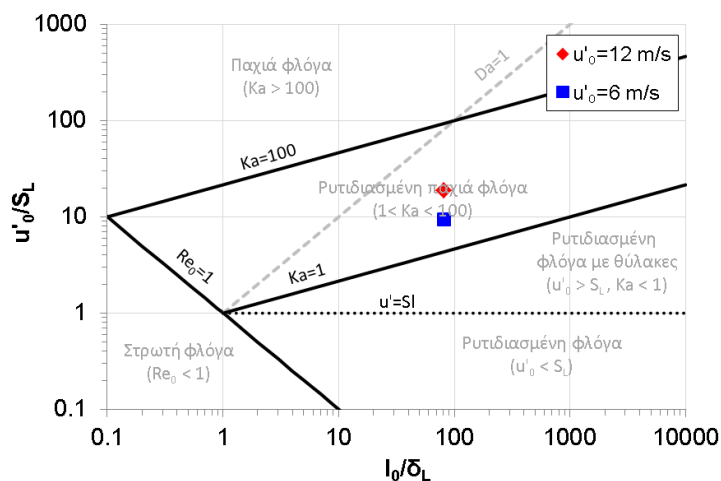
Σχήμα 9.5.4: Ισοϋψείς χαρακτηριστικής ταχύτητας τύρβης (m/s) μαζί με το περίγραμμα της φλόγας στο ΧΖ επίπεδο που περνάει από το κέντρο του δοχείου, για το Μοντέλο 3.

Στο Σχήμα 9.5.5 παρουσιάζεται η μορφή της φλόγας. Παρατηρούμε ότι στα 0.085 s η φλόγα έχει πάλι την μορφή μανταριριού που είδαμε και στο αρχικό μοντέλο (Σχήμα 9.3.10). Στη συνέχεια όμως η φλόγα παρουσιάζει διαφορετική μορφή, η οποία είναι πιο κοντά στο πείραμα σε σχέση με το αρχικό μοντέλο. Μέσα στο δοχείο και κοντά στα τοιχώματα, παρατηρούμε ότι η καύση έχει εξελιχθεί πιο γρήγορα σε σχέση με σημεία που βρίσκονται πιο μακριά από αυτά. Αυτό οφείλεται στο μοντέλο $k-\epsilon$ και στις υψηλές τιμές τύρβης που προβλέπει κοντά στο τοίχωμα. Αυτό το συναντήσαμε και στη περίπτωση της έκρηξης σε οδική σήραγγα, στο προηγούμενο κεφάλαιο (Σχήμα 8.3.12). Αυτή η συμπεριφορά όμως δεν παρουσιάζεται στο πείραμα. Συνεπώς, αυτό είναι ένα σημείο το οποίο μελλοντικά θα πρέπει να βελτιωθεί στο συγκεκριμένο μοντέλο.



Σχήμα 9.5.5: Ισοϋψείς κλάσματος μάζας νερού στο ΧΖ επίπεδο που περνάει από το κέντρο του δοχείου, για το Μοντέλο 3.

Τέλος, στο παρακάτω σχήμα απεικονίζονται το διάγραμμα τύπου Borghi (§2.4.1) για τις κατηγορίες της τυρβώδους καύσης. Η ολοκληρωτική κλίμακα μήκους η οποία υπολογίστηκε με βάση τις τιμές των k και ϵ από τη σχέση (2.1.13), κυμαινόταν στη περιοχή έξω από το άνοιγμα από 0.02 έως 0.04 m. Συνεπώς, η τιμή που χρησιμοποιήθηκε για τον υπολογισμό των σημείων στο διάγραμμα ήταν τα 0.03 m. Σαν χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης επιλέχθηκαν με βάση το Σχήμα 9.5.4 οι τιμές 6 m/s και 12 m/s. Παρατηρούμε ότι και τα δύο σημεία βρίσκονται μέσα στη περιοχή της ρυτιδιασμένης παχιάς φλόγας. Αυτό μπορούμε να πούμε ότι ήταν αναμενόμενο, καθώς από τη μία η τύρβη που αναπτύσσεται στη περιοχή έξω από το άνοιγμα είναι έντονη με αποτέλεσμα να μετατοπιζόμαστε από τις περιοχές της ρυτιδιασμένης φλόγας, αλλά από την άλλη όχι τόσο έντονη ώστε να μπορούμε στη περιοχή της παχιάς φλόγας στην οποία θα αναμέναμε επιβράδυνση και όχι επιτάχυνση του ρυθμού καύσης, κάτι που δεν παρατηρείται στο πείραμα.



Σχήμα 9.5.6: Διάγραμμα τύπου Borghi κατηγοριών τυρβώδους καύσης. Απεικόνιση των σημείων που αντιστοιχούν στην περίπτωση που εξετάζουμε για δυο διαφορετικές τιμές του u'_0 (τιμές υπολόγιστων παραμέτρων: $l_0 = 0.03 \text{ m}$, $\delta_L = 0.37 \cdot 10^{-3}$, $S_L = 0.64 \text{ m/s}$).

9.6 Συμπεράσματα

Στο κεφάλαιο αυτό, έγινε προσομοίωση έκρηξης σε δοχείο με άνοιγμα. Το υπολογιστικό μοντέλο προσομοίωσε με ακρίβεια το πείραμα μόνο μέχρι τη στιγμή που η φλόγα εξέρχεται από το άνοιγμα, αποτυγχάνοντας να προβλέψει σωστά την βιαιότητα της εξωτερικής έκρηξης. Προκειμένου να βελτιώσουμε την πρόγνωση του μοντέλου, δοκιμάστηκαν διαφορετικά μοντέλα τύρβης, καθώς και τροποποιήσεις του μοντέλου καύσης. Εκτός από τη μέθοδο LES, δοκιμάστηκαν τα μοντέλα τύρβης RNG k- ϵ και k- ϵ . Τα μοντέλα αυτά, αν και κατάφεραν να προβλέψουν καλύτερα την εξωτερική έκρηξη, δεν έδωσαν την επιθυμητή ακρίβεια. Έτσι δοκιμάστηκαν δύο παραλλαγές του μοντέλου καύσης.

Η πρώτη παραλλαγή, αφορούσε την σχέση με την οποία υπολογίζεται η χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης. Το νέο μοντέλο δοκιμάστηκε σε συνδυασμό με τη μέθοδο LES και έδωσε καλύτερα αποτελέσματα, καθώς η ένταση της εξωτερικής έκρηξης εκτιμήθηκε πιο σωστά, ενώ ταυτόχρονα, η συμπεριφορά του μοντέλου στα πρώτα στάδια της έκρηξης η οποία προβλεπόταν καλά στο αρχικό μοντέλο, δεν άλλαξε. Επίσης η μορφή της φλόγας ήταν πολύ κοντά σε αυτή του πειράματος.

Παρόλα αυτά, θα πρέπει να γίνουν επιπλέον προσομοιώσεις έτσι ώστε να επιβεβαιώσουμε την καλή συμπεριφορά του νέου μοντέλου. Το μοντέλο θα πρέπει στο μέλλον να αξιολογηθεί τόσο στις προσομοιώσεις που έγιναν στα προηγούμενα κεφάλαια, όσο και σε άλλες περιπτώσεις εκρήξεων σε κλειστούς χώρους με ανοίγματα.

Η δεύτερη παραλλαγή, αφορούσε τον τρόπο με τον οποίο οι συντελεστές επιτάχυνσης της φλόγας εισάγονται στη σχέση που συνδέει τη τυρβώδη ταχύτητα καύσης με την χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης. Το νέο μοντέλο δοκιμάστηκε σε συνδυασμό με το μοντέλο τύρβης k-ε. Τα αποτελέσματα από το νέο μοντέλο ήταν εξαιρετικά. Το φαινόμενο της εξωτερικής έκρηξης προβλέφθηκε πολύ σωστά, ενώ και η συνολική μορφή της καμπύλης υπερπίεσης ήταν πολύ κοντά στην μορφή που έχει η πειραματική. Επίσης, όπως και στη προηγούμενη παραλλαγή, η καμπύλη υπερπίεσης στα πρώτα στάδια της έκρηξης κατά τα οποία η φλόγα βρίσκεται ακόμα στο εσωτερικό του δοχείου συνέχισε να παρουσιάζει καλή συμφωνία με το πείραμα. Το νέο αυτό μοντέλο, όπως και το προηγούμενο, θα πρέπει να αξιολογηθεί σε περισσότερες περιπτώσεις. Στις περιπτώσεις της ελεύθερης έκρηξης (Κεφάλαιο 7) και της έκρηξης σε οδική σήραγγα (Κεφάλαιο 8), το νέο μοντέλο δεν αναμένεται να αλλάξει σημαντικά τα αποτελέσματα λόγω των μικρών τιμών της χαρακτηριστικής ταχύτητας τύρβης. Συνεπώς το νέο μοντέλο αναμένεται να έχει την ίδια καλή συμφωνία όπως είχε και το αρχικό μοντέλο καύσης.

Κεφάλαιο 10

Επίλογος

Many of life's failures are people who did not realize how close they were to success when they gave up
Thomas A. Edison

Ο κύριος σκοπός της διδακτορικής διατριβής ο οποίος ήταν η ανάπτυξη ενός γρήγορου και αξιόπιστου μοντέλου υπολογιστικής ρευστομηχανικής για προσομοιώσεις εκρήξεων αέριου μείγματος υδρογόνου-αέρα, επιτεύχθηκε. Χρησιμοποιήθηκε και βελτιώθηκε ένα μοντέλο καύσης το οποίο λαμβάνει υπ' όψιν του ένα πλήθος φυσικών διεργασιών οι οποίες συμβαίνουν σε μια έκρηξη υδρογόνου. Στη συνέχεια παρουσιάζουμε τα γενικά συμπεράσματα της εργασίας, τη συμβολή της στην επιστήμη, προτάσεις για μελλοντική έρευνα και τέλος τις επιστημονικές δημοσιεύσεις οι οποίες παρήχθησαν κατά τη διάρκεια της διατριβής αυτής.

10.1 Γενικά συμπεράσματα

Πέραν των ειδικών συμπερασμάτων που παρουσιάστηκαν στο τέλος των Κεφαλαίων 5 έως 9, από την παρούσα διατριβή προκύπτουν και κάποια γενικότερα συμπεράσματα τα οποία είναι τα εξής:

- Η γενική συμπεριφορά της μεθοδολογίας που ακολουθήθηκε και η συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα ήταν πολύ καλή. Προβλέφθηκαν επιτυχώς και με ακρίβεια ένα πλήθος διαφορετικών περιπτώσεων εκρήξεων: έκρηξη μικρής κλίμακας σε περιβάλλον με εμπόδια, μεγάλης κλίμακας έκρηξη σε ελεύθερο περιβάλλον, έκρηξη σε μοντέλο οδικής σήραγγας με και χωρίς εμπόδια και έκρηξη σε δοχείο με άνοιγμα.
- Σύμφωνα με τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων, φαίνεται ότι οι βασικοί μηχανισμοί επιτάχυνσης της φλόγας πραγματοποιούνται σε υποπλεγματική κλίμακα και εξαρτώνται από τις αστάθειες που δημιουργούνται στο μέτωπο της. Αυτά τα φαινόμενα αναπτύσσονται ανεξάρτητα από το αν το περιβάλλον στο οποίο προελαύνει η φλόγα είναι τυρβώδες ή όχι και ως εκ τούτου δεν πρέπει να συσχετίζονται με τη τύρβη που προβλέπεται κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης. Συνεπώς, η χρήση των κλασικών μοντέλων που έχουν αναπτυχθεί για την τυρβώδη ταχύτητα καύσης και οι οποίες τη συσχετίζουν με τη χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης, δεν έχουν την απαιτούμενη θεωρητική βάση για να προβλέψουν από μόνες τους τον ρυθμό καύσης σε φαινόμενα σαν αυτά που εξετάσαμε.
- Η μέθοδος LES συγκριτικά με τη μέθοδο RANS, είχε καλύτερη συμφωνία με το πείραμα για τις περιπτώσεις μεσαίας και μεγάλης κλίμακας. Οι διαφορές όμως δεν ήταν σημαντικές, καθώς δεν υπήρξε ουσιαστική μεταβολή της μορφής των καμπυλών υπερπίεσης. Αυτό σημαίνει ότι καλύτερη συμφωνία με το πείραμα, θα μπορούσε ενδεχομένως να επιτευχθεί και στα μοντέλα τύπου RANS, χρησιμοποιώντας ελαφρώς διαφορετικές τιμές κάποιων εκ των σταθερών του

μοντέλου καύσης. Επιπλέον, το μοντέλο k-ε ήταν αυτό που σε συνδυασμό με την παραλλαγή του μοντέλου καύσης που αναπτύχθηκε στη παρούσα διατριβή οδήγησε σε καλύτερη συμφωνία με το πείραμα. Όλα τα παραπάνω, θέτουν υπό αμφισβήτηση την υπεροχή της χρησιμοποιούμενης μεθόδου LES έναντι της μεθόδου RANS, για σενάρια παρόμοια με αυτά που εξετάστηκαν στην παρούσα διατριβή.

- Η διάσταση της φράκταλ γεωμετρίας αποτελεί σημαντική παράμετρο για το μοντέλο καύσης για εφαρμογές μεγάλης κλίμακας. Η τιμή της είναι δύσκολο να προσδιοριστεί εκ των προτέρων. Όπως είδαμε η τιμή 2.3 παρουσίασε την καλύτερη συμφωνία με το πείραμα στην περίπτωση της έκρηξης μεγάλης κλίμακας σε ελεύθερο περιβάλλον, ενώ η τιμή 2.1 στην περίπτωση της έκρηξης μικρότερης κλίμακας σε σήραγγα. Συνεπώς, φαίνεται ότι η διάσταση φράκταλ πρέπει να λαμβάνει μικρότερες τιμές σε εκρήξεις μεσαίας κλίμακας οι οποίες περιορίζονται σε μεγάλο βαθμό από τη γεωμετρία του προβλήματος, όπως δηλαδή είναι η περίπτωση της έκρηξης στη σήραγγα. Η υπόθεση αυτή παρόλα αυτά πρέπει να ελεγχθεί και σε άλλα πειράματα.
- Η εμπειρική σχέση των North & Santavica (1990) προβλέπει μικρές και μεσαίες τιμές της διάστασης φράκταλ, με αποτέλεσμα η πρόβλεψη να μην είναι σε καλή συμφωνία με το πείραμα στην περίπτωση έκρηξης μεγάλης κλίμακας σε ελεύθερο περιβάλλον. Αυτό οφείλεται στην εξάρτηση της από τη χαρακτηριστική ταχύτητα της τύρβης u'_0 η οποία όπως είδαμε στις περισσότερες περιπτώσεις δεν λαμβάνει ιδιαίτερα μεγάλες τιμές σε σύγκριση με την μεγάλη ταχύτητα στρωτής καύσης του υδρογόνου.
- Το αρχικό μοντέλο καύσης βρέθηκε ότι δεν μπορεί να προσομοιώσει με ακρίβεια την έκρηξη σε κλειστό χώρο μεσαίας κλίμακας με άνοιγμα, λόγω υποεκτίμησης της εξωτερικής έκρηξης. Οι αλλαγές του μοντέλου που προτάθηκαν για τις περιπτώσεις αυτές, οδήγησαν σε πολύ καλύτερη συμφωνία με το πείραμα. Τα νέα μοντέλα, φάνηκε ότι έχουν τη δυνατότητα να χρησιμοποιηθούν και σε άλλες περιπτώσεις εκρήξεων πέραν αυτής που δοκιμάστηκαν.
- Αν και το μοντέλο καύσης χρησιμοποιήθηκε κυρίως για το υδρογόνο, η προσομοίωση με καύσιμο το προπάνιο (§6.3.5) αλλά και η θεωρητική βάση του μοντέλου, υποδεικνύουν ότι αυτό είναι κατάλληλο και μπορεί να χρησιμοποιηθεί και για άλλα αέρια καύσιμα.
- Ο κώδικας ADREA-HF ο οποίος χρησιμοποιήθηκε και επεκτάθηκε για τις ανάγκες της διατριβής, αποδείχτηκε ότι αποτελεί ένα γρήγορο και αξιόπιστο εργαλείο για την προσομοίωση φαινομένων έκρηξης αερίων καυσίμων. Επιπλέον, η επέκταση του κώδικα έγινε με τέτοιο τρόπο ώστε η ενσωμάτωση επιπλέον μοντέλων ή την μετατροπή αυτών που ήδη υπάρχουν να γίνεται με σχετικά απλό τρόπο.
- Η μεθοδολογία της υπολογιστικής ρευστομηχανικής φάνηκε ότι μπορεί να αποτελέσει ένα αξιόπιστο και πολύ δυνατό εργαλείο για την εκτίμηση των επιπτώσεων μιας έκρηξης αέριου μείγματος καυσίμου-αέρα σε πρακτικές εφαρμογές. Απαιτείται όμως αξιολόγηση των μοντέλων σε ευρύ φάσμα εφαρμογών, έτσι ώστε να καλυφθεί το μεγάλο πλήθος των περιπτώσεων που συναντάμε στην πραγματικότητα.

10.2 Συμβολή της διατριβής στην επιστήμη

Η παρούσα εργασία συνέβαλε στην κάλυψη κάποιων από τα κενά που υπήρχαν στη βιβλιογραφία και προσέφερε στην πρόοδο της επιστήμης για τους εξής λόγους:

- Προτάθηκε και δοκιμάστηκε μια μετατροπή του μοντέλου καύσης για τον ορθότερο υπολογισμό της κρίσιμης ακτίνας μετάβασης στην αστάθεια θερμοδιάχυσης. Η μετατροπή αυτή έκανε το μοντέλο καύσης να είναι πιο συνεπές με τη φυσική του φαινομένου, οδηγώντας στην καλύτερη συμφωνία με το πείραμα.
- Δοκιμάστηκαν νέες εφαρμογές του μοντέλου καύσης και διερευνήθηκαν τα όρια ισχύος του. Διαπιστώθηκε ότι το μοντέλο είναι ικανό να αναπαραστήσει με μεγάλη ακρίβεια ακόμα και περιπτώσεις έκρηξης πολύ μικρής κλίμακας με εμπόδια. Από την άλλη διαπιστώθηκε ότι το μοντέλο υποεκτιμά σημαντικά την πίεση σε κλειστό χώρο μεσαίας κλίμακας με ανοίγματα, αφού δεν αναπαράγει την αύξηση του ρυθμού καύσης στην εξωτερική έκρηξη.
- Αναπτύχθηκαν δύο καινοτόμες μετατροπές του μοντέλου καύσης έτσι ώστε να καταφέρουμε να αναπαραστήσουμε με ακρίβεια το φαινόμενο της εξωτερικής έκρηξης. Η πρώτη παραλλαγή του μοντέλου, αναπτύχθηκε στα πλαίσια της μεθόδου LES και οδήγησε σε καλύτερη συμφωνία με το πείραμα. Η δεύτερη παραλλαγή αναπτύχθηκε στα πλαίσια της μεθόδου RANS και δοκιμάστηκε σε συνδυασμό με το μοντέλο k-ε. Η συμφωνία του νέου αυτού μοντέλου με το πείραμα ήταν εξαιρετική.
- Έγινε για πρώτη φορά συστηματική μελέτη της επίδρασης των μοντέλων τύρβης στα φαινόμενα έκρηξης προαναμεμιγμένου μείγματος καυσίμου αέρα. Η μελέτη αυτή αποτέλεσε τη βάση για τη δημιουργία της δεύτερης βελτιωμένης παραλλαγής του μοντέλου.

10.3 Προτάσεις για μελλοντική έρευνα

Η παρούσα διατριβή αναδεικνύει κάποια ζητήματα που θα ήταν πολύ ενδιαφέροντα για μελλοντική έρευνα. Ως παράδειγμα αναφέρονται τα εξής:

- **Χρήση σύνθετης χημείας.** Όπως είδαμε στην περίπτωση της έκρηξης στοιχειομετρικού μείγματος υδρογόνου-αέρα σε κλειστό δοχείο (§5.2), η προβλεπόμενη μέγιστη πίεση είναι μεγαλύτερη της πειραματικής λόγω του απλοποιημένου μοντέλου καύσης μίας εξίσωσης που χρησιμοποιήθηκε. Αν και από άποψη ασφάλειας η πρόβλεψη μεγαλύτερης της πραγματικής πίεσης και θα μπορούσε υπό προϋποθέσεις να θεωρηθεί ακόμα και επιθυμητή, κάτι το οποίο χρειάζεται να διερευνηθεί είναι η χρήση πιο σύνθετης χημείας. Αυτό θα μπορούσε να γίνει είτε αλλάζοντας τη θερμογόνο δύναμη του καυσίμου (στη περίπτωση μας τις ενθαλπίες σχηματισμού των ουσιών που συμμετέχουν στην αντίδραση) έτσι ώστε να επιτυγχάνεται η πειραματικώς προβλεπόμενη θερμοκρασία και πίεση, είτε θεωρώντας μοντέλο δύο ή και περισσότερων χημικών αντιδράσεων. Η σύγκριση πρέπει να γίνει με αξιόπιστα πειράματα, που να επιβεβαιώνουν τα φαινόμενα που σχετίζονται με ενεργειακές απώλειες (π.χ. φαινόμενο του διαχωρισμού των προϊόντων). Οι προσεγγίσεις αυτές είναι πιο σημαντικό να εξεταστούν σε στοιχειομετρικές συνθήκες όπου η θερμοκρασία της καύσης είναι μεγαλύτερη, καθώς σε αραιά μείγματα η προσέγγιση της καύσης σε ένα βήμα αναμένεται να είναι πιο ικανοποιητική. Χρησιμοποιώντας πιο σύνθετη χημεία, οι τιμές των παραμέτρων του μοντέλου καύσης ενδέχεται όπως είναι φυσικό να χρειαστούν κάποιες μεταβολές ώστε να υπάρχει η καλύτερη δυνατή συμφωνία με τα πειράματα. Οι μεταβολές αυτές όμως δεν αναμένεται να είναι σημαντικές.
- **Αξιολόγηση των παραλλαγών του μοντέλου καύσης που προτάθηκε σε περισσότερες περιπτώσεις.** Οι παραλλαγές του μοντέλου καύσης που προτάθηκαν, οδήγησαν σε βελτίωση των αποτελεσμάτων στην περίπτωση έκρηξης σε κλειστό χώρο με άνοιγμα. Οι παραλλαγές

αυτές θα πρέπει να δοκιμαστούν σε περιπτώσεις παρόμοιες με αυτές που παρουσιάσαμε στη Διατριβή, αλλά κυρίως σε άλλες περιπτώσεις εκρήξεων σε κλειστούς χώρους με ανοίγματα, έτσι ώστε να διαπιστωθεί το εύρος εφαρμογής των νέων μοντέλων. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον εμφανίζουν τα πειράματα των Bauwens et al. (2011), καθώς είναι μεγαλύτερης κλίμακας αλλά όμοιας γεωμετρίας με αυτή του πειράματος που εξετάσαμε εδώ.

- **Συντελεστές Ξ .** Μία ιδέα η οποία αξίζει να διερευνηθεί, αφορά τους συντελεστές Ξ_f και Ξ_k . Οι συντελεστές αυτοί θα ήταν ίσως πιο φυσικό να εξαρτώνται από τον χρόνο και όχι από την απόσταση από το σημείο έναυσης. Αυτό θα μπορούσε να είναι σημαντικό σε περιπτώσεις στις οποίες υπάρχει έντονη μεταφορά της φλόγας από το πεδίο ροής.
- **Μη-ομογενή μείγματα.** Τα μη-ομογενή μείγματα έχουν τύχει στη βιβλιογραφία μικρότερης προσοχής, όσον αφορά τη μοντελοποίηση τους, παρά τη μεγάλη πρακτική σημασία τους. Θα ήταν σημαντικό, λοιπόν, το μοντέλο καύσης να αξιολογηθεί έναντι πειραμάτων μη-ομογενούς μείγματος καυσίμου-αέρα, έτσι ώστε να διαπιστωθεί η δυνατότητα του να προβλέψει με ακρίβεια τέτοιες εκρήξεις, και να προταθούν βελτιώσεις του αν κριθεί απαραίτητο.
- **Βελτίωση του μοντέλου καύσης στη περιοχή κοντά στα τοιχώματα στη περίπτωση του μοντέλου k-ε.** Όπως φάνηκε από τις προσομοιώσεις που έγιναν, τα μοντέλα k-ε προβλέπουν υψηλές τιμές της χαρακτηριστικής ταχύτητας τύρβης στη περιοχή κοντά στα τοιχώματα, οι οποίες μπορούν να οδηγήσουν σε υψηλές τιμές του ρυθμού καύσης στις περιοχές αυτές. Για τη βελτίωση λοιπόν του μοντέλου καύσης, θα ήταν χρήσιμο να αναπτυχθεί μια τεχνική ορθότερου υπολογισμού του ρυθμού καύσης στις περιοχές κοντά στα τοιχώματα.
- **Περαιτέρω έρευνα πάνω στο LES σε εκρήξεις μεσαίας και μεγάλης κλίμακας.** Όπως φάνηκε από τις προσομοιώσεις που έγιναν, η μέθοδος που ακολουθείται για την τύρβη μπορεί να αποτελέσει σημαντικό παράγοντα για την επιτυχία ή μη ενός μοντέλου καύσης. Η εφαρμογή της μεθόδου LES με (κατά πολύ) μεγαλύτερη χωροχρονική ανάλυση σε προβλήματα μεσαίας και μεγάλης κλίμακας, είναι κάτι το οποίο αξίζει να εξεταστεί, έτσι ώστε να αυξηθεί το ποσοστό της επιλυόμενης τύρβης. Αυτό που αξίζει επίσης να εξεταστεί στο μέλλον, είναι η εφαρμογή ενός πιο εξελιγμένου υποπλεγματικού μοντέλου LES, όπως είναι το δυναμικό μοντέλο Smagorinsky. Όπως είδαμε το δυναμικό μοντέλο Smagorinsky έχει χρησιμοποιηθεί στη βιβλιογραφία για την περίπτωση έκρηξης μικρής κλίμακας, επιδεικνύοντας καλά αποτελέσματα. Ωστόσο, δεν έχει εξεταστεί και αναλυθεί, το κατά πόσο η καλή συμφωνία με το πείραμα οφείλεται σε αυτό, και αν το απλό μοντέλο Smagorinsky θα προέβλεπε παρόμοια αποτελέσματα.

10.4 Επιστημονικές δημοσιεύσεις

Κατά τη διάρκεια της διατριβής παρήχθησαν μια σειρά δημοσιεύσεων σε επιστημονικά περιοδικά και συνέδρια σχετικές (άμεσα ή έμμεσα) με την παρούσα διατριβή. Οι αναφορές στις δημοσιεύσεις αυτές είναι οι εξής:

Δημοσιεύσεις σε διεθνή περιοδικά με κριτές

1. Toliás I.C., Stewart J.R., Newton A., Keenan J., Makarov D., Hoyes J.R., Molkov V. and Venetsanos A.G., Numerical simulations of vented hydrogen deflagrations in a medium-scale enclosure, *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 2017, under revision.

2. Talias I.C., Venetsanos A.G., Markatos N. and Kiranoudis C.T., CFD evaluation against a large scale unconfined hydrogen deflagration, *International Journal of Hydrogen Energy*, **12** (11), 7731–7739, 2017.
3. Baraldi D., Melideo D., Kotchourko A., Ren K., Yanez J., Jedicke O., Giannissi S.G., Talias I.C., et al., Development of a model evaluation protocol for CFD analysis of hydrogen safety issues the SUSANA project, *International Journal of Hydrogen Energy*, **42** (11), 7633–7643, 2017.
4. Giannissi S.G., Talias I.C. and Venetsanos A.G., Mitigation of buoyant gas releases in single-vented enclosure exposed to wind: Removing the disrupting wind effect, *International Journal of Hydrogen Energy*, **41** (6), 4060-4071, 2016.
5. Talias, I.C., Venetsanos, A.G., Markatos, N. and Kiranoudis, C.T., CFD modeling of hydrogen deflagration in a tunnel, *International Journal of Hydrogen Energy*, **39** (35), 20538-46, 2014.
6. Koutsourakis, N., Talias, I.C., Venetsanos, A.G. and Bartzis, J.G., Evaluation of an LES code against a hydrogen dispersion experiment, *CFD Letters*, **4** (4), 225-236, 2012.

Δημοσιεύσεις σε διεθνή συνέδρια

1. Talias I.C., Venetsanos A.G., Vagiokas N., CFD modeling of vapor cloud explosion, cold BLEVE and hot BLEVE in a large scale tunnel, *12th International Conference on Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics (HEFAT2016)*, Costa del Sol, Spain, 11-13 July, 2016.
2. Baraldi D., Melideo D., Kotchourko A., Ren K., Yanez J., Jedicke O., Keenan J., Makarov D., Molkov V., Giannissi S.G., Talias I.C., et al., HYMEP The Model Evaluation Protocol for CFD analysis of hydrogen safety issues, *21st World Hydrogen Energy Conference, Zaragoza (WHEC2016)*, Spain, 13-16th June, 2016.
3. Koutsourakis N., Bartzis J.G., Efthimiou G.C., Venetsanos A.G., Talias I.C., Markatos N.C., Hertwig D., Leiti B., LES study of unsteady flow phenomena in an urban geometry – the need for special evaluation methods, *17th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes (HARMO 17)*, Budapest, Hungary, 9-12 May, 2016.
4. Talias I.C., Venetsanos A.G., Markatos N.C., Kiranoudis C.T., CFD evaluation against a large scale unconfined hydrogen deflagration, *6th International Conference on Hydrogen Safety (ICHS2015)*, Yokohama, Japan, 19-21 October, 2015.
5. Talias I.C., Venetsanos A.G., Comparison of convective schemes in Hydrogen Impinging Jet CFD simulation, *6th International Conference on Hydrogen Safety (ICHS2015)*, Yokohama, Japan, 19-21 October, 2015.
6. Giannissi S.G., Talias I.C., Venetsanos A.G., Removing the disrupting wind effect in single-vented enclosure exposed to external wind, *6th International Conference on Hydrogen Safety (ICHS2015)*, Yokohama, Japan, 19-21 October, 2015.
7. Baraldi D., Melideo D., Kotchourko A., Ren K., Yanez J., Jedicke O., Giannissi S.G., Talias I.C., et al., Development of a model evaluation protocol for CFD analysis of hydrogen safety issues - the SUSANA project, *6th International Conference on Hydrogen Safety (ICHS2015)*, Yokohama, Japan, 19-21 October, 2015.
8. Talias I.C., Venetsanos A.G., Markatos N.C., Kiranoudis C.T., Application of CFD to hydrogen deflagration in a vented enclosure, *4th International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences (IC-MSQUARE)*, Mykonos, Greece, June 5-8, 2015.
9. Talias I.C., Venetsanos A.G., Markatos N.C., CFD simulation of a large scale unconfined hydrogen deflagration, *17th International Conference on Computational Fluid Dynamics (ICCFD 2015)*, Amsterdam, The Netherlands, May 14-15, 2015.
10. Coldrick S., Kelsey A., Chernyavskiy B., Makarov D., Molkov V., Balardi D., Melideo D., Giannissi S.G., Talias I.C., Venetsanos A.G., A model evaluation protocol for Computational Fluid Dynamics (CFD) models used in safety analyses for hydrogen and fuel cell technologies, *Hazards 25 Conference*, Edinburgh, UK, May 13-15, 2015.
11. Talias I.C., Venetsanos A.G., Markatos N.C. and Kiranoudis C.T., CFD simulation of hydrogen deflagration in a vented room, *XXVI IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2014)*, Boston, 11-14 August, 2014.
12. Talias I.C., Venetsanos A.G. and Markatos N., Evaluation of the ADREA-HF CFD Code Against a Hydrogen Deflagration in a Tunnel, *5th International Conference on Hydrogen Safety (ICHS2013)*, Brussels, Belgium, 9-11 Sept, 2013.
13. Venetsanos A.G., Talias I., Baraldi D., Benz S., Cariteau B., Garcia J., Hansen O.R., Jäkel C., Ledin S., Middha P., Papanikolaou E.A., Ia-Hysafe Standard Benchmark Exercise Sbep-V21: Hydrogen Release And

- Accumulation Within A Non-Ventilated Ambient Pressure Garage At Low Release Rates, *4th International Conference on Hydrogen Safety (ICHS2011)*, San Francisco, USA, 12-14 Sept., 2011.
14. Toliás I.C., Papadimitriou N.I., Venetsanos A.G., Benefits from the parallel computational mechanics programs in modern low-cost shared memory architectures, *7th International Congress on Computational Mechanics (GRACM)*, Athens, 30 June – 2 July, 2011.
 15. Koutsourakis N., Venetsanos A.G., Bartzís J.G., Toliás I.C., Markatos N.C., Pollutant Dispersion Study In Asymmetric Street Canyons Using Large Eddy Simulation, *7th International Congress on Computational Mechanics (GRACM)*, Athens, 30 June – 2 July, 2011.
 16. Koutsourakis N., Venetsanos A.G., Bartzís J.G., Toliás I.C., Presentation of new LES Capability of ADREA-HF CFD Code, *Proceedings of the 13th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes (HARMO 13)*, Paris, France, p 662-666, 1-4 June, 2010.

Δημοσιεύσεις σε ελληνικά συνέδρια

1. Koutsourakis N., Venetsanos A.G., Bartzís J.G., Toliás I.C., Markatos N.C., Analysis of coherent structures and unsteady turbulent phenomena in a semi-idealized city using Large Eddy Simulation, *9th Hellenic Conference in Fluid Mechanism phenomena (POH 2014)* (in Greek), Athens, Greece, 12-13 December, 2014.
2. Toliás I.C., Venetsanos A.G., Giannisi S.G., Parallelization of the Computational Fluid Dynamic code ADREA-HF and Application in Hydrogen Dispersion, *8th National Scientific Conference in Chemical Engineering (ΠΕΣΧΜ)*, Thessaloniki, Greece, 26-28 May, 2011.

Παράρτημα Α

Λεπτομέρειες σχέσεων και μεθόδων

A.1 Άλλες μορφές της εξίσωσης ενέργειας

Μη-ολοκληρωμένη (στιγμαία) μορφή της εξίσωσης ενέργειας

Εδώ θα παρουσιάσουμε μια διαφορετική μορφή της εξίσωσης ενέργειας που παρουσιάστηκε στην παράγραφο 3.1.1. Ο όρος που θα γραφτεί διαφορετικά είναι ο όρος της ροής ενέργειας λόγω διάχυσης. Αυτή η μορφή της εξίσωσης ενέργειας παρουσιάζεται π.χ. από τους Veynante & Vervisch (2002).

Η ενθαλπία του μείγματος μπορεί να δοθεί μέσω των μερικών ενθαλπιών και του κλάσματος μάζας

του κάθε συστατικού από τη σχέση $h = \sum_{k=1}^N h_k Y_k$. Συνεπώς έχουμε ότι

$$\frac{\partial h}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{k=1}^N h_k Y_k \right) = \sum_{k=1}^N \frac{\partial}{\partial x_j} (h_k Y_k) = \sum_{k=1}^N \left(h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} + Y_k \frac{\partial h_k}{\partial x_j} \right) \quad (\text{A.1.1})$$

Όμως $h_k = C_{pk} T$ όπου C_{pk} η θερμοχωρητικότητα του συστατικού k . Κάνοντας την υπόθεση ότι το

C_{pk} δεν μεταβάλλεται χωρικά και χρησιμοποιώντας τη σχέση $C_p = \sum_{k=1}^N C_{pk} Y_k$, η παραπάνω σχέση γίνεται

$$\frac{\partial h}{\partial x_j} = \sum_{k=1}^N \left(h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} + Y_k C_{pk} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) = \sum_{k=1}^N h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} + \frac{\partial T}{\partial x_j} \sum_{k=1}^N Y_k C_{pk} = \sum_{k=1}^N h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} + C_p \frac{\partial T}{\partial x_j} \quad (\text{A.1.2})$$

Χρησιμοποιώντας τις σχέσεις $\text{Pr} = \frac{\mu C_p}{\lambda}$ και $\text{Sc}_k = \frac{\mu}{\rho D_k}$ των αριθμών Prandtl και Schmidt και

προσθαφαιρώντας τον όρο $\frac{\mu}{\text{Pr}} \sum_{k=1}^N h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j}$, η ροή ενέργειας λόγω διάχυσης θα ισούται με

$$F_j^h = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} - \rho \sum_{k=1}^N D_k h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} = -\frac{\mu C_p}{\text{Pr}} \frac{\partial T}{\partial x_j} - \sum_{k=1}^N \frac{\mu}{\text{Sc}_k} h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} = \left(-\frac{\mu C_p}{\text{Pr}} \frac{\partial T}{\partial x_j} - \frac{\mu}{\text{Pr}} \sum_{k=1}^N h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right) - \sum_{k=1}^N \frac{\mu}{\text{Sc}_k} h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} + \frac{\mu}{\text{Pr}} \sum_{k=1}^N h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \quad (\text{A.1.3})$$

οπότε χρησιμοποιώντας την σχέση (A.1.2) για την ολική ενθαλπία προκύπτει:

$$F_j^h = -\frac{\mu}{\text{Pr}} \frac{\partial h}{\partial x_j} + \mu \sum_{k=1}^N \left(\frac{1}{\text{Pr}} - \frac{1}{\text{Sc}_k} \right) h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \quad (\text{A.1.4})$$

Ολοκληρωμένη μορφή της εξίσωσης ενέργειας

Εδώ θα αποδείξουμε την σχέση (3.1.23) που είναι η κατά Favre μέση χρονικά εξίσωση διατήρησης της στατικής ενθαλπίας. Η ολοκλήρωση της εξίσωσης διατήρησης της στατικής ενθαλπίας δίνει:

$$\frac{\partial \overline{\rho \tilde{h}}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u_j h}) = \frac{\overline{Dp}}{Dt} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{F_j^h}) + \overline{\tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}} \quad (\text{A.1.5})$$

όπου

$$\overline{F_j^h} = -\lambda \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j} - \sum_{k=1}^N \overline{\rho D_k h_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \quad (\text{A.1.6})$$

Σε πρώτη φάση γίνονται οι εξής προσεγγίσεις:

$$\overline{F_j^h} = -\bar{\lambda} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} - \sum_{k=1}^N \bar{\rho} \bar{D}_k \tilde{h}_k \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} \quad (\text{A.1.7})$$

$$\overline{\tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}} = \bar{\tau}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \quad (\text{A.1.8})$$

ενώ στην ολική παράγωγο της πίεσης, αμελείται ο τελευταίος όρος (Poinsot & Veynante 2005):

$$\frac{\overline{Dp}}{Dt} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + u_j \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \tilde{u}_j \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + u_j'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \approx \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \tilde{u}_j \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \equiv \frac{D\bar{p}}{Dt} \quad (\text{A.1.9})$$

Ο πιο σημαντικός προς μοντελοποίηση όρος είναι ο $\overline{\rho u_j h}$ που προέκυψε από την ολοκλήρωση του όρου μεταφοράς $\rho u_j h$. Θεωρώντας τη σχέση $h = \sum_{k=1}^N h_k Y_k$ που συνδέει την ενθαλπία του μείγματος με την ενθαλπία των συστατικών, έχουμε:

$$\begin{aligned} \overline{\rho u_j h} &= \overline{\rho u_j \sum_{k=1}^N h_k Y_k} = \sum_{k=1}^N \overline{\rho u_j h_k Y_k} = \sum_{k=1}^N \overline{\rho (\tilde{u}_j + u_j'') (\tilde{h}_k + h_k'') (\tilde{Y}_k + Y_k'')} = \\ &= \sum_{k=1}^N \left(\overline{\rho \tilde{u}_j \tilde{h}_k \tilde{Y}_k} + \overline{\rho \tilde{u}_j \tilde{h}_k Y_k''} + \overline{\rho \tilde{u}_j h_k'' \tilde{Y}_k} + \overline{\rho \tilde{u}_j h_k'' Y_k''} \right) + \\ &= \sum_{k=1}^N \left(\overline{\rho u_j'' \tilde{h}_k \tilde{Y}_k} + \overline{\rho u_j'' \tilde{h}_k Y_k''} + \overline{\rho u_j'' h_k'' \tilde{Y}_k} + \overline{\rho u_j'' h_k'' Y_k''} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.1.10})$$

Οι όροι που διαγράφονται είναι μηδενικοί καθώς $\overline{\tilde{u}f} = \tilde{u}\bar{f}$ και $\overline{\rho u''} = 0$. Από τους υπόλοιπους όρους, αυτοί που περιέχουν συσχετίσεις των διακυμάνσεων κλάσματος μάζας με διακυμάνσεις ενθαλπίας θεωρούνται μικρή και αμελούνται, οπότε τελικά προκύπτει:

$$\overline{\rho u_j h} = \sum_{k=1}^N \left(\overline{\rho \tilde{u}_j \tilde{h}_k \tilde{Y}_k} + \overline{\rho u_j'' \tilde{h}_k Y_k''} + \overline{\rho u_j'' h_k'' \tilde{Y}_k} \right) \quad (\text{A.1.11})$$

η οποία λόγω των σχέσεων $\overline{\tilde{u}f} = \tilde{u}\bar{f}$, $\overline{\rho u'' f''} = \bar{\rho} \tilde{u}'' f''$ γίνεται

$$\overline{\rho u_j h} = \sum_{k=1}^N \left(\overline{\rho \tilde{u}_j \tilde{h}_k \tilde{Y}_k} + \overline{\rho \tilde{h}_k \tilde{u}_j \tilde{Y}_k''} + \overline{\rho \tilde{Y}_k \tilde{u}_j \tilde{h}_k''} \right) \quad (\text{A.1.12})$$

Οι τρεις όροι του αθροίσματος μοντελοποιούνται ως εξής. Για τον πρώτο όρο έχουμε:

$$\sum_{k=1}^N \left(\overline{\rho \tilde{u}_j \tilde{h}_k \tilde{Y}_k} \right) = \overline{\rho \tilde{u}_j} \sum_{k=1}^N \left(\tilde{h}_k \tilde{Y}_k \right) \approx \overline{\rho \tilde{u}_j} \tilde{h} \quad (\text{A.1.13})$$

ενώ για τον δεύτερο και τον τρίτο θεωρούμε ότι

$$\overline{\rho \tilde{u}_j \tilde{Y}_k''} = -\frac{\mu_t}{Sc_t} \nabla \tilde{Y}_k \quad (\text{A.1.14})$$

$$\overline{\rho \tilde{u}_j \tilde{h}_k''} = -\frac{\mu_t}{Pr_t} \nabla \tilde{h}_k \quad (\text{A.1.15})$$

άρα καταλήγουμε στη σχέση

$$\overline{\rho u_j h} = \overline{\rho \tilde{u}_j} \tilde{h} - \frac{\mu_t}{Sc_t} \sum_{k=1}^N \tilde{h}_k \nabla \tilde{Y}_k - \frac{\mu_t}{Pr_t} \sum_{k=1}^N \tilde{Y}_k \nabla \tilde{h}_k \quad (\text{A.1.16})$$

η οποία προσταφέροντας τον όρο $\frac{\mu_t}{Pr_t} \sum_{k=1}^N \left(\tilde{h}_k \nabla \tilde{Y}_k \right)$ μπορεί να γραφεί και στη μορφή

$$\overline{\rho u_j h} = \overline{\rho \tilde{u}_j} \tilde{h} - \frac{\mu_t}{Pr_t} \sum_{k=1}^N \left(\tilde{h}_k \nabla \tilde{Y}_k + \tilde{Y}_k \nabla \tilde{h}_k \right) + \mu_t \left(\frac{1}{Pr_t} - \frac{1}{Sc_t} \right) \sum_{k=1}^N \tilde{h}_k \nabla \tilde{Y}_k \quad (\text{A.1.17})$$

και υποθέτοντας πάλι τη σχέση (A.1.13):

$$\overline{\rho u_j h} = \overline{\rho \tilde{u}_j} \tilde{h} - \frac{\mu_t}{Pr_t} \nabla \tilde{h} + \mu_t \left(\frac{1}{Pr_t} - \frac{1}{Sc_t} \right) \sum_{k=1}^N \tilde{h}_k \nabla \tilde{Y}_k \quad (\text{A.1.18})$$

Μια υπόθεση που συχνά γίνεται είναι ότι $Pr_t = Sc_t$, οπότε η σχέση απλοποιείται στην τελική

$$\overline{\rho u_j h} = \overline{\rho \tilde{u}_j} \tilde{h} - \frac{\mu_t}{Pr_t} \nabla \tilde{h} \quad (\text{A.1.19})$$

Άρα η μέση εξίσωση ενέργειας είναι

$$\frac{\partial \overline{\rho h}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho \tilde{u}_j} \tilde{h} \right) = \frac{D\overline{p}}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\lambda} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} + \sum_{k=1}^N \overline{\rho D_k} \tilde{h}_k \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} \right) + \bar{\tau}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \quad (\text{A.1.20})$$

Μια εναλλακτική της μορφή μπορεί να γραφεί αν στην (A.1.16) γράψουμε τον τρίτο όρο κάνοντας συναρτήσει της θερμοκρασίας χρησιμοποιώντας την σχέση $h_k = C_{pk} T$. Κάνοντας την υπόθεση ότι

το C_{pk} δεν μεταβάλλεται χωρικά και ότι $\bar{C}_p = \sum_{k=1}^N \bar{C}_{pk} \tilde{Y}_k$ προκύπτει:

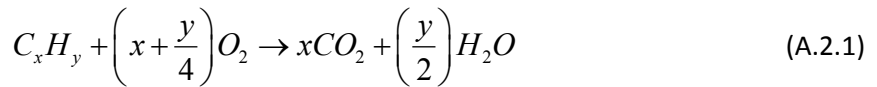
$$\frac{\mu_t}{Pr_t} \sum_{k=1}^N \tilde{Y}_k \nabla \tilde{h}_k = \frac{\mu_t}{Pr_t} \sum_{k=1}^N \tilde{Y}_k \bar{C}_{pk} \nabla \tilde{T} = \frac{\mu_t}{Pr_t} \nabla \tilde{T} \sum_{k=1}^N \tilde{Y}_k \bar{C}_{pk} = \frac{\mu_t \bar{C}_p}{Pr_t} \nabla \tilde{T} \quad (\text{A.1.21})$$

Αυτός ο όρος μπορεί να θεωρηθεί ότι είναι το τυρβώδες μέρος της μετάδοσης θερμότητας με αγωγή, ενώ ο δεύτερος όρος της (Α.1.16) μπορεί να θεωρηθεί σαν το τυρβώδες μέρος της μεταφοράς ενέργειας λόγω διάχυσης των συστατικών. Άρα γράφοντας τους όρους αυτούς μαζί με τους αντίστοιχους όρους που εμφανίζονται και στη στρωτή ροή, η εξίσωση ενέργειας παίρνει τη μορφή:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h}) = \frac{D\bar{p}}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\bar{\lambda} + \frac{\mu_t \bar{C}_p}{Pr_t} \right) \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} + \sum_{k=1}^N \left(\bar{\rho} \bar{D}_k + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \tilde{h}_k \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} \right) + \bar{\tau}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \quad (\text{A.1.22})$$

A.2 Υπόθεση ίσης διάχυσης συστατικών

Όπως αναφέρθηκε στην §3.1, μια προσέγγιση που χρησιμοποιείται συχνά σε τυρβώδεις καύσης είναι αυτή της ίσης διάχυσης μεταξύ των συστατικών που συμμετέχουν στην αντίδραση (προϊόντα και αντιδρώντα). Για παράδειγμα, ας θεωρήσουμε την γενική εξίσωση καύσης υδρογονανθράκων:



Έστω ότι έχουμε προαναμεμειγμένο μείγμα $C_x H_y$ με O_2 και N_2 . Έστω Y_F , Y_{O_2} , Y_{CO_2} , Y_{H_2O} , Y_{N_2} τα κλάσματα μάζας των συστατικών με Y_F^0 , $Y_{O_2}^0$, $Y_{N_2}^0$ τα αρχικά κλάσματα μάζας στο μείγμα ($Y_{O_2}^0$ κλάσμα μάζας στο μείγμα, όχι στον αέρα). Θεωρώντας ίση διάχυση μεταξύ των συστατικών του μείγματος, η μόνη εξίσωση μεταφοράς που χρειάζεται να επιλυθεί είναι αυτή του καυσίμου, με όρο πηγής που θα εξαρτάται από τον ρυθμό της αντίδρασης. Ο ρυθμός αντίδρασης θα μας δώσει την ποσότητα του καυσίμου που καταναλώνεται και η στοιχειομετρία της αντίδρασης την ποσότητα του οξυγόνου που απαιτείται για την καύση της ποσότητας αυτής (πλήρης καύση) καθώς και την ποσότητα του CO_2 και του H_2O . Έτσι αν σε κάποιο σημείο το κλάσμα μάζας του καυσίμου είναι Y_F τα κλάσματα μάζας των υπόλοιπων συστατικών θα είναι:

$$Y_{CO_2} = \frac{\nu_{CO_2} W_{CO_2}}{\nu_F W_F} (Y_F^0 - Y_F) \quad (\text{A.2.2})$$

$$Y_{H_2O} = \frac{\nu_{H_2O} W_{H_2O}}{\nu_F W_F} (Y_F^0 - Y_F) = \frac{\nu_{H_2O} W_{H_2O}}{\nu_{CO_2} W_{CO_2}} Y_{CO_2} \quad (\text{A.2.3})$$

$$Y_{O_2} = Y_{O_2}^0 - \frac{\nu_{O_2} W_{O_2}}{\nu_F W_F} (Y_F^0 - Y_F) = Y_{O_2}^0 - \frac{\nu_{O_2} W_{O_2}}{\nu_{CO_2} W_{CO_2}} Y_{CO_2} \quad (\text{A.2.4})$$

όπου W_k και ν_k το μοριακό βάρος και ο στοιχειομετρικός συντελεστής της ουσίας k . Η θεώρηση ότι όλα τα συστατικά έχουν την ίδια διάχυση ουσιαστικά σημαίνει ότι δεν μπορούν να διαχωριστούν μεταξύ τους, οπότε γνωρίζοντας την ποσότητα ενός από αυτά μπορούμε μέσω των παραπάνω γραμμικών σχέσεων να υπολογίσουμε τις ποσότητες των υπολοίπων (ίδια λογική με το ότι τον αέρα τον θεωρούμε σαν αέρα σταθερής σύστασης σε οξυγόνο και άζωτο). Συνεπώς η

έλλειψη καυσίμου μεταφράζεται σε πραγματοποίηση καύσης, άρα αντικατάσταση της ποσότητας καυσίμου (και του οξυγόνου) που λείπει με τα προϊόντα της αντίδρασης.

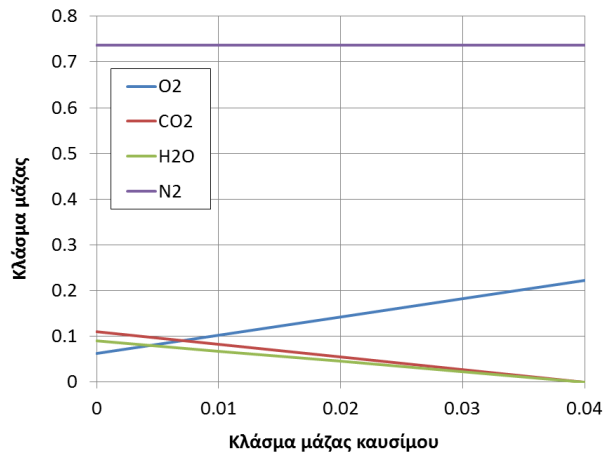
Για την απόδειξη αυτών των σχέσεων, έστω ότι είχαμε αρχικά x_F^0 kg καυσίμου, $x_{O_2}^0$ kg οξυγόνου και $x_{N_2}^0$ kg αζώτου (συνολική μάζα $c = x_F^0 + x_{O_2}^0 + x_{N_2}^0$), με κλάσματα μάζας Y_F^0 , $Y_{O_2}^0$ και $Y_{N_2}^0$ αντίστοιχα. Έστω ότι σε ένα υπολογιστικό κελί έχουν καταναλωθεί y_F kg καυσίμου, τότε η ποσότητα καυσίμου, CO_2 , H_2O και O_2 θα είναι:

$$x_F = x_F^0 - y_F, \quad x_{CO_2} = \frac{v_{CO_2} W_{CO_2}}{v_F W_F} y_F, \quad x_{H_2O} = \frac{v_{H_2O} W_{H_2O}}{v_F W_F} y_F, \quad x_{O_2} = x_{O_2}^0 - \frac{v_{O_2} W_{O_2}}{v_F W_F} y_F \quad (A.2.5)$$

Άρα, για τα κλάσματα μάζας θα έχουμε:

$$\begin{aligned} Y_{CO_2} &= \frac{x_{CO_2}}{c} = \frac{\frac{v_{CO_2} W_{CO_2}}{v_F W_F} y_F}{c} = \frac{v_{CO_2} W_{CO_2}}{v_F W_F} \frac{x_F^0 - x_F}{c} = \frac{v_{CO_2} W_{CO_2}}{v_F W_F} \left(\frac{x_F^0}{c} - \frac{x_F}{c} \right) \\ &= \frac{v_{CO_2} W_{CO_2}}{v_F W_F} (Y_F^0 - Y_F) \\ Y_{H_2O} &= \frac{x_{H_2O}}{c} = \frac{\frac{v_{H_2O} W_{H_2O}}{v_F W_F} y_F}{c} = \frac{v_{H_2O} W_{H_2O}}{v_F W_F} \frac{x_F^0 - x_F}{c} = \frac{v_{H_2O} W_{H_2O}}{v_F W_F} \left(\frac{x_F^0}{c} - \frac{x_F}{c} \right) \\ &= \frac{v_{H_2O} W_{H_2O}}{v_F W_F} (Y_F^0 - Y_F) = \frac{v_{H_2O} W_{H_2O}}{v_F W_F} Y_{CO_2} \frac{v_F W_F}{v_{CO_2} W_{CO_2}} = \frac{v_{H_2O} W_{H_2O}}{v_{CO_2} W_{CO_2}} Y_{CO_2} \\ Y_{O_2} &= \frac{x_{O_2}}{c} = \frac{x_{O_2}^0}{c} - \frac{v_{O_2} W_{O_2}}{v_F W_F} \frac{y_F}{c} = \frac{x_{O_2}^0}{c} - \frac{v_{O_2} W_{O_2}}{v_F W_F} \frac{x_F^0 - x_F}{c} = Y_{O_2}^0 - \frac{v_{O_2} W_{O_2}}{v_F W_F} (Y_F^0 - Y_F) \\ &= Y_{O_2}^0 - \frac{v_{O_2} W_{O_2}}{v_F W_F} Y_{CO_2} \frac{v_F W_F}{v_{CO_2} W_{CO_2}} = Y_{O_2}^0 - \frac{v_{O_2} W_{O_2}}{v_{CO_2} W_{CO_2}} Y_{CO_2} \end{aligned} \quad (A.2.6)$$

Για να γίνουν τα παραπάνω περισσότερο κατανοητά, ας θεωρήσουμε την περίπτωση ενός κλειστού δοχείου με προ-αναμεμειγμένο μείγμα καυσίμου αέρα, στο οποίο σε μια περιοχή του έχει γίνει πλήρης καύση με αποτέλεσμα να μην υπάρχει καθόλου καύσιμο. Επίσης έστω ότι έπεται από αυτό η καύση έχει σταματήσει. Τότε έχουμε μια μικρή περιοχή όπου $Y_F = 0$ (αλλά Y_{CO_2} , Y_{H_2O} και Y_{N_2} διάφορα του μηδενός), ενώ παντού στην υπόλοιπη περιοχή έχουμε $Y_F = Y_F^0$. Λόγω της διάχυσης του καυσίμου, αυτή η ασυνέχεια θα τείνει να εξαφανιστεί, με αποτέλεσμα η συγκέντρωση του καυσίμου στην περιοχή της καύσης να αρχίσει να αυξάνει ενώ στην υπόλοιπη να μειώνεται. Αυτή η μείωση της συγκέντρωσης μεταφράζεται μέσω των παραπάνω σχέσεων σε αύξηση της συγκέντρωσης των προϊόντων, που είναι φυσικό αφού τα προϊόντα διαχέονται και αυτά (και μάλιστα με τον ίδιο τρόπο λόγω της υπόθεσης ίσης διάχυσης) από την περιοχή που είχε καεί. Στο παρακάτω διάγραμμα φαίνονται οι συγκεντρώσεις όλων των συστατικών σε συνάρτηση με το κλάσμα μάζας του καυσίμου, όπως αυτές έχουν προκύψει από τις παραπάνω σχέσεις για CH_4 και για $Y_F^0 = 0.04$, $Y_{O_2}^0 = 0.223$, $Y_{N_2}^0 = 0.737$.



Σχήμα Α.2.1: Κλάσμα μάζας στοιχείων του μείγματος σαν συνάρτηση του κλάσματος μάζας του καυσίμου (μεθάνιο) για αρχική ποσότητα καυσίμου $Y_F^0 = 0.04$.

A.3 Μεταβλητή προόδου

Η μεταβλητή προόδου (progress variable) είναι μια μεταβλητή με την βοήθεια της οποίας μπορούμε να ορίσουμε το μέτωπο της φλόγας και να χωρίσουμε την άκαυστη από την καμένη περιοχή. Μπορεί να οριστεί με πολλούς τρόπους, όπως σαν το κανονικοποιημένο κλάσμα μάζας των προϊόντων από τη σχέση

$$c = \frac{Y_f - Y_f^u}{Y_f^b - Y_f^u} \quad (\text{A.3.1})$$

η οποία αν δεν παραμένει καύσιμο στην καμένη περιοχή (δηλαδή $Y_f^b = 0$ που σημαίνει ότι η αρχική συγκέντρωση είναι μικρότερη της στοιχειομετρικής) απλοποιείται στη σχέση

$$c = 1 - \frac{Y_f}{Y_f^u} \quad (\text{A.3.2})$$

όπου Y_f είναι το κλάσμα μάζας του καυσίμου τοπικά, Y_f^u το κλάσμα μάζας στην άκαυστη περιοχή και Y_f^b το κλάσμα μάζας στην περιοχή που η καύση έχει ολοκληρωθεί. Παρατηρούμε ότι η μεταβλητή προόδου λαμβάνει τιμή 0 στην άκαυστη περιοχή και 1 στην περιοχή όπου έχει ολοκληρωθεί η καύση. Αυτό βέβαια μπορεί να αντιστραφεί αν δοθεί κάποιος διαφορετικός ορισμός της μεταβλητής προόδου. Η εξίσωση διατήρησης η οποία δίνει τη μεταβλητή προόδου είναι η

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) + \nabla \cdot (\rho \bar{u} c) = \nabla \cdot (\rho D \nabla c) + \dot{\omega} \quad (\text{A.3.3})$$

όπου $\dot{\omega}$ ο ρυθμός καύσης. Αντικαθιστώντας τη σχέση (A.3.1) στη σχέση (A.3.3) προκύπτει

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \frac{Y_f - Y_f^u}{Y_f^b - Y_f^u} \right) + \nabla \cdot \left(\rho \bar{u} \frac{Y_f - Y_f^u}{Y_f^b - Y_f^u} \right) = \nabla \cdot \left(\rho D \nabla \frac{Y_f - Y_f^u}{Y_f^b - Y_f^u} \right) + \dot{\omega} \Rightarrow \\
& \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho (Y_f - Y_f^u) \right) + \nabla \cdot \left(\rho \bar{u} (Y_f - Y_f^u) \right) = \nabla \cdot \left(\rho D \nabla (Y_f - Y_f^u) \right) + (Y_f^b - Y_f^u) \dot{\omega} \Rightarrow \\
& \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho Y_f \right) - \cancel{Y_f^u \frac{\partial \rho}{\partial t}} + \nabla \cdot \left(\rho \bar{u} Y_f \right) - \cancel{Y_f^u \nabla \cdot (\rho \bar{u})} = \nabla \cdot \left(\rho D \nabla Y_f \right) + (Y_f^b - Y_f^u) \dot{\omega} \Rightarrow \quad (\text{A.3.4}) \\
& \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho Y_f \right) + \nabla \cdot \left(\rho \bar{u} Y_f \right) = \nabla \cdot \left(\rho D \nabla Y_f \right) + (Y_f^b - Y_f^u) \dot{\omega} \Rightarrow \\
& \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho Y_f \right) + \nabla \cdot \left(\rho \bar{u} Y_f \right) = \nabla \cdot \left(\rho D \nabla Y_f \right) + \dot{\omega}'
\end{aligned}$$

όπου οι όροι που απαλείφονται είναι λόγω της εξίσωσης της συνέχειας. Αν εφαρμόσουμε τη μέθοδο της κλίσης για τον ρυθμό καύσης (§3.2.7), τότε:

$$\dot{\omega} = \rho_u S_t |\nabla c| \quad (\text{A.3.5})$$

οπότε αντικαθιστώντας και εδώ τη σχέση της μεταβλητής προόδου προκύπτει

$$\dot{\omega} = \rho_u S_t |\nabla c| = \rho_u S_t \left| \nabla \frac{Y_f - Y_f^u}{Y_f^b - Y_f^u} \right| = \frac{1}{Y_f^b - Y_f^u} \rho_u S_t |\nabla Y_f| \quad (\text{A.3.6})$$

και συνεπώς στην εξίσωση μεταφοράς του κλάσματος μάζας του καυσίμου (A.3.4) ο όρος πηγής $\dot{\omega}'$ ισούται με

$$\dot{\omega}' = \rho_u S_t |\nabla Y_f| \quad (\text{A.3.7})$$

Με τις παραπάνω σχέσεις αποδεικνύεται ουσιαστικά η ισοδυναμία μεταξύ της εξίσωσης της μεταβλητής προόδου και της εξίσωσης για το κλάσμα μάζας του καυσίμου. Έτσι σαν μεταβλητή προόδου θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί και το κλάσμα μάζας του καυσίμου. Αυτή η προσέγγιση χρησιμοποιήθηκε και στην παρούσα διατριβή. Το πλεονέκτημα αυτής της μεθόδου είναι η ευκολότερη υλοποίηση σε έναν υπάρχον κώδικα υπολογιστικής ρευστομηχανικής.

A.4 Σχέση του Charlette για την τυρβώση ταχύτητα καύσης

Η σχέση αυτή των Charlette et al. (2002) για την τυρβώδη ταχύτητα καύσης, η οποία έχει αναπτυχθεί για να χρησιμοποιηθεί ειδικά στα πλαίσια της μεθόδου LES, είναι η εξής:

$$S_T = S_L \left(1 + \min \left[\frac{\Delta}{\delta_L}, \Gamma \frac{u'_0}{S_L} \right] \right)^\beta \quad (\text{A.4.1})$$

όπου το β προτείνεται ίσο με 0.5, Δ είναι το χαρακτηριστικό μήκος του κελιού, δ_L το πάχος της στρωτής φλόγας, S_L η ταχύτητα στρωτής καύσης, u'_0 η υποπλεγματική τυρβώδης ταχύτητα και Γ η συνάρτηση αποδοτικότητας (efficiency function). Η σχέση αυτή έχει προκύψει από την υπόθεση ότι ο λόγος της τυρβώδους προς την στρωτή ταχύτητα καύσης ισούται με την υποπλεγματική παραμόρφωση της φλόγας Ξ_Δ η οποία προσδιορίζεται από τη σχέση:

$$\frac{S_T}{S_L} = \frac{A_{sgs}}{\Delta^2} = \Xi_\Delta = \left(1 + \frac{\Delta}{\eta_c}\right)^\beta \quad (\text{A.4.2})$$

όπου A_{sgs} η υποπλεγματική επιφάνεια φλόγας (μέσα στο κελί πλευράς Δ) και η_c είναι η μικρότερη κλίμακα στην οποία η φλόγα παραμορφώνεται (εσωτερικό κατώφλι). Η κλίμακα αυτή μπορεί να θεωρηθεί ίση με τον αντίστροφο της μέσης καμπυλότητας της φλόγας, δηλαδή:

$$\eta_c = \left| \langle \nabla \cdot \vec{n} \rangle_s \right|^{-1} \quad (\text{A.4.3})$$

όπου \vec{n} το κάθετο διάνυσμα στην φλόγα και $\langle \cdot \rangle_s$ ο τελεστής φιλτραρίσματος (ή μέσου όρου) στην επιφάνεια της. Η μονάδα που υπάρχει στη σχέση (A.4.2) έχει προστεθεί έτσι ώστε το S_T να τείνει στο S_L όταν $\eta_c \gg \Delta$. Όπως είναι φανερό η παραπάνω σχέση μπορεί να θεωρηθεί σαν ένα είδος φράκταλ μοντέλου. Ξεκινώντας από την εξίσωση διατήρησης της υποπλεγματικής επιφανειακής πυκνότητας της φλόγας και κάνοντας κάποιες υποθέσεις (όπως το ότι οι χρονικές κλίμακες που σχετίζονται με την υποπλεγματική δυναμική της φλόγας είναι πολύ μικρότερες των χρονικών κλιμάκων που ορίζουν της επιλυόμενη ροή, καθώς και ότι η φλόγα μπορεί να προσαρμόζεται ακαριαία στις επιβαλλόμενες διακυμάνσεις), η ποσότητα $\left| \langle \nabla \cdot \vec{n} \rangle_s \right|$ προσεγγίζεται τελικά από τη σχέση

$$\left| \langle \nabla \cdot \vec{n} \rangle_s \right| = \Delta^{-1} \frac{u'_0}{S_L} \Gamma \quad (\text{A.4.4})$$

Το ελάχιστο το οποίο λαμβάνεται στη σχέση (A.4.1), έχει προστεθεί έτσι ώστε στην περίπτωση όπου η υπολογιζόμενη κλίμακα η_c είναι μικρότερη από το στρωτό πάχος της φλόγας (όπως μπορεί να συμβεί σε υψηλούς λόγους u'_0/S_L), σαν κλίμακα να λαμβάνεται το πάχος της στρωτής φλόγας. Αυτό συμβαίνει γιατί οι μικρότερες από το στρωτό πάχος της φλόγας κλίμακες θεωρούνται ότι δεν μπορούν να παραμορφώσουν τη φλόγα καθώς σε αυτή την περίπτωση θα παραβιαζόταν η θεωρητική βάση του μοντέλου.

Τέλος, η συνάρτηση αποδοτικότητας Γ έχει υπολογιστεί από προσομοιώσεις DNS στοιχειώδους αλληλεπίδρασης φλόγας-δίνης μοναδικής κλίμακας μήκους και ταχύτητας, έτσι ώστε να ληφθούν υπ' όψιν όλες οι σχετικές με το φαινόμενο κλίμακες. Η συνάρτηση αυτή μπορεί να υπολογιστεί μέσω των σχέσεων:

$$\Gamma \left(\frac{\Delta}{\delta_L}, \frac{u'_\Delta}{S_L}, \text{Re}_\Delta \right) = \left[\left((f_u^{-a} + f_\Delta^{-a})^{-1/a} \right)^{-b} + f_{\text{Re}}^{-b} \right]^{-1/b} \quad (\text{A.4.5})$$

$$f_u = 4 \left(\frac{27C_k}{110} \right)^{1/2} \left(\frac{18C_k}{55} \right) \left(\frac{u'_\Delta}{S_L} \right)^2 \quad (\text{A.4.6})$$

$$f_\Delta = \left[\frac{27C_k \pi^{4/3}}{110} \times \left(\left(\frac{\Delta}{\delta_L} \right)^{4/3} - 1 \right) \right]^{1/2} \quad (\text{A.4.7})$$

$$f_{Re} = \left[\frac{9}{55} \exp\left(-\frac{3}{2} C_k \pi^{4/3} Re_{\Delta}^{-1}\right) \right]^{1/2} \times Re_{\Delta}^{1/2} \quad (A.4.8)$$

$$a = 0.60 + 0.20 \exp[-0.1(u'_{\Delta}/S_L)] - 0.20 \exp[-0.1(\Delta/\delta_L)], \quad b = 1.4 \quad (A.4.9)$$

όπου $Re_{\Delta} = \frac{u'_{\Delta} \Delta}{\nu}$ ο υποπλεγματικός αριθμός Reynolds ο οποίος χρησιμοποιώντας τη σχέση (2.2.11) για τον αριθμός Reynolds της φλόγας μπορεί να γραφτεί συναρτήσει των βασικών παραμέτρων Δ/δ_L και u'_{Δ}/S_u σαν $Re_{\Delta} = 4 \frac{u'_{\Delta}}{S_L} \frac{\Delta}{\delta_L}$. Όπως είναι φανερό, η τυρβώδης ταχύτητα καύσης αποτελεί τελικά συνάρτηση των δύο αυτών βασικών παραμέτρων, του λόγου μηκών Δ/δ_L και του λόγου ταχυτήτων u'_{Δ}/S_u .

Στην εργασία των Charlette et al. (2002), η υποπλεγματική τυρβώδης ταχύτητα u'_0 δεν υπολογίζεται από τις συνήθεις σχέσεις μέσω της υποπλεγματικής συνεκτικότητας, αλλά μέσω της σχέσης:

$$\vec{u}'_0 = c \Delta^3 [\nabla^2 (\nabla \times \vec{u})] = c \Delta^3 [\nabla \times (\nabla^2 (\vec{u}))] \quad (A.4.10)$$

Στη σχέση αυτή ο τελεστής ∇^2 εφαρμόζεται σε κάθε συνιστώσα του διανύσματος $\nabla \times \vec{u}$ (πρώτη ισότητα) ή του διανύσματος \vec{u} (δεύτερη ισότητα), έτσι ώστε να προκύψουν οι τρεις συνιστώσες του \vec{u}'_0 . Η σταθερά c υπολογίστηκε ίση με 2 με βάση το φάσμα Kolmogorov (Colin et al. 2000). Πρέπει να αναφέρουμε ότι είναι σημαντικός ο τρόπος με τον οποίο θα υπολογιστεί αριθμητικά η δεύτερη παράγωγος η οποία χρησιμοποιείται στην παραπάνω σχέση. Η παράγωγος αυτή υπολογίζεται με βάση βήμα 2Δ , όπου Δ το μήκος του φίλτρου δηλαδή το μήκος του κελιού, προκειμένου να εξαιρεθούν οι επιδράσεις των μικρών κλιμάκων οι οποίες δεν επιλύονται καλά. Έτσι για παράδειγμα για ομοιόμορφο πλέγμα έχουμε:

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_i = \frac{u_{i+2} - 2u_i + u_{i-2}}{(2\Delta x)^2} \quad (A.4.11)$$

όπου u μια συνιστώσα της ταχύτητας και i ο δείκτης του κελιού. Περισσότερες λεπτομέρειες για την παραπάνω μέθοδο παρουσιάζονται από τους Colin et al. (2000).

A.5 Τροποποιημένη μέθοδος SIMPLER

Η διακριτοποίηση των εξισώσεων της ορμής γίνεται σε θετικά μετατοπισμένο πλέγμα (staggered grid). Η διακριτοποιημένη εξίσωση της ορμής (π.χ. της u συνιστώσας), μπορεί να γραφτεί στην μορφή:

$$a_e u_e = \sum a_i u_i + (p_P - p_E) A_e + S \quad (A.5.1)$$

όπου u_e η ταχύτητα στη δεξιά επιφάνεια ενός κελιού του μη-μετατοπισμένου πλέγματος, p_P η πίεση στο κέντρο του κελιού, p_E η πίεση στο κέντρο του δεξιού κελιού, A_e το εμβαδόν της δεξιάς επιφάνειας του κελιού και S όροι πηγής. Στη σχέση αυτή οι ταχύτητες u_i αναφέρονται στο

μετατοπισμένο πλέγμα, στο κέντρο των γειτονικών κελιών του κελιού στο οποίο ανήκει η u_e , και οι συντελεστές a_e , a_i έχουν προκύψει από την διακριτοποίηση του όρου συναγωγής, διάχυσης και του χρονικού όρου. Η παραπάνω εξίσωση μπορεί να γραφτεί στη μορφή:

$$u_e = \hat{u} + C \cdot (p_p - p_E) \quad (\text{A.5.2})$$

όπου η ποσότητα \hat{u} ονομάζεται ψευδοταχύτητα. Η αντικατάσταση των ταχυτήτων της σχέσης αυτή στην εξίσωση της συνέχειας, μας δίνει μια εξίσωση για την πίεση. Η χρονική παράγωγος της εξίσωσης της συνέχειας, διακριτοποιείται ως εξής:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \approx \frac{\frac{\rho^i}{p^i} p^{i+1} - \rho^0}{\Delta t} \quad (\text{A.5.3})$$

όπου ο δείκτης i αναφέρεται στην προηγούμενη επανάληψη και ο $i+1$ στην τρέχουσα επανάληψη (και τα δύο της τρέχουσας χρονικής στιγμής). Τα μεγέθη στην επανάληψη i είναι συνεπώς γνωστά ενώ στην $i+1$ άγνωστα. Ο δείκτης 0 αναφέρεται στην προηγούμενη χρονική στιγμή, για την οποία όλα τα μεγέθη είναι γνωστά. Η παραπάνω προσέγγιση ενισχύει την διαγώνια κυριαρχία του συστήματος των εξισώσεων που προκύπτει με αποτέλεσμα αυτό να λύνεται πιο εύκολα. Επίσης όταν οι επαναλήψεις έχουν συγκλίνει, ισχύει ότι $p^{i+1} \approx p^i$ και $\rho^i \approx \rho^n$, οπότε η σχέση (A.5.3) είναι ισοδύναμη με τη συνήθη διακριτοποίηση των πίσω διαφορών.

Ο συνολικός αλγόριθμος που εκτελείται σε κάθε νέα χρονική στιγμή $n+1$ αποτελείται από τα ακόλουθα βήματα:

1. Αρχικοποίηση όλων των μεταβλητών (ίσες με τις τιμές της προηγούμενης χρονικής στιγμής n). Έναρξη εσωτερικών επαναλήψεων ($i=1$).
2. Υπολογισμός των ποσοτήτων \hat{u} και C της εξίσωσης (A.5.2). Ο υπολογισμός γίνεται με βάση τις τιμές των ταχυτήτων της προηγούμενης επανάληψης i (αν $i=1$ τότε με βάση της προηγούμενης χρονικής στιγμής).
3. Υπολογισμός των συντελεστών της εξίσωσης της πίεσης. Υπολογισμός της πίεσης μέσω της επίλυση του συστήματος γραμμικών εξισώσεων που προκύπτει.
4. Υπολογισμός των ταχυτήτων από την αλγεβρική σχέση (A.5.2).
5. Υπολογισμός του ρυθμού καύσης. Υπολογισμός των νέων κλασμάτων μάζας των συστατικών με βάση τον ρυθμό αυτό (μέθοδος κλασματικού βήματος, §4.5).
6. Διακριτοποίηση των υπόλοιπων εξισώσεων μεταφοράς (π.χ. για το k και το ϵ , για τα συστατικά και την ενέργεια) και επίλυση των γραμμικών συστημάτων που προκύπτουν.
7. Υπολογισμός της πυκνότητας από την καταστατική εξίσωση και των υπολοίπων ιδιοτήτων του ρευστού (π.χ. μοριακή συνεκτικότητα).
8. Έλεγχος σύγκλισης. Συνέχιση των επαναλήψεων (μεταπήδηση στο βήμα 2) σε περίπτωση που οι προϋποθέσεις σύγκλισης δεν ικανοποιούνται.

Σε σύγκριση με την συνηθισμένη μέθοδο SIMPLER, δεν επιλύεται εξίσωση για τη διόρθωση της πίεσης μετά το βήμα 4 (και συνεπώς δεν υπολογίζονται και διορθωμένες ταχύτητες).

Τέλος πρέπει να αναφέρουμε ότι οι εξισώσεις μεταφοράς διακριτοποιούνται στην συντηρητική τους μορφή. Η διακριτοποίηση της συντηρητικής μορφής των εξισώσεων (σε σύγκριση με τη μη

συντηρητική) είναι επιθυμητή λόγω της διατήρησης της μάζας που αυτή εμπεριέχει, μπορεί όμως να οδηγήσει σε αριθμητικά προβλήματα. Αυτά οφείλονται στο γεγονός ότι η διατήρηση μάζας δεν ικανοποιείται με ακρίβεια στις πρώτες επαναλήψεις μιας χρονικής στιγμής καθώς η σύγκλιση δεν έχει ακόμα επιτευχθεί. Αυτό έχει σαν συνέπεια να παραβιάζεται η διαγώνιος κυριαρχία των γραμμικών συστημάτων που πρέπει να επιλυθούν. Για το λόγο αυτό, από τη διακριτοποιημένη εξίσωση μεταφοράς μιας μεταβλητής φ , αφαιρείται η διακριτοποιημένη εξίσωση της συνέχειας πολλαπλασιασμένη με την μεταβλητή φ . Δηλαδή, αν οι εξισώσεις μεταφοράς και συνέχειας είναι (σε συνεχή και σε ημί-διακριτοποιημένη μορφή)

$$\frac{\partial \rho \varphi}{\partial t} + \nabla \rho u \varphi = S \rightarrow \frac{\rho^n \varphi^n - \rho^0 \varphi^0}{\Delta t} + \nabla \rho u \varphi = S \quad (\text{A.5.4})$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho u = 0 \rightarrow \frac{\rho^n - \rho^0}{\Delta t} + \nabla \rho u = 0 \quad (\text{A.5.5})$$

τότε πολλαπλασιάζοντας την εξίσωση συνέχειας με την ποσότητα φ (η οποία λαμβάνεται στη νέα χρονική στιγμή n) και αφαιρώντας την από την πρώτη, προκύπτει ότι:

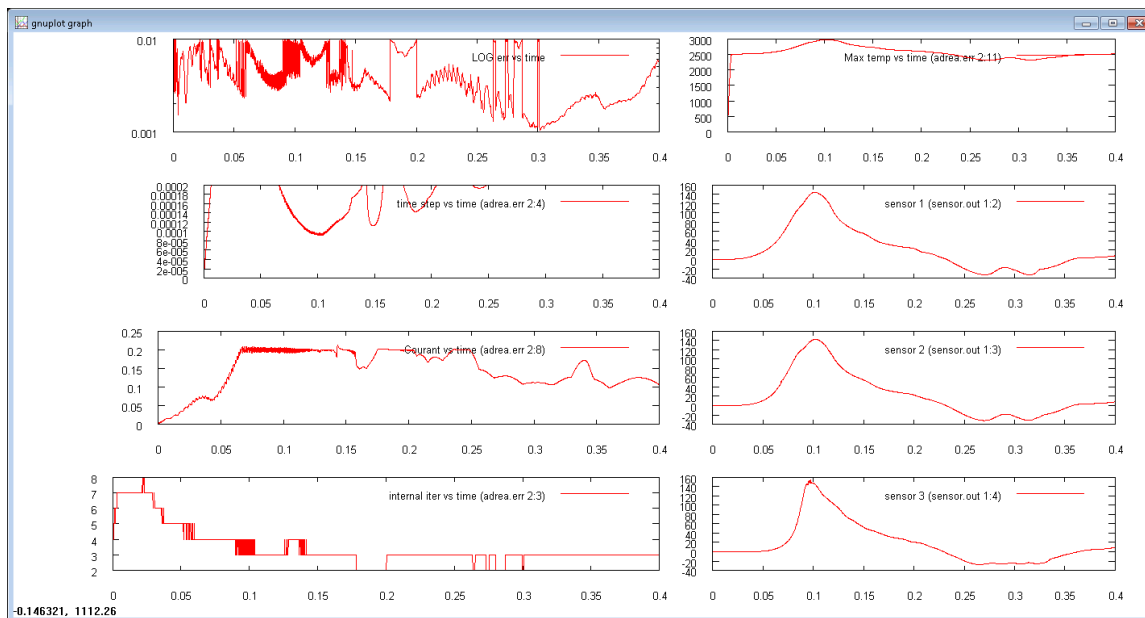
$$\begin{aligned} \frac{\rho^n \varphi^n - \rho^0 \varphi^0}{\Delta t} - \varphi^n \frac{\rho^n - \rho^0}{\Delta t} + \nabla \rho u \varphi - \varphi^n \nabla \rho u = S \Rightarrow \\ \frac{\rho^0 (\varphi^n - \varphi^0)}{\Delta t} + \nabla \rho u \varphi - \varphi^n \nabla \rho u = S \end{aligned} \quad (\text{A.5.6})$$

Η μέθοδος αυτή έχει καλύτερη αριθμητική συμπεριφορά, ενώ παρουσιάζει και το πλεονέκτημα ότι από τον χρονικό όρο απαλείφεται η άγνωστη πυκνότητα ρ^n , γεγονός που διευκολύνει την σύγκλιση. Η διακριτοποίηση του όρου $\nabla \rho u \varphi$ είναι σημαντική και σε αυτή εμπλέκονται τα αριθμητικά σχήματα που περιγράψαμε στη §4.4, ενώ η διακριτοποίηση του όρου $\varphi \nabla \rho u$ είναι πιο εύκολη καθώς οι ταχύτητες στα όρια των κελιών είναι γνωστές και η πυκνότητα μπορεί να προσεγγιστεί με γραμμική παρεμβολή στους κόμβους. Τα παραπάνω προκειμένου να είναι πιο κατανοητά διατυπώθηκαν για το απλό χρονικό σχήμα διακριτοποίησης των πίσω διαφορών, μπορούν όμως να διατυπωθούν αντίστοιχα και για τη μέθοδο Crank-Nicolson που χρησιμοποιήσαμε.

Για τη σύγκλιση ενός χρονικού βήματος, υπολογίζονται το πόσο διαφέρουν οι τιμές των βασικών μεταβλητών από τη μια επανάληψη στην άλλη. Αν το μέγιστο της διαφοράς μεταξύ των μεταβλητών είναι μικρότερο από μια τιμή που ορίζει ο χρήστης (προκαθορισμένη τιμή ίση με 0.01) τότε το χρονικό βήμα θεωρείται ότι έχει συγκλίνει και η επίλυση συνεχίζει στην επόμενη χρονική στιγμή. Για τις ταχύτητες η διαφορά υπολογίζεται σαν το μέγιστο της απόλυτης διαφοράς των τιμών σε όλα τα κελιά, ενώ για τις υπόλοιπες μεταβλητές (θερμοκρασία και συγκεντρώσεις) η απόλυτη διαφορά διαιρείται με τη μέγιστη τιμή της μεταβλητής στο πεδίο. Στον κώδικα υπάρχουν και επιπλέον έλεγχοι οι οποίοι εξετάζουν την διατήρησης της μάζας (τόσο της συνολικής, όσο και των συστατικών) και μόνο αν αυτή ικανοποιείται ο κώδικας συνεχίζει στην επόμενη χρονική στιγμή.

Στο παρακάτω σχήμα απεικονίζεται ένα παράθυρο γραφικών του ADREA-HF στο οποίο γίνεται έλεγχος της πορείας επίλυσης κατά τη διάρκεια μιας προσομοίωσης. Τα διαγράμματα αυτά αφορούν την περίπτωση έκρηξης στο μοντέλο σήραγγας που μελετήθηκε στο Κεφάλαιο 8. Στα

διαγράμματα της αριστερής στήλης απεικονίζεται το μέγιστο σφάλμα, το χρονικό βήμα, ο αριθμός CFL και οι επαναλήψεις που χρειάστηκε ο αλγόριθμος για να συγκλίνει σε κάθε χρονική στιγμή. Παρατηρούμε ότι το χρονικό βήμα αρχικά είναι πολύ μικρό και σταδιακά αυξάνει μέχρι να αποκτήσει την μέγιστη τιμή που έχει οριστεί ή μέχρι να περιοριστεί λόγω του αριθμού CFL. Στα διαγράμματα της δεξιάς στήλης απεικονίζεται η μέγιστη θερμοκρασία και οι τιμές της ποσότητας που έχει επιλέξει ο χρήστης (εδώ υπερπίεση) σε τρεις θέσεις μέσα στο υπολογιστικό χωρίο.



Σχήμα Α.4.1: Παράθυρο ελέγχου της πορείας μιας προσομοίωσης στο ADREA-HF.

A.6 Ορισμοί και χρήσιμες σχέσεις μειγμάτων και καύσης

Στην καύση εμπλέκονται πολλά συστατικά, με αποτέλεσμα να έχουμε μείγμα συστατικών και πριν και μετά την πραγματοποίηση της. Συνεπώς είναι σημαντικό να γνωρίζουμε ορισμένους απλούς ορισμούς και σχέσεις μειγμάτων αερίων.

Ο μερικός όγκος V_k ενός συστατικού στο μείγμα, ορίζεται σαν τον όγκο που είχε το συστατικό πριν την ανάμιξη. Μερική πυκνότητα ενός συστατικού σε ένα μείγμα, ονομάζεται ο λόγος της μάζας του συστατικού προς τον μερικό όγκο του συστατικού στο μείγμα, δηλαδή

$$\rho_k = \frac{m_k}{V_k} \quad (\text{A.6.1})$$

Σαν X_k συμβολίζουμε το κλάσμα όγκου (ή αλλιώς γραμμομοριακό κλάσμα) του συστατικού k στο μείγμα, ενώ σαν Y_k το κλάσμα μάζας. Αυτά δίνονται από τις σχέσεις

$$X_k = \frac{n_k}{n_{total}} = \frac{V_k}{V} \quad (\text{A.6.2})$$

$$Y_k = \frac{m_k}{m_{total}} \quad (\text{A.6.3})$$

όπου n το πλήθος των moles, V_k ο μερικός όγκος του συστατικού k και V ο ολικός όγκος του μείγματος. Η αναλογία moles είναι και αναλογία όγκων μόνο στο τέλειο αέριο. Μια χρήσιμη σχέση, είναι η σχέση που συνδέει το κλάσμα μάζας με το κλάσμα όγκου:

$$Y_k = \frac{m_k}{m} = \frac{n_k}{n} \frac{MB_k}{MB} \Leftrightarrow Y_k = X_k \frac{MB_k}{MB} \quad (\text{A.6.4})$$

Γνωρίζοντας τις μερικές πυκνότητες των συστατικών, μπορούμε να υπολογίσουμε την πυκνότητα του μείγματος από τη σχέση:

$$\frac{1}{\rho} = \sum_k \frac{Y_k}{\rho_k} \quad (\text{A.6.5})$$

Η πυκνότητα μείγματος μπορεί να υπολογιστεί και εφαρμόζοντας την καταστατική εξίσωση του μείγματος. Οι δύο τρόποι είναι ισοδύναμοι και μας δίνουν ακριβώς το ίδιο αποτέλεσμα. Ξεκινώντας από την παραπάνω σχέση και χρησιμοποιώντας τις καταστατικές εξισώσεις του κάθε συστατικού, έχουμε (για ευκολία θεωρούμε 2 μόνο συστατικά):

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho} &= \frac{Y_k}{\rho_1} + \frac{Y_k}{\rho_2} \Leftrightarrow \frac{1}{\rho} = \frac{Y_k}{\frac{P}{R_1 T}} + \frac{Y_k}{\frac{P}{R_2 T}} \Leftrightarrow \frac{1}{\rho} = \frac{Y_k R_1 T}{P} + \frac{Y_k R_2 T}{P} \Leftrightarrow \\ P &= \rho T (Y_k R_1 + Y_k R_2) \Leftrightarrow P = \rho T \left(Y_k \frac{R}{MB_1} + Y_k \frac{R}{MB_2} \right) \Leftrightarrow \\ P &= \rho R T \left(\frac{q_1}{MB_1} + \frac{q_2}{MB_2} \right) = \rho \frac{R}{MB_{mix}} T = \rho R_{mix} T \end{aligned} \quad (\text{A.6.6})$$

Στο τέλος των παραπάνω πράξεων χρησιμοποιήθηκε η σχέση που μας δίνει το μοριακό βάρος του μείγματος, η οποία είναι:

$$\frac{1}{MB_{mix}} = \sum_k \frac{Y_k}{MB_k} \quad (\text{A.6.7})$$

Η σχέση αυτή αποδεικνύεται εύκολα ως εξής:

$$n = \frac{m}{MB} \Leftrightarrow MB = \frac{m}{n} \Leftrightarrow \frac{1}{MB} = \frac{n}{m} \Leftrightarrow \frac{1}{MB} = \frac{\sum_k n_k}{m} = \frac{\sum_k \frac{m_k}{MB_k}}{m} \Leftrightarrow \frac{1}{MB} = \sum_k \frac{Y_k}{MB_k} \quad (\text{A.6.8})$$

Η ειδική ενθαλπία του μείγματος (J/kg) μπορεί να υπολογιστεί από τις επιμέρους ενθαλπίες μέσω της σχέσης:

$$h_{mix} = \sum_k Y_k h_k \quad (\text{A.6.9})$$

Ο **λόγος καυσίμου-αέρα** ορίζεται σαν τον λόγο της μάζας του καυσίμου προς την μάζα του αέρα:

$$FAR = \frac{m_f}{m_{air}} \quad (\text{A.6.10})$$

ενώ μπορεί να οριστεί και σαν αναλογία moles, δηλαδή:

$$FAR' = \frac{n_f}{n_{air}} \quad (A.6.11)$$

Το κλάσμα όγκου του καυσίμου συνδέεται με τον γραμμομοριακό λόγο καυσίμου-αέρα με τη σχέση:

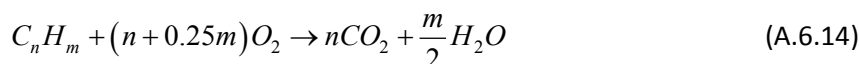
$$X_f = \frac{n_f}{n_f + n_{air}} = \frac{FAR'}{FAR' + 1} \quad (A.6.12)$$

Ο λόγος ισοδυναμίας καυσίμου-αέρα ορίζεται ως εξής:

$$\varphi = \frac{FAR}{FAR_{stoi}} = \frac{m_f/m_{air}}{m_f/m_{air}} = \frac{n_f/n_{air}}{(n_f/n_{air})_{stoi}} \quad (A.6.13)$$

όπου FAR_{stoi} είναι ο στοιχειομετρικός λόγος καυσίμου-αέρα, δηλαδή όταν η ποσότητα του αέρα είναι ακριβώς τόση ώστε να καταναλωθεί όλο το καύσιμο αλλά και όλο το οξυγόνο.

Θεωρούμε την γενική μορφή της αντίδρασης καύσης ενός υδρογονάνθρακα:



Σε αυτή την περίπτωση, ο γραμμομοριακός στοιχειομετρικός λόγος καυσίμου-αέρα FAR'_{stoi} μπορεί να υπολογιστεί εύκολα από τη σχέση:

$$FAR'_{stoi} = \left(\frac{n_f}{n_{air}} \right)_{stoi} = \frac{1}{(n + 0.25m) \frac{1}{X_{oair}}} \quad (A.6.15)$$

όπου X_{oair} η κατ' όγκο σύσταση του αέρα σε οξυγόνο (περίπου ίση με 0.21). Ο λόγος αυτός για το υδρογόνο, μεθάνιο και προπάνιο είναι ίσος με 0.42, 0.105 και 0.042. Στον παρακάτω πίνακα απεικονίζονται κάποια χαρακτηριστικά μεγέθη για την περίπτωση μείγματος υδρογόνου-αέρα σε διάφορους λόγους ισοδυναμίας φ . Οι υπολογισμοί αυτοί είναι σημαντικοί καθώς, εκτός των άλλων, το συνήθως δεδομένο σε ένα πείραμα καύσης είναι ο λόγος ισοδυναμίας φ , ενώ το συνηθισμένο δεδομένο εισόδου σε έναν κώδικα υπολογιστικής ρευστομηχανικής είναι τα κλάσματα μάζας των συστατικών.

Πίνακας Α.5.1: Χαρακτηριστικά μεγέθη για μείγμα υδρογόνου-αέρα διαφόρων συγκεντρώσεων (θεωρούμε κατ' όγκο σύσταση του αέρα σε οξυγόνο 21%. Το κλάσμα μάζας του νερού είναι αυτό που προκύπτει μετά την καύση).

φ	FAR'	X_f	X_{O_2}	Y_f	Y_{O_2}	Y_{H_2O}
0.100	0.042	0.040	0.202	0.00290	0.2322	0.0260
0.523	0.220	0.180	0.172	0.01510	0.2294	0.1351
0.700	0.294	0.227	0.162	0.02011	0.2282	0.1798
1.000	0.420	0.296	0.148	0.02854	0.2263	0.2549
1.280	0.538	0.350	0.137	0.03626	0.2245	0.2529
7.150	3.003	0.750	0.052	0.17330	0.1926	0.2169

Παράρτημα Β

Αγγλική ορολογία

Ελληνικός όρος	Αγγλικός όρος
Ρυτιδιασμένη φλόγα	Wrinkled flame
Κατανεμημένη ζώνη καύσης	Distributed reaction zone / distributed combustion
Στρωτή φλόγα	Laminar flame
Μέτωπο της φλόγας	Flame front
Πάχος της φλόγας	Flame thickness
Ολοκληρωτική κλίμακα	Integral scale
Φλογίδια	Flamelets
Παχιά φλογίδια	Thickened flamelets
Τυρβώδη ταχύτητα καύσης	Turbulent flame speed
Εργασία ανασκόπησης	Review paper
Προελαύνων άκρη	Leading edge
Διακύμανση	Fluctuation
Αδρανειακή υπο-περιοχή	Inertial subrange
Εγγενής	Intrinsic
Ρυθμός παραμόρφωσης	Strain rate
Ταχύτητα παραμορφωμένης φλόγας	Stretched flame speed
Έκρηξη προ-αναμεμειγμένου μείγματος αερίων	Vapor Cloud Explosions
Εκρήξεις εκτόνωσης υγροποιημένου αερίου	Boiling Liquid Expanding Vapor Explosion (BLEVE)
Επιταχυνόμενη έκρηξη	Deflagration
Υπερηχητική έκρηξη	Detonation
Μετάβαση επιταχυνόμενης σε υπερηχητική έκρηξη	Deflagration to Detonation Transition (DDT)
Κύματα κρούσης	Shock waves
Έκρηξη σε κλειστό χώρο με ανοίγματα	Vented deflagration
Συνάρτηση περιορισμού	Limiter function
Κινούμενος μέσος	Moving average

Παράρτημα Γ

Πίνακας συμβόλων

	Συνήθη μεγέθη
t	Χρόνος (s)
x	Απόσταση (m)
u, U	Ταχύτητα (m/s)
ρ	Πυκνότητα (kg/m ³)
P, p	Πίεση (Pa)
T	Θερμοκρασία (K)
h	Στατική ενθαλπία (Joule)
h_t	Ολική ενθαλπία (Joule)
V	Όγκος (m ³)
L	Χαρακτηριστικό μήκος (m)
Y	Κλάσμα μάζας
g	Επιτάχυνση της βαρύτητας (m/s ²)
R	Ακτίνα (m)
γ	Αδιαβατικός εκθέτης
μ	Συνεκτικότητα (kg/m/s)
ν	Κινηματική συνεκτικότητα (m ² /s)
D	Συντελεστής διάχυσης μάζας (m ² /s)
D_{th}	Συντελεστής θερμικής διάχυσης (m ² /s)
λ	Συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας (J/s/m/K)
C_p	Ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεση (J/kg/K)
Pr	Αριθμός Prandtl
Sc	Αριθμός Schmidt
Re	Αριθμός Reynolds
	Τύρβη
l	Χαρακτηριστικό μήκος (m)
u'_0	Χαρακτηριστική ταχύτητα τύρβης (m/s)
k	Τυρβώδης κινητική ενέργεια (ανά μάζα) (m ² /s ²)
ε	Ρυθμός καταστροφής της τυρβώδους ενέργειας (m ² /s ³)
	Καύση
S_L	Στρωτή ταχύτητα καύσης (m/s)
S_T, S_t	Τυρβώδης ταχύτητα καύσης (m/s)
S_L^{sgs}	Υποπλεγματική ταχύτητα καύσης (m/s)
δ_L	Πάχος της φλόγας
E	Λόγος επέκτασης
c	Μεταβλητή προόδου
$\dot{\omega}$	Ρυθμός παραγωγής ή κατανάλωσης λόγω καύσης
Pe	Αριθμός Peclet

R_0	Κρίσιμη ακτίνα (m)
Ξ	Συντελεστές επιτάχυνσης της φλόγας
Ξ_k	Συντελεστής για την τύρβη που παράγεται από το μέτωπο της φλόγας
Ξ_{lp}	Συντελεστής για την αστάθεια θερμοδιάχυσης
Ξ_f	Συντελεστής για την φράκταλ γεωμετρίας της φλόγας
Ψ	Σταθερά μοντέλου καύσης
D_f, FD	Φράκταλ διάσταση
ε	Θερμο-κινητικός εκθέτης
ν	Στοιχειομετρικός συντελεστής
MW	Μοριακό βάρος (gr/mole)

Εκθέτες και δείκτες

0	Αρχική συνθήκη
u	Άκαυστη περιοχή
b	Καμένη περιοχή
R	Αντιδρώντα
f	Καύσιμο
L	Στρωτή
t	Τυρβώδης
max	Μέγιστο
-	Μέση ή φιλτραρισμένη ποσότητα
~	Μαζικά μέση ή μαζικά φιλτραρισμένη ποσότητα
'	Διαταραχή ή υποπλεγματική ποσότητα
pmax	Μέγιστη υπερπίεση
0.1pmax	10% της μέγιστης υπερπίεσης

Συνομεύσεις

RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes
LES	Large eddy simulation
CD, CDS	Συνήθης σχήμα κεντρικών διαφορών
BCD	Σχήμα φραγμένων κεντρικών διαφορών

Ευρετήριο

ADREA-HF.....	121
BiCGstab.....	133, 135
Deferred correction	128
Dissociation.....	153, 191
Domain decomposition.....	136
Explicit.....	131
Fractional step	131
GMRES.....	133, 135
ILU	133, 135
Implicit	131
Lewis number.....	46, 52, 53, 70, 119
MPI.....	136
Non-conservative.....	132
Non-reflecting.....	122
OpenMP	134
Porosities.....	121
SIMPLER	122
Time splitting	131
Total Variation Diminishing, TVD.....	125
Wall function.....	122
Άκαυστη περιοχή	44
Αριθμός Schmidt.....	59, 86, 94, 255
Αστάθεια Darrieus-Landau	51
Γραμμικοποίηση όρου πηγής.....	130
Καμένη περιοχή	44
Κλασματικού βήματος.....	131
Λόγος επέκτασης	44
Όρος πηγής	130
Περιοχή προθέρμανσης.....	44
Ταχύτητα στρωτής καύσης.....	45

Βιβλιογραφία

- Abdel-Raheem, M.A., Ibrahim, S.S., Malalasekera, W. & Masri, A.R. (2015). Large eddy simulation of hydrogen–air premixed flames in a small scale combustion chamber. *International Journal of Hydrogen Energy*, 40(7), pp.3098–3109.
- Abu-Orf, G.M. & Cant, R.S. (2000). A turbulent reaction rate model for premixed turbulent combustion in spark-ignition engines. *Combustion and Flame*, 122(3), pp.233–252.
- Agarwal, R.K. (1981). A third-order-accurate upwind scheme for Navier–Stokes solutions at high Reynolds numbers. In *19th AIAA Aerospace Sciences Meeting* (pp. 1981–112). St. Louis.
- AICHe. (1994). *Guidelines for Evaluating the Characteristics of Vapor Cloud Explosions, Flash Fires, and BLEVEs*. Center for Chemical Process Safety, American Institute of Chemical Engineers.
- Argyropoulos, C.D. & Markatos, N.C. (2015). Recent advances on the numerical modelling of turbulent flows. *Applied Mathematical Modelling*, 39(2), pp.693–732.
- Aspden, A.J., Day, M.S. & Bell, J.B. (2011). Turbulence–flame interactions in lean premixed hydrogen: transition to the distributed burning regime. *Journal of Fluid Mechanics*, 680, pp.287–320.
- Baraldi, D., Heitsch, M. & Wilkening, H. (2007). CFD simulations of hydrogen combustion in a simplified EPR containment with CFX and REACFLOW. *Nuclear Engineering and Design*, 237(15–17), pp.1668–1678.
- Baraldi, D., Kotchourko, A., Lelyakin, A., Yanez, J., Gavrikov, A., Efimenko, A., Verbecke, F., Makarov, D., Molkov, V. & Teodorczyk, A. (2010). An inter-comparison exercise on CFD model capabilities to simulate hydrogen deflagrations with pressure relief vents. *International Journal of Hydrogen Energy*, 35(22), pp.12381–12390.
- Baraldi, D., Kotchourko, A., Lelyakin, A., Yanez, J., Middha, P., Hansen, O.R., Gavrikov, A., Efimenko, A., Verbecke, F. & Makarov, D. (2009). An inter-comparison exercise on CFD model capabilities to simulate hydrogen deflagrations in a tunnel. *International Journal of Hydrogen Energy*, 34(18), pp.7862–7872.
- Barrett, R., Berry, M., Chan, T.F., Demmel, J., Donato, J.M., Dongarra, J., Eijkhout, V., Pozo, R., Romine, C. & Vorst, H. Van der. (1994). *Templates for the solution of linear systems: Building blocks for iterative methods* (2nd ed.). SIAM.
- Bartzis, J. (1991). ADREA-HF: a three-dimensional finite volume code for vapour cloud dispersion in complex terrain. *EUR Report 13580 EN*.
- Bauwens, C.R., Chaffee, J. & Dorofeev, S. (2010). Effect of Ignition Location, Vent Size, and Obstacles on Vented Explosion Overpressures in Propane-Air Mixtures. *Combustion Science and Technology*, 182(11–12), pp.1915–1932.
- Bauwens, C.R., Chaffee, J. & Dorofeev, S.B. (2009). Effect of Instabilities and Acoustics on Pressure Generated in Vented Propane-Air Explosions. In *22 international colloquium on the dynamics of explosions and reactive systems*. Minsk, Belarus.
- Bauwens, C.R., Chaffee, J. & Dorofeev, S.B. (2011). Vented explosion overpressures from combustion of hydrogen and hydrocarbon mixtures. *International Journal of Hydrogen Energy*, 36(3), pp.2329–2336.
- Bauwens, C.R., Chao, J. & Dorofeev, S.B. (2012). Effect of hydrogen concentration on vented explosion overpressures from lean hydrogen–air deflagrations. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37(22), pp.17599–17605.
- Bechtold, J.K. & Matalon, M. (1987). Hydrodynamic and diffusion effects on the stability of spherically expanding flames. *Combustion and Flame*, 67(1), pp.77–90.
- Benzi, M. (2002). Preconditioning Techniques for Large Linear Systems: A Survey. *Journal of Computational Physics*, 182(2), pp.418–477.
- Betchov, R. & Criminale, W.O. (1967). *Stability of parallel flow*. Academic Press.
- Bjerketvedt, D. & Mjaavatten, A. (2013). A hydrogen air explosion in a process plant: a case history. In *5th International Conference on Hydrogen Safety, Brussels, Belgium*.

- Bonhomme, A., Selle, L. & Poinso, T. (2013). Curvature and confinement effects for flame speed measurements in laminar spherical and cylindrical flames. *Combustion and Flame*, 160(7), pp.1208–1214.
- Borgh, R. (1985). On the Structure and Morphology of Turbulent Premixed Flames. In *Recent Advances in the Aerospace Sciences* (pp. 117–138). Boston, MA: Springer US. Retrieved from http://link.springer.com/10.1007/978-1-4684-4298-4_7
- Bose, S.T., Moin, P. & You, D. (2010). Grid-independent large-eddy simulation using explicit filtering. *Physics of Fluids*, 22(10), p.105103.
- Bradley, D., Lau, A.K.C. & Lawes, M. (1992). Flame Stretch Rate as a Determinant of Turbulent Burning Velocity. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 338(1650).
- Bradley, D., Lawes, M. & Mansour, M.S. (2011). The Problems of the Turbulent Burning Velocity. *Flow, Turbulence and Combustion*, 87(2–3), pp.191–204.
- Bradley, D., Sheppard, C.G.W., Woolley, R., Greenhalgh, D.A. & Lockett, R.D. (2000). The development and structure of flame instabilities and cellularity at low Markstein numbers in explosions. *Combustion and Flame*, 122(1), pp.195–209.
- Bragin, M., Makarov, D. & Molkov, V. (2013). Pressure limit of hydrogen spontaneous ignition in a T-shaped channel. *International Journal of Hydrogen Energy*, 38, pp.8039–8052.
- Bragin, M.V. & Molkov, V.V. (2011). Physics of spontaneous ignition of high-pressure hydrogen release and transition to jet fire. *International Journal of Hydrogen Energy*, 36(3), pp.2589–2596.
- Bray, K.N.C. & Libby, P.A. (1976). Interaction effects in turbulent premixed flames. *The Physics of Fluids*, 19(11), pp.1687–1701.
- Bray, K.N.C., Libby, P.A., Masuya, G. & Moss, J.B. (1981). Turbulence Production in Premixed Turbulent Flames. *Combustion Science and Technology*, 25(3–4), pp.127–140.
- Breuer, M. (1998). Large eddy simulation of the subcritical flow past a circular cylinder: numerical and modeling aspects. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 28(9), pp.1281–1302.
- Brouillette, M. (2002). The Richtmyer Meshkov instability. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 34(1), pp.445–468.
- Butler, T.D. & O'Rourke, P.J. (1977). A numerical method for two dimensional unsteady reacting flows. *Symposium (International) on Combustion*, 16(1), pp.1503–1515.
- Chandrasekhar, S. (1961). *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability*. Dover Publications.
- Chao, J., Bauwens, C.R. & Dorofeev, S.B. (2011). An analysis of peak overpressures in vented gaseous explosions. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(2), pp.2367–2374.
- Charlette, F., Meneveau, C. & Veynante, D. (2002). A power-law flame wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion Part I: non-dynamic formulation and initial tests. *Combustion and Flame*, 131(1–2), pp.159–180.
- CHEMKIN. (2013). Reaction Design.
- Ciccarelli, G. & Dorofeev, S. (2008). Flame acceleration and transition to detonation in ducts. *Progress in Energy and Combustion Science*, 34(4), pp.499–550.
- Colin, O., Ducros, F., Veynante, D. & Poinso, T. (2000). A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Physics of Fluids*, 12(7), pp.1843–1863.
- Cooper, M.G., Fairweather, M. & Tite, J.P. (1986). On the mechanisms of pressure generation in vented explosions. *Combustion and Flame*, 65(1), pp.1–14.
- Crowl, D.A. (2003). *Understanding explosions*. American Institute of Chemical Engineers, New York.
- Dahoe, A.E. (2005). Laminar burning velocities of hydrogen–air mixtures from closed vessel gas explosions. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 18(3), pp.152–166.
- Dahoe, A.E., Skjold, T., Roekaerts, D.J.E.M., Pasman, H.J., Eckhoff, R.K., Hanjalic, K. & Donze, M. (2013). On the Application of the Levenberg–Marquardt Method in Conjunction with an Explicit Runge–Kutta and an Implicit Rosenbrock Method to Assess Burning Velocities from Confined Deflagrations. *Flow, Turbulence and Combustion*, 91(2), pp.281–317.
- Di Sarli, V. & Di Benedetto, A. (2013). Effects of non-equidiffusion on unsteady propagation of hydrogen-enriched methane/air premixed flames. *International Journal of Hydrogen Energy*, 38(18), pp.7510–

7518.

- Di Sarli, V., Di Benedetto, A. & Russo, G. (2009). Using Large Eddy Simulation for understanding vented gas explosions in the presence of obstacles. *Journal of Hazardous Materials*, 169(1), pp.435–442.
- Di Sarli, V., Di Benedetto, A. & Russo, G. (2012). Large Eddy Simulation of transient premixed flame–vortex interactions in gas explosions. *Chemical Engineering Science*, 71, pp.539–551.
- Di Sarli, V., Di Benedetto, A., Russo, G., Jarvis, S., Long, E.J. & Hargrave, G.K. (2009). Large Eddy Simulation and PIV Measurements of Unsteady Premixed Flames Accelerated by Obstacles. *Flow, Turbulence and Combustion*, 83(2), pp.227–250.
- Dimotakis, P.E. (2000). The mixing transition in turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 409, pp.69–98.
- Drazin, P.G. & Reid, W.H. (2004). *Hydrodynamic Stability (Cambridge Mathematical Library)*. Cambridge University Press.
- Driscoll, J.F. (2008). Turbulent premixed combustion: Flamelet structure and its effect on turbulent burning velocities. *Progress in Energy and Combustion Science*, 34(1), pp.91–134.
- Duclos, J., Veynante, D. & Poinso, T. (1993). A comparison of flamelet models for premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 95(1–2), pp.101–117.
- Efimenko, A. & Dorofeev, S. (2001). CREBCOM code system for description of gaseous combustion. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 14(6), pp.575–581.
- Erlebacher, G., Hussaini, M.Y., Speziale, C.G. & Zang, T.A. (1992). Toward the large-eddy simulation of compressible turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 238(1), p.155.
- Favre, A. (1992). Formulation of the statistical equations of turbulent flows with variable density. In *Studies in Turbulence* (pp. 324–341). Springer New York.
- Ferziger, J.H. & Peric, M. (2002). *Computational methods for fluid dynamics* (3rd ed.). Springer.
- Fromm, J.E. (1968). A method for reducing dispersion in convective difference schemes. *Journal of Computational Physics*, 3(2), pp.176–189.
- Gamezo, V.N., Ogawa, T. & Oran, E.S. (2007). Numerical simulations of flame propagation and DDT in obstructed channels filled with hydrogen–air mixture. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(2), pp.2463–2471.
- Gant, S.E. (2010). Reliability Issues of LES-Related Approaches in an Industrial Context. *Flow, Turbulence and Combustion*, 84(2), pp.325–335.
- García, J., Baraldi, D., Gallego, E., Beccantini, A., Crespo, A., Hansen, O.R., Høiset, S., Kotchourko, A., Makarov, D. & Migoya, E. (2010). An intercomparison exercise on the capabilities of CFD models to reproduce a large-scale hydrogen deflagration in open atmosphere. *International Journal of Hydrogen Energy*, 35(9), pp.4435–4444.
- Geng, J., Mander, T. & Baker, Q. (2015). Blast wave clearing behavior for positive and negative phases. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 37, pp.143–151.
- Georgiadis, N.J., Rizzetta, D.P. & Fureby, C. (2010). Large-Eddy Simulation: Current Capabilities, Recommended Practices, and Future Research. *AIAA Journal*, 48(8), pp.1772–1784.
- Germano, M. (1992). Turbulence: the filtering approach. *Journal of Fluid Mechanics*, 238, p.325.
- Geurts, B.J. (2006). Interacting errors in large-eddy simulation: a review of recent developments. *Journal of Turbulence*, 7, p.n55.
- Ghosal, S. & Moin, P. (1995). The Basic Equations for the Large Eddy Simulation of Turbulent Flows in Complex Geometry. *Journal of Computational Physics*, 118(1), pp.24–37.
- Givoli, D. (1991). Non-reflecting boundary conditions. *Journal of Computational Physics*, 94(1), pp.1–29.
- Gostintsev, Y.A., Istratov, A.G. & Shulenin, Y.V. (1989). Self-similar propagation of a free turbulent flame in mixed gas mixtures. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 24 (5).
- Gouldin, F.C. (1987). An application of fractals to modeling premixed turbulent flames. *Combustion and Flame*, 68(3), pp.249–266.
- Grinstein, F.F., Margolin, L.G. & Rider, W.J. (2007). *Implicit Large Eddy Simulation: Computing Turbulent Fluid Dynamics*. Cambridge University Press.
- Groethe, M., Merilo, E., Colton, J., Chiba, S., Sato, Y. & Iwabuchi, H. (2007). Large-scale hydrogen deflagrations and detonations. *International Journal of Hydrogen Energy*, 32(13), pp.2125–2133.

- Gu, X.J., Haq, M.Z., Lawes, M. & Woolley, R. (2000). Laminar burning velocity and Markstein lengths of methane–air mixtures. *Combustion and Flame*, 121(1), pp.41–58.
- Gubba, S.R. (2009). *Development of a Dynamic LES Model for Premixed Turbulent Flames*. PhD thesis, Loughborough University, UK.
- Gubba, S.R., Ibrahim, S.S., Malalasekera, W. & Masri, A.R. (2008). LES Modeling of Premixed Deflagrating Flames in a Small-Scale Vented Explosion Chamber with a Series of Solid Obstructions. *Combustion Science and Technology*, 180(10–11), pp.1936–1955.
- Gubba, S.R., Ibrahim, S.S., Malalasekera, W. & Masri, A.R. (2011). Measurements and LES calculations of turbulent premixed flame propagation past repeated obstacles. *Combustion and Flame*, 158(12), pp.2465–2481.
- Gülder, Ö.L. (1990). Turbulent premixed flame propagation models for different combustion regimes. *Twenty-Third Symposium (International) on Combustion*. The Combustion Institute, 23(1), pp.743–750.
- Gullbrand, J. (2003). Grid-Independent Large-Eddy Simulation in Turbulent Channel Flow using Three-Dimensional Explicit Filtering. *Annual Research Briefs, Center for Turbulence Research*, pp.331–342.
- Gullbrand, J. & Chow, F.K. (2003). The effect of numerical errors and turbulence models in large-eddy simulations of channel flow, with and without explicit filtering. *Journal of Fluid Mechanics*, 495, p.s0022112003006268.
- Hakberg, B. & Gosman, A.D. (1985). Analytical determination of turbulent flame speed from combustion models. *Symposium (International) on Combustion*, 20(1), pp.225–232.
- Harrison, A.J. & Eyre, J.A. (1987). External Explosions as a Result of Explosion Venting. *Combustion Science and Technology*, 52(1–3), pp.91–106.
- Henkes, R.A.W.M., Van Der Vlugt, F.F. & Hoogendoorn, C.J. (1991). Natural-convection flow in a square cavity calculated with low-Reynolds-number turbulence models. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 34(2), pp.377–388.
- Hinze, J.O. (1959). *Turbulence*. McGraw-Hill, New York.
- Hjertager, B.H. (1982). Simulation of Transient Compressible Turbulent Reactive Flows. *Combustion Science and Technology*, 27(5–6), pp.159–170.
- Hjertager, B.H. (1989). Simulation of gas explosions. *Modeling, Identification and Control*, 10(4), pp.227–247.
- Hjertager, B.H. (1993). Computer modelling of turbulent gas explosions in complex 2D and 3D geometries. *Journal of Hazardous Materials*, 34(2), pp.173–197.
- Hjertager, B.H. & Solberg, T. (1999). A Review of Computational Fluid Dynamics (CFD) Modeling of Gas Explosions. *Prevention of Hazardous Fires and Explosions*, 26, pp.77–91.
- Holmes, P., Lumley, J.L. & Berkooz, G. (1998). *Turbulence, Coherent Structures, Dynamical Systems and Symmetry*. Cambridge University Press.
- Huzayyin, A.S., Moneib, H.A., Shehatta, M.S. & Attia, A.M.A. (2008). Laminar burning velocity and explosion index of LPG–air and propane–air mixtures. *Fuel*, 87(1), pp.39–57.
- Jiang, X., Fan, B., Ye, J. & Dong, G. (2005). Experimental investigations on the external pressure during venting. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 18(1), pp.21–26.
- Jomaas, G., Law, C.K. & Bechtold, J.K. (2007). On transition to cellularity in expanding spherical flames. *Journal of Fluid Mechanics*, 583(2), pp.1–26.
- Karlovitz, B., Denniston, D.W. & Wells, F.E. (1951). Investigation of Turbulent Flames. *The Journal of Chemical Physics*, 19(5), p.541.
- Kawanabe, H., Shioji, M., Tsunooka, T. & Ali, Y. (1998). CFD simulation for predicting combustion and pollutant formation in a homogeneous-charge spark-ignition engine. In *International Symposium COMODIA98* (pp. 233–238). Tokyo.
- Keenan, J.J., Makarov, D.V. & Molkov, V.V. (2014). Rayleigh–Taylor instability: Modelling and effect on coherent deflagrations. *International Journal of Hydrogen Energy*, 39(35), pp.20467–20473.
- Keller, J.O., Gresho, M., Harris, A. & Tchouvelev, A.V. (2014). What is an explosion? *International Journal of Hydrogen Energy*, 39(35), pp.20426–20433.
- Khosla, P.K. & Rubin, S.G. (1974). A diagonally dominant second-order accurate implicit scheme. *Computers & Fluids*, 2(2), pp.207–209.

- Kim, W.K., Mogi, T., Kuwana, K. & Dobashi, R. (2015). Self-similar propagation of expanding spherical flames in large scale gas explosions. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35(2), pp.2051–2058.
- Klein, M., Sadiki, A. & Janicka, J. (2003). A digital filter based generation of inflow data for spatially developing direct numerical or large eddy simulations. *Journal of Computational Physics*, 186(2), pp.652–665.
- Kovalets, I. V., Andronopoulos, S., Venetsanos, A.G. & Bartzis, J.G. (2008). Optimization of the numerical algorithms of the ADREA-I mesoscale prognostic meteorological model for real-time applications. *Environmental Modelling & Software*, 23(1), pp.96–108.
- Kumar, S. (2003). *An Experimental Investigation of Richtmyer-Meshkov Instability*. California Institute of Technology, PhD thesis.
- Kuznetsov, M., Friedrich, A., Stern, G., Kotchourko, N., Jallais, S. & L'Hostis, B. (2015). Medium-scale experiments on vented hydrogen deflagration. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 36, pp.416–428.
- Kwon, O.C., Rozenchan, G. & Law, C.K. (2002). Cellular instabilities and self-acceleration of outwardly propagating spherical flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29(2), pp.1775–1783.
- Lamoureux, N., Djebaili-Chaumeix, N. & Paillard, C.-E. (2003). Laminar flame velocity determination for H₂-air-He-CO₂ mixtures using the spherical bomb method. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 27(4), pp.385–393.
- Launder, B.E., Reece, G.J. & Rodi, W. (1975). Progress in the development of a Reynolds-stress turbulence closure. *Journal of Fluid Mechanics*, 68(3), p.537.
- Launder, B.E. & Sandham, N.D. (2002). *Closure Strategies for Turbulent and Transitional Flows*. (B. E. Launder, Ed.). Cambridge University Press.
- Launder, B.E. & Spalding, D.B. (1974). The numerical computation of turbulent flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 3(2), pp.269–289.
- Law, C.K. (2006). *Combustion Physics*. Cambridge University Press.
- Law, C.K., Jomaas, G. & Bechtold, J.K. (2005). Cellular instabilities of expanding hydrogen/propane spherical flames at elevated pressures: theory and experiment. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1), pp.159–167.
- Law, C.K. & Sung, C.J. (2000). Structure, aerodynamics, and geometry of premixed flamelets. *Progress in Energy and Combustion Science*, 26(4), pp.459–505.
- Lees, P.F. (1980). *Loss Prevention in the Process Industries*. London and Boston: Butterworths.
- Lenoir, E.M. & Davenport, J.A. (1993). A survey of vapor cloud explosions: Second update. *Process Safety Progress*, 12(1), pp.12–33.
- Lesieur, M. & Metais, O. (1996). New Trends in Large-Eddy Simulations of Turbulence. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 28(1), pp.45–82.
- Leuckel, W., Nastoll, W. & Zarzalis, N. (1990). Experimental investigation of the influence of turbulence on the transient premixed flame propagation inside closed vessels. *Twenty-Third Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute*, 23(1), pp.729–734.
- Leveque, R.J. (2004). *Finite volume methods for hyperbolic problems (Cambridge Texts in Applied Mathematics)*. United Kingdom: Cambridge University Press.
- Lewis, B. & Elbe, G. von. (1987). *Combustion, Flames and Explosions of Gases* (3rd ed.). London: Academic Press Inc.
- Liakos, H.H., Founti, M.A. & Markatos, N.C. (2000a). Modelling of stretched natural gas diffusion flames. *Applied Mathematical Modelling*, 24(5–6), pp.419–435.
- Liakos, H.H., Founti, M.A. & Markatos, N.C. (2000b). The relative importance of combustion mechanisms in industrial premixed flames under high pressure. *Applied Thermal Engineering*, 20(10), pp.925–940.
- Liakos, H.H., Founti, M.A. & Markatos, N.C. (2001). Modeling the characteristic types and heat release of stretched premixed impinging flames. *Computational Mechanics*, 27(1), pp.88–96.
- Liakos, H.H., Keramida, E.P., Founti, M.A. & Markatos, N.C. (2002). Heat and mass transfer study of impinging turbulent premixed flames. *Heat and Mass Transfer*, 38(4–5), pp.425–432.
- Liakos, H.H., Koukou, M.K., Founti, M.A. & Markatos, N.C. (2002). Industrial-scale processing of granite surfaces by natural gas jet flames. *Applied Thermal Engineering*, 22(4), pp.393–405.

- Libby, P.A. & Bray, K.N.C. (1980). Implications of the laminar flamelet model in premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 39(1), pp.33–41.
- Libby, P.A. & Bray, K.N.C. (1981). Countergradient Diffusion in Premixed Turbulent Flames. *AIAA Journal*, 19(2), pp.205–213.
- Lilly, D.K. (1992). A proposed modification of the Germano subgrid-scale closure method. *Physics of Fluids A (Fluid Dynamics)*, 4(3), pp.633–5.
- Lin, C.C. (1955). *The Theory of Hydrodynamic Stability*. Cambridge University Press.
- Lipatnikov, A. (2013). *Fundamentals of premixed turbulent combustion*. CRC Press, Taylor & Francis group.
- Lipatnikov, A.N. & Chomiak, J. (2002). Turbulent flame speed and thickness: phenomenology, evaluation, and application in multi-dimensional simulations. *Progress in Energy and Combustion Science*, 28(1), pp.1–74.
- Lipatnikov, A.N. & Chomiak, J. (2005). Molecular transport effects on turbulent flame propagation and structure. *Progress in Energy and Combustion Science*, 31(1), pp.1–73.
- Lipatnikov, A.N. & Chomiak, J. (2010). Effects of premixed flames on turbulence and turbulent scalar transport. *Progress in Energy and Combustion Science*, 36(1), pp.1–102.
- Lund, T.S., Wu, X. & Squires, K.D. (1998). Generation of Turbulent Inflow Data for Spatially-Developing Boundary Layer Simulations. *Journal of Computational Physics*, 140(2), pp.233–258.
- Magnussen, B.F. & Hjertager, B.H. (1976). On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. *Symposium (International) on Combustion*, 16(1), pp.719–729.
- Makarov, D., Verbecke, F., Molkov, V., Kotchourko, A., Lelyakin, A., Yanez, J., Baraldi, D., Heitsch, M., Efimenko, A. & Gavrikov, A. (2010). An intercomparison of CFD models to predict lean and non-uniform hydrogen mixture explosions. *International Journal of Hydrogen Energy*, 35(11), pp.5754–5762.
- Makarov, D., Verbecke, F., Molkov, V., Roe, O., Skotenne, M., Kotchourko, A., Lelyakin, A., Yanez, J., Hansen, O., Middha, P., Ledin, S., Baraldi, D., Heitsch, M., Efimenko, A. & Gavrikov, A. (2009). An inter-comparison exercise on CFD model capabilities to predict a hydrogen explosion in a simulated vehicle refuelling environment. *International Journal of Hydrogen Energy*, 34(6), pp.2800–2814.
- Mantel, T. & Borghi, R. (1994). A new model of premixed wrinkled flame propagation based on a scalar dissipation equation. *Combustion and Flame*, 96(4), pp.443–457.
- Markatos, N. & Pericleous, K. (1984). Laminar and turbulent natural convection in an enclosed cavity. *International Journal of Heat and Mass*, 27(5), pp.755–772.
- Markatos, N.C., Spalding, D.B. & Tatchell, D.G. (1977). *Combustion of hydrogen injected into a supersonic airstream (the SHIP computer program)*. NASA CR-2802.
- Masri, A.R., AlHarbi, A., Meares, S. & Ibrahim, S.S. (2012). A Comparative Study of Turbulent Premixed Flames Propagating Past Repeated Obstacles. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 51(22), pp.7690–7703.
- McDonough, J.M. (2007). *Introductory lectures on turbulence - Physics, Mathematics and Modeling*. Departments of Mechanical Engineering and Mathematics University of Kentucky.
- Meneveau, C. & Katz, J. (2000). Scale-Invariance and Turbulence Models for Large-Eddy Simulation. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 32(1), pp.1–32.
- Meneveau, C. & Poinso, T. (1991). Stretching and quenching of flamelets in premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 86(4), pp.311–332.
- Menter, F.R. (1994). Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. *AIAA Journal*, 32(8), pp.1598–1605.
- Metghalchi, M. & Keck, J.C. (1980). Laminar burning velocity of propane-air mixtures at high temperature and pressure. *Combustion and Flame*, 38, pp.143–154.
- Meyers, J., Geurts, B.J. & Baelmans, M. (2003). Database analysis of errors in large-eddy simulation. *Physics of Fluids*, 15(9), pp.2740–2755.
- Mira Martinez, D. & Jiang, X. (2013). Numerical investigations of a hydrogen impinging flame with different finite-rate chemical kinetic mechanisms. *Fuel*, 109, pp.285–296.
- Mittal, R. & Moin, P. (1997). Suitability of Upwind-Biased Finite Difference Schemes for Large-Eddy Simulation of Turbulent Flows. *AIAA Journal*, 35(8), pp.1415–1417.

- Moin, P. & Mahesh, K. (1998). DIRECT NUMERICAL SIMULATION: A Tool in Turbulence Research. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30(1), pp.539–578.
- Molkov, V. (2012). *Fundamentals of Hydrogen Safety Engineering, parts I & II*. Free download e-book, bookboon.com, ISBN: 978-87-403-0279-0.
- Molkov, V. & Bragin, M. (2015). Hydrogen–air deflagrations: Vent sizing correlation for low-strength equipment and buildings. *International Journal of Hydrogen Energy*, 40(2), pp.1256–1266.
- Molkov, V., Makarov, D. & Schneider, H. (2006). LES modelling of an unconfined large-scale hydrogen-air deflagration. *Journal of Physics D (Applied Physics)*, 39(20), pp.4366–76.
- Molkov, V., Makarov, D. & Schneider, H. (2007). Hydrogen-air deflagrations in open atmosphere: Large eddy simulation analysis of experimental data. *International Journal of Hydrogen Energy*, 32(13), pp.2198–2205.
- Molkov, V., Verbecke, F. & Makarov, D. (2008). LES of Hydrogen-Air Deflagrations in a 78.5-m Tunnel. *Combustion Science and Technology*, 180(5), pp.796–808.
- Molkov, V.V. & Makarov, D.V. (2006). Rethinking the Physics of a Large-Scale Vented Explosion and its Mitigation. *Process Safety and Environmental Protection*, 84(1), pp.33–39.
- Moult, A., Spalding, D.B. & Markatos, N.C.G. (1979). The solution of flow problems in highly irregular domains by the finite-difference method. *Trans Inst Chem Eng*, 57, pp.200–204.
- NFPA 68. (2013). *Standard on Explosion Protection by Deflagration Venting*. Quincy, MA, USA: National Fire Protection Association.
- North, G.L. & Santavicca, D.A. (1990). The Fractal Nature of Premixed Turbulent Flames. *Combustion Science and Technology*, 72(4–6), pp.215–232.
- O’Hern, T.J., Weckman, E.J., Gerhart, A.L., TIESZEN, S.R. & Schefer, R.W. (2005). Experimental study of a turbulent buoyant helium plume. *Journal of Fluid Mechanics*, 544, pp.143–171.
- OECD. (2000). Flame acceleration and deflagration to detonation transition in nuclear industry. State of the Art Report NEA/CSNI/R report 7. *Nuclear Energy Agency*.
- Oran, E.S. (2015). Understanding explosions – From catastrophic accidents to creation of the universe. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35(1), pp.1–35.
- Oran, E.S. & Gamezo, V.N. (2007). Origins of the deflagration-to-detonation transition in gas-phase combustion. *Combustion and Flame*, 148(1–2), pp.4–47.
- Patankar, S. V. (1980). *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow (Series on Computational Methods in Mechanics and Thermal Science)*. Hemisphere Publishing Corporation.
- Patel, M., Cross, M., Markatos, N.C. & Mace, A.C.H. (1987). An evaluation of eleven discretization schemes for predicting elliptic flow and heat transfer in supersonic jets. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 30(9), pp.1907–1925.
- Patel, M.K. & Markatos, N.C. (1986). An evaluation of eight discretization schemes for two-dimensional convection-diffusion equations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 6(3), pp.129–153.
- Peters, N. (1986). Laminar flamelet concepts in turbulent combustion. *Twenty-First Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute*, 21(1), pp.1231–1250.
- Peters, N. (1999). The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 384, pp.107–132.
- Peters, N. (2000). *Turbulent Combustion*. Cambridge University Press.
- Petrova, M.V. & Williams, F.A. (2006). A small detailed chemical-kinetic mechanism for hydrocarbon combustion. *Combustion and Flame*, 144(3), pp.526–544.
- Piomelli, U. (1999). Large-eddy simulation: achievements and challenges. *Progress in Aerospace Sciences*, 35(4), pp.335–362.
- Piomelli, U. & Chasnov, J.R. (1996). *Large-Eddy Simulations: Theory and Applications* (pp. 269–336). Springer Netherlands.
- Pitsch, H. (2006). Large-eddy simulation of turbulent combustion. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 38(1), pp.453–482.
- Pitsch, H. & De Lageneste, D.L. (2002). Large-eddy simulation of premixed turbulent combustion using a level-set approach. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29(2), pp.2001–2008.

- Poinsot, T. (1996). Using direct numerical simulations to understand premixed turbulent combustion. *Symposium (International) on Combustion*, 26(1), pp.219–232.
- Poinsot, T. & Veynante, D. (2005). *Theoretical and Numerical Combustion, Second Edition*. R.T. Edwards, Inc.; 2nd edition.
- Poinsot, T., Veynante, D. & Candel, S. (1991). Quenching processes and premixed turbulent combustion diagrams. *Journal of Fluid Mechanics Digital Archive*, 228, p.561.
- Pope, S.B. (2000). *Turbulent Flows*. Cambridge University Press.
- Proust, C. & Leprette, E. (2009). The dynamics of vented gas explosions. *Process Safety Progress*, 29(3), pp.231–235.
- Quillatre, P., Vermorel, O., Poinsot, T. & Ricoux, P. (2013). Large Eddy Simulation of Vented Deflagration. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 52(33), pp.11414–11423.
- Razus, D.M. & Krause, U. (2001). Comparison of empirical and semi-empirical calculation methods for venting of gas explosions. *Fire Safety Journal*, 36(1), pp.1–23.
- Reynolds, O. (1883). An Experimental Investigation of the Circumstances Which Determine Whether the Motion of Water Shall Be Direct or Sinuous, and of the Law of Resistance in Parallel Channels. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 174, pp.935–982.
- Rodi, W. (1993). *Turbulence Models and Their Application in Hydraulics - A State of the Art Review*. CRC Press.
- Roy, G.D., Frolov, S.M., Borisov, A.A. & Netzer, D.W. (2004). Pulse detonation propulsion: challenges, current status, and future perspective. *Progress in Energy and Combustion Science*, 30(6), pp.545–672.
- Saad, Y. (1994). Highly Parallel Preconditioners for General Sparse Matrices. *Golub G., Lusk M., Greenbaum A. (Eds) Recent Advances in Iterative Methods*, 60, pp.165–199.
- Saad, Y. (2003). *Iterative methods for sparse linear systems* (2nd ed.). Society for Industrial and Applied Mathematics.
- Sagaut, P. (2006). *Large eddy simulation for incompressible flows: an introduction*. (Springer, Ed.) (3rd ed.).
- Said, R. & Borghi, R. (1988). A simulation with a “cellular automaton” for turbulent combustion modelling. *22nd Symposium (International) on Combustion*, 22(1), pp.569–577.
- Sato, Y., Iwabuchi, H., Groethe, M., Merilo, E. & Chiba, S. (2006). Experiments on hydrogen deflagration. *Journal of Power Sources*, 159(1), pp.144–148.
- Schefer, R.W., Kulatilaka, W.D., Patterson, B.D. & Settersten, T.B. (2009). Visible emission of hydrogen flames. *Combustion and Flame*, 156(6), pp.1234–1241.
- Schmid, H.-P., Habisreuther, P. & Leuckel, W. (1998). A Model for Calculating Heat Release in Premixed Turbulent Flames. *Combustion and Flame*, 113(1–2), pp.79–91.
- Selle, L., Lartigue, G., Poinsot, T., Koch, R., Schildmacher, K.-U., Krebs, W., Prade, B., Kaufmann, P. & Veynante, D. (2004). Compressible large eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes. *Combustion and Flame*, 137(4), pp.489–505.
- Sha, W.T. (1980). An overview on rod-bundle thermal-hydraulic analysis. *Nuclear Engineering and Design*, 62(1–3), pp.1–24.
- Sharp, D.H. (1984). An overview of Rayleigh-Taylor instability. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 12(1), pp.3–18.
- Shy, S.S., Lin, W.J. & Wei, J.C. (2000). An experimental correlation of turbulent burning velocities for premixed turbulent methane-air combustion. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 456(2000).
- Spalding, D.B. (1971). Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames. *Symposium (International) on Combustion*, 13(1), pp.649–657.
- Spalding, D.B. (1976). Development of the eddy-break-up model of turbulent combustion. *Symposium (International) on Combustion*, 16(1), pp.1657–1663.
- Strelets, M. (2001). Detached eddy simulation of massively separated flows. In *39th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. Reston, Virginia: American Institute of Aeronautics and Astronautics.
- Summerfield, M. (1955). The structure and propagation mechanism of turbulent flames in high speed flow. *Journal of Jet Propulsion*.
- Sustek, J. & Janovsky, B. (2013). Comparison of empirical and semi-empirical equations for vented gas

- explosion with experimental data. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 26(6), pp.1549–1557.
- Sweby, P.K. (1984). High Resolution Schemes Using Flux Limiters for Hyperbolic Conservation Laws. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 21(5), pp.995–1011.
- Taylor, G. (1950). The instability of liquid surfaces when accelerated in a direction perpendicular to their planes. I. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 201(1065), pp.192–196.
- Tennekes, H. & Lumley, J.L. (1972). *A First Course in Turbulence*. The MIT Press.
- Tominaga, Y. & Stathopoulos, T. (2007). Turbulent Schmidt numbers for CFD analysis with various types of flowfield. *Atmospheric Environment*, 41(37), pp.8091–8099.
- Tse, S.D., Zhu, D.L. & Law, C.K. (2000). Morphology and burning rates of expanding spherical flames in H₂/O₂/inert mixtures up to 60 atmospheres. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28(2), pp.1793–1800.
- Tsuruda, T. & Hirano, T. (1987). Growth of Flame Front Turbulence During Flame Propagation Across an Obstacle. *Combustion Science and Technology*, 51(4–6), pp.323–328.
- Vagelopoulos, C.M., Egolfopoulos, F.N. & Law, C.K. (1994). Further considerations on the determination of laminar flame speeds with the counterflow twin-flame technique. *Symposium (International) on Combustion*, 25(1), pp.1341–1347.
- van Wingerden, C.J.M., van den Berg, A.C. & Opschoor, G. (1989). Vapor cloud explosion blast prediction. *Plant/Operations Progress*, 8(4), pp.234–238.
- Vasudeo, N., Echehki, T., Day, M.S. & Bell, J.B. (2010). The regime diagram for premixed flame kernel-vortex interactions—Revisited. *Physics of Fluids*, 22(4), p.43602.
- Venetsanos, A., Huld, T., Adams, P. & Bartzis, J. (2003). Source, dispersion and combustion modelling of an accidental release of hydrogen in an urban environment. *Journal of Hazardous Materials*, 105(1–3), pp.1–25.
- Venetsanos, A.G., Papanikolaou, E.A. & Bartzis, J.G. (2010). The ADREA-HF CFD code for consequence assessment of hydrogen applications. *International Journal of Hydrogen Energy*, 35(8), pp.3908–3918.
- Versteeg, H. & Malalasekera, W. (2007). *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method* (2nd ed.). Prentice Hall.
- Veynante, D., Trouvé, A., Bray, K.N.C. & Mantel, T. (1997). Gradient and counter-gradient scalar transport in turbulent premixed flames. *Journal of Fluid Mechanics*, 332, pp.263–293.
- Veynante, D. & Vervisch, L. (2002). Turbulent combustion modeling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 28(3), pp.193–266.
- Waterson, N.P. & Deconinck, H. (2007). Design principles for bounded higher-order convection schemes – a unified approach. *Journal of Computational Physics*, 224(1), pp.182–207.
- Wen, X., Yu, M., Liu, Z. & Sun, W. (2012). Large eddy simulation of methane–air deflagration in an obstructed chamber using different combustion models. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 25(4), pp.730–738.
- White, F.M. (1991). *Viscous Fluid Flow* (2nd ed.). McGraw-Hill.
- Wilcox, D. (2008). Formulation of the k- ω Turbulence Model Revisited. *AIAA Journal*, 46(11), pp.2823–2838.
- Wilcox, D.C. (2006). *Turbulence Modeling for CFD* (3rd ed.). DCW Industries, Inc., La Canada, California.
- Williams, F.A. (1985). *Combustion theory - Combustion Science and Engineering Series, Second edition*. Menlo Park, California: The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc.
- Williams, F.A. (2008). Detailed and reduced chemistry for hydrogen autoignition. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 21(2), pp.131–135.
- Wu, F., Jomaas, G. & Law, C.K. (2013). An experimental investigation on self-acceleration of cellular spherical flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 34(1), pp.937–945.
- Xiao, H., Makarov, D., Sun, J. & Molkov, V. (2012). Experimental and numerical investigation of premixed flame propagation with distorted tulip shape in a closed duct. *Combustion and Flame*, 159(4), pp.1523–1538.
- Xie, Z.-T. & Castro, I.P. (2008). Efficient Generation of Inflow Conditions for Large Eddy Simulation of Street-Scale Flows. *Flow, Turbulence and Combustion*, 81(3), pp.449–470.

- Yakhot, V. (1988). Propagation Velocity of Premixed Turbulent Flames. *Combustion Science and Technology*, 60(1–3), pp.191–214.
- Yakhot, V. & Orszag, S.A. (1986). Renormalization group analysis of turbulence. I. Basic theory. *Journal of Scientific Computing*, 1(1), pp.3–51.
- Yáñez, J., Kotchourko, A. & Lelyakin, A. (2012). Hydrogen deflagration simulations under typical containment conditions for nuclear safety. *Nuclear Engineering and Design*, 250, pp.678–686.
- Zimont, V. & Lipatnikov, A. (1995). A numerical model of premixed turbulent combustion of gases. *Chem. Phys. Rep*, 14(7), pp.993–1025.
- Zimont, V., Polifke, W., Bettelini, M. & Weisenstein, W. (1998). An Efficient Computational Model for Premixed Turbulent Combustion at High Reynolds Numbers Based on a Turbulent Flame Speed Closure. *ASME. J. Eng. Gas Turbines Power*, 120(3), pp.526–532.
- Zimont, V.L. (1979). Theory of turbulent combustion of a homogeneous fuel mixture at high reynolds numbers. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 15(3), pp.305–311.
- Γιαννίση, Σ. (2016). *Μελέτη διασποράς υδρογόνου και φυσικού αερίου με υπολογιστική ρευστομηχανική*. Διδακτορική διατριβή, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Σχολή Χημικών Μηχανικών.
- Κουτσουράκης, Ν. (2014). *Τυρβώδης ροή και διασπορά ρύπων στο αστικό περιβάλλον*. Διδακτορική διατριβή, Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών.
- Λιάκος, Χ.Χ. (2000). *Μαθηματική μοντελοποίηση τυρβώδους καύσης και εφαρμογή σε τυρβώδεις φλόγες*. Διδακτορική διατριβή, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Σχολή Χημικών Μηχανικών.
- Παπανικολάου, Ε. (2011). *Μοντελοποίηση διασποράς υδρογόνου και άλλων ανωστικών αερίων σε κλειστούς χώρους με τη μεθοδολογία της υπολογιστικής ρευστομηχανικής*. Διδακτορική διατριβή, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Σχολή Χημικών Μηχανικών.

