



**Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο**  
**Σχολή Χημικών Μηχανικών**  
**Τομέας Ανάλυσης, Σχεδιασμού**  
**& Ανάπτυξης Διεργασιών και**  
**Συστημάτων (II)**

**Υπολογιστική Μελέτη της Διασποράς**  
**Taylor - Aris**

**Διπλωματική Εργασία**  
**του Σοφοκλή Κ. Καλοϊδά**

**Επιβλέπων Καθηγητής**  
**Ανδρέας Γ. Μπουντουβής**

**Αθήνα**  
**Ιούλιος 2020**

## Ευχαριστίες

Σε αυτό το σημείο οφείλω ένα “ευχαριστώ”

στον κ. Μπουντουβή για την επίβλεψη και τις συμβουλές του

στον δρ Γάκη για την καθοδήγηση του

στους γονείς και την οικογένεια μου

στους φίλους και τους δικούς μου ανθρώπους

που με συντροφεύουν στο ταξίδι της ζωής

# Περιεχόμενα

Περίληψη.....	5
Abstract .....	6
Κεφάλαιο 1: Εισαγωγή .....	7
Κεφάλαιο 2: Βασικές Αρχές Φαινομένων Μεταφοράς Μάζας και Ρευστομηχανικής .....	9
2.1 Αρχές Φαινομένων Μεταφοράς Μάζας .....	9
2.1.1 Μοριακή Διάχυση.....	9
2.1.2 Συναγωγή.....	11
2.1.3 Ροή με συνδυασμό μοριακής διάχυσης και συναγωγή.....	12
2.2 Αρχές Ρευστοδυναμικής.....	13
2.2.1 Εξίσωση Συνέχειας (Ισοζύγιο Μάζας Ροής) .....	13
2.2.2 Εξίσωση Κίνησης .....	14
2.2.3 Εξίσωση Navier-Stokes .....	14
2.2.4 Ροή Hagen-Poiseuille .....	15
Κεφάλαιο 3: Το Φαινόμενο Διασποράς Taylor-Aris.....	18
3.1 Εισαγωγή.....	18
3.1.1 Το παράδειγμα της εμβολικής ροής .....	19
3.1.2 Το παράδειγμα της ροής Hagen Poiseuille – Φαινόμενο Taylor-Aris.....	20
3.2 Ο Συντελεστής Taylor-Aris $K$ .....	22
4.1 Παρουσίαση του προβλήματος και μεθοδολογία .....	30
4.1.1 Παρουσίαση του προβλήματος .....	30
4.1.2 Παρουσίαση της μεθοδολογίας .....	32
4.2 Μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων .....	33
4.2.1 Δημιουργία πλέγματος (Mesh).....	34
4.2.2 Επίλυση Εξισώσεων στο πλέγμα.....	35
4.3 Υπολογιστικά Πειράματα.....	36
Κεφάλαιο 5: Παρουσίαση Αποτελεσμάτων .....	39
5.1 Εισαγωγή – Κατανομή συγκέντρωσης.....	39
5.2 Υπολογισμός Συντελεστή Διάχυσης .....	40
5.3 Σύγκριση για Διαφορετικά Πλέγματα (Mesh).....	43
5.4 Αποτελέσματα Διασποράς.....	45
5.4.1 Υπολογισμός στην περιοχή Taylor.....	45
5.4.2 Υπολογισμός στην περιοχή Taylor-Aris .....	48

5.5 Συγκέντρωση των αποτελεσμάτων.....	51
5.5.1 Αξιοπιστία Αποτελεσμάτων .....	53
5.5.2 Χρονική εξέλιξη .....	55
Κεφάλαιο 6: Συμπεράσματα .....	61
Παράρτημα: Σύμβολα .....	64
Βιβλιογραφία.....	65

## Περίληψη

Η μελέτη της διασποράς Taylor-Aris βασίζεται στην κατανόηση βασικών αρχών της μεταφοράς μάζας και ορμής. Εγκείται στη διερεύνηση της συνδυαστικής επίδρασης της μοριακής διάχυσης και συναγωγής στην κατανομή της συγκέντρωσης ενός πολυσυστατικού ρευστού μέσω του συντελεστή διασποράς  $K$ . Ο συντελεστής επηρεάζεται τόσο από την αλληλεπίδραση των επιμέρους ρευστών αλλά και από μεγέθη της ροής. Ενδιαφέρον παρουσιάζει η μελέτη της χρονικής εξέλιξης της διασποράς, με βάση την ανάλυση που πραγματοποιήθηκε από τους Taylor και Aris.

Η υπολογιστική διερεύνηση της διασποράς γίνεται με τη χρήση λογισμικού υπολογισμών φαινομένων μεταφοράς, που προσομοιώνει ρεαλιστικά, προβλήματα φυσικών και χημικών διεργασιών.

Στην παρούσα εργασία έγινε χρήση του λογισμικού Comsol Multiphysics 5.2 και Matlab για την προσομοίωση τα διαποράς και για τον υπολογισμό των απαραίτητων μεγεθών.

Έγινε υπολογιστική μελέτη σε ένα κυλινδρικό αγωγό στον οποίο η κύρια ροή αποτελείται από ένα ρευστό  $B$  στο οποίο εισάγεται για αμελητέο χρονικό διάστημα ένας παλμός ενός ρευστού  $A$ . Η μελέτη της κατανομής της συγκέντρωσης του ρευστού  $A$  σε εξέλιξη με τον χρόνο για διαφορετικά δεδομένα ροής και ο υπολογισμός του συντελεστή διασποράς  $K$  από την κατανομή της συγκέντρωσης αποτέλεσε την βάση της εργασίας.

Τα αποτελέσματα, που προέκυψαν στα πλαίσια των υπολογιστικών πειραμάτων της παρούσας εργασίας, οδήγησαν στην χαρτογράφηση της περιοχής στην οποία το φαινόμενο της διασποράς Taylor-Aris λαμβάνει χώρα ως συνάρτηση του αριθμού Peclet της ροής και του αδιάστατου χρόνου Fourier. Επιπλέον, εξετάστηκε η συσχέτιση της τιμής του συντελεστή διασποράς με την εξέλιξη του φαινομένου της διασποράς. Μέσα από την μελέτη προκύψανε συμπεράσματα για την εξέλιξη του φαινομένου της διασποράς για μεγάλους αριθμούς Peclet και της μεταβολής της θέσης της μέγιστης συγκέντρωσης του ρευστού  $A$  εντός του αγωγού.

## **Abstract**

Taylor-Aris dispersion is based in understanding basic principles of mass and momentum transport. It is an asset to explain the combined effect of molecular diffusion and convection for the concentration distribution of a multicomponent fluid with the use of dispersion coefficient  $K$ . Dispersion coefficient is affected by interaction of individual fluids and by flow sizes offering an exact explanation (using average velocity and concentration) of molecular dispersion in the fluid. There is interest in studying the time evolution of dispersion according to the analysis of Taylor and Aris.

The computational investigation of the dispersion was made with the use of appropriate software for transport phenomena, which are used to simulate, realistically, problems of physical and chemical processes.

The current study used software of Comsol Multiphysics 5.2 and Matlab to simulate the dispersion of the computational experiments and to calculate the necessary sizes.

The computational study was realized in a cylindrical duct. The main flow inside the duct consists of an hypothetical fluid B inside which for a obsolete amount of time a pulse of a fluid A is inserted. Studying the concentration distribution of fluid A according to time and different flow data as well as calculating the dispersion coefficient  $K$  by the concentration distribution was the main basis of the thesis.

The results, which developed from the computational experiments of the current study, led to mapping the region in which the Taylor-Aris dispersion happens as a function of Peclet number and dimensionless time (Fourier number). Also, the association of time evolution of dispersion coefficient for the computational experiments and the dispersion phenomenon was examined. Through the examination emerged general observations about the evolution of dispersion for big Peclet numbers and resulted in a prediction about the distance travelled by the point which the maximum concentration is located.

## **Κεφάλαιο 1: Εισαγωγή**

Στην παρούσα διπλωματική εργασία μελετάται υπολογιστικά η διασπορά Taylor-Aris. Πιο συγκεκριμένα, μελετάται η συμφωνία μεταξύ του θεωρητικού υπολογισμού του συντελεστή διασποράς Taylor-Aris και του υπολογισμού με χρήση λογισμικού προσομοίωσης φαινομένων μεταφοράς και ρευστοδυναμικής ρευστών. Γίνεται σύγκριση των μετρήσεων σε διαφορετικές συνθήκες ροής του υπολογιστικού πειράματος που πραγματοποιήθηκε στα πλαίσια της διπλωματικής εργασίας. Ουσιαστικά, διαμορφώνεται μέσω της προσομοίωσης η κατανομή της συγκέντρωσης του ρευστού με βάση το φαινόμενο της διασποράς μελετώντας τους αδιάστατους αριθμούς Peclet και Fourier.

Η διασπορά Taylor-Aris αφορά την μελέτη της ανάπτυξης της κατανομής της συγκέντρωσης ενός ρευστού A, που έχει εισαχθεί σε ένα ρευστό B, εντός ενός κυλινδρικού αγωγού, ακτίνας R, που επικρατεί η στρωτή ροή. Παρατηρείται το «παράδοξο» πως η κατανομή της συγκέντρωσης του A δεν παίρνει την παραβολική μορφή της ταχύτητας της στρωτής ροής. Ο λόγος έγκειται στην συνδυαστική επίδραση της συναγωγής και της μοριακής διάχυσης, που ωθεί τελικά το ρευστό A να διασπείρεται αξονικά κατά μήκος της ροής. Ο πειραματικός τρόπος προσδιορισμού του φαινομένου πραγματοποιείται με την εισαγωγή ενός παλμού του ρευστού A στο ρευστό B και η μελέτη της κατανομής συγκεντρώσεων που διαμορφώνει η ροή.

Η διασπορά Taylor-Aris παρατηρείται σε ένα μεγάλο φάσμα των διεργασιών που περιέχουν μεταφορά μάζας πολυσυστατικών ρευστών. Η διασπορά Taylor-Aris παρατηρείται, ενδεικτικά, από τους εργαστηριακούς χρωματογραφικούς διαχωρισμούς, στην εκτίμηση της μίξης των παραγώγων κλασματικής απόσταξης πετρελαίου κατά την μεταφορά τους σε αγωγούς, την μελέτη της εξάπλωσης μια ανεπιθύμητης ουσίας σε ένα ποτάμι, την μελέτη της ροής μιας φαρμακευτικής ουσίας εντός του ανθρώπινου οργανισμού μέσω του αίματος στις φλέβες μέχρι και την μελέτη της ροής εντός ενός πορώδους υλικού. Συμπερασματικά, η διασπορά Taylor-Aris εμφανίζεται από την μεταφορά ρευστών σε γεωμετρίες βιομηχανικής χρήσης διαμέτρου της τάξης μεγέθους του μέτρου (m) μέχρι τριχοειδών σωλήνων της τάξης μεγέθους νανόμετρων (nm).

Στην παρούσα εργασία, δημιουργείται ένας χάρτης της περιοχής Taylor-Aris με βάση τους αδιάστατους αριθμούς Peclet και Fourier, παρατηρείται η σταδιακή προσέγγιση του

συντελεστή Taylor-Aris σε μικρές αποκλίσεις από την θεωρητική τιμή και γίνεται σύγκριση μεταξύ αποτελεσμάτων διαφορετικών γεωμετριών και παραμέτρων.

Στο Κεφάλαιο 2 γίνεται μια εισαγωγή σε βασικές έννοιες της ρευστοδυναμικής που είναι απαραίτητες για την κατανόηση της διασποράς. Η διασπορά Taylor-Aris βασίζεται σε παραδοχές και απλουστεύσεις πάνω σε βασικές έννοιες της ρευστοδυναμικής.

Στο Κεφάλαιο 3 περιγράφεται η λογική της διασποράς Taylor-Aris και οι παραδοχές οι οποίες γίνονται. Αναπτύσσεται το μοντέλο που πρότεινε ο Taylor και στην συνέχεια η προσθήκη του Aris. Προκύπτει η προσέγγιση του συντελεστή διασποράς  $K$ , που αποτελεί το συντελεστή υπολογισμού της διασποράς.

Στο Κεφάλαιο 4 περιγράφεται το πρόβλημα που στήθηκε, η διαδικασία που ακολουθήθηκε στο λογισμικό Comsol Multiphysics 5.2 για να καταστρωθούν οι προσομοιώσεις της ροής των δύο ρευστών και η μεθοδολογία των υπολογιστικών πειραμάτων που πραγματοποιήθηκαν.

Στο Κεφάλαιο 5 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της χαρτογράφησης της περιοχής Taylor-Aris όπως προκύπτει από τις προσομοιώσεις της ροής των ρευστών με την χρήση του λογισμικού. Επιπλέον, παρουσιάζεται η προσέγγιση της τιμής του συντελεστή διασποράς  $K$  συναρτήσει του χρόνου για την καλύτερη κατανόηση της εξέλιξης του φαινομένου της διασποράς. Τέλος, παρουσιάζονται υπολογιστικά πειράματα που σχετίζονται με την αξιοπιστία των αποτελεσμάτων.

Στο Κεφάλαιο 6 ακολουθεί η παρουσίαση των συμπερασμάτων της διπλωματικής εργασίας.



## Κεφάλαιο 2: Βασικές Αρχές Φαινομένων Μεταφοράς

### Μάζας και Ρευστομηχανικής

Ο κλάδος της χημικής μηχανικής αποτελεί εφαρμογή των αρχών της φυσικής, χημείας, μαθηματικών οικονομικών και τεχνικών επιστημών σε πεδία που σχετίζονται με την ροή των υλικών, τον μετασχηματισμό της ύλης και την διεξαγωγή διεργασιών σε εγκαταστάσεις όπου η ύλη υποβάλλεται σε κατεργασία ή επεξεργασία κατά τον ωφελιμότερο τρόπο.

Από τον παραπάνω ορισμό γίνεται κατανοητή η σημασία της ρευστομηχανικής και των φαινομένων μεταφοράς για τις εφαρμογές της χημικής μηχανικής.

Στην περίπτωση της παρούσας διπλωματικής εργασίας η μελέτη του φαινομένου της διασποράς Taylor-Aris βασίζεται σε βασικές αρχές της ρευστομηχανικής και των φαινομένων μεταφοράς.

Για το Κεφάλαιο 2 θα θεωρείται πως ισχύει στις αρχές που περιγράφονται η υπόθεση του συνεχούς μέσου για τα ρευστά (Παπαϊωάννου, 2002).

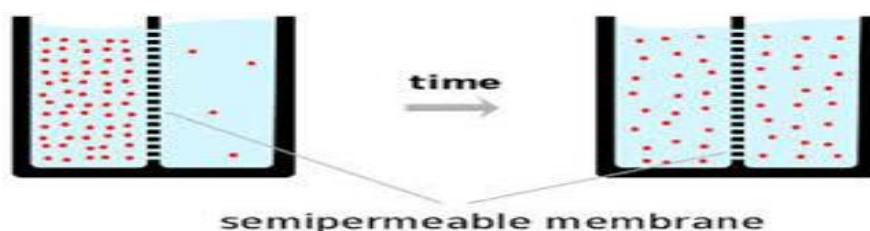
### **2.1 Αρχές Φαινομένων Μεταφοράς Μάζας**

Τα Φαινόμενα Μεταφοράς Μάζας όπως υποδηλώνεται και από το όνομα περιγράφουν την μεταφορά μάζας σε ένα σύστημα από ένα σημείο σε ένα άλλο. Η μεταφορά μάζας μπορεί να συμβαίνει σε μία φάση (μονοφασικό σύστημα) ή μεταξύ διαφορετικών φάσεων (πολυφασικό σύστημα). Οι πολλαπλές φάσεις προκαλούνται από την αδυναμία πλήρους ανάμιξης διαφορετικών ρευστών. Ένα μονοφασικό σύστημα μπορεί να αποτελείται από ένα μόνο συστατικό μίγμα ή ένα πολυσυστατικό μίγμα πλήρους ανάμιξης (Ασημακόπουλος, Λυγερού, & Αραμπατζής, 2012).

Διακρίνονται δύο βασικοί μηχανισμοί μεταφοράς μάζας στα ρευστά. Η μοριακή διάχυση και η συναγωγή.

#### **2.1.1 Μοριακή Διάχυση**

Η μοριακή διάχυση αποτελεί την θερμική κίνηση των μορίων ενός ρευστού σε θερμοκρασίες μεγαλύτερες του απόλυτου μηδέν. Η κινητήρια δύναμη της διάχυσης οφείλεται στην



παρουσία διαφοράς δυναμικού. Μέσω της θερμικής κίνησης των μορίων, η κίνηση γίνεται από τις περιοχές αυξημένης μοριακής συγκέντρωσης σε αυτές μειωμένης συγκέντρωσης, τείνοντας να δημιουργηθεί μια ισορροπία στην συγκέντρωση συνολικά του πολυσυστατικού ρευστού με την πάροδο του χρόνου (Atkins & De Paula, 2014). Από την στιγμή που επικρατεί ισορροπία στην συγκέντρωση του μίγματος ρευστού τα μόρια συνεχίζουν να κινούνται σε τυχαίες κατευθύνσεις μη διαταράσσοντας την θερμοδυναμική ισορροπία. Αυτή η διαδικασία αποτελεί αποτέλεσμα της μοριακής διάχυσης και ονομάζεται αυτό-διάχυση (self-diffusion).

Για να δοθεί ένα παράδειγμα, ας θεωρηθεί ένα δοχείο που χωρίζεται από έναν ημιπερατό υμένα. Στις δύο περιοχές που χωρίζει ο υμένας υπάρχει μίγμα των ρευστών A και B με υψηλή συγκέντρωση του A (διαλυμένη ουσία) στην μια περιοχή (περιοχή 1) και καθαρά το ρευστό B (διαλύτης) στην άλλη (περιοχή 2) αντίστοιχα (βλέπε σχήμα 2.1). Η ημιπερατή μεμβράνη ορίζει την διεπιφάνεια μεταξύ των δυο ρευστών. Με το πέρασμα του χρόνου η τυχαία θερμική κίνηση μορίων από τις 2 περιοχές θα διαπερνά την διεπιφάνεια. Έτσι, στην διεπιφάνεια θα υπάρχει εισροή και εκροή του ρευστού A και B προς την περιοχή στην οποία αρχικά βρισκόταν το μίγμα υψηλής συγκέντρωσης A. Απόντος όμως του συστατικού A στην περιοχή 2 η εισροή συστατικού A προς την περιοχή 1 θα είναι μηδενική οδηγώντας έτσι στατιστικά στο πέρασμα μορίων του A στην περιοχή 2 αυξάνοντας την συγκέντρωση της σε A και μειώνοντας την συγκέντρωση του A στην περιοχή 1 καθώς ο αριθμός μορίων του A είναι πεπερασμένος. Αυτή η διαδικασία σταδιακά θα αρχίσει να οδηγεί στην εξισορρόπηση των εισροών και εκροών A στην διεπιφάνεια όταν και οι συγκεντρώσεις εξισορροπηθούν. Έπειτα, όταν έχει επέλθει ισορροπία, για τις εισροές και εκροές δεν υπάρχει κάποιος στατιστικός λόγος να δημιουργούνται περιοχές υψηλότερης και μικρότερης μοριακής συγκέντρωσης με διάρκεια στον χρόνο. Εφόσον, η κίνηση των μορίων είναι τυχαία τα γεγονότα ένα μόριο να κινηθεί δεξιά ή αριστερά της διεπιφάνειας είναι ισοπίθανα (Goodsell, 2009) διατηρώντας έτσι την ισορροπία και ερμηνεύοντας γιατί όσο δεν υπάρχει ισορροπία η εισροή μορίων στην περιοχή χαμηλότερης συγκέντρωσης υπερσχύει της εκροής.

Η μοριακή διάχυση αν και εμφανίζεται ως ένα θερμοδυναμικό στατιστικό “σύμπτωμα” ή αποτέλεσμα (Berghout, 2013) τελικά διαπιστώνεται πως ακολουθεί συγκεκριμένους κανόνες. Η μελέτη της σχέσης του φαινομένου με τον χρόνο περιγράφεται με διαφορικές εξισώσεις. Βασικοί κανόνες για την μαθηματική αναπαράσταση της μοριακής διάχυσης δίνονται από τους νόμους του Fick.

### **1<sup>ος</sup> Νόμος του Fick**

Ο 1<sup>ος</sup> νόμος του Fick αναφέρεται σε μόνιμες συνθήκες και δείχνει την σχέση της ροής λόγω διάχυσης με την μοριακή συγκέντρωση των συστατικών. Η μαθηματική μορφή του νόμου,

για όλες τις διαστάσεις του χώρου, με βάση την οποία υπολογίζεται η ροή,  $J_i$ , σε μόνιμες συνθήκες είναι:

$$J_i = -D_{ab} \nabla c_i \quad 1^{\text{ος}} \text{ N. Fick} \quad (2.01)$$

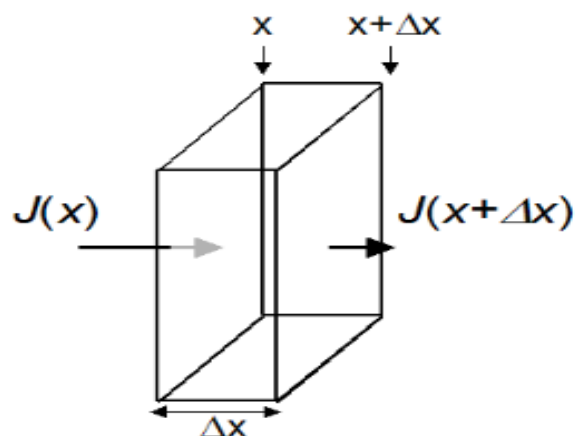
Όπου  $D_{ab}$  ο συντελεστής διάχυσης

$c_i$  η συγκέντρωση του ρευστού  $i$

Έτσι καταλήγουμε με βάση τον 1<sup>ο</sup> Ν. του Fick πως η σχέση ροής και συγκέντρωσης περιγράφεται από το γινόμενο της 1<sup>ης</sup> τάξης παραγώγου της συγκέντρωσης ως προς την χώρο και την σταθερά διάχυσης  $D_{ab}$ .

## 2<sup>ος</sup> Νόμος του Fick

Ο 2<sup>ος</sup> νόμος του Fick δείχνει την μεταβολή της συγκέντρωσης συναρτήσει του χρόνου λόγω του φαινομένου της διάχυσης. Προκύπτει σαν συμπέρασμα του 1<sup>ου</sup> νόμου (εξίσωση (2.01)) και της υπόθεσης πως δεν υπάρχει κάποιος παράγοντας καταστροφής ή δημιουργίας των μορίων. Έτσι, κατά την ροή από μια περιοχή σαν αυτή που απεικονίζεται στο σχήμα 2.3 προκύπτει ένα ισοζύγιο της ροής που δίνεται από το 2<sup>ο</sup> νόμο του Fick με μαθηματική μορφή:



Σχήμα 2.3 Απεικόνιση του 2<sup>ου</sup> v. Fick (Berg, 1983)

$$\frac{\partial c_i}{\partial t}_{diff} = D_{ab} \nabla^2 c_i \quad 2^{\text{ος}} \text{ N. Fick} \quad (2.02)$$

Όπου,  $D_{ab}$  ο συντελεστής διάχυσης

$c_i$  η συγκέντρωση του ρευστού  $i$

Γίνεται αντιληπτό πως η χρονική μεταβολή της συγκέντρωσης είναι γινόμενο του συντελεστή διάχυσης και της 2<sup>ης</sup> τάξης παραγώγου της συγκέντρωσης ως προς την θέση του.

### 2.1.2 Συναγωγή

Ως συναγωγή εννοείται ο μηχανισμός μεταφοράς μάζας ενός ρευστού που οφείλεται στην μακροσκοπική κίνηση του. Με αυτή την έννοια η συναγωγή οφείλεται στην προσανατολισμένη κίνηση σε ‘‘πακέτα’’ ύλης (που προκαλείται από κάποια μηχανική ή άλλη

αιτία) του συνόλου των μορίων του ρευστού οδηγώντας στην μεταφορά τους στον χώρο (Ασημακόπουλος, Λυγερού, & Αραμπατζής, 2012).

Η ροή της συναγωγής,  $J_i$ , ενός μίγματος ρευστών πλήρους ανάμιξης ουσιαστικά περιγράφει την κίνηση με την μέση ταχύτητα ενός όγκου του μίγματος. Από μαθηματική σκοπιά αυτό περιγράφεται από την παρακάτω εξίσωση:

$$J_i = c_i \langle \mathbf{u} \rangle, \quad (2.03)$$

Όπου,  $c_i$  η μοριακή συγκέντρωση του ρευστού στον όγκο

$\langle \mathbf{u} \rangle$  η μέση ταχύτητα του ρευστού.

Όπως είναι αναμενόμενο η ροή του ρευστού  $J_i$  έχει την ίδια κατεύθυνση με την μέση ταχύτητα  $\langle \mathbf{u} \rangle$ , όπως φαίνεται κι από την εξίσωση. Αυτό προφανώς εξηγείται καθώς η ροή οφείλεται στην κίνηση από το σύνολο της μάζας του ρευστού. Για ένα πλήρως διαλυμένο μίγμα αυτή η εξίσωση εξηγεί πλήρως την κίνηση του ρευστού. Στην περίπτωση, όμως, που υπάρχει συγκέντρωση μάζας σε συγκεκριμένες περιοχές στον χώρο (πχ αν εισαχθεί απότομα σε ένα ρευστό Β (διαλύτης) το οποίο αποτελεί την κύρια ροή, ένα ρευστό Α (διαλυμένη ουσία)) η παραπάνω εξίσωση δεν αρκεί και χρειάζονται κάποιες επεξηγήσεις.

Εφόσον η μέση ταχύτητα παραμένει σταθερή η εξίσωση της συναγωγής με τον χρόνο γίνεται:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t_{conv}} = -\langle \mathbf{u} \rangle \cdot \nabla c_i \quad (2.04)$$

Με αυτό τον τρόπο καταλήγουμε στην εξίσωση συναγωγής για την περίπτωση μιας ροής στην οποία εμφανίζεται βαθμίδα συγκέντρωσης.

### 2.1.3 Ροή με συνδυασμό μοριακής διάχυσης και συναγωγή

Η ροή ενός μίγματος ρευστών διέπεται από τα δύο φαινόμενα μεταφοράς μάζας που αναφέρθηκαν παραπάνω. Η συνδυαστική εξίσωση της μεταβολής της συγκέντρωσης ενός ρευστού του μίγματος συναρτήσει του χρόνου περιγράφεται, με την προϋπόθεση να μην υπάρχει χημική αντίδραση, από το άθροισμα των εξισώσεων (2.02) και (2.04):

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = \frac{\partial c_i}{\partial t_{conv}} + \frac{\partial c_i}{\partial t_{diff}} \Rightarrow \frac{\partial c_i}{\partial t} + \langle \mathbf{u} \rangle \cdot \nabla c_i = D_{ab} \nabla^2 c_i \quad (2.05)$$

Όπως θα φανεί και στην συνέχεια η εξίσωση αυτή δεν μπορεί να περιγράψει ικανοποιητικά την συνδυαστική επίδραση της συναγωγής και μοριακής διασποράς στην διεύθυνση της κίνησης. Οι παρατηρήσεις του G. I. Taylor για την ροή ενός μίγματος δύο ρευστών εντός ενός αγωγού κατάφεραν να περιγράψουν τον συνδυασμό των δύο φαινομένων μάζας που συνιστούν το φαινόμενο της μοριακής διασποράς.

## 2.2 Αρχές Ρευστοδυναμικής

Η μελέτη της ροής ενός ρευστού σχετίζεται με πολλές βασικές αρχές της ρευστοδυναμικής. Αυτές πλαισιώνουν το περιβάλλον μέσα στο οποίο αναπτύσσεται και το φαινόμενο της διασποράς Taylor-Aris που μελετάται στην παρούσα διπλωματική εργασία.

Αν και η ρευστοδυναμική έχει εύρος αρχών, για οικονομία του χρόνου θα επεξηγηθούν όσες από αυτές είναι απαραίτητες για την παρούσα εργασία.

### 2.2.1 Εξίσωση Συνέχειας (Ισοζύγιο Μάζας Ροής)

Η εξίσωση συνέχειας προκύπτει από το ισοζύγιο μάζας μιας ροής (αρχή διατήρησης της μάζας σε ένα ρέον ρευστό). Ο ρυθμός συσσώρευσης/μείωσης της μάζας οφείλεται στον ρυθμό εισροής μάζας αφαιρώντας τον ρυθμό εκροής της μάζας σε μια περιοχή του χώρου κατά την έλευση ενός χρονικού διαστήματος (Bird, Stewart, & Lightfoot, 2001). Αποτυπώνοντας το σε μια σχηματική εξίσωση:

$$\left( \begin{array}{c} \text{ρυθμός συσσώρευσης} \\ \text{μάζας} \end{array} \right) = \left( \begin{array}{c} \text{ρυθμός εισροής} \\ \text{μάζας} \end{array} \right) - \left( \begin{array}{c} \text{ρυθμός εκροής} \\ \text{μάζας} \end{array} \right)$$

Εφόσον, η ροή αυτή συμβαίνει σε μια περιοχή του χώρου η μάζα θα μετριέται μέσω της πυκνότητας,  $\rho$ , στον χώρο. Έτσι, η εξίσωση τροποποιείται:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}), \quad \text{Εξίσωση Συνέχειας} \quad (2.06)$$

Όπου  $\rho \mathbf{u}$  είναι η μαζική ροή

Λόγω της συναγωγής του ρευστού η διαφορά των ρυθμών εισροής και εκροής αποδίδεται από τον όρο  $\nabla \cdot (\rho \mathbf{u})$  της εξίσωσης (2.06).

Για ένα ρευστό το οποίο θεωρείται πως δεν μπορεί να μεταβληθεί η πυκνότητα του (ασυμπίεστο ρευστό) η εξίσωση συνέχειας μας δίνει πως η εισροή και η εκροή βρίσκονται σε ισορροπία κατά την ροή, εφόσον η μεταβολή της πυκνότητας με τον χρόνο καθίσταται αδύνατη λόγω της ασυμπιεστότητας (Παπαϊωάννου, 2002). Οπότε προκύπτει πως για τα ασυμπίεστα ρευστά:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.07)$$

Για τα περισσότερα νευτωνικά υγρά, η ασυμπιεστότητα είναι μια ασφαλής παραδοχή που ανταποκρίνεται με μικρό σφάλμα στην πραγματικότητα, αν και δεν υπάρχει πλήρως ασυμπίεστο ρευστό στην φύση. Ακόμα και για νευτωνικά αέρια μπορεί να γίνει η παραδοχή,

αν τηρείται το κριτήριο πως η ταχύτητα κίνησης τους είναι πολύ μικρότερη της ταχύτητας διάδοσης του ήχου σε αυτά (Landau & Lifshitz, 1987).

### 2.2.2 Εξίσωση Κίνησης

Η εξίσωση κίνησης αποτυπώνεται από το ισοζύγιο ορμής του ρευστού σε ορισμένο όγκο. Αποτελεί, ουσιαστικά, εφαρμογή της αρχής διατήρησης της ορμής στην κίνηση ενός ρευστού. Περιγραφικά μπορεί να αποτυπωθεί με την εξής σχηματική εξίσωση:

$$\left( \begin{array}{c} \text{ρυθμός μεταβολής} \\ \text{ορμής} \end{array} \right) = \left( \begin{array}{c} \text{ρυθμός εισ} \\ \text{ορμής} \end{array} \right) - \left( \begin{array}{c} \text{ρυθμός εξ} \\ \text{ορμής} \end{array} \right) + \left( \begin{array}{c} \text{επίδραση εξωτερ} \\ \text{δύναμης/ορμής} \end{array} \right)$$

Όπως και στην περίπτωση της εξίσωσης συνέχειας τα μεγέθη αναφέρονται σε ορισμένο όγκο του ρευστού οπότε θα εμφανίζεται η πυκνότητα,  $\rho$ , του ρευστού καθώς η ορμή,  $\mathbf{p} = m\mathbf{u}$ , περιέχει την μάζα,  $m$ .

Γίνεται η παραδοχή πως η μόνη εξωτερική επίδραση στον όγκο του ρευστού που υπάρχει είναι η βαρυτική επίδραση (Bird et al., 2002). Περνώντας από την σχηματική εξίσωση στην αντικατάσταση με τους φυσικούς όρους προκύπτει η εξής μορφή του ισοζυγίου :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{v} = -\nabla \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v} - \nabla p - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} \quad (2.08)$$

$$\left( \begin{array}{c} \text{ολ. ρυθμός} \\ \text{μεταβολής ορμής} \end{array} \right) = \left( \begin{array}{c} \text{ρυθμός μεταβολής ορμής} \\ \text{λόγω συναγωγής} \end{array} \right) - \left( \begin{array}{c} \text{ρυθμός μεταβολής ορμής} \\ \text{λόγω μορ. διάχυσης} \end{array} \right) + \left( \begin{array}{c} \text{ρυθμός μεταβολής ορμής} \\ \text{λόγω εξωτερικής επίδρ.} \end{array} \right)$$

Έτσι, φαίνεται πως η εξίσωση κίνησης οφείλεται σε 3 βασικές αιτίες στην περίπτωση ενός ρευστού σε ροή. Την συναγωγή, την μοριακή διάχυση και όποιον εξωτερικό παράγοντα μεταφέρει ορμή στο ρευστό (θα μπορούσε να είναι και κάποια τεχνητό μέσο όπως μια αντλία).

### 2.2.3 Εξίσωση Navier-Stokes

Η εξίσωση Navier – Stokes προκύπτει άμεσα από την εξίσωση της κίνησης. Αποτελεί την εφαρμογή του 2<sup>ου</sup> v. του Νεύτωνα για τα ρευστά. Η σημασία της εξίσωσης για την μελέτη της ροής των ρευστών είναι μεγάλη καθώς αποτελεί θεμέλιο για την μελέτη της ασυμπίεστης ροής (Παπαϊωάννου, 2002).

Η χρήση της υλικής παραγώγου στην εξίσωση κίνησης δίνει την Navier-Stokes:

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v} + \rho \mathbf{g} \quad \text{εξίσωση Navier-Stokes} \quad (2.09)$$

Όπου,  $\rho$  η πυκνότητα

$p$  η πίεση της ροής

$\mu$  το δυναμικό ιξώδες

$g$  η επιτάχυνση λόγω εξωτερικής επίδρασης

$v$  η ταχύτητα της ροής

Στην συνέχεια διαιρώντας την (2.09) με την πυκνότητα  $\rho$ :

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2\mathbf{v} + \mathbf{g}, \quad (2.10)$$

όπου  $\nu = \mu/\rho$ , είναι το κινηματικό ιξώδες

Ουσιαστικά, αυτή είναι η γενικότερη μορφή της εξίσωσης. Για την εργασία ενδιαφέρον έχει η ασυμπίεστη ροή. Για τροποποιημένες συνθήκες στην ροή αντιστοιχούν άλλες μορφές της εξίσωσης Navier-Stokes.

#### 2.2.4 Ροή Hagen-Poiseuille

Εδώ αναλύεται η ροή που διέπεται από τον νόμο Hagen-Poiseuille. Αναλυτικότερα, περιγράφεται η ασυμπίεστη στρωτή ροή ενός νευτωνικού ρευστού που βρίσκεται εντός ενός κυλινδρικού αγωγού. Η εφαρμογή του νόμου είναι ευρεία και με τροποποιήσεις ανταποκρίνεται και σε διαφορετικά σχήματα του αγωγού (άρα και με τροποποίηση των οριακών συνθηκών)(Průša, 2008). Ανταποκρίνεται από την ύπαρξη μιας ροής εντός ενός κυλινδρικού αγωγού στις αποχετεύσεις (Chatwin, 1985) έως την ροή του αίματος στις φλέβες (Hirshfeld & Nathan, 2020). Τα δύο παραδείγματα χρησιμοποιούνται για να δείξουν πως σε αυτή την μεγάλη διαφορά τάξεων μεγέθους η ροή διέπεται από την ίδια αρχή. Ο λόγος που προκαλείται η ροή είναι η διαφορά δυναμικού. Στην περίπτωση αυτή το μέγεθος που αναφέρεται στο δυναμικό είναι η πίεση. Έτσι, το ρευστό ρέει από τις περιοχές μεγαλύτερης πίεσης σε αυτές μικρότερης.

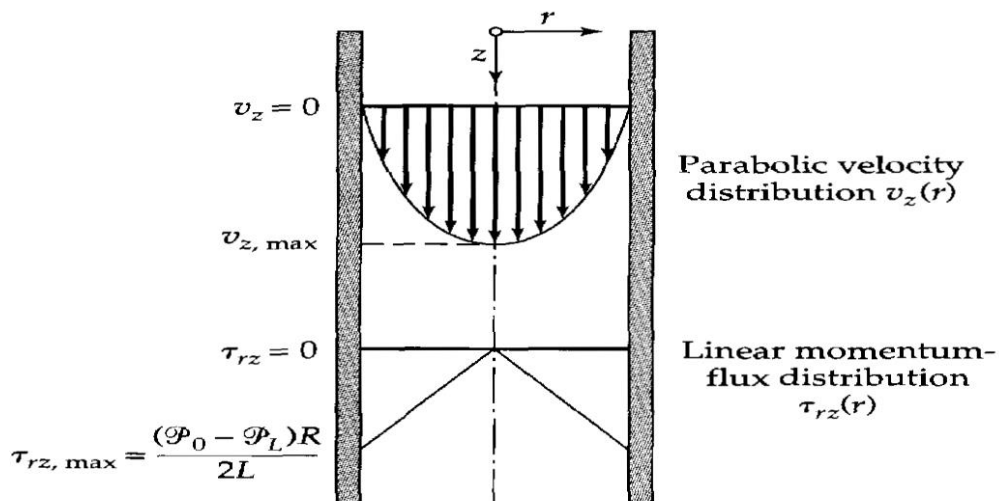
Σε αυτό το σημείο παρουσιάζονται συγκεντρωμένες οι παραδοχές που είναι απαραίτητες για να ερμηνευθεί μαθηματικά η ροή Hagen-Poiseuille (Bird et al., 2002). Οι αναγκαίες παραδοχές είναι οι εξής:

- Η ροή είναι στρωτή, δηλαδή ο αριθμός Reynolds δεν πρέπει να ξεπερνά το 2100
- Η ροή είναι ασυμπίεστη άρα η πυκνότητα παραμένει σταθερή
- Η ροή είναι μόνιμη άρα δεν υπάρχει χρονική διαφοροποίηση των μεγεθών της ροής,  $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$
- Το ρευστό είναι νευτωνικό άρα ισχύει για τις διατμητικές ιξώδεις δυνάμεις  $\tau = -\mu \frac{dv}{dy}$

- e) Η ροή είναι ανεπτυγμένη δηλαδή είναι επαρκώς απομακρυσμένη από την είσοδο για να αναπτυχθεί το παραβολικό προφίλ της ταχύτητας της
- f) Οι οριακές συνθήκες της ροής στα τοιχώματα συνεπάγονται πως δεν υπάρχει ολίσθηση ( $v_z=0$ ) δηλαδή το οριακό στρώμα που εφάπτεται με τα τοιχώματα του αγωγού δεν κινείται στην κατεύθυνση της ροής.

Η ταχύτητα της ροής με βάση της συνθήκες που περιγράφονται από τους Hagen-Poiseuille εξαρτάται από το μέγεθος του κυλινδρικού αγωγού, την διαφορά πίεσης και το δυναμικό ιξώδες:

$$v_z = -\frac{(P_0 - P_L)}{4\mu L} R^2 \left[ 1 - \left(\frac{r}{R}\right)^2 \right] \quad (2.11)$$



Σχήμα 2.4 Προφίλ ταχύτητας και ιξώδεις τάσεις σε κυλινδρικό αγωγό με ροή Hagen-Poiseuille (Bird, Stewart, & Lightfoot, 2002)

Συνεπώς, εξάγονται και κάποιοι χρήσιμοι όροι που αφορούν την ροή όπως την μέγιστη ταχύτητα, μέση ταχύτητα και το προφίλ της μαζικής ροής.

- Η μέγιστη ταχύτητα φαίνεται από την εξίσωση (2.11) πως προκύπτει με τον μηδενισμό της ακτίνας (δηλαδή πάνω στον άξονα συμμετρίας) όπως είναι λογικό, δίνοντας:

$$v_{z,max} = -\frac{(P_0 - P_L)R^2}{4\mu L} \quad (2.12)$$

- Η μέση ταχύτητα προκύπτει ολοκληρώνοντας την ογκομετρική ροή,  $Q = v_z * \pi * R^2$ , κατά μήκος της ακτίνας για όλη την περιοχή της διατομής του αγωγού:

$$\langle v_z \rangle = \frac{v_{z,max}}{2} \quad (2.13)$$



- Η μαζική ροή δίνεται ως το γινόμενο της ογκομετρικής ροής με βάση την μέση ταχύτητα,  $\bar{Q} = \langle v_z \rangle \pi R^2$  ( $\frac{m^3}{s}$ ), πολλαπλασιασμένη με την πυκνότητα,  $\rho$  ( $\frac{kg}{m^3}$ ), δίνοντας:

$$w = -\frac{\pi(P_0 - P_L)\rho R^4}{8\mu L} \quad (2.14)$$

## **Κεφάλαιο 3: Το Φαινόμενο Διασποράς Taylor-Aris**

### **3.1 Εισαγωγή**

Η διασπορά Taylor-Aris αφορά την μελέτη της ανάπτυξης της κατανομής της μέσης συγκέντρωσης ενός ρευστού A, που έχει εισαχθεί σε ένα ρευστό B, εντός ενός κυλινδρικού αγωγού, ακτίνας R, που επικρατεί η μόνιμη στρωτή ροή. Παρατηρείται το «παράδοξο» πως η κατανομή της μέσης συγκέντρωσης του A δεν παίρνει παραβολική μορφή, όπως αναμένεται από την συναγωγή με το παραβολικό προφίλ ταχύτητας, αλλά τείνει να διαμορφωθεί με ένα ομοιόμορφο τρόπο εντός του αγωγού. Ο λόγος έγκειται στην συνδυαστική επίδραση της συναγωγής και μοριακής διάχυσης, που ωθεί τελικά το ρευστό A να διασπείρεται αξονικά κατά μήκος της ροής με τρόπο που η κατανομή συγκεντρώσεων τείνει σε μια ομοιόμορφη μορφή κατά μήκος της ακτίνας και του μήκους εντός του αγωγού (ιδανικά). Ο πειραματικός προσδιορισμός του φαινομένου πραγματοποιείται με την εισαγωγή ενός παλμού του ρευστού A στο ρευστό B και η μελέτη της διαμόρφωσης της κατανομής συγκεντρώσεων της ροής. Θεωρούμε πως ο παλμός εισάγεται σε χρόνο που θεωρείται μηδενικός και σε σημείο που θεωρείται η αρχή του αγωγού. Η μελέτη του παλμού γίνεται μετά από ένα χρονικό διάστημα, το οποίο θα ορίζεται και από την υπολογιστική διαδικασία, που ο συνδυασμός των δυο μηχανισμών μεταφοράς μάζας έχει εξελιχθεί. Το φαινόμενο της διασποράς αποκτά ιδιαίτερο ενδιαφέρον για εύρος εφαρμογών. Από την μελέτη φαρμακευτικών εφαρμογών στο καρδιαγγειακό σύστημα (Høgstedt et al., 2016), περιβαλλοντικές εφαρμογές όπως η διαχείριση των αποβλήτων των αστικών αποχετεύσεων ή ρύπων σε ποταμούς (Wang et al., 2014), βιομηχανικές εφαρμογές (Biron et al., 2018, Patrachari et al, 2012) και μελέτη των αντιδράσεων σε πορώδη υλικά (Zhao, 2007) η ροή των ρευστών εντός αυτών των συστημάτων απαιτεί την συνεισφορά της μελέτης της διασποράς Taylor-Aris. Κατ' επέκταση, η εφαρμογές της διασποράς μπορεί να συναντηθούν σε μεγάλο το εύρος της σύγχρονης παραγωγής, περιβαλλοντικής διαχείρισης και ιατρικής που περιέχει ροή ρευστών σε αγωγούς (με διαφοροποιήσεις για κάθε γεωμετρία).

Για την πληρέστερη κατανόηση του φαινομένου χρειάζεται η αναπαράσταση της ροής. Ξεκινώντας από το παράδειγμα της εμβολικής ροής (ως μια πιο απλή αναπαράσταση) γίνεται η συσχέτιση της με την διάχυση και την συναγωγή. Έστω ότι σε έναν κυλινδρικό αγωγό στον οποίο επικρατεί εμβολική ροή ενός ρευστού εισαχθεί μια χρονική στιγμή ένας ομοιόμορφος παλμός ενός ιχνηθέτη συγκέντρωσης,  $c_0$ , που καταλαμβάνει μια μικρή περιοχή κυλινδρικού σχήματος, μικρού πάχους  $\delta$ . Με βάση όσα έχουν αναφερθεί στο Κεφάλαιο 2 θα λειτουργήσουν δύο μηχανισμοί μεταφοράς μάζας στην ροή, η μοριακή διάχυση και η συναγωγή.

### 3.1.1 Το παράδειγμα της εμβολικής ροής

Η συναγωγή τείνει να μεταφέρει αυτούσιο τον παλμό του ιχνηθέτη. Δεδομένης της εμβολικής ροής του ρευστού που ακολουθεί μετά την εισαγωγή του ιχνηθέτη την αρχική στιγμή η μεταφορά με την ταχύτητα της ροής του ιχνηθέτη δεν επιφέρει κάποια αλλαγή στην γεωμετρία του. Θεωρείται ότι στα τοιχώματα μεταξύ ρευστού και αγωγού υπάρχει ολίσθηση οπότε και η ταχύτητα κίνησης του ρευστού είναι παντού ίση με την μέση ταχύτητα ροής. Ως αποτέλεσμα αυτού, η κατανομή συγκεντρώσεων του δεν θα μεταβληθεί αλλά θα παραμείνει ως είχε αρχικά με την εισαγωγή του παλμού αλλάζοντας μόνο την θέση της στον αγωγό.

Μένει η επίδραση της μοριακής διάχυσης. Για διευκόλυνση θα χωριστεί σε αξονική και ακτινική περιγράφοντας την τυχαία θερμική κίνηση των μορίων παράλληλα στον άξονα και την ακτίνα του κυλινδρικού αγωγού, αντίστοιχα.

Από την στιγμή, που η κατανομής συγκέντρωσης είναι ομοιόμορφη σε όλο τον όγκο του ιχνηθέτη και η συναγωγή δεν το διαταράσσει δεν υπάρχει στατιστικός λόγος η ακτινική διάχυση να επιφέρει κάποια διαφορά ως προς την συγκέντρωση.

Για την αξονική μοριακή διάχυση η κατάσταση είναι διαφορετική. Η κατανομή της συγκέντρωσης θα τείνει να πλατύνει μεγαλώνοντας το πάχος,  $\delta$ , του χώρου που καταλαμβάνουν τα μόρια του αρχικού παλμού. Αυτό θα συμβαίνει καθώς η απουσία του ιχνηθέτη στο υπόλοιπο ρευστό θα δημιουργεί μια διαφορά δυναμικού λόγω της διαφοράς στην συγκέντρωση. Έτσι, λόγω της διάχυσης μόρια του ιχνηθέτη θα τείνουν να περάσουν πέρα από την περιοχή που καταλαμβάνει αρχικά ο ιχνηθέτης σε σχέση με το υπόλοιπο ρευστό, κινούμενα με την ταχύτητα της διάχυσης. Αν ο ρυθμός μεταφοράς της διάχυσης είναι συγκρίσιμος με αυτόν της συναγωγής τότε θα παρατηρείται η επέκταση του παλμού τόσο στην ίδια όσο και την αντίθετη κατεύθυνση της ροής. Ειδικά, λόγω της υπεροχής του ρυθμού μεταφοράς της συναγωγής αυτό το φαινόμενο θα είναι αμελητέο. Έτσι, η κατανομή συγκέντρωσης θα μεταβάλλεται ποιοτικά, καθώς θα πλαταίνει λόγω της αξονικής διάχυσης του αρχικού παλμού στο υπόλοιπο ρευστό και ποσοτικά αφού θα δημιουργούνται περιοχές μεγαλύτερης και μικρότερης συγκέντρωσης όπου βρίσκονται τα μόρια του αρχικά ομοιόμορφου παλμού.

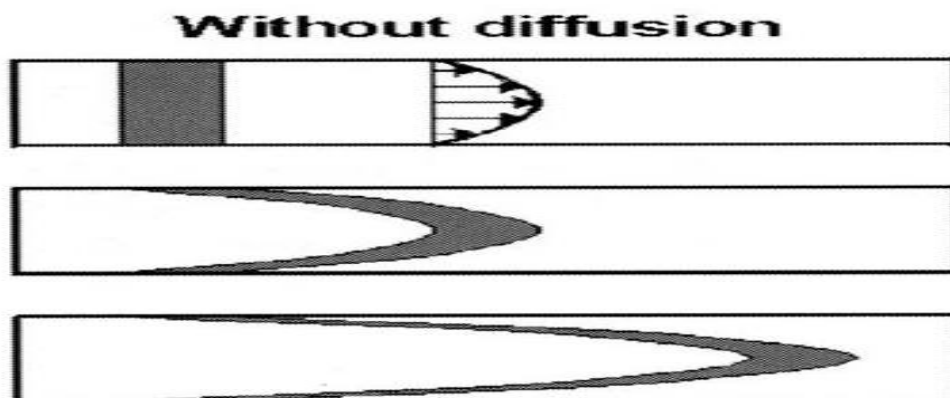
Η περίπτωση της εμβολικής ροής δεν αφορά το φαινόμενο της διασποράς Taylor-Aris. Αλλά διευκολύνει να γίνει αντιληπτή η επίδραση των φαινομένων μεταφοράς μάζας με την ροή, που είναι βασικό για την περίπτωση της ροής Hagen-Poiseuille που αποτελεί αντικείμενο ενδιαφέροντος της μελέτης.

### 3.1.2 Το παράδειγμα της ροής Hagen Poiseuille – Φαινόμενο Taylor-Aris

Για συντομία, ας θεωρηθεί ότι επαναλαμβάνεται το παράδειγμα που αναφέρθηκε για την εμβολική ροή και με την εισαγωγή ενός παλμού ιχνηθέτη με μόνη διαφορά πως η ροή πλέον δεν είναι εμβολική αλλά ακολουθεί το νόμο του Hagen-Poiseuille, άρα το προφίλ της ταχύτητας είναι παραβολικό με ισχύ της συνθήκης μη ολίσθησης στα τοιχώματα. Και πάλι, ο αρχικός ιχνηθέτης εισάγεται ως ένας κυλινδρικός παλμός ομοιόμορφης συγκέντρωσης όπως αναφέρθηκε και στο προηγούμενο παράδειγμα.

Η συναγωγή μετά την χρονική στιγμή εισαγωγής του παλμού μετακινεί τον ιχνηθέτη αλλάζοντας την αρχική του γεωμετρία. Αυτό είναι λογικό επακόλουθο, καθώς το παραβολικό προφίλ της ταχύτητας ροής μεταβάλλει τον ιχνηθέτη τείνοντας με την πάροδο του χρόνου να του δώσει αντίστοιχο παραβολικό σχήμα στον ίδιο τον παλμό (βλ σχήμα 3.1). Το σχήμα αυτό θα είναι και το σχήμα της κατανομής της συγκέντρωσης του. Έτσι, δημιουργούνται δύο παραβολικές επιφάνειες διαχωρισμού όσον αφορά την συγκέντρωση του ρευστού  $A$  (μπροστά και πίσω) του ιχνηθέτη από τον όγκο του υπόλοιπου ρευστού. Αυτό γίνεται καλύτερα κατανοητό με το σχήμα 3.1. Αν υπήρχε μόνο η επίδραση της συναγωγής ο ιχνηθέτης θα λάμβανε μια παραβολική μορφή εντός της οποίας θα ήταν ομοιόμορφα και αναλλοίωτα ως προς το μέτρο της κατανεμημένη η αρχική συγκέντρωση,  $c_0$ . Ακόμα και το πάχος θα διατηρούταν μεταξύ των δυο επιφανειών που αναφέρθηκαν (για κάθε ευθύγραμμο τμήμα παράλληλο στον άξονα καθώς για κάθε παράλληλη στον άξονα γραμμή το ρευστό κινείται με ίδια ταχύτητα). Αν και το παραβολικό σχήμα της κατανομής συγκέντρωσης συνεχώς θα μεταβαλλόταν καθώς κατά μήκος της ακτίνας η ταχύτητα της ροής αλλάζει. Όμως, ως προς την κατανομή της συγκέντρωσης δεν θα προκαλούταν κάποια μεταβολή ποσοτική παρά μόνο σχηματική ακολουθώντας τον σχήμα που λαμβάνει ο παλμός σύμφωνα με την εικόνα 3.1

Λαμβάνοντας υπ' όψιν την μοριακή διάχυση η εικόνα που έχει δημιουργηθεί από την συναγωγή αλλάζει σημαντικά. Μεταξύ του ιχνηθέτη και του υπόλοιπου ρευστού ως προς την συγκέντρωση δημιουργείται μια διαφορά δυναμικού (συγκέντρωσης). Η διάχυση όπως και πριν χωρίζεται σε αξονική και ακτινική. Η ακτινική κίνηση των μορίων θα αρχίσει να



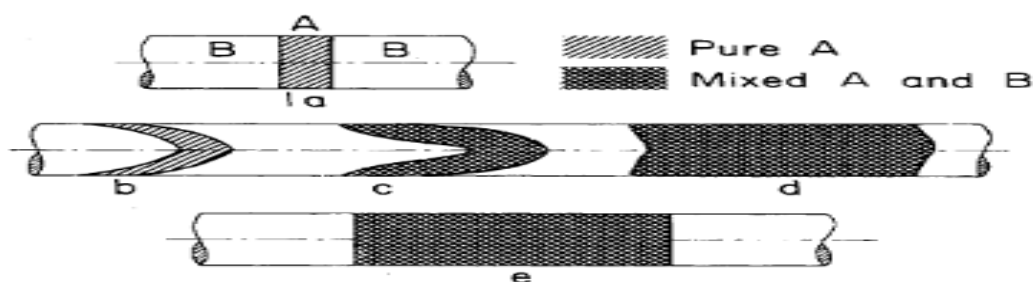
Σχήμα 3.1 Απεικόνιση της κατανομής συγκεντρώσεων σε στρωτή ροή σε κυλινδρικό αγωγό χωρίς μοριακή διάχυση ([https://mycourses.aalto.fi/pluginfile.php/416274/mod\\_resource/content/1/Microfluidics%201%202017.pdf](https://mycourses.aalto.fi/pluginfile.php/416274/mod_resource/content/1/Microfluidics%201%202017.pdf))

“γεμίζει” με ιχνηθέτη, το ρευστό της κύριας ροής B, κάθετα στον άξονα του μήκους, “γεμίζοντας” τις περιοχές που δημιουργούνται έξω από το παραβολοειδές σχήμα της κατανομής συγκέντρωσης που έχει αρχικά ο ιχνηθέτης. Αυτή η ακτινική μεταφορά ιχνηθέτη τείνει να εξομαλύνει τη παραβολική σε μία κατανομή συγκεντρώσεων που καταλαμβάνει ομοιόμορφα μια περιοχή του κυλινδρικού αγωγού.

Η αξονική διάχυση λειτουργεί με τρόπο όπως και στην εμβολική ροή. Τείνει να “πλατύνει” τον χώρο που καταλαμβάνουν τα μόρια του αρχικού παλμού. Στην περίπτωση που η συναγωγή υπερτερεί της διάχυσης, η αξονική διάχυση μπορεί να θεωρηθεί ότι έχει αμελητέα επίδραση στην γεωμετρία της κατανομής συγκέντρωσης. Αυτή είναι η πρώτη περίπτωση του φαινομένου που μελετήθηκε το 1953 από τον Taylor. Αν ο ρυθμός μεταφοράς της συναγωγής είναι συγκρίσιμος με τον ρυθμό της διάχυσης τότε η αξονική διασπορά συμβάλλει σημαντικά στην διαμόρφωση της κατανομής συγκέντρωσης του ιχνηθέτη. Αυτή είναι η προσθήκη του Aris το 1956 στην αρχική παρατήρηση και εξήγηση του φαινομένου από τον Taylor μαζί μεαπλοποιήσεις στις παραδοχές του φαινομένου.

Ο συνδυασμός της συναγωγής και της μοριακής διάχυσης για την διαμόρφωση της “παράδοξης” κατανομής της συγκέντρωσης του ιχνηθέτη μέσα στην ροή του ρευστού είναι αυτό που ονομάζεται φαινόμενο διασποράς Taylor-Aris και απεικονίζεται στο σχήμα 3.2.

Στην περιγραφή της μεταφοράς μάζας της ροής, για την κατανόηση τους, παρουσιάστηκαν ξεχωριστά η διάχυση και η συναγωγή ενώ προφανώς στην πραγματικότητα εκτυλίσσονται ταυτόχρονα. Η αρχή της επαλληλίας των κινήσεων επιτρέπει την ασφαλή μελέτη και ως ξεχωριστά γεγονότα που αν συνυπολογιστούν συνθέτουν την συνολική εικόνα. Με αυτή την λογική παρουσιάστηκαν με αυτό τον τρόπο οι μηχανισμοί μεταφοράς μάζας που λαμβάνουν μέρος στο φαινόμενο της διασποράς Taylor-Aris.



**Σχήμα 3.2** Απεικόνιση της επίδρασης του συνδυασμού συναγωγής και μοριακής διάχυσης στη κατανομή συγκεντρώσεων ενός μίγματος 2 πλήρως διαλυμένων ρευστών A και B (Nunge & Gill, 1969)

### 3.2 Ο Συντελεστής Taylor-Aris K

Αρχικά, σε μία μικρή απόσταση από την είσοδο θα εμφανιστεί ροή τύπου Poisseuille, της οποίας η μαθηματική εξίσωση ως προς το  $x_A=c_A/c$  δίνεται παρακάτω σύμφωνα με την εξίσωση (2.05) αντικαθιστώντας την παραβολική ταχύτητα στην θέση της μέσης ταχύτητας, για την οποία θεωρείται πως η συγκέντρωση  $c$  και ο συντελεστής διάχυσης  $D_{ab}$  είναι σταθεροί όροι:

$$\frac{\partial x_A}{\partial t} + v_{z,max} \left[ 1 - \left( \frac{r}{R} \right)^2 \right] \frac{\partial x_A}{\partial z} = D_{AB} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial x_A}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 x_A}{\partial z^2} \right) \quad (3.01)$$

Ο υπογραμμισμένος όρος της εξίσωσης (3.01), αποτελεί την αξονική διάχυση και αφαιρείται με την προϋπόθεση πως ο αριθμός Peclet,  $Pe_d = \frac{d \langle v \rangle}{D_{AB}}$ , είναι αρκετά μεγάλος (μια προσέγγιση δίνεται στο τέλος της εργασίας). Ο αριθμός Peclet αποτελεί ένα αδιάστατο μέγεθος που εκφράζει τον λόγο των ρυθμών μεταφοράς λόγω συναγωγής προς τον αντίστοιχο λόγο μοριακής διάχυσης,

$$Pe = \frac{\text{ρυθμός μεταφοράς συναγωγής}}{\text{ρυθμός μεταφοράς μοριακής διάχυσης}} \quad (3.02)$$

Υπό αυτή την έννοια για προχωρημένους αριθμούς Peclet μπορεί να θεωρηθεί πως η συναγωγή υπερτερεί συγκριτικά με την μοριακή διάχυση καταλήγοντας να θεωρείται αμελητέα η συνεισφορά της αξονικής μοριακής διάχυσης, που λαμβάνει χώρα στον ίδιο άξονα με την συναγωγή. Η δεύτερη συνθήκη για την παράλειψη του υπογραμμισμένου όρου είναι να ικανοποιείται πως η ροή έχει πλέον αναπτυχθεί πλήρως.

Οι οριακές συνθήκες που προκύπτουν από τον κυλινδρικό αγωγό είναι:

$$\text{Για } r = 0 \text{ και } r = R \text{ ισχύει } \frac{\partial x_A}{\partial r} = 0 \quad (3.03)$$

και αντικατοπτρίζουν την αδυναμία της διάχυσης να διαπεράσει τα τοιχώματα του αγωγού και την ύπαρξη ακτινικής συμμετρίας (με συνέπεια στις οριακές συνθήκες να υπάρχει μηδενική μεταβολή της κατανομής συγκέντρωσης ως προς την μεταβολή της ακτίνας). Στην συνέχεια για την προσέγγιση της λύσης χρησιμοποιείται η μέση τιμή της συγκέντρωσης του ρευστού A, άρα και του λόγου  $x_A$  για να χρησιμοποιηθεί στην προσεγγιστική επίλυση για μεγάλους χρόνους διάδοσης του παλμού αφότου εισέλθει (G. I. Taylor, 1954):

$$\langle x_A \rangle = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^R x_A r dr d\theta}{\int_0^{2\pi} \int_0^R r dr d\theta} = \frac{2\pi \int_0^R x_A r dr d\theta}{2\pi \int_0^R r dr d\theta} = \frac{2}{R^2} \int_0^R x_A r dr \quad (3.04)$$

Όπως και με το όριο των αριθμών Peclet για το οποίο ισχύουν οι παραπάνω παραδοχές, στο τέλος της εργασίας επιδιώκεται να γίνει αντίστοιχη προσέγγιση για την ισχύ τους σε σχέση με το μήκος που έχει διανύσει ο παλμός και τον χρόνο.

Εδώ κρίνεται αναγκαίο για την μελέτη του φαινομένου να ακολουθηθεί η περιοχή που εκτυλίσσεται η διασπορά. Για να γίνει αντιληπτό αυτό, είναι σαν ο παρατηρητής να έχει «καβαλήσει» πάνω σε μια διατομή του ρευστού ακολουθώντας την στον χρόνο κινούμενος με την μέση ταχύτητα του ρευστού για να μελετάται συνέχεια η συμπεριφορά της συγκεκριμένης διατομής (Deen, 1998). Ουσιαστικά, ο παρατηρητής του φαινομένου δεν βρίσκεται στο σημείο εισαγωγής του παλμού αλλά ακολουθεί με την μέση ταχύτητα τον παλμό όπως αναπτύσσεται λόγω της ροής.

Για αυτό τον λόγο οδηγούμαστε στην εισαγωγή ενός νέου μεγέθους, του μεταβλητού μήκους, που κινείται με την μέση ταχύτητα του ρευστού:

$$\bar{z} = z - \langle v_z \rangle t \quad (3.05)$$

Για να μελετήσουμε πως επηρεάζει την ροή που περιγράψαμε στην εξίσωση (3.01) θα χρειαστεί να μελετήσουμε πως επηρεάζει τα διαφορικά που υπάρχουν στην εξίσωση. Με βάση τον κανόνα της αλυσίδας ισχύει γενικά:

$$\frac{\partial x_{A(t,z,r)}}{\partial t} = \frac{\partial \bar{x}_A}{\partial \bar{t}} \frac{\partial \bar{t}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{x}_A}{\partial \bar{z}} \frac{\partial \bar{z}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{x}_A}{\partial \bar{r}} \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} \quad (3.06)$$

Στην περίπτωση η οποία μελετάται το μόνο μέγεθος που μεταβάλλεται είναι το μεταβλητό μήκος  $\bar{z}$ . Κατ' επέκταση, ο χρόνος και η ακτίνα που εμφανίζονται στον κανόνα της αλυσίδας ταυτίζονται με τον χρόνο και την ακτίνα που αντιλαμβάνεται και ο μη κινούμενος παρατηρητής. Με αυτή την έννοια, η μεταβολές τους χρονικά δεν αλλάζουν από αυτό που αναμένεται. Η διαφοροποίηση στην χρονική μεταβολή αφορά μόνο το (αξονικό) μεταβλητό μήκος  $\bar{z}$ .

Έτσι γνωρίζουμε πως 
$$\frac{\partial \bar{r}}{\partial t} = \frac{\partial r}{\partial t} = 0 \quad (3.07)$$

$$\frac{\partial \bar{t}}{\partial t} = \frac{\partial t}{\partial t} = 1 \quad (3.08)$$

$$\frac{\partial \bar{z}}{\partial t} = 0 \quad (3.09)$$

Οπότε από την εξ. (3.05) λαμβάνεται: 
$$\frac{\partial \bar{z}}{\partial t} = \frac{\partial z}{\partial t} - \langle v_z \rangle = -\langle v_z \rangle \quad (3.10)$$

Τελικά, με τον κανόνα της αλυσίδας η (3.06) καταλήγει:  $\frac{\partial x_A}{\partial t} = \frac{\partial \bar{x}_A}{\partial \bar{t}} - \frac{\partial \bar{x}_A}{\partial \bar{z}} \langle v_z \rangle$

$$= \frac{\partial \bar{x}_A}{\partial \bar{t}} - \frac{\partial \bar{x}_A}{\partial \bar{z}} \frac{v_{z,max}}{2} \quad (3.11)$$

Επίσης για την ευκολία της μελέτης των υπολογισμών θα εισαχθεί και το αδιάστατο ακτινικό μέγεθος,  $\xi = \frac{r}{R}$ . Κατ' επέκταση, η εξίσωση (3.01) διαμορφώνεται με τις προσθήκες της (3.11) ως εξής:

$$\boxed{\frac{\partial \bar{x}_A}{\partial \bar{t}} + v_{z,max} \left[ \frac{1}{2} - \xi^2 \right] \frac{\partial \bar{x}_A}{\partial \bar{z}} = \frac{D_{AB}}{R^2} \left( \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi \frac{\partial \bar{x}_A}{\partial \xi} \right) \right)} \quad (3.12)$$

Ο αρχικός υπογραμμισμένος όρος στην εξίσωση (3.12) μπορεί να παραληφθεί. Και αυτό συμβαίνει καθώς με την εισαγωγή του  $\bar{z}$ , και για χρόνους που ο παλμός έχει αναπτυχθεί, προκύπτει πως η συμπεριφορά της ροής προσομοιάζει σε μία φαινομενικά μόνιμη (οπότε δεν υπάρχει διαφοροποίηση των μεγεθών χρονικά) (Bird et al., 2002). Το μεταβλητό μήκος  $\bar{z}$  μένει σταθερό για τον κινούμενο παρατηρητή οπότε δεν προκύπτει μεταβολή της συγκέντρωσης λόγω του μεταβλητού μήκους με τον χρόνο και με δεδομένη την ανάπτυξη του παλμού για μεγάλους χρόνους η επίδραση της μοριακής διάχυσης στην κατανομή της συγκέντρωσης με τον χρόνο μπορεί να θεωρηθεί αμελητέα καθώς κατά μήκος της ακτίνας η κατανομή συγκεντρώσεων τείνει να γίνει ομοιόμορφη. Έτσι, προκύπτει η παράλειψη του υπογραμμισμένου όρου της (3.12).

Επίσης, ο λόγος των συγκεντρώσεων  $\bar{x}_A$  μπορεί να θεωρηθεί ως άθροισμα της μέσης τιμής του και των αποκλίσεων λόγω ροής από την μέση τιμή. Εδώ θα χρειαστεί να γίνει μια προσέγγιση που θα βοηθήσει στην απλοποίηση του μοντέλου που μελετάμε χωρίς να δημιουργεί σημαντικές αποκλίσεις. Λόγω της ταχύτητας των ακτινικών διαχυτικών φαινομένων μπορεί να θεωρηθεί πως οι αποκλίσεις εξομαλύνονται για χρόνο που είναι αρκετός για την εξέλιξη του φαινομένου, άρα κυριαρχεί η μέση κατανομή συγκέντρωσης  $\langle \bar{x}_A \rangle$  αξονικά.

$$\bar{x}_A(\xi, \bar{z}, t) = \langle \bar{x}_A \rangle + \bar{x}'_A(\xi, \bar{z}, t), \quad |\bar{x}'_A| \ll \langle \bar{x}_A \rangle \quad (3.13)$$

Επιλύοντας με βάση τις προσεγγίσεις που παρουσιάστηκαν την εξίσωση (3.12) προκύπτει:

$$\frac{R^2 v_{z,max}}{D_{AB}} \left[ \frac{1}{2} - \xi^2 \right] \frac{\partial \bar{x}_A}{\partial \bar{z}} = \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi \frac{\partial \bar{x}_A}{\partial \xi} \right) \xrightarrow{|\bar{x}'_A| \ll \langle \bar{x}_A \rangle}$$



$$\begin{aligned} \frac{R^2 v_{z,max}}{D_{AB}} \left[ \frac{1}{2} - \xi^2 \right] \frac{\partial \langle \bar{x}_A \rangle}{\partial \bar{z}} &= \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi \frac{\partial \bar{x}_A}{\partial \xi} \right) \\ \Rightarrow \frac{R^2 v_{z,max}}{D_{AB}} \left[ \frac{1}{2} \xi - \xi^3 \right] \frac{\partial \langle \bar{x}_A \rangle}{\partial \bar{z}} &= \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi \frac{\partial \bar{x}_A}{\partial \xi} \right) \end{aligned} \quad (3.14)$$

Ολοκληρώνοντας την παραπάνω σχέση ως προς  $\xi$  για να δούμε την σχέση μεταξύ του λόγου συγκεντρώσεων,  $\bar{x}_A$ , και της αδιάστατης ακτίνας,  $\xi$ , παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \int_0^\xi \frac{R^2 v_{z,max}}{D_{AB}} \left[ \frac{1}{2} \xi - \xi^3 \right] \frac{\partial \langle \bar{x}_A \rangle}{\partial \bar{z}} d\xi &= \int_0^\xi \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi \frac{\partial \bar{x}_A}{\partial \xi} \right) d\xi \Rightarrow \\ \frac{R^2 v_{z,max}}{D_{AB}} \left( \frac{\xi^2}{4} - \frac{\xi^4}{4} \right) \frac{\partial \langle \bar{x}_A \rangle}{\partial \bar{z}} &= \xi \frac{\partial \bar{x}_A}{\partial \xi} \Rightarrow \\ \frac{R^2 v_{z,max}}{4D_{AB}} (\xi - \xi^3) \frac{\partial \langle \bar{x}_A \rangle}{\partial \bar{z}} &= \frac{\partial \bar{x}_A}{\partial \xi} \end{aligned} \quad (3.15)$$

Άρα:

$$\begin{aligned} \int_0^\xi \frac{\partial \bar{x}_A}{\partial \xi} d\xi &= \frac{R^2 v_{z,max}}{4D_{AB}} \frac{\partial \langle \bar{x}_A \rangle}{\partial \bar{z}} \int_0^\xi (\xi - \xi^3) d\xi \Rightarrow \\ \bar{x}_A - \bar{x}_A(0, \bar{z}) &= \frac{R^2 v_{z,max}}{8D_{AB}} \left( \xi^2 - \frac{\xi^4}{2} \right) \frac{\partial \langle \bar{x}_A \rangle}{\partial \bar{z}} \\ \Rightarrow \boxed{\bar{x}_A} &= \frac{R^2 v_{z,max}}{8D_{AB}} \left( \xi^2 - \frac{\xi^4}{2} \right) \frac{\partial \langle \bar{x}_A \rangle}{\partial \bar{z}} + \bar{x}_A(0, \bar{z}) \end{aligned} \quad (3.16)$$

Ο μέσος αυτής της κατανομής ως προς την ακτίνα είναι:

$$\begin{aligned} \langle \bar{x}_A \rangle &= \frac{\int_0^1 \bar{x}_A \xi d\xi}{\int_0^1 \xi d\xi} = \frac{\int_0^1 \left( \frac{R^2 v_{z,max}}{8D_{AB}} \left( \xi^3 - \frac{\xi^5}{2} \right) \frac{\partial \langle \bar{x}_A \rangle}{\partial \bar{z}} + \bar{x}_A(0, \bar{z}) \xi \right) d\xi}{1/2} \\ &= 2 \left[ \frac{R^2 v_{z,max}}{8D_{AB}} \left( \frac{\xi^4}{4} - \frac{\xi^6}{12} \right) \frac{\partial \langle \bar{x}_A \rangle}{\partial \bar{z}} + \frac{1}{2} \bar{x}_A(0, \bar{z}) * \xi^2 \right]_0^1 \Rightarrow \\ \boxed{\langle \bar{x}_A \rangle} &= \frac{R^2 v_{z,max}}{24D_{AB}} \frac{\partial \langle \bar{x}_A \rangle}{\partial \bar{z}} + \bar{x}_A(0, \bar{z}) \end{aligned} \quad (3.17)$$

Μια προσέγγιση της λύσης, όπως εξηγείται και με βάση την σχέση (3.13), προκύπτει αφαιρώντας την σχέση (3.17) από την (3.16):

$$\begin{aligned}\bar{x}_A - \langle \bar{x}_A \rangle &= \frac{R^2 v_{z,max}}{8D_{AB}} \frac{\partial \langle \bar{x}_A \rangle}{\partial \bar{z}} \left( -\frac{1}{3} + \xi^2 - \frac{\xi^4}{2} \right) \\ &= \frac{R^2 \langle v_z \rangle}{4D_{AB}} \frac{\partial \langle \bar{x}_A \rangle}{\partial \bar{z}} \left( -\frac{1}{3} + \xi^2 - \frac{\xi^4}{2} \right), \quad \text{όπου } v_{z,max} = 2 \langle v_z \rangle \quad (3.18)\end{aligned}$$

Άρα τελικά προκύπτει:

$$\boxed{\bar{x}_A = \frac{R^2 \langle v_z \rangle}{4D_{AB}} \frac{\partial \langle \bar{x}_A \rangle}{\partial \bar{z}} \left( -\frac{1}{3} + \xi^2 - \frac{\xi^4}{2} \right) + \langle \bar{x}_A \rangle} \quad (3.19)$$

Μελετώντας τώρα την μαζική (μολαρική) ροή,  $w$  (mol/s), σε μια διατομή του αγωγού και ακολουθώντας την, θεωρώντας δηλαδή σταθερό το  $\bar{z}$ , θα βοηθήσει στην εξαγωγή του μαθηματικού μοντέλου της διασποράς Taylor-Aris. Προκύπτει:

$$w = \pi R^2 c \langle \bar{x}_A (v_z - \langle v_z \rangle) \rangle \quad (3.20)$$

Για την μελέτη του μέσου όρου που χρησιμοποιείται στην μαζική ροή της εξίσωσης (3.20) και για να ακολουθηθούν ευκολότερα οι πράξεις θα αναπτυχθεί το γινόμενο χιζίζοντας την μαζική ροή βήμα-βήμα:

$$v_z = v_{z,max}(1 - \xi^2) = 2 \langle v_z \rangle (1 - \xi^2) \quad (3.21)$$

Για να ξεχωρίσουμε τον μέσο όρο που υπάρχει στην μαζική (μολαρική) ροή θα σταθούμε στα επιμέρους γινόμενα την συγκέντρωσης,  $\bar{x}_A$ , με την ταχύτητα,  $v_z$ , και την μέση ταχύτητα,  $\langle v_z \rangle$ , αντίστοιχα:

$$\begin{aligned}\bar{x}_A v_z &= \frac{R^2 \langle v_z \rangle^2}{2D_{AB}} \frac{\partial \langle \bar{x}_A \rangle}{\partial \bar{z}} \left( -\frac{1}{3} + \xi^2 - \frac{\xi^4}{2} \right) (1 - \xi^2) + 2 \langle v_z \rangle \langle \bar{x}_A \rangle (1 - \xi^2) \\ \bar{x}_A \langle v_z \rangle &= \frac{R^2 \langle v_z \rangle^2}{4D_{AB}} \frac{\partial \langle \bar{x}_A \rangle}{\partial \bar{z}} \left( -\frac{1}{3} + \xi^2 - \frac{\xi^4}{2} \right) + \langle v_z \rangle \langle \bar{x}_A \rangle \quad (3.22)\end{aligned}$$

Άρα

$$\begin{aligned}\bar{x}_A (v_z - \langle v_z \rangle) &= \\ \frac{R^2 \langle v_z \rangle^2}{2D_{AB}} \frac{\partial \langle \bar{x}_A \rangle}{\partial \bar{z}} \left( -\frac{1}{3} + \xi^2 - \frac{\xi^4}{2} \right) \left( \frac{1}{2} - \xi^2 \right) + 2 \langle v_z \rangle \langle \bar{x}_A \rangle \left( \frac{1}{2} - \xi^2 \right) \quad (3.23)\end{aligned}$$

Περνώντας στην μέση τιμή του παραπάνω γινομένου της εξίσωσης (3.23) με ολοκλήρωση ως προς την αδιάστατη ακτίνα  $\xi$  διαμορφώνεται η εξής σχέση:

$$\begin{aligned} \langle \bar{x}_A (v_z - \langle v_z \rangle) \rangle &= \frac{\int_0^1 (\bar{x}_A v_z - \bar{x}_A \langle v_z \rangle) \xi d\xi}{\int_0^1 \xi d\xi} = \\ &= \frac{\frac{R^2 \langle v_z \rangle^2}{2D_{AB}} \frac{\partial \langle \bar{x}_A \rangle}{\partial \bar{z}} \int_0^1 \left( -\frac{1}{3} + \xi^2 - \frac{\xi^4}{2} \right) \left( \frac{1}{2} - \xi^2 \right) \xi d\xi + 2 \langle v_z \rangle \langle \bar{x}_A \rangle \int_0^1 \left( \frac{1}{2} - \xi^2 \right) \xi d\xi}{1/2} \\ &= -\frac{R^2 \langle v_z \rangle^2}{48D_{AB}} \frac{\partial \langle \bar{x}_A \rangle}{\partial \bar{z}} \end{aligned} \quad (3.24)$$

Άρα:  $\boxed{\pi R^2 c \langle \bar{x}_A (v_z - \langle v_z \rangle) \rangle = -\frac{\pi R^4 c \langle v_z \rangle^2}{48D_{AB}} \frac{\partial \langle \bar{x}_A \rangle}{\partial \bar{z}}}$  (3.25)

Επειδή για μεγάλους χρόνους η συγκέντρωση  $c = \text{const}$ ,  $c \langle \bar{x}_A \langle v_z \rangle \rangle = \langle \bar{c}_A \langle v_z \rangle \rangle = \langle \bar{c}_A \rangle \langle v_z \rangle$ , αφού  $\langle v_z \rangle = \text{const}$

Και  $c \langle \bar{x}_A v_z \rangle \approx \langle \bar{c}_A v_{Az} \rangle = \langle \bar{J}_{Az} \rangle$  όπου  $\bar{J}_{Az}$  η μολ. ροή προς την διατομή (3.26)

Η αντικατάσταση αυτή επιτρέπεται καθώς λόγω της κυριαρχίας της συναγωγής σε σύγκριση με την αξονική διασπορά (και θεωρώντας την κατ' επέκταση αμελητέα) μπορεί να γίνει η προσέγγιση πως τα μόρια του μίγματος στην αξονική τους κίνηση, κινούνται με την ίδια ταχύτητα μεταξύ τους όταν η κατανομή της συγκέντρωσης του ιχνηθέτη αποκτά κυλινδρικό σχήμα.

Επιστρέφοντας σε στατικές συντεταγμένες για να διατυπώσουμε την τελική μορφή της διασποράς Taylor-Aris, χρησιμοποιούμε ξανά τον κανόνα της αλυσίδας:

$$\frac{\partial \langle \bar{x}_A \rangle}{\partial \bar{z}} = \frac{\partial \langle x_A \rangle}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial \bar{z}} + \frac{\partial \langle x_A \rangle}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial \bar{z}} + \frac{\partial \langle x_A \rangle}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \bar{z}} \quad (3.27)$$

Όπου:  $\frac{\partial r}{\partial \bar{z}} = 0$   $r, \bar{z}$  ανεξάρτητα μεταξύ τους (3.28)

$$\frac{\partial t}{\partial \bar{z}} = \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \left( \frac{\bar{z} - z}{\langle v_z \rangle} \right) = \frac{1}{\langle v_z \rangle} - \frac{1}{\langle v_z \rangle} * \frac{\partial z}{\partial \bar{z}} \quad (3.29)$$

$$\frac{\partial z}{\partial \bar{z}} = 1 + \langle v_z \rangle * \frac{\partial t}{\partial \bar{z}} = 1 + 1 - \frac{\partial z}{\partial \bar{z}} \implies \frac{\partial z}{\partial \bar{z}} = 1 \quad (3.30)$$

Άρα  $\frac{\partial t}{\partial \bar{z}} = 0$  και κατ' επέκταση  $\frac{\partial \langle \bar{x}_A \rangle}{\partial \bar{z}} = \frac{\partial \langle x_A \rangle}{\partial z}$  (3.31)

Εισάγοντας στην εξίσωση (3.25), τις σχέσεις (3.26), (3.31) και διαιρώντας με  $\pi R^2$  έχουμε:

$$\boxed{\langle \bar{J}_{Az} \rangle = \langle \bar{c}_A \rangle \langle v_z \rangle - K \frac{\partial \langle c_A \rangle}{\partial z}} \Rightarrow \boxed{\langle J_{Az} \rangle = \langle c_A \rangle \langle v_z \rangle - K \frac{\partial \langle c_A \rangle}{\partial z}} \quad (3.32)$$

Όπου:

$$\boxed{K = \frac{d^2 \langle v_z \rangle^2}{192 D_{AB}} = \frac{Pe_d^2 D_{AB}}{192}} \quad \text{με} \quad Pe_d = \frac{d \langle v_z \rangle}{D_{AB}} \quad (3.33)$$

Όπου  $d$  η διάμετρος του αγωγού

$\langle v_z \rangle$  η μέση ταχύτητα της ροής

$D_{AB}$  ο συντελεστής διάχυσης των δύο ρευστών

**Το μέγεθος  $K$  ορίζεται ως συντελεστής της μοριακής διασποράς Taylor-Aris.** Ο συντελεστής φαίνεται πως με την ενίσχυση της συναγωγής δρα αυξητικά για το μέτρο του, ενώ αντιθέτως η διάχυση λειτουργεί αντίστροφα (ή λαμβάνοντας υπ' όψιν την προσθήκη της εξίσωσης 3.37 που ακολουθεί τείνει να τον εξισώσει με τον συντελεστή διάχυσης). Ακόμα, ο συντελεστής  $K$  σε αντίθεση με τον συντελεστή διάχυσης εξαρτάται κυρίως από τα χαρακτηριστικά της ροής αλλά και από την αλληλεπίδραση των ρευστών και την θερμοκρασία (επειδή επηρεάζεται και από τον συντελεστή διάχυσης) ενώ ο συντελεστής διάχυσης επηρεάζεται μόνο από τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ρευστών και την θερμοκρασία εξ' ολοκλήρου (Atkins & De Paula, 2014).

Σε αυτό το σημείο είναι ανάγκη να αξιοποιηθεί η εξίσωση συνέχειας της συγκέντρωσης (χωρίς αντίδραση) με χρήση των μέσων τιμών ως προς την διατομή του αγωγού:

$$\frac{\partial \langle c_A \rangle}{\partial t} = -\nabla \cdot \langle J_A \rangle \Leftrightarrow \frac{\partial \langle c_A \rangle}{\partial t} = -\frac{\partial \langle J_{Az} \rangle}{\partial z} \quad (3.34)$$

Εισάγοντας στην εξ. (3.32) την εξίσωση της συνέχειας (2.06) προσαρμοσμένη για συγκεντρώσεις όπως δίνεται από την (3.34) θα καταλήξει σε μια μορφή διαφορικής εξίσωσης που περιγράφει την διασπορά Taylor-Aris:

$$\frac{\partial \langle c_A \rangle}{\partial t} = -\frac{\partial \langle c_A \rangle}{\partial z} \langle v_z \rangle + K \frac{\partial^2 \langle c_A \rangle}{\partial z^2} \Rightarrow$$

$$\boxed{\frac{\partial \langle c_A \rangle}{\partial t} + \langle v_z \rangle \frac{\partial \langle c_A \rangle}{\partial z} = K \frac{\partial^2 \langle c_A \rangle}{\partial z^2}} \quad (3.35)$$

Μπορεί να παρατηρηθεί η ομοιότητα στην εξίσωση (3.35) με την συνδυαστική εξίσωση (2.05) συναγωγής και διάχυσης. Η διαφορά είναι πως στην θέση της διάχυσης λαμβάνεται υπ'

όπιν η μικτή αλληλεπίδραση διάχυσης και συναγωγής όπως περιγράφηκε από το φαινόμενο της διασποράς Taylor-Aris.

Η επίλυση της διαφορικής εξίσωσης καταλήγει στη κατανομή της μέσης συγκέντρωσης που επικρατεί λόγω της διασποράς του ιχνηθέτη για μεγάλους χρόνους εξέλιξης του φαινομένου. Η κατανομή αυτή παίρνει την μορφή της κανονικής (Gaussian) κατανομής:

$$\langle c_A \rangle = \frac{n_{A0}}{2\pi R^2 \sqrt{\pi K t}} \exp\left(-\frac{(z - \langle u \rangle t)^2}{4Kt}\right) \quad (3.36)$$

Ο Aris δίνει μια μαθηματική ανάλυση επίλυσης του προβλήματος που συμπεριλαμβάνει και τους μικρούς χρόνους προσμετρά και την συμβολή της μοριακής διάχυσης αξονικά (Aris, 1956). Μέσα από αυτή την ανάλυση καταλήγει και σε μια νέα μορφή για τον συντελεστή  $K$ . Τελικά ο συντελεστής παίρνει την μορφή:

$$K = D_{AB} + \frac{d^2 \langle v_z \rangle^2}{192 D_{AB}} = D_{AB} \left(1 + \frac{Pe_d^2}{192}\right) \quad (3.37)$$

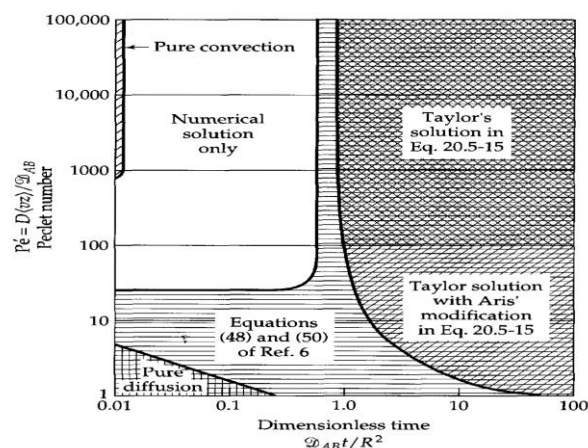
Όπου  $Pe_d$ , ο αριθμός Peclet μετρημένος με βάση την διάμετρο

$D_{AB}$  ο συντελεστής διάχυσης των δύο ρευστών

Παρακάτω, παρατίθεται ο πίνακας που δείχνει την συσχέτιση του αριθμού Peclet με τον αδιάστατο χρόνο Fourier. Ο αδιάστατος αριθμός Fourier συμβολίζει την αναλογία του ρυθμού μεταφοράς της διάχυσης με την ικανότητα αποθήκευσης ύλης του ρευστού στον χώρο. Σχηματικά θα μπορούσε να περιγραφεί ως εξής:

$$Fo = \frac{\text{ρυθμός μεταφοράς λόγω διάχυσης}}{\text{ρυθμός αποθήκευσης ύλης στον χώρο}} = \frac{D_{ab} t}{R^2} \quad (3.38)$$

Διακρίνονται οι διαφορετικές περιοχές εντός των οποίων επικρατεί συγκεκριμένη μορφή ροής του ρευστού με βάση βιβλιογραφικές πηγές (σχήμα 3.3). Η περιοχή στην οποία περιέχονται οι εξισώσεις Taylor - Aris θα δημιουργηθεί με βάση προσεγγίσεις των προσομοιώσεων των υπολογιστικών πειραμάτων που πραγματοποιούνται στα πλαίσια της εργασίας.



Σχήμα 3.3 Χαρτογράφηση της σχέσης αριθμού Peclet της ροής και (αδιάστατου) χρόνου (Ananthakrishnan et al., 1965)

## **Κεφάλαιο 4: Το Υπολογιστικό Πείραμα και η Μεθοδολογία**

Η χρήση του Comsol Multiphysics 5.2 δίνει την δυνατότητα να μελετήσουμε το φαινόμενο της διασποράς Taylor-Aris μέσω προσομοιώσεων. Για αυτό τον λόγο χρησιμοποιήθηκε για την μελέτη της διασποράς Taylor-Aris καθώς όπως έχει αναφερθεί προηγουμένως αποτελεί πεδίο μελέτης για την ρευστοδυναμική και την μεταφορά μάζας. Για επίλυση των μαθηματικών εξισώσεων έγινε χρήση της Μεθόδου Πεπερασμένων Στοιχείων.

Για να περάσουμε όμως στην περιγραφή των συγκεκριμένων βημάτων για το στήσιμο του μοντέλου στο Comsol θα βοηθούσε να περιγραφτούν η γενικότερη μεθοδολογία που ακολουθήθηκε ώστε να είναι κατανοητά τα βήματα που γίνανε. Πριν από αυτό πρέπει να αναφερθούν κάποιες κουβέντες για ποιο είναι το πρόβλημα με το οποίο καταπιάνεται η παρούσα εργασία.

### **4.1 Παρουσίαση του προβλήματος και μεθοδολογία**

#### **4.1.1 Παρουσίαση του προβλήματος**

Το πρόβλημα το οποίο στήθηκε για την μελέτη του φαινομένου της διασποράς Taylor-Aris συμβαίνει εντός ενός αγωγού όπως παριστάνεται στο σχήμα 4.1. Ο αγωγός έχει κυλινδρικό σχήμα. Η ακτίνα,  $R$ , του αγωγού είναι της τάξης των εκατοστών και το μήκος,  $L$ , το οποίο ενδιαφέρει το πρόβλημα, είναι το μήκος στο οποίο εκτυλίσσεται το φαινόμενο της διασποράς. Το μήκος αυτό δεν ταυτίζεται αναγκαστικά με το πραγματικό μήκος του αγωγού αλλά προσεγγιστικά είναι ένα μήκος ικανό να επιτρέψει το φαινόμενο να εκτυλιχθεί εντός του.

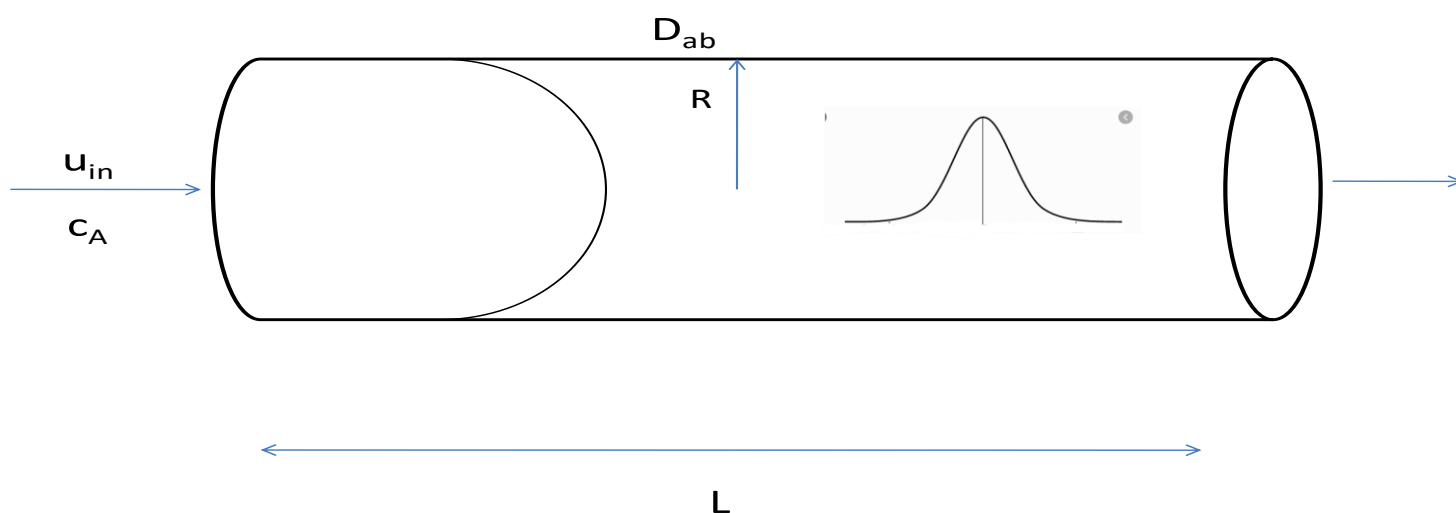
Η γεωμετρία του κυλινδρικού αγωγού παρουσιάζεται στο σχήμα 4.1. Εμφανίζει έναν άξονα συμμετρίας που περνά το κέντρο του κύκλου που δημιουργείται αν γίνει μια τυχαία εγκάρσια τομή του αγωγού. Επιπλέον, η τομή κατά μήκος του άξονα συμμετρίας του αγωγού θα έχει σαν σχήμα ένα ορθογώνιο παραλληλόγραμμο. Αυτή η πληροφορία θα φανεί χρήσιμη στην συνέχεια καθώς ταιριάζει με τα εργαλεία που εμφανίζει για την μελέτη του προβλήματος το λογισμικό Comsol.

Στον συγκεκριμένο αγωγό, αρχικά, ρέει ένα ρευστό B. Το ρευστό B αποτελεί και το διαλύτη στο οποίο εισέρχεται ένας παλμός ενός καθαρού ρευστού A, ο οποίος μελετάται. Τα δύο ρευστά έχουν παρόμοια μοριακά βάρη  $Mr_a=20$  και  $Mr_b=18$ . Το ρευστό B έχει πυκνότητα  $\rho_B = 0,998 \text{ kg/L}$ . Το ρευστό A εισέρχεται από την αρχή του αγωγού αποκτώντας την μέση ταχύτητα της ροής,  $u_{in} = 0.005 \text{ m/s}$ . Ο παλμός είναι ορθογωνικός. Εισάγεται για ένα μικρό χρονικό διάστημα ( $\Delta t=0.1 \text{ s}$ ) με καθαρή εισροή ρευστού A. Η διάρκεια εισαγωγής του

παλμού καθώς και η μορφή του (τριγωνικός, ορθογωνικός κλπ) δεν επηρεάζει την εξέλιξη του φαινομένου για αναπτυγμένους χρόνους (G. Taylor, 1953)

Η ροή ακούει στο νόμο Hagen-Poiseuille όπως αναφέρθηκε στο Κεφάλαιο 2.

Τα δύο ρευστά, όπως έχει εξηγηθεί στο κεφάλαιο 2, θα αλληλεπιδράσουν μεταξύ τους με τους δύο μηχανισμούς μεταφοράς μάζας. Θα υπάρχει η διάχυση του ρευστού A στο B και παράλληλα η συναγωγή από την κύρια ροή. Η διάχυση μεταξύ των ρευστών εμφανίζει ένα συντελεστή διάχυσης,  $D_{ab}$ .



**Σχήμα 4.1** Αναπαράσταση του κυκλινδρικού αγωγού του υπολογιστικού προβλήματος με το παραβολικό προφίλ της ταχύτητας και την Gaussian κατανομή της συγκέντρωσης

Καταστρώνεται η εξίσωση κίνησης ως προς το ρευστό A, που όπως αναφέρθηκε αναπαριστά το ισοζύγιο μάζας της ροής. Χωρίς τις παραδοχές που γίνονται στο Κεφάλαιο 3 μελετάται η εξέλιξη της ροής με την βοήθεια των προσομοιώσεων του λογισμικού Comsol.

Το μέγεθος ενδιαφέροντος είναι η εξέλιξη της κατανομής της συγκέντρωσης του ρευστού A. Με την χρήση του Comsol και της Matlab θα διαπιστωθεί ποια είναι η μορφή που λαμβάνει η κατανομή συγκεντρώσεων. Από αυτή την πληροφορία μπορεί να εξαχθεί ο συντελεστής της διασποράς Taylor-Aris,  $K$ , επιτρέποντας την σύγκριση του με τον θεωρητικά υπολογισμένο και την εκ νέου χαρτογράφηση της περιοχής Taylor-Aris.

#### 4.1.2 Παρουσίαση της μεθοδολογίας

Οι προσομοιώσεις που πραγματοποιήθηκαν γίνανε βάση ενός υποθετικού μίγματος ρευστών. Αυτό έγινε για έναν λόγο. Εφόσον, η μελέτη δεν επικεντρώνεται στην συμπεριφορά ενός συγκεκριμένου μίγματος δίνεται η δυνατότητα μεγαλύτερης ευελιξίας στην αλλαγή των παραμέτρων. Για παράδειγμα, η αλλαγή τιμής του συντελεστή διάχυσης για ένα συγκεκριμένο μίγμα θα έπρεπε να συνοδεύεται από την μελέτη της θερμοκρασίας. Αυτό δεν είναι αντικείμενο ενδιαφέροντος για την παρούσα εργασία.

Επιλέχτηκε να διατηρηθεί σταθερή η γεωμετρία του αγωγού ώστε οι προσομοιώσεις να μην γίνεται να επηρεαστούν από αυτήν (δηλαδή διατηρείται σταθερή η διάμετρος και το σχήμα του αγωγού). Κατ' επέκταση, οι δύο παράγοντες που μένουν για την μεταβολή του αριθμού Peclet είναι η σταθερά διάχυσης και η μέση ταχύτητα. Ο επιπλέον περιορισμός είναι ότι το φαινόμενο Taylor-Aris εκτυλίσσεται με διαφορετικό τρόπο, που δεν περιγράφεται από όσα αναφέρθηκαν στο Κεφάλαιο 3, όταν περνάμε στην τυρβώδη ροή ( $Re > 2100$ ) (G. Taylor, 1954). Έτσι χωρίς να είναι απαγορευτική η μεταβολή της μέσης ταχύτητας,  $\langle v_z \rangle$ , δημιουργείται ένας περιορισμός στην αποκλειστική μεταβολή αυτής για όλο το φάσμα των αριθμών Peclet που χρειάστηκε να μελετηθούν. Αυτό συμβαίνει καθώς αύξηση της ταχύτητας επιφέρει αύξηση του αριθμού Reynolds με κίνδυνο να βρεθεί σε τιμές τυρβώδους ροής.

Έτσι, η επιλογή ενός υποθετικού μίγματος ρευστών έγινε για να δοθεί η δυνατότητα μεταβολής του συντελεστή διάχυσης. Αυτό πραγματοποιήθηκε λαμβάνοντας υπ' όψιν την τάξη μεγέθους πραγματικών τιμών του συντελεστή διάχυσης και της ικανότητας του υπολογιστή να επεξεργαστεί την διαδικασία των προσομοιώσεων (καθώς οι μεγάλες αλλαγές στην γεωμετρία αρκετές φορές επηρεάζουν το πλέγμα (mesh) αραιώνοντας το υπερβολικά).

Για την λειτουργία του Comsol απαιτείται η σταθερά διάχυσης και η μέση ταχύτητα της ροής. Για την γεωμετρία του αγωγού η ακτίνα και το μήκος (στο οποίο θα μελετήσουμε την ροή). Αυτές καταγράφηκαν συγκεντρωτικά στην αρχή για να διευκολύνει την μεταβολή και χρήση τους εντός του λογισμικού.

Επιλέχθηκε να ενταθούν οι μετρήσεις καθώς περνάμε στην περιοχή, όπου πλέον και η διάχυση όντας σημαντική σε σχέση με την συναγωγή, αφήνει εμφανή επίδραση στο φαινόμενο της διασποράς. Με βάση και τις παρατηρήσεις του Aris σε αυτή την περιοχή το φαινόμενο της διασποράς μεταβάλλεται σε σχέση με τα αναμενόμενα αποτελέσματα από τον Taylor. Η μεγαλύτερη πυκνότητα των μετρήσεων έγινε για τις τιμές  $Pe < 100$ .

Παρατίθεται ένας συγκεντρωτικός πίνακας με τα δεδομένα των επιμέρους προσομοιώσεων που συνιστούν το πρόβλημα που αναλύεται:



**Πίνακας 4.1 Συγκεντρωτικός πίνακας παραμέτρων των υπολογιστικών πειραμάτων**

Pe	$D_{ab}$ (m <sup>2</sup> /s)	R (m)	$u_{in}$ (m/s)	L (m)
2	$5 \cdot 10^{-5}$	0,01	0,005	7
5	$2 \cdot 10^{-5}$	0,01	0,005	1
10	$10^{-5}$	0,01	0,005	1,25
15	$6,667 \cdot 10^{-6}$	0,01	0,005	1,75
20	$5 \cdot 10^{-6}$	0,01	0,005	3
25	$4 \cdot 10^{-6}$	0,01	0,005	3
50	$2 \cdot 10^{-6}$	0,01	0,005	4,5
75	$1,333 \cdot 10^{-6}$	0,01	0,005	6
100	$10^{-6}$	0,01	0,005	6
150	$6,667 \cdot 10^{-7}$	0,01	0,005	6
200	$5 \cdot 10^{-7}$	0,01	0,005	6
400	$2,5 \cdot 10^{-7}$	0,01	0,005	7
600	$1,667 \cdot 10^{-7}$	0,01	0,005	9
800	$1,25 \cdot 10^{-7}$	0,01	0,005	10
1000	$10^{-7}$	0,01	0,005	10

## 4.2 Μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων

Το Comsol Multiphysics 5.2 για να επιλύσει ένα πρόβλημα το οποίο του τίθεται χρησιμοποιεί συγκεκριμένες μαθηματικές μεθόδους. Για να πραγματοποιηθεί αυτό χωρίζει την γεωμετρία του προβλήματος σε επιμέρους χώρους εντός των οποίων επιλύεται το πρόβλημα καταλήγοντας στο τελικό αποτέλεσμα της προσομοίωσης. Η δημιουργία και λειτουργία του πλέγματος (Mesh) αποτελεί το περιβάλλον επίλυσης για την Μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων (Finite Elements Method – FEM).

#### 4.2.1 Δημιουργία πλέγματος (Mesh)

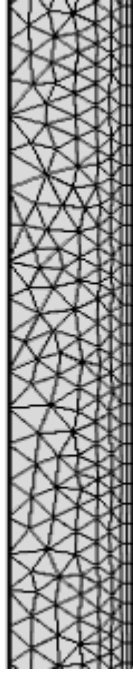
Η εξίσωση κίνησης του προβλήματος αποτελεί ένα σύνολο Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων (PDEs). Ο διαχωρισμός της γεωμετρίας μέσω του πλέγματος σε επιμέρους στοιχεία (elements), όπως ονομάζονται, δημιουργεί δισδιάστατες επιφάνειες στην απεικόνιση του αγωγού. Κάθε ξεχωριστή επιφάνεια, που συγκροτεί το πλέγμα (mesh), αποτελεί ένα υπολογιστικό κλάδο. Εντός αυτών των κλάδων γίνεται η επίλυση των PDEs.

Η δημιουργία του πλέγματος έχει ιδιαίτερη σημασία για την μελέτη του προβλήματος με το λογισμικό. Αποτελεί παράγοντα που σχετίζεται με την αξιοπιστία των αποτελεσμάτων που παραλαμβάνονται τελικά. Η ύπαρξη ή όχι σύγκλισης των λύσεων, η ακρίβεια της λύσης αλλά και ο υπολογιστικός φόρτος βασίζονται στην πυκνότητα και την ποιότητα του πλέγματος (Gakis, 2020).

Ο υπολογιστικός φόρτος, βέβαια, θέτει συγκεκριμένους περιορισμούς. Η χρήση ενός υπερβολικά πυκνού πλέγματος ενδέχεται να μην επιφέρει ουσιαστική διαφορά ως προς το αποτέλεσμα που λαμβάνεται. Το πρόβλημα σε σχέση με αυτό οφείλεται στον χρόνο και την υπολογιστική επιβάρυνση της μνήμης του υπολογιστή. Από αυτή την άποψη, με όρους βελτιστοποίησης του προβλήματος, δεν απαιτείται πάντα η επιβάρυνση του προβλήματος με το πλέγμα μέγιστης δυνατής πυκνότητας.

Με βάση το σχήμα των στοιχείων το πλέγμα μπορεί να πάρει τις εξής μορφές: α) δομημένου πλέγματος, αποτελούμενο από ορθογώνια ή τραπέζια στοιχεία τα οποία συγκροτούν ένα ομοιόμορφο σχέδιο και β) αδόμητου πλέγματος, αποτελούμενο από τριγωνικά στοιχεία, τα οποία τοποθετούνται τυχαία δημιουργώντας ένα ανομοιόμορφο σχέδιο. Οι δύο μορφές πλέγματος αναφέρονται σε δισδιάστατη απεικόνιση του προβλήματος. Η Μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων (FEM) μπορεί να προσαρμοστεί και στις δύο μορφές πλέγματος ή συνδυασμό τους

Στο σχήμα 4.2 παρουσιάζεται η εικόνα του πλέγματος του κυλινδρικού αγωγού του προβλήματος όπως απεικονίζεται στο λογισμικό Cosmol Multiphysics 5.2:



Σχήμα 4.2 Σχηματική απεικόνιση του πλέγματος του υπολογιστικού προβλήματος στο λογισμικό του Comsol Multiphysics 5.2. Το αριστερό όριο του αγωγού στην απεικόνιση είναι ο άξονας συμμετρίας του (μην συγχέεται με το τοίχωμα του αγωγού).

#### 4.2.2 Επίλυση Εξισώσεων στο πλέγμα

Οι μερικές διαφορικές εξισώσεις επιλύονται μαζί με το υπολογιστικό πλέγμα με την χρήση της Μεθόδου Πεπερασμένων Στοιχείων (FEM). Ο συνδυασμός των μερικών διαφορικών εξισώσεων,  $A(u)$ , και των συνοριακών συνθηκών,  $B(u)$ , συγκροτούν ένα πρόβλημα οριακών τιμών (Gakis, 2020):

$$A(u) = Lu = f, \text{ στο χωρίο } \Omega \quad (4.01)$$

$$B(u) = Mu = g \text{ στο } \partial\Omega \quad (4.02)$$

Όπου το  $L$  και  $M$  είναι διαφορικοί τελεστές στο χωρίο  $\Omega$  και το όριο  $\partial\Omega$ , αντίστοιχα, ενώ  $u$  είναι η άγνωστη συνάρτηση. Στην Μέθοδο Πεπερασμένων Στοιχείων, η επίλυση της συνάρτησης παίρνει μια κατά προσέγγιση μορφή  $\tilde{u}$ :

$$u \approx \tilde{u} = \sum_{j=1}^N u_j \varphi^j \quad (4.03)$$

Όπου  $u_j$  είναι οι άγνωστες μεταβλητές των κόμβων και  $\varphi^j$  είναι οι συναρτήσεις βάσης, δηλαδή γνωστές συναρτήσεις, που συνήθως είναι πολωνυμικές. Η προσεγγιστική λύση δίνεται με την βοήθεια των σταθμισμένων υπολοίπων Galerkin  $R_i$ . Ο όρος  $R_i$  είναι:

$$R_i = \int_{\Omega} (Lu - f) w_i dV \quad (4.04)$$

Όπου  $w_i$  είναι μια σταθμική συνάρτηση. Η Μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων (FEM) χρησιμοποιεί την μέθοδο σταθμισμένων υπολοίπων Garlekin. Δηλαδή, κάθε σταθμική συνάρτηση  $w_i$  ισούται με την συνάρτηση βάσης. Το πλήθος των υπολοίπων είναι ίσο με το πλήθος των συναρτήσεων βάσης άρα και ίσο με το πλήθος των κόμβων που δημιουργούνται από το πλέγμα. Η μέθοδος αυτή αναζητά τις λύσεις που μηδενίζουν το σταθμισμένο υπόλοιπο (Σέμπου, 2014).

Η εξ. (4.04) πρέπει να μηδενίζεται και αντικαθιστώντας σε αυτήν την  $u$  της εξ. (4.03) τροποποιείται ως εξής :

$$R_i = \int_{\Omega} \left( \mathbf{L} \left( \sum_{j=1}^N u_j \varphi^j \right) - f \right) w_i dV = 0 \quad (4.05)$$

Πλέον ο μόνος άγνωστος όρος είναι η μεταβλητή στους κόμβους  $u_j$ . Ολοκληρώνοντας τμηματικά, ή με χρήση του θεωρήματος απόκλισης τους Gauss, ή κάποια άλλη μέθοδο και λαμβάνοντας υπ' όψιν τις συνοριακές συνθήκες προκύπτει μείωση του βαθμού των παραγώγων. Οι συνοριακές συνθήκες Dirichlet ταιριάζουν χωρίς παραλλαγές στην εξίσωση. Για τις συνοριακές συνθήκες Neumann και Robin χρειάζεται η ολοκλήρωση κατά τμήματα για να εφαρμοστούν.

Για παράδειγμα, αν ο τελεστής  $\mathbf{L}$  είναι γραμμικός η εξ. (4.05) θα γίνει:

$$\sum_{j=1}^N u_j \varphi^j \int_{\Omega} \varphi^i \mathbf{L}(\varphi^j) dV = \int_{\Omega} f \varphi^i dV \quad (4.06)$$

Συνεχίζοντας, η εξίσωση οδηγείται σε ένα γραμμικό σύστημα:

$$\sum_{j=1}^N u_j a_{ij} = b_i \quad (4.07)$$

Για το οποίο, με χρήση των συνοριακών συνθηκών μπορεί να δοθεί αριθμητική λύση.

Η εφαρμογή των παραπάνω στο Comsol, γίνεται με την χρήση πολυωνύμων 2<sup>ου</sup> βαθμού για την εξίσωση κίνησης (3.01) που αναλύθηκε αρχικά το κεφάλαιο 3 ως συνάρτηση βάσης. Οι εξισώσεις του συστήματος που εισάγονται στο λογισμικό λύνονται με PARDISO και MUMPS solver.

### 4.3 Υπολογιστικά Πειράματα

Το βασικό πρόβλημα της μελέτης της κατανομής συγκέντρωσης του ρευστού χωρίζεται σε επιμέρους προβλήματα. Με την βοήθεια του Comsol έγινε προσπάθεια να χαρτογραφηθεί η

περιοχή που το φαινόμενο Taylor-Aris λαμβάνει χώρα συναρτήσει του αριθμού Peclet και του αδιάστατου χρόνου. Για να πραγματοποιηθεί αυτό έγινε μελέτη της προσέγγισης του συντελεστή  $K$  στις θεωρητικά υπολογισμένες τιμές. Επίσης, μελετήθηκε η εξέλιξη του μοντέλου Taylor-Aris για μικρούς χρόνους για την παρατήρηση της εξέλιξης των υπολογιζόμενων τιμών του συντελεστή,  $K$ , σε σχέση με τον θεωρητικά υπολογισμένο στους ίδιους χρόνους.

Τέλος, επιλέχθηκαν συγκεκριμένες συγκρίσεις στο μοντέλο για την εξακρίβωση της ακρίβειας και αξιοπιστίας των αποτελεσμάτων που θα παρουσιαστούν. Αυτό κρίθηκε αναγκαίο για να μπορέσει να διαπιστωθεί αν επηρεάζεται η μελέτη του φαινομένου από παράγοντες όπως η αλλαγή των παραμέτρων ή η πυκνότητα του υπολογιστικού πλέγματος του λογισμικού.

Αρχικά, προσεγγίστηκε η γραμμή που οριοθετεί την περιοχή Taylor-Aris με βάση τις προσομοιώσεις μας. Όπως αναπτύχθηκε και στο προηγούμενο κεφάλαιο η διασπορά Taylor-Aris προϋποθέτει την ανάπτυξη της ροής για μεγάλους χρόνους. Με αυτή την έννοια, το φαινόμενο δεν θα παρατηρηθεί από την χρονική στιγμή που εισάγεται ο παλμός. Η περιοχή αυτή μπορεί να εξακριβωθεί μέσα από την προσέγγιση του συντελεστή  $K$ . Κατ' επέκταση παρατηρείται αν δημιουργείται κανονική κατανομή για τη συγκέντρωση του παλμού. Με αυτό τον τρόπο προσεγγίζεται ο συντελεστής  $K$  αριθμητικά. Για να πραγματοποιηθεί η προσέγγιση γίνεται χρήση του Matlab αξιοποιώντας το εργαλείο Curve Fitting.

Η μελέτη καταλήγει στην διαμόρφωση του διαγράμματος για δύο προσεγγίσεις (της τάξης του 95% και 97% της θεωρητικά αναμενόμενης τιμής). Μπορεί με αυτό τον τρόπο να γίνει σύγκριση με τον σχήμα 3.3 που χαρτογραφήθηκε η περιοχή Taylor-Aris.

Δεύτερον, γίνεται σύγκριση με μεταβολή των παραμέτρων για να εξακριβωθεί η αξιοπιστία των μετρήσεων και προσομοιώσεων. Μελετάται αν επηρεάζεται το αποτέλεσμα των προσομοιώσεων από αυτή την μεταβολή. Ουσιαστικά, η σύγκριση γίνεται για έναν αριθμό Peclet που προκύπτει με δύο διαφορετικά σύνολα τιμών για τις παραμέτρους και μελετάται αν για τον ίδιο αδιάστατο χρόνο  $Fo$  υπάρχει σύγκλιση των αποτελεσμάτων. Αυτό πραγματοποιείται για αλλαγή των παραμέτρων που καταλήγουν στον ίδιο αριθμό Peclet. Δεδομένου ότι τα αποτελέσματα της χαρτογράφησης δίνονται συναρτήσει αδιάστατων μεγεθών, το κριτήριο της αξιοπιστίας είναι αν υπάρχει για ίδιους αριθμούς Peclet και Fourier σύγκλιση στην τιμή της προσέγγισης της υπολογιζόμενης τιμής  $K$  ως προς την θεωρητική μεταξύ των δύο συγκρινόμενων συνόλων παραμέτρων.

Τρίτον, μελετάται η αξιοπιστία του ίδιου του εργαλείου για την βελτιστοποίηση της διαδικασίας εξεύρεσης λύσεων. Όπως αναφέρθηκε στην υποενότητα 4.2, κάθε προσομοίωση

απαιτεί συγκεκριμένες δυνατότητες επεξεργασίας. Απαιτείται, βέβαια, αυτό να πραγματοποιηθεί παραδίδοντας ικανοποιητικά αποτελέσματα και χωρίς να επιβαρύνεται υπολογιστικά (ως προς την επεξεργασία) η διαδικασία. Η πυκνότητα του πλέγματος επηρεάζει την ακρίβεια των αποτελεσμάτων που λαμβάνονται. Η κατάλληλη επιλογή πλέγματος (mesh) βασίζεται στην ταχύτητα υπολογισμού, στην μικρότερη επιβάρυνση αλλά κυρίως στην ακρίβεια των λύσεων. Για αυτό τον λόγο, θα μελετηθεί αν το πυκνότερο πλέγμα από αυτό που επιλέχθηκε δίνει λύσεις που τηρούν το σύνολο των κριτηρίων που αναφέρθηκαν και επηρεάζει σε ουσιαστικό βαθμό την αξιοπιστία των αποτελεσμάτων.

Τέταρτον, γίνεται μελέτη της εξέλιξης του συντελεστή διασποράς,  $K$ , με τον χρόνο. Ουσιαστικά, ξεκινώντας από την αρχική χρονική στιγμή της ροής μελετάται η εξέλιξη διαμόρφωσης του συντελεστή από την μη ανεπτυγμένη ροή σε μεγάλους χρόνους και σε τιμές που προσεγγίζουν την θεωρητική της τιμή επαρκώς. Η ουσία αυτής της μελέτης είναι να διαπιστωθεί αν υπάρχει κάποιος γενικός κανόνας για τον οποίο η προσέγγιση του συντελεστή,  $K$ , μπορεί να ερμηνεύσει ικανοποιητικά το φαινόμενο της διασποράς Taylor-Aris. Ταυτόχρονα, καταστρώνεται το διάγραμμα της χρονικής εξέλιξης του συντελεστή διασποράς.

Η μελέτη του αρχικού προβλήματος μέσα από αυτές τις προσομοιώσεις και συγκρίσεις στοχεύουν στην παρατήρηση των κανόνων με τους οποίους λειτουργεί το φαινόμενο Taylor-Aris στις περιοχές πριν την ανάπτυξη της ροής και την οριακή γραμμή πέρα από την οποία μπορεί να θεωρηθεί πως εκτυλίσσεται με αξιόπιστα αποτελέσματα το φαινόμενο της διασποράς.

## Κεφάλαιο 5: Παρουσίαση Αποτελεσμάτων

Με βάση το πρόβλημα που αναλύθηκε στο Κεφάλαιο 4 καταστρώνεται το υπολογιστικό πείραμα εισαγωγής ενός ιχνηθέτη σε έναν αγωγό όπου ρέει ένα ρευστό Β στο οποίο διαλύεται ο ιχνηθέτης Α. Η μελέτη της συγκέντρωσης του ιχνηθέτη με την χρήση του Comsol και της Matlab θα οδηγήσει στην εξεύρεση του συντελεστή Κ για το φαινόμενο της διασποράς.

### 5.1 Εισαγωγή – Κατανομή συγκέντρωσης

Όπως έχει αναφερθεί στο κεφάλαιο 3 η μορφή που λαμβάνει η κατανομή της μέσης συγκέντρωσης είναι μια κανονική κατανομή, όπως φαίνεται από την εξίσωση (3.36):

$$\langle c_A \rangle = \frac{n_{A0}}{2\pi R^2 \sqrt{\pi Kt}} \exp\left(-\frac{(z - \langle u \rangle t)^2}{4Kt}\right) \quad (5.01)$$

Κατά την προσομοίωση της ροής στο Comsol θα ληφθούν δεδομένα για τη κατανομή της μέσης συγκέντρωσης μέσα από το υπολογιστικό πείραμα. Αναμένεται και αυτά να λάβουν την μορφή μιας κανονικής κατανομής, η οποία έχει γενικό τύπο:

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x - \mu}{\sigma}\right)^2\right) \quad (5.02)$$

Εξισώνοντας, τους όρους στον παρανομαστή του εκθετικού προκύπτει:

$$\sigma = \sqrt{2Kt} \quad (5.03)$$

Άρα η τυπική απόκλιση  $\sigma$  συσχετίζεται άμεσα με τον συντελεστή διασποράς, Κ, και τον χρόνο, t.

Στην Matlab η κανονική κατανομή εμφανίζεται ως εξής:

$$f(x) = a \exp\left(-\left(\frac{x - b}{c}\right)^2\right) \quad (5.04)$$

Παρόμοια, εξισώνοντας τους παρανομαστές στα εκθετικά των (5.03) και (5.04):

$$c = \sqrt{2}\sigma = 2\sqrt{Kt} \Rightarrow$$
$$K = \frac{\sigma^2}{2t} = \frac{c^2}{4t} \quad (5.05)$$

Έτσι, με την χρήση του εργαλείου Curve Fitting στην Matlab η αντιστοίχιση των δεδομένων σε μια κανονική κατανομή προσφέρει τους συντελεστές a, b, c που αναφέρθηκαν στην

εξίσωση (5.04). Αρκεί η γνώση του συντελεστή  $c$  και της χρονικής στιγμής για την οποία μετρείται η κατανομή της συγκέντρωσης για να υπολογιστεί ο συντελεστής διασποράς  $K$ .

Με την χρήση της αντιστοίχισης του συντελεστή  $K$  με τους συντελεστές της κανονικής κατανομής γίνεται εφικτή η εξεύρεση του από την προσομοίωση της ροής. Αυτή θα είναι η μέθοδος που θα χρησιμοποιηθεί σε όλα τα παραδείγματα που ακολουθούν.

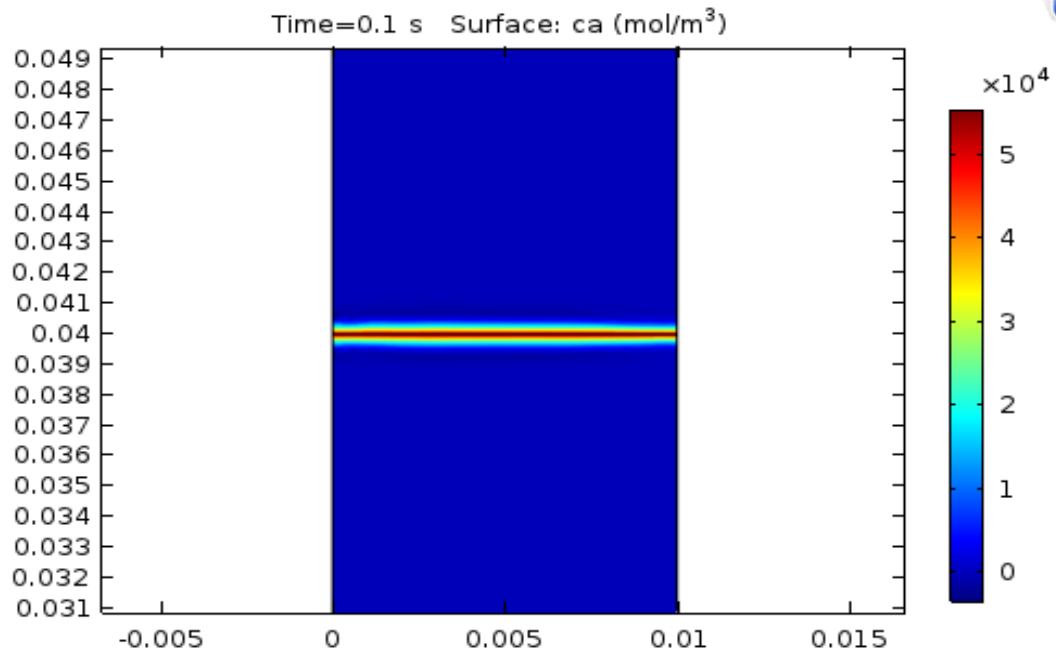
## 5.2 Υπολογισμός Συντελεστή Διάχυσης

Αρχικά, γίνεται μελέτη μιας απλής εφαρμογής για να διαπιστωθεί η ικανότητα των εργαλείων που θα χρησιμοποιηθούν να αποδώσουν σωστά αποτελέσματα. Η απλή εφαρμογή θα είναι ένα υπολογιστικό πείραμα στο οποίο το ρευστό βρίσκεται σε ηρεμία, κατ' επέκταση δεν υπάρχει συναγωγή.

Με την εισαγωγή ενός παλμού από ένα άλλο ρευστό στον αγωγό παρακολουθείται το φαινόμενο της μοριακής διάχυσης για ένα χρονικό διάστημα για να διαπιστωθεί αν ο ρυθμός διάχυσης είναι ίδιος με τον θεωρητικό. Το να μη ισχύει κάτι τέτοιο είναι άτοπο και θα έδειχνε σφάλμα στην μέθοδο μέτρησης. Ουσιαστικά, η συγκεκριμένη μέτρηση πραγματοποιείται για να επαληθευτεί η δυνατότητα χρήσης των συγκεκριμένων εργαλείων και στην περίπτωση της διασποράς. Ο παλμός εισάγεται σε όλη την διάμετρο του αγωγού.

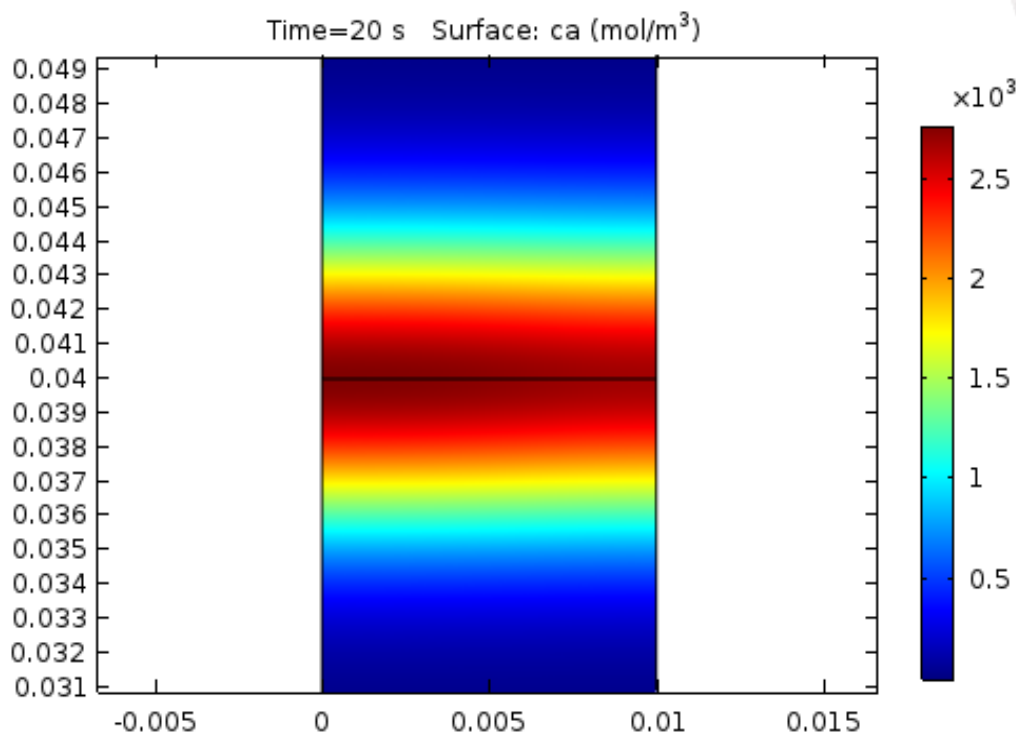
Ο παλμός εισάγεται για ένα πολύ μικρό χρονικό διάστημα (0.1s) δημιουργώντας μια κατανομή συγκεντρώσεων όπως φαίνεται στην εικόνα που ακολουθεί. Στην προσομοίωση που απεικονίζεται στο σχήμα 5.1 φαίνεται η μισή εγκάρσια διατομή του αγωγού. Δηλαδή η τομή του αγωγού κατά μήκος του άξονα συμμετρίας του όμως όχι για το σύνολο της διαμέτρου. Η απεικόνιση παριστάνεται από τον άξονα συμμετρίας κατά μήκος του αγωγού και για μήκος μίας ακτίνας. Έτσι παρουσιάζονται και οι υπόλοιπες προσομοιώσεις του Comsol:





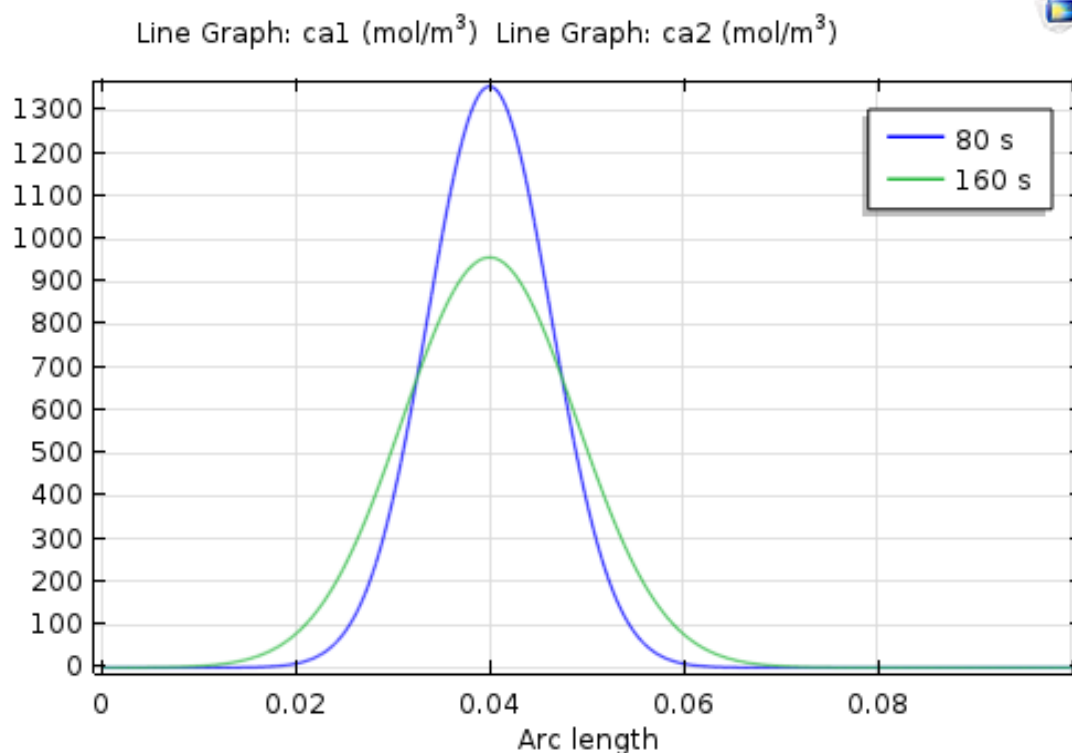
Σχήμα 5.1 Κατανομή συγκεντρώσεων του παλμού για πολύ μικρούς χρόνους στη διάχυση

Αφήνοντας το φαινόμενο να εξελιχθεί φαίνεται από το σχήμα 5.2 πως η αξονική μοριακή διάχυση επιδρά με τρόπο που κάνει τον αρχικό παλμό να πλατύνει και προς τις δύο κατευθύνσεις. Το ίδιο ισχύει και για την συγκέντρωση:



Σχήμα 5.2 Κατανομή συγκεντρώσεων μετά από την ανάπτυξη του παλμού λόγω διάχυσης

Υπολογίζοντας την συγκέντρωση για όλο το μήκος του αγωγού λαμβάνεται ένα διάγραμμα όπως φαίνεται στο σχήμα 5.3. Αυτό γίνεται για δύο χρονικές στιγμές που το φαινόμενο της μοριακής διάχυσης έχει εξελιχθεί επαρκώς:



Σχήμα 5.3 Γραφική αναπαράσταση των τιμών της κατανομής της συγκέντρωσης για χρόνους 80s (μπλε) και 160s (πράσινο)

Οι δύο καμπύλες παίρνουν την μορφή της κανονικής κατανομής (σχήμα 5.3) όπως προκύπτει και από την λύση της εξίσωσης (2.04) του 2<sup>ου</sup> νόμου του Fick. Φαίνεται πως με το πέρασμα του χρόνου η τυπική απόκλιση της κατανομής μεγαλώνει. Σε αντιστοιχία με αυτά που αναφέρονται στην εισαγωγή του κεφαλαίου η τυπική απόκλιση σχετίζεται με τον συντελεστή διάχυσης,  $D_{ab}$ . Η συνάρτηση της σχέσης τους είναι (Atkins & De Paula, 2014):

$$D_{ab} = \frac{\sigma^2}{2t} = \frac{c^2}{4t} \quad (5.06)$$

Παρουσιάζοντας τα αποτελέσματα του υπολογιστικού πειράματος μοριακής διάχυσης προκύπτει η υπολογιστική τιμή του συντελεστή διάχυσης. Όπως, προαναφέρθηκε αναμένεται να συμπίπτει με την θεωρητική καθώς το μόνο φαινόμενο που εκτυλίσσεται είναι η διάχυση. Η παρουσίαση γίνεται με την βοήθεια του εργαλείου Curve Fitting της Matlab που δίνει τις παραμέτρους της κανονικής κατανομής:

Πίνακας 5.1 Παράμετροι και αποτελέσματα υπολογισμού του συντελεστή διάχυσης  $D_{ab}$

Παράμετροι		T(s)	80	160
Ακτίνα R (m)	0.01	c1	0.008952	0.01265
Μήκος L (m)	0.1	Τυπική απόκλιση $\sigma$	0.00633	0.008945
Συντελεστής Διάχυσης $D_{ab}$	2.5E-07	Υπ Συντελεστής Διάχυσης $D_{ab}$	2.5042E-07	2.5004E-07
		Error %	-0.173	-0.014

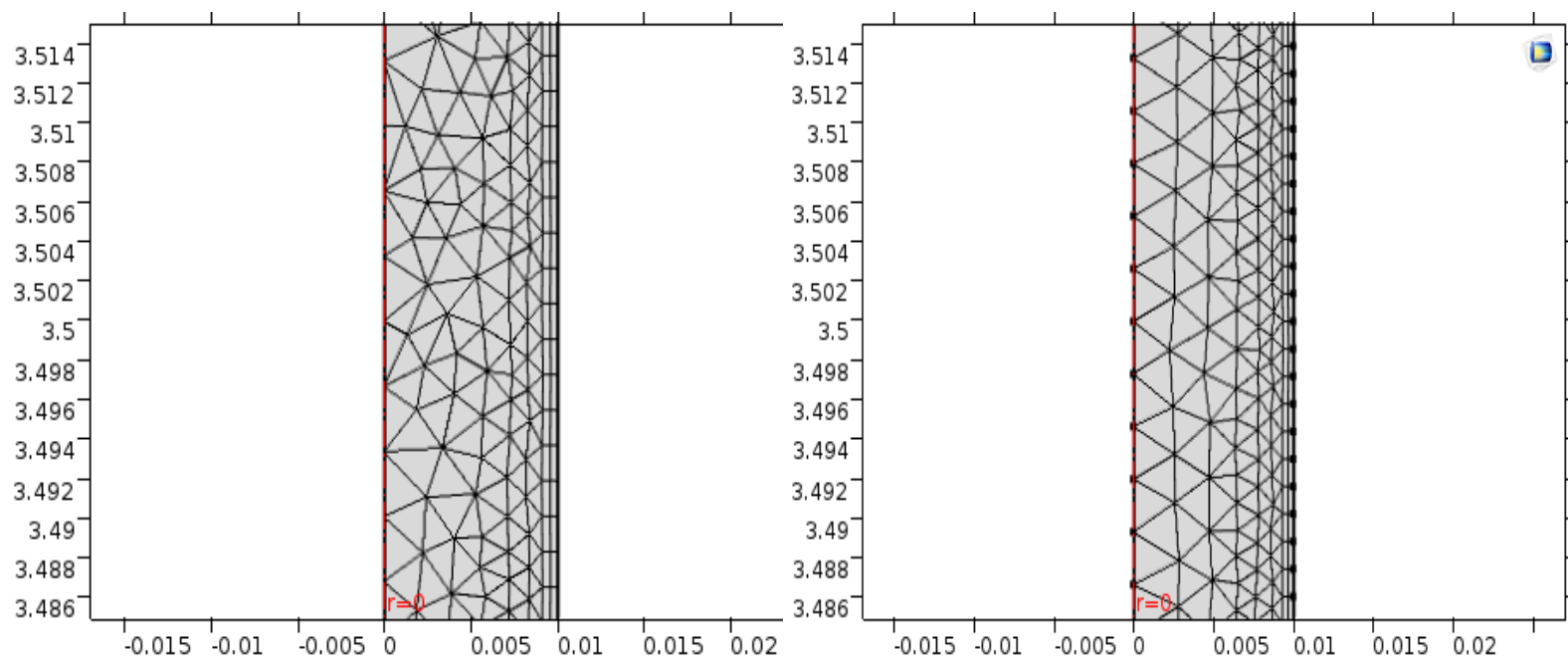
Από την παρουσίαση των αποτελεσμάτων στον Πίνακα 5.1 προκύπτει συμφωνία θεωρητικής και υπολογιστικής τιμής. Συμπερασματικά, η συγκεκριμένη μέθοδος μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την μελέτη και της διασποράς με τις κατάλληλες προσαρμογές για να αναφέρεται στην εξίσωση συνέχειας του προβλήματος που αναφέρθηκε στο κεφ. 4 και να υπολογίζει τον συντελεστή διασποράς Taylor-Aris.

### 5.3 Σύγκριση για Διαφορετικά Πλέγματα (Mesh)

Πριν γίνει αναφορά στο καθ' εαυτό πρόβλημα και τα αποτελέσματα του υπάρχει ανάγκη να φανεί πως η αξιοπιστία του πλέγματος που επιλέχθηκε είναι επαρκής. Όπως αναφέρθηκε στο Κεφ. 4 η επίλυση των διαφορικών εξισώσεων γίνεται με την Μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων. Η επιλογή του πλέγματος γίνεται με κριτήριο την ακρίβεια επίλυσης, τον απαιτούμενο χρόνο και την επιβάρυνση της μνήμης του υπολογιστή. Από αυτή την άποψη δεν επιλέγεται το πιο πυκνό πλέγμα γιατί μπορεί να καταστεί ατελέσφορο χρονικά και λειτουργικά για την προσομοίωση.

Η σύγκριση πραγματοποιήθηκε για το υπολογιστικό πείραμα που έχει αριθμό Peclet 400 με μόνη αλλαγή στην επιλογή του αμέσως πυκνότερου πλέγματος (mesh) από τις τυποποιημένες επιλογές του Comsol (Παράδειγμα 1 → Coarse Mesh, Παράδειγμα 2 → Normal Mesh).

Ακολουθεί η παρουσίαση των πλέγματος στο σχήμα 5.4 και των αποτελεσμάτων στον Πίνακα 5.2 που δίνονται για τον συντελεστή διασποράς Taylor-Aris συγκριτικά για τα δύο παραδείγματα:



Σχήμα 5.4 Απεικόνιση της πυκνότητας των πλεγμάτων για δύο τυποποιημένες επιλογές. Αριστερά για πυκνότητα Coarse και δεξιά για Normal

Πίνακας 5.2 Παράμετροι και σύγκριση αποτελεσμάτων για τα δύο διαφορετικά πλέγματα

Πλέγμα	Coarse		Normal	
υπολογιστικού Πειράματος $Re=400$				
Συντ. Διάχυσης $D_{ab} (m^2/s)$	<b>2.5E-07</b>			
Θεωρ. Συντ. Διασποράς $K (m^2/s)$	<b>2.086E-04</b>			
Χρόνος s (Fourier)	<b>280 (0.7)</b>	<b>550 (1.375)</b>	<b>280 (0.7)</b>	<b>550 (1.375)</b>
Υπολογιστικός Συντ. Διασποράς $K$	<b>1.98324E-04</b>	<b>2.02343E-04</b>	<b>1.98156E-04</b>	<b>2.02283E-04</b>
Απόκλιση	<b>4.92%</b>	<b>2.99%</b>	<b>5%</b>	<b>3.02%</b>

Παρατηρώντας τις εικόνες του σχήματος 5.4 των πλεγμάτων φαίνεται οπτικά πως προκύπτει διαφορά μεταξύ των δύο πλεγμάτων χωρίς να μπορεί αν βγει κάποιο ασφαλές συμπέρασμα από αυτή την πληροφορία. Με βάση το λογισμικό στην περίπτωση του Coarse Mesh υπάρχουν 39701 στοιχεία ενώ για το Normal Mesh 48176 στοιχεία. Λαμβάνοντας υπ' όψιν τον Πίνακα 5.2 στον οποίο δίνονται αποτελέσματα για τους δύο επιλεγμένους χρόνους διακρίνεται μια μικρή απόκλιση μεταξύ των παραδειγμάτων που είναι αναμενόμενη όσο πυκνώνει το πλέγμα. Η διαφορά αυτή όμως αν συγκριθούν ο υπολογιστικός συντελεστής διασποράς για το αραιότερο πλέγμα προς το πυκνότερο πλέγμα για τους δύο χρόνους με αύξουσα σειρά προκύπτουν αποκλίσεις της τάξης του 0,08% και 0,03% αντίστοιχα. Αυτές οι αποκλίσεις μπορούν να θεωρηθούν αμελητέες και προσθετικά μειώνονται με τον χρόνο. Κατ' επέκταση η χρήση ενός Coarse πλέγματος που χρησιμοποιήθηκε και για τα άλλα υπολογιστικά πειράματα μπορεί να θεωρηθεί ικανοποιητικό με βάση τους λόγους που λαμβάνονται υπ' όψιν και αναφέρθηκαν παραπάνω (ακρίβεια, χρόνος, επιβάρυνση). Τέλος, δεν υπάρχει κάποιος λόγος να θεωρηθεί πως η αμελητέες αποκλίσεις θα διαφοροποιηθούν για τα άλλα υπολογιστικά παραδείγματα.

## **5.4 Αποτελέσματα Διασποράς**

Με χρήση της μεθόδου που παρουσιάστηκε για το πρόβλημα της μοριακής διάχυσης καταστρώνεται στην Comsol το πρόβλημα του κεφ 4 για την μελέτη του φαινομένου της διασποράς.

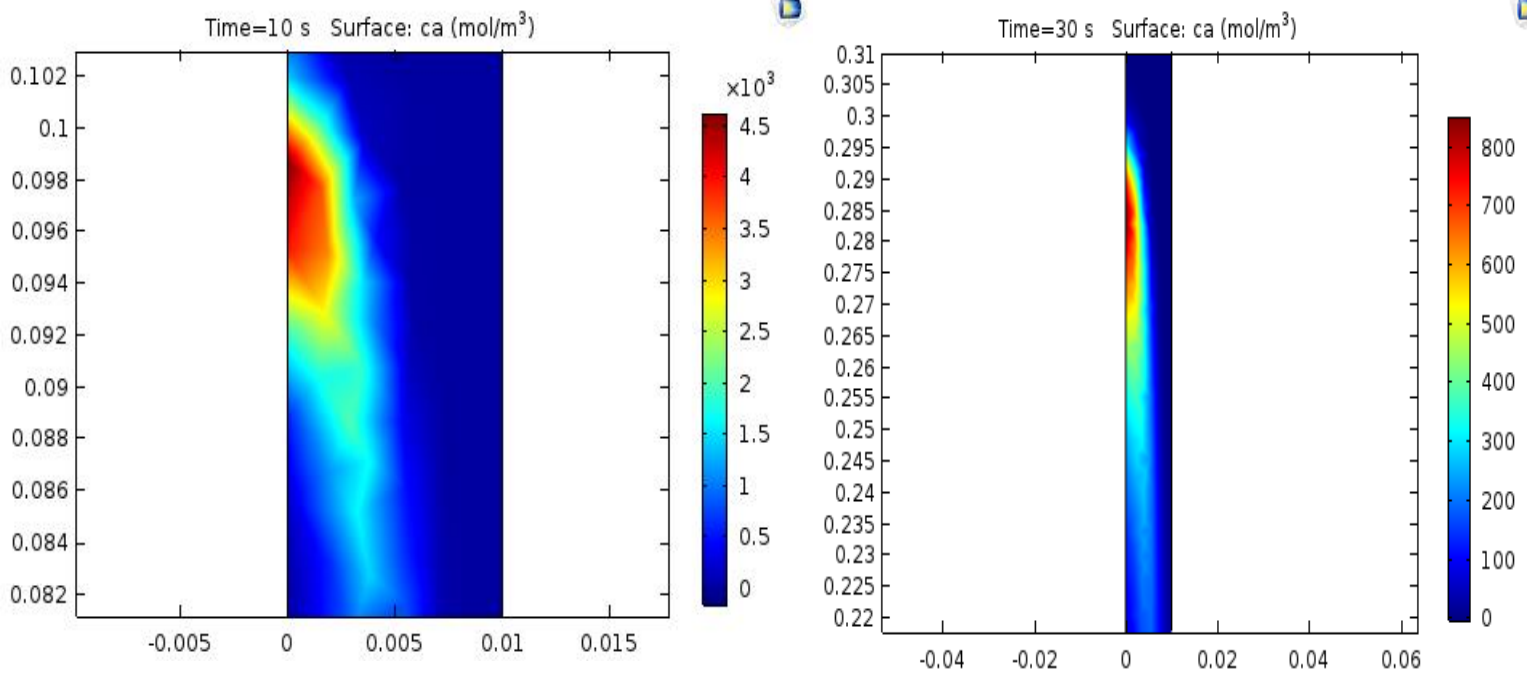
### **Υπολογισμός συντελεστή K**

Στην συνέχεια θα γίνει η αντίστοιχη διαδικασία με βάση την περίπτωση του παραδείγματος που αναφέρθηκε στο κεφ. 4 στην οποία υπάρχει παραβολικό προφίλ της ταχύτητας και εμφανίζεται το φαινόμενο της διασποράς.

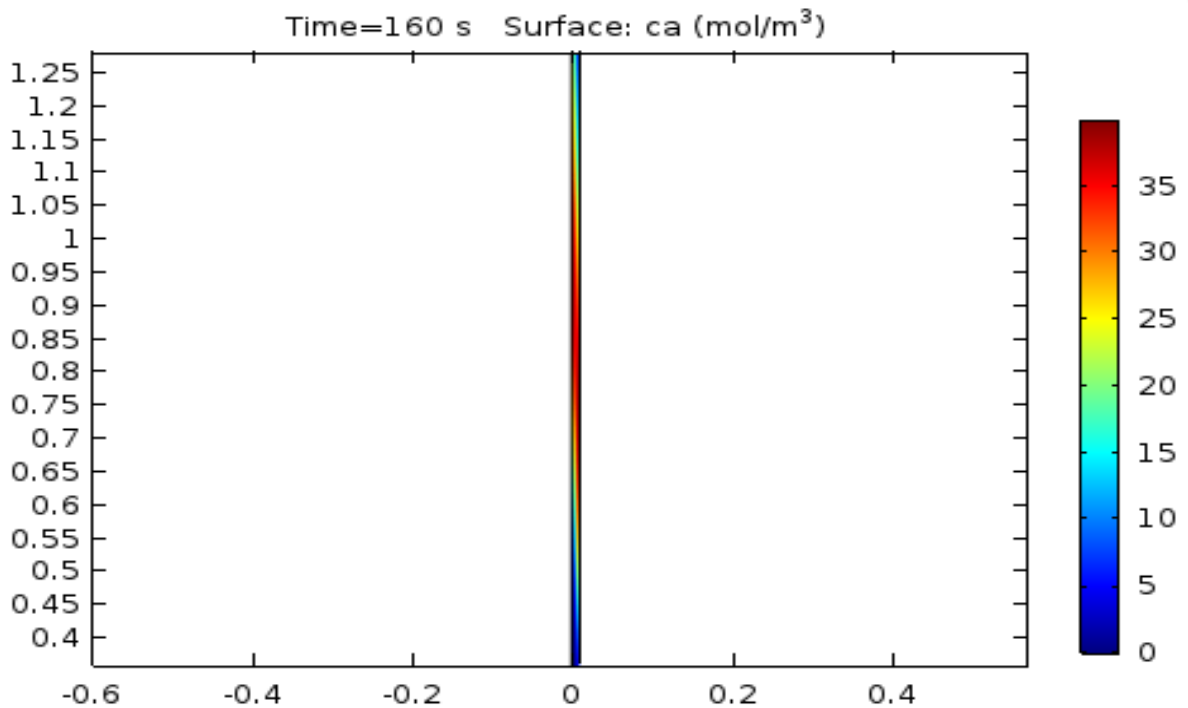
Το υπολογιστικό πείραμα πραγματοποιείται σε συνθήκες που περιγράφονται από τον πίνακα των παραμέτρων στο κεφ. 4. Αρχικά, παρουσιάζεται, ενδεικτικά, η διεξαγωγή του πειράματος σε συνθήκες της περιοχής Taylor και στην συνέχεια της Taylor-Aris. Αυτό όπως έχει αναφερθεί προηγουμένως θα γίνει με διαφοροποίηση των συνθηκών διατηρώντας αμετάβλητη την ακτίνα του αγωγού και την μέση ταχύτητα της ροής.

#### **5.4.1 Υπολογισμός στην περιοχή Taylor**

Όπως, έχει περιγραφεί το υπολογιστικό πείραμα ξεκινάει εισάγοντας μια ποσότητα ιχνηθέτη και αφήνεται να κινηθεί για ορισμένο χρονικό διάστημα και να αναπτυχθεί. Στην περίπτωση αυτή ο ιχνηθέτης εντάσσεται στην κύρια ροή και τροποποιείται λόγω της συνδυαστικής επίδρασης της συναγωγής και ακτινικής διάχυσης. Σύμφωνα με το μοντέλο Taylor η αξονική διάχυση μπορεί να θεωρηθεί αμελητέα. Γίνεται προσομοίωση της ροής που αναφέρεται στον Πίνακα 4.1 με αριθμό Peclet 400. Η χρήση του Comsol δίνει τα εξής αποτελέσματα:



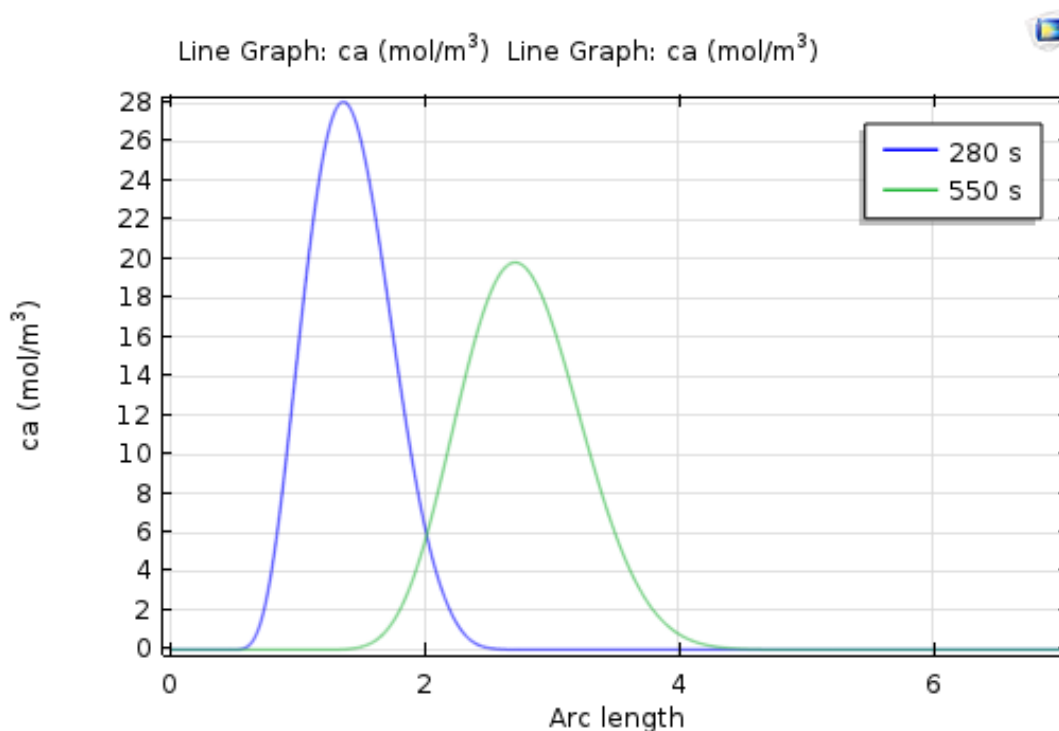
Σχήμα 5.5 Προσομοίωση της κατανομής συγκεντρώσεων για μικρούς χρόνους ανάπτυξης του παλμού για το υπολογιστικό πείραμα με αριθμό Peclet 400



Σχήμα 5.6 Προσομοίωση της κατανομής συγκεντρώσεων του αρχικού παλμού για αναπτυγμένο χρόνο της ροής  $Pe=400$

Στις παραπάνω εικόνες (σχήμα 5.5 και 5.6) ήδη από μικρούς χρόνους γίνεται εμφανές πως ο παλμός του ιχνηθέτη χάνει το αρχικό παραβολοειδές σχήμα της κατανομής συγκέντρωσης (σχήμα 5.5) και αποκτά ένα νέο που οφείλεται στην διασπορά (σχήμα 5.6). Για μεγάλους χρόνους λαμβάνεται η καμπύλη της κατανομής συγκέντρωσης κατά μήκος του άξονα z για διαφορετικές χρονικές στιγμές (και κατ' επέκταση μήκη του αγωγού).

Για την μελέτη της κατανομής της συγκέντρωσης παρατίθεται η σχετική αναπαράσταση από το Comsol του σχήματος 5.7:



**Σχήμα 5.7** Γραφική αναπαράσταση των τιμών της κατανομής συγκέντρωσης κατά μήκος της ροϊκής γραμμής που εντοπίζεται η μέση ταχύτητα για ροή με Peclet 400 για χρόνους 280s και 550s από την εισαγωγή του ιχνηθέτη

Με την χρήση της εφαρμογής Curve Fitting του Matlab τα δεδομένα της καμπύλης εισάγονται για να μελετηθούν. Όπως αναμένεται και θεωρητικά από την μελέτη των Taylor-Aris παρατηρείται πως τα δεδομένα αντιστοιχούν σε μια κανονική κατανομή. Με την εξεύρεση των παραμέτρων της συνάρτησης της κανονικής κατανομής (το μέγεθος ενδιαφέροντος όπως έχει αναφερθεί είναι η τυπική απόκλιση) υπολογίζεται ο συντελεστής K της διασποράς. Η παρουσίαση ακολουθεί τους βαθμούς προσέγγισης που αναζητήθηκαν (της τάξης του 95% και 97%):

**Πίνακας 5.3 Παράμετροι και αποτελέσματα υπολογισμού του συντελεστή διασποράς  $K$**

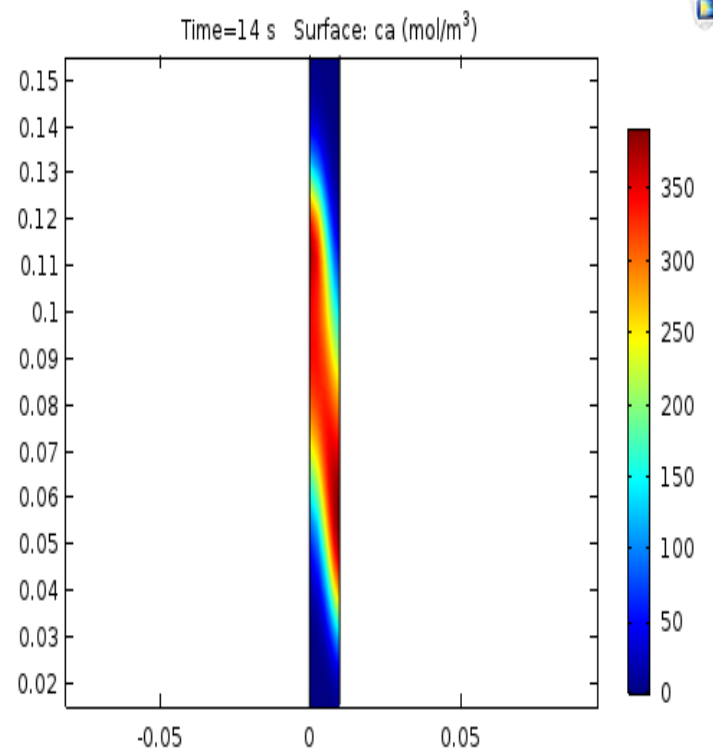
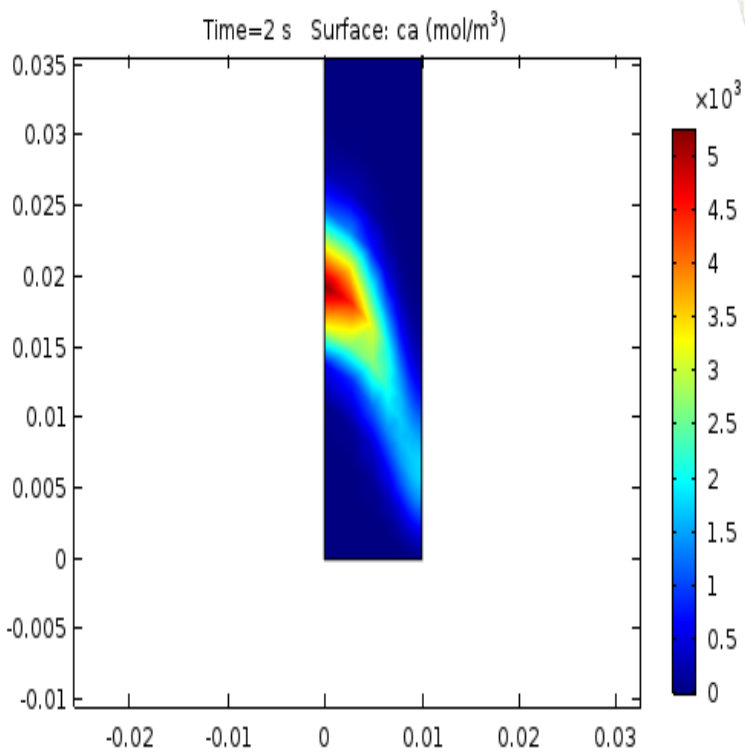
Παράμετροι		T (s)	280	550
Μεση ταχ. < $u >$ (m/s)	0.005	c1	0.4713	0.6672
Συντ. διάχυσης $D_{ab}$ ( $m^2/s$ )	2.5E-07	Τυπική απόκλιση $\sigma$	0.33326	0.4718
Ακτίνα R (m)	0.01	R squared	0.99	0.99
Μήκος L (m)	7	Υπολογιστικός συντ $K$ ( $m^2/s$ )	1.983E-04	2.023E-04
Θεωρ. συντ. διασποράς $K$ ( $m^2/s$ )	2.086E-04	Error %	4.91%	2.99%

Επιβεβαιώνεται και από το υπολογιστικό πείραμα πως η τιμή του συντελεστή διασποράς προσεγγίζει την θεωρητική του Taylor. Επιπλέον, η διαφορά μεταξύ του συντελεστή διάχυσης και του συντελεστή διασποράς είναι της τάξης μεγέθους  $10^{-3}$  επιβεβαιώνοντας την παραδοχή πως η αξονική διάχυση μπορεί να θεωρηθεί ότι ασκεί αμελητέα επίδραση στο φαινόμενο. Όσον αφορά την ταχύτητα φαίνεται πως η μετατόπιση της μεγαλύτερης τιμής συγκέντρωσης (η κορυφή της καμπύλης) ακολουθεί προσεγγιστικά την μέση ταχύτητα και η καμπύλη της κατανομής της συγκέντρωσης τελειώνει σε μετατόπιση ανάλογη της μέγιστης ταχύτητας.

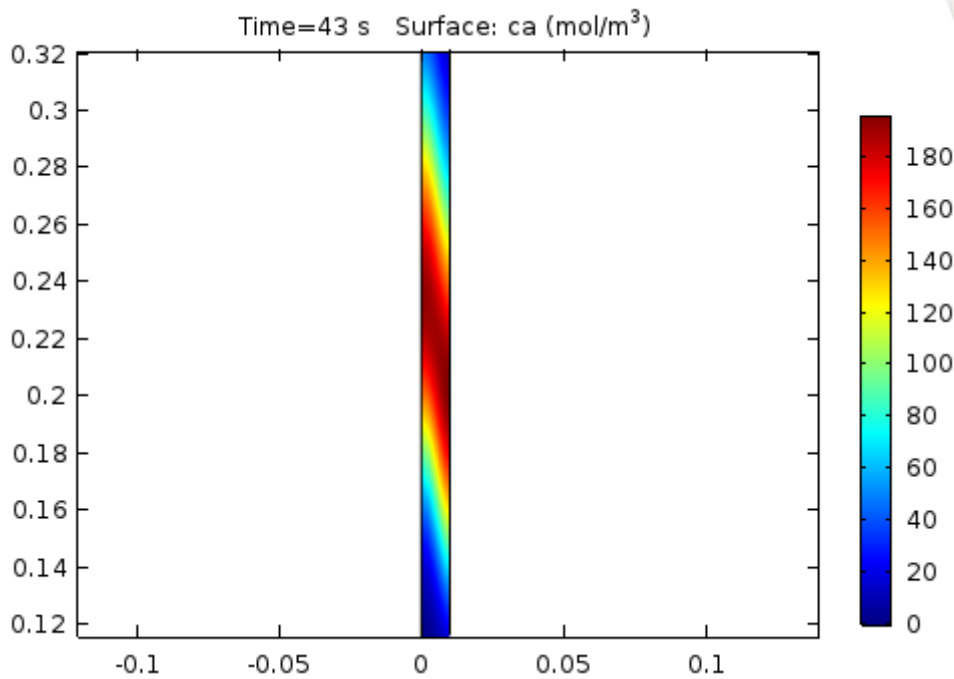
#### **5.4.2 Υπολογισμός στην περιοχή Taylor-Aris**

Αντίστοιχα, σε αυτή την περίπτωση ακολουθείται η ίδια λογική με την περίπτωση της διασποράς στην περιοχή Taylor. Η αλλαγή που είναι αναγκαία είναι στις συνθήκες για να εισέρχεται στην περιοχή Taylor-Aris. Τα δεδομένα είναι με βάση τον πίνακα 4.1 για την περίπτωση τιμής Peclet 50. Η προσθήκη του Aris στα ευρήματα του Taylor είναι πως για χαμηλούς αριθμούς Peclet η μοριακή διάχυση δεν είναι αμελητέα στο φαινόμενο της διασποράς. Αυτό διαφοροποιεί την κατάσταση διότι η αξονική διάχυση ασκεί επίδραση στο φαινόμενο που δεν μπορεί να θεωρηθεί αμελητέα. Τα σχήματα 5.8 και 5.9 παρουσιάζουν την ανάπτυξη του αρχικού παλμού.



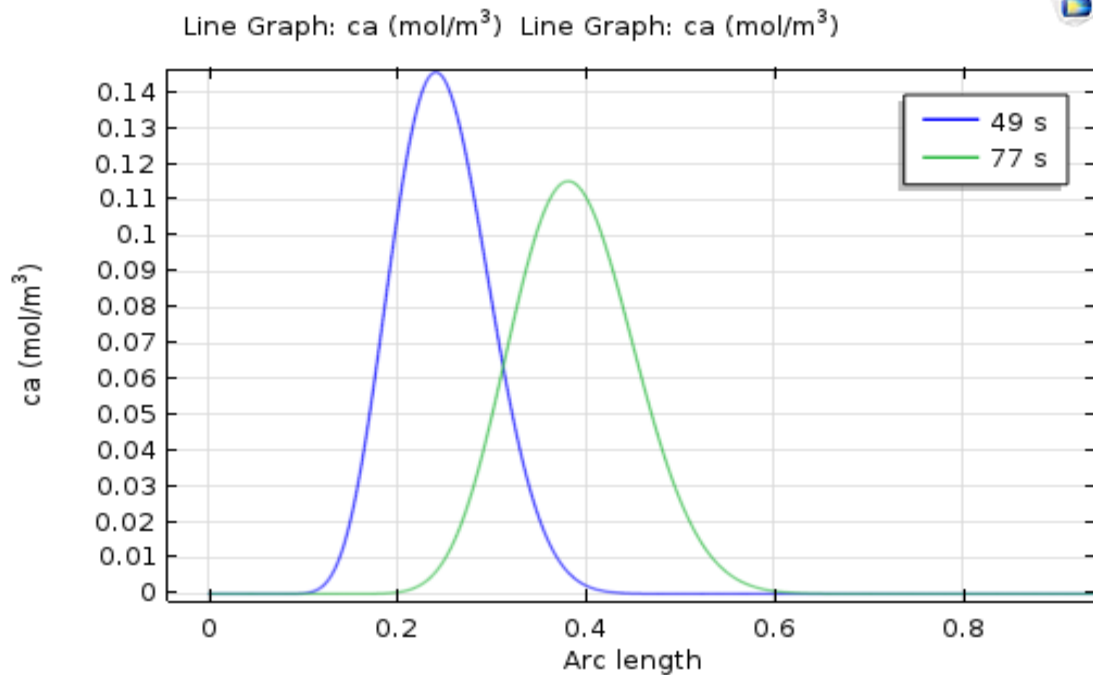


Σχήμα 5.8 Προσομοίωση της κατανομής συγκεντρώσεων για μικρούς χρόνους ανάπτυξης του παλμού για το υπολογιστικό πείραμα με αριθμό Peclet 50



Σχήμα 5.9 Προσομοίωση της κατανομής συγκεντρώσεων του αρχικού παλμού για αναπτυγμένο χρόνο της ροής Pe=50

Αντίστοιχα, παρουσιάζονται οι καμπύλες κατανομής της συγκέντρωσης όπως και στο προηγούμενο παράδειγμα:



Σχήμα 5.10 Γραφική αναπαράσταση των τιμών της κατανομής συγκέντρωσης κατά μήκος της ροϊκής γραμμής με την μέση ταχύτητα για ροή με Peclet 50 για χρόνους 49s και 77s από την εισαγωγή του ικνηθέτη

Με χρήση της Matlab καταλήγουμε εκ νέου στον υπολογισμό του συντελεστή  $K$  της διασποράς:

Πίνακας 5.3 Παράμετροι και αποτελέσματα υπολογισμού του συντελεστή διασποράς  $K$

Παράμετροι		T (s)	49	77
Μεση ταχ. < $u >$ (m/s)	0.005	c1	0.0723	0.0915
Συντ. διάχυσης $D_{ab}$ (m <sup>2</sup> /s)	2E-06	Τυπική απόκλιση $\sigma$	0.05111	0.064721
Ακτίνα R (m)	0.01	R squared		
Μήκος L (m)	4.5	Υπολογιστικός συντ $K$ (m <sup>2</sup> /s)	2.6655-05	2.72-05
Θεωρ. συντ. διασποράς $K$ (m <sup>2</sup> /s)	2.804E-05	Error %	4.94%	3.00%

Παρατηρείται πως η υπολογιζόμενη τιμή του συντελεστή  $K$  προσεγγίζει ικανοποιητικά την θεωρητική της τιμή. Σε αυτή την περίπτωση η τιμή του συντελεστή διάχυσης και του συντελεστή της διασποράς βρίσκονται σε παρόμοια τάξη μεγέθους επιβεβαιώνοντας την υπολογίσιμη επίδραση της αξονικής διάχυσης στο φαινόμενο.

Πέραν από την παρατήρηση των γεγονότων και της επίδρασης της αξονικής διάχυσης, μπορεί να παρατηρηθεί πως η χρήση του συντελεστή  $K$  σύμφωνα με την προσθήκη του Aris δίνει αποτελέσματα που είναι ασφαλή σε κάθε περίπτωση, είτε η ακτινική διάχυση είναι αμελητέα ή αν δεν είναι αμελητέα δηλαδή και για μεγαλύτερους αριθμούς Peclet.

## 5.5 Συγκέντρωση των αποτελεσμάτων

Οι προσομοιώσεις των υπολογιστικών πειραμάτων που αναφέρθηκαν παραπάνω πραγματοποιούνται για ένα φάσμα διαφορετικών τιμών Peclet. Οι τιμές αναφέρονται στον πίνακα 4.1 του κεφ 4. Οι μετρήσεις ξεκινάνε από χαμηλές μέχρι τιμές που μπορούν να θεωρηθούν ότι ισχύουν οι παρατηρήσεις του Taylor σχετικά με την επίδραση της αξονικής μοριακής διάχυσης στην ροή. Ουσιαστικά, περνώντας αυτές τις τιμές σε ένα διάγραμμα συναρτήσεως του χρόνου μπορεί να μελετηθεί πως επιδρά η αναλογία της συναγωγής και διάχυσης στην ροή και την ανάπτυξη του φαινομένου της διασποράς.

Ως προς τον χρόνο θα χρησιμοποιηθεί το αδιάστατο χρονικό μέγεθος του αριθμού Fourier. Ο αριθμός Fourier (ή αδιάστατος χρόνος):

$$Fo = \frac{D_{ab}t}{R^2} \quad (5.06)$$

συσχετίζει χρονικά το φαινόμενο της μοριακής διάχυσης με την χωρητικότητα της γεωμετρίας. Με αυτό τον τρόπο αποτελεί μέγεθος το οποίο μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να συνυπολογίσει τις διαφορές συνθηκών, γεωμετρικών ή φυσικοχημικών, στην ροή του ρευστού. Αυτό προφανώς καθίσταται χρήσιμο στην δημιουργία ενός κοινού κανόνα για διαφορετικές ροές που μελετούνται στην περίπτωση μας ως προς την εξέλιξη του φαινομένου της διασποράς.

Η μελέτη των αποτελεσμάτων γίνεται δημιουργώντας δύο περιοχές. Η πρώτη προκύπτει από τα αποτελέσματα με την προσέγγιση της θεωρητικής τιμής του συντελεστή διασποράς  $K$  της τάξης τους 95% και η άλλη της τάξης του 97%.

Τα αποτελέσματα όπως φαίνονται στην εικόνα 5.11 δείχνουν πως ξεκινώντας από τους μικρότερους αριθμούς  $Pe$ , στους οποίους ισχύει πως η επίδραση της αξονικής διάχυσης είναι υπολογίσιμη, ωθεί την εμφάνιση του φαινομένου σε μεγαλύτερους αδιάστατους χρόνους που σταδιακά μικραίνουν σε τιμή όσο αυξάνεται ο αριθμός Peclet. Όταν αρχίζει και επικρατεί η

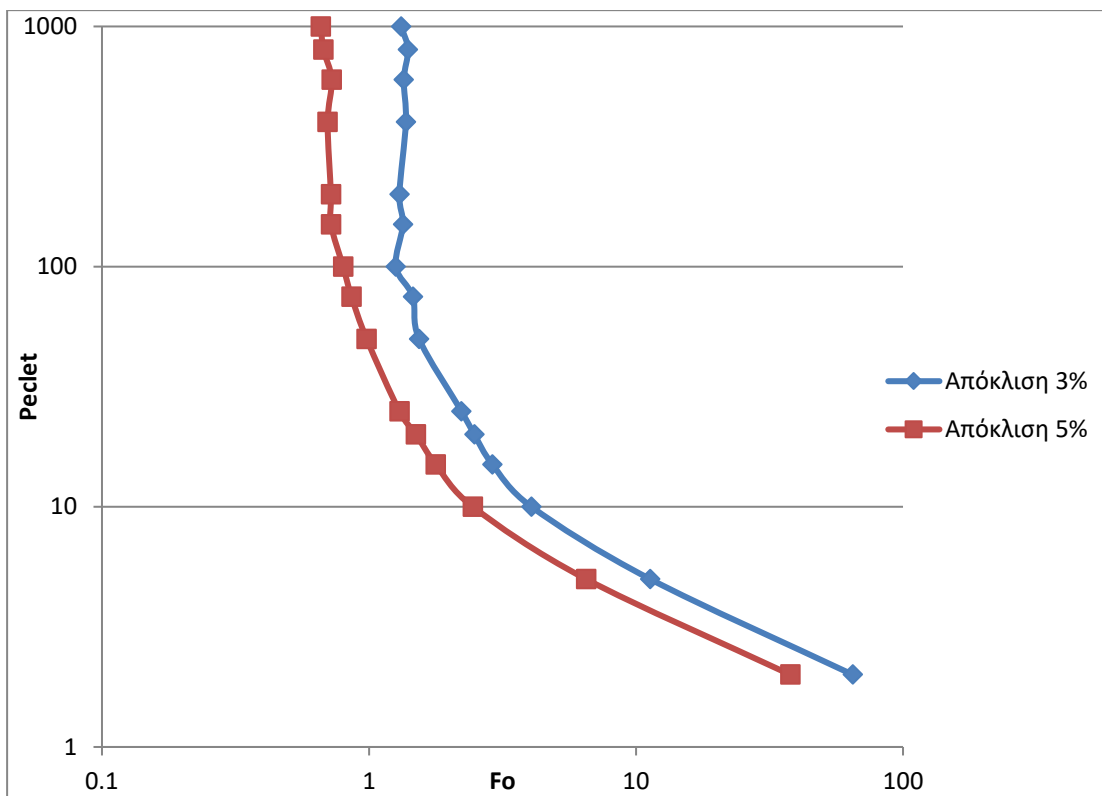
συναγωγή καθιστώντας την αξονική διάχυση αμελητέα στο φαινόμενο αρχίζει και σταθεροποιείται σε χαμηλούς αδιάστατους χρόνους. Με διαφορά την μετατόπιση της περιοχής λόγω της ακριβέστερης προσέγγισης (από 5% σε 3% απόκλιση) η συμπεριφορά της καμπύλης που δείχνει την σχέση αριθμού Peclet (αναλογία συναγωγής και διάχυσης) και του αδιάστατου χρόνου παραμένει ίδια.

Προσθετικά, παρατηρείται συμφωνία με βιβλιογραφικά δεδομένα του σχήματος 3.3 με μικρή χρονική διαφορά στην εμφάνιση της περιοχής. Αυτή η διαφορά γίνεται πιο εμφανής για την περιοχή Aris. Πιο συγκεκριμένα, στην περίπτωση των υπολογιστικών πειραμάτων φαίνεται πως για καλύτερη προσέγγιση η καμπύλη της περιοχής Taylor-Aris μετατοπίζεται χρονικά προς μεγαλύτερους χρόνους.

Παρατίθεται ο συγκεντρωτικός πίνακας των αποτελεσμάτων και τα αποτελέσματα σε μορφή διαγράμματος:

**Πίνακας 5.4 Συγκεντρωτική παρουσίαση της απόκλισης υπολογιστικού προς θεωρητικού συντελεστή διασποράς  $K$  συναρτήσει του αριθμού Peclet και του αδιάστατου χρόνου**

Pe	Fo 95%	Fo 97%
2	37.85	64.85
5	6.5	11.3
10	2.45	4.06
15	1.78	2.9
20	1.5	2.48
25	1.3	2.22
50	0.98	1.54
75	0.86	1.46
100	0.8	1.26
150	0.72	1.34
200	0.72	1.3
400	0.7	1.375
600	0.725	1.35
800	0.7	1.4
1000	0.66	1.32



Σχήμα 5.11 Γραφική αναπαράσταση των συγκεντρωτικών αποτελεσμάτων για δύο προσεγγίσεις υπολογιστικού προς θεωρητικού συντελεστή διασποράς  $K$

### 5.5.1 Αξιοπιστία Αποτελεσμάτων

#### Σύγκριση με διαφορετικές παραμέτρους

Τα αποτελέσματα που έχουν δοθεί από την μελέτη του κεντρικού προβλήματος έχουν παρουσιαστεί στις παραπάνω υποενότητες. Η χρήση των αδιάστατων μεγεθών υποδεικνύει πως αυτά τα αποτελέσματα μπορούν να γενικευτούν και αν στηνόταν ένα διαφορετικό πρόβλημα ως προς το μέγεθος του αγωγού και τις παραμέτρους της ροής. Για να διαπιστωθεί αυτό συγκρίθηκαν δυο περιπτώσεις ροής σε κυλινδρικό αγωγό με ίδιο αριθμό Peclet. Στόχος να διαπιστωθεί αν η εξέλιξη της διασποράς Taylor-Aris θα εξελιχτεί με ανάλογο τρόπο. Το μέγεθος βάσει του οποίου θα διαπιστωθεί αυτό είναι αν συγκλίνουν οι προσεγγίσεις των συντελεστών διασποράς  $K$  (ως προς τους δύο βαθμούς που τέθηκαν και προηγουμένως, δηλαδή για 95% και 97% προσέγγιση) ως προς τον αδιάστατο χρόνο.

Η πρώτη περίπτωση είναι αυτή της προσομοίωσης στην περιοχή Taylor που παρουσιάστηκε στην υποενότητα 5.4.1. Στη δεύτερη περίπτωση μεταβάλλονται και τα 3 μεγέθη που επηρεάζουν τον αριθμό Peclet (ακτίνα, συντελεστής διάχυσης, μέση ταχύτητα ροής)

παραμένοντας όμως στην τιμή 400. Τα μεταβαλλόμενα μεγέθη παρουσιάζονται στον πίνακα της σύγκρισης.

Με παράθεση των πινάκων των παραμέτρων και αποτελεσμάτων μπορεί να πραγματοποιηθεί η σύγκριση:

**Πίνακας 5.5 Σύγκριση παραμέτρων και αποτελεσμάτων δυο διαφορετικών υπολογιστικών πειραμάτων με ίδιο αριθμό Peclet=400**

Παράμετροι		T (s) [Fo]	280 [0.7]	550 [1.375]
Peclet	400	c1	0.4713	0.6672
Μεση ταχ. < $u$ > (m/s)	0.005	Τυπική απόκλιση $\sigma$	0.33326	0.4718
Ακτίνα R (m)	0.01	R squared		
Μήκος L (m)	7	Υπολογιστικός συντ K	1.983E-04	2.023E-04
Συντ. Διάχυσης $D_{ab}$	2.5E-07			
Θεωρ. συντ. διασποράς K	2.086E-04	Error %	4.91%	2.99%

Παράμετροι		T (s) [Fo]	280 [0.7]	550 [1.375]
Peclet	400	c1	0.9425	1.335
Μεση ταχ. < $u$ > (m/s)	0.01	Τυπική απόκλιση $\sigma$	0.6664	0.0.944
Ακτίνα R (m)	0.02	R squared		
Μήκος L (m)	12	Υπολογιστικός συντ K	7.931E-04	8.101E -04
Συντ. Διάχυσης $D_{ab}$	1E-06			
Θεωρ. συντ. διασποράς K	8.343E-04	Error %	4.93%	2.90%

Αρχικά, μπορεί να παρατηρηθεί πως υπάρχει ικανοποιητική σύγκλιση των προσεγγίσεων για τους ίδιους αδιάστατους χρόνους. Στην περίπτωση της προσέγγισης για 95% είναι εμφανές πως η διαφοροποίηση των αποτελεσμάτων είναι αμελητέα. Στην περίπτωση της δεύτερης προσέγγισης για 97% αν και είναι πιο αξιοπρόσεκτη η διαφορά των αποτελεσμάτων, δεν

ξεπερνά το 3% ( $\frac{2,99-2,9}{2,99} * 100\% = 3,01\%$  η διαφορά μεταξύ των προσεγγίσεων). Μπορεί ακόμα να παρατηρηθεί πως μεταβολή των παραμέτρων επιδρά με διπλασιασμό της τυπικής απόκλισης της καμπύλης που έχει την μορφή κανονικής κατανομής. Αυτό είναι αναμενόμενο δεδομένης της εξίσωσης (5.03) που δείχνει πως επηρεάζει η αλλαγή του συντελεστή διασποράς  $K$  την μορφή της καμπύλης, καθώς στην κανονική κατανομή η τυπική απόκλιση σχετίζεται με το πλάτος της κατανομής.

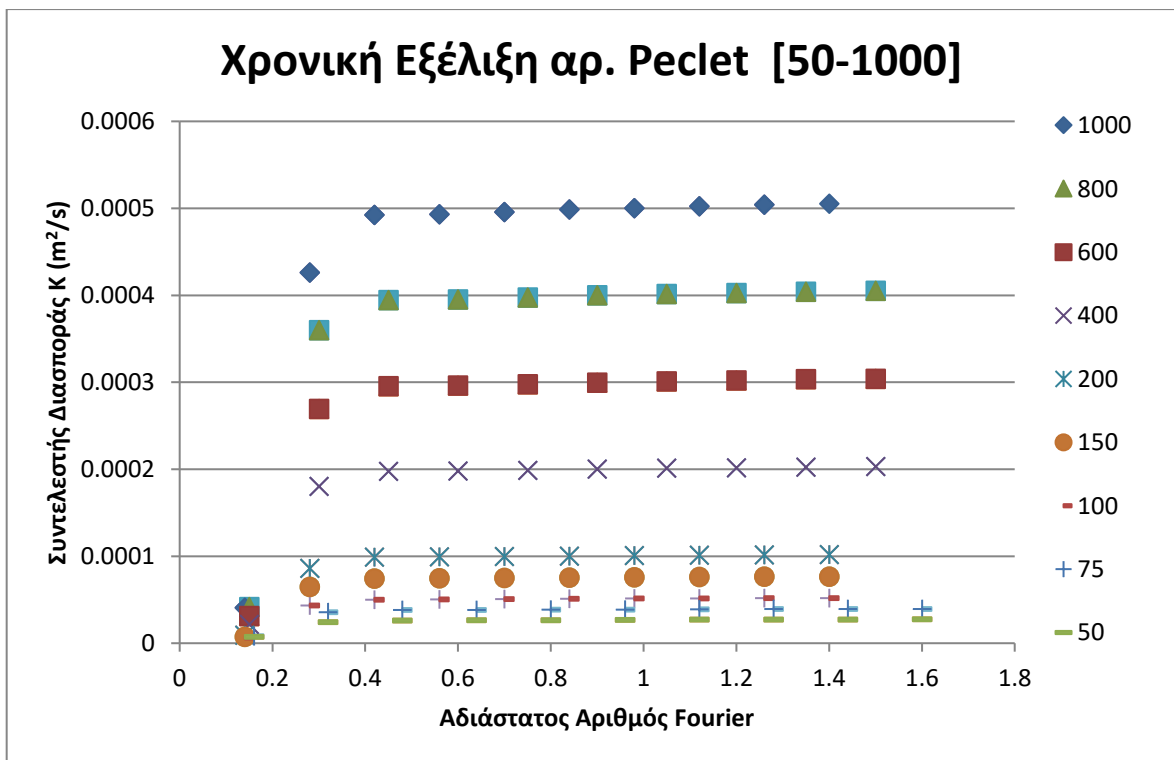
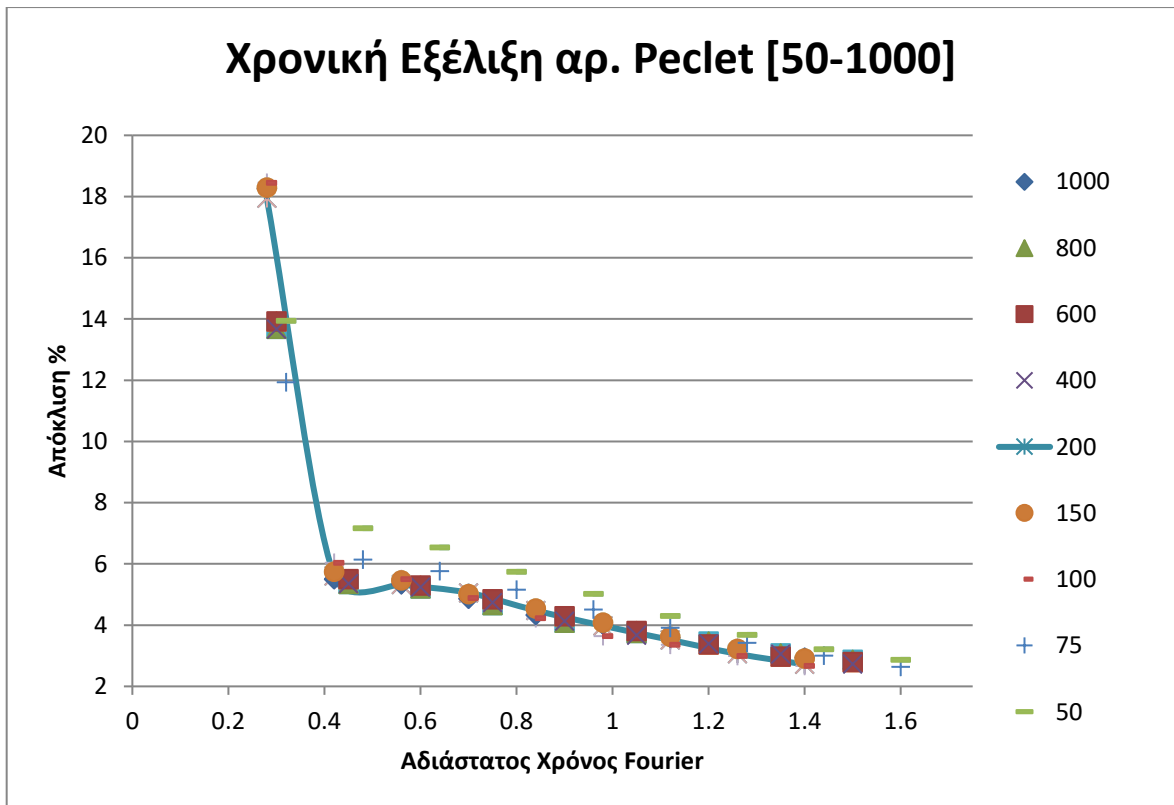
### 5.5.2 Χρονική εξέλιξη

Μετά την χαρτογράφηση της περιοχής, που διαμορφώνεται η διασπορά, έχει σημασία να δοθεί προσοχή και στην χρονική εξέλιξη της διαμόρφωσης του συντελεστή διασποράς  $K$  για μικρότερους χρόνους. Λαμβάνοντας 10 σημεία από την χρονική στιγμή που εισάγεται ο παλμός και ξεκινά η μελέτη του φαινομένου μέχρι χρόνους που ξεπερνούν οριακά την απόκλιση της τάξης του 3% μπορεί να μελετηθεί αυτή η χρονική εξέλιξη. Η παραπάνω διαδικασία πραγματοποιείται για κάθε υπολογιστικό πείραμα που χρησιμοποιήθηκε στην χαρτογράφηση της περιοχής Taylor-Aris.

Η χρονική εξέλιξη του συντελεστή μπορεί να δείξει πότε ο συντελεστής  $K$  αποκτά αξιοπιστία σαν εργαλείο μελέτης της διασποράς. Τέλος, μπορεί να δείξει αν διακρίνεται κάποια γενική τάση στην χρονική ανάπτυξη του φαινομένου.

Για την καλύτερη παρουσίαση των αποτελεσμάτων τα υπολογιστικά πειράματα δεν θα παρουσιαστούν σε ένα συγκεντρωτικό διάγραμμα καθώς οι διαφορές στους αδιάστατους χρόνους καθιστούν ένα τέτοιο διάγραμμα δυσανάγνωστο. Ομαδοποιήθηκαν για την καλύτερη παρουσίαση.

Αρχικά παρουσιάζονται τα διαγράμματα χρονικής εξέλιξης των υπολογιστικών πειραμάτων με μεγαλύτερο αριθμό Peclet [50-1000].



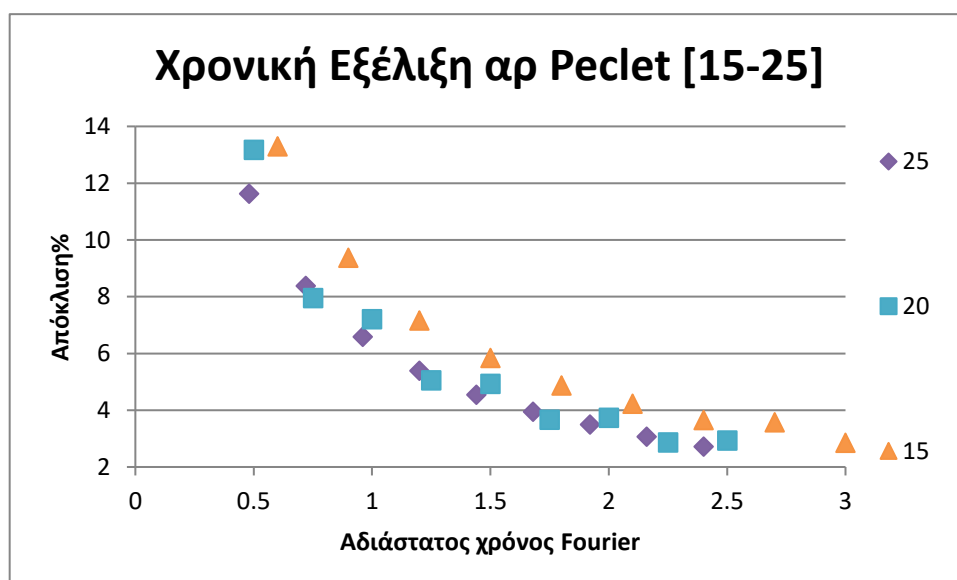
Σχήμα 5.12 Γραφική αναπαράσταση της χρονικής εξέλιξης της απόκλισης και του υπολογισμού του συντελεστή διασποράς  $K$  για αριθμούς Peclet [50, 1000]

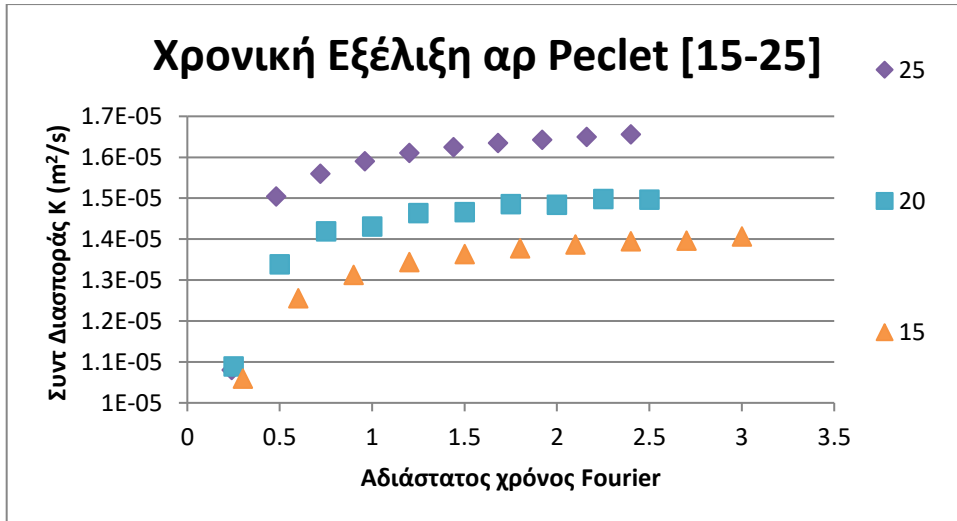


Παρατηρείται πως εμφανίζεται σχετική ομοιότητα στην εξέλιξη του συντελεστή  $K$ . Αυτό γίνεται περισσότερο σαφές παρατηρώντας το διάγραμμα που εμφανίζει το ποσοστό απόκλισης μεταξύ της θεωρητικής και υπολογιστικής τιμής του συντελεστή διασποράς (σχήμα 5.11). Αυτό είναι αναμενόμενο καθώς ήδη από την χαρτογράφηση της περιοχής Taylor-Aris οι προσεγγίσεις αυτών των τιμών γίνονται σε παρεμφερή χρόνο. Μπορεί να παρατηρηθεί ακόμα πως για χρόνους μέχρι και  $0,45 Fo$  η προσέγγιση του συντελεστή  $K$  είναι ανακριβής και πέφτει απότομα με το πέρασμα του χρόνου οδηγώντας σε μια πιο ομαλή μετάβαση του στην θεωρητικά υπολογισμένη τιμή. Η τιμή  $0,45 Fo$  φαίνεται να συμπίπτει με την χρονική στιγμή που η κατανομή της συγκέντρωσης αρχίζει και διαμορφώνεται σε κανονική κατανομή. Η αρχική κεφαλή της κατανομής συγκέντρωσης του παλμού γύρω από τον άξονα συμμετρίας που για μικρούς χρόνους κινούταν με την μέγιστη ταχύτητα λόγω της διασποράς εξαφανίζεται (σχήμα 5.5). Μετά από αυτό το σημείο η κατανομή της συγκέντρωσης αναπτύσσεται αξονικά. Με εξαίρεση την χρονική εξέλιξη της ροής με  $Re=50$  για τις τιμές  $Re \geq 75$  η περιοχή στην οποία το φαινόμενο της διασποράς παρατηρείται με ικανοποιητική αξιοπιστία (της τάξης του 5% απόκλιση) είναι για χρόνους  $Fo \geq 0.8$ . Προφανώς με γνώση του πίνακα μπορεί να γίνει αντίστοιχη παρατήρηση για αυστηρότερες προσεγγίσεις. Για παράδειγμα για αξιοπιστία της τάξης του 3% απόκλιση παρατηρείται η ίδια συμπεριφορά για τους  $Re \geq 75$  για χρόνους  $Fo \geq 1.4$  προσεγγιστικά. Για μικρότερους αριθμούς Peclet δεν μπορεί να προκύψει ένας γενικός κανόνας για την σχέση απόκλισης και αδιάστατου χρόνου.

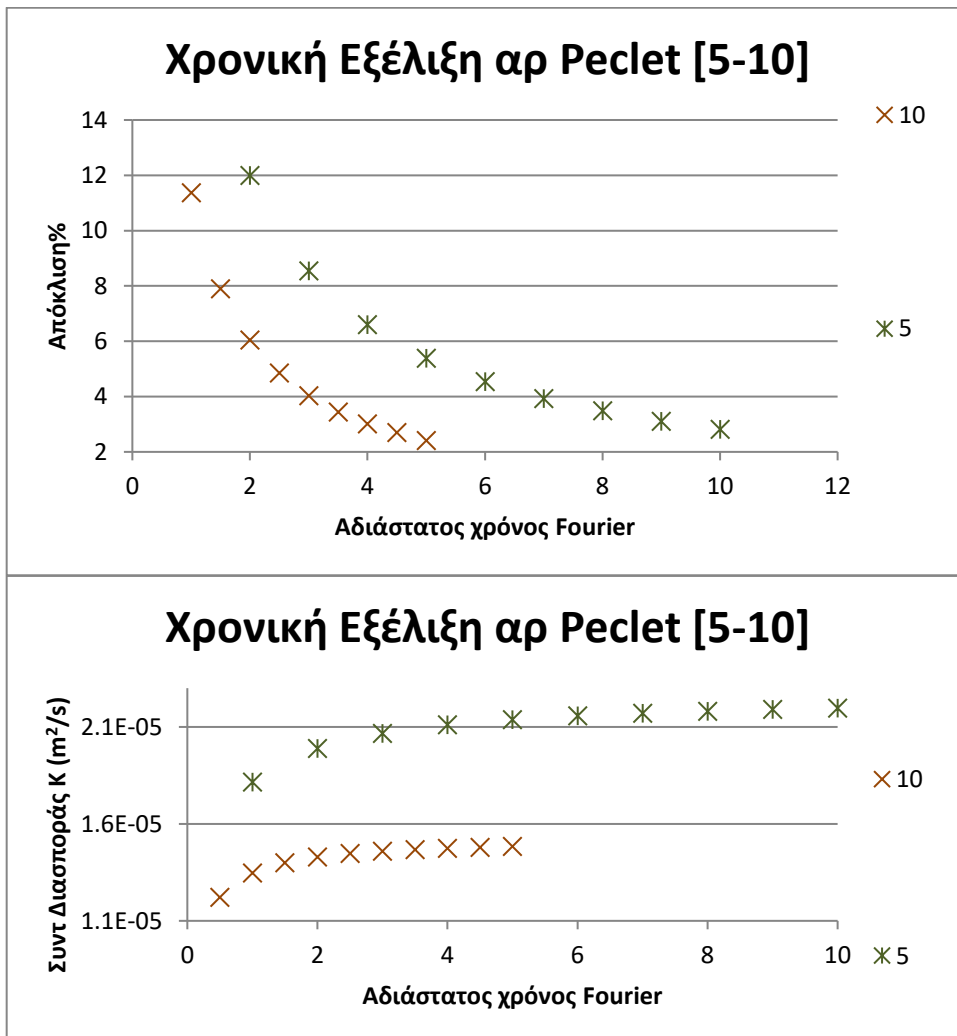
Με αυτό τον τρόπο, όπως θα φανεί και παρακάτω, μπορεί να γίνει προσέγγιση του μήκους στο οποίο πλέον το φαινόμενο της διασποράς και η ροή του μίγματος των ρευστών εξηγείται ικανοποιητικά από τον συντελεστή  $K$  καθώς και η εξακρίβωση του μεγέθους του παλμού μόνο με την γνώση των αρχικών παραμέτρων.

Στην συνέχεια παρουσιάζονται τα διαγράμματα για τις υπόλοιπες τιμές Peclet:





Σχήμα 5.13 Γραφική αναπαράσταση της χρονικής εξέλιξης της απόκλισης και του υπολογισμού του συντελεστή διασποράς  $K$  για αριθμούς Peclet [15, 25]



Σχήμα 5.14 Γραφική αναπαράσταση της χρονικής εξέλιξης της απόκλισης και του υπολογισμού του συντελεστή διασποράς  $K$  για αριθμούς Peclet 5 και 10

Αυτές οι τιμές συμπίπτουν με την απότομη καμπύλη στην χαρτογράφηση του σχήματος 5.4, που εμφανίζεται για μικρούς αριθμούς Peclet. Όσο ο αριθμός Peclet μικραίνει υπάρχει μεγαλύτερη χρονική απόκλιση στον τρόπο με τον οποίο προσεγγίζεται η περιοχή στην οποία ο συντελεστής  $K$  εξηγεί ικανοποιητικά το φαινόμενο. Αν και η χρονική εξέλιξη ακολουθεί αντίστοιχη πορεία με την περίπτωση των μεγαλύτερων αριθμών Peclet (μια αρχική περιοχή απότομων αλλαγών που ακολουθείται από μια πιο ομαλή προσέγγιση της θεωρητικής τιμής) φαίνεται πως όσο μικραίνει ο αριθμός Peclet είναι αρκετά πιο ομαλή και μακροχρόνια η μετάβαση στην θεωρητικά υπολογισμένη τιμή του συντελεστή διασποράς. Παράλληλα, δεν υπάρχει χρονική σύγκλιση για τους διαφορετικούς αριθμούς Peclet σχετικά με τον αδιάστατο χρόνο που εμφανίζεται η αντίστοιχη προσέγγιση (πχ της τάξης του 5% απόκλιση). Η πιο ‘‘απρόβλεπτη’’ συμπεριφορά αυτών των αριθμών Peclet δεν μπορεί να οδηγήσει σε κάποια ομαδοποίηση των αποτελεσμάτων ως προς την συμπεριφορά τους.

Αν συσχετίσουμε τώρα τον αριθμό Peclet με τον αριθμό Fourier μπορούμε να καταλήξουμε σε μια γενική σχέση για τους μεγάλους αριθμούς Peclet ( $Pe \geq 75$ ) σε σχέση με την εμφάνιση του φαινομένου εντός του αγωγού. Πιο συγκεκριμένα, μπορεί να γίνει αντιληπτό μέσα από τους μαθηματικούς τύπους του αριθμού Peclet και Fourier:

$$Pe_d = \frac{d \langle u \rangle}{D_{ab}} \text{ και } Fo = \frac{D_{ab} t}{R^2} = \frac{4D_{ab} t}{d^2} \Rightarrow$$

$$Pe_d = \frac{4d \langle u \rangle t}{Fo d^2} \Rightarrow \langle u \rangle t = L = \frac{Pe_d Fo d}{4} \quad (5.07)$$

Η σχέση (5.07) δείχνει ουσιαστικά την μεταφορά της κορυφής στην κατανομή συγκεντρώσεων με την μέση ταχύτητα άρα θεωρώντας  $L = \langle u \rangle t = \frac{Pe_d Fo d}{4}$ .

Παρατηρώντας την χρονική εξέλιξη της προσέγγισης θεωρητικής και υπολογιστικής τιμής του συντελεστή διασποράς  $K$  προκύπτει πως για χρόνους μετά την τιμή  $0.8 Fo$  αρχίζει να υπάρχει αξιόπιστη προσέγγιση της θεωρητικής και υπολογιστικής τιμής του συντελεστή. Μπορεί να θεωρηθεί ότι από εκείνη την απόσταση εντός αγωγού και έπειτα οι παραδοχές που έχουν γίνει για την μελέτη του φαινομένου μπορούν να θεωρηθούν ασφαλείς. Με βάση αυτό προκύπτει πως το φαινόμενο της διασποράς ερμηνεύεται από τον συντελεστή  $K$ , σύμφωνα με τους κανόνες που έχουν αναφερθεί στο κεφ 3, αφού ο αρχικός παλμός έχει διασχίσει απόσταση εντός του αγωγού που αντιστοιχεί σε  $Fo > 0.8$  ή  $Fo > 1.4$  (για προσέγγιση της τάξης 97%) αντίστοιχα:

$$L > 0.2 Pe_d d \text{ και } L > 0.35 Pe_d d \quad (5.08)$$

Παράλληλα, δεδομένου πως η κατανομή συγκεντρώσεων του αρχικού παλμού έχει σχήμα κανονικής κατανομής. Το πλάτος του μπορεί να περιγραφεί ικανοποιητικά από την τυπική απόκλιση. Στην κανονική κατανομή σε πλάτος εξαπλάσιο της τιμής της τυπικής απόκλισης καλύπτεται το 99.7% των παρατηρούμενων αποτελεσμάτων άρα στην περίπτωση της διασποράς αυτό θα ισχύει για την κατανομή συγκεντρώσεων. Με αυτή την έννοια:

$$L_{\pi\lambda} = 6\sigma = 6\sqrt{2Kt} \quad (5.09)$$

Αντικαθιστώντας το χρόνο με τον αδιάστατο σύμφωνα με την σχέση (3.38) και τον συντελεστή K σύμφωνα με την (3.37):

$$L_{\pi\lambda} = 6 \sqrt{2K \frac{d^2}{4D_{ab}} Fo} = 6d \sqrt{\frac{KFo}{2D_{ab}}} \Rightarrow \frac{L_{\pi\lambda}}{d} = 4.24 \sqrt{\left(1 + \frac{Pe_d^2}{192}\right) Fo} \quad (5.10)$$

Με αυτό τον τρόπο γνωρίζοντας τις αρχικές παραμέτρους και την χαρτογράφηση της ροής μπορεί να προσεγγιστεί το μέγεθος και η τοποθεσία του παλμού εντός του αγωγού. Άρα να γίνει προσεγγιστικά πρόβλεψη χωρίς να γίνει η προσομοίωση για την απόσταση που ταξιδεύει η μέγιστη τιμή της κατανομής συγκέντρωσης του ρευστού A και πόσο είναι το πλάτος εντός του αγωγού που εντοπίζεται συγκέντρωση του A. Η εξίσωση (5.10) μπορεί να φανεί χρήσιμη σε συνδυασμό με την χαρτογράφηση του σχήματος 5.11.

## Κεφάλαιο 6: Συμπεράσματα

Συνοψίζονται συμπεράσματα από την μελέτη και τα αποτελέσματα της παρούσας εργασίας και θα γίνουν προτάσεις για περαιτέρω μελέτη και επέκταση του αντικειμένου.

Η υπολογιστική μελέτη του φαινομένου της διασποράς οδήγησε στον υπολογισμό του συντελεστή διασποράς  $K$ . Με βάση αυτό προκύπτει η προσέγγιση της χρονικής εξέλιξης του φαινομένου. Αρχικά, διαπιστώνεται η επάρκεια του  $K$  για την ικανοποιητική πρόβλεψη της χωρο-χρονικής εξέλιξης της διασποράς. Σε μικρούς χρόνους εμφανίζεται απόκλιση (μεγαλύτερη του 10%) θεωρητικής και υπολογιστικής τιμής καθώς δεν έχει δημιουργηθεί ακόμα η κανονική κατανομή για την συγκέντρωση αλλά επικρατεί μια μεταβατική κατάσταση. Με την χαρτογράφηση του φαινομένου συναρτήσει των χαρακτηριστικών της ροής όπως περιγράφονται από τον αριθμό Peclet και τον αδιάστατο χρόνο προκύπτει ο βαθμός προσέγγισης τους, όπως περιγράφεται από τις προσεγγίσεις της τάξης του 95% και 97%, σε σχέση με την θεωρητικά υπολογισμένη τιμή.

Η χρονική εξέλιξη του συντελεστή της διασποράς Taylor-Apis και η ομαδοποίηση συμβάλει στην περαιτέρω κατανόηση του φαινομένου. Διαπιστώνεται πως για ροές με αριθμό  $Pe > 75$  η χρονική εξέλιξη της προσέγγισης του υπολογιστικού συντελεστή διασποράς  $K$  με την θεωρητική τιμή που αναμένεται εμφανίζει σύγκλιση, οδηγώντας σε κάποιες γενικές παρατηρήσεις για αυτή την περιοχή αριθμών Peclet. Η απόκλιση υπολογιστικής και θεωρητικής τιμής του συντελεστή διασποράς πραγματοποιεί μια απότομη πτώση για μικρούς χρόνους μέχρι ένα σημείο στο οποίο μπορεί να θεωρηθεί πως η κατανομή συγκέντρωσης του αρχικού παλμού, πλέον, αρχίζει να λαμβάνει την μορφή της κανονικής κατανομής. Το σημείο αυτό μπορεί να προσδιοριστεί προσεγγιστικά σε χρόνους που ισχύει  $Fo > 0.45$ . Για την προσέγγιση υπολογιστικών τιμών που δεν εμφανίζουν πλέον σημαντική απόκλιση από την θεωρητική φαίνεται πως μπορεί να γίνει με ασφάλεια για αδιάστατους χρόνους  $Fo > 0.8$  ή  $Fo > 1.4$  για μεγαλύτερη ακρίβεια. Δεν κατέστη δυνατό να εντοπιστεί κάποιος κανόνας με τον οποίο για τους μικρότερους αριθμούς Peclet αλλάζει το χρονικό όριο εμφάνισης της κανονικής κατανομής. Επιπλέον, η αρχική μετάβαση σε ικανοποιητική προσέγγιση του συντελεστή  $K$  για αυτούς τους αριθμούς Peclet είναι εξ αρχής εμφανώς ομαλότερη. Όσο ενισχύεται δηλαδή η διάχυση σε σχέση με την συναγωγή δεν εμφανίζεται κάποια απότομη μετάβαση στην κανονική κατανομή συγκέντρωσης.

Οι παραπάνω παρατηρήσεις οφείλονται στην σχέση μεταξύ των δυο φαινομένων μεταφοράς μάζας που λαμβάνουν χώρα στο μίγμα ρευστών, της μοριακής διάχυσης και της συναγωγής. Για τους μεγάλους αριθμούς Peclet ο χαμηλός ρυθμός διάχυσης σε σχέση με αυτόν της συναγωγής ωθεί την κατανομή συγκέντρωσης του παλμού να αποκτήσει σε μικρούς χρόνους

μια “ουρά” μεγάλου μήκους και παραβολοειδούς σχήματος (όπως φαίνεται και στο σχήμα 5.5). Όταν αυτή η “ουρά” απλώνεται ακτινικά για χρόνους μετά το χρονικό όριο  $Fo > 0.45$  δημιουργεί απότομα τη κανονική κατανομή συγκεντρώσεων. Αντίθετα, σε μικρότερους αριθμούς Peclet η ταχύτητα διάχυσης είναι συγκρίσιμη με της συναγωγής. Κατ’ επέκταση το φαινόμενο που παρατηρήθηκε προηγουμένως αμβλύνεται. Η “ουρά” που δημιουργείται είναι μικρότερη συγκριτικά με την κεφαλή του παλμού και τα διαχυτικά φαινόμενα λαμβάνουν χώρα πιο γρήγορα συγκριτικά με τους μεγάλους αριθμούς Peclet και την μέση ταχύτητα της ροής. Κατά συνέπεια, η διασπορά του παλμού γίνεται πιο σταδιακά και η περιοχή που ο συντελεστής διασποράς  $K$  ερμηνεύει ικανοποιητικά το φαινόμενο της διασποράς εμφανίζεται σε μεγαλύτερους (αδιάστατους) χρόνους.

Για αποκλίσεις μεταξύ θεωρητικής και υπολογιστικής τιμής του συντελεστή  $K$  μικρότερες του 5% μπορεί να θεωρηθεί πως το φαινόμενο περιγράφεται ικανοποιητικά από την εξίσωση (3.35) και πως οι παραδοχές που έχουν γίνει στο Κεφάλαιο 3 ισχύουν. Με την ίδια λογική στις παρατηρήσεις που έγιναν πριν μπορεί να προβλεφθεί μετά από ποιο χρονικό διάστημα η ροή εισέρχεται στην περιοχή Taylor-Aris και μετά από ποιο μήκος του αγωγού συμβαίνει αυτό σύμφωνα με τις εξισώσεις (5.07), (5.09) και (5.10).

Ένα ζήτημα το οποίο αξίζει προσοχής είναι η θέση του παλμού. Παρατηρήθηκε πως το σημείο στο οποίο βρίσκεται η κορυφή της καμπύλης στην κατανομή της συγκέντρωσης ταξιδεύει με την μέση ταχύτητα της ροής αλλά εμφανίζει μια μικρή απόκλιση στην περίπτωση του υπολογιστικού πειράματος που πραγματοποιήθηκε στην παρούσα εργασία (που διαφοροποιείται εξαρτώμενο από τον αριθμό Peclet). Αυτή η απόκλιση μένει σταθερή στον χρόνο για τον ίδιο αριθμό Peclet και για χρόνους  $Fo > 0.45$ . Κατ’ επέκταση δεν επηρεάζει σημαντικά την πρόβλεψη της θέσης του παλμού όσο μεγαλώνει ο χρόνος παρατήρησης. Παρ’ όλα αυτά, για μικρότερους χρόνους διαπιστώνεται απόκλιση. Αποδίδεται στην αρχική διαμόρφωση του παλμού κατά την είσοδο του στην ροή. Επηρεάζεται επίσης από την ακτίνα. Στο σημείο που η ταχύτητα ισούται με την μέση ταχύτητα η απόκλιση μηδενίζεται και αυξάνεται στον άξονα συμμετρίας (θετική μετατόπιση) και στα τοιχώματα (αρνητική μετατόπιση). Κάτι τέτοιο δεν μπορεί να προβλεφθεί θεωρητικά καθώς χρησιμοποιούνται προσεγγιστικά μέσα μεγέθη (η μέση συγκέντρωση, η μέση ταχύτητα). Σε ένα πραγματικό σύστημα όμως υπάρχουν αποκλίσεις από τα μέσα μεγέθη. Δεν κατέστη δυνατό, όμως, να μελετηθεί περαιτέρω η προέλευση της απόκλισης αν και θα βοηθούσε στην εξακρίβωση της συμπεριφοράς του παλμού και για μικρούς χρόνους που η κατανομή της συγκέντρωσης δεν έχει πάρει ακόμα τα χαρακτηριστικά που περιγράφονται από τις εξισώσεις των Taylor-Aris καθώς και για μικρούς χρόνους που οι αποκλίσεις αυτές είναι αξιοσημείωτες συγκριτικά με την απόσταση που διασχίζει ο παλμός.

Τελικά, η χαρτογράφηση της χρονικής εξέλιξης του φαινομένου της διασποράς και του συντελεστή Taylor-Aris καταλήγει στην δυνατότητα πρόβλεψης της θέσης και του μεγέθους του παλμού συναρτήσει του χρόνου μετά το όριο του  $Fo > 0.8$  γνωρίζοντας μόνο τα βασικά χαρακτηριστικά της ροής. Για ένα δεδομένο σύστημα, πχ το καρδιαγγειακό σύστημα, τα μεγέθη έχουν ένα δεδομένο εύρος οπότε και για διαφορετικές αναλογίες της συναγωγής και διάχυσης μπορεί να υπάρχει εκ των προτέρων χαρτογράφηση της περιοχής που καταλαμβάνει μια διαλυμένη ουσία που έχει εισαχθεί στο σύστημα.

## Παράρτημα: Σύμβολα

A μονόμετρο μέγεθος

A διανυσματικό μέγεθος

<A> μέση τιμή μεγέθους

A<sub>i</sub> δείκτης μεγέθους

c μολαρική συγκέντρωση,  $\frac{mol}{m^3}$

D<sub>ab</sub> συντελεστής διάχυσης,  $\frac{m^2}{s}$

Fo =  $\frac{D_{ab}t}{R^2}$  αριθμός Fourier

J ροή,  $\frac{mol}{m^2s}$

K συντελεστής διασποράς  $\frac{m^2}{s}$

n μολαρική μάζα, mol

p πίεση, Pa

Pe<sub>d</sub> =  $\frac{d u}{D_{ab}}$  αριθμός Peclet

Q ογκομετρική ροή,  $\frac{m^3}{s}$

R ακτίνα, m

t χρόνος, s

w μαζική (μολαρική) ροή,  $\frac{kg}{s}$  ή  $(\frac{mol}{s})$

u ταχύτητα ρευστού,  $\frac{m}{s}$

x<sub>i</sub>=c<sub>i</sub>/c σχετική πυκνότητα

z μήκος, m

$\bar{z}$ =z-<u<sub>z</sub>>t μεταβλητό μήκος, m

μ δυναμικό ιξώδες, Pa· s

ν κινηματικό ιξώδες,  $\frac{m^2}{s}$

ξ=r/R αδιάστατη ακτίνα



- $\rho$  πυκνότητα ρευστού,  $\frac{kg}{m^3}$
- $\sigma$  τυπική απόκλιση
- $\tau$  ιξώδης διατμητική τάση, Pa

## **Βιβλιογραφία**

- Ananthakrishnan, V., Gill, W. N., & Barduhn, A. J. Laminar dispersion in capillaries. *A.I.Ch. E. Journal*. 11(6), 1063–1072, **1965**.
- Aris, R.. On the dispersion of a solute in a fluid flowing through a tube. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*. 235(1200), 67–77, **1956**.
- Atkins, P., De Paula, J. *Φυσικοχημεία*. Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης. **2014**.
- Berg, H. C. *Random Walks in Biology*. Princeton University Press. **1983** .
- Berghout, S.. *The Einstein Smoluchowski Equation in the One Dimensional Exclusion Process*. Utrecht University. Master Thesis. **2013** .
- Bird, R. B., Stewart, W. E. & Lightfoot, E. N. *Transport Phenomena, Second Edition*. John Wiley & Sons, Inc. **2002**.
- Biron, J. P., Bonfils, F., Cipelletti, L., & Cottet, H.. Size-characterization of natural and synthetic polyisoprenes by Taylor dispersion analysis. *Polymer Testing*. 66(January), 244–250, **2018**.
- Chatwin, P. Mathematical Models of Dispersion in Rivers and Estuaries. *Annual Review of Fluid Mechanics*. 17(1), 119–149, **1985**.
- Comsol Multiphysics 5.2 Reference Manual
- Deen, W. M.. *Analysis of Transport Phenomena*. Oxford University Press. **1998**.
- Gakis, G. P. *Multi-scale modeling and experimental analysis of ALD alumina: Interplay of process dynamics, chemistry and interfacial phenomena*. NTUA / University of Toulouse. PhD Thesis. **2020**.
- Goodsell, D. S.. Escherichia coli. *Biochemistry and Molecular Biology Education*. 37(6), 325–332, **2009**.
- Hirshfeld, J. W., & Nathan, A. S. . Deriving Function From Structure: Applying Hagen-Poiseuille to Coronary Arteries. *JACC: Cardiovascular Interventions*. 13(4), 498–501, **2020**.
- Høgstedt, U. B., Schwach, G., van de Weert, M., & Østergaard, J. Taylor Dispersion Analysis as a promising tool for assessment of peptide-peptide interactions. *European Journal of Pharmaceutical Sciences*. 93, 21–28, **2016**.
- Nunge, R. J., Gill, W. N. Mechanisms Affecting Dispersion and Miscible Displacement. *Industrial & Engineering Chemistry*. 61, 33–49, **1969**.
- Patrachari, A. R. *Deterministic Models to Explain the Phenomenon of Interfacial Mixing in Refined Products Pipelines*. Oklahoma State University. PhD Thesis. **2012**.
- Průša, V. On the influence of boundary condition on stability of Hagen-Poiseuille flow. *Computers and Mathematics with Applications*. 57(5), 763–771, **2008**.

- Taylor, G. Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences.* 219(1137), 186–203, **1953**.
- Taylor, G. The dispersion of matter in turbulent flow through a pipe. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences.* 223(1155), 446–468, **1954**.
- Taylor, G. I. Diffusion and mass transport in tubes. *Proceedings of the Physical Society. Section B,* 67(12), 857–869, **1954**.
- Wang, P., Li, Z., Huai, W. X., Chen, B., Li, J. S., Hayat, T., Alsaedi, A., & Chen, G. Q. Indicators for environmental dispersion in a three-layer wetland: Extension of Taylor’s classical analysis. *Ecological Indicators.* 47, 254–269, **2014**.
- Zhao, H., Bau, H. H. Effect of secondary flows in Taylor-Aris dispersion. *Analytical Chemistry.* 79, 7792-7798, **2007**.
- Ασημακόπουλος, Δ. Κ., Λυγερού, Β. Ι., Αραμπατζής Γ. Α.. *Μεταφορά Θερμότητας και Μάζας.* Παπασωτηρίου Εκδόσεις. **2012**.
- Παπαδημητρίου, Δ. Π.. *Υπολογιστική μελέτη της επίδρασης μικροετερογένειας στις μακροσκοπικές ιδιότητες μεταφοράς σε κλίνες μικροσφαιριδίων.* Thesis. NTUA. **2019**.
- Παπαϊωάννου, Α. Θ. ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΤΩΝ ΡΕΥΣΤΩΝ, ΤΟΜΟΣ Ι, Β' ΕΚΔΟΣΗ. ΕΚΔΟΣΕΙΣ ΚΟΡΑΛΙ. **2013**.
- Σέμπου, Α. . *Προτυποποίηση και υπολογιστική προσομοίωση φαινομένων διάχυσης στη ξήρανση φρούτων.* Thesis. NTUA. **2014**.