

ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΣ ΚΑΝΟΥΤΟΣ

ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΕΜΠ



Μοντελοποίηση Μεταφοράς
και Δυναμικής Μη-Σφαιρικών,
τύπου Fractals Νανοσωματιδίων

Τομέας Πυρηνικής Τεχνολογίας

Επιβλέπων: Δημήτρης Μητράκος, Επίκουρος Καθηγητής

Αθήνα, Σεπτέμβριος 2021



NATIONAL TECHNICAL UNIVERSITY OF ATHENS
SCHOOL OF MECHANICAL ENGINEERING

KONSTANTINOS KANOUTOS

Diploma Thesis:

**Modeling of Non-Spherical Fractal-like
Nanoparticles Transport and Dynamics**

Section: Nuclear Engineering

Supervisor: Dimitris Mitrakos, Assistant Professor

Athens, September 2021

Ιδιαίτερες ευχαριστίες

*Στον Επίκουρο Καθηγητή του ΕΜΠ Δημήτρη Μητράκο
για την προσεκτική του καθοδήγηση και την ώθηση που μου έδωσε
καθώς με θέρμη και ενθουσιασμό με εισήγαγε στην επιστήμη του Αερολύματος*

*Στους Δρ. Ιωάννη Δροσινό και Δρ. Αναστάσιο Μελά
για την πολύτιμη συνεργασία μας*

*Στην οικογένειά μου και τους οικείους μου ανθρώπους
που με στήριξαν ανελλιπώς*

Υπεύθυνη δήλωση για λογοκλοπή και για κλοπή πνευματικής ιδιοκτησίας:

Έχω διαβάσει και κατανοήσει τους κανόνες για τη λογοκλοπή και τον τρόπο σωστής αναφοράς των πηγών που περιέχονται στον οδηγό συγγραφής Διπλωματικών Εργασιών. Δηλώνω ότι, από όσα γνωρίζω, το περιεχόμενο της παρούσας Διπλωματικής Εργασίας είναι προϊόν δικής μου εργασίας και υπάρχουν αναφορές σε όλες τις πηγές που χρησιμοποίησα.

Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σε αυτή τη Διπλωματική εργασία είναι του συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευθεί ότι αντιπροσωπεύουν τις επίσημες θέσεις της Σχολής Μηχανολόγων Μηχανικών ή του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

Κωνσταντίνος Κανούτος

Περιεχόμενα

Σύνοψη	8
Περίληψη	8
Abstract.....	9
Συνοπόμευσεις - Αρτικόλεξα	10
Κατάλογος Συμβόλων	11
1. Εισαγωγή	14
1.1 Πλαίσιο	14
1.2 Σκοπός, ερωτήματα και στόχοι	15
1.3 Διάρθρωση της εργασίας	16
2. Βιβλιογραφική ανασκόπηση	17
3. Βασική θεωρία και μοντελοποίηση δυναμικής αερολύματος	20
3.1 Χαρακτηριστικά του αερολύματος.....	20
3.2 Συνάρτηση κατανομής μεγέθους σωματιδίων	22
3.3 Φυσική Αερολύματος.....	24
3.3.1 Εσωτερικές διαδικασίες: Συσσωμάτωση – Συνάθροιση.....	25
3.3.2 Εξωτερικές διαδικασίες: Διάχυση – Εναπόθεση.....	30
3.4 Η Γενική Εξίσωση της Δυναμικής του Αερολύματος (ΓΕΔΑ)	33
3.4.1 Συσσωμάτωση	33
3.4.2 Συνολική μεταβολή λόγω εσωτερικών διαδικασιών	34
3.4.3 Μεταφορά – Διάχυση.....	34
3.4.4 Γενική Εξίσωση της Δυναμικής του Αερολύματος	35
3.5 Αριθμητικές μέθοδοι	35
3.5.1 Αριθμητική περιγραφή συνάρτησης κατανομής μεγέθους.....	36
3.5.2 Αριθμητική επίλυση ροής αερολύματος.....	37
4. Προτεινόμενο μοντέλο	39
4.1 Μέθοδοι επίλυσης εσωτερικών διαδικασιών.....	39
4.1.1 Διακριτοποίηση μεγέθους σωματιδίων	39
4.1.2 Συσσωμάτωση – Συνάθροιση.....	40
4.2 Μέθοδοι επίλυσης εξωτερικών διαδικασιών	46
4.2.1 Brownian Διάχυση	46
4.2.2 Τυρβώδης διάχυση.....	46
4.2.3 Τυρβώδης πρόσκρουση.....	47
4.2.4 Θερμοφοριστική εναπόθεση.....	47
4.2.5 Ολική ταχύτητα εναπόθεσης.....	48
4.3 Μεθοδολογία επίλυσης ΓΕΔΑ	48
4.3.1 Υπολογισμός πεδίου θερμοκρασίας – Μονοδιάστατη επίλυση.....	49
4.3.2 Υπολογισμοί δυναμικής αερολύματος – Μονοδιάστατη επίλυση	49
4.4 Έλεγχος, επαλήθευση και αξιολόγηση του μοντέλου	50
4.4.1 Σύγκριση με αναλυτικές λύσεις.....	51

4.4.2	Υπολογιστική προσομοίωση μεταφοράς και δυναμικής νανοσωματιδίων από εκπομπές πετρελαιοκίνητου οχήματος (πρότυπα Euro 3)	53
5.	Εφαρμογή - Αποτελέσματα	63
5.1	Υπολογιστική προσομοίωση μεταφοράς και δυναμικής νανοσωματιδίων από εκπομπές οχήματος προς υποστήριξη – ερμηνεία μετρήσεων για τον νέο Ευρωπαϊκό Κανονισμό (Μείωση της ρύπανσης από ελαφρά μηχανοκίνητα οχήματα – Euro 7).....	63
5.1.1	1 ^η σειρά μετρήσεων	65
5.1.2	2 ^η σειρά μετρήσεων	69
5.1.3	Υπόλοιπες σειρές μετρήσεων.....	73
6.	Συμπεράσματα	76
	Κατάλογος Σχημάτων	79
	Κατάλογος Πινάκων	82
	Κατάλογος Αναφορών.....	83
	Παράρτημα.....	88
	Παράρτημα I: Υπολογιστικός κώδικας σε MATLAB για την προσομοίωση πειράματος μεταφοράς και δυναμικής νανοσωματιδίων περιεχόμενων στις εκπομπές ελαφρού πετρελαιοκίνητου (diesel) οχήματος σύμφωνα με τα πρότυπα του Ευρωπαϊκού Κανονισμού (Euro 3)	88
	Παράρτημα II: Υπολογιστικός κώδικας σύγκρισης της αριθμητικής επίλυσης της διαδικασίας συσσωμάτωσης με αναλυτικές λύσεις.....	95
	Παράρτημα III: Υπολογιστικός κώδικας σε MATLAB για την προσομοίωση πειράματος μεταφοράς και δυναμικής νανοσωματιδίων προς υποστήριξη – ερμηνεία μετρήσεων από εκπομπές οχήματος στα πλαίσια αναθεώρησης προτύπων με το νέο Ευρωπαϊκό Κανονισμό (Euro 7).....	98

Σύνοψη

Περίληψη

Στην παρούσα εργασία εξετάζονται η μεταφορά και η δυναμική νανοσωματιδίων σε αερολύματα, υπό τη θεώρηση μη-σφαιρικών, τύπου fractals σωματιδίων. Το μοντέλο που αναπτύχθηκε, χρησιμοποιήθηκε για την ανάλυση και την επεξεργασία μετρήσεων, στα πλαίσια της αναθεώρησης του Ευρωπαϊκού Κανονισμού για τις εκπομπές οχημάτων (Euro 7), σε συνεργασία με το Ευρωπαϊκό Κοινό Κέντρο Ερευνών (JRC) στην Ίσπρα της Ιταλίας.

Το μοντέλο βασίζεται στην επίλυση της μονοδιάστατης Γενικής Εξίσωσης της Δυναμικής του Αερολύματος (ΓΕΔΑ), με ημι-Lagrangian βηματική προσέγγιση. Η συνάρτηση κατανομής μεγέθους των σωματιδίων θεωρείται πως ακολουθεί λογαριθμοκανονική κατανομή, και για την αριθμητική προσέγγισή της χρησιμοποιείται η τμηματική μέθοδος. Λαμβάνεται υπόψη η διαδικασία της συσσωμάτωσης-συνάθροισης και προσδιορίζονται τα μορφολογικά χαρακτηριστικά των συμπλεγμάτων σωματιδίων, τα οποία θεωρούνται ως φράκταλ (fractals). Ακόμη, μοντελοποιούνται οι διάφοροι μηχανισμοί διάχυσης και εναπόθεσης σωματιδίων. Για τον προσδιορισμό της ταχύτητας και της θερμοκρασίας του αερολύματος, επιλύονται επίσης οι εξισώσεις της συνέχειας και της μεταφοράς θερμότητας, σε μία διάσταση.

Κατά αυτόν τον τρόπο, η μεταβολή της πυκνότητας κατανομής μεγέθους και της ολικής κατά αριθμό συγκέντρωσης σωματιδίων υπολογίζεται από το μοντέλο. Η επαλήθευση του μοντέλου πραγματοποιήθηκε μέσω σύγκρισης με γνωστές αναλυτικές λύσεις της ΓΕΔΑ, καθώς επίσης και με παλαιότερα πειραματικά δεδομένα. Ακόμη, πραγματοποιήθηκε η εφαρμογή του μοντέλου για την υπολογιστική προσομοίωση νέων πειραμάτων που διενεργούνταν αυτήν την περίοδο από το JRC, τα οποία προσομοιώθηκαν ικανοποιητικά. Επιπλέον, για την υποστήριξη των μετρήσεων, υπολογίστηκε η σχετική επίδραση των διαφόρων μηχανισμών απομάκρυνσης σωματιδίων.

Το υπολογιστικό μοντέλο που αναπτύσσεται στα πλαίσια της παρούσας εργασίας, δύναται να επιλύσει αριθμητικά ροές αερολύματος με υψηλό ρυθμό συνάθροισης σωματιδίων, π.χ. για τη μελέτη και ανάλυση των εκπομπών οχημάτων. Περαιτέρω εφαρμογή βρίσκει επίσης στην σύνθεση νανοσωματιδίων σε αντιδραστήρες αερολύματος, στην ασφάλεια πυρηνικών αντιδραστήρων και στην εναπόθεση σωματιδίων στο αναπνευστικό σύστημα.

Abstract

In the present work, nanoparticles transport and dynamics in aerosols are studied, considering non-spherical, fractal-like particles. The developed model was used for the analysis and processing of measurements, regarding the revision of the European Regulation for vehicle emissions (Euro 7), in collaboration with the European Joint Research Centre (JRC) in Ispra, Italy.

The model is based on solving the one-dimensional General Dynamic Equation for aerosols (GDE), using a semi-Lagrangian stepwise approach. The particle size distribution function is considered to follow a lognormal distribution, and the sectional method is used for its numeric approach. The coagulation–agglomeration process is taken into account, and the morphological characteristics of the fractal-like agglomerates are determined. Furthermore, the various particle diffusion and deposition mechanisms are modeled. For the determination of the aerosol velocity and temperature, the equations of continuity and heat-transfer, in one dimension, are also solved.

Thus, the change in particle size distribution density and total number concentration is calculated by the model. The validation of the model was performed by comparison with known analytical solutions of the GDE, as well as with older experimental data. Furthermore, the model was applied for the computational simulation of new experiments, currently being conducted by JRC, which were satisfactorily simulated. In addition, to support the measurements, the relative effect of the various particle removal mechanisms was calculated.

The computing model developed in the present work may numerically solve aerosol flows with high particle agglomeration rate, e.g. for the study and analysis of vehicle emissions. Further application is also found in the synthesis of nanoparticles in aerosol reactors, in the safety of nuclear reactors and in particle deposition onto the respiratory system.

Συντομώσεις - Αρτικόλεξα

ΓΕΔΑ, GDE	Γενική Εξίσωση της Δυναμικής του Αερολύματος
CFD	Υπολογιστική Ρευστομηχανική
CPC	Μετρητής Συμπύκνωσης Σωματιδίων
DLA	Συνάθροιση Λόγω Διάχυσης
DLCA	Σύμπλεγμα Συνάθροισης Λόγω Διάχυσης
DMA	Διαφορικός Αναλυτής Κινητικότητας
ET	Σωλήνας Εξατμίσεως
FFPS	Δειγματολήπτης Λεπτόκοκκων Σωματιδίων
JRC	Κοινό Κέντρο Ερευνών
PBE	Εξίσωση Ισορροπίας Πληθυσμού
PM	Σημείο Δειγματοληψίας Σωματιδιακής Μάζας
PN10	Κατά αριθμό συγκέντρωση σωματιδίων διαμέτρου μεγαλύτερης από 10nm
PN23	Κατά αριθμό συγκέντρωση σωματιδίων διαμέτρου μεγαλύτερης από 23nm
SMPS	Σκάνερ Μεγέθους Κινητικότητας Σωματιδίων
TEM	Ηλεκτρονική Μικροσκοπία Μετάδοσης
VELA	Εργαστήρια Εκπομπών Οχημάτων

Κατάλογος Συμβόλων

Γ	βαθμίδα ταχύτητας κάθετη στη διεύθυνση της ροής
Δx	χωρικό βήμα
ϵ_k	ρυθμός απώλειας κινητικής ενέργειας ανά μονάδα μάζας
λ	μέση ελεύθερη διαδρομή μορίων του αερίου
μ	διάμεση διάμετρος
μ_g	δυναμική συνεκτικότητα αερίου
ν_g	κινηματική συνεκτικότητα αερίου
ρ	πυκνότητα
ρ_{eff}	ενεργός πυκνότητα
ρ_g	πυκνότητα αερίου
ρ_p	πυκνότητα σωματιδίου
ρ_0	πυκνότητα μονομερούς
σ	γεωμετρική τυπική απόκλιση
τ	αδιάστατος χρόνος
τ_{ag}	χρονική κλίμακα μηχανισμού συσσωμάτωσης
τ_{B-diff}	χρονική κλίμακα μηχανισμού Brownian διάχυσης
τ_{T-diff}	χρονική κλίμακα μηχανισμού τυρβώδους διάχυσης
τ_{T-edd}	χρονική κλίμακα μηχανισμού τυρβώδους πρόσκρουσης
τ_{th}	χρονική κλίμακα μηχανισμού θερμοφόρισης
τ_p	χρόνος απόκρισης Stokes σωματιδίου
τ_p^+	χρόνος ηρεμίας σωματιδίου
τ_{res}	χρόνος παραμονής
c	διάνυσμα ταχύτητας ολίσθησης
\bar{c}_i	μέση ταχύτητα σωματιδίου με δείκτη i
C_C	συντελεστής Cunningham
C_f	συντελεστής τριβής
C_p	θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεση
d, d_p	διάμετρος
d_f, D_f	μορφοκλασματική διάσταση
d_h	υδραυλική διάμετρος
dl	σημείο πλέγματος
d_0	διάμετρος μονομερούς
D, D_p	συντελεστής διάχυσης
E_{th}	ολική απόδοση θερμοφόρισης

g	επιτάχυνση της βαρύτητας
g_i	μήκος Fuchs σωματιδίου με δείκτη i
J	ροή σωματιδίων
k	συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας
k_B	σταθερά Boltzmann
K	συντελεστής συσσωμάτωσης
K_B	συντελεστής Brownian συσσωμάτωσης
K_{LS}	συντελεστής συσσωμάτωσης σε στρωτή ροή
K_{th}	συντελεστής θερμοφόρισης
K_{TS}	συντελεστής τυρβώδους συσσωμάτωσης
K_{max}	συνολικός αριθμός τμημάτων
Kn	αριθμός Knudsen
l_i	μέση ελεύθερη διαδρομή σωματιδίου με δείκτη i
m	μάζα
n	συνάρτηση πυκνότητας κατανομής μεγέθους των σωματιδίων
n_{agg}	αριθμός μονομερών
N	κατά αριθμό συγκέντρωση σωματιδίων
N_{total}	ολική κατά αριθμό συγκέντρωση σωματιδίων
Nu	αριθμός Nusselt
P_{diff}	κλάσμα διαπερατότητας τυρβώδους διάχυσης
Pr	αριθμός Prandtl
r	διάνυσμα θέσης
Re	αριθμός Reynolds
R_g	ακτίνα περιστροφής
Sc	αριθμός Schmidt
Sh	αριθμός Sherwood
t	χρόνος
T	θερμοκρασία
T_a	θερμοκρασία περιβάλλοντος
T_m	μέση θερμοκρασία ρευστού
T_w	θερμοκρασία τοιχωμάτων
u	ταχύτητα
u_{fr}	ταχύτητα τριβής
u_g	ταχύτητα ρευστού
v	όγκος
\mathbf{v}	διάνυσμα ταχύτητας
v_{B-diff}	ταχύτητα εναπόθεσης Brownian διάχυσης

v_d	ολική ταχύτητα εναπόθεσης
v_{T-diff}	ταχύτητα εναπόθεσης τυρβώδους διάχυσης
v_{T-edd}	ταχύτητα εναπόθεσης τυρβώδους πρόσκρουσης
v_s	ταχύτητα βαρυτικής καθίζησης
v_{th}	ταχύτητα θερμοφόρισης
V_{agg}	γεωμετρικός όγκος συμπλέγματος
x	θέση επί άξονα παράλληλου σε επιφάνεια
y	θέση επί άξονα κάθετου σε επιφάνεια

Επιγραφές

Δt	χρονικό διάστημα
c	σύγκρουση
O	προηγούμενο ή αρχικό μέγεθος
$+$	αδιάστατο μέγεθος
$*$	μέγεθος αναφοράς

Υπογραφές

agg	σύμπλεγμα σωματιδίων
A	επιφάνεια
$coag$	συσσωμάτωση
g	αέριο
k	πλήθος μονομερών
M	μάζα
p	σωματίδιο
$reac$	αντιδραστήρας

1. Εισαγωγή

1.1 Πλαίσιο

Η κατανόηση των ιδιοτήτων και της συμπεριφοράς μικρών σωματιδίων που αιωρούνται σε αέριο αποτελεί αναγκαία συνιστώσα της έρευνας πολλών σύγχρονων επιστημονικών και τεχνολογικών πεδίων, φαινομενικά απομακρυσμένων μεταξύ τους. Για παράδειγμα, η συγκέντρωση και η σύσταση αιωρούμενων σωματιδίων στην ατμόσφαιρα αποτελεί σημαντική παράμετρο στην εκτίμηση της ατμοσφαιρικής ρύπανσης και της αλλαγής του κλίματος. Το μέγεθος των βιομηχανικά παραγόμενων νανοσωματιδίων είναι κρίσιμη παράμετρος και είναι αναγκαίο να ελέγχεται, καθώς καθορίζει τις ιδιότητες και την ποιότητα των τελικών προϊόντων. Σημαντικό πεδίο της σύγχρονης έρευνας, που περιλαμβάνει τη μελέτη της συμπεριφοράς σωματιδίων, είναι αυτό της ασφάλειας των πυρηνικών αντιδραστήρων, καθώς το μεγαλύτερο μέρος των ραδιενεργών εκλύσεων από την καρδιά του αντιδραστήρα κατά τη διάρκεια ενός υποθετικού μείζονος πυρηνικού ατυχήματος είναι σε σωματιδιακή μορφή.

Η αιώρηση μικρών σωματιδίων σε αέρια ονομάζεται *Αερόλυμα (αέριο+διάλυμα)*. Τα σωματίδια μπορεί να είναι σε υγρή ή στερεή φάση και έχουν μέγεθος που εκτείνεται από τη μακροσκοπική κλίμακα της τάξης του δεκάτου του χιλιοστόμετρου έως τη σχεδόν ατομική κλίμακα του νανόμετρου (μερικά Angstrom). Πρόκειται για διφασικό σύστημα, καθώς ο όρος αερόλυμα περιλαμβάνει τόσο τη σωματιδιακή όσο και την αέρια φάση. Συνήθως, η σωματιδιακή φάση είναι αρκετά διαλυμένη (ο όγκος των σωματιδίων δεν ξεπερνά το 0.0001% του ολικού όγκου) και επομένως το αερόλυμα μπορεί να θεωρηθεί ότι είναι ένα διφασικό σύστημα μονής σύζευξης (Drossinos & Housiadas, 2006). Συγκεκριμένα, μπορεί να θεωρηθεί ότι η αέρια φάση (φέρων αέριο) επιδρά στη σωματιδιακή, αλλά ότι η σωματιδιακή φάση έχει αμελητέα επίδραση στα υδροδυναμικά χαρακτηριστικά του φέροντος αερίου.

Ο πληθυσμός των σωματιδίων ενός αερολύματος δεν είναι γενικά ευσταθής, αλλά μεταβάλλεται λόγω ποικίλων φυσικών διαδικασιών, όπως οι συγκρούσεις μεταξύ των σωματιδίων (συσσωμάτωση-συνάθροιση). Τα σωματίδια μεταφέρονται επίσης λόγω της ροής του φέροντος αερίου και εναποτίθενται στις επιφάνειες των τοιχωμάτων λόγω διάφορων μηχανισμών, όπως η διάχυση, η θερμοφόριση και η αδρανειακή πρόσκρουση (Hinds, 1999; Friedlander, 2000; Seinfeld & Pandis, 2016).

Η μοντελοποίηση της δυναμικής και της μεταφοράς του αερολύματος μπορεί να υποστηρίξει σημαντικά την κατανόηση των διάφορων φυσικών διαδικασιών που λαμβάνουν χώρα και των βασικών παραμέτρων λειτουργίας, σε περιπτώσεις, για τις οποίες απαιτείται βαθύτερη κατανόηση και ερμηνεία της φαινομενολογίας, όπως για παράδειγμα, οι φυσικές και χημικές διαδικασίες που επιδρούν στην εξέλιξη του πυρηνικού αερολύματος (Alpy et al., 2003; Parozzi et al., 2005; Gelain & Vendel, 2008; Herranz et al., 2018). Σε άλλες εφαρμογές, η μοντελοποίηση της μεταφοράς και της δυναμικής του αερολύματος μπορεί

να υποστηρίξει τον σχεδιασμό και τον έλεγχο συστημάτων, π.χ. για την σύνθεση νανοσωματιδίων (Tsantilis et al., 2002).

Συγκεκριμένα, η μοντελοποίηση της μεταφοράς και δυναμικής νανοσωματιδίων, που προέρχονται από εκπομπές ελαφρών, συμβατικών οχημάτων, μπορεί να ερμηνεύσει και να υποστηρίξει εργαστηριακές μετρήσεις προσδιορισμού και ελέγχου των περιεχόμενων ρύπων στα εκλυόμενα καυσαέρια (Giechaskiel, Isella & Drossinos, 2008). Τέτοιες πειραματικές μετρήσεις και εργαστηριακές αξιολογήσεις, οι οποίες χαρακτηρίζονται από αρκετές αβεβαιότητες (Giechaskiel et al., 2021), αποτελούν πεδίο ενδιαφέροντος της σύγχρονης έρευνας, καθώς οι ευρωπαϊκοί ρυθμιστικοί κανονισμοί για τις εκπομπές οχημάτων αναθεωρούνται (Euro 7), εισάγοντας πλέον κανονιστικό πλαίσιο για τις συγκεντρώσεις σωματιδίων μεγέθους περί τα 10 νανόμετρα, αντί των 23 νανομέτρων, όπως ίσχυε μέχρι πρότινος.

1.2 Σκοπός, ερωτήματα και στόχοι

Ο σκοπός της παρούσας εργασίας είναι η προσομοίωση της μεταφοράς και της δυναμικής νανοσωματιδίων από εκπομπές οχημάτων, για την ανάλυση, ερμηνεία και υπολογιστική υποστήριξη πειραματικών μετρήσεων, στα πλαίσια αναθεώρησης του κανονισμού ευρωπαϊκών προδιαγραφών αναφορικά με τη ρύπανση από ελαφρά μηχανοκίνητα οχήματα (Euro 7). Οι πειραματικές μετρήσεις διενεργούνταν στο Ευρωπαϊκό Κοινό Κέντρο Ερευνών (Joint Research Centre – JRC) στην Ίσπρα της Ιταλίας. Η μεταβολή της συγκέντρωσης σωματιδίων και της κατανομής του μεγέθους τους είναι το κύριο σημείο ενδιαφέροντος της παρούσας εργασίας.

Το αντικείμενο είναι η ανάπτυξη αριθμητικής μεθόδου για την επίλυση της *Γενικής Εξίσωσης της Δυναμικής του Αερολύματος (ΓΕΔΑ) (General Dynamic Equation – GDE)*, δηλαδή της βασικής εξίσωσης που περιγράφει τη μεταφορά και τη δυναμική του αερολύματος. Ειδικότερα, πέραν της επίλυσης των διαφόρων μηχανισμών διάχυσης και εναπόθεσης σωματιδίων, ο στόχος είναι η μεθοδολογία να είναι ικανή να επιλύσει τη διαδικασία της *συνάθροισης (agglomeration)* μεταξύ των σωματιδίων. Διαδικασία κατά την οποία τα σωματίδια συγκρούονται μεταξύ τους και συσσωματώνονται διατηρώντας τη γεωμετρία τους, με αποτέλεσμα τη παραγωγή μη-σφαιρικών συμπλεγμάτων σωματιδίων (*clusters*), τα οποία συχνά θεωρούνται ως *φράκταλ (fractals)*.

Η αριθμητική μέθοδος επίλυσης της ΓΕΔΑ, η οποία αναπτύσσεται στα πλαίσια της παρούσας εργασίας, βασίζεται σε ημι-Lagrangian βηματική προσέγγιση. Για την αριθμητική αναπαράσταση της συνάρτησης κατανομής μεγέθους των σωματιδίων χρησιμοποιείται η τμηματική μέθοδος. Επίσης, παράλληλα με την επίλυση της ΓΕΔΑ, επιλύεται η εξίσωση μεταφοράς θερμότητας, σε μία διάσταση, για την περίπτωση διέλευσης αερολύματος μέσω ενός αγωγού.

1.3 Διάρθρωση της εργασίας

Στο Κεφάλαιο 2 γίνεται σύντομη βιβλιογραφική ανασκόπηση, σχετικά με το θέμα που πραγματεύεται η παρούσα εργασία. Γίνεται αναφορά στα ήδη υπάρχοντα υπολογιστικά μοντέλα επίλυσης ρών αερολύματος, ενώ εισάγεται επίσης η έννοια των θεωρούμενων ως φράκταλ σωματιδίων.

Στο Κεφάλαιο 3 παρουσιάζονται, αρχικά, τα βασικά στοιχεία θεωρίας για την περιγραφή των διάφορων διαδικασιών που εξετάζονται από το παρόν μοντέλο. Στη συνέχεια παρουσιάζεται η Γενική Εξίσωση της Δυναμικής του Αερολύματος (ΓΕΔΑ) και γίνεται μνεία στις αριθμητικές μεθόδους που χρησιμοποιούνται για την επίλυση της.

Στο Κεφάλαιο 4 παρουσιάζεται η μεθοδολογία που ακολουθήθηκε στα πλαίσια της παρούσας εργασίας. Καταγράφονται οι μέθοδοι επίλυσης όλων των δυναμικών μηχανισμών του αερολύματος που λαμβάνονται υπόψη. Έμφαση δίνεται στην πιστοποίηση των μεθόδων που αναπτύχθηκαν, η οποία πραγματοποιήθηκε μέσω της σύγκρισης με αναλυτικές λύσεις της ΓΕΔΑ, καθώς και με πειραματικά δεδομένα.

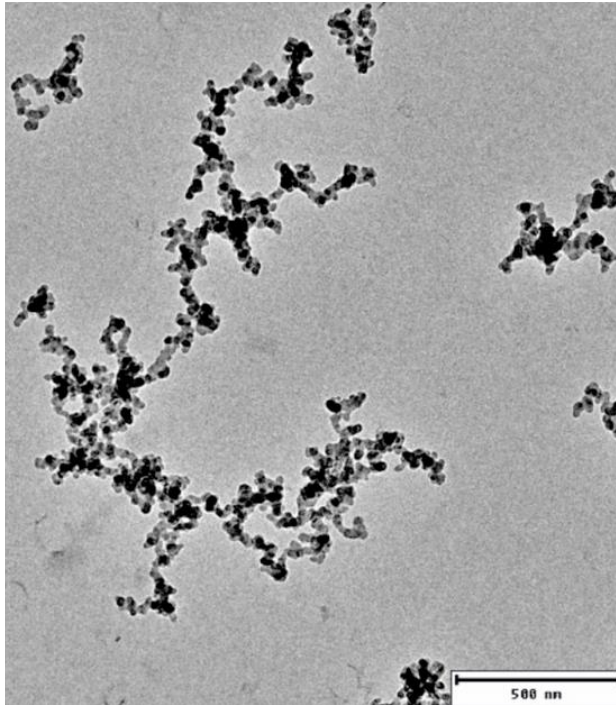
Στο Κεφάλαιο 5 παρουσιάζεται η εφαρμογή του μοντέλου που αναπτύσσεται στην παρούσα εργασία. Το μοντέλο αξιοποιήθηκε για την υπολογιστική προσομοίωση μεταφοράς και δυναμικής νανοσωματιδίων από εκπομπές οχήματος, προς υποστήριξη και ερμηνεία μετρήσεων που πραγματοποιούνταν, παράλληλα αυτήν την περίοδο, από το JRC, για τον νέο Ευρωπαϊκό Κανονισμό (Euro 7). Παρατίθενται τα αποτελέσματα των υπολογισμών και συγκρίνονται με τις πειραματικές μετρήσεις.

Τέλος, στο Κεφάλαιο 6 συνοψίζονται τα βασικά συμπεράσματα σχετικά με την προτεινόμενη μεθοδολογία και τη δυνατότητα υπολογιστικής προσομοίωσης ρών αερολύματος. Παρουσιάζονται επίσης, πιθανές μελλοντικές κατευθύνσεις για τη βελτίωση και εξέλιξη της προτεινόμενης μεθοδολογίας.

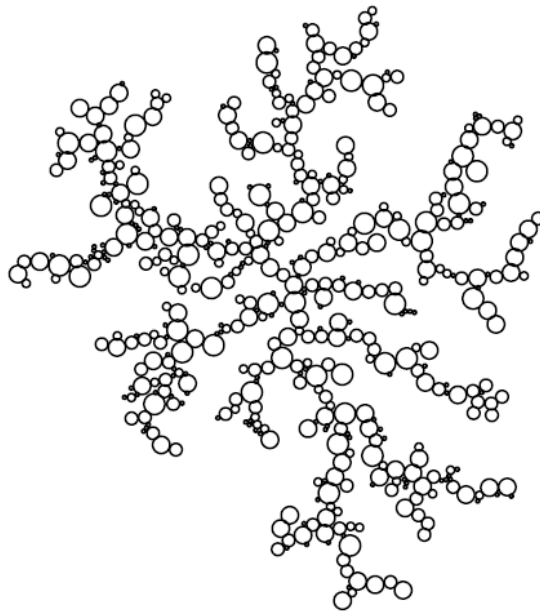
2. Βιβλιογραφική ανασκόπηση

Μονοδιάστατα μοντέλα, χρησιμοποιούνται συχνά για την προσομοίωση διάφορων εφαρμογών, εξαιτίας του μικρού υπολογιστικού τους κόστους, αλλά και της σημαντικά μικρότερης δυσκολίας που συναντάται κατά την κατασκευή τους. Τέτοιες εφαρμογές είναι, για παράδειγμα, η σύνθεση ναοσωματιδίων σε αντιδραστήρες αερολύματος (Tsantilis & Pratsinis, 2000; Shigeta & Nishiyama, 2005), η εναπόθεση σωματιδίων στο αναπνευστικό σύστημα (Mitsakou, Helmis & Housiadas, 2004) και οι εφαρμογές ασφάλειας πυρηνικών αντιδραστήρων (Alpy et al., 2003). Παρά την απλότητα των μονοδιάστατων μοντέλων, ένα από τα προβλήματα που συναντώνται κατά τη κατασκευή τους αποτελεί η αριθμητική περιγραφή της συνάρτησης κατανομής μεγέθους των σωματιδίων. Αρκετές μέθοδοι έχουν αναπτυχθεί και εξακολουθούν να αναπτύσσονται για την αριθμητική περιγραφή της συνάρτησης κατανομής. Από αυτές η τμηματική μέθοδος (sectional method) (Gelbard et al., 1980; Jacobson & Turco, 1995; Kumar & Ramkrishna, 1997) παραμένει η μέθοδος με την μεγαλύτερη γενικότητα, καθώς μπορεί να αντιμετωπίσει την εξέλιξη τυχαίων κατανομών.

Πλήθος μεθοδολογιών έχει αναπτυχθεί για την επίλυση των δυναμικών φαινομένων ροής αερολύματος, όπου λαμβάνει χώρα η διαδικασία της συσσωμάτωσης, λόγω των συγκρούσεων μεταξύ σφαιρικών σωματιδίων (π.χ. Mitrakos, Mitsakou & Housiadas, 2004; Seinfeld & Pandis, 2016). Μεθοδολογίες έχουν επίσης αναπτυχθεί και για την επίλυση της διαδικασίας της συνάθροισης, λόγω των συγκρούσεων μεταξύ μη-σφαιρικών σωματιδίων-συμπλεγμάτων (π.χ. Friedlander, 2000; Drossinos & Housiadas, 2006; Isella, Giechaskiel & Drossinos, 2008). Στην τελευταία περίπτωση, λαμβάνεται υπόψη η μορφολογία των μη-σφαιρικών σωματιδίων, η οποία επηρεάζει σημαντικά τη μεταφορά και τη δυναμική των σωματιδίων που αιωρούνται σε ένα αερόλυμα. Μέσω της διαδικασίας της συνάθροισης, τα συμπλέγματα σωματιδίων αποκτούν δενδριτικό σχήμα (Σχήμα 1, Σχήμα 2), το οποίο χαρακτηρίζεται από *αυτο-ομοιομορφία (self-similarity)*, προσομοιάζοντας σχηματισμούς *φρακταλ* (Friedlander, 2000; Drossinos & Housiadas, 2006).



Σχήμα 1: Ανεπεξέργαστη εικόνα ηλεκτρονικής μικροσκοπίας (TEM) συμπλέγματος σωματιδίων τέφρας (Altenhoff et al., 2020).



Σχήμα 2: Τυπικό Σύμπλεγμα Λόγω Διάχυσης (Diffusion Limited Aggregate – DLA) με 10^4 σωματίδια, διαφόρων μεγεθών (Braga et al., 2015).

Τα υπολογιστικά μοντέλα που αναπτύσσονται για την επίλυση του μηχανισμού της συνάθροισης των σωματιδίων συνεχώς εξελίσσονται, καθώς ο προσδιορισμός των μορφολογικών χαρακτηριστικών των μη-σφαιρικών σωματιδίων δεν υπόκειται σε κάποια καθολική θεώρηση και αποτελεί συχνά πεδίο ενδιαφέροντος διαφόρων ερευνητικών εργασιών (π.χ. Kostoglou & Konstandopoulos, 2001; Artelt, Schmid & Peukert, 2003; Kostoglou, Konstandopoulos & Friedlander, 2006; Heinson, Sorensen & Chakrabati, 2012; Charvet et al., 2014; Braga et al., 2015; Altenhoff et al., 2020; Yon et al., 2021).

3. Βασική θεωρία και μοντελοποίηση δυναμικής αερολύματος

3.1 Χαρακτηριστικά του αερολύματος

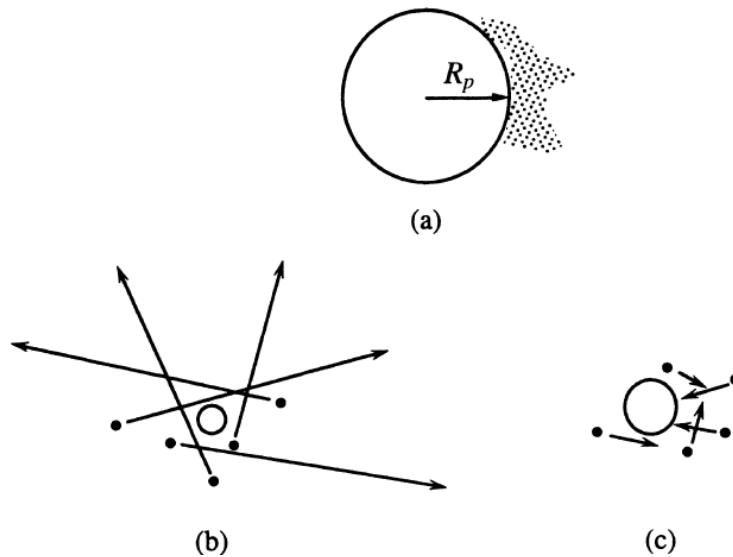
Η συγκέντρωση των σωματιδίων (αριθμός σωματιδίων ανά μονάδα όγκου φέροντος αερίου) αποτελεί βασική ιδιότητα ενός αερολύματος. Πέραν της συγκέντρωσης, πολύ σημαντική ιδιότητα που καθορίζει τη συμπεριφορά ενός αερολύματος, στην πλειονότητα των εφαρμογών, είναι και το μέγεθος των σωματιδίων. Η λειτουργία και η αποτελεσματικότητα, για παράδειγμα, των φίλτρων, η διείσδυση των εισπνεόμενων φαρμάκων στο κατώτερο αναπνευστικό σύστημα και η διασπορά πυρηνικών αερολυμάτων εξαρτώνται άμεσα από το μέγεθος των σωματιδίων. Στη νανοτεχνολογία επίσης, το μέγεθος των παραγόμενων σωματιδίων είναι κρίσιμη παράμετρος, καθώς επιδρά σημαντικά στην ποιότητα και στις ιδιότητες των τελικών προϊόντων. Η χημική σύσταση των σωματιδίων μπορεί επίσης να παρουσιάζει ενδιαφέρον, για παράδειγμα σε εφαρμογές με αντικείμενο την τοξικολογική επίδραση ενός αερολύματος. Ακόμη, το σχήμα των σωματιδίων μπορεί να επιδρά στην ποιότητα και στις ιδιότητες των προϊόντων της νανοτεχνολογίας, ενώ τέλος, το ηλεκτρικό φορτίο των σωματιδίων είναι μια ιδιότητα, που βρίσκει εφαρμογή, για παράδειγμα στα ηλεκτροστατικά φίλτρα.

Η συνηθέστερη παράμετρος που χρησιμοποιείται για τον χαρακτηρισμό του μεγέθους ενός σωματιδίου είναι η διάμετρος, d ή d_p . Τα υγρά σωματίδια που προκύπτουν, για παράδειγμα από συμπύκνωση ενός ατμού, έχουν σφαιρικό σχήμα και η διάμετρος τους μπορεί να ληφθεί ίση με τη πραγματική διάμετρο του σωματιδίου. Τα στερεά σωματίδια όμως συνήθως έχουν ακανόνιστο σχήμα. Σε τέτοιες περιπτώσεις χρησιμοποιείται η «ισοδύναμη διάμετρος», που είναι η διάμετρος που θα έπρεπε να έχει ένα σφαιρικό σωματίδιο, ώστε να έχει την ίδια συμπεριφορά με το πραγματικό με βάση ένα επιλεγμένο κριτήριο. Η πιο συχνά χρησιμοποιούμενη «ισοδύναμη διάμετρος» είναι η *αεροδυναμική διάμετρος*, η οποία ορίζεται ως η διάμετρος σφαιρικού σωματιδίου με μοναδιαία πυκνότητα (1000 kg/m^3), το οποίο έχει την ίδια ταχύτητα καθίζησης με το πραγματικό σωματίδιο. Πολύ συχνά χρησιμοποιείται και η *διάμετρος Stokes*, η οποία ορίζεται ως η διάμετρος σφαιρικού σωματιδίου με την ίδια πυκνότητα και ταχύτητα καθίζησης με το σωματίδιο. Η μονάδα που συνηθέστερα χρησιμοποιείται για τη μέτρηση της διαμέτρου των σωματιδίων είναι το μικρόμετρο (μm), αν και συχνά, σε περιπτώσεις νανοσωματιδίων, χρησιμοποιείται το νανόμετρο (nm).

Συνηθίζεται τα σωματίδια να κατηγοριοποιούνται ανάλογα με το μέγεθός τους. Σφαιρικά σωματίδια με διάμετρο μεγαλύτερη από $1\mu\text{m}$ χαρακτηρίζονται *χονδρόκοκκα* (*coarse particles*). Τα σωματίδια διαμέτρου μικρότερης από $1\mu\text{m}$, τα ονομαζόμενα *λεπτόκοκκα* (*fine particles*), μπορούν να διακριθούν σε διάφορες υποκατηγορίες, όπως τα *υπερλεπτόκοκκα σωματίδια* (*ultrafine particles*), για διάμετρο μικρότερη από 100nm (Friedlander, 2000). Συγκεκριμένα, σωματίδια με διάμετρο από 1nm έως μερικές δεκάδες νανόμετρα ονομάζονται *νανοσωματίδια* (*nanoparticles*).

Το μέγεθος των σωματιδίων επιδρά καταλυτικά στα χαρακτηριστικά του αερολύματος, καθώς ακόμα και η ίδια η φύση των νόμων που περιγράφουν τη συμπεριφορά του αερολύματος εξαρτάται από το μέγεθος των σωματιδίων του. Οι μηχανισμοί, για παράδειγμα, της μεταφοράς θερμότητας, μάζας και ορμής μεταξύ του σωματιδίου και της αέριας φάσης εξαρτώνται από τον αριθμό *Knudsen*, που ορίζεται ως ο λόγος της μέσης ελεύθερης διαδρομής του αερίου (*mean free path*) λ , προς την ακτίνα του σωματιδίου ($Kn = 2\lambda/d_p$). Η μέση ελεύθερη διαδρομή του αερίου ορίζεται ως η μέση απόσταση που διανύει ένα μόριο του μεταξύ δύο διαδοχικών συγκρούσεων και υπολογίζεται από την κινητική θεωρία των αερίων (Friedlander, 2000).

Σύμφωνα με την τιμή του αριθμού *Knudsen* (ή αντίστοιχα σύμφωνα με τη σχέση της διαμέτρου του σωματιδίου με τη μέση ελεύθερη διαδρομή του αερίου) μπορούν να διακριθούν δύο οριακές περιοχές (Σχήμα 3). Η πρώτη περιοχή είναι αυτή, στην οποία η διάμετρος των σωματιδίων είναι πολύ μεγαλύτερη από τη μέση ελεύθερη διαδρομή του αερίου ($Kn \ll 1$). Η περιοχή αυτή είναι γνωστή ως *συνεχής περιοχή* (*continuum regime*). Σε αυτή την περιοχή το περιβάλλον ρευστό συμπεριφέρεται σαν συνεχές μέσο, και επομένως μπορούμε να θεωρήσουμε συνθήκη μη ολίσθησης (μηδενικής ταχύτητας) στην επιφάνεια του σωματιδίου. Για τον υπολογισμό την αντίστασης που ασκείται στο σωματίδιο μπορούν να χρησιμοποιηθούν οι εξισώσεις Navier-Stokes. Όταν η διάμετρος του σωματιδίου είναι πολύ μικρότερη από τη μέση διαδρομή του αερίου ($Kn \gg 1$) τότε το αέριο δεν μπορεί να θεωρηθεί συνεχές μέσο. Σε αυτή την περίπτωση, η αντίσταση που προβάλλει το αέριο στην κίνηση του σωματιδίου είναι αποτέλεσμα διακριτών προσκρούσεων, οι οποίες είναι συχνότερες στην εμπρός περιοχή του σωματιδίου. Σε αυτή την περιοχή, που ονομάζεται *ελεύθερη μοριακή περιοχή* (*free molecular regime*), η μεταφορά ενέργειας, μάζας και ορμής μεταξύ του ρευστού και του σωματιδίου μπορεί να υπολογιστεί με βάση τη θεωρία των μοριακών συγκρούσεων (κινητική θεωρία των αερίων). Μεταξύ των δύο παραπάνω οριακών περιοχών παρεμβάλλεται η *μεταβατική περιοχή* (*transition regime*). Η θεωρία της μετάβασης από την ελεύθερη στη συνεχή περιοχή παρουσιάζει μεγάλες δυσκολίες και για αυτό, στη μεταβατική περιοχή συνήθως χρησιμοποιούνται σχέσεις παρεμβολής μεταξύ των δύο οριακών περιοχών.



Σχήμα 3: Σχηματική περιγραφή των δύο οριακών περιοχών αλληλεπίδρασης φέροντος αερίου-σωματιδίου: a) συνεχής περιοχή $Kn \ll 1$, b) ελεύθερη μοριακή περιοχή $Kn \gg 1$, c) μεταβατική περιοχή $Kn \approx 1$ (Seinfeld & Pandis, 2016).

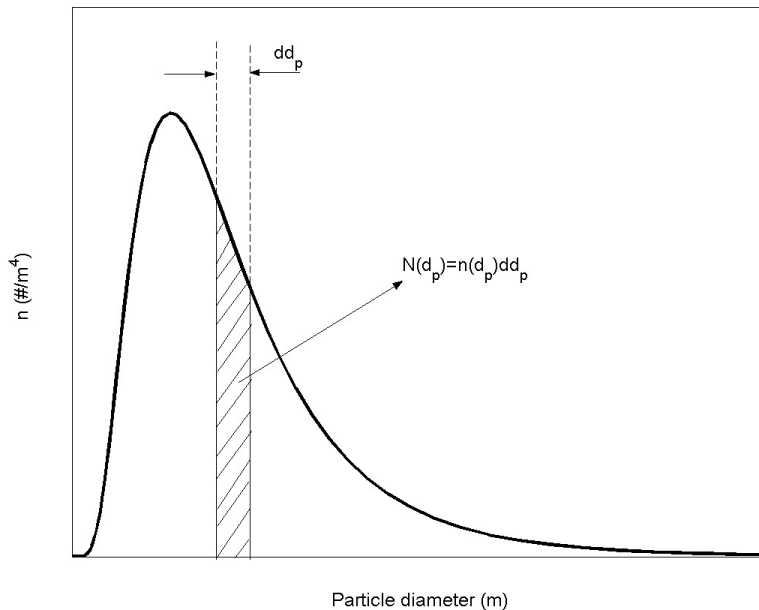
3.2 Συνάρτηση κατανομής μεγέθους σωματιδίων

Ένα αερόλυμα χαρακτηρίζεται ως *μονοδιασπαρμένο* (*monodisperse aerosol*), εάν τα σωματίδια που περιέχονται σε αυτό έχουν όλα το ίδιο μέγεθος, ή ως *πολυδιασπαρμένο* (*polydisperse aerosol*), στην περίπτωση όπου το μέγεθος των σωματιδίων που περιέχονται σε αυτό ποικίλλει. Η πρώτη περίπτωση είναι ιδανική, καθώς θα απαιτούσε πλήρως ελεγχόμενες συνθήκες για να προκύψει (Colbeck, 1998). Αερολύματα που προκύπτουν από ορισμένες διαδικασίες της βιομηχανίας παραγωγής νανοσωματιδίων θα μπορούσαν να χαρακτηριστούν ως μονοδιασπαρμένα, για περιορισμένο χρόνο. Στην πράξη, οποιοδήποτε αερόλυμα δημιουργείται μέσω φυσικών ή τεχνητών διαδικασιών είναι πολυδιασπαρμένο.

Για τη μαθηματική περιγραφή ενός αερολύματος χρησιμοποιείται η *συνάρτηση κατανομής μεγέθους* των σωματιδίων, που συμβολίζεται συνήθως με n . Η συνάρτηση κατανομής μεγέθους μπορεί να έχει δύο μορφές (Friedlander, 2000; Drossinos & Housiadas, 2006): τη *διακριτή* (*discrete*) και τη *συνεχή* (*continuous*). Κατά τη διακριτή κατανομή τα σωματίδια θεωρείται ότι αποτελούνται από έναν ακέραιο αριθμό διακριτών υπομονάδων (π.χ. μόρια), τα οποία καλούνται μονομερή. Έτσι, η διακριτή συνάρτηση κατανομής μεγέθους των σωματιδίων $n_k(r,t)$, όπου r είναι το διάνυσμα του χώρου και t ο χρόνος, δίνει τη συγκέντρωση των σωματιδίων (αριθμός σωματιδίων ανά μονάδα όγκου του αερίου), τα οποία αποτελούνται από k μονομερή. Αν και ο τρόπος αυτός είναι αυστηρά ακριβής, ωστόσο είναι δύσκολο να εφαρμοστεί πρακτικά, λόγω του πολύ μεγάλου αριθμού μορίων που αποτελούν ακόμα και τα μικρά σωματίδια. Για τον λόγο αυτό, συνήθως χρησιμοποιείται η *συνεχής συνάρτηση πυκνότητας κατανομής μεγέθους* των σωματιδίων

$n(d_p, r, t)$ (Σχήμα 4), η οποία ορίζεται, έτσι ώστε το γινόμενο $n(d_p, r, t) \cdot dd_p$ να είναι ίσο με τη συγκέντρωση των σωματιδίων του αερολύματος που έχουν διάμετρο από d_p έως και $d_p + dd_p$. Οι μονάδες της συνεχούς συνάρτησης πυκνότητας κατανομής μεγέθους είναι αριθμός σωματιδίων ανά μονάδα όγκου αερίου και ανά μονάδα μεγέθους σωματιδίου (μήκος⁻⁴). Από τον παραπάνω ορισμό προκύπτει ότι το ολοκλήρωμα της συνεχούς συνάρτησης πυκνότητας κατανομής μεγέθους σε όλο το εύρος μεγεθών των σωματιδίων ισούται με την ολική συγκέντρωση των σωματιδίων του αερολύματος (Σχήμα 4).

Εκτός από τη συγκέντρωση των σωματιδίων κατά αριθμό, η συγκέντρωση κατά επιφάνεια και η συγκέντρωση κατά όγκο (ή μάζα) των σωματιδίων, μπορούν επίσης να χρησιμοποιούνται κατά περίπτωση, ανάλογα με την εφαρμογή. Η συγκέντρωση των σωματιδίων κατά μάζα χρησιμοποιείται συχνά, για παράδειγμα σε περιπτώσεις φίλτρων, όπου αυτό που μετράται είναι η μάζα των σωματιδίων που κατακρατούνται και όχι ο αριθμός τους. Η συγκέντρωση κατά επιφάνεια των σωματιδίων μπορεί επίσης να χρησιμοποιηθεί σε εφαρμογές, όπου η επιφάνεια των σωματιδίων παρουσιάζει ενδιαφέρον, όπως στην περίπτωση χημικών ή βιοχημικών αντιδράσεων.



Σχήμα 4: Παράδειγμα συνεχούς συνάρτησης πυκνότητας κατανομής για την περιγραφή του μεγέθους των σωματιδίων ενός αερολύματος.

Σε αυτές τις περιπτώσεις χρησιμοποιείται η συνάρτηση πυκνότητας κατανομής του μεγέθους των σωματιδίων, εκφρασμένη ως προς τη μάζα (n_M) ή την επιφάνεια (n_A) των σωματιδίων. Οι παραπάνω συναρτήσεις πυκνότητας κατανομής μπορούν να προκύψουν από τη συνάρτηση πυκνότητας κατανομής μεγέθους κατά αριθμό n πολλαπλασιάζοντας, αντίστοιχα, με τη μάζα ή την επιφάνεια του σωματιδίου:

$$n_M = \left(\frac{\pi}{6} d_p^3 \rho_p\right) n \quad (1)$$

$$n_A = (\pi d_p^2) n \quad (2)$$

όπου ρ_p είναι η πυκνότητα των σωματιδίων.

Η συνάρτηση κατανομής μεγέθους πολλών αερολυμάτων μπορεί να περιγραφεί από μαθηματικές συναρτήσεις. Η συνηθέστερη αναλυτική συνάρτηση κατανομής που χρησιμοποιείται είναι η *λογαριθμοκανονική (lognormal)* κατανομή. Η λογαριθμοκανονική συνάρτηση κατανομής μεγέθους ενός αερολύματος δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

$$n(d_p) = \frac{N_{total}}{\sqrt{2\pi} d_p \ln \sigma} \exp\left[-\frac{(\ln d_p - \ln \mu)^2}{2 \ln^2 \sigma}\right] \quad (3)$$

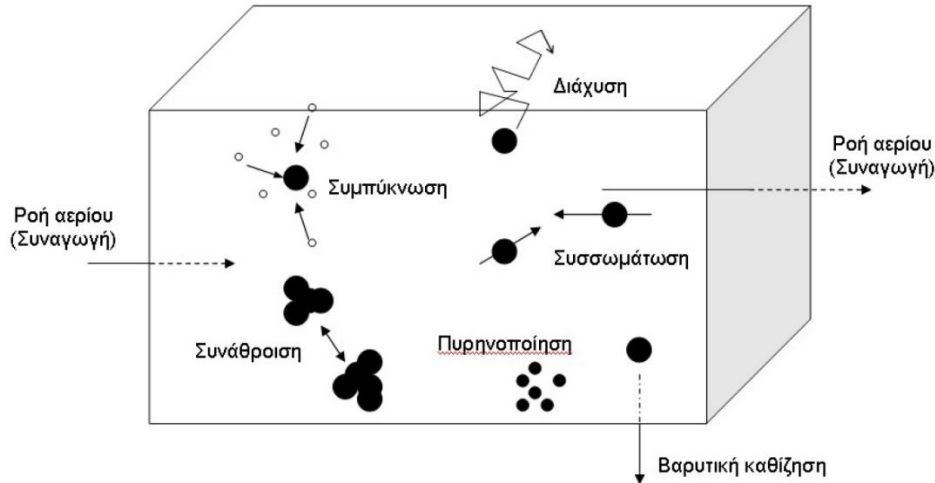
όπου μ είναι η *διάμεσος διάμετρος (median diameter)*, δηλαδή η διάμετρος από την οποία τα μισά σωματίδια είναι μικρότερα και τα υπόλοιπα μισά μεγαλύτερα. N_{total} είναι η ολική συγκέντρωση κατά αριθμό των σωματιδίων και σ η *γεωμετρική τυπική απόκλιση (geometrical standard deviation)* της κατανομής. Στο Σχήμα 4 απεικονίζεται ένα παράδειγμα λογαριθμοκανονικής κατανομής. Η λοξότητα της κατανομής και η ουρά που παρατηρείται για μεγάλα σωματίδια (βλ. Σχήμα 4) αποτελούν γενικό χαρακτηριστικό των λογαριθμοκανονικών κατανομών. Λογαριθμοκανονική συνάρτηση πυκνότητας κατανομής μεγέθους ακολουθούν αερολύματα που απαντώνται συχνά στην πράξη, τόσο φυσικής όσο και ανθρωπογενούς προέλευσης. Το μέγεθος των σωματιδίων ενός αερολύματος που εξελίσσεται, για παράδειγμα, λόγω συσσωμάτωσης ακολουθεί λογαριθμοκανονική κατανομή (Friedlander, 2000).

3.3 Φυσική Αερολύματος

Η συνάρτηση κατανομής μεγέθους ενός αερολύματος μεταβάλλεται στον χώρο και στον χρόνο υπό την επίδραση διάφορων φυσικών διαδικασιών. Στην παράγραφο αυτή περιγράφονται τα βασικά σημεία των κύριων διαδικασιών μεταφοράς και δυναμικής του αερολύματος.

Οι φυσικές διαδικασίες που επιδρούν στην εξέλιξη ενός αερολύματος διακρίνονται σε *εσωτερικές (internal processes)* και *εξωτερικές (external processes)* (Drossinos & Housiadas, 2006). Αν θεωρήσουμε ένα στοιχειώδη όγκο (Σχήμα 5) τότε εσωτερικές είναι οι διαδικασίες που συμβαίνουν μέσα στα όριά του, ενώ εξωτερικές αυτές που μεταφέρουν σωματίδια διαμέσου των ορίων του. Οι κύριες εσωτερικές διαδικασίες είναι η συσσωμάτωση – συνάθροιση και η μετατροπή της αέριας φάσης σε σωματιδιακή, μέσω πυρηνοποίησης και συμπύκνωσης – εξάτμισης. Στα πλαίσια της παρούσας εργασίας θα επικεντρωθούμε στον μηχανισμό της συσσωμάτωσης. Στις εξωτερικές διαδικασίες περιλαμβάνονται διαδικασίες, όπως η μεταφορά σωματιδίων λόγω της ροής του φέροντος αερίου, η διάχυση και η κίνηση

των σωματιδίων λόγω της επίδρασης εξωτερικών δυνάμεων, όπως η βαρύτητα ή η θερμοφόριση (κίνηση σωματιδίων λόγω βαθμίδας θερμοκρασίας στο φέρον αέριο) κλπ.



Σχήμα 5: Στοιχειώδης όγκος, στον οποίο παρουσιάζονται οι κύριες φυσικές διαδικασίες μεταφοράς και δυναμικής του αερολύματος (προσαρμοσμένο στα ελληνικά από Drossinos & Housiadas, 2006).

3.3.1 Εσωτερικές διαδικασίες: Συσσωμάτωση – Συνάθροιση

Τα σωματίδια ενός αερολύματος συγκρούονται μεταξύ τους λόγω της σχετικής τους κίνησης, η οποία μπορεί να οφείλεται στην κίνηση Brown, σε ανομοιογένειες του ρευστού (σε στρωτή ή τυρβώδη ροή) και στην κίνηση που προκαλείται από εξωτερικές δυνάμεις (βαρυτικές, ηλεκτροστατικές κλπ.). Δευτερευόντως, σχετική κίνηση μεταξύ των σωματιδίων προκαλούν βαθμίδες συγκέντρωσης και θερμοκρασίας. Η διαδικασία σύγκρουσης μεταξύ των σωματιδίων, κατά την οποία σχηματίζονται μεγαλύτερα σωματίδια (*συσσωματώματα*), είναι γνωστή ως *συσσωμάτωση (coagulation)*. Κατά τη συσσωμάτωση, τα αρχικά σωματίδια συγχωνεύονται μεταξύ τους και χάνουν την αρχική τους ταυτότητα. Στις περιπτώσεις στερεών σωματιδίων ενδέχεται τα συγκρουόμενα σωματίδια να διατηρούν τη μορφή και την ταυτότητά τους, σχηματίζοντας ένα σύμπλεγμα (cluster) σωματιδίων. Η διαδικασία αυτή ονομάζεται *συνάθροιση (agglomeration)* (Drossinos & Housiadas, 2006).

Ως αποτέλεσμα της συσσωμάτωσης προκαλείται μείωση του συνολικού αριθμού των σωματιδίων με ταυτόχρονη αύξηση του μέσου μεγέθους τους. Το αντικείμενο της θεωρίας της συσσωμάτωσης είναι η περιγραφή της μεταβολής της συγκέντρωσης και του μεγέθους των σωματιδίων συναρτήσει του χρόνου.

Το πρώτο βήμα της περιγραφής αυτής είναι ο υπολογισμός του ρυθμού, με τον οποίο συγκρούονται τα σωματίδια μεταξύ τους. Κατά την ανάλυση που ακολουθεί, θεωρείται ότι όταν δύο σωματίδια συγκρούονται μεταξύ τους προκύπτει ένα νέο σωματίδιο, του οποίου ο όγκος είναι ίσος με το άθροισμα των όγκων των αρχικών σωματιδίων. Έστω ότι N_{ij}^c είναι

η συχνότητα των συγκρούσεων, δηλαδή ο αριθμός των συγκρούσεων ανά μονάδα όγκου στην μονάδα του χρόνου, μεταξύ σωματιδίων με όγκους v_i και v_j . Αν τα σωματίδια θεωρηθούν σφαιρικά τότε οι δείκτες i, j συνδέονται μονοσήμαντα με τις διαμέτρους των σωματιδίων. Αν N_i και N_j είναι οι συγκεντρώσεις των σωματιδίων με μέγεθος v_i και v_j , αντίστοιχα, τότε η συχνότητα των συγκρούσεων μεταξύ τους είναι (Friedlander, 2000):

$$N_{ij}^c = K(v_i, v_j) N_i N_j \quad (4)$$

Ο συντελεστής $K(v_i, v_j)$ καλείται *συνάρτηση συχνότητας συγκρούσεων (collision frequency function)* ή *συντελεστής συσσωμάτωσης (coagulation kernel)* και έχει μονάδες όγκου ανά μονάδα χρόνου. Η συναρτησιακή σχέση του συντελεστή συσσωμάτωσης εξαρτάται από τον μηχανισμό που προκαλεί τη συσσωμάτωση, δηλαδή τον μηχανισμό που προκαλεί τη σχετική κίνηση μεταξύ των σωματιδίων. Η τιμή του συντελεστή συσσωμάτωσης είναι, γενικά, συνάρτηση του μεγέθους των σωματιδίων και των υδροδυναμικών χαρακτηριστικών της ροής του ρευστού.

3.3.1.1 Brownian συσσωμάτωση

Η κίνηση Brown αποτελεί τον πιο συνηθισμένο μηχανισμό πρόκλησης σχετικής κίνησης μεταξύ σωματιδίων. Ως εκ τούτου, σε πειραματικό και θεωρητικό επίπεδο, η περίπτωση της Brownian συσσωμάτωσης έχει μελετηθεί εκτενέστερα. Το φαινόμενο αυτό, το οποίο μελετήθηκε αρχικά από τον Smoluchowski (1916) και συχνά αναφέρεται ως *θερμική συσσωμάτωση (thermal coagulation)*, είναι σημαντικό για σωματίδια μικρότερα από 1μm, δηλαδή για σωματίδια που διαχέονται εύκολα. Η θεωρία της συσσωμάτωσης περιγράφεται με διαφορετικό τρόπο στις δύο οριακές περιοχές αναφορικά με το μέγεθος των σωματιδίων, δηλαδή τη συνεχή και τη μοριακή περιοχή (βλ. 3.1).

Στη συνεχή περιοχή χρησιμοποιείται ένα απλοποιημένο μοντέλο διάχυσης σύμφωνα με το οποίο ένα ακίνητο, σφαιρικό σωματίδιο όγκου v_i (ή διαμέτρου d_i) βρίσκεται σε ένα άπειρο μέσο, στο οποίο περιέχονται και άλλα ελεύθερα σωματίδια όγκου v_j (ή διαμέτρου d_j). Το πρόβλημα πλέον ισοδυναμεί με τον υπολογισμό του ρυθμού διάχυσης των ελεύθερων σωματιδίων στην επιφάνεια του ακίνητου σωματιδίου, θεωρώντας πως κάθε σύγκρουση οδηγεί σε συσσωμάτωση. Ο συντελεστής συσσωμάτωσης υπολογίζεται, από επίλυση της εξίσωσης διάχυσης υπό την παραδοχή πως ο *συντελεστής διάχυσης των σωματιδίων δεν μεταβάλλεται* καθώς τα σωματίδια πλησιάζουν μεταξύ τους, ως εξής (Drossinos & Housiadas, 2006):

$$K_B(v_i, v_j) = 2\pi(d_i + d_j)(D_i + D_j) \quad (5)$$

Στη σχέση (5), ως D συμβολίζεται ο συντελεστής διάχυσης του σωματιδίου, ο οποίος υπολογίζεται σύμφωνα με τη σχέση (21), η οποία δίνεται παρακάτω.

Στη μοριακή και μεταβατική περιοχή, ο συντελεστής συσσωμάτωσης προκύπτει από την κινητική θεωρία των αερίων, θεωρώντας τις συγκρούσεις μεταξύ των σωματιδίων ως συγκρούσεις μεταξύ σφαιρών, ως εξής (Friedlander, 2000):

$$K_B(v_i, v_j) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/6} \left(\frac{6k_B T}{\rho_p}\right)^{1/2} (v_i^{-1} + v_j^{-1})^{1/2} (v_i^{1/3} + v_j^{1/3})^2 \quad (6)$$

Ο Fuchs (1964) πρότεινε μία γενική σχέση παρεμβολής για τον συντελεστή συσσωμάτωσης σφαιρικών σωματιδίων, κατάλληλη για ολόκληρο το εύρος μεγεθών των σωματιδίων:

$$K_B(d_i, d_j) = 2\pi(d_i + d_j)(D_i + D_j) / \left[\frac{d_i + d_j}{d_i + d_j + 2(g_i^2 + g_j^2)^{1/2}} + \frac{8(D_i + D_j)}{(d_i + d_j)(\bar{c}_i^2 + \bar{c}_j^2)^{1/2}} \right] \quad (7)$$

όπου $\bar{c}_i = \sqrt{8k_B T / (\pi m_i)}$ η μέση ταχύτητα του σωματιδίου, $m_i = \rho_p v_i$ η μάζα του και g_i το λεγόμενο μήκος του Fuchs, το οποίο δίνεται από τη σχέση:

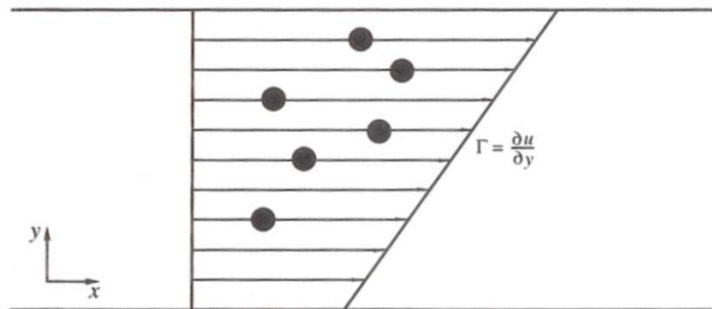
$$g_i = \frac{1}{3d_i l_i} [(d_i + l_i)^3 - (d_i^2 + l_i^2)^{3/2}] - d_i \quad (8)$$

με $l_i = 8D_i / (\pi \bar{c}_i)$ ως τη μέση ελεύθερη διαδρομή του σωματιδίου.

3.3.1.2 Συσσωμάτωση σε στρωτή ροή

Στην περίπτωση στρωτής ροής, οι χωρικές ανομοιογένειες προκαλούν σχετική κίνηση μεταξύ των σωματιδίων (Σχήμα 6), οπότε τα σωματίδια δύνανται να έρθουν σε επαφή και να σχηματίσουν συσσωμάτωματα. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται *συσσωμάτωση σε στρωτή ροή* (*laminar shear coagulation*). Σε συνθήκες ομοιόμορφης διατμητικής ροής με βαθμίδα ταχύτητας $\Gamma = \partial u / \partial y$, κάθετη στη διεύθυνση της ροής (Σχήμα 6), αγνοώντας την κίνηση Brown και υποθέτοντας πως τα σωματίδια δεν επηρεάζουν τις γραμμές ροής, η συνάρτηση συχνότητας συγκρούσεων, όπως έδειξε ο Smoluchowski (1916), δίνεται από τον τύπο (Drossinos & Housiadas, 2006):

$$K_{LS}(d_i, d_j) = \frac{\Gamma}{6} (d_i + d_j)^3 \quad (9)$$



Σχήμα 6: Σχηματική αναπαράσταση του μηχανισμού σύγκρουσης των σωματιδίων, λόγω στρωτής ροής (Seinfeld & Pandis, 2016).

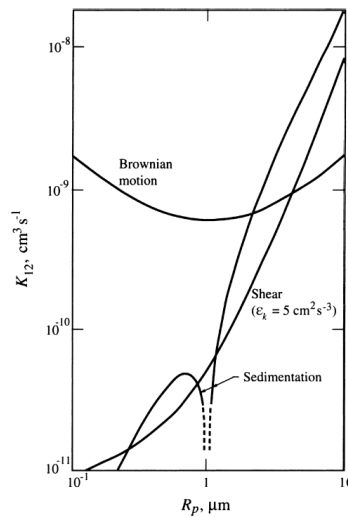
3.3.1.3 Τυρβώδης συσσωμάτωση

Όπως στην περίπτωση της στρωτής ροής, έτσι και στην τυρβώδη ροή, η ύπαρξη βαθμίδων ταχύτητας προκαλεί συσσωμάτωση (*Turbulent Coagulation*). Σε αντίθεση όμως με την προηγούμενη περίπτωση, στη τυρβώδη ροή είναι πολύ δύσκολο να προσδιοριστεί η κατάλληλη βαθμίδα της ταχύτητας. Οι Saffman και Turner (1956) κατέληξαν στη παρακάτω σχέση για τον συντελεστή συσσωμάτωσης λόγω διάτμησης σε τυρβώδη ροή (*turbulent shear coagulation*):

$$K_{TS}(d_i, d_j) = \left(\frac{\pi \varepsilon_k}{120 \nu_g} \right)^{1/2} (d_i + d_j)^3 \quad (10)$$

όπου ε_k είναι ο ρυθμός απώλειας της κινητικής ενέργειας ανά μονάδα μάζας και $\nu_g = \mu_g / \rho_g$ το κινηματικό ιξώδες του ρευστού. Η τυρβώδης συσσωμάτωση λόγω διάτμησης έχει σημαντική επίδραση για σχετικά μεγάλα σωματίδια (με διάμετρο της τάξεως των 5 μm) και για έντονα τυρβώδεις ροές (Seinfeld & Pandis, 2016). Σε τυρβώδεις ροές εκτός από τη διάτμηση, η αδράνεια των σωματιδίων είναι επίσης δυνατό να προκαλέσει συσσωμάτωση. Συγκεκριμένα, σωματίδια με διαφορετικές μάζες που βρίσκονται στην ίδια δίνη έχουν, λόγω αδράνειας, διαφορετικές ταχύτητες και μπορούν να συγκρουστούν μεταξύ τους (*Τυρβώδης Αδρανειακή Συσσωμάτωση - Turbulent Inertial Coagulation*).

Η σχετική συχνότητα των συγκρούσεων σε ένα αερόλυμα, ως συνάρτηση του μεγέθους του δεύτερου σωματιδίου, απεικονίζεται στο Σχήμα 7. Εκτενέστερη ανάλυση αυτού του μηχανισμού, καθώς και άλλων μηχανισμών συσσωμάτωσης λόγω εξωτερικών δυνάμεων (π.χ. βαρυτικές δυνάμεις), μπορεί να βρεθεί στη βιβλιογραφία (Seinfeld & Pandis, 1998; Friedlander, 2000).



Σχήμα 7: Σύγκριση μεταξύ διαφόρων μηχανισμών συσσωμάτωσης για σωματίδιο ακτίνας 1 μm, συναρτήσει της ακτίνας του δεύτερου αλληλεπιδρώντος σωματιδίου (Seinfeld & Pandis, 2016).

3.3.1.4 Συνάθροιση (Agglomeration)

Κατά την προηγούμενη ανάλυση θεωρείται πως κατά την σύγκρουση δύο σωματιδίων, αυτά συσσωματώνονται δημιουργώντας ένα μεγαλύτερο σωματίδιο. Παρά ταύτα, σε ορισμένες εφαρμογές (π.χ. αερόλυμα παραγόμενο από καύση σε μηχανή diesel, σε χυτήριο, από καύση κονιορτοποιημένου άνθρακα κλπ.) (Friedlander, 2000), πειραματικές μετρήσεις και υπολογιστικές προσομοιώσεις καταδεικνύουν περιπτώσεις, όπου τα συγκρουόμενα σωματίδια τείνουν να διατηρούν τη ταυτότητα και τη μορφή τους, δημιουργώντας συμπλέγματα (clusters), τα οποία αποτελούνται από μικρότερα, πρωταρχικά σωματίδια (Colbeck, 1998; Drossinos & Housiadas, 2006). Το μέγεθος των πρωταρχικών σωματιδίων ενδέχεται να είναι από μερικά νανόμετρα έως περίπου 0.1 μm, και το παραγόμενο σύμπλεγμα σωματιδίων της τάξεως 10² nm έως μερικά μικρόμετρα.

Στην περίπτωση των συμπλεγμάτων σωματιδίων, απαιτείται προσεκτική ανάλυση των μορφολογικών τους χαρακτηριστικών, καθώς η μορφολογία τους επηρεάζει σε μεγάλο βαθμό τη μεταφορά και τις θερμικές ιδιότητες των σωματιδίων του αερολύματος. Η μορφολογία ενός μεγάλου συμπλέγματος διαμέτρου d_{agg} , αποτελούμενο από n_{agg} μικρότερα πρωταρχικά σωματίδια (μονομερή) διαμέτρου d_0 , συνήθως χαρακτηρίζεται από τη τιμή της *μορφοκλασματικής διάστασης* (*fractal dimension* ή *Hausdorff dimension*) του συσσωματώματος (Friedlander, 2000):

$$n_{agg} = a \left(\frac{d_{agg}}{d_0} \right)^{d_f} \quad (11)$$

Η μορφοκλασματική διάσταση, d_f ή D_f , αποτελεί μία στατιστική ποσότητα, που εκφράζει τον βαθμό πλήρωσης του χώρου από ένα *μορφοκλασματικό* ή *φράκταλ σωματίδιο*. Εφαρμόζεται στην ανάλυση της μορφολογίας συμπλεγμάτων σωματιδίων τα οποία εμφανίζουν *αυτο-ομοιομορφία*. Η μάζα ενός συμπλέγματος σωματιδίων μπορεί να εκφραστεί ως εξής:

$$m_{agg} = n_{agg} \rho_0 \frac{\pi}{6} d_0^3 \equiv \rho_0 v \quad (12)$$

όπου ρ_0 είναι η πυκνότητα των μονομερών. Η δεύτερη ισότητα της σχέσης (12) ορίζει ως όγκο του συμπλέγματος τη ποσότητα $v = n_{agg} \pi d_0^3 / 6$, δηλαδή το άθροισμα των όγκων των μονομερών. Επίσης, η μάζα ενός συμπλέγματος δύναται να εκφραστεί συναρτήσει του μεγέθους της *ενεργού πυκνότητας*:

$$m_{agg} = \rho_{eff} v_{agg} \quad (13)$$

όπου $v_{agg} = \pi d_{agg}^3 / 6$ είναι ο γεωμετρικός όγκος και ρ_{eff} είναι η *ενεργός πυκνότητα* (*effective density*) του συμπλέγματος σωματιδίων. Η ενεργός πυκνότητα εξαρτάται από τη πυκνότητα και τη διάμετρο των μονομερών του συμπλέγματος, σύμφωνα με τη σχέση:

$$\rho_{eff} = \rho_0 \left(\frac{d_{agg}}{d_0} \right)^{(d_f - 3)} \quad (14)$$

Το μεγαλύτερο μέρος της διαθέσιμης μέχρι στιγμής θεωρητικής ανάλυσης επί της δυναμικής των σωματιδίων λόγω της διαδικασίας της συνάθροισης αφορά την επίδραση της κίνησης Brown στη διαδικασία αυτή. Με βάση τη θεωρητική εργασία του Smoluchowski, ο Brownian συντελεστής συσσωμάτωσης, για τη περίπτωση της μοριακής περιοχής, υπολογίζεται ως εξής (Friedlander, 2000):

$$K_{agg}(v_i, v_j) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{2}{d_f-2}} \left(\frac{6k_B T}{\rho_p}\right)^{1/2} d_0^{(2-6/d_f)} (v_i^{-1} + v_j^{-1})^{1/2} (v_i^{1/d_f} + v_j^{1/d_f})^2 \quad (15)$$

Για συγκρουόμενα σφαιρικά σωματίδια τα οποία συσσωματώνονται σχηματίζοντας ένα μεγαλύτερο σφαιρικό σωματίδιο ($d_f = 3$), η σχέση (15) μεταπίπτει στη σχέση (6). Στη συνεχή περιοχή και για μεγάλο αριθμό μονομερών, ο συντελεστής συσσωμάτωσης βρίσκεται από την εξής σχέση (Friedlander, 2000):

$$K_{agg}(v_i, v_j) = \frac{2k_B T}{3\mu_g} (v_i^{-1/d_f} + v_j^{-1/d_f})(v_i^{1/d_f} + v_j^{1/d_f}) \quad (16)$$

Για $d_f = 3$, η σχέση (16) μεταπίπτει στη σχέση (5). Προς εύρεση του συντελεστή συσσωμάτωσης για όλο το εύρος τιμών του αριθμού Knudsen, δύναται να χρησιμοποιηθεί παρεμβολή μεταξύ των σχέσεων (15) και (16) (βλ. εξ. (7)).

3.3.2 Εξωτερικές διαδικασίες: Διάχυση – Εναπόθεση

Η διάχυση ή η επίδραση εξωτερικών δυνάμεων προκαλούν την κίνηση ενός σωματιδίου, ακόμα και όταν αυτό αιωρείται σε ένα ακίνητο ρευστό. Λόγω αυτής της επίδρασης, το σωματίδιο διαφεύγει από τις γραμμές ροής και μετακινείται ανάμεσα στις διάφορες περιοχές του ρευστού, με τελική συνέπεια την εναπόθεσή του σε κάποια επιφάνεια. Ένα από τα κεντρικότερα ζητούμενα της επιστήμης του αερολύματος είναι ο προσδιορισμός της ροής των σωματιδίων που οδηγούνται στην εναπόθεση. Στη συνέχεια της παραγράφου παρουσιάζονται, εν συντομία, τα στοιχεία της θεωρίας των κυριότερων μηχανισμών εναπόθεσης. Εκτεταμένη ανάλυση της κίνησης ενός σωματιδίου, καθώς και αναλυτικότερη περιγραφή των βημάτων που απαιτούνται για την εξαγωγή των σχέσεων που παρουσιάζονται παρακάτω, μπορεί να βρεθεί σε Hinds (1999), Friedlander (2000) και Drossinos & Housiadas (2006).

3.3.2.1 Βαρυτική καθίζηση (*gravitational settling*)

Η βαρύτητα έχει σαν αποτέλεσμα τα σωματίδια που βρίσκονται σε ένα ρευστό να αποκτήσουν γρήγορα μία ταχύτητα κατά τη διεύθυνση της δύναμης της βαρύτητας. Η ταχύτητα αυτή καλείται *ταχύτητα καθίζησης* και μπορεί να υπολογιστεί από την ισορροπία των δυνάμεων της βαρύτητας και της αντίστασης (οπισθέλκουσα δύναμη) που ασκούνται στο σωματίδιο από το ρευστό (νόμος του Stokes) (Hinds, 1999):

$$v_s = \frac{\rho_p d_p^2 g}{18\mu_g} \quad (17)$$

όπου v_s είναι η ταχύτητα καθίζησης και g η επιτάχυνση της βαρύτητας. Η εξίσωση του Stokes προκύπτει, θεωρώντας το περιβάλλον αέριο ως συνεχές μέσο, καθώς ο συντελεστής τριβής (ή αντίστασης) (*drag coefficient*) υπολογίζεται από την επίλυση των εξισώσεων Navier-Stokes, θέτοντας στην επιφάνεια του σωματιδίου οριακή συνθήκη μη ολίσθησης. Για μικρά σωματίδια όμως, το περιβάλλον αέριο δεν μπορεί να θεωρηθεί πλέον συνεχές μέσο, και επομένως απαιτείται διόρθωση για τη δύναμη αντίστασης που ασκείται στο σωματίδιο. Η διόρθωση αυτή μπορεί να ληφθεί υπόψη με την εισαγωγή στην εξίσωση (17) του συντελεστή *Cunningham* C_C (διόρθωση λόγω ολίσθησης – *slip correction*):

$$v_s = \frac{\rho_p d_p^2 g C_C}{18\mu_g} \quad (18)$$

με $C_C = 1 + Kn[1.17 + 0.53 \exp(-0.78/Kn)]$ (19)

Για σωματίδια διαμέτρου ίσης με 1μm, σε αέρα υπό κανονικές συνθήκες θερμοκρασίας και πίεσης, ισχύει $C_C = 1.15$. Ο συντελεστής C_C μπορεί να αγνοηθεί για σωματίδια με $d_p > 10\mu m$ ($C_C = 1$). Αντίθετα, έχει μεγάλες τιμές για μικρά σωματίδια με $d_p < 1\mu m$ (π.χ. $C_C = 23$ για $d_p = 0.01\mu m$).

Η εξίσωση (18) ισχύει στη *περιοχή Stokes*, δηλαδή για $Re_p < 0.1$, όπου Re_p είναι ο αριθμός Reynolds του σωματιδίου. Με πολύ καλή προσέγγιση όμως, ισχύει και για $Re_p < 1$. Η συνθήκη αυτή ισχύει για τις περισσότερες περιπτώσεις και επομένως η εξίσωση (18) χρησιμοποιείται πολύ συχνά για τον υπολογισμό της ταχύτητας καθίζησης. Παρόλα αυτά έχουν αναπτυχθεί σχέσεις και για κίνηση του σωματιδίου εκτός της περιοχής Stokes (βλ. Hinds 1999). Η επίδραση της βαρυτικής καθίζησης, όπως προκύπτει από τη εξίσωση (18), είναι σημαντική για μεγάλα σωματίδια, καθώς είναι ανάλογη του τετραγώνου της διαμέτρου των σωματιδίων.

3.3.2.2 Διάχυση

Τα σωματίδια που αιωρούνται σε ένα ρευστό εκτελούν μια τυχαία κίνηση, ως αποτέλεσμα του συνεχούς βομβαρδισμού τους από τα μόρια του ρευστού (κίνηση Brown). Το μακροσκοπικό αποτέλεσμα της κίνησης Brown, που είναι γνωστό ως διάχυση, έχει ως συνέπεια τη μετακίνηση των σωματιδίων από τις περιοχές με μεγαλύτερη συγκέντρωση στις περιοχές με μικρότερη συγκέντρωση. Η ροή των σωματιδίων (*αριθμός σωματιδίων/m²/s*) λόγω διάχυσης υπολογίζεται από το πρώτο νόμο του Fick:

$$J = -D_p \nabla N \quad (20)$$

όπου N η κατά αριθμό συγκέντρωση των σωματιδίων και D_p ο συντελεστής διάχυσης του σωματιδίου. Ο συντελεστής D_p δίνεται από τη σχέση των Stokes-Einstein, εισάγοντας,

επιπλέον, το συντελεστή Cunningham C_C , ώστε να ληφθεί υπόψη η διόρθωση της δύναμης αντίστασης, λόγω ολίσθησης (Hinds 1999):

$$D_p = \frac{k_B T}{3\pi\mu_g d_p} C_C \quad (21)$$

όπου μ_g είναι το δυναμικό ιξώδες του περιβάλλοντος αερίου. Η επίδραση της διάχυσης είναι σημαντικότερη όσο μικρότερα είναι τα σωματίδια, διότι όπως φαίνεται από την εξίσωση (21) ο συντελεστής διάχυσης είναι αντιστρόφως ανάλογος με τη διάμετρο του σωματιδίου.

3.3.2.3 Θερμοφόριση

Σε ένα σωματίδιο που αιωρείται σε ένα ρευστό στο οποίο υπάρχει βαθμίδα θερμοκρασίας, ασκείται στατιστικά μεγαλύτερη δύναμη στη «θερμή» πλευρά του, λόγω της μεγαλύτερης ενέργειας και ορμής των μορίων του ρευστού στην πλευρά αυτή. Το μακροσκοπικό αποτέλεσμα αυτής της δύναμης είναι η κίνηση του σωματιδίου από τις θερμότερες στις ψυχρότερες περιοχές. Το φαινόμενο αυτό είναι γνωστό ως *θερμοφόριση* (*thermophoresis*). Η *ταχύτητα θερμοφόρισης* (*thermophoretic velocity*) υπολογίζεται από τη τοπική βαθμίδα θερμοκρασίας στο ρευστό, σύμφωνα με τη παρακάτω σχέση:

$$v_{th} = -K_{th} v_g \frac{\nabla T}{T} \quad (22)$$

όπου K_{th} είναι η σταθερά θερμοφόρισης, που εξαρτάται από τις ιδιότητες του αερίου και του σωματιδίου. Η σταθερά θερμοφόρισης στις δύο οριακές περιοχές του αριθμού Knudsen δίνεται από τις παρακάτω σχέσεις (Fuchs 1964):

$$K_{th} = \frac{3}{2} \frac{k/k_p}{(1+2k/k_p)}, \quad \text{για } Kn \ll 1 \quad (23)$$

$$K_{th} = \frac{3}{4(1+\pi/8)}, \quad \text{για } Kn \gg 1 \quad (24)$$

όπου k , k_p οι συντελεστές θερμικής αγωγιμότητας φέροντος αερίου και σωματιδίου αντίστοιχα. Οι Talbot et al. (1980) πρότειναν, για το συντελεστή θερμοφόρισης, μια σχέση παρεμβολής, κατάλληλη για ολόκληρο το εύρος μεγεθών των σωματιδίων που συμπίπτει με τις παραπάνω σχέσεις στις δύο οριακές περιοχές, και επιπλέον είναι επιβεβαιωμένη πειραματικά:

$$K_{th} = \frac{2.294 C_C (k/k_p + 2.2Kn)}{(1+3.483Kn)(1+2k/k_p+4.4Kn)} \quad (25)$$

3.4 Η Γενική Εξίσωση της Δυναμικής του Αερολύματος (ΓΕΔΑ)

Οι διάφορες φυσικές διαδικασίες που περιγράφηκαν προηγουμένως έχουν ως αποτέλεσμα τη μεταβολή της συνάρτησης κατανομής μεγέθους ενός αερολύματος στο χώρο και στο χρόνο. Στην παράγραφο αυτή παρουσιάζεται η μαθηματική περιγραφή της επίδρασης των φυσικών διαδικασιών που παρουσιάστηκαν προηγουμένως στην εξέλιξη της συνάρτησης πυκνότητας κατανομής του μεγέθους ενός αερολύματος. Αρχικά θα περιγραφεί η χρονική εξέλιξη της συνάρτησης κατανομής λόγω της επίδρασης των εσωτερικών διαδικασιών που μελετώνται, δηλαδή της συσσωμάτωσης – συνάθροισης, αμελώντας τη μεταφορά, τη διάχυση και τις εξωτερικές δυνάμεις (στατικό αερόλυμα). Στην συνέχεια θα παρουσιαστεί η *Γενική Εξίσωση της Δυναμικής του Αερολύματος – ΓΕΔΑ (General Dynamic Equation – GDE)* (ή *εξίσωση ισορροπίας πληθυσμού – population balance equation, PBE*) (Friedlander 2000), δηλαδή, της εξίσωσης που περιγράφει την εξέλιξη της συνάρτησης κατανομής μεγέθους ενός αερολύματος στον χώρο και στον χρόνο λόγω, τόσο των εξωτερικών, όσο και των εσωτερικών διαδικασιών. Σημειώνεται, ότι η ΓΕΔΑ είναι η βασική εξίσωση της επιστήμης του αερολύματος και η επίλυση της αποτελεί τον κεντρικό στόχο πολλών σύγχρονων εφαρμογών.

3.4.1 Συσσωμάτωση

Η εξέλιξη της συνάρτησης κατανομής ενός αερολύματος μελετήθηκε αρχικά από τον Smolukowski στις αρχές του προηγούμενου αιώνα, λαμβάνοντας υπόψη μόνο την επίδραση της συσσωμάτωσης (Smolukowski, 1916). Σύμφωνα με αυτή την ανάλυση, η χρονική μεταβολή της διακριτής συνάρτησης κατανομής μεγέθους ενός αερολύματος, λόγω συσσωμάτωσης, δίνεται από την παρακάτω σχέση:

$$\frac{dn_k}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} K(v_i, v_j) n_i n_j - n_k \sum_{i=1}^{\infty} K(v_i, v_k) n_i \quad (26)$$

Ο πρώτος όρος στο δεύτερο μέλος της παραπάνω εξίσωσης δίνει το ρυθμό, με τον οποίο σχηματίζονται σωματίδια που αποτελούνται από k υπομονάδες (μόρια), λόγω των συγκρούσεων μικρότερων σωματιδίων, δηλαδή σωματιδίων που αποτελούνται από i και $k - i$ υπομονάδες. Ο συντελεστής $1/2$ υπάρχει για την αποφυγή της διπλής πρόσθεσης των συγκρούσεων. Ο δεύτερος όρος δίνει τον ρυθμό, με τον οποίο ο αριθμός των σωματιδίων που αποτελούνται από k υπομονάδες μειώνεται, εξαιτίας της αύξησης του μεγέθους τους που προκαλείται από τις συγκρούσεις τους με τα υπόλοιπα σωματίδια. Η ανάλυση του Smolukowski περιλάμβανε Brownian συσσωμάτωση και συσσωμάτωση, λόγω στρωτής ροής. Παρά ταύτα, όλοι οι μηχανισμοί συσσωμάτωσης μπορούν να περιγραφούν με τον ίδιο τρόπο, αθροίζοντας κατάλληλα τους αντίστοιχους συντελεστές συσσωμάτωσης.

Αν και η σχέση (26) περιγράφει σωστά την εξέλιξη της συσσωμάτωσης, δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί πρακτικά, λόγω του τεράστιου εύρους του k . Για αυτό τον λόγο, όπως έχει ήδη ειπωθεί, χρησιμοποιείται συνήθως η συνεχής συνάρτηση πυκνότητας κατανομής του

μεγέθους. Η εξίσωση της συσσωμάτωσης για τη συνεχή συνάρτηση κατανομής γράφεται ως εξής (Friedlander, 2000; Seinfeld & Pandis, 2016):

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \int_0^v K(\tilde{v}, v-\tilde{v}) n(\tilde{v}, t) n(v-\tilde{v}, t) d\tilde{v} - n(v,t) \int_0^\infty K(v, \tilde{v}) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \quad (27)$$

Όπως και στην περίπτωση της διακριτής κατανομής, έτσι και στην εξίσωση (27), ο πρώτος όρος στο δεύτερο μέλος δίνει τον ρυθμό σχηματισμού σωματιδίων όγκου v από τις συγκρούσεις μεταξύ μικρότερων σωματιδίων όγκων \tilde{v} και $v-\tilde{v}$, ενώ ο δεύτερος όρος δίνει τον ρυθμό με τον οποίο μειώνονται τα σωματίδια όγκου v , λόγω των συγκρούσεων τους με τα υπόλοιπα σωματίδια του αερολύματος.

3.4.2 Συνολική μεταβολή λόγω εσωτερικών διαδικασιών

Η συνολική χρονική μεταβολή της συνάρτησης κατανομής μεγέθους των σωματιδίων, λόγω εσωτερικών διαδικασιών, προκύπτει λαμβάνοντας υπόψη τη συνεισφορά όλων των εσωτερικών διαδικασιών (συσσωμάτωση, πυρηνοποίηση, συμπύκνωση – εξάτμιση κλπ.). Στα πλαίσια της παρούσας εργασίας, μόνο ο μηχανισμός της συσσωμάτωσης λαμβάνεται υπόψη. Επομένως, η συνολική χρονική μεταβολή της συνάρτησης κατανομής μεγέθους των σωματιδίων, λόγω εσωτερικών διαδικασιών, προκύπτει:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{\text{coag}} \quad (28)$$

3.4.3 Μεταφορά – Διάχυση

Έως τώρα παρουσιάστηκε η εξίσωση που περιγράφει τη δυναμική του αερολύματος υπό την επίδραση της συσσωμάτωσης. Η κίνηση του φέροντος αερίου, η διάχυση και οι εξωτερικές δυνάμεις μεταβάλλουν τις συγκεντρώσεις, και άρα τη συνάρτηση κατανομής μεγέθους ενός αερολύματος στο χώρο και στο χρόνο. Θεωρώντας ένα ρευστό με διάνυσμα ταχύτητας \mathbf{v} που φέρει σωματίδια τα οποία εκτελούν κίνηση Brown, η εξίσωση συναγωγής – διάχυσης του αερολύματος προκύπτει από το ισοζύγιο του αριθμού των σωματιδίων σε ένα στοιχειώδη όγκο του χώρου (Friedlander, 2000):

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\mathbf{v}) = \nabla \mathcal{D}_p \nabla n \quad (29)$$

Η ταχύτητα του ρευστού στην παραπάνω εξίσωση θεωρείται γενικά γνωστή και μπορεί να προσδιοριστεί, για παράδειγμα από την ανεξάρτητη επίλυση των εξισώσεων Navier-Stokes, υποθέτοντας ότι τα σωματίδια δεν επηρεάζουν τη ροή (σύστημα μονής σύζευξης). Η επίδραση των εξωτερικών δυνάμεων εισάγεται στην παραπάνω εξίσωση, χρησιμοποιώντας το διάνυσμα της αντίστοιχης ταχύτητας ολίσθησης (drift velocity) \mathbf{c} :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot [n(\mathbf{v} + \mathbf{c})] = \nabla \mathcal{D}_p \nabla n \quad (30)$$

3.4.4 Γενική Εξίσωση της Δυναμικής του Αερολύματος

Εισάγοντας στην εξίσωση (30) τους όρους της εξίσωσης (28), δηλαδή των εσωτερικών διαδικασιών που λαμβάνονται υπόψη, προκύπτει τελικά η ΓΕΔΑ:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot [n(\mathbf{v} + \mathbf{c})] = \nabla \mathcal{D}_p \nabla n + \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{coag} \quad (31)$$

Όπως έχει ήδη ειπωθεί, η εξίσωση αυτή είναι θεμελιώδης στην επιστήμη του αερολύματος.

3.5 Αριθμητικές μέθοδοι

Η επίλυση της ΓΕΔΑ είναι συχνά ο κεντρικός στόχος στις διάφορες εφαρμογές της τεχνολογίας και της επιστήμης του αερολύματος. Η εξίσωση αυτή είναι μια ολοκληρωτική – διαφορική εξίσωση, για την οποία αναλυτικές λύσεις υπάρχουν μόνο σε περιορισμένες, ιδεατές περιπτώσεις (Seinfeld & Pandis, 2016). Στη συντριπτική πλειοψηφία των εφαρμογών η ΓΕΔΑ είναι αναγκαίο να επιλυθεί αριθμητικά και επιπλέον, λόγω της ύπαρξης πολύπλοκων, πολυδιάστατων ροών, πρέπει συχνά η επίλυση της να συνδυάζεται με υπολογισμούς ρευστομηχανικής (CFD).

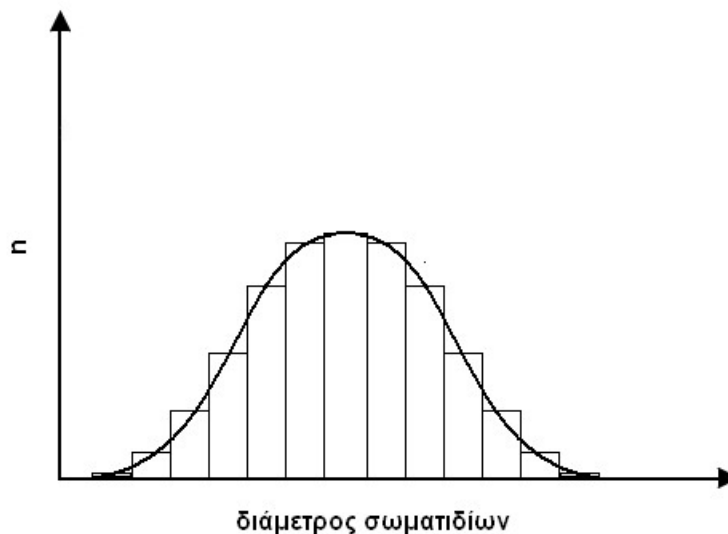
Η αριθμητική επίλυση της πλήρους ΓΕΔΑ χαρακτηρίζεται από μεγάλες δυσκολίες. Ακόμα και στην περίπτωση στατικού αερολύματος, όπου δεν υπάρχει ροή (εξ. (28)), η αριθμητική επίλυση παρουσιάζει σημαντικές δυσκολίες. Για παράδειγμα, ο όρος της συμπύκνωσης κάνει την ΓΕΔΑ υπερβολική, με τα γνωστά προβλήματα αριθμητικής διάχυσης (*numerical diffusion*) και αστάθειας. Στην περίπτωση όπου οι εσωτερικές διαδικασίες του αερολύματος λαμβάνουν χώρα ταυτόχρονα με μεταφορά και διάχυση, πρέπει να αντιμετωπιστεί μια επιπλέον σημαντική δυσκολία, λόγω του μεγάλου εύρους των χρονικών σταθερών των διάφορων διαδικασιών (*stiffness*). Συγκεκριμένα, οι χρονικές σταθερές ορισμένων εσωτερικών διαδικασιών είναι συνήθως τάξεις μεγέθους μικρότερες από αυτές της μεταφοράς ή της διάχυσης των σωματιδίων. Για την ακριβή επίλυση σε αυτές τις περιπτώσεις απαιτούνται πολύ μικρά χωρικά και χρονικά βήματα, επιβαρύνοντας σημαντικά το υπολογιστικό κόστος. Επομένως, ο τρόπος με τον οποίο η επιπλέον ανεξάρτητη μεταβλητή, δηλαδή το μέγεθος των σωματιδίων, αντιμετωπίζεται αριθμητικά, ή ισοδύναμα ο τρόπος αριθμητικής περιγραφής της συνάρτησης κατανομής του μεγέθους, αποτελεί κρίσιμη παράμετρο για την επιτυχή αριθμητική επίλυση της ΓΕΔΑ. Το ζητούμενο είναι το μέγεθος των σωματιδίων να αντιμετωπίζεται αριθμητικά με τέτοιο τρόπο, ώστε να επιτυγχάνεται ικανοποιητική ακρίβεια, διατηρώντας, ωστόσο, τον υπολογιστικό χρόνο σε ανεκτά επίπεδα.

3.5.1 Αριθμητική περιγραφή συνάρτησης κατανομής μεγέθους

Στην περίπτωση ενός στατικού αερολύματος, δηλαδή ενός αερολύματος που είναι ομογενές στο χώρο, οι όροι διάχυσης - μεταφοράς παραλείπονται και κατά συνέπεια η ΓΕΔΑ (εξ. (31)) γράφεται όπως η εξίσωση (28) (για την περίπτωση όπου μόνο η συσσωμάτωση λαμβάνεται υπόψη). Οι μέθοδοι για την αριθμητική επίλυση της δυναμικής του αερολύματος, που έχουν αναπτυχθεί έως τώρα, μπορούν να διακριθούν σε κατηγορίες, σύμφωνα με τη μέθοδο που χρησιμοποιείται για την αριθμητική αναπαράσταση της συνάρτησης κατανομής μεγέθους. Οι δύο βασικότερες κατηγορίες που χρησιμοποιούνται ευρύτερα είναι οι μέθοδοι των ροπών (*moments methods*) και οι τμηματικές μέθοδοι (*sectional methods*). Τα βασικά στοιχεία της τμηματικής μεθόδου παρουσιάζονται στη συνέχεια, καθώς σε αυτή τη κατηγορία ανήκει η μεθοδολογία που προτείνεται στην παρούσα εργασία.

Οι τμηματικές μέθοδοι (Gelbard et al., 1980) βασίζονται στη διακριτοποίηση του μεγέθους των σωματιδίων σε τμήματα (*sections* ή *bins*). Η συνεχής συνάρτηση κατανομής μεγέθους προσεγγίζεται από ένα ιστόγραμμα που αποτελείται από πεπερασμένο αριθμό τμημάτων (Σχήμα 8), για κάθε ένα από τα οποία, η ΓΕΔΑ επιλύεται χωριστά. Όλα τα σωματίδια σε ένα τμήμα θεωρείται ότι έχουν το ίδιο μέγεθος, το οποίο αποτελεί το χαρακτηριστικό μέγεθος του τμήματος. Η ακρίβεια των υπολογισμών εξαρτάται από τον αριθμό των τμημάτων που χρησιμοποιούνται για τη διακριτοποίηση του μεγέθους των σωματιδίων.

Στην αρχική εκδοχή των τμηματικών μεθόδων, το πλέγμα διακριτοποίησης του μεγέθους των σωματιδίων παραμένει σταθερό κατά τη διάρκεια ενός υπολογισμού (*fixed* – ή *stationary* – *particle size grid*). Σε αυτή την περίπτωση, οι διάφορες εσωτερικές διαδικασίες προκαλούν τη μεταφορά σωματιδίων μεταξύ των διάφορων τμημάτων της κατανομής.



Σχήμα 8: Τμηματική αναπαράσταση συνάρτησης κατανομής μεγέθους σωματιδίων.

Η χρονική εξέλιξη της συνάρτησης πυκνότητας κατανομής λόγω συσσωμάτωσης μπορεί να περιγραφεί από μία τροποποιημένη εξίσωση Smoluchowski, κατάλληλη για την τμηματική περιγραφή του μεγέθους των σωματιδίων. Η γενική μορφή μιας τέτοιας εξίσωσης δίνεται από την ακόλουθη σχέση (Kumar & Ramkrishna, 1997; Debry & Sportisse, 2007):

$$\left(\frac{dN_i}{dt}\right)_{coag} = \sum_{j=1}^i \sum_{k=1}^j \alpha_{i,j,k} N_j N_k - N_j \sum_{j=1}^{K_{max}} \beta_{i,j} N_j \quad (32)$$

όπου N_i είναι η συγκέντρωση των σωματιδίων του τμήματος i και K_{max} ο συνολικός αριθμός των τμημάτων που χρησιμοποιούνται για τη διακριτοποίηση του μεγέθους των σωματιδίων. Στη σχέση (32), όπως και στην περίπτωση διακριτής ή συνεχούς κατανομής (εξίσωση (26) ή (27), αντίστοιχα) ο πρώτος όρος στο δεύτερο μέλος δίνει τον ρυθμό με τον οποίο προστίθενται σωματίδια στο τμήμα i , λόγω των συγκρούσεων μεταξύ μικρότερων σωματιδίων, ενώ ο δεύτερος όρος δίνει τον ρυθμό με τον οποίο αφαιρούνται σωματίδια από το τμήμα i , εξαιτίας της αύξησης του μεγέθους τους, λόγω σύγκρουσης με τα υπόλοιπα σωματίδια της κατανομής.

Υπάρχουν κι άλλες μέθοδοι για την αριθμητική περιγραφή της συνάρτησης κατανομής. Τέτοιες είναι η *διακριτή μέθοδος (discrete method)* και η *μέθοδος μονοδιασπαρμένης κατανομής (monodisperse method)*. Η *μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων (finite elements method)* έχει επίσης χρησιμοποιηθεί για την αριθμητική επίλυση της δυναμικής του αερολύματος.

Οι τμηματικές μέθοδοι προσφέρουν περισσότερους βαθμούς ελευθερίας και μπορούν άμεσα να περιγράψουν τυχαίες κατανομές μεγέθους, εξασφαλίζοντας κατά αυτόν τον τρόπο μεγαλύτερη γενικότητα εφαρμογής. Στις τμηματικές μεθόδους, η ΓΕΔΑ επιλύεται για κάθε τμήμα, ή ισοδύναμα ο αριθμός των εξισώσεων που επιλύονται είναι ίσος με τον αριθμό των τμημάτων που χρησιμοποιούνται για τη διακριτοποίηση του μεγέθους των σωματιδίων. Ανάλογα και με τις κύριες φυσικές εσωτερικές διαδικασίες που εξετάζονται σε συνδυασμό και με τη μέθοδο για την αριθμητική επίλυση των εσωτερικών διαδικασιών και ειδικότερα της συμπύκνωσης, μπορεί να απαιτηθεί πολύ μεγάλος αριθμός τμημάτων για να επιτευχθεί ικανοποιητική ακρίβεια.

3.5.2 Αριθμητική επίλυση ροής αερολύματος

Το πρόβλημα της αριθμητικής επίλυσης πολυδιάστατης ροής αερολύματος είναι ισοδύναμο με την αριθμητική επίλυση της ΓΕΔΑ (εξ. (31)), δηλαδή, επιπλέον των εσωτερικών διαδικασιών πρέπει να ληφθούν υπόψη η μεταφορά και η διάχυση των σωματιδίων (δεύτερος όρος στο πρώτο μέλος και πρώτος όρος στο δεύτερο μέλος της εξίσωσης (31) αντίστοιχα). Για την επίλυση της πλήρους ΓΕΔΑ είναι απαραίτητη η γνώση των πεδίων ταχύτητας και θερμοκρασίας, τα οποία κατά συνέπεια, πρέπει επίσης να υπολογίζονται.

Τα μοντέλα που χρησιμοποιούνται για την αριθμητική επίλυση ροών αερολύματος μπορούν να διακριθούν σε δύο μεγάλες κατηγορίες, ανάλογα με το σύστημα αναφοράς που χρησιμοποιείται για την επίλυση της σωματιδιακής φάσης. Οι δύο αυτές κατηγορίες είναι α) τα μοντέλα που βασίζονται σε Eulerian προσέγγιση και β) τα μοντέλα που βασίζονται σε Lagrangian προσέγγιση. Περαιτέρω διάκριση των μοντέλων γίνεται με βάση τη μέθοδο που χρησιμοποιείται για την αριθμητική περιγραφή της συνάρτησης κατανομής του μεγέθους των σωματιδίων. Έτσι, υπάρχουν μοντέλα που χρησιμοποιούν την τμηματική μέθοδο (*sectional models*) ή την μέθοδο των ροπών (*moment models*). Η διακριτή κατανομή (*discrete models*) καθώς και η μονοδιεσπαρμένη κατανομή (*monodisperse models*) επίσης χρησιμοποιούνται σε μοντέλα επίλυσης ροής αερολύματος.

Η προσέγγιση κατά Lagrange στηρίζεται στον υπολογισμό των τροχιών των σωματιδίων και την επίλυση της δυναμικής του αερολύματος πάνω σε αυτές, η οποία με αυτό τον τρόπο, καταλήγει στην ολοκλήρωση των διαφορικών εξισώσεων κίνησης των σωματιδίων. Λόγω της στατιστικής φύσης φαινομένων, όπως για παράδειγμα της διάχυσης, απαιτείται πολύ μεγάλος αριθμός τροχιών για την εξαγωγή αξιόπιστων και μεγάλου εύρους αποτελεσμάτων (Longest & Xi, 2007). Αυτό έχει ως αποτέλεσμα την αύξηση του υπολογιστικού κόστους σε μεγάλο βαθμό. Για τον λόγο αυτόν, η σωματιδιακή φάση θεωρείται συχνά ότι ακολουθεί τις γραμμές ροής του φέροντος αερίου (ημι-Lagrangian μοντέλα). Με αυτό τον τρόπο αποφεύγεται η στατιστική ανάλυση των τροχιών των σωματιδίων. Η επίλυση πραγματοποιείται σε Lagrangian σύστημα αναφοράς, το οποίο κινείται με ταχύτητα ίση με την ταχύτητα ενός στοιχείου του ρευστού («fluid particle»), υπολογίζοντας τη μεταβολή της συνάρτησης κατανομής του μεγέθους λόγω των διάφορων εσωτερικών διαδικασιών της δυναμικής του αερολύματος (π.χ. Hagmeijer et al., 2005). Οι διαφορικές εξισώσεις που προκύπτουν είναι αρκετά απλούστερες από τη ΓΕΔΑ. Καθώς τα υπολογιστικά πλέγματα μπορούν να κινούνται, τα Lagrangian μοντέλα δεν παρουσιάζουν το πρόβλημα της αριθμητικής διάχυσης και μπορούν να αντιμετωπίσουν απότομες χωρικές μεταβολές με μεγάλη ακρίβεια. Επιπλέον αποφεύγεται η αντιστροφή μεγάλων πινάκων, που συνήθως προκύπτουν στα πλαίσια Eulerian προσέγγισης, μειώνοντας κατά αυτόν τον τρόπο το υπολογιστικό κόστος (Hagmeijer et al. 2005). Η εφαρμογή τους σε αντιδραστήρες αερολύματος στρωτής ροής για τη σύνθεση νανοσωματιδίων (π.χ. Johannessen et al., 2000), καταδεικνύει τη χρησιμότητά τους, καθώς είναι δυνατή η ακριβής προσομοίωση τέτοιων εφαρμογών με σχετικά μικρό υπολογιστικό κόστος. Παρά ταύτα, τέτοιες προσεγγίσεις δεν μπορούν να αντιμετωπίσουν ελλειπτικές ροές που περιλαμβάνουν διάχυση, ανακυκλοφορία του ρευστού ή περιδινήσεις και γενικά τυρβώδεις ροές, περιορίζοντας έτσι σημαντικά το εύρος εφαρμογής των ημι-Lagrangian μοντέλων.

4. Προτεινόμενο μοντέλο

Στο κεφάλαιο αυτό περιγράφεται η μεθοδολογία που αναπτύχθηκε στα πλαίσια της παρούσας εργασίας για την αριθμητική επίλυση της Γενικής Εξίσωσης της Δυναμικής του Αερολύματος (ΓΕΔΑ) και την προσομοίωση μονοδιάστατων ροών αερολύματος. Η προτεινόμενη μεθοδολογία χρησιμοποιεί την τμηματική μέθοδο για την αριθμητική περιγραφή της συνάρτησης κατανομής του μεγέθους των σωματιδίων και στηρίζεται σε ημι-Lagrangian σύστημα αναφοράς.

Στο πρώτο μέρος του κεφαλαίου παρουσιάζονται οι επιμέρους μέθοδοι επίλυσης των δυναμικών διαδικασιών του αερολύματος. Στη συνέχεια περιγράφεται ο συνολικός αλγόριθμος με τον οποίο επιλύεται η ροή του αερολύματος. Στο τελευταίο μέρος του κεφαλαίου γίνεται η πιστοποίηση και η αξιολόγηση των μεθόδων που αναπτύχθηκαν. Αρχικά, πραγματοποιείται σύγκριση με αναλυτικές λύσεις της ΓΕΔΑ, διαθέσιμες για την περίπτωση στατικού αερολύματος. Στη συνέχεια παρουσιάζεται η πιστοποίηση του συνολικού αλγορίθμου επίλυσης της ροής του αερολύματος. Για τον σκοπό αυτόν, πραγματοποιήθηκε σύγκριση με πειραματικά δεδομένα, στα οποία η ροή χαρακτηρίζεται από συσσωμάτωση – συνάθροιση μη-σφαιρικών σωματιδίων.

4.1 Μέθοδοι επίλυσης εσωτερικών διαδικασιών

4.1.1 Διακριτοποίηση μεγέθους σωματιδίων

Όπως έχει ήδη ειπωθεί, για την αριθμητική περιγραφή της συνάρτησης κατανομής του μεγέθους των σωματιδίων χρησιμοποιείται η τμηματική μέθοδος. Το πλέγμα, στο οποίο διακριτοποιείται το μέγεθος των σωματιδίων, ορίζεται στην αρχή των υπολογισμών και παραμένει σταθερό κατά τη διάρκεια τους. Λόγω του πολύ μεγάλου εύρους στο οποίο εκτείνεται το μέγεθος των σωματιδίων (έως και μερικές τάξεις μεγέθους), η διακριτοποίηση γίνεται χρησιμοποιώντας λογαριθμική κλίμακα. Συγκεκριμένα, ο λογάριθμος της διαμέτρου διακριτοποιείται σε $K_{max}+1$ σημεία, τα οποία ισαπέχουν μεταξύ τους κατά λ. Κατά συνέπεια, η μεταβολή της διαμέτρου των σωματιδίων στο πλέγμα είναι γεωμετρική με λόγο ίσο με λ:

$$dl_i = dl_{min} \lambda^{i-1}, \quad i=1,2,\dots, K_{max}+1 \quad (33)$$

$$\lambda = 10^{\frac{\log_{10}(dl_{max}/dl_{min})}{K_{max}}} \quad (34)$$

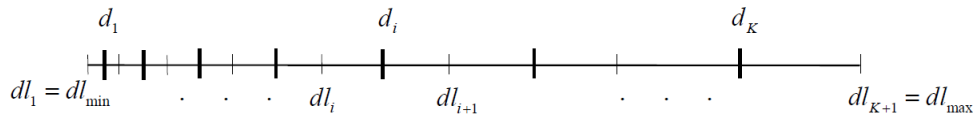
όπου, dl_{min} και dl_{max} είναι το ελάχιστο και το μέγιστο όριο του πλέγματος του μεγέθους των σωματιδίων, αντίστοιχα, και K_{max} ο συνολικός αριθμός των τμημάτων που χρησιμοποιούνται για τη διακριτοποίηση του μεγέθους των σωματιδίων. Στο Σχήμα 9 απεικονίζεται η μορφή του πλέγματος που χρησιμοποιείται για τη διακριτοποίηση του μεγέθους των σωματιδίων. Κάθε τμήμα της κατανομής i ορίζεται από τα όρια του, dl_i και dl_{i+1} . Η τιμή της πυκνότητας της συνάρτησης κατανομής n_i θεωρείται ότι δεν μεταβάλλεται στο τμήμα i . Επομένως, η κατά αριθμό συγκέντρωση των σωματιδίων N_i στο τμήμα αυτό,

καθώς και η ολική συγκέντρωση των σωματιδίων N_{total} , προσεγγίζονται ως ακολούθως (βλ. Σχήμα 8, Κεφ. 3):

$$N_i = n_i \Delta d_i \quad (35)$$

$$N_{total} = \sum_{i=1}^K N_i = \sum_{i=1}^K n_i \Delta d_i \quad (36)$$

όπου, $\Delta d_i = dl_{i+1} - dl_i$ είναι το εύρος του τμήματος i .



Σχήμα 9: Η μορφή του πλέγματος που χρησιμοποιείται για τη διακριτοποίηση του μεγέθους των σωματιδίων.

Όλα τα σωματίδια που ανήκουν στο τμήμα i , θεωρείται ότι έχουν την ίδια διάμετρο d_i , η οποία λαμβάνεται ίση με τον αριθμητικό μέσο των διαμέτρων των ορίων του τμήματος. Η διάμετρος αυτή αποτελεί το χαρακτηριστικό μέγεθος των σωματιδίων του τμήματος.

4.1.2 Συσσωμάτωση – Συνάθροιση

Η διαδικασία της συσσωμάτωσης, δηλαδή της σύγκρουσης μεταξύ δύο σωματιδίων και σχηματισμού ενός νέου, οδηγεί στη μείωση του ολικού αριθμού των σωματιδίων και στην ταυτόχρονη αύξηση του μεγέθους τους. Σημειώνεται, ότι κατά τη σύγκρουση δύο σωματιδίων θεωρείται ότι ο συνολικός τους όγκος διατηρείται. Έτσι, στα πλαίσια τμηματικής περιγραφής του μεγέθους, ο όγκος του σωματιδίου που προκύπτει από τη σύγκρουση ενός σωματιδίου του τμήματος k , με ένα σωματίδιο του τμήματος j είναι:

$$V_{kj} = V_k + V_j \quad (37)$$

όπου, v είναι ο όγκος του σωματιδίου. Συνεπώς, κατά τη συσσωμάτωση το μέγεθος των σωματιδίων της κατανομής αυξάνεται, ενώ ο ολικός τους όγκος διατηρείται σταθερός.

Για την επίλυση της συσσωμάτωσης χρησιμοποιείται το ημι-πεπλεγμένο (semi-implicit) αριθμητικό σχήμα που προτάθηκε από τους Jacobson et al. (1994). Σύμφωνα με το σχήμα αυτό, η συγκέντρωση του αριθμού των σωματιδίων στο τμήμα i της κατανομής, στο τέλος του χρονικού διαστήματος Δt , δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

$$N_i^{\Delta t} = \frac{1}{v_i} \frac{v_i N_i^0 + \Delta t \sum_{j=1}^i \left\{ \sum_{k=1}^{i-1} f_{k,j,i} K(d_k, d_j) v_k N_k^{\Delta t} N_j^0 \right\}}{1 + \Delta t \sum_{j=1}^{K_{max}} (1 - f_{i,j,i}) K(d_i, d_j) N_j^0} \quad (38)$$

Η συνάρτηση πυκνότητας κατανομής μεγέθους των σωματιδίων συνδέεται με τη συγκέντρωση των σωματιδίων μέσω της εξίσωσης (35), επομένως η συνάρτηση πυκνότητας κατανομής, στο τέλος του χρονικού διαστήματος Δt , δίνεται ως ακολούθως:

$$n_i^{\Delta t} = \frac{N_i^{\Delta t}}{\Delta d_i} \quad (39)$$

Η εξίσωση (38) είναι μία ειδική περίπτωση της γενικής μορφής της εξίσωσης της συσσωμάτωσης για τη τμηματική μέθοδο που παρουσιάστηκε στην παράγραφο 3.5.1 (εξ. (32), διακριτοποιημένη ως προς το χρόνο), που προκύπτει με κατάλληλη επιλογή των συντελεστών $\alpha_{i,j,k}$ και $\beta_{i,j}$.

Οι συντελεστές συσσωμάτωσης $K(d_i, d_j)$ υπολογίζονται σε όλο το εύρος μεγεθών των σωματιδίων-συμπλεγμάτων, βάσει του συντελεστή για Brownian συσσωμάτωση στη συνεχή περιοχή και για μεγάλο αριθμό μονομερών (εξ. (16)), αξιοποιώντας τον τύπο παρεμβολής κατά Fuchs (βλ. εξ. (7), Κεφ. 3):

$$K(d_i, d_j) = \frac{2k_B T}{3\mu_g} (v_i^{-1/d_f} + v_j^{-1/d_f})(v_i^{1/d_f} + v_j^{1/d_f}) / \left[\frac{d_i + d_j}{d_i + d_j + 2(g_i^2 + g_j^2)^{1/2}} + \frac{8(D_i + D_j)}{(d_i + d_j)(\bar{c}_i^{-2} + \bar{c}_j^{-2})^{1/2}} \right] \quad (40)$$

Στην εξίσωση (40), d_f είναι η μορφοκλασματική διάσταση (*fractal dimension*), για την τιμή της οποίας γίνεται λόγος στο επόμενο εδάφιο (βλ. 4.1.2.1). Η διάμετρος των σωματιδίων-συμπλεγμάτων σχετίζεται με τον όγκο τους σύμφωνα με τη σχέση:

$$d_i = [6v_i \rho_0 / (\pi \rho_{eff})]^{1/3} \quad (41)$$

όπου ρ_{eff} η ενεργός πυκνότητα των σωματιδίων-συμπλεγμάτων. Η τιμή της ενεργού πυκνότητας υπολογίζεται σύμφωνα με τη σχέση (43) (βλ. 4.1.2.2).

Οι συντελεστές $f_{i,j,k}$ της εξίσωσης (38) είναι συντελεστές που δίνουν το κλάσμα του όγκου v_{ij} των σωματιδίων που προκύπτουν από τις συγκρούσεις μεταξύ σωματιδίων των τμημάτων i και j , το οποίο προστίθεται σε κάθε τμήμα k :

$$f_{i,j,k} = \left\{ \begin{array}{ll} \left(\frac{v_{k+1} - v_i - v_j}{v_{k+1} - v_k} \right) \frac{v_k}{v_i + v_j}, & v_k \leq v_i + v_j < v_{k+1}; \quad k < K_{max} \\ 1 - f_{i,j,k-1}, & v_{k-1} < v_i + v_j < v_k; \quad k > 1 \\ 1, & v_i + v_j \geq v_k; \quad k = K_{max} \\ 0, & \text{οπουδήποτε αλλού} \end{array} \right\} \quad (42)$$

Τα δύο βασικά πλεονεκτήματα του σχήματος που περιγράφεται από την σχέση (38) είναι το μικρό υπολογιστικό κόστος, καθώς δεν απαιτεί επαναλήψεις, και επιπλέον, η αριθμητική ευστάθεια ανεξαρτήτως από το χρησιμοποιούμενο χρονικό βήμα. Σημειώνεται ότι η σχέση

(38) έχει εξαχθεί, λαμβάνοντας υπόψη τη διατήρηση του όγκου των σωματιδίων, και όχι του αριθμού τους, με αποτέλεσμα ο συνολικός αριθμός των σωματιδίων να μην διατηρείται ακριβώς. Ωστόσο, τα σφάλματα αυτά δεν αποτελούν σημαντικό πρόβλημα, καθώς είναι μικρά και μπορούν να περιοριστούν αυξάνοντας τον αριθμό των τμημάτων που χρησιμοποιούνται για τη διακριτοποίηση του μεγέθους των σωματιδίων (Jacobson et al., 1994).

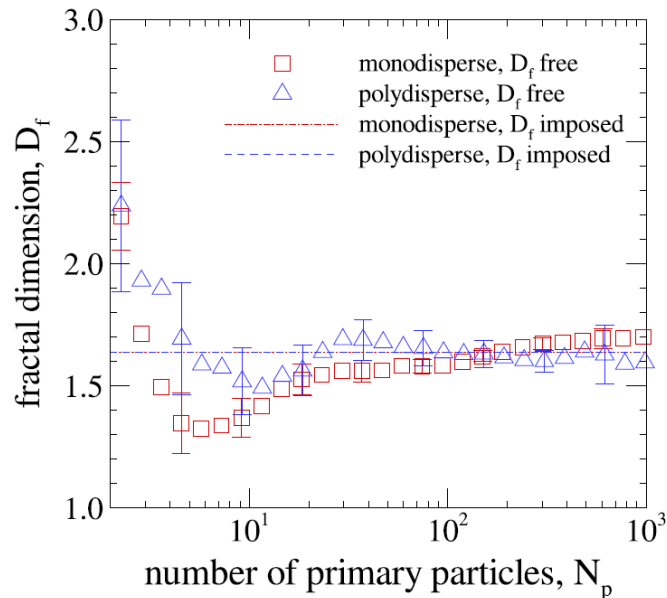
Στις επόμενες παραγράφους γίνεται συζήτηση επί του κατάλληλου προσδιορισμού της μορφοκλασματικής διάστασης και της ενεργού πυκνότητας των σωματιδίων-συμπλεγμάτων.

4.1.2.1 Μορφοκλασματική διάσταση (fractal dimension)

Τα μορφολογικά χαρακτηριστικά των σωματιδίων επηρεάζουν σε μεγάλο βαθμό τη μεταφορά και τη δυναμική τους. Για την μοντελοποίηση της συνάθροισης επιλέχθηκε η θεώρηση μίας αντιπροσωπευτικής τιμής *μορφοκλασματικής διάστασης (fractal dimension)*, d_f ή D_f . Για την περίπτωση της *Συνάθροισης Λόγω Διάχυσης (Diffusion Limited Aggregation – DLA)*, μεταξύ συμπλεγμάτων (*Cluster-Cluster Aggregation*), η μορφοκλασματική διάσταση έχει προσδιοριστεί από διάφορους υπολογιστικούς αλγόριθμους (Colbeck, 1998) ίση με $d_f = 1.8$.

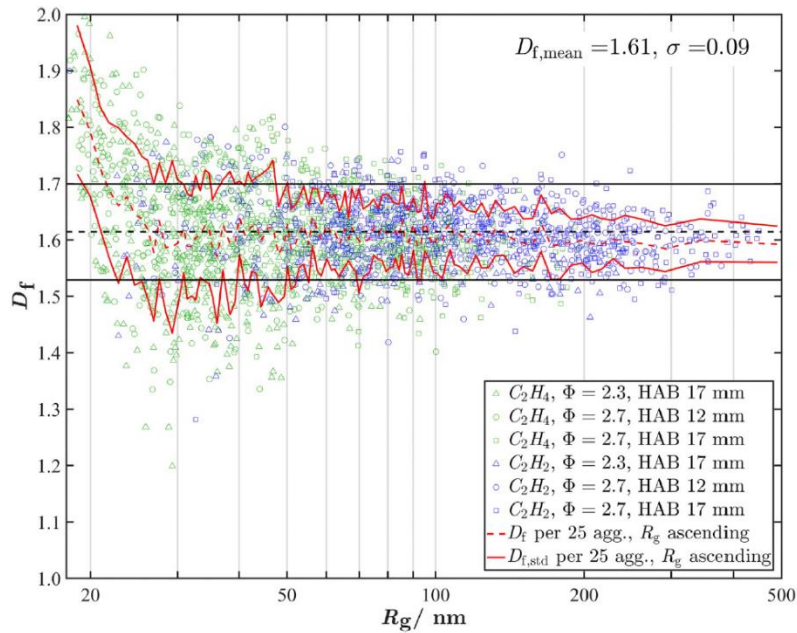
Εντούτοις, υπολογιστικές και πειραματικές μελέτες έχουν αναδείξει διάφορες συσχετίσεις για τα μορφολογικά χαρακτηριστικά των συμπλεγμάτων (clusters) σωματιδίων (π.χ. Artelt, Schmid & Peukert, 2003; Heinson, Sorensen & Chakrabati, 2012; Braga et al., 2015; Altenhoff et al., 2020; Yon et al., 2021). Σε αρκετές μελέτες η μορφοκλασματική διάσταση ενός συμπλέγματος λαμβάνεται συναρτήσεως του αριθμού των μονομερών από τα οποία αποτελείται (π.χ. Goudeli, Eggersdorfer & Pratsinis, 2015) ή συναρτήσεως του ίδιου του μεγέθους του φράκταλ σωματιδίου (π.χ. Thouy & Jullien, 1997). Σημειώνεται πως η τιμή της μορφοκλασματικής διάστασης έχει συσχετιστεί και με τον χρόνο (Kostoglou & Konstandopoulos, 2001; Artelt, Schmid & Peukert, 2003; Kostoglou, Konstandopoulos & Friedlander, 2006, Schmid et al., 2006; Eggersdorfer & Goudeli, 2020), για την περίπτωση, για παράδειγμα, της *πυροσυσσώματωσης (sintering)*.

Για την περίπτωση των *Συμπλεγμάτων Συνάθροισης Λόγω Διάχυσης (Diffusion Limited Cluster Agglomerates – DLCA)* αποτελούμενων από σφαιρικά πρωταρχικά σωματίδια, η μορφοκλασματική διάσταση φέρεται να ακολουθεί φθίνουσα συνάρτηση του αριθμού των μονομερών (Yon et al., 2021). Ειδικότερα, για συμπλέγματα αποτελούμενα από πολύ μεγάλο αριθμό μονομερών παρατηρείται σύγκλιση περί της τιμής $D_f = 1.64$ (Σχήμα 10).



Σχήμα 10: Η μορφοκλασματική διάσταση D_f ως συνάρτηση του αριθμού των πρωτεύοντων σωματιδίων, όπως προκύπτει από μοντέλο προσέγγισης συσχέτισης ζευγών (pair correlation model fitting). Οι γραμμές σφάλματος αντιστοιχούν σε διάστημα εμπιστοσύνης 95% (Yon et al., 2021).

Την εξάρτηση της τιμής της μορφοκλασματικής διάστασης από την τιμή της ακτίνας περιστροφής (*radius of gyration*) των σωματιδίων-συμπλεγμάτων, και άρα από τον αριθμό των μονομερών που αποτελούν ένα σύμπλεγμα, επιβεβαιώνουν οι Altenhoff et al. (2020). Από ηλεκτρονική μικροσκοπία (TEM) επί συμπλεγμάτων συνάθροισης σωματιδίων τέφρας, η μορφοκλασματική διάσταση υπολογίστηκε πως λαμβάνει τιμές ελάχιστα μικρότερες από 2.0 για μικρό αριθμό μονομερών, ενώ καθώς το πλήθος των μονομερών (και αντίστοιχα η ακτίνα περιστροφής) αυξάνει, η τιμή της μορφοκλασματικής διάστασης φέρεται να φθίνει, συγκλίνοντας προς την τιμή $D_f = 1.6$ (Σχήμα 11).



Σχήμα 11: Η μορφοκλασματική διάσταση D_f ως συνάρτηση της ακτίνας περιστροφής R_g (Altenhoff et al., 2020).

Οι Park, Kittelson & McMurry (2004) μελέτησαν τα εκλυόμενα σωματίδια από εξάτμιση μηχανής diesel. Μέσω ηλεκτρονικής μικροσκοπίας (TEM), συσχέτισαν τον όγκο που καταλαμβάνει η δενδριτική δομή των συμπλεγμάτων με την ολική τους μάζα, καταλήγοντας σε μορφοκλασματική διάσταση $D_f = 1.61$ ή $D_f = 1.75$, αναλόγως με την ακρίβεια της ανάλυσης.

Για την περίπτωση της συσσωμάτωσης σε στρωτή ροή, οι Sato, Kobayashi & Adach (2004) προσδιόρισαν πειραματικά την αντιπροσωπευτική τιμή της μορφοκλασματικής διάστασης των σωματιδίων-συμπλεγμάτων ίση με $D_f = 1.66$.

Λαμβάνοντας υπόψη τις παραπάνω μελέτες, καθίσταται ασφαλής, στα πλαίσια της παρούσας εργασίας, η θεώρηση αντιπροσωπευτικής τιμής μορφοκλασματικής διάστασης ίσης με $d_f = 1.6$ και η εισαγωγή της τιμής αυτής στο προτεινόμενο μοντέλο. Βεβαίως, δεν μπορεί να αμεληθεί η συνήθης θεώρηση μορφοκλασματικής διάστασης ίσης με $d_f = 1.8$ (Friedlander, 2000; Drossinos & Housiadas, 2006), οπότε κατά τον πλήρη έλεγχο του μοντέλου (βλ. 4.4.2), επιλέχθηκε η εισαγωγή της μορφοκλασματικής διάστασης ως παράμετρος και ακολούθησε ο υπολογισμός των αποτελεσμάτων ξεχωριστά για τις δύο προαναφερόμενες τιμές της παραμέτρου αυτής.

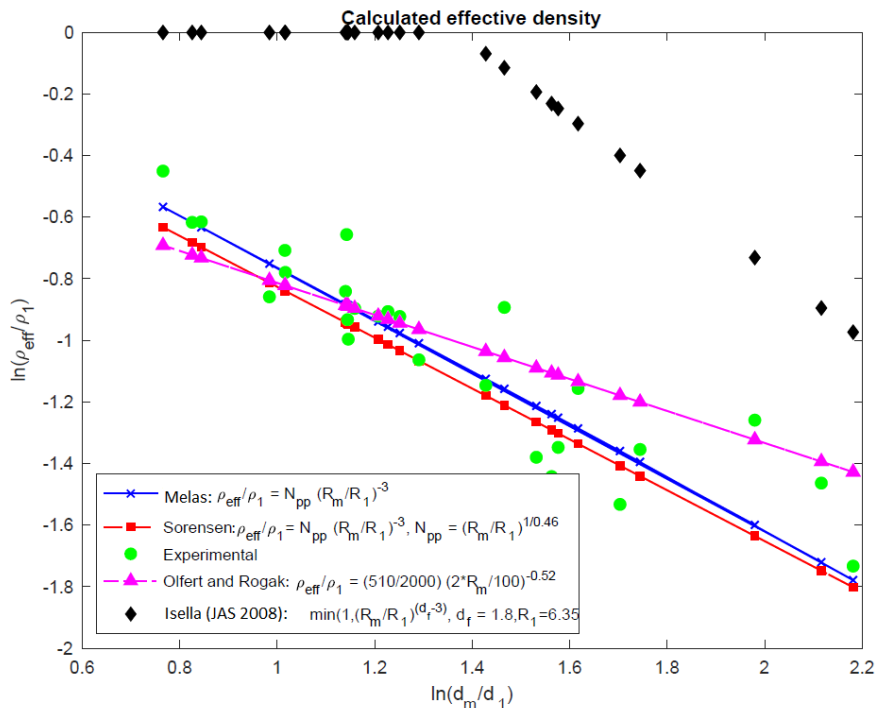
4.1.2.2 Ενεργός πυκνότητα (effective density)

Τα σωματίδια-συμπλέγματα, λόγω της μορφολογίας τους, παρουσιάζουν διαφορετικό λόγο μάζας προς καταλαμβανόμενο χώρο σε σχέση με την τιμή της πυκνότητας των πρωταρχικών

σωματιδίων. Το παραπάνω μέγεθος εκφράζεται από την ενεργό πυκνότητα (*effective density*), ρ_{eff} , των σωματιδίων-συμπλεγμάτων (βλ. εξ. (13), Κεφ. 3). Συνήθως, η ενεργός πυκνότητα ενός συμπλέγματος υπολογίζεται συναρτήσει του αριθμού των μονομερών από τα οποία αποτελείται (βλ. Sorensen, 2011; Melas et al., 2014). Εντούτοις, στα πλαίσια της παρούσας εργασίας, αναζητήθηκε άμεση συσχέτιση μεταξύ της ενεργού πυκνότητας συμπλέγματος σωματιδίων και της διαμέτρου του (π.χ. Isella, Giechaskiel & Drossinos, 2008). Οι Olfert & Rogak (2019) προσδιόρισαν πειραματικά την ακόλουθη σχέση παρεμβολής για νανοσωματίδια τέφρας:

$$\rho_{eff} = 510 \left(\frac{d_i}{100} \right)^{-0.52} \quad (43)$$

όπου ρ_{eff} η ενεργός πυκνότητα (σε kg/m^3) και d_i η διάμετρος του σωματιδίου-συμπλέγματος (σε nm), για πυκνότητα μονομερούς $\rho_0 = 2000 kg/m^3$. Η παραπάνω σχέση χρησιμοποιεί ως τιμή αναφοράς τη διάμετρο 100nm. Στο Σχήμα 12, παρουσιάζεται σύγκριση της σχέσης (43) με πειραματικά δεδομένα, καθώς επίσης και με διάφορες γνωστές σχέσεις προσδιορισμού της ενεργού πυκνότητας. Η παρεμβολή των Olfert & Rogak (2019) προσεγγίζει με ακρίβεια τις πειραματικές μετρήσεις. Κρίνεται επομένως σκόπιμη η εισαγωγή της σχέσης (43) στο μοντέλο μας, για τον υπολογισμό της ενεργού πυκνότητας.



Σχήμα 12: Συγκριτικό διάγραμμα των αποτελεσμάτων διαφόρων σχέσεων για τον υπολογισμό του λόγου ενεργού πυκνότητας προς πυκνότητα μονομερών ρ_{eff}/ρ_1 (Drossinos, Y., προσωπική επικοινωνία, 28 Απριλίου 2021).

4.2 Μέθοδοι επίλυσης εξωτερικών διαδικασιών

Στο παρόν εδάφιο επικεντρωνόμαστε στους μηχανισμούς που καθορίζουν την κίνηση ενός σωματιδίου, το οποίο αιωρείται στο αερόλυμα. Για την περίπτωση ροής αερολύματος, ειδικά σε επιταχυνόμενες ροές, παρουσιάζονται φαινόμενα που σχετίζονται με την αδράνεια του σωματιδίου. Αυτοί οι μηχανισμοί, οι οποίοι ορίζουν την κίνηση ενός σωματιδίου, ονομάζονται μηχανισμοί εναπόθεσης, καθώς το αιωρούμενο σωματίδιο εναποτίθεται σε μία επιφάνεια, λόγω της επίδρασής τους. Για τη μελέτη των μηχανισμών αυτών, καθίσταται αναγκαίος ο υπολογισμός της ταχύτητας εναπόθεσης (*deposition velocity*), v_d , δηλαδή της ταχύτητας με την οποία εναποτίθεται ένα σωματίδιο σε μία στερεά επιφάνεια (π.χ. τα τοιχώματα ενός αντιδραστήρα αερολύματος). Η ταχύτητα αυτή αναπτύσσεται ως αποτέλεσμα της επίδρασης των εν λόγω μηχανισμών στη κίνηση του σωματιδίου. Παρακάτω παρατίθενται οι μηχανισμοί εναπόθεσης οι οποίοι λαμβάνονται υπόψη, στα πλαίσια της παρούσας εργασίας.

4.2.1 Brownian Διάχυση

Η ταχύτητα εναπόθεσης λόγω της Brownian διάχυσης προσδιορίζεται από τη θεωρία μεταφοράς μάζας. Για τη περίπτωση κυλινδρικού αγωγού, διαμέτρου d_{reac} , εκφράζεται συναρτήσει του αδιάστατου αριθμού Sherwood (Sh) για τη μεταφορά μάζας (σε πλήρη αντιστοιχία με τον αριθμό Nusselt (Nu) για τη μεταφορά θερμότητας):

$$v_{B-diff} = \frac{D_p Sh}{d_{reac}} \quad (44)$$

όπου D_p ο συντελεστής διάχυσης (βλ. εξ. (15), Κεφ. 3). Ο τοπικός αριθμός Sherwood υπολογίζεται συναρτήσει της αδιάστατης απόστασης $x^+ = x/(d_{reac} Re Sc)$, όπου x η απόσταση από την είσοδο του αντιδραστήρα και $Sc = \mu_g/(\rho_g D_p)$ ο αριθμός Schmidt. Κατά αυτόν τον τρόπο, λαμβάνεται υπόψη η ανάπτυξη οριακού στρώματος (φαινόμενα εισόδου – *entrance effects*). Για το υπολογισμό του τοπικού αριθμού Sh αξιοποιείται η αλγεβρική παρεμβολή των Shah & London (1978):

$$Sh(x^+) = \left\{ \begin{array}{l} 1.077(x^+)^{-1/3} - 0.7, \quad x^+ \leq 0.01 \\ 3.657 + 6.874(10^3 x^+)^{-0.488} \exp(-57.2x^+), \quad x^+ > 0.01 \end{array} \right\} \quad (45)$$

Η παραπάνω συσχέτιση αποδίδει τον αριθμό Sherwood εντός περιθωρίου $\pm 3\%$ από τα ακριβέστερα αποτελέσματα.

4.2.2 Τυρβώδης διάχυση

Στην περίπτωση της τυρβώδους ροής, επιδρά ο μηχανισμός της *διάχυσης λόγω δινών* (*eddy diffusion*). Η αντίστοιχη ταχύτητα εναπόθεσης υπολογίζεται από την τυπική συσχέτιση των Wells & Chamberlain (1967):

$$v_{T-diff} = 0.2u_{fr}Sc^{-2/3}Re^{-1/8} \quad (46)$$

όπου $Re = u_g d_{reac} \rho_g / \mu_g$ ο αριθμός Reynolds για κυλινδρικό σωλήνα) και u_{fr} η ταχύτητα τριβής, η οποία υπολογίζεται ως:

$$u_{fr} = u_g \sqrt{\frac{Cf}{2}} \quad (47)$$

όπου u_g η (μέση) ταχύτητα του ρευστού και Cf ο συντελεστής τριβής (*friction factor*). Ο συντελεστής τριβής υπολογίζεται, από τον τύπο του Churchill, ως:

$$\frac{Cf}{2} = \left\{ \frac{1}{[(8/Re)^{10} + (Re/36500)^{20}]^{1/2}} + [2.21 \ln(Re/7)]^{10} \right\}^{1/5} \quad (48)$$

4.2.3 Τυρβώδης πρόσκρουση

Η *τυρβώδης πρόσκρουση* (*eddy impaction*) επιδρά μόνον στη περίπτωση της τυρβώδους ροής και αφορά την επίδραση της αδράνειας των σωματιδίων στην διάχυσή τους. Η αντίστοιχη ταχύτητα εναπόθεσης δύναται να εκφραστεί συναρτήσει του *χρόνου ηρεμίας* (*relaxation time*) του σωματιδίου (Drossinos & Housiadas, 2006):

$$v_{T-edd} = \min[6 \cdot 10^{-4} \tau_p^{+2} u_{fr}, 0.1 u_{fr}] \quad (49)$$

όπου $\tau_p^+ = \tau_p u_{fr}^2 \rho_g / \mu_g$ ο αδιάστατος χρόνος ηρεμίας του σωματιδίου, με $\tau_p = \rho_p d_p^2 C_C / (18 \mu_g)$ τον χρόνο απόκρισης Stokes (*Stokes response time*) του σωματιδίου.

4.2.4 Θερμοφοριστική εναπόθεση

Όπως έχει αναφερθεί, η ταχύτητα θερμοφόρισης, v_{th} , εξαρτάται από την ύπαρξη θερμοκρασιακής βαθμίδας (βλ. 3.3.2.3). Για ροή του φέροντος αερίου σε κυλινδρικό σωλήνα, με ύπαρξη θερμοκρασιακής βαθμίδας κατά την ακτινική διεύθυνση, από τη μονοδιάστατη προσέγγιση της εξίσωσης (22) προκύπτει (Housiadas & Drossinos, 2005):

$$v_{th} = -K_{th} \frac{\mu_g}{\rho_g T} \frac{T_w - T_m}{d_{reac} / Nu} \quad (50)$$

όπου T_w, T_m η θερμοκρασία των τοιχωμάτων και η μέση θερμοκρασία του φέροντος αερίου, αντίστοιχα, K_{th} ο θερμοφοριστικός συντελεστής σύμφωνα με τους Talbot et al. (1980) (βλ. 3.3.2.3), και Nu ο αριθμός Nusselt, ο οποίος υπολογίζεται από τον τύπο του Gnielinski:

$$Nu = \frac{(Cf/2)(Re-1000)Pr}{1+12.7(Cf/2)^{1/2}(Pr^{2/3}-1)} \quad (51)$$

όπου $Pr = C_p \mu_g / k_g$ ο αριθμός Prandtl και C_f ο συντελεστής τριβής από εξίσωση (48).

4.2.5 Ολική ταχύτητα εναπόθεσης

Η ολική ταχύτητα εναπόθεσης προκύπτει από το αλγεβρικό άθροισμα των επιμέρους ταχυτήτων εναπόθεσης των μηχανισμών που παρατίθενται παραπάνω:

$$V_d = V_{B-diff} + V_{T-diff} + V_{T-edd} + V_{th} \quad (52)$$

Η επαλληλία των ταχυτήτων εναπόθεσης βασίζεται στην υπόθεση της ανεξαρτησίας των διαφόρων μηχανισμών εναπόθεσης. Πρόκειται για συνήθη προσέγγιση σε πολλές εφαρμογές (π.χ. θεωρία φιλτραρίσματος). Παρά ταύτα, σε ορισμένες εφαρμογές η υπόθεση ανεξαρτησία επενεργούμενων μηχανισμών απώλειας σωματιδίων δεν είναι δυνατή, ειδικά όπου δεν μπορεί να υποτεθεί ομοιόμορφη χωρική κατανομή της συγκέντρωσης σωματιδίων. Για παράδειγμα, σωματίδια επαρκούς αδράνειας ($t_p^+ > 1$) παρουσιάζουν έντονα προφίλ συγκέντρωσης σε τυρβώδες οριακό στρώμα, καθώς εγκλωβίζονται κοντά στα τοιχώματα, πάνω από το ιξώδες υπόστρωμα (π.χ. Picciotto et al., 2005). Καθώς οι διαφορετικοί μηχανισμοί επενεργούν σε διαφορετικά εύρη μεγεθών σωματιδίων (π.χ. τα μικρότερα σωματίδια διαχέονται εντονότερα, τα μεγαλύτερα εμφανίζουν μεγαλύτερη αδρανειακή επίδραση κλπ.), η προσέγγιση της γραμμικής άθροισης δεν επηρεάζει σε μεγάλο βαθμό το ολικό αποτέλεσμα. Απεναντίας, σε περιπτώσεις όπου οι εν λόγω μηχανισμοί επενεργούν επί του ίδιου εύρους μεγεθών (π.χ. βαρυτική καθίζηση και αδρανειακή πρόσκρουση), η παραπάνω προσέγγιση υπερεκτιμά την ικανότητα απομάκρυνσης σωματιδίων του συνόλου των μηχανισμών.

4.3 Μεθοδολογία επίλυσης ΓΕΔΑ

Στο εδάφιο αυτό περιγράφεται η μονοδιάστατη μεθοδολογία που αναπτύχθηκε, στα πλαίσια της παρούσας εργασίας, για την επίλυση ροών αερολύματος, που περιγράφηκε στο Κεφάλαιο 3. Ο σκοπός ήταν να χρησιμοποιηθεί για γρήγορους και εύκολους υπολογισμούς, καθώς και για να εκτιμηθούν οι δυνατότητες τέτοιων απλών μοντέλων στην προσομοίωση ροών αερολύματος που απαντώνται σε σύγχρονα επιστημονικά και τεχνολογικά πεδία. Μονοδιάστατα μοντέλα χρησιμοποιούνται συχνά για την προσομοίωση διάφορων εφαρμογών εξαιτίας του μικρού υπολογιστικού τους κόστους, αλλά και της σημαντικά μικρότερης προσπάθειας που απαιτείται για την κατασκευή τους. Για παράδειγμα, τέτοιες εφαρμογές είναι η εναπόθεση σωματιδίων στους πνεύμονες (Mitsakou, Helmis & Housiadas, 2004), ο έλεγχος και η αξιολόγηση της ασφάλειας πυρηνικών αντιδραστήρων (Alpy et al., 2003) και η σύνθεση νανοσωματιδίων σε αντιδραστήρες αερολύματος (Tsantilis & Pratsinis, 2000; Shigeta & Nishiyama, 2005).

Για την επίλυση της ροής αερολύματος, π.χ. κατά μήκος ενός αγωγού, είναι απαραίτητη η γνώση του πεδίου θερμοκρασίας. Για αυτόν τον λόγο, επιλύεται παράλληλα η εξίσωση μεταφοράς θερμότητας και προσδιορίζονται τα χαρακτηριστικά της ροής. Ο υπολογιστικός κώδικας που αναπτύχθηκε στα πλαίσια της παρούσας εργασίας είναι γραμμένος σε γλώσσα MATLAB (βλ. Παράρτημα Ι).

4.3.1 Υπολογισμός πεδίου θερμοκρασίας – Μονοδιάστατη επίλυση

Η μέση θερμοκρασία της ροής προσδιορίζεται επιλύοντας τη μονοδιάστατη εξίσωση μεταφοράς θερμότητας. Η μέση θερμοκρασία του ρευστού, T_m , για συνθήκες μόνιμης κατάστασης και κυλινδρικό αγωγό διαμέτρου d_{react} , προκύπτει σύμφωνα με την ακόλουθη σχέση (Housiadas & Drossinos, 2005):

$$\frac{dT_m}{dx} = \frac{4Nu}{d_{react}RePr}(T_w - T_m) \quad (53)$$

όπου T_w η θερμοκρασία των τοιχωμάτων του αντιδραστήρα και Nu ο τυρβώδης αριθμός Nusselt, υπολογιζόμενος σύμφωνα με την εξίσωση (51).

4.3.2 Υπολογισμοί δυναμικής αερολύματος – Μονοδιάστατη επίλυση

Η εξέλιξη της σωματιδιακής φάσης λόγω της μεταφοράς και της δυναμικής του αερολύματος περιγράφεται από τη ΓΕΔΑ (εξ. (31), Κεφ. 3). Σύμφωνα με τη τμηματική μέθοδο, η ΓΕΔΑ γράφεται και επιλύεται χωριστά για κάθε ένα από τα τμήματα (bins), στα οποία διακριτοποιείται το μέγεθος των σωματιδίων. Κατά αυτόν τον τρόπο, η επίλυση της ΓΕΔΑ καταλήγει στην επίλυση της παρακάτω εξίσωσης:

$$\frac{\partial \rho n_i}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho(u+c^i)n_i] - \nabla \rho D_p^i \nabla n_i = \left(\frac{\partial \rho n_i}{\partial t} \right)_{coag}, \quad i=1, K_{max} \quad (54)$$

όπου K_{max} το συνολικό πλήθος των τμημάτων που χρησιμοποιούνται για τη διακριτοποίηση του μεγέθους των σωματιδίων. Η συνάρτηση κατανομής είναι εκφρασμένη ανά μονάδα μάζας του φέροντος αερίου. Στην περίπτωση επίλυσης της πλήρους ΓΕΔΑ, δηλαδή σε περιπτώσεις όπου λαμβάνουν χώρα και διαδικασίες μετατροπής της ατμώδους φάσης σε σωματιδιακή (πυρηνοποίηση, συμπύκνωση) η ΓΕΔΑ είναι πεπλεγμένη, μέσω του λόγου κορεσμού (ή ισοδύναμα μέσω της συγκέντρωσης του ατμού στην αέρια φάση), και πρέπει να επιλύεται ταυτόχρονα με την εξίσωση μεταφοράς του ατμού. Για την περίπτωση μόνιμου προβλήματος (steady-state problem), το οποίο προκύπτει επιβάλλοντας σταθερές οριακές συνθήκες, ο πρώτος όρος της εξίσωσης (54) μηδενίζεται.

Στην παρούσα εργασία αναπτύχθηκε μονοδιάστατο μοντέλο επίλυσης της ΓΕΔΑ. Στηρίζεται στην επίλυση της ροής του αερολύματος χρησιμοποιώντας ημι-Lagrangian προσέγγιση και λαμβάνει υπόψη ως μοναδική εσωτερική διαδικασία της δυναμικής του αερολύματος τη

συσσωμάτωση – συνάθροιση, η οποία επιλύεται αριθμητικά με τη μέθοδο που αναπτύχθηκε παραπάνω (βλ. 4.1). Στη περίπτωση μόνιμου (steady-state) προβλήματος, η ΓΕΔΑ μπορεί να γραφεί ως εξής:

$$\frac{\partial}{\partial x}(u_g n_i) = u \left(\frac{\partial n_i}{\partial x} \right)_{coag} - \frac{4}{d_h} v_d n_i, \quad i=1, K_{max} \quad (55)$$

Στην παραπάνω εξίσωση n_i είναι η συνάρτηση πυκνότητας κατανομής του μεγέθους των σωματιδίων στο τμήμα i της κατανομής, εκφρασμένη ανά μονάδα όγκου του φέροντος αερίου. Ο τελευταίος όρος της εξίσωσης (55) περιγράφει την εναπόθεση των σωματιδίων λόγω των διάφορων μηχανισμών εναπόθεσης (βλ. 4.2). Οι μηχανισμοί αυτοί λαμβάνονται υπόψη μέσω της ταχύτητας εναπόθεσης v_d , ενώ d_h είναι η υδραυλική διάμετρος του αντιδραστήρα.

Η αριθμητική επίλυση της εξίσωσης (55) εξελίσσεται κατά τη διεύθυνση της ροής, σε κάθε χωρικό βήμα Δx_i . Αρχικά, υπολογίζονται η μεταφορά και η εναπόθεση των σωματιδίων χρησιμοποιώντας σχήμα πεπερασμένων διαφορών, στο οποίο ο όρος της μεταφοράς διακριτοποιείται, χρησιμοποιώντας το σχήμα ανάντι παραγωγής (upwind). Στη συνέχεια, υπολογίζεται η μεταβολή της συνάρτησης κατανομής, λόγω των εσωτερικών διαδικασιών συσσωμάτωσης - συνάθροισης. Συγκεκριμένα, μετά το τέλος των υπολογισμών σε κάθε βήμα, η λύση αποθηκεύεται και η επίλυση συνεχίζεται στο επόμενο βήμα. Η ταχύτητα του αερίου υπολογίζεται από τη μονοδιάστατη εξίσωση της συνέχειας:

$$\frac{1}{A} \frac{d\rho u A}{dx} = 0 \quad (56)$$

όπου A η διατομή του αγωγού, η οποία μπορεί να μεταβάλλεται. Η θερμοκρασία των τοιχωμάτων του αντιδραστήρα κατά μήκος της ροής αποτελεί είσοδο και μπορεί να είναι γνωστή από μετρήσεις.

4.4 Έλεγχος, επαλήθευση και αξιολόγηση του μοντέλου

Στο παρόν εδάφιο γίνεται η πιστοποίηση και η αξιολόγηση των μεθόδων που αναπτύχθηκαν. Αρχικά, πραγματοποιείται σύγκριση με διαθέσιμες αναλυτικές λύσεις της ΓΕΔΑ, για την περίπτωση στατικού αερολύματος. Στη συνέχεια παρουσιάζεται η πιστοποίηση του συνολικού αλγορίθμου επίλυσης της ΓΕΔΑ. Για τον σκοπό αυτόν, πραγματοποιήθηκε σύγκριση με παλαιότερα πειραματικά δεδομένα μετρήσεων εκπομπών οχημάτων που είχαν πραγματοποιηθεί στο Ευρωπαϊκό Κοινό Κέντρο Ερευνών (Joint Research Centre – JRC) στην Ίσπρα της Ιταλίας.

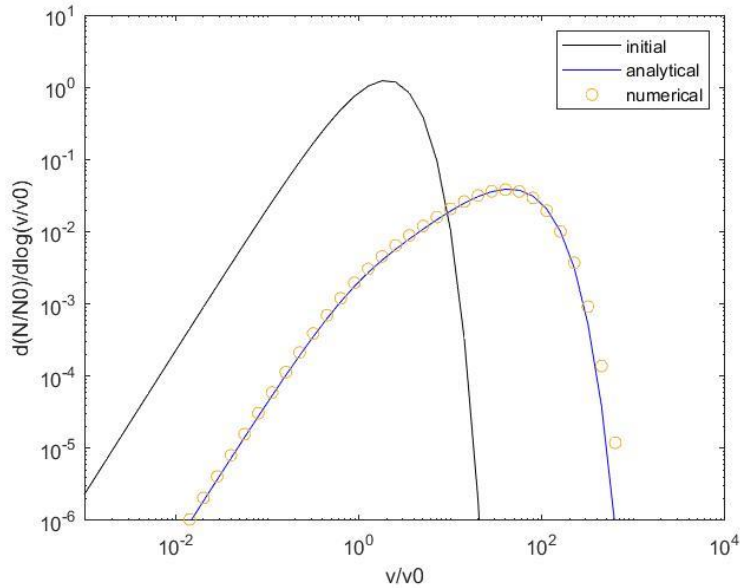
4.4.1 Σύγκριση με αναλυτικές λύσεις

Η μέθοδος επίλυσης των εσωτερικών διαδικασιών του αερολύματος, οι οποίες λήφθηκαν υπόψη στα πλαίσια της παρούσας εργασίας (συσσωμάτωση-συνάθροιση), πιστοποιήθηκαν πραγματοποιώντας σύγκριση με γνωστές αναλυτικές λύσεις της ΓΕΔΑ (εξ. (28), Κεφ. 3) για την περίπτωση στατικού αερολύματος, δηλαδή χωρίς τους όρους μεταφοράς και διάχυσης (Ramabhadran, Peterson & Seinfeld, 1976). Στην περίπτωση που εξετάζεται, ο συντελεστής συσσωμάτωσης K θεωρείται σταθερός, δηλαδή ανεξάρτητος του μεγέθους των σωματιδίων. Η αρχική συνάρτηση πυκνότητας κατανομής μεγέθους του αερολύματος, εκφρασμένη ως προς των όγκο των σωματιδίων, θεωρείται ότι έχει τη μορφή μιας συνάρτησης γάμμα πρώτης τάξης:

$$n_0(v) = \frac{N_0 v}{v_0^2} \exp\left(-\frac{v}{v_0}\right) \quad (57)$$

όπου N_0 είναι η αρχική ολική συγκέντρωση των σωματιδίων (κατά αριθμό) και v_0 η μέση τιμή του όγκου της αρχικής κατανομής. Για την αριθμητική επίλυση της συσσωμάτωσης χρησιμοποιήθηκε η ημι-ρητή μέθοδος των Jacobson et al. (1994) που παρουσιάζεται στα προηγούμενα κεφάλαια της παρούσας εργασίας (βλ. 4.1.2).

Για τη προσομοίωση (βλ. Παράρτημα II) θεωρήθηκε εύρος τιμών σωματιδιακής διαμέτρου $[10^{-2}, 10^5]$, το οποίο διακριτοποιήθηκε σε 140 λογαριθμικά χωρισμένα τμήματα (bins), δηλαδή σε 20 τμήματα ανά δεκάδα. Στο Σχήμα 13, παρουσιάζονται η αριθμητικά υπολογιζόμενη αδιάστατη συνάρτηση πυκνότητας κατανομής μεγέθους σωματιδίων, καθώς επίσης και η αντίστοιχη αναλυτική λύση, στο τέλος της προσομοίωσης, δηλαδή σε αδιάστατο χρόνο $\tau = 50$. Παρατηρείται άριστη συμφωνία της αδιάστατης συνάρτησης πυκνότητας κατανομής μεγέθους των σωματιδίων, όπως υπολογίζεται αριθμητικά, σε σύγκριση με την αναλυτική λύση.



Σχήμα 13: Η αριθμητικά υπολογιζόμενη αδιάστατη συνάρτηση πυκνότητας κατανομής μεγέθους των σωματιδίων στο τέλος της προσομοίωσης, σε σύγκριση με την αναλυτική λύση. Απεικονίζεται επίσης η αρχική συνάρτηση πυκνότητας κατανομής μεγέθους.

Υπενθυμίζεται ότι η διαδικασία της συσσωμάτωσης επιδρά στον ολικό αριθμό των σωματιδίων αλλά όχι στον ολικό όγκο τους. Η αριθμητική μέθοδος που χρησιμοποιήθηκε για την επίλυση της συσσωμάτωσης, εκ κατασκευής, διατηρεί τον ολικό όγκο των σωματιδίων, αλλά όχι και τον ολικό αριθμό τους (βλ. Κεφάλαιο 3). Από τη συμφωνία, όμως, της αναλυτικής λύσης με την αριθμητική (Σχήμα 13), σχετικά με τον αριθμό των σωματιδίων, προκύπτει ότι τα σφάλματα που υπεισέρχονται στον υπολογισμό του αριθμού των σωματιδίων κατά την αριθμητική επίλυση της συσσωμάτωσης είναι πολύ μικρά. Επομένως, διαφαίνεται ικανοποιητική ακρίβεια στην αριθμητική επίλυση, ακόμα και για σχετικά χαμηλό αριθμό τμημάτων (bins) ανά δεκάδα μεγέθους σωματιδίων.

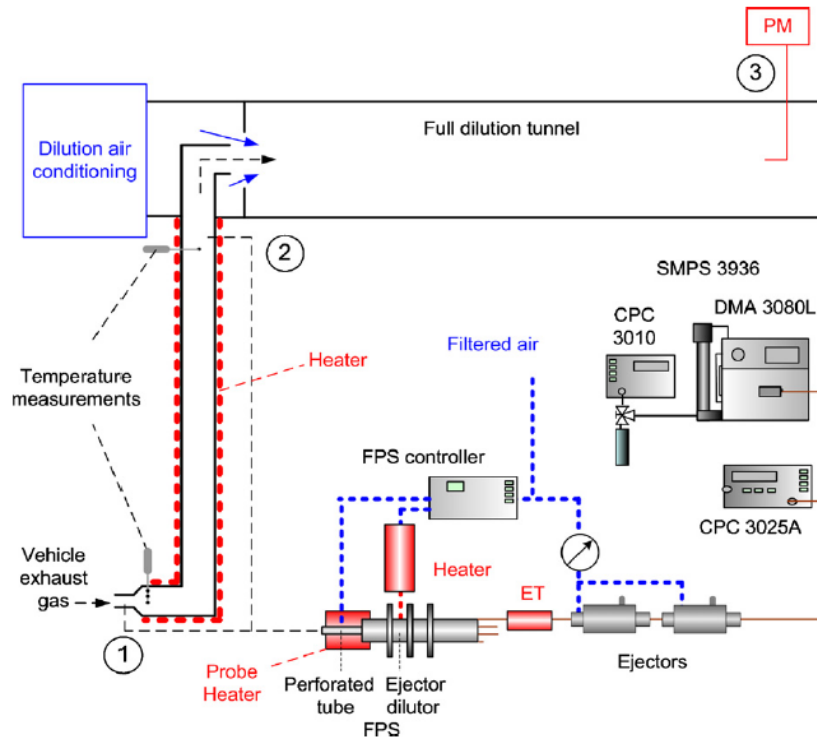
Περαιτέρω αναλυτικές λύσεις προσφέρονται, για την περίπτωση Brownian συσσωμάτωσης και συσσωμάτωσης σε στρωτή ροή στην συνεχή περιοχή, από τους Wang, Yu & Peng (2020), ενώ συγκεκριμένα για τη περίπτωση συνάθροισης σωματιδίων-συμπλεγμάτων όμοιων με φράκταλ, αναλυτικές λύσεις προσφέρονται από Vemury & Pratsinis (1995) και Goudeli, Eggerdorfer & Pratsinis, (2015), για αυτοσυντηρούμενη (*self-preserving*) κατανομή μεγέθους σωματιδίων.

4.4.2 Υπολογιστική προσομοίωση μεταφοράς και δυναμικής νανοσωματιδίων από εκπομπές πετρελαιοκίνητου οχήματος (πρότυπα Euro 3)

Το συνολικό προτεινόμενο μοντέλο πιστοποιήθηκε προσομοιώνοντας υπολογιστικά παλαιότερα πειράματα επί της μεταφοράς και δυναμικής νανοσωματιδίων (Isella, Giechaskiel & Drossinos, 2008) από εκπομπές καυσαερίων οχημάτων, στο πλαίσιο των, τότε ισχύοντων, Ευρωπαϊκών Κανονισμών (Euro 3). Κατά τα πειράματα αυτά, διενεργήθηκαν πειραματικές μετρήσεις σε ροή με έντονα δυναμικά φαινόμενα, κυρίως λόγω επενέργειας του μηχανισμού συσσωμάτωσης – συνάθροισης σωματιδίων. Τα αποτελέσματα του μοντέλου συγκρίθηκαν με τις πειραματικές μετρήσεις, προκειμένου το μοντέλο να ελεγχθεί και να αξιολογηθεί ως προς τη λειτουργικότητα και την αξιοπιστία του.

Στην εργασία τους, οι Isella, Giechaskiel & Drossinos (2008) ερευνούν πειραματικά και θεωρητικά τη δυναμική των μη πτητικών σωματιδίων που εκπέμπονται από ελαφρύ πετρελαιοκίνητο (diesel) όχημα σύμφωνα με τα πρότυπα Euro 3. Πραγματοποιούν μονοδιάστατη μοντελοποίηση της μεταφοράς και δυναμικής του αερολύματος για την περαιτέρω κατανόηση και ανάλυση των μετρήσεων. Στο μοντέλο τους λαμβάνονται υπόψη οι διαδικασίες της μεταφοράς, διάχυσης, συνάθροισης και θερμοφόρισης των σωματιδίων.

Το πειραματικό σκέλος της παραπάνω έρευνας περιλάμβανε την ανάλυση δύο σειρών πειραμάτων, εκ των οποίων η πρώτη αφορούσε τη λειτουργία του οχήματος σε ταχύτητα 50 km/h αντιστοιχώντας σε παροχή καυσαερίων $1 \text{ m}^3/\text{min}$ και θερμοκρασία εισόδου στο σωλήνα μεταφοράς 110°C , ενώ η δεύτερη σε ταχύτητα 120 km/h με παροχή καυσαερίων $2 \text{ m}^3/\text{min}$ και θερμοκρασία εισόδου 210°C . Τα εκπεμπόμενα καυσαέρια οδηγούνταν από την εξάτμιση στη σήραγγα αραίωσης, όπου βρισκόταν το σημείο δειγματοληψίας των σωματιδίων, μέσω ενός ατσάλινου κυλινδρικού σωλήνα μεταφοράς μήκους 9m και εσωτερικής διαμέτρου 10cm (Σχήμα 14). Το εξωτερικό του σωλήνα μεταφοράς έφερε μονωτική επένδυση, ενώ το εσωτερικό των τοιχωμάτων του θερμαινόταν ως τη θερμοκρασία 70°C , από την εκκίνηση των πειραμάτων με ταχύτητα οχήματος 50 km/h , ενώ δεν υπήρχε σύστημα ψύξης για την περίπτωση της περαιτέρω θέρμανσης του σωλήνα από τα θερμά καυσαέρια (περίπτωση λειτουργίας με ταχύτητα 120 km/h). Ανάντι του σημείου δειγματοληψίας στην σήραγγα αραίωσης πραγματοποιούνταν ταχέα τυρβώδης ανάμιξη των καυσαερίων με αέρα αραίωσης. Οι μετρήσεις λαμβάνονταν σε κανονικές συνθήκες (θερμοκρασία 0°C και πίεση 1bar). Συμπληρωματικά, σωματιδιακά δείγματα λαμβάνονταν επίσης στην είσοδο και στην έξοδο του σωλήνα μεταφοράς, εξασφαλίζοντας μετρήσεις αναφορικά με τη συγκέντρωση και κατανομή των σωματιδίων.



Σχήμα 14: Σχηματικό διάγραμμα της πειραματικής διάταξης και του συστήματος δειγματοληψίας (FPS – δειγματολήπτης λεπτόκοκκων σωματιδίων, ET – σωλήνας εξατμίσεως, CPC – μετρητής συμπύκνωσης σωματιδίων, SMPS – Σκάνερ μεγέθους κινητικότητας σωματιδίων, PM – σημείο δειγματοληψίας σωματιδιακής μάζας, DMA – διαφορικός αναλυτής κινητικότητας) (Isella, Giechaskiel & Drossinos, 2008).

Στη παρούσα εργασία, το μοντέλο αρχικοποιήθηκε εισάγοντας ως συνάρτηση πυκνότητας κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην είσοδο την λογαριθμοκανονική προσέγγιση των πειραματικών μετρήσεων για τη θέση αυτή (Πίνακας 1). Οι πειραματικά μετρούμενες τιμές των μεγεθών που χαρακτηρίζουν τις συνθήκες του προβλήματος θεωρήθηκαν ως συνθήκες μόνιμης κατάστασης, όπως και στην εργασία των Isella, Giechaskiel & Drossinos (2008).

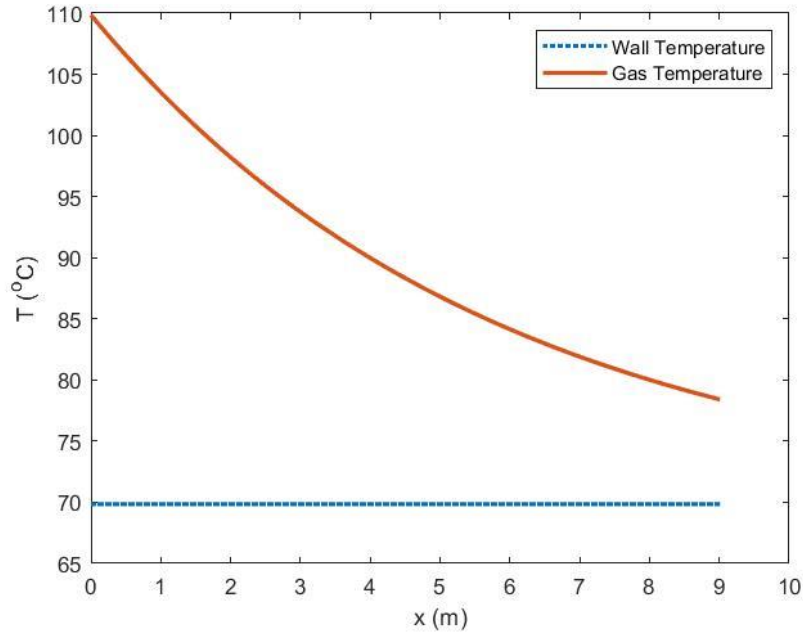
Πίνακας 1: Παράμετροι της λογαριθμοκανονικής προσέγγισης της πειραματικής κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην είσοδο και έξοδο του σωλήνα μεταφοράς.

Speed (km/h)	Position	N_{∞} (cm^{-3}) fit	μ (nm)	σ (nm)
50	Inlet	7.60×10^7	62.0	1.75
50	Outlet	4.50×10^7	87.3	1.63
50	DLT	$(4.50 \times 10^7)^a$	$(87.3)^a$	$(1.63)^a$
120	Inlet	1.43×10^8	67.7	1.79
120	Outlet	8.25×10^7	88.5	1.69
120	DLT	$(8.25 \times 10^7)^a$	$(88.5)^a$	$(1.69)^a$

(Isella, Giechaskiel & Drossinos, 2008)

Για την επίλυση του προβλήματος (βλ. Παράρτημα Ι) θεωρήθηκε εύρος τιμών διαμέτρου σωματιδίων $[1\text{nm}, 1000\text{nm}]$ με λογαριθμική διαμέριση σε 400 τμήματα (bins). Η διάμετρος των σωματιδίων-συμπλεγμάτων θεωρήθηκε ίση με την αριθμητικά μέση τιμή του εύρους του τμήματος (bin) στο οποίο εμπίπτουν. Ως βήμα ικανοποιητικής ακρίβειας για την ημι-Lagrangian βηματική επίλυση της ΓΕΔΑ (εξ. (55), Κεφ. 4) κατά μήκος της ροής στον σωλήνα μεταφοράς, τέθηκε ελάχιστο μήκος $\Delta x = 1\text{cm}$. Η παραπάνω διακριτοποίηση βρέθηκε επαρκής μετά από δοκιμές ευαισθησίας πλέγματος και χρησιμοποιήθηκε στο σύνολο της ανάλυσης που ακολουθεί, εκτός όπου αναφέρεται διαφορετικά.

Για τους υπολογισμούς της μεταφοράς και της δυναμικής του αερολύματος είναι απαραίτητη η γνώση της θερμοκρασίας κατά μήκος του αγωγού. Αυτή προσδιορίζεται από την αριθμητική επίλυση της μονοδιάστατης εξίσωσης μεταφοράς θερμότητας (εξ. (53), Κεφ. 4). Η θερμοκρασία των τοιχωμάτων του σωλήνα μεταφοράς θεωρήθηκε ίση με $T_w = 70^\circ\text{C}$, η οποία σύμφωνα με συστάσεις από το JRC θεωρείται ικανοποιητική προσέγγιση. Η θερμοκρασία του αέρα, όπως υπολογίστηκε ως συνάρτηση της αξονικής θέσης, παρουσιάζεται στο Σχήμα 15.

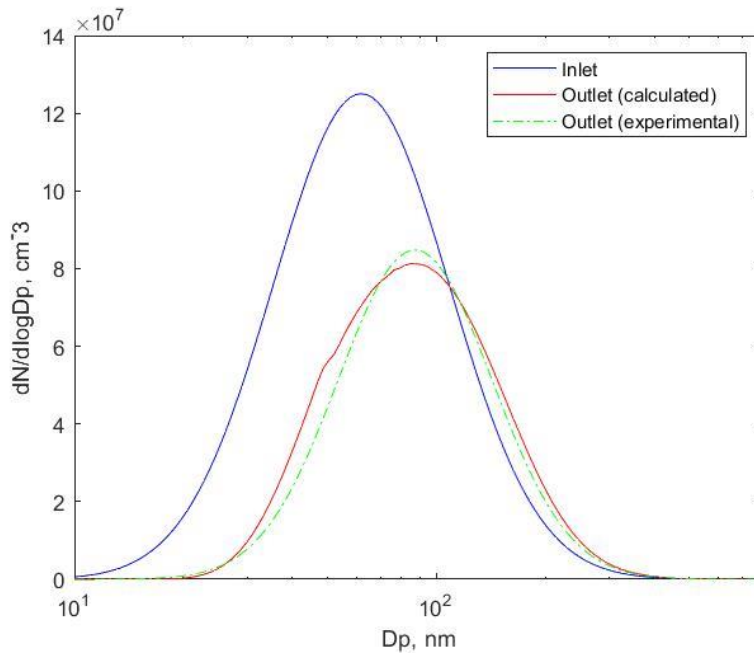


Σχήμα 15: Η θερμοκρασία του αερολύματος και των τοιχωμάτων του σωλήνα μεταφοράς συναρτήσει της απόστασης από την είσοδο του σωλήνα, για λειτουργία οχήματος σε ταχύτητα 50 km/h.

Κατ' αρχάς, δοκιμάστηκε η σχέση παρεμβολής που προτείνεται από τους Isella, Giachaskiel & Drossinos (2008), για τον υπολογισμό της ενεργού πυκνότητας (σε kg/m^3):

$$\rho_{eff} = \min \left(\rho_o, \rho_o \frac{d_i}{d^*} \right)^{d_f - 3} \quad (58)$$

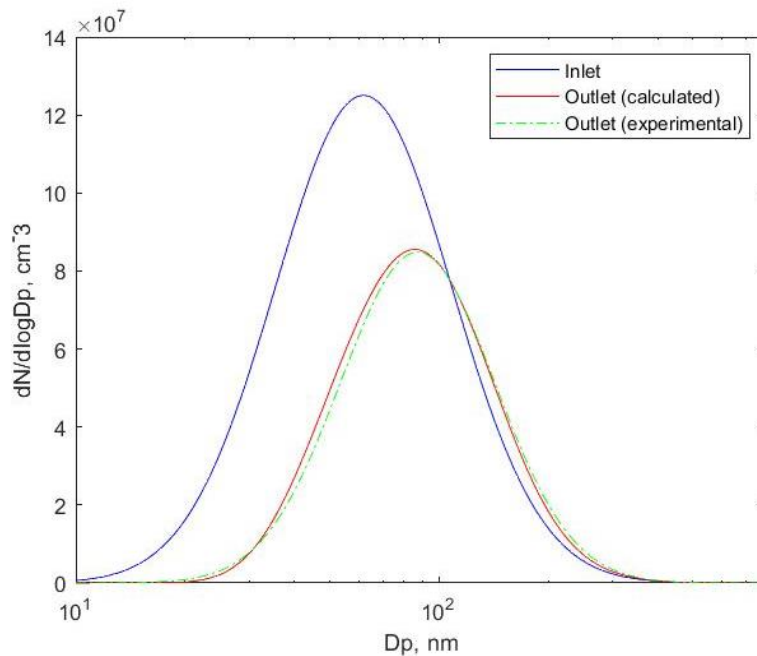
όπου $\rho_o = 1000 \text{ kg}/\text{m}^3$ η πυκνότητα μονομερούς, d_i η διάμετρος του σωματιδίου-συμπλέγματος και $d^*=50\text{nm}$ η διάμετρος αναφοράς. Τα αποτελέσματα βάσει της παραπάνω σχέσης απεικονίζονται στο Σχήμα 16. Για τη δοκιμή αυτή, εισήχθη η τιμή μορφοκλασματικής διάστασης $d_f=1.8$. Η κατά αριθμό ολική συγκέντρωση σωματιδίων στην έξοδο του σωλήνα, υπολογίστηκε ίση με $N_{total} = 4.82 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-3}$, αρκετά μεγαλύτερη της αντίστοιχης μετρούμενης τιμής (βλ. Πίνακα 1).



Σχήμα 16: Η πειραματικά μετρούμενη πυκνότητα κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην είσοδο και έξοδο του σωλήνα μεταφοράς και η υπολογιζόμενη πυκνότητα κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην έξοδο, για ταχύτητα οχήματος 50 km/h , τιμή μορφοκλασματικής διάστασης $d_f=1.8$ και ενεργό πυκνότητα σωματιδίων-συμπλεγμάτων υπολογιζόμενη σύμφωνα με τη σχέση (58).

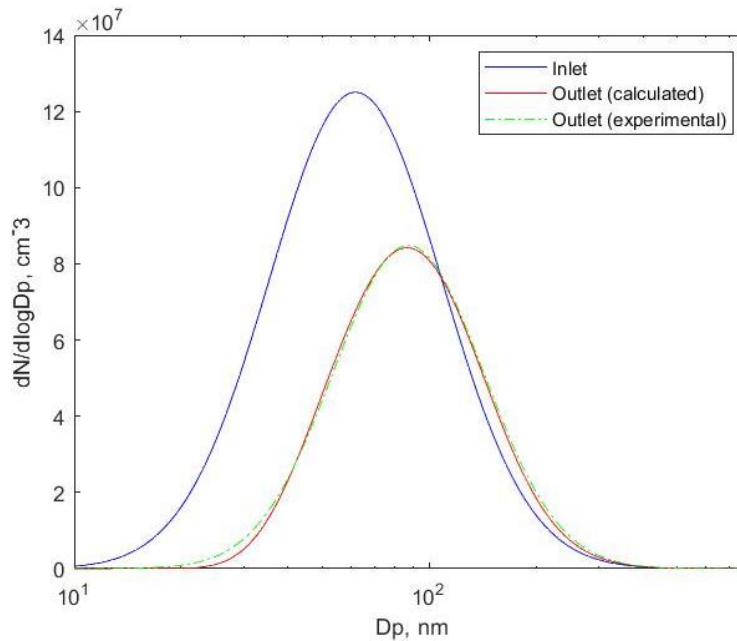
Πρόσθετοι υπολογισμοί πραγματοποιήθηκαν χρησιμοποιώντας τη συσχέτιση που προτείνουν οι Olfert & Rogak (2019) για την ενεργό πυκνότητα των σωματιδίων-συμπλεγμάτων (εξ. (43), Κεφ. 4), όπως αναλύεται στα προηγούμενα εδάφια (βλ. 4.1.2.2). Εξετάστηκε επίσης η επίδραση της τιμής της μορφοκλασματικής διάστασης χρησιμοποιώντας δύο διαφορετικές θεωρήσεις. Αρχικά η μορφοκλασματική διάσταση ελήφθη ως $d_f = 1.8$ και στη συνέχεια επαναλήφθηκαν οι υπολογισμοί για τιμή μορφοκλασματικής διάστασης $d_f = 1.6$, ώστε να εποπτευθεί και να συγκριθεί η συμφωνία με τις πειραματικές μετρήσεις για κάθε μία εκ των δύο θεωρήσεων.

Τα αποτελέσματα του μοντέλου προσομοίωσης των πειραμάτων μελέτης της δυναμικής νανοσωματιδίων από εκπομπές εξάτμισης ελαφρού πετρελαιοκίνητου (diesel) οχήματος, για την περίπτωση ταχύτητας 50 km/h , αποτυπώνονται στους πίνακες και τα σχήματα που ακολουθούν καταδεικνύοντας ικανοποιητική σύγκλιση των πειραματικά μετρούμενων και των υπολογιζόμενων τιμών.



Σχήμα 17: Η πειραματικά μετρούμενη πυκνότητα κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην είσοδο και έξοδο του σωλήνα μεταφοράς και η υπολογιζόμενη πυκνότητα κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην έξοδο, για ταχύτητα οχήματος 50 km/h , τιμή μορφοκλασματικής διάστασης $d_f=1.8$ και ενεργό πυκνότητα των σωματιδίων-συμπλεγμάτων υπολογιζόμενη σύμφωνα με τη σχέση (43).

Στο Σχήμα 17 αποτυπώνεται η υπολογιζόμενη και η μετρούμενη πυκνότητα κατανομής μεγέθους των σωματιδίων στην έξοδο του σωλήνα μεταφοράς, υποθέτοντας ως αρχική κατανομή την πειραματικά μετρούμενη κατανομή στην είσοδο του σωλήνα και θεωρώντας αντιπροσωπευτική τιμή μορφοκλασματικής διάστασης $d_f = 1.8$ για όλο το εύρος τιμών διαμέτρου των σωματιδίων-συμπλεγμάτων. Στο Σχήμα 18 αποτυπώνονται τα ίδια μεγέθη για τις ίδιες συνθήκες, λαμβάνοντας ως τιμή μορφοκλασματικής διάστασης $d_f = 1.6$.



Σχήμα 18: Η πειραματικά μετρούμενη πυκνότητα κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην είσοδο και έξοδο του σωλήνα μεταφοράς και η υπολογιζόμενη πυκνότητα κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην έξοδο, για ταχύτητα οχήματος 50 km/h , τιμή μορφοκλασματική διάστασης $d_f=1.6$ και ενεργό πυκνότητα των σωματιδίων-συμπλεγμάτων υπολογιζόμενη σύμφωνα με τη σχέση (43).

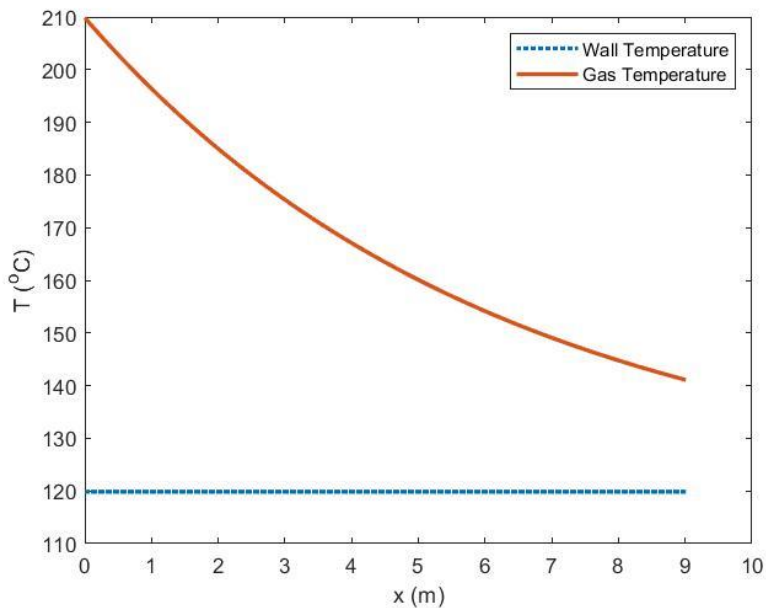
Παρατηρείται πολύ καλή συμφωνία της υπολογιζόμενης και της μετρούμενης κατανομής στην έξοδο σε κάθε μία εκ των δύο περιπτώσεων. Οι αντίστοιχες αριθμητικές τιμές της υπολογιζόμενης και της πειραματικά μετρούμενης ολικής συγκέντρωσης σωματιδίων στην έξοδο του σωλήνα μεταφοράς δίνονται επίσης στον Πίνακα 2.

Πίνακας 2: Η πειραματικά μετρούμενη και η υπολογιζόμενη ολική συγκέντρωση σωματιδίων στην έξοδο του σωλήνα μεταφοράς, για ταχύτητα οχήματος 50 km/h .

	$N \text{ (cm}^{-3}\text{)}$
Πειραματικά μετρούμενη τιμή	$4.50 \cdot 10^7$
Υπολογιζόμενη τιμή (για $d_f = 1.8$)	$4.58 \cdot 10^7$
Υπολογιζόμενη τιμή (για $d_f = 1.6$)	$4.41 \cdot 10^7$

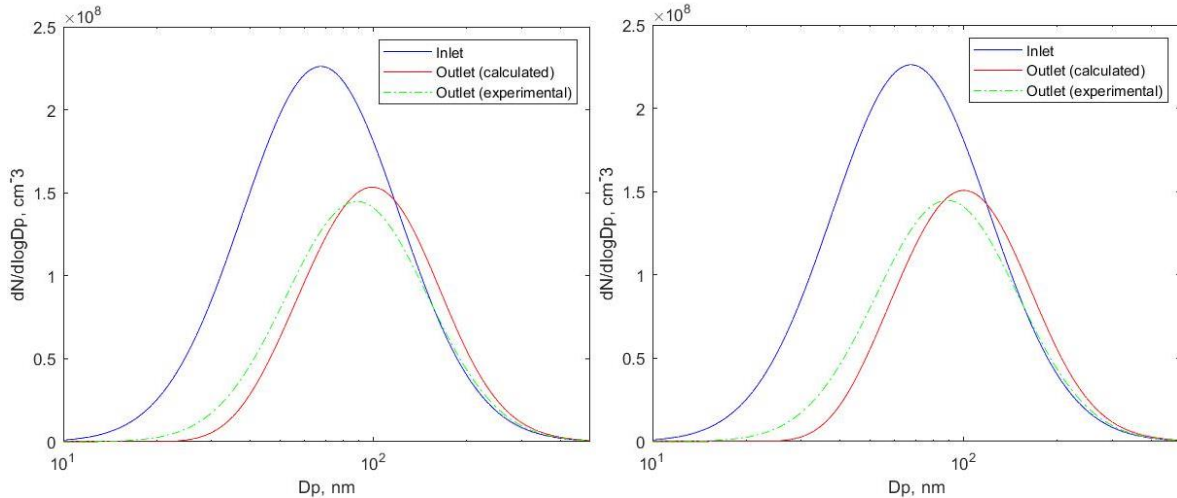
Προσομοιώθηκε επίσης η σειρά πειραματικών μετρήσεων για ταχύτητα οχήματος 120 km/h , ακολουθώντας την ίδια μεθοδολογία με τη σειρά μετρήσεων για ταχύτητα οχήματος 50 km/h . Υπό τη θεώρηση συνθηκών μόνιμης κατάστασης και αρχικοποιώντας το μοντέλο με τη μετρούμενη κατανομή μεγέθους σωματιδίων στην είσοδο του σωλήνα μεταφοράς (Πίνακας 1), υπολογίστηκε η συνάρτηση κατανομής μεγέθους των σωματιδίων στην έξοδο του σωλήνα μεταφοράς.

Η θερμοκρασία των τοιχωμάτων του σωλήνα μεταφοράς σε αυτήν την περίπτωση ελήφθη ίση με $T_w = 120^\circ\text{C}$. Το θερμοκρασιακό προφίλ του αερολύματος κατά μήκος του σωλήνα παρουσιάζεται στο Σχήμα 19, όπως υπολογίστηκε.



Σχήμα 19: Η θερμοκρασία του αερολύματος και των τοιχωμάτων του σωλήνα μεταφοράς συναρτήσει της απόστασης από την είσοδο του σωλήνα, για λειτουργία οχήματος σε ταχύτητα 120 km/h .

Η μορφοκλασματική διάσταση εξετάστηκε ως παράμετρος για τους υπολογισμούς. Στο Σχήμα 20 αποτυπώνεται η υπολογιζόμενη και η μετρούμενη μεταβολή της πυκνότητας κατανομής μεγέθους των σωματιδίων κατά τη διέλευση του αερολύματος από τον σωλήνα μεταφοράς, για τιμή μορφοκλασματικής διάστασης $d_f = 1.8$ και $df = 1.6$.



Σχήμα 20: Η πειραματικά μετρούμενη πυκνότητας κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην είσοδο και έξοδο του σωλήνα μεταφοράς και η υπολογιζόμενη πυκνότητα κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην έξοδο, για ταχύτητα οχήματος 120 km/h , ενεργό πυκνότητα των σωματιδίων-συμπλεγμάτων υπολογιζόμενη σύμφωνα με τη σχέση (43) και τιμή μορφοκλασματική διάστασης $d_f=1.8$ (αριστερά) και $d_f=1.6$ (δεξιά).

Παρατηρείται, για την περίπτωση ταχύτητας οχήματος 120 km/h , σχετική σύγκλιση μεταξύ της υπολογιζόμενης και της μετρούμενης κατανομής στην έξοδο του σωλήνα μεταφοράς. Αυτό υποδεικνύεται κι από τη σύγκριση της υπολογιζόμενης τιμής του συνολικού αριθμού σωματιδίων στην έξοδο του σωλήνα μεταφοράς με την αντίστοιχη μετρούμενη τιμή (Πίνακας 3). Σημειώνεται η παρατηρούμενη υπερεκτίμηση απώλειας σωματιδίων για τιμή μορφοκλασματικής διάστασης $d_f = 1.6$.

Πίνακας 3: Η πειραματικά μετρούμενη και η υπολογιζόμενη ολική συγκέντρωση σωματιδίων στην έξοδο του σωλήνα μεταφοράς, για ταχύτητα οχήματος 120 km/h .

	$N \text{ (cm}^{-3}\text{)}$
Πειραματικά μετρούμενη τιμή	$8.25 \cdot 10^7$
Υπολογιζόμενη τιμή (για $d_f = 1.8$)	$8.27 \cdot 10^7$
Υπολογιζόμενη τιμή (για $d_f = 1.6$)	$7.95 \cdot 10^7$

Συμπερασματικά, το μοντέλο φέρεται ικανό να προσομοιώσει ικανοποιητικά τα παραπάνω πειράματα, και οι μέθοδοι και οι παράμετροι που χρησιμοποιούνται θεωρούνται

κατάλληλες για σχετικούς υπολογισμούς. Στο επόμενο κεφάλαιο παρουσιάζεται η εφαρμογή του μοντέλου, για την προσομοίωση και την ανάλυση των νέων πειραμάτων που λάμβαναν χώρα παράλληλα αυτήν την περίοδο στο JRC, με σκοπό τη μελέτη και ανάλυση μετρήσεων επί των εκπομπών νανοσωματιδίων από οχήματα, στο πλαίσιο του υπό ανάπτυξη νέου Ευρωπαϊκού Κανονισμού (νέα ευρωπαϊκά πρότυπα εκπομπών οχημάτων – Euro 7 για αυτοκίνητα, βαν, φορτηγά και λεωφορεία).

5. Εφαρμογή - Αποτελέσματα

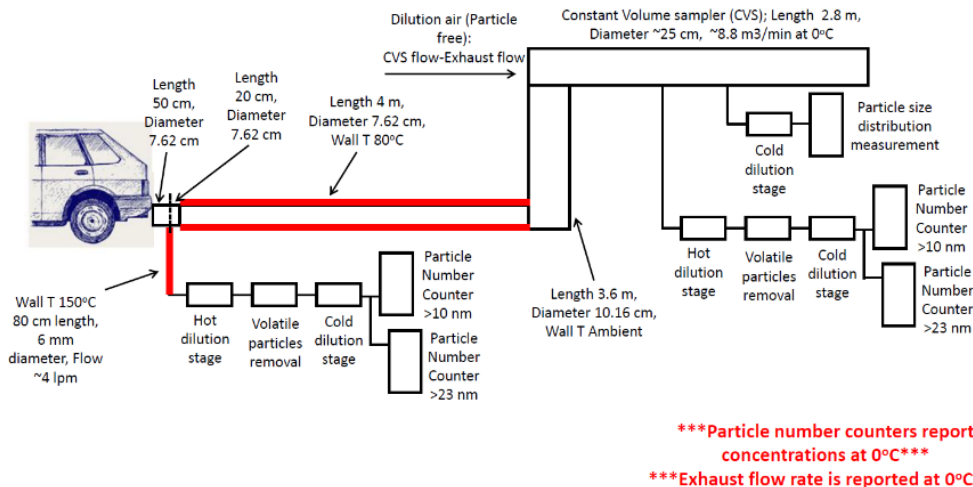
Η εφαρμογή του μοντέλου πραγματοποιήθηκε σε πλαίσιο συνεργασίας με εργαστήριο υπαγόμενο στα Εργαστήρια Εκπομπών Οχημάτων (Vehicle Emissions Laboratories – VELA) του Κοινού Κέντρου Ερευνών (Joint Research Centre – JRC) στην Ίσπρα της Ιταλίας. Ειδικότερα, το μοντέλο αξιοποιήθηκε για την υπολογιστική προσομοίωση πειραμάτων που λάμβαναν χώρα παράλληλα αυτήν την περίοδο στις εγκαταστάσεις του JRC, με σκοπό την ερμηνεία, κατανόηση και αξιολόγηση των διαφόρων μηχανισμών που επιδρούν στη δυναμική του αερολύματος και την αξιοπιστία των μετρήσεων.

5.1 Υπολογιστική προσομοίωση μεταφοράς και δυναμικής νανοσωματιδίων από εκπομπές οχήματος προς υποστήριξη – ερμηνεία μετρήσεων για τον νέο Ευρωπαϊκό Κανονισμό (Μείωση της ρύπανσης από ελαφρά μηχανοκίνητα οχήματα – Euro 7)

Στις εγκαταστάσεις του JRC πραγματοποιούνταν αυτήν την περίοδο νέα πειράματα αναφορικά με τη μεταφορά και δυναμική νανοσωματιδίων, τα οποία εκλύονται από εκπομπές συμβατικών (ελαφρών) οχημάτων, στα πλαίσια αναθεώρησης του Ευρωπαϊκού Κανονισμού για νέες αυστηρότερες προδιαγραφές (Μείωση της ρύπανσης από ελαφρά μηχανοκίνητα οχήματα – Euro 7*). Στην παρούσα εργασία εξετάστηκαν ορισμένες νέες σειρές πειραματικών μετρήσεων, με έμφαση στις μεταβολές της κατανομής μεγέθους των σωματιδίων και της κατά αριθμό συγκέντρωσης σωματιδίων, κατά μήκος των σωλήνων μεταφοράς και δειγματοληψίας.

Στο Σχήμα 21 παρουσιάζεται η πειραματική διάταξη που χρησιμοποιήθηκε στα νέα πειράματα. Οι σημαντικότερες διαφορές με την εργαστηριακή εγκατάσταση που περιγράφηκε στο προηγούμενο εδάφιο είναι τα τεχνικά χαρακτηριστικά του αγωγού μέσω του οποίου διέρχεται το αερόλυμα, από την εξάτμιση ελαφρού οχήματος μέχρι τη σήραγγα αραίωσης και το σημείο δειγματοληψίας. Συγκεκριμένα, ο αγωγός αποτελείται κυρίως από δύο τμήματα, έναν θερμαινόμενο δειγματοληπτικό σωλήνα μήκους $4m$ και διαμέτρου $7.62cm$, με θερμοκρασία τοιχώματων $80^{\circ}C$, και έναν σωλήνα μεταφοράς μήκους $3.6m$ και διαμέτρου $10.16cm$, με τοιχώματα σε θερμοκρασία περιβάλλοντος, η οποία, σύμφωνα με συστάσεις του JRC, υποτέθηκε ίση με $T_a = 23^{\circ}C$. Οι πειραματικές μετρήσεις πραγματοποιήθηκαν στην είσοδο του δειγματοληπτικού σωλήνα και εντός της σήραγγας αραίωσης, μετά από τυρβώδη ανάμιξη με αέρα.

*Κανονισμός (ΕΚ) του Ευρωπαϊκού Κοινοβουλίου και του Συμβουλίου που αφορά την έγκριση τύπου μηχανοκινήτων οχημάτων όσον αφορά εκπομπές από ελαφρά επιβατηγά και εμπορικά οχήματα (Euro 7) και σχετικά με την πρόσβαση σε πληροφορίες επισκευής και συντήρησης οχημάτων.



Σχήμα 21: Απλοποιημένο σχήμα της πειραματικής διάταξης των εργαστηριακών εγκαταστάσεων του Κοινού Κέντρου Ερευνών (2021) (Melas A., προσωπική επικοινωνία, 18 Μαΐου 2021).

Σε αντίθεση με την περίπτωση των προηγούμενων πειραμάτων (Isella, Giechaskiel & Drossinos, 2008), η κατανομή μεγέθους σωματιδίων κατά την είσοδο του αερολύματος στον αγωγό μεταφοράς δεν ήταν γνωστή από τις πειραματικές μετρήσεις. Οι μόνες διαθέσιμες μετρήσεις, πέραν της ογκομετρικής παροχής και θερμοκρασίας των καυσαερίων, αφορούσαν τη (κατά αριθμό) συγκέντρωση σωματιδίων με διάμετρο μεγαλύτερη από 10nm ($PN10$) και 23nm ($PN23$). Ως εκ τούτου, η συνάρτηση κατανομής στην είσοδο έπρεπε να εκτιμηθεί υπολογιστικά βάσει των δύο αυτών μετρήσεων. Επιπλέον, ακολουθώντας και τις συστάσεις του JRC, θεωρήθηκε ότι η τιμή συγκέντρωσης $PN10$ προσεγγίζει ικανοποιητικά την ολική συγκέντρωση των σωματιδίων. Η συνάρτηση πυκνότητας κατανομής μεγέθους των σωματιδίων στην είσοδο εκτιμήθηκε όπως περιγράφεται παρακάτω.

Η κατανομή μεγέθους των σωματιδίων στην είσοδο θεωρείται ότι ακολουθεί λογαριθμοκανονική συνάρτηση, σύμφωνα με την σχέση (3) του Κεφαλαίου 3 της παρούσας εργασίας. Οι παράμετροι σ , μ (τυπική απόκλιση και διάμεση διάμετρος αντίστοιχα) είναι άγνωστοι που πρέπει να προσδιοριστούν, ώστε να εκτιμηθεί η κατανομή στην είσοδο. Οι παράμετροι αυτοί μπορούν να προσδιοριστούν με τη βοήθεια των γνωστών τιμών συγκέντρωσης $PN10$, $PN23$. Ειδικότερα, με την υπόθεση λογαριθμοκανονικής συνάρτησης κατανομής, οι συγκεντρώσεις αυτές δίνονται από τις παρακάτω σχέσεις:

$$PN10 = \int_{10\text{nm}}^{\infty} n(d) dd \quad (59)$$

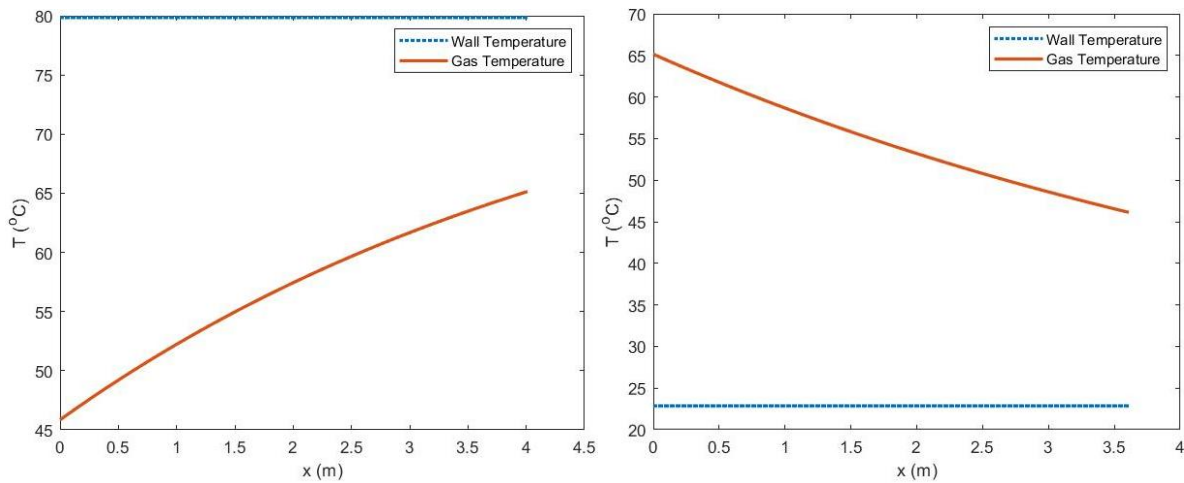
$$PN23 = \int_{23nm}^{\infty} n(d)dd \quad (60)$$

Οι σχέσεις (59) και (60) αποτελούν ένα σύστημα δύο εξισώσεων με δύο αγνώστους (σ, μ). Η επίλυση του παραπάνω μη-γραμμικού συστήματος πραγματοποιήθηκε αριθμητικά μέσω επαναληπτικής διαδικασίας, χρησιμοποιώντας συνάρτηση (*fsolve*) διαθέσιμη στο MATLAB. Για τον αριθμητικό υπολογισμό των ολοκληρωμάτων χρησιμοποιήθηκε μέθοδος τετραγωνικών συναρτήσεων (*quadrature*), επίσης μέσω διαθέσιμης στο MATLAB συνάρτησης (*integral*).

5.1.1 1^η σειρά μετρήσεων

Η πρώτη σειρά μετρήσεων διεξήχθη με ογκομετρική παροχή καυσαερίων $0.68 \text{ m}^3/\text{min}$ (θερμοκρασία αναφοράς 0°C) και θερμοκρασία καυσαερίων 46°C στην έξοδο της εξάτμισης του οχήματος, για σταθερή ταχύτητα οχήματος 50 km/h . Οι διαθέσιμες μετρήσεις ως προς τη σωματιδιακή συγκέντρωση ανήλθαν σε $PN10 = 1.38 \cdot 10^5 \text{ σωματίδια}/\text{cm}^3$ και $PN23 = 1.07 \cdot 10^5 \text{ σωματίδια}/\text{cm}^3$ στην είσοδο του αγωγού μεταφοράς.

Υποθέτοντας σταθερή θερμοκρασία τοιχωμάτων του αγωγού μεταφοράς, σύμφωνα με τις συστάσεις από το JRC, υπολογίσαμε τη μέση θερμοκρασία του αερολύματος κατά μήκος του άξονα του αγωγού. Το θερμοκρασιακό προφίλ του αερολύματος κατά μήκος του αγωγού μεταφοράς αποτυπώνεται στο Σχήμα 22. Η κλίση της θερμοκρασιακής καμπύλης εμφανίζεται σύμφωνη με την αναμενόμενη. Ενδιαφέρον προκαλεί η περίπτωση του σωλήνα μεταφοράς, του οποίου τα τοιχώματα έχουν μικρότερη θερμοκρασία από εκείνη του αερολύματος, αιτιώδη συνθήκη της θερμοφορτικής εναπόθεσης σωματιδίων κατά μήκος του σωλήνα αυτού.



Σχήμα 22: Η θερμοκρασία του αερολύματος, των τοιχωμάτων του δειγματοληπτικού σωλήνα μήκους 4m (αριστερά) και του σωλήνα μεταφοράς μήκους 3.6m (δεξιά), συναρτήσει της απόστασης από την είσοδο του κάθε σωλήνα, για θερμοκρασία καυσαερίων 46°C και ογκομετρική παροχή 0.68 m³/min σε θερμοκρασία αναφοράς 0°C.

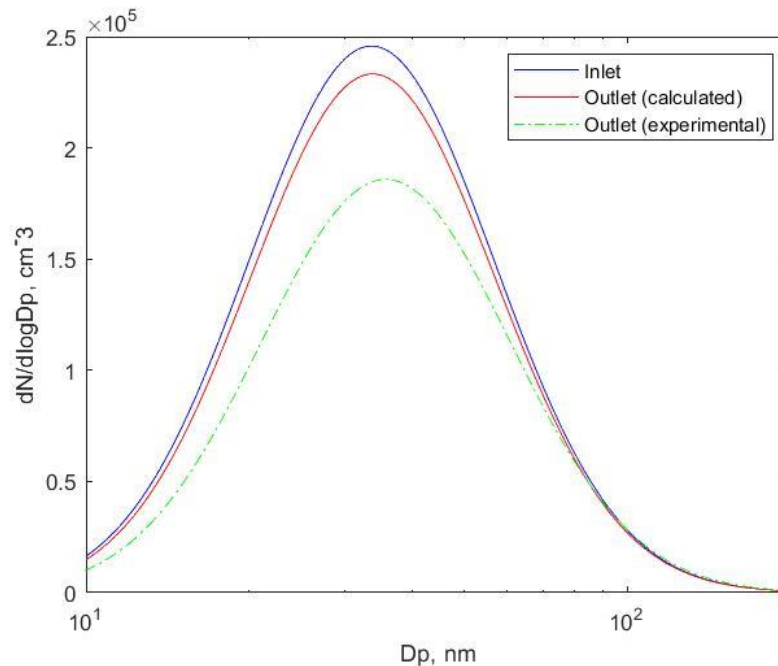
Ακόμη, ακολουθήθηκε η βηματική επίλυση της ΓΕΔΑ και της εξίσωσης μεταφοράς θερμότητας κατά μήκος του αγωγού μεταφοράς, ξεχωριστά για κάθε τμήμα του αγωγού (δειγματοληπτικός σωλήνας, σωλήνας μεταφοράς), λόγω των διαφορετικών επικρατούντων συνθηκών σε κάθε περίπτωση, όπως η γεωμετρία σωλήνα και η θερμοκρασία τοιχωμάτων. Η συνάρτηση κατανομής στην είσοδο εκτιμήθηκε, όπως περιγράφεται παραπάνω, βάσει των μετρούμενων τιμών PN10, PN23. Οι υπολογισμοί μεταφοράς και δυναμικής αερολύματος εκτελέστηκαν θεωρώντας αντιπροσωπευτική τιμή μορφοκλασματικής διάστασης $d_f = 1.8$ για όλο το εύρος τιμών διαμέτρου των σωματιδίων-συμπλεγμάτων. Η ενεργός πυκνότητα των σωματιδίων-συμπλεγμάτων υπολογίστηκε σύμφωνα με τη σχέση (43), όπως προτείνεται από τους Olfert & Rogak (2019).

Στον Πίνακα 4 συγκρίνονται οι υπολογιζόμενες τιμές των συγκεντρώσεων σωματιδίων (κατά αριθμό) με διάμετρο μεγαλύτερη από 10nm (PN10) και 23nm (PN23) στην έξοδο του αγωγού, ως προς τις πειραματικά μετρούμενες τιμές τους στην ίδια θέση. Παρατηρείται σημαντική απόκλιση μεταξύ των υπολογιζόμενων και των μετρούμενων μεγεθών, της τάξεως 22 – 24 %.

Πίνακας 4: Οι υπολογιζόμενες και οι πειραματικά μετρούμενες συγκεντρώσεις PN10 και PN23 στην έξοδο του αγωγού μεταφοράς (1^η σειρά μετρήσεων).

	PN10	PN23
Υπολογιζόμενη τιμή	$1.31 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-3}$	$1.04 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-3}$
Πειραματικά μετρούμενη τιμή	$1.06 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-3}$	$8.53 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-3}$
Λόγος υπολογιζόμενης προς μετρούμενης τιμής	1.24	1.22

Για τον προσδιορισμό της συνάρτησης πυκνότητας κατανομής μεγέθους των σωματιδίων στην έξοδο του αγωγού, όπως προκύπτει από τις πειραματικές μετρήσεις, ακολουθήθηκε η ίδια μεθοδολογία που περιγράφεται παραπάνω. Βάσει των διαθέσιμων πειραματικών μετρήσεων (PN10, PN23) στην έξοδο του αγωγού, επιλύθηκε το σύστημα εξισώσεων (59), (60). Κατά αυτόν τον τρόπο, επετεύχθη η γραφική απεικόνιση της υπολογιζόμενης και της μετρούμενης πυκνότητας κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην έξοδο του αγωγού μεταφοράς (Σχήμα 23).



Σχήμα 23: Η μετρούμενη πυκνότητα κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην είσοδο και έξοδο του αγωγού μεταφοράς και η υπολογιζόμενη πυκνότητα κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην έξοδο, μετά από αναγωγή σε θερμοκρασία 0°C (1^η σειρά μετρήσεων).

Στο Σχήμα 23 διακρίνεται η απόκλιση της υπολογιζόμενης μεταβολής της πυκνότητας κατανομής μεγέθους των σωματιδίων σε σχέση με την αντίστοιχη πειραματική. Η υπολογιζόμενη ελάττωση του σωματιδιακού πληθυσμού και μεταβολή της κατανομής μεγέθους υπολείπεται της μετρούμενης.

Για την περαιτέρω διερεύνηση των μηχανισμών που επιδρούν στην εξέλιξη της κατανομής των σωματιδίων έγινε προσδιορισμός των *χρονικών κλιμάκων (timescales)* δράσης των μηχανισμών αυτών, οι οποίες καταδεικνύουν τη σχετική επίδραση κάθε δυναμικής διαδικασίας του αερολύματος. Για το σκοπό αυτό χρησιμοποιήθηκαν οι σχέσεις που δίνονται στην εργασία των Isella, Giechaskiel & Drossinos (2008). Οι εκτιμώμενες τιμές των χρονικών κλιμάκων των διάφορων μηχανισμών δίνονται στους Πίνακες 5 και 6.

Πίνακας 5: Οι χρονικές κλίμακες των δυναμικών διαδικασιών του αερολύματος στο δειγματοληπτικό σωλήνα μήκους 4m.

Χρόνος παραμονής	Συσσωμάτωση – Συνάθροιση	Brownian διάχυση	Τυρβώδης διάχυση	Τυρβώδης πρόσκρουση
$\tau_{res} = 1.4s$	$\tau_{ag} = 2.4 \cdot 10^3 s$	$\tau_{B-diff} = 120s$	$\tau_{T-diff} = 115s$	$\tau_{T-edd} = 5.5 \cdot 10^9 s$

Αρχικά υπολογίστηκαν οι χρονικές κλίμακες των δυναμικών φαινομένων του αερολύματος κατά την παρέλευση του από τον δειγματοληπτικό σωλήνα. Συγκρίνοντας τις χρονικές κλίμακες του Πίνακα 5 μεταξύ τους και ιδιαίτερα με τον χρόνο παραμονής των σωματιδίων στον δειγματοληπτικό σωλήνα, προκύπτει αμελητέα η επίδραση του μηχανισμού συσσωμάτωσης-συνάθροισης μεταξύ των σωματιδίων, ενώ παρουσιάζεται ιδιαίτερα περιορισμένη η επίδραση των διάφορων μηχανισμών διάχυσης και εναπόθεσης των σωματιδίων. Ως εκ τούτου, κανένας από τους παραπάνω μηχανισμούς δεν δύναται να αιτιολογήσει τη μετρούμενη ελάττωση του σωματιδιακού πληθυσμού. Προς επιπρόσθετη υποστήριξη της παρατήρησης αυτής, υπολογίστηκε επίσης το *κλάσμα διαπερατότητας (penetration fraction)* της τυρβώδους διάχυσης καθ' όλο το μήκος του δειγματοληπτικού σωλήνα, χρησιμοποιώντας αναλυτικές λύσεις και συσχετίσεις που είναι διαθέσιμες στη βιβλιογραφία (Malet et al., 2000; Mitrakos et al., 2008). Από τους υπολογισμούς αυτούς, το κλάσμα διαπερατότητας προέκυψε $P_{diff} = 0.99$, παρουσιάζοντας δηλαδή πολύ μικρή εναπόθεση σωματιδίων, συμπέρασμα που συνάδει με τους υπολογισμούς στην παρούσα εργασία.

Πίνακας 6: Οι χρονικές κλίμακες παραμονής και θερμοφόρισης εντός του σωλήνα μεταφοράς 3.6m.

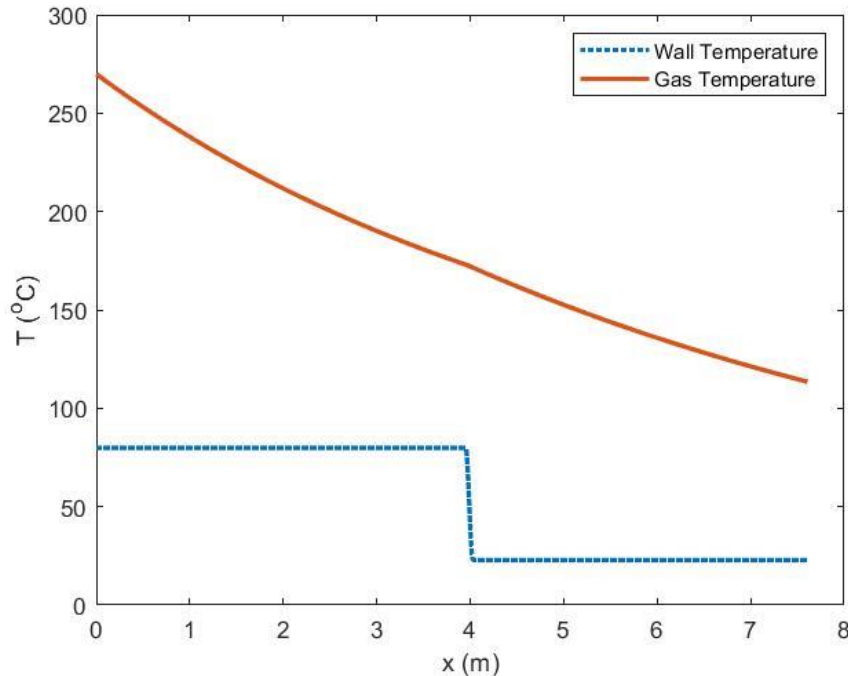
Χρόνος παραμονής	Θερμοφόριση
$\tau_{res} = 2s$	$\tau_{th} = 70s$

Επίσης, για την πλήρη επαλήθευση των υπολογισμών, προσδιορίστηκε η χρονική κλίμακα της θερμοφοριτικής εναπόθεσης των σωματιδίων στον σωλήνα μεταφοράς (Πίνακας 6). Όπως αναφέρεται παραπάνω, τα τοιχώματα του συγκεκριμένου τμήματος του αγωγού ήταν ψυχρότερα του θερμού διερχόμενου αερολύματος, οδηγώντας στην εναπόθεση σωματιδίων λόγω της θερμοκρασιακής βαθμίδας. Εντούτοις, συγκρίνοντας τον χρόνο παραμονής των σωματιδίων εντός του σωλήνα μεταφοράς με την χρονική κλίμακα θερμοφόρισής τους, όπως υπολογίστηκαν και παρουσιάζονται στον Πίνακα 6, γίνεται εύκολα αντιληπτό πως, ενώ πραγματοποιείται θερμοφοριτική εναπόθεση σωματιδίων εντός του σωλήνα, ο μηχανισμός αυτός δεν αρκεί να αιτιολογήσει την πειραματικά μετρούμενη ελάττωση της (κατά αριθμό) συγκέντρωσης σωματιδίων. Παρατήρηση η οποία επιβεβαιώθηκε έπειτα από τον προσδιορισμό της ολικής απόδοσης θερμοφοριτικής εναπόθεσης (*E_{th}*) σύμφωνα με τη μεθοδολογία που προτείνεται από Housiadas & Drossinos (2005), η οποία υπολογίστηκε εντός του εύρους [4.9 %, 5.3 %].

5.1.2 2^η σειρά μετρήσεων

Το πείραμα διεξήχθη υπό νέες συνθήκες, ήτοι ογκομετρική παροχή καυσαερίων 2.09 m³/min, για θερμοκρασία αναφοράς 0°C, και θερμοκρασία καυσαερίων 270°C στην έξοδο της εξάτμισης του οχήματος, για σταθερή ταχύτητα οχήματος 120 km/h. Οι διαθέσιμες μετρήσεις ως προς τη σωματιδιακή συγκέντρωση καταγράφηκαν ως: *PN10* = 7.89·10⁴ σωματίδια/cm³ και *PN23* = 6.01·10⁴ σωματίδια/cm³ στην είσοδο του αγωγού μεταφοράς. Οι υπολογισμοί εκτελέστηκαν θεωρώντας αντιπροσωπευτική τιμή μορφοκλασματικής διάστασης *d_f* = 1.8 για όλο το εύρος τιμών διαμέτρου των σωματιδίων-συμπλεγμάτων. Η ενεργός πυκνότητα των σωματιδίων-συμπλεγμάτων υπολογίστηκε από τη σχέση (43), σύμφωνα με τους Olfert & Rogak (2019).

Το μοντέλο προσαρμόστηκε κατάλληλα ώστε να επιλύει βηματικά τη ΓΕΔΑ και την εξίσωση μεταφοράς θερμότητας σε κάθε θέση του αγωγού για το σύνολο της διάταξης του αγωγού μεταφοράς, λαμβάνοντας υπόψη τις διαφορετικές συνθήκες που επικρατούν στα επιμέρους τμήματά του (βλ. Παράρτημα III). Στο Σχήμα 24 παρουσιάζεται το θερμοκρασιακό προφίλ του αερολύματος κατά μήκος του αγωγού.



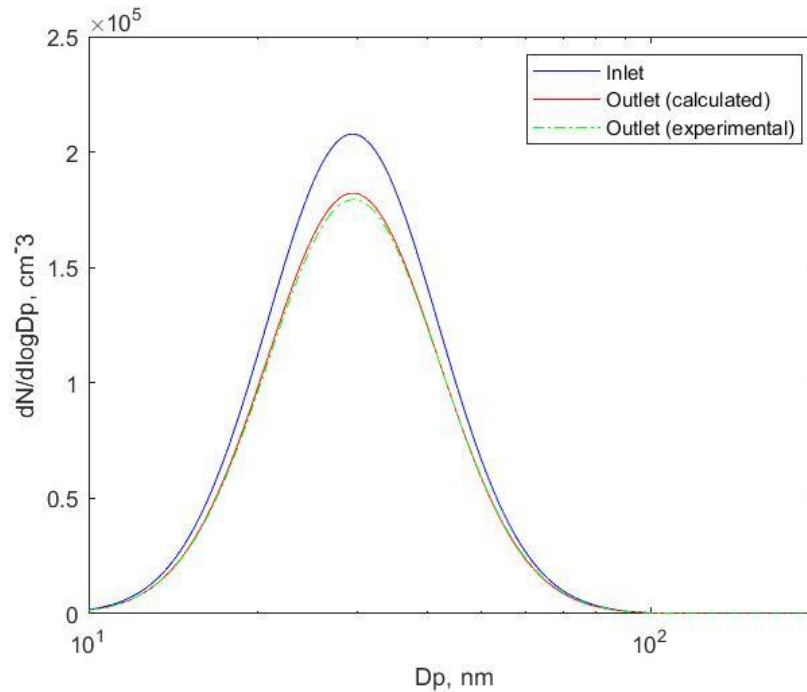
Σχήμα 24: Η θερμοκρασία του αερολύματος και των τοιχωμάτων του αγωγού μεταφοράς συναρτήσεως της απόστασης από την είσοδο του κάθε σωλήνα, για θερμοκρασία καυσαερίων 270°C και ογκομετρική παροχή $2.09 \text{ m}^3/\text{min}$ σε θερμοκρασία αναφοράς 0°C .

Στον Πίνακα 7 παρουσιάζεται η σύγκριση των υπολογιζόμενων τιμών των (κατά αριθμό) συγκεντρώσεων σωματιδίων με διάμετρο μεγαλύτερη από 10nm (PN10) και 23nm (PN23) στην έξοδο του αγωγού, ως προς τις πειραματικά μετρούμενες τιμές τους στην ίδια θέση, μετά από αναγωγή σε θερμοκρασία 0°C . Παρατηρείται ικανοποιητική συμφωνία μεταξύ των υπολογιζόμενων και των μετρούμενων συγκεντρώσεων.

Πίνακας 7: Οι υπολογιζόμενες και οι πειραματικά μετρούμενες συγκεντρώσεις PN10 και PN23 στην έξοδο του αγωγού μεταφοράς (2^η σειρά μετρήσεων).

	PN10	PN23
Υπολογιζόμενη τιμή	$6.93 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-3}$	$5.27 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-3}$
Πειραματικά μετρούμενη τιμή	$6.84 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-3}$	$5.23 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-3}$
Λόγος υπολογιζόμενης προς μετρούμενης τιμής	1.01	1.01

Η πυκνότητα κατανομής μεγέθους των σωματιδίων στην είσοδο και έξοδο του αγωγού, όπως προκύπτει από τις πειραματικές μετρήσεις, προσεγγίστηκε με λογαριθμοκανονική συνάρτηση, η οποία υπολογίστηκε από επίλυση των εξισώσεων (59) και (60), σύμφωνα με τη μεθοδολογία που αναπτύσσεται στο προηγούμενο εδάφιο. Η γραφική απεικόνιση της υπολογιζόμενης και της πειραματικής πυκνότητας κατανομής μεγέθους σωματιδίων παρουσιάζεται στο Σχήμα 25. Παρατηρείται συμφωνία μεταξύ της υπολογιζόμενης και της μετρούμενης κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην έξοδο του αγωγού.



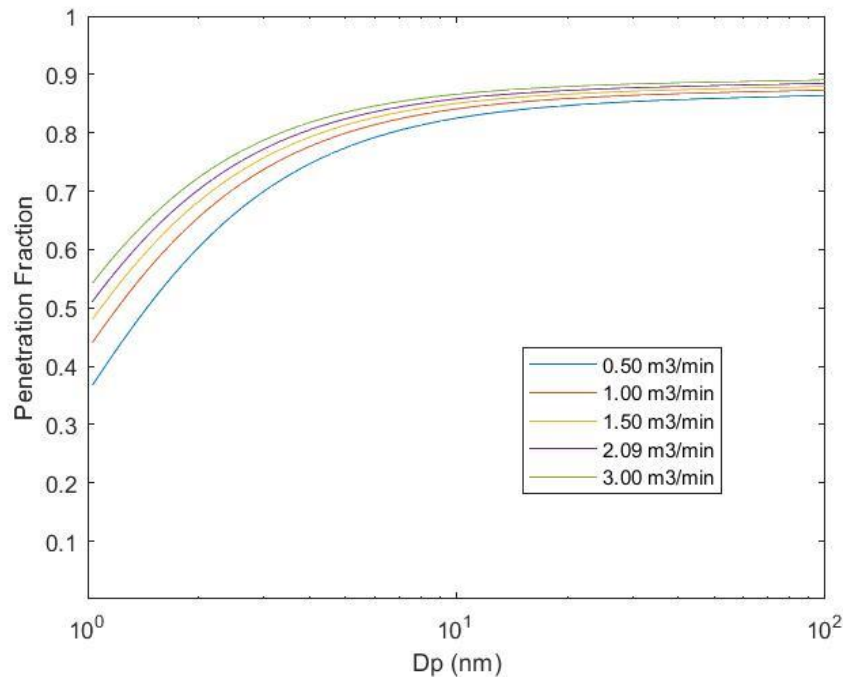
Σχήμα 25: Η μετρούμενη πυκνότητα κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην είσοδο και έξοδο του αγωγού μεταφοράς και η υπολογιζόμενη πυκνότητα κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην έξοδο, μετά από αναγωγή σε θερμοκρασία 0°C (2^η σειρά μετρήσεων).

Για τον προσδιορισμό της σχετικής επίδρασης κάθε μηχανισμού στη δυναμική του αερολύματος, προσδιορίστηκαν οι διάφορες χρονικές κλίμακες, όπως παρατίθενται στον Πίνακα 8. Παρατηρείται η σημασία του μηχανισμού της θερμοφοριτικής εναπόθεσης στη δυναμική του σωματιδιακού πληθυσμού, ενώ μικρότερης αλλά όχι αμελητέας σημασίας καθίστανται οι μηχανισμοί της Brownian και τυρβώδους διάχυσης των σωματιδίων. Απεναντίας, ο μηχανισμός της συσσωμάτωσης φέρεται να επιδρά ελάχιστα στην μεταβολή της κατανομής του σωματιδιακού πληθυσμού.

Πίνακας 8: Οι χρονικές κλίμακες των δυναμικών φαινομένων του αερολύματος.

Χρόνος παραμονής	Συσσωμάτωση - Συνάθροιση	Θερμοφό -ριση	Brownian διάχυση	Τυρβώδης διάχυση	Τυρβώδης πρόσκρουση
$\tau_{res} = 0.5s$	$\tau_{ag} = 7.0 \cdot 10^3 s$	$\tau_{th} = 3s$	$\tau_{B-diff} = 69s$	$\tau_{T-diff} = 76s$	$\tau_{T-edd} = 1.5 \cdot 10^8 s$

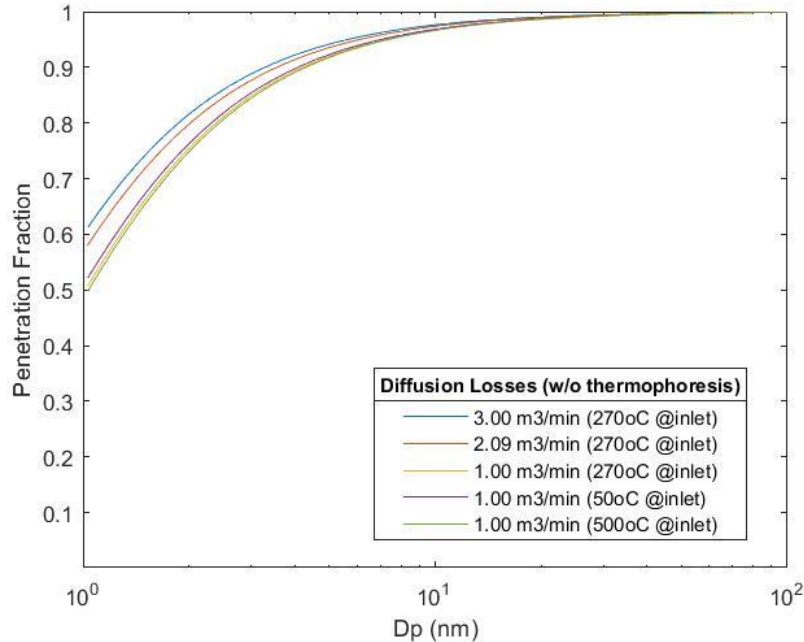
Για περαιτέρω διερεύνηση της συσχέτισης μεταξύ της υπολογιζόμενης ελάττωσης της σωματιδιακής συγκέντρωσης με το μέγεθος των σωματιδίων-συμπλεγμάτων, προσδιορίστηκε το ολικό κλάσμα διαπερατότητας για όλο το εύρος των τιμών σωματιδιακής διαμέτρου (Σχήμα 26). Η διαδικασία επαναλήφθηκε για διάφορες τιμές παροχής καυσαερίων στον αγωγό μεταφοράς, ώστε να αναδειχθεί η εξάρτηση της εν λόγω μεταβολής από την ογκομετρική παροχή.



Σχήμα 26: Ολικό κλάσμα διαπερατότητας συναρτήσει της σωματιδιακής διαμέτρου, για διάφορες τιμές ογκομετρικής παροχής και με θερμοκρασία εισόδου 270°C.

Στο Σχήμα 26 παρατηρούνται μικρές τιμές του κλάσματος διαπερατότητας για τις μικρότερες τιμές διαμέτρου σωματιδίων (1nm – 10nm) και σχετική εξάρτηση από την τιμή της παροχής, ενώ για μεγαλύτερες τιμές διαμέτρου η τιμή του κλάσματος διαπερατότητας φέρεται να συγκλίνει περί της τιμής 0.88, σχεδόν για όλες τις τιμές παροχής. Ένα μέρος των σωματιδίων φέρεται να εντοπίζεται σταθερά στις απώλειες, σε κάθε εξεταζόμενη

περίπτωση, πιθανόν λόγω του μηχανισμού της θερμοφοριτικής εναπόθεσης. Η σχετική επίδραση συγκεκριμένα των μηχανισμών διάχυσης σωματιδίων στην μεταβολή του σωματιδιακού πληθυσμού, χωρίς να ληφθεί υπόψη ο μηχανισμός της θερμοφόρισης, απεικονίζεται στο Σχήμα 27.



Σχήμα 27: Κλάσμα διαπερατότητας αναφορικά με την απώλεια σωματιδίων λόγω διάχυσης συναρτήσει της σωματιδιακής διαμέτρου, για διάφορες τιμές παροχής και θερμοκρασίας εισόδου, θεωρώντας αμελητέα θερμοφόριση.

Στο Σχήμα 27 παρατηρείται απώλεια σωματιδίων μικρότερης διαμέτρου ($1\text{nm} - 10\text{nm}$) λόγω των μηχανισμών διάχυσης, η οποία εξασθενεί σημαντικά για μεγαλύτερα σωματίδια, καθώς επίσης και χαλαρή εξάρτηση από τις τιμές ογκομετρικής παροχής και θερμοκρασίας εισόδου. Κατά αυτόν τον τρόπο επιβεβαιώνεται η σημασία του μηχανισμού της θερμοφόρισης για την απώλεια σωματιδίων στη δεύτερη σειρά μετρήσεων, όπου το αερόλυμα εισήχθη στον αγωγό μεταφοράς σε πολύ μεγαλύτερη θερμοκρασία από τα τοιχώματά του.

5.1.3 Υπόλοιπες σειρές μετρήσεων

Το μοντέλο εφαρμόστηκε επίσης στην περίπτωση έξι ακόμη σειρών πειραματικών μετρήσεων, για συνθήκες μόνιμης κατάστασης. Οι τρεις εξ αυτών αφορούσαν ταχύτητα οχήματος 50 km/h , ενώ οι υπόλοιπες τρεις αφορούσαν ταχύτητα οχήματος 90 km/h .

Στον Πίνακα 9 δίνονται συγκεντρωτικά οι πειραματικές μετρήσεις για την περίπτωση ταχύτητας οχήματος 50 km/h . Συγκεκριμένα, παρουσιάζονται η παροχή και θερμοκρασία καυσαερίων στην είσοδο του αγωγού και οι μετρούμενες συγκεντρώσεις σωματιδίων στην είσοδο και την έξοδο.

Πίνακας 9: Μετρούμενα μεγέθη πειραμάτων για ταχύτητα οχήματος 50 km/h .

Παροχή καυσαερίων	$0.68 \text{ m}^3/\text{min}$	$0.55 \text{ m}^3/\text{min}$	$0.63 \text{ m}^3/\text{min}$
Θερμοκρασία καυσαερίων	$46 \text{ }^\circ\text{C}$	$45 \text{ }^\circ\text{C}$	$45 \text{ }^\circ\text{C}$
Συγκέντρωση PN10 εισόδου	$1.38 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-3}$	$1.29 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-3}$	$1.47 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-3}$
Συγκέντρωση PN23 εισόδου	$1.07 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-3}$	$1.02 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-3}$	$1.17 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-3}$
Συγκέντρωση PN10 εξόδου	$1.06 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-3}$	$1.26 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-3}$	$1.18 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-3}$
Συγκέντρωση PN23 εξόδου	$8.53 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-3}$	$1.05 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-3}$	$9.67 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-3}$

(Melas, A., προσωπική επικοινωνία, 15 Ιουνίου 2021)

Τα αποτελέσματα της υπολογιστικής προσομοίωσης, όσον αφορά τις υπολογιζόμενες σωματιδιακές συγκεντρώσεις στην έξοδο του αγωγού, παρατίθενται στον Πίνακα 10. Παρατηρείται η σύγκλιση των υπολογιζόμενων και των μετρούμενων μεγεθών σε μία εκ των τριών σειρών μετρήσεων.

Πίνακας 10: Οι λόγοι των υπολογιζόμενων προς τις μετρούμενες τιμές συγκεντρώσεων σωματιδίων στην έξοδο του αγωγού.

Λόγος PN10 εξόδου	1.26	0.99	1.21
Λόγος PN23 εξόδου	1.22	0.94	1.17

Στον Πίνακα 11 δίνονται οι πειραματικές μετρήσεις για την περίπτωση των σειρών μετρήσεων με ταχύτητα οχήματος 90 km/h .

Πίνακας 11: Μετρούμενα μεγέθη πειραμάτων για ταχύτητα οχήματος 90 km/h.

Παροχή καυσαερίων	1.13 m ³ /min	1.00 m ³ /min	1.14 m ³ /min
Θερμοκρασία καυσαερίων	173 °C	174 °C	173 °C
Συγκέντρωση PN10 εισόδου	7.50·10 ⁴ cm ⁻³	9.06·10 ⁴ cm ⁻³	9.02·10 ⁴ cm ⁻³
Συγκέντρωση PN23 εισόδου	5.69·10 ⁴ cm ⁻³	7.08·10 ⁴ cm ⁻³	6.93·10 ⁴ cm ⁻³
Συγκέντρωση PN10 εξόδου	6.40·10 ⁴ cm ⁻³	8.59·10 ⁴ cm ⁻³	7.61·10 ⁴ cm ⁻³
Συγκέντρωση PN23 εξόδου	5.16·10 ⁴ cm ⁻³	6.92·10 ⁴ cm ⁻³	6.00·10 ⁴ cm ⁻³

(Melas, A., προσωπική επικοινωνία, 15 Ιουνίου 2021)

Τα αποτελέσματα της υπολογιστικής προσομοίωσης των παραπάνω σειρών μετρήσεων παρατίθενται στον Πίνακα 12.

Πίνακας 12: Οι λόγοι των υπολογιζόμενων προς τις μετρούμενες τιμές συγκεντρώσεων σωματιδίων στην έξοδο του αγωγού.

Λόγος PN10 εξόδου	1.06	0.96	1.07
Λόγος PN23 εξόδου	1.01	0.93	1.05

Για την περίπτωση ταχύτητας οχήματος 90 km/h, παρατηρείται σύγκλιση μεταξύ των υπολογιζόμενων και των μετρούμενων συγκεντρώσεων σωματιδίων στην έξοδο του αγωγού, σε όλες τις εν λόγω σειρές μετρήσεων.

6. Συμπεράσματα

Στην παρούσα εργασία αναπτύσσεται και παρουσιάζεται υπολογιστικό μοντέλο για τη προσομοίωση της μεταφοράς και της δυναμικής μη-σφαιρικών νανοσωματιδίων, τα οποία περιέχονται σε αερόλυμα, π.χ. εκλυόμενο από όχημα, για την ανάλυση, ερμηνεία και υποστήριξη πειραματικών μετρήσεων. Τα πειράματα αυτά διενεργούνταν παράλληλα αυτή τη περίοδο σε εργαστήριο του Ευρωπαϊκού Κοινού Κέντρου Ερευνών (JRC), στα πλαίσια αναθεώρησης των ευρωπαϊκών προδιαγραφών σχετικά με τη ρύπανση από ελαφρά μηχανοκίνητα οχήματα (Euro 7). Το προτεινόμενο μοντέλο περιλαμβάνει την επίλυση της μονοδιάστατης Γενική Εξίσωσης της Δυναμικής του Αερολύματος (ΓΕΔΑ), με ημι-Lagrangian βηματική προσέγγιση, και τη παράλληλη επίλυση της εξίσωσης μεταφοράς θερμότητας σε μία διάσταση. Για την αριθμητική προσέγγιση της συνάρτησης κατανομής μεγέθους των σωματιδίων, ακολουθείται η τμηματική μέθοδος, διακριτοποιώντας το εύρος τιμών διαμέτρου των σωματιδίων σε λογαριθμικά χωρισμένα τμήματα (bins). Στο μοντέλο λαμβάνεται υπόψη η διαδικασία της συσσωμάτωσης-συνάθροισης και προσδιορίζονται τα μορφολογικά χαρακτηριστικά των σχηματιζόμενων, τύπου fractals συμπλεγμάτων (clusters) σωματιδίων, ενώ επιλύονται επίσης οι διάφοροι μηχανισμοί διάχυσης και εναπόθεσης σωματιδίων.

Το μοντέλο επαληθεύτηκε εκτενώς μέσω σύγκρισης με αναλυτικές λύσεις διαθέσιμες στη βιβλιογραφία, αλλά και με παλαιότερα πειραματικά δεδομένα διαθέσιμα από το JRC. Ειδικότερα, πραγματοποιήθηκε έλεγχος της προτεινόμενης μεθόδου επίλυσης του μηχανισμού της συσσωμάτωσης. Ο έλεγχος βασίστηκε σε συγκρίσεις με γνωστές αναλυτικές λύσεις τις ΓΕΔΑ για την περίπτωση στατικού αερολύματος (απουσία μεταφοράς). Από τη σύγκριση των αριθμητικών αποτελεσμάτων του μοντέλου της παρούσας εργασίας με τις αναλυτικές λύσεις για τη συσσωμάτωση υπό ιδανικές συνθήκες, παρατηρείται άριστη συμφωνία. Η αριθμητική επίλυση φέρεται να είναι ικανοποιητικά ακριβής.

Η πειραματική επαλήθευση περιλάμβανε την υπολογιστική προσομοίωση παλαιότερων πειραμάτων επί της μεταφοράς και δυναμικής νανοσωματιδίων από εκπομπές ελαφρού πετρελαιοκίνητου (diesel) οχήματος, σύμφωνα με τα, τότε ισχύοντα, πρότυπα του Ευρωπαϊκού Κανονισμού (Euro 3), εκ μέρους του JRC. Από τους υπολογισμούς, παρατηρείται πολύ καλή συμφωνία μεταξύ των υπολογιζόμενων τιμών και των πειραματικών μετρήσεων. Η μεταβολή της πυκνότητας κατανομής μεγέθους των σωματιδίων υπολογίζεται με ακρίβεια.

Άξια αναφοράς καθίσταται η επιτυχής προσέγγιση των χαρακτηριστικών των μη-σφαιρικών σωματιδίων με τη θεώρηση σχηματισμών τύπου fractals, μέσω του προτεινόμενου μοντέλου. Η συσχέτιση της ενεργούς πυκνότητας των σωματιδίων με τη διάμετρο τους σύμφωνα με τους Olfert & Rogak (2019), βελτίωσε την ακρίβεια του μοντέλου. Σε συμφωνία με τις πειραματικές μετρήσεις προέκυψαν επίσης τα αποτελέσματα, για διαφορετικές τιμές μορφοκλασματικής διάστασης, με κάπως ικανοποιητικότερη σύγκλιση να εντοπίζεται για τη θεώρηση $d_f = 1.8$.

Επομένως, κρίθηκε σκόπιμη η εφαρμογή του μοντέλου για την υπολογιστική προσομοίωση των νέων πειραμάτων που διενεργούνταν παράλληλα αυτήν την περίοδο από το JRC, με σκοπό την ερμηνεία και αξιολόγηση των δυναμικών διαδικασιών του αερολύματος και την υποστήριξη των πειραματικών μετρήσεων.

Κατά την προσομοίωση της πρώτης σειράς μετρήσεων παρατηρήθηκε απόκλιση των υπολογιζόμενων και των πειραματικά μετρούμενων τιμών, καθώς υπολογίστηκε ελάχιστη μείωση της συγκέντρωσης σωματιδίων. Από τον προσδιορισμό των χρονικών κλιμάκων των δυναμικών φαινομένων του αερολύματος, κατέστη σαφής η αμελητέα επίδραση του μηχανισμού της συσσωμάτωσης. Αιτία αυτού κρίθηκε η σχετικά χαμηλή συγκέντρωση σωματιδίων στο αερόλυμα (τάξεως 10^5 σωματίδια/cm³). Το παραπάνω συμπέρασμα υποστηρίζουν οι Giechaskiel et al. (2012), αναφέροντας πως η επίδραση του μηχανισμού της συσσωμάτωσης καθίσταται σημαντική για υψηλότερες συγκεντρώσεις σωματιδίων (τάξεως τουλάχιστον 10^7 σωματίδια/cm³). Για την εν λόγω σειρά μετρήσεων, σημαντικότεροι μηχανισμοί απώλειας σωματιδίων ήταν η θερμοφοριστική εναπόθεση και η διάχυση των σωματιδίων. Εντούτοις, κανένας από τους εξεταζόμενους μηχανισμούς δεν ήταν δυνατό να αιτιολογήσει τη μετρούμενη απώλεια σωματιδίων.

Η δεύτερη σειρά πειραματικών μετρήσεων προσομοιώθηκε με μεγαλύτερη ακρίβεια, καθώς υπήρξε πολύ καλή συμφωνία μεταξύ των υπολογισμών και των πειραματικών μετρήσεων, σχετικά με την απώλεια σωματιδίων. Κυριότερος μηχανισμός απώλειας σωματιδίων προσδιορίστηκε η θερμοφόριση, λόγω θερμοκρασιακής βαθμίδας, ενώ περιορισμένη προσδιορίστηκε η επίδραση των μηχανισμών διάχυσης των σωματιδίων. Η επίδραση του μηχανισμού της συσσωμάτωσης – συνάθροισης κρίνεται επίσης αμελητέα. Υπολογίστηκε ελάττωση της συγκέντρωσης σωματιδίων για όλο το εύρος τιμών σωματιδιακής διαμέτρου, λόγω θερμοφόρισης των σωματιδίων. Για τα μικρότερα σε μέγεθος σωματίδια ($1nm - 10nm$) υπολογίστηκαν μεγαλύτερες απώλειες, καθώς σε αυτές τις τάξεις μεγέθους έγινε επίσης αισθητή η επίδραση των μηχανισμών διάχυσης.

Προσομοιώθηκαν επιπλέον έξι σειρές μετρήσεων, για τις οποίες παρουσιάστηκαν οι υπολογιζόμενες τελικές συγκεντρώσεις σωματιδίων *PN10* και *PN23* και συγκρίθηκαν με τις αντίστοιχες πειραματικές μετρήσεις. Για την περίπτωση της ταχύτητας οχήματος $50 km/h$, πολύ καλή συμφωνία μεταξύ των υπολογιζόμενων και των μετρούμενων τιμών εντοπίστηκε σε μία εκ των τριών σειρών μετρήσεων. Αντιθέτως, για την περίπτωση ταχύτητας οχήματος $90 km/h$, υπήρξε ικανοποιητική σύγκλιση μεταξύ των υπολογιζόμενων και των μετρούμενων συγκεντρώσεων, για όλες τις σειρές μετρήσεων. Συμπεραίνουμε πως, για τη μεγαλύτερη ταχύτητα οχήματος, προσομοιώθηκαν ικανοποιητικά τα δυναμικά φαινόμενα του αερολύματος. Εντούτοις, για τη περίπτωση μικρότερης ταχύτητας οχήματος, φαίνεται να επιδρά άγνωστος προς το παρόν μηχανισμός του αερολύματος, ο οποίος δεν επιλύεται από το προτεινόμενο μοντέλο (π.χ. πυρηνοποίηση, εξάτμιση – συμπύκνωση).

Εν κατακλείδι, το προτεινόμενο υπολογιστικό μοντέλο προσομοιώνει ικανοποιητικά τη μεταφορά και τη δυναμική νανοσωματιδίων περιεχόμενων σε αερόλυμα. Καθώς στηρίζεται στην τμηματική μέθοδο για την αριθμητική προσέγγιση της συνάρτησης κατανομής

μεγέθους των σωματιδίων, προσφέρει γενικότητα, αφού μπορεί να προσομοιώσει τυχαίες κατανομές. Το μοντέλο προσδιορίζει τα μορφολογικά χαρακτηριστικά των συμπλεγμάτων σωματιδίων, θεωρώντας ότι αυτά προσομοιάζουν με φράκταλ (fractals), για αερόλυμα παραγόμενο από μηχανές εσωτερικής καύσης, χυτήρια κλπ. Για τη περίπτωση διέλευσης αερολύματος μέσω ενός αγωγού, πραγματοποιεί επίλυση της εξίσωσης μεταφοράς θερμότητας σε μία διάσταση, καθώς και της μονοδιάστατης ΓΕΔΑ, με ημι-Lagrangian βηματική προσέγγιση, λαμβάνοντας υπόψη τη διαδικασία της συσσωμάτωσης-συνάθροισης σωματιδίων για τη δυναμική του αερολύματος. Το μοντέλο υπολογίζει επίσης τη διάχυση και εναπόθεση των σωματιδίων, επιλύοντας τον μηχανισμό της θερμοφόρισης, για την περίπτωση ύπαρξης θερμοκρασιακής βαθμίδας, καθώς επίσης και τους μηχανισμούς Brownian διάχυσης, τυρβώδους διάχυσης και τυρβώδους πρόσκρουσης, για την περίπτωση συνάθροισης σωματιδίων λόγω κίνησης Brown ή έντονα τυρβώδους ροής του αερολύματος αντίστοιχα.

Η περιγραφή των μορφολογικών χαρακτηριστικών των σωματιδίων-συμπλεγμάτων, και δη της μορφοκλασματικής διάστασής τους, τίθεται καθοριστικής σημασίας για την ακρίβεια του μοντέλου. Η εισαγωγή ενός συστήματος κατάλληλων, ρεαλιστικών συσχετίσεων, μέσω των οποίων προσδιορίζεται η τιμή της μορφοκλασματικής διάστασης, δύναται να βελτιώσει την ακρίβεια των υπολογισμών και να διευρύνει το πεδίο εφαρμογής. Για παράδειγμα, η ακριβέστερη συσχέτιση της μορφοκλασματικής διάστασης των σωματιδίων με το μέγεθός τους φαίνεται να συντελεί στην εξαγωγή ρεαλιστικότερων αποτελεσμάτων.

Ενδεχόμενη βελτίωση του μοντέλου, για τη καλύτερη ερμηνεία και κατανόηση των μηχανισμών που διέπουν την εξέλιξη του αερολύματος στη μετρητική διάταξη, δύναται να προκύψει μέσω της εισαγωγής λοιπών εσωτερικών διαδικασιών του αερολύματος στο μοντέλο, οι οποίες δεν λήφθηκαν υπόψη στα πλαίσια της παρούσας εργασίας, όπως οι διαδικασίες που αφορούν την *μετατροπή αέριας φάσης σε σωματιδιακή (gas-to-particle conversion)* και αντίστροφα. Τέτοιες διαδικασίες είναι η *πυρηνοποίηση (nucleation)* και *ανάπτυξη (growth)* των σωματιδίων, καθώς επίσης και η *συμπύκνωση-εξάτμιση (condensation- evaporation)*. Για παράδειγμα, η ικανότητα προσομοίωσης της πρώτης σειράς μετρήσεων που πραγματοποιούνταν παράλληλα αυτήν την περίοδο από το JRC (βλ. 5.1.1), λαμβάνοντας υπόψη την ύπαρξη *συμπυκνώνμενων ειδών (condensable species)*, ενδέχεται να βελτιωνόταν σημαντικά. Εάν όλες οι εσωτερικές διαδικασίες του αερολύματος ληφθούν υπόψη, η εξίσωση (31) παίρνει τη μορφή της πλήρους ΓΕΔΑ, για την επίλυση της οποίας απαιτείται η ταυτόχρονη επίλυση της εξίσωσης μεταφοράς ατμού.

Κατάλογος Σχημάτων

Σχήμα 1: Ανεπεξέργαστη εικόνα ηλεκτρονικής μικροσκοπίας (TEM) συμπλέγματος σωματιδίων τέφρας (Altenhoff et al., 2020).....	18
Σχήμα 2: Τυπικό Σύμπλεγμα Λόγω Διάχυσης (Diffusion Limited Aggregate – DLA) με 10^4 σωματίδια, διαφόρων μεγεθών (Braga et al., 2015).	18
Σχήμα 3: Σχηματική περιγραφή των δύο οριακών περιοχών αλληλεπίδρασης φέροντος αερίου-σωματιδίου: a) συνεχής περιοχή $Kn \ll 1$, b) ελεύθερη μοριακή περιοχή $Kn \gg 1$, c) μεταβατική περιοχή $Kn \approx 1$. (Seinfeld & Pandis, 2016).....	22
Σχήμα 4: Παράδειγμα συνεχούς συνάρτησης πυκνότητας κατανομής για την περιγραφή του μεγέθους των σωματιδίων ενός αερολύματος.	23
Σχήμα 5: Στοιχειώδης όγκος, στον οποίο παρουσιάζονται οι κύριες φυσικές διαδικασίες μεταφοράς και δυναμικής του αερολύματος (προσαρμοσμένο στα ελληνικά από Drossinos & Housiadas, 2006).	25
Σχήμα 6: Σχηματική αναπαράσταση του μηχανισμού σύγκρουσης των σωματιδίων, λόγω στρωτής ροής (Seinfeld & Pandis, 2016).....	27
Σχήμα 7: Σύγκριση μεταξύ διαφόρων μηχανισμών συσσωμάτωσης για σωματίδιο ακτίνας $1\mu\text{m}$, συναρτήσει της ακτίνας του δεύτερου αλληλεπιδρώντος σωματιδίου (Seinfeld & Pandis, 2016).	28
Σχήμα 8: Τμηματική αναπαράσταση συνάρτησης κατανομής μεγέθους σωματιδίων.	36
Σχήμα 9: Η μορφή του πλέγματος που χρησιμοποιείται για τη διακριτοποίηση του μεγέθους των σωματιδίων.	40
Σχήμα 10: Η μορφοκλασματική διάσταση D_{fi} ως συνάρτηση του αριθμού των πρωτεύοντων σωματιδίων, όπως προκύπτει από μοντέλο προσέγγισης συσχέτισης ζευγών (pair correlation model fitting). Οι γραμμές σφάλματος αντιστοιχούν σε διάστημα εμπιστοσύνης 95% (Yon et al., 2021).....	43
Σχήμα 11: Η μορφοκλασματική διάσταση D_f ως συνάρτηση της ακτίνας περιστροφής R_g (Altenhoff et al., 2020).	44
Σχήμα 12: Συγκριτικό διάγραμμα των αποτελεσμάτων διαφόρων σχέσεων για τον υπολογισμό του λόγου ενεργού πυκνότητας προς πυκνότητα μονομερών ρ_{eff}/ρ_1 (Drossinos, Υ., προσωπική επικοινωνία, 28 Απριλίου 2021).....	45

Σχήμα 13: Η αριθμητικά υπολογιζόμενη αδιάστατη συνάρτηση πυκνότητας κατανομής μεγέθους των σωματιδίων στο τέλος της προσομοίωσης, σε σύγκριση με την αναλυτική λύση. Απεικονίζεται επίσης η αρχική συνάρτηση πυκνότητας κατανομής μεγέθους..... 52

Σχήμα 14: Σχηματικό διάγραμμα της πειραματικής διάταξης και του συστήματος δειγματοληψίας (FPS – δειγματολήπτης λεπτόκοκκων σωματιδίων, ET – σωλήνας εξατμίσεως, CPC – μετρητής συμπύκνωσης σωματιδίων, SMPS – Σκάνερ μεγέθους κινητικότητας σωματιδίων, PM – σημείο δειγματοληψίας σωματιδιακής μάζας, DMA – διαφορικός αναλυτής κινητικότητας) (Isella, Giechaskiel & Drossinos, 2008)..... 54

Σχήμα 15: Η θερμοκρασία του αερολύματος και των τοιχωμάτων του σωλήνα μεταφοράς συναρτήσει της απόστασης από την είσοδο του σωλήνα, για λειτουργία οχήματος σε ταχύτητα 50 km/h. 56

Σχήμα 16: Η πειραματικά μετρούμενη πυκνότητα κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην είσοδο και έξοδο του σωλήνα μεταφοράς και η υπολογιζόμενη πυκνότητα κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην έξοδο, για ταχύτητα οχήματος 50 km/h, τιμή μορφοκλασματικής διάστασης $d_f=1.8$ και ενεργό πυκνότητα σωματιδίων-συμπλεγμάτων υπολογιζόμενη σύμφωνα με τη σχέση (58)..... 57

Σχήμα 17: Η πειραματικά μετρούμενη πυκνότητα κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην είσοδο και έξοδο του σωλήνα μεταφοράς και η υπολογιζόμενη πυκνότητα κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην έξοδο, για ταχύτητα οχήματος 50 km/h, τιμή μορφοκλασματικής διάστασης $d_f=1.8$ και ενεργό πυκνότητα των σωματιδίων-συμπλεγμάτων υπολογιζόμενη σύμφωνα με τη σχέση (43). 58

Σχήμα 18: Η πειραματικά μετρούμενη πυκνότητα κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην είσοδο και έξοδο του σωλήνα μεταφοράς και η υπολογιζόμενη πυκνότητα κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην έξοδο, για ταχύτητα οχήματος 50 km/h, τιμή μορφοκλασματική διάστασης $d_f=1.6$ και ενεργό πυκνότητα των σωματιδίων-συμπλεγμάτων υπολογιζόμενη σύμφωνα με τη σχέση (43). 59

Σχήμα 19: Η θερμοκρασία του αερολύματος και των τοιχωμάτων του σωλήνα μεταφοράς συναρτήσει της απόστασης από την είσοδο του σωλήνα, για λειτουργία οχήματος σε ταχύτητα 120 km/h. 60

Σχήμα 20: Η πειραματικά μετρούμενη πυκνότητας κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην είσοδο και έξοδο του σωλήνα μεταφοράς και η υπολογιζόμενη πυκνότητα κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην έξοδο, για ταχύτητα οχήματος 120 km/h, ενεργό πυκνότητα των σωματιδίων-συμπλεγμάτων υπολογιζόμενη σύμφωνα με τη σχέση (43) και τιμή μορφοκλασματική διάστασης $d_f=1.8$ (αριστερά) και $d_f=1.6$ (δεξιά). 61

Σχήμα 21: Απλοποιημένο σχήμα της πειραματικής διάταξης των εργαστηριακών εγκαταστάσεων του Κοινού Κέντρου Ερευνών (2021) (Melas A., προσωπική επικοινωνία, 18 Μαΐου 2021)..... 64

Σχήμα 22: Η θερμοκρασία του αερολύματος, των τοιχωμάτων του δειγματοληπτικού σωλήνα μήκους 4m (αριστερά) και του σωλήνα μεταφοράς μήκους 3.6m (δεξιά), συναρτήσει της απόστασης από την είσοδο του κάθε σωλήνα, για θερμοκρασία καυσαερίων 46°C και ογκομετρική παροχή 0.68 m³/min σε θερμοκρασία αναφοράς 0°C. 66

Σχήμα 23: Η μετρούμενη πυκνότητα κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην είσοδο και έξοδο του αγωγού μεταφοράς και η υπολογιζόμενη πυκνότητα κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην έξοδο, μετά από αναγωγή σε θερμοκρασία 0°C (1^η σειρά μετρήσεων). 67

Σχήμα 24: Η θερμοκρασία του αερολύματος και των τοιχωμάτων του αγωγού μεταφοράς συναρτήσει της απόστασης από την είσοδο του κάθε σωλήνα, για θερμοκρασία καυσαερίων 270°C και ογκομετρική παροχή 2.09 m³/min σε θερμοκρασία αναφοράς 0°C. 70

Σχήμα 25: Η μετρούμενη πυκνότητα κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην είσοδο και έξοδο του αγωγού μεταφοράς και η υπολογιζόμενη πυκνότητα κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην έξοδο, μετά από αναγωγή σε θερμοκρασία 0°C (2^η σειρά μετρήσεων). 71

Σχήμα 26: Ολικό κλάσμα διαπερατότητας συναρτήσει της σωματιδιακής διαμέτρου, για διάφορες τιμές ογκομετρικής παροχής και με θερμοκρασία εισόδου 270°C. 72

Σχήμα 27: Κλάσμα διαπερατότητας αναφορικά με την απώλεια σωματιδίων λόγω διάχυσης συναρτήσει της σωματιδιακής διαμέτρου, για διάφορες τιμές παροχής και θερμοκρασίας εισόδου, θεωρώντας αμελητέα θερμοφόριση..... 73

Κατάλογος Πινάκων

Πίνακας 1: Παράμετροι της λογαριθμοκανονικής προσέγγισης της πειραματικής κατανομής μεγέθους σωματιδίων στην είσοδο και έξοδο του σωλήνα μεταφοράς.	55
Πίνακας 2: Η πειραματικά μετρούμενη και η υπολογιζόμενη ολική συγκέντρωση σωματιδίων στην έξοδο του σωλήνα μεταφοράς, για ταχύτητα οχήματος 50 km/h.	59
Πίνακας 3: Η πειραματικά μετρούμενη και η υπολογιζόμενη ολική συγκέντρωση σωματιδίων στην έξοδο του σωλήνα μεταφοράς, για ταχύτητα οχήματος 120 km/h.	61
Πίνακας 4: Οι υπολογιζόμενες και οι πειραματικά μετρούμενες συγκεντρώσεις <i>PN10</i> και <i>PN23</i> στην έξοδο του αγωγού μεταφοράς (1 ^η σειρά μετρήσεων).	67
Πίνακας 5: Οι χρονικές κλίμακες των δυναμικών διαδικασιών του αερολύματος στο δειγματοληπτικό σωλήνα μήκους 4m.	68
Πίνακας 6: Οι χρονικές κλίμακες παραμονής και θερμοφόρισης εντός του σωλήνα μεταφοράς 3.6m.	69
Πίνακας 7: Οι υπολογιζόμενες και οι πειραματικά μετρούμενες συγκεντρώσεις <i>PN10</i> και <i>PN23</i> στην έξοδο του αγωγού μεταφοράς (2 ^η σειρά μετρήσεων).	70
Πίνακας 8: Οι χρονικές κλίμακες των δυναμικών φαινομένων του αερολύματος.	72
Πίνακας 9: Μετρούμενα μεγέθη πειραμάτων για ταχύτητα οχήματος 50 km/h.	74
Πίνακας 10: Οι λόγοι των υπολογιζόμενων προς τις μετρούμενες τιμές συγκεντρώσεων σωματιδίων στην έξοδο του αγωγού.	74
Πίνακας 11: Μετρούμενα μεγέθη πειραμάτων για ταχύτητα οχήματος 90 km/h.	75
Πίνακας 12: Οι λόγοι των υπολογιζόμενων προς τις μετρούμενες τιμές συγκεντρώσεων σωματιδίων στην έξοδο του αγωγού.	75

Κατάλογος Αναφορών

- Alpy, N., Kissane, M.P., Drosik, I., Fiche, C. & Kaye, M.H, 2003. *Fission-Product Transport Modelling in the ASTEC Integral Code: the Status of the SOPHEAROS Module. 8th International Conf. on CANDU Fuel*. Honey Harbour, Ontario, September 2003, Canadian Nuclear Society.
- Altenhoff, M., Aßmann, S., Teige, C., Huber, F.J.T. & Will, S., 2020. An Optimized Evaluation Strategy for a Comprehensive Morphological Soot Nanoparticle Aggregate Characterization by Electron Microscopy. *Journal of Aerosol Science*, Volume 139.
- Artelt, C., Schmid, H.-J. & Peukert, W., 2003. Simulations, On the Relevance of Accounting for the Evolution of the Fractal Dimension in Aerosol Process. *Journal of Aerosol Science*, Volume 34, pp. 511-534.
- Braga, F.L., Mattos, O.A., Amorin, V.S. & Souza, A.B., 2015. Diffusion Limited Aggregation of Particles with Different Sizes: Fractal Dimension Change by Anisotropic Growth. *Physica A*, Volume 429.
- Charvet, A., Bau, S., Coy, N.E.P., Bémer, D., Thomas, D., 2014. Characterizing the Effective Density and Primary Particle Diameter of Airborne Nanoparticles Produced by Spark Discharge Using Mobility and Mass Measurements (Tandem DMA/APM). *J. Nanopart. Res.*, Volume 16.
- Colbeck, I., 1998. Introduction to Aerosol Science. In: I. Colbeck, ed. *Physical and Chemical Properties of Aerosols*. s.l.:Blackie Academic & Professional.
- Debry, E. & Sportisse, B., 2007. Solving Aerosol Coagulation with Size-binning Methods. *Applied Numerical Mathematics*, Volume 57, pp. 1008-1020.
- Drossinos, Y. & Housiadas, C., 2006. 'Aerosol Flows'. In: C. T. Crowe, ed. *Multiphase Flow Handbook*. Boca Raton (FL): CRC Press - Taylor & Francis Group.
- Eggersdorfer, M.L. & Goudeli, E., 2020. Structure and Dynamics of Fractal-like Particles Made by Agglomeration and Sintering. *AIChE Journal*, Volume 66.
- Friedlander, S., 2000. *Smoke, dust and haze*. 2nd ed. New York: Oxford University.
- Fuchs, N. A., 1964. *The Mechanics of Aerosols*. New York: Dover Publication Inc..
- Gelain, T. & Vendel, J., 2008. Research Works on Contamination Transfers through Cracked Concrete Walls. *Nuclear Engineering and Design*, Volume 238, pp. 1159-1165.
- Gelbard, F., Tambour, Y. & Seinfeld, J.H., 1980. Sectional Representations for Simulating Aerosol Dynamics. *J. Colloid Int. Sci.*, Volume 76.
- Giechaskiel, B., Arndt, M., Schindler, W., Bergmann, A., Silvis, W. & Drossinos, Y., 2012. Sampling of Non-Volatile Vehicle Exhaust Particles: A Simplified Guide. *SAE International*.

Giechaskiel, B., Lähde, T., Melas, A.D., Valverde, V. & Clairotte, M. 2021. Uncertainty of Laboratory and Portable Solid Particle Number Systems for Regulatory Measurements of Vehicle Emissions. *Environmental Research*, Volume 197.

Goudeli, E., Eggersdorfer, M.L. & Pratsinis, S.E., 2015. Coagulation-Agglomeration of Fractal-like Particles: Structure and Self-Preserving Size Distribution. *Langmuir*, Volume 31, pp. 1320-1327.

Hagmeijer, R., Ijzermans, R.H.A. & Put, F., 2005. Solution of the General Dynamic Equation along Approximate Fluid Trajectories Generated by the Method of Moments. *Phys. Fluids*, Volume 17.

Heinson, W.R., Sorensen, C.M. & Chakrabati, A., 2012. A Three Parameter Description of the Structure of Diffusion Limited Cluster Fractal Aggregates. *Journal of Colloid and Interface Science*, Volume 375, pp. 65-69.

Herranz, L.E., Garcia, M., Kissane, M.P. & Spengler, C., 2018. A Lumped Parameter Modelling of Particle Generation from Na-pool Fires in SFR Containments. *Progress in Nuclear Energy*, Volume 109, pp. 223-232.

Hinds, W. C., 1999. *Aerosol Technology: Properties, Behavior, and Measurement of Airborne Particles*. 2nd ed. New York: John Wiley and Sons Inc..

Housiadas, C. & Drossinos, Y., 2005. Thermophoretic Deposition in Tube Flow. *Aerosol Science and Technology*, Volume 39, pp. 304-318.

Isella, L., Giechaskiel, B. & Drossinos, Y., 2008. Diesel-exhaust Aerosol Dynamics from the Tailpipe to the Dilution Tunnel. *Journal of Aerosol Science*, Volume 39, pp. 737-758.

Jacobson, M.Z. & Turco, R.P., 1995. Simulating Condensational Growth, Evaporation, and Coagulation of Aerosols Using a Combined Moving and Stationary Size Grid. *Aerosol Science and Technology*, 22(1), pp. 73-92.

Jacobson, M.Z., Turco, R.P., Jensen, E.J. & Toon, O.B., 1994. Modeling Coagulation among Particles of Different Composition and Size. *Atmospheric Environment*, 28(7), pp. 1327-1338.

Johannessen, T., Pratsinis, S. E. & Livbjerg, H., 2000. Computational Fluid-Particle Dynamics for the Flame Synthesis of Alumina Particles. *Chemical Engineering Science*, Volume 55, pp. 177-191.

Kostoglou, M. & Konstandopoulos, A.G., 2001. Evolution of Aggregate Size and Fractal Dimension during Brownian Coagulation. *Journal of Aerosol Science*, Volume 32, pp. 1399-1420.

Kostoglou, M., Konstandopoulos, A.G. & Friedlander, S.K., 2006. Bivariate Population Dynamics Simulation of Fractal Aerosol Aggregate Coagulation and Restructuring. *Journal of Aerosol Science*, Volume 37, pp. 1102-1115.

- Kumar, S. & Ramkrishna, D., 1997. On the Solution of Population Balance equations by discretization-III. Nucleation, Growth and Aggregation of Particles. *Chemical Engineering Science*, 52(24), pp. 4659-4679.
- Longest, P.W. & Xi, J., 2007. Effectiveness of Direct Lagrangian Tracking Models for Simulating Nanoparticle Deposition in the Upper Airways. *Aerosol Science and Technology*, 41(4), pp. 380-397.
- Malet, J., Alloul, L., Michielsen, N., Boulaud, D. & Renoux, A., 2000. Deposition of Nanosized Particles in Cylindrical Tubes under Laminar and Turbulent Flow Conditions. *Journal of Aerosol Science*, 31(3), pp. 335-348.
- Melas, A.D., Isella, L., Konstandopoulos, A.G. & Drossinos, Y., 2014. Morphology and Mobility of Synthetic Colloidal Aggregates. *Journal of Colloid and Interface Science*, Volume 417, pp. 27-36.
- Mitrakos, D., Chatzidakis, S., Hinis, E.P., Herranz, L.E., Parozzi, F. & Housiadas, C., 2008. A Simple Mechanistic Model for Particle Penetration and Plugging in Tubes and Cracks. *Nuclear Engineering and Design*, Volume 238, pp. 3370-3378.
- Mitrakos, D., Mitsakou, C. & Housiadas, C., 2004. Simulation of Laminar Flow Reactor with a 1-D Sectional Aerosol Model. *Journal of Aerosol Science*, 35(Supplement 2), pp. S895-S896.
- Mitsakou, C., Helmis, C. & Housiadas, C., 2005. Eulerian Modelling of Lung Deposition with Sectional Representation of Aerosol Dynamics. *Journal of Aerosol Science*, Volume 36, pp. 75-94.
- Olfert, J. & Rogak, S., 2019. Universal Relations Between Soot Effective Density and Primary Particle Size for Common Combustion Sources. *Aerosol Science and Technology*, 53(5), pp. 485-492.
- Paci, S., Parozzi, F. & Porfiri, M.T., 2005. Validation of the ECART Code for the Safety Analysis of Fusion Reactors. *Fusion Engineering and Design*, Volume 75-79, pp. 1243-1246.
- Park, K., Kittelson, D.B. & McMurry, P.H., 2004. Structural Properties of Diesel Exhaust Particle Measured by Transmission Electron Microscopy (TEM): Relationships to Particle Mass and Mobility. *Aerosol Science and Technology*, 38(9), pp. 881-889.
- Parozzi, F., Chatzidakis, S., Gelain, T., Herranz, L.E., Hinis, E., Housiadas, C., Journeau, C., Malgarida, E., Nahas, G., Piluso, P., Plumecocq, W. & Vendel, J., 2005. *Investigation on Aerosol Transport in Containment Cracks. International Conference on Nuclear Energy for New Europe*. Bled, Slovenia, September 5-8, s.n.
- Picciotto, M., Marchioli, C., Reeks, M.W. & Soldati, A., 2005. Statistics of Velocity and Preferential Accumulation of Micro-particles in Boundary Layer Turbulence. *Nuclear Engineering and Design*, Volume 235, pp. 1239-1249.

- Ramabhadran, T.E., Peterson, T.W. & Seinfeld, J.H., 1976. Dynamics of Aerosol Coagulation and Condensation. *AIChE Journal*, 22(5), pp. 840-851.
- Saffman, P.G. & Turner, J.S., 1956. On the Collision of Drops in Turbulent Clouds. *Journal of Fluid Mechanics*, 1(1), pp. 16-30.
- Sato, D., Kobayashi, M. & Adachi, Y., 2004. Effect of Floc Structure on the Rate of Shear Coagulation. *Journal of Colloid and Interface Science*, 272(2004), pp. 354-351.
- Schmid, H.-J., Al-Zaitone, B., Artelt, C. & Peukert, W., 2006. Evolution of the Fractal Dimension for Simultaneous Coagulation and Sintering. *Chemical Engineering Science*, Volume 61, pp. 293-305.
- Seinfeld, J.H. & Pandis, S.N., 2016. *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change*. 3rd ed. Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, Inc..
- Shah, R.K. & London, A.L., 1978. *Laminar Flow Forced Convection in Ducts*. s.l.:Academic Press.
- Shigeta, M. & Nishiyama, H., 2005. Numerical Analysis of Metallic Nanoparticle Synthesis Using RF Inductively Coupled Plasma Flows. *Trans. ASME, J. Heat Transfer*, Volume 127, p. 1222.
- Smoluchowski, M., 1916. Drei Vortrage uber Diffusion, Brownsche Molekularbewegung und Koagulation von Kolloidteilchen. *Physic. Zeits.*, Volume 17, pp. 557-585.
- Sorensen, C.M., 2011. The Mobility of Fractal Aggregates: A Review. *Aerosol Science and Technology*, 45(7), pp. 765-779.
- Talbot, L., Cheng, R.K., Schefer, R.W. & Willis, D.R., 1980. Thermophoresis of Particles in a Heated Boundary Layer. *J. Fluid Mech.*, 101(4), pp. 737-758.
- Thouy, R. & Jullien, R., 1997. Geometrical Properties of Aggregates with Tunable Fractal Dimension. *J. Phys. A: Math. Gen.*, Volume 30, pp. 6725-6735.
- Tsantilis, S., Kammler, H.K. & Pratsinis, S.E., 2002. Population Balance Modeling of Flame Synthesis of Titania Nanoparticles. *Chemical Engineering Science*, Volume 57, pp. 2139-2156.
- Tsantilis, S. & Pratsinis, S., 2000. Evolution of Primary and Aggregate Particle-Size Distributions by Coagulation and Sintering. *AIChE Journal*, 46(2).
- Vemury, S. & Pratsinis, S.E., 1995. Self-Preserving Size Distributions of Agglomerates. *J. Aerosol Sci.*, 26(2), pp. 175-185.
- Wang, K., Yu, S. & Peng, W., 2020. An Analytical Solution of the Population Balance Equation for Simultaneous Brownian and Shear Coagulation in the Continuum Regime. *Advanced Powder Technology*, Volume 31, pp. 2128-2135.

Wells, A.C. & Chamberlain, A.C., 1967. Transport of Small Particles to Vertical Surfaces. *Br. J. Appl. Phys.*, Volume 18.

Yon, D., Morán, J., Ouf, F.-X., Mazur, M. & Mitchell, J.B., 2021. From Monomers to Agglomerates: A Generalized Model for Characterizing the Morphology of Fractal-like Clusters. *Journal of Aerosol Science*, Volume 151.

Παράρτημα

Παράρτημα I: Υπολογιστικός κώδικας σε MATLAB για την προσομοίωση πειράματος μεταφοράς και δυναμικής νανοσωματιδίων περιεχόμενων στις εκπομπές ελαφρού πετρελαιοκίνητου (diesel) οχήματος σύμφωνα με τα πρότυπα του Ευρωπαϊκού Κανονισμού (Euro 3)

```

%% %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%% This code solves aerosol transport and dynamics in 1-D flow.
%% The 1-D Aerosol General Dynamic Equation is solved
%% in a semi-Lagrangian manner, by marching along the axial distance.
%% GDE is solved with the sectional method.
%% Internal aerosol processes considered: Coagulation, Agglomeration.
%% %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

global R NA k dreac P densLiquid As dx dlfixed ddfixed
global TGX gamma thermdiffG densG mwG TWALLX kG kP miG
global mdotG Cp uG mfpalhG uGprev

nbin=input('nbin= ? '); %number of particle size bins
dlmin=1e-9; %minimum particle diameter
dlmax=1000e-9; %maximum particle diameter

%Particle size bins construction
logos=10^(log10(dlmax/dlmin)/nbin);
dlfixed=zeros(1,nbin+1);
for i=1:nbin+1
    dlfixed(i)=dlmin*logos^(i-1);
end
ddfixed=zeros(1,nbin);
dfixed=zeros(1,nbin);
for i=1:nbin
    ddfixed(i)=dlfixed(i+1)-dlfixed(i);
    dfixed(i)=0.5*(dlfixed(i+1)+dlfixed(i));
end

%JRC experimental conditions (50km/h)
Vin=1; %m3/min
Ninf=7.6e13; %#/m3
mu=62; %nm
sigma=1.75; %nm

% Inlet gas temperature
Tgas(1)=273+110;
TGin=Tgas(1); % Inlet temperature (K)

% Tube wall temperature
[XT,TG,TWALL]=gas_wall_temp;
Tsurf(1)=TWALL(1);

%System Pressure (N/m^2)
P=system_pressure;

```



```

%Species and other constants
[R,NA,k,gamma]=uni_constants;
[mwG,RG,kG,miG,Cp]=cons_prop_gas(TGin);

%Tube geometry (m)
[xstart,xstop,dreac]=reac_geom;

%GAS density
densGin=P/(RG*TGin);

%Gas flow rate (kgr/s)
[mdotG]=flowrates(Vin,densGin);

%% Initialize
numdis=in_dist(nbin,Ninf,mu,sigma);
NumberCon=1e-6*sum(numdis.*ddfixed)    %#/cm3
numdisin=numdis;

uGprev=mdotG/(densGin*pi*(dreac^2)/4); %Gas velocity at inlet
Atube=pi*(dreac^2)/4;                %Tube cross section
ks=1;

%Initial dx, t
dx0=input('dx= ?');
dx=dx0;
t0=0;

x=xstart;
TGX=TGin;
densG=densGin;
uG=uGprev;

%% March in x
while x<=xstop
    ks=ks+1;
    x=x+dx

    %Calculation of the Gas and Wall Temperature at x
    [TWALLX]=Wall_temp_at_x(XT,TWALL,x);
    Tsurf(ks)=TWALLX;
    %%Considering operation @50km/h%%
    [Cf]=TGM_coeff(dreac,uG,miG,densG);
    TGX=(1-Cf*dx)*Tgas(ks-1)+Cf*dx*Tsurf(ks);
    Tgas(ks)=TGX;

    %Properties of Gas
    [mwG,RG,kG,miG,Cp]=cons_prop_gas(TGX);
    %Calculation of Gas Density (kgr/m^3)
    densG=P/(RG*TGX);
    Gasdensity(ks)=densG;

    %Calculation of Gas Velocity(m/sec)
    uG=gvel(dreac,mdotG);
    t0=t0+dx/uG;

    %Various Properties

```

```

[densLiquid,mfpathG,thermdiffG,kP]=propg(P,TGX,mwG,densG);

%SOLVE GDE
As=pi*dreac/Atube;

%CONVECTION & DEPOSITION
for i=1:nbin
    Vd(i)=max(0,pdepsn(dfixed(i),x));
    numdis(i)=(uGprev/uG)*numdis(i)-(dx/uG)*Vd(i)*As*numdis(i);
end

%COAGULATION
[K,vfix]=kernels(dfixed,nbin);
numdis=coag(numdis,vfix,ddfixed,nbin,dx,K);
xcoor(ks)=x;
uGprev=uG;
NumberCon=1e-6*sum(numdis.*ddfixed) %#/cm3

end
numdis;

%% OUTPUT and various comparisons
N_at_end=sum(numdis.*ddfixed);
n0logdp0=1e-6*(numdisin.*dfixed)*2.303;
n0logdp1=1e-6*(numdis.*dfixed)*2.303;
diameter1=1e9*dfixed;
%Experimental outlet (JRC 2008) @50km/h
numdisex=in_dist(nbin,4.5e13,87.3,1.63);
n0logdp2=1e-6*(numdisex.*dfixed)*2.303;

%PLOT n
figure(1)
semilogx(diameter1,n0logdp0,'b',diameter1,n0logdp1,'r',...
diameter1,n0logdp2,'g-.')
axis([10 800 0 1.4e8])
xlabel('Dp, nm')
ylabel('dN/dlogDp, cm^-3')
legend('Inlet','Outlet (calculated)','Outlet (experimental)')

figure(2)
plot(xcoor,Tsurf-273.15,':', xcoor,Tgas-273.15, 'LineWidth',2)
xlabel('x (m)')
ylabel('T (^oC)')
legend('Wall Temperature', 'Gas Temperature')

function [XT,TG,TWALL]=gas_wall_temp
xstop=9.0;
pointnum=101;
XT=zeros(1,pointnum);
TWALL=zeros(1,pointnum);
TG=zeros(1,pointnum);
for i=1:pointnum
    XT(i)=(i-1)*(xstop/(pointnum-1));

```

```

        TWALL(i)=273+70;
end

function P=system_pressure
global P
P=101325; % N/m^2

function [R,NA,k,gamma]=uni_constants
R=8.314;
NA=6.023e23;
k=1.3806e-23;
gamma=1.4;

function [mwG,RG,kG,miG,CpG]=cons_prop_gas(T)
global R mwG P
mwG=0.029;
RG=R/mwG;
kG=3.4405e-3+T*7.5177e-5;
niG=-1.1555e-14*T^3. + 9.5728e-11*T^2. + 3.7604e-08*T - 3.448e-06;
dG=P/(RG*T);
miG=niG*dG;
CpG=1005.0;

function [xstart,xstop,dreac]=reac_geom
global dreac
xstart=0;
xstop=9.0;
dreac=10e-2;

function [mg]=flowrates(Vin,rg)
mg=(Vin/60)*rg;

function [numdis] = in_dist(nbin,Ninf,mu,sigma)
global dlfixed ddfixed
numdis=zeros(1,nbin);
nint=501;
for j=1:nbin
    sumnumint=0;
    for i=1:nint
        di=1e9*dlfixed(j)+((1e9*dlfixed(j+1)-1e9*dlfixed(j))/(nint-1))...
            *(i-1);
        nlog=Ninf*exp(-(log(di)-log(mu))^2/(2*log(sigma)^2))...
            /(sqrt(2*pi)*log(sigma))*(1/di);
        numint=nlog*(1e9*dlfixed(j+1)-1e9*dlfixed(j))/(nint-1);
        sumnumint=sumnumint+numint;
    end
    numdis(j)=sumnumint/ddfixed(j);
end

function [TWALLX]=Wall_temp_at_x(XT,TWALL,x)
TWALLX=interp1(XT,TWALL,x,'PCHIP');

function [Cf] = TGm_coeff(dreac,uG,miG,densG)
Prf=0.7;
Rreac=dreac/2;
niG=miG/densG;

```

```

Ref=uG*dreac/niG;
ff=2/((1/((8/Ref)^10+(Ref/36500)^20)^(1/2))+(2.21*log(Ref/7))^10)^(1/5));
Nuf=(ff/2)*(Ref-1000)*Prf/(1+12.7*(ff/2)^(1/2)*(Prf^(2/3)-1));
Cf=2*Nuf/(Rreac*Ref*Prf);

function y=gvel(dreac,mdotG)
global densG
y=mdotG/densG/(pi*(dreac^2)/4);

function [densLiquidf,mfpathGf,thermdiffG,kP]=propg(Pf,Tf,mwgf,densGf)
global kG Cp miG TGX R P mwG
densLiquidf=2000; % (Rogak et al., 2019)
k_B=1.38e-23;
m_air=28.8*1.66e-27;
v_th=sqrt((2.*k_B*Tf)/m_air);
mfpathGf=2.*miG/(densGf*v_th);
thermdiffG=kG/densGf/Cp;
kP=0.07;

function yv=pdepsn(di,xx)
global mfpathG kG miG TGX uG densG dreac Cp R mwG TWALLX k kP densLiquid
Re = uG*dreac*densG/miG;
Pr = Cp*miG/kG;
Kni = 2*mfpathG/di;
Cuni= 1+Kni*(1.17+0.53*exp(-0.78/Kni));
%% Brownian diffusion
Dp = k*TGX*Cuni/(3*pi*miG*di);
Scp = miG/(Dp*densG);
xplus = xx/(dreac*Re*Scp);
if xplus <= 0.01
    Sh = (1.077*(xplus^(-1/3)))-0.7;
else
    Sh= 3.657+6.874*((1000*xplus)^(-0.488))*(exp(-57.2*xplus));
end
Vd_mol = Dp*Sh/dreac;
%% Turbulent diffusion
Af = (1/((8/Re)^10+(Re/36500)^20)^0.5+(2.21*log(Re/7))^10)^(1/5);
Cf = 2/Af;
ufr = uG*(0.5*Cf)^0.5;
Vd_tdiff = 0.2*ufr*Scp^(-2/3)*Re^(-1/8);
%% Turbulent eddy impaction
tp = densLiquid*di^2*Cuni/(18*miG);
tpplus = tp*ufr^2*densG/miG;
Vd_teddy = min(6e-4*tpplus^2*ufr,0.1*ufr);
%% Thermophoresis
Kt = 2.294*Cuni*((kG/kP)+2.2*Kni)/((1+3.483*Kni)*(1+2*(kG/kP)+4.4*Kni));
Nu=(Cf/2)*(Re-1000)*Pr/(1+12.7*(Cf/2)^(1/2)*(Pr^(2/3)-1));
if TGX > TWALLX
    Vth = -Kt*(miG/(densG*TGX))*(TWALLX-TGX)/(dreac/Nu);
else
    Vth = 0;
end
%% Total deposition velocity
yv = Vth + Vd_mol + Vd_tdiff + Vd_teddy;

function [K,vfix]=kernels(dagg,nbin)

```

```

global miG mfpathG TGX densLiquid k
df=1.8; % fractal dimension
% df=1.6; % (Altenhoff et al., 2020; Yon et al., 2021)
denseff=zeros(1,nbin);
vfix=zeros(1,nbin);
for n=1:nbin
    denseff(n)=510*(dagg(n)/100e-9)^(-0.52); % (Olfert & Rogak 2019)
    vfix(n)=pi/6*dagg(n)^3*denseff(n)/densLiquid;
end
K=zeros(nbin,nbin);
for i=1:nbin
    di=dagg(i);
    mi=denseff(i)*pi/6*di^3;
    ci=(8*k*TGX/pi/mi)^0.5;
    Kni=2*mfpathG/di;
    Cuni=1+Kni*(1.17+0.53*exp(-0.78/Kni));
    Diffi=(k*TGX/(3*pi*di*miG))*Cuni;
    lamdai=8*Diffi/pi/ci;
    gi=1/(3*di*lamdai)*((di+lamdai)^3-(di^2+lamdai^2)^(3/2))-di;
    for j=1:nbin
        dj=dagg(j);
        mj=denseff(j)*pi/6*dj^3;
        cj=(8*k*TGX/pi/mj)^0.5;
        Knj=2*mfpathG/dj;
        Cunj=1+Knj*(1.17+0.53*exp(-0.78/Knj));
        Diffj=(k*TGX/(3*pi*dj*miG))*Cunj;
        lamdaj=8*Diffj/pi/cj;
        gj=1/(3*dj*lamdaj)*((dj+lamdaj)^3-(dj^2+lamdaj^2)^(3/2))-dj;
        beta=((di+dj)/(di+dj+2*(gi^2+gj^2)^0.5)...
            +8*(Diffi+Diffj)/((di+dj)*(ci^2+cj^2)^0.5))^(-1);
        Kij_cont=(2*k*TGX/3/miG)*(vfix(i)^(1/df)+vfix(j)^(1/df))...
            *(Cuni/vfix(i)^(1/df)+Cunj/vfix(j)^(1/df));
        K(i,j)=Kij_cont*beta;
    end
end

function y=coag(cfixed,vfixed,ddf, nbin,dx,K)
global uG
dt=dx/uG;
cold=cfixed;
NNold=cold.*ddf;
NNnew=zeros(size(NNold));
sumden1=0;
for j1=1:nbin
    sumden1=sumden1+K(1,j1)*NNold(j1);
end
sumden1;
NNnew(1)=(1/vfixed(1))*(vfixed(1)*NNold(1))/(1+dt*sumden1);
for kk=2:nbin-1
    sumdenk=0;
    for jk=1:nbin
        Vkj=vfixed(kk)+vfixed(jk);
        if Vkj>vfixed(kk) & Vkj<vfixed(kk+1)
            fkjk=((vfixed(kk+1)-Vkj)...
                /(vfixed(kk+1)-vfixed(kk)))*(vfixed(kk)/Vkj);
        elseif Vkj>vfixed(kk-1) & Vkj<vfixed(kk)

```

```

        fkjk=1-((vfixed(kk)-Vkj)...
        / (vfixed(kk)-vfixed(kk-1))) * (vfixed(kk-1)/Vkj);
    else
        fkjk=0;
    end

    sumdenk=sumdenk+(1-fkjk)*K(kk,jk)*NNold(jk);
end
sumdenk;
sumnum=0;
for jj=1:kk
    sum2=0;
    for ii=1:kk-1
        Vij=vfixed(ii)+vfixed(jj);
        if Vij>=vfixed(kk) & Vij<vfixed(kk+1)
            fijk=((vfixed(kk+1)-Vij)...
            / (vfixed(kk+1)-vfixed(kk))) * (vfixed(kk)/Vij);
        elseif Vij>vfixed(kk-1) & Vij<vfixed(kk)
            fijk=1-((vfixed(kk)-Vij)...
            / (vfixed(kk)-vfixed(kk-1))) * (vfixed(kk-1)/Vij);
        else
            fijk=0;
        end
        sum2=sum2+(fijk)*K(ii,jj)*vfixed(ii)*NNnew(ii)*NNold(jj);
    end
    sumnum=sumnum+sum2;
end
sumnum;
NNnew(kk)=(1/vfixed(kk))*(vfixed(kk)*NNold(kk)+dt*sumnum)...
/(1+dt*sumdenk);
end
sumnumnbin=0;
for jn=1:nbin
    sum22=0;
    for in=1:nbin-1
        if vfixed(in)+vfixed(jn)>=vfixed(nbin)
            sum22=sum22+K(in,jn)*vfixed(in)*NNnew(in)*NNold(jn);
        end
    end
    sumnumnbin=sumnumnbin+sum22;
end
NNnew(nbin)=(1/vfixed(nbin))*(vfixed(nbin)*NNold(nbin)+dt*sumnumnbin);
y=NNnew./(ddfixed);

```

Παράρτημα II: Υπολογιστικός κώδικας σύγκρισης της αριθμητικής επίλυσης της διαδικασίας συσσωμάτωσης με αναλυτικές λύσεις

```

N0=1.0;
v0=1.0;
K0=0.83333;
sigma=0.0000000000000000025;
tmax=50.0;
tmin=0.0;
dt=0.5;

nbin=input('nbin= ? '); %number of particle size bins
dlmin=0.01;           %minimum particle diameter
dlmax=1e5;           %maximum particle diameter

%Particle size bins construction
logos=10^(log10(dlmax/dlmin)/nbin);
dlfixed=zeros(1,nbin+1);
for i=1:nbin+1
    dlfixed(i)=dlmin*logos^(i-1);
end
ddfixed=zeros(1,nbin);
dfixed=zeros(1,nbin);
for i=1:nbin
    ddfixed(i)=dlfixed(i+1)-dlfixed(i);
    dfixed(i)=0.5*(dlfixed(i+1)+dlfixed(i));
end

%Kernel matrix
for j=1:nbin
    for i=1:nbin
        K(i,j)=K0;
    end
end

vlfix=pi/6*dlfixed.^3;
for isgv=1:nbin
    vfix(isgv)=(vlfix(isgv+1)+vlfix(isgv))/2;
    dvfix(isgv)=vlfix(isgv+1)-vlfix(isgv);
end
for i=1:nbin
    numdis(i)=(N0*vfix(i)/(v0^2))*exp(-vfix(i)/v0);
    c0(i)=numdis(i);
end
Phi00=0.0;
for i=1:nbin
    Phi00=Phi00+c0(i)*vfix(i)*dvfix(i);
end

ks=1;
t=0;
while t<=tmax
    ks=ks+1;
    t=t+dt

```

```

% COAGULATION
numdis=coag(numdis,vfix,dvfix,ddfired,nbin,dt,K);
time=t;
tcoor(ks)=t;
NumberCon=sum(numdis.*dvfix)

%Analytical solution
Ni=N0/(1.0+K0*N0*time/2.0);
M0=Ni;
TTT=1.0-M0/N0;
Lamda=sigma/(K0*N0);
ek=-2.*Lamda*TTT/(1.-TTT);
for i=1:nbin
    canalyt(i)=(N0*(1.0-TTT)^2)/(v0*sqrt(TTT))*exp(ek)...
    *exp((-vfix(i)/v0)*exp(ek))*sinh(vfix(i)/v0)*sqrt(TTT)*exp(ek);
end

Nana(ks)=N0/(1.0+K0*N0*time/2.0);
Phiana(ks)=Phi00*exp(sigma*time);

end

loglog(vfix,2.303*vfix.*c0/N0,'k',vfix,2.303*vfix.*canalyt/N0,'b',vfix,
2.303*vfix.*numdis/N0,'o')
legend('initial','analytical','numerical')
axis([1e-3 1e4 1e-6 10])
xlabel('v/v0')
ylabel('d(N/N0)/dlog(v/v0)')

function y=coag(cfired,vfired,dvfired,ddfired,nbin,dt,K)

cold=cfired;
NNold=cold.*dvfired;
NNnew=zeros(size(NNold));

for j1=1:nbin
    sumden1=sumden1+K(1,j1)*NNold(j1);
end
sumden1;
NNnew(1)=(1/vfired(1))*(vfired(1)*NNold(1))/(1+dt*sumden1);

for kk=2:nbin-1
    sumdenk=0;
    for jk=1:nbin
        Vkj=vfired(kk)+vfired(jk);
        if Vkj>vfired(kk) & Vkj<vfired(kk+1)
            fkjk=((vfired(kk+1)-Vkj)/(vfired(kk+1)...
            -vfired(kk)))*(vfired(kk)/Vkj);
        elseif Vkj>vfired(kk-1) & Vkj<vfired(kk)
            fkjk=1-((vfired(kk)-Vkj)/(vfired(kk)...
            -vfired(kk-1)))*(vfired(kk-1)/Vkj);
        else

```



```

        fkjk=0;
    end

    sumdenk=sumdenk+(1-fkjk)*K(kk,jk)*NNold(jk);
end
sumdenk;

sumnum=0;
for jj=1:kk
    sum2=0;
    for ii=1:kk-1
        Vij=cfixed(ii)+vfixed(jj)
        if Vij>vfixed(kk) & Vij<vfixed(kk+1);
            fijk=((vfixed(kk+1)-Vij)/(vfixed(kk+1)...
                -vfixed(kk)))*(vfixed(kk)/Vij);
        elseif Vij>=vfixed(kk-1) & Vij<vfixed(kk)
            fijk=1-((vfixed(kk)-Vij)/(vfixed(kk)...
                -vfixed(kk-1)))*(vfixed(kk-1)/Vij);
        else
            fijk=0;
        end
        sum2=sum2+fijk*K(ii,jj)*vfixed(ii)*NNnew(ii)*NNold(jj);
    end
    sumnum=sumnum+sum2;
end
sumnum;
NNnew(kk)=(1/vfixed(kk))*(vfixed(kk)*NNold(kk)+dt*sumnum)...
/(1+dt*sumdenk);
end

%k=nbin
sumnumnbin=0;
for jn=1:nbin
    sum22=0;
    for in=1:nbin-1
        if (vfixed(in)+vfixed(jn))>=vfixed(nbin)
            sum22=sum22+K(in,jn)*vfixed(in)*NNnew(in)*NNold(jn);
        else
            sum22=sum22;
        end
    end
    sumnumnbin=sumnumnbin+sum22;
end

NNnew(nbin)=(1/vfixed(nbin))*(vfixed(nbin)*NNold(nbin)+dt*sumnumnbin);
y=NNnew./(dvfixed);

```

Παράρτημα III: Υπολογιστικός κώδικας σε MATLAB για την προσομοίωση πειράματος μεταφοράς και δυναμικής νανοσωματιδίων προς υποστήριξη – ερμηνεία μετρήσεων από εκπομπές οχήματος στα πλαίσια αναθεώρησης προτύπων με το νέο Ευρωπαϊκό Κανονισμό (Euro 7)

```

%% %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%% This code solves aerosol transport and dynamics in 1-D flow.
%% The 1-D Aerosol General Dynamic Equation is solved
%% in a semi-Lagrangian manner, by marching along the axial distance.
%% GDE is solved with the sectional method.
%% Internal aerosol processes considered: Coagulation, Agglomeration.
%% %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

global R NA k dreac P densLiquid As dx dlfixed ddfixed
global TGX gamma thermdiffG densG mwG TWALLX kG kP miG
global mdotG Cp uG mfpalhG uGprev Ninf PN10 PN23 densG0
global sigma mu fraction dmax sigmaex muex fractionex

nbin=input('nbin= ? '); %number of particle size bins
dlmin=1e-9; %minimum particle diameter
dlmax=500e-9; %maximum particle diameter

%Particle size bins construction
logos=10^(log10(dlmax/dlmin)/nbin);
dlfixed=zeros(1,nbin+1);
for i=1:nbin+1
    dlfixed(i)=dlmin*logos^(i-1);
end
ddfixed=zeros(1,nbin);
dfixed=zeros(1,nbin);
for i=1:nbin
    ddfixed(i)=dlfixed(i+1)-dlfixed(i);
    dfixed(i)=0.5*(dlfixed(i+1)+dlfixed(i));
end

%JRC experimental conditions and initial NumberCon
% Inlet gas temperature
Tgas(1)=273+270;
TGin=Tgas(1); % Inlet temperature (K)
Tamb=23.0;
xstart=0.0;
xtube1=4.0;
xtube2=3.6;
xstop=xtube1+xtube2;
dtube1=7.62e-2;
dtube2=10.16e-2;
Ttube1=273+80;
Ttube2=273+Tamb;

% Tube wall temperature
[XT,TG,TWALL]=gas_wall_temp(xtube1,xtube2,Ttube1,Ttube2);

```

```

Tsurf(1)=TWALL(1);

% Tube geometry
drea=reac_d(xstart,xtubel,xtube2,dtubel,dtube2);

%System Pressure (N/m^2)
P=system_pressure;

%Species and other constants
[R,NA,k,gamma]=uni_constants;
[mwG,RG,kG,miG,Cp]=cons_prop_gas(TGin);

%GAS density
densGin=P/(RG*TGin);
densG0=P/(RG*(273+0));

%Gas flow rate (kgr/s)
Vin0=2.09; % m3/min (0oC)
Vin=Vin0*densG0/densGin % m3/min (Tgas)
[mdotG]=flowrates(Vin,densGin);

%% Initialize
% Numerical solution to calculate the initial particle size distribution
% parameters (sigma and mu) from the known PN10 and PN23 data.
% Assumption for Ninf is required to normalize PN10 and PN23, however,
% instead of Ninf, the fraction of particles with d<10nm is assumed.

% Fraction [%] of particle < PN10
fraction = 0.1; % percentage(%) of PN with d<PN10 (inlet)

% Max particle size
dmax=dlmax*1e9; %nm

%Initial values
sigma = 2.5;
mu = 30;

PN10_0=7.89e10; %#/m3 Initial NumberCon of PN10 (0oC)
PN23_0=6.01e10; %#/m3 Initial NumberCon of PN23 (0oC)
PN10=PN10_0*densGin/densG0 % #/m3 (Tgas)
PN23=PN23_0*densGin/densG0 % #/m3 (TGas)
Ninf=PN10/((100-fraction)/100) % estimated #/m3 Total Initial NumberCon

% Solve system to calculate sigma and mu of the normalized lognormal
% distribution
par0 = [sigma mu];
options = optimoptions('fsolve','Display','iter');
par = fsolve(@PNs,par0,options);

% Calculated Parameteres of the lognormal distribution
sigma = par(1)
mu = par(2)

numdis=in_dist(nbin,Ninf,mu,sigma);
NumberCon=1e-6*sum(numdis.*ddfixed) % calculated #/cm3
numdisin=numdis;

```

```

uGprev=mdotG/(densGin*pi*(dreact^2)/4); %Gas velocity at inlet
Atube=pi*(dreact^2)/4; %Tube cross section
ks=1;

%Initial dx, t
dx0=input('dx= ?');
dx=dx0;
t0=0;

x=xstart;
TGX=TGin;
densG=densGin;
uG=uGprev;
uGas(ks)=uG;
Gasdensity(ks)=densG;
tube_A(ks)=Atube;

%% March in x
while x<xstop
    ks=ks+1;
    x=x+dx
    dreact=react_d(x,xtube1,xtube2,dtube1,dtube2);

    %Calculation of the Gas and Wall Temperature at x
    [TWALLX]=Wall_temp_at_x(XT,TWALL,x);
    Tsurf(ks)=TWALLX;

    [Cft]=TGM_coeff(dreact,uG,miG,densG,Cp,kG);
    TGX=(1-Cft*dx)*Tgas(ks-1)+Cft*dx*Tsurf(ks);
    Tgas(ks)=TGX;

    %Properties of Gas
    [mwG,RG,kG,miG,Cp]=cons_prop_gas(TGX);
    %Calculation of Gas Density (kgr/m^3)
    densG=P/(RG*TGX);
    Gasdensity(ks)=densG;
    Atubeprev=tube_A(ks-1);
    Atube=pi*(dreact^2)/4;
    tube_A(ks)=Atube;

    %Calculation of Gas Velocity(m/sec)
    uG=gvel(dreact,mdotG);
    uGas(ks)=uG;
    t0=t0+dx/uG;

    %Various Properties
    [densLiquid,mfpathG,thermdiffG,kP]=propg(P,TGX,mwG,densG);

    %SOLVE GDE
    As=pi*dreact/Atube;

    %CONVECTION & DEPOSITION
    for i=1:nbin
        [Vd(i),Eth(i)]=pdepsn(dfixed(i),x,Tgas);
        numdis(i)=Atubeprev*uGprev*numdis(i)/(Atube*(uG+As*Vd(i)*dx));
    end
end

```

```

end

%COAGULATION
[K,vfix]=kernels(dfixed,nbin);
numdis=coag(numdis,vfix,ddfixed,nbin,dx,K);
xcoor(ks)=x;
uGprev=uG;
NumberCon=1e-6*sum(numdis.*ddfixed) %#/cm3

end
numdis;
toc

%% OUTPUT and various comparisons
N_at_end=sum(numdis.*ddfixed);
n0logdp0=1e-6*(numdisin.*dfixed)*2.303;
n0logdp1=1e-6*(numdis.*dfixed)*2.303;
diameter1=1e9*dfixed;

%Experimental outlet
% Numerical solution to calculate the outlet particle size distribution
% parameters (sigma and mu) from the known PN10 and PN23 data.
% Assumption for Ninf is required to normalize PN10 and PN23, however,
% instead of Ninf, the fraction of particles with d<10nm is assumed.

% Fraction [%] of particle < PN10
fractionex = 0.1;

%Initial values
sigmaex = 2.;
muex = 40;

% Solve system to calculate sigma and mu of the normalized lognormal
% distribution
parex0 = [sigmaex muex];
options = optimoptions('fsolve','Display','iter');
parex = fsolve(@ExPNs,parex0,options);

% Calculated Parameteres of the lognormal distribution
sigmaex = parex(1)
muex = parex(2)

PN10out0=6.84e10; % #/m3 (0oC)
PN23out0=5.23e10; % #/m3 (0oC)
Ninfoutex=PN10out0*(densG/densG0)/((100-fractionex)/100);
numdisex=in_dist(nbin,Ninfoutex,muex,sigmaex);
n0logdpex=1e-6*(numdisex.*dfixed)*2.303;

% Time scales in Sample Line (4m)
uGm=uGas(1);
Tgm=Tgas(1);
densGm=Gasdensity(1);
[mwGm,RGm,kGm,miGm,Cpm]=cons_prop_gas(Tgm);
[densLiquidm,mfpathGm,thermdiffGm,kPm]=propg(P,Tgm,mwGm,densGm);
[t_res,t_ag,t_bdiff,t_tdiff,t_tedd]=timescales(xstop,dreac,Ninf,mu,uGm,...

```

```

Tgm,k,miGm,mfpathGm,densGm,densLiquidm);
[t_res2,t_therm] = timescale_th(mu,dreac,uGas,Tgas,Gasdensity,...
mfpathGm,miGm,kGm,kPm,Cpm);

NumberCon=1e-6*sum(numdis.*ddfixed) %#/cm3
for i=1:nbin
    Num_in(i)=numdisin(i)*ddfixed(i)/densGin; % #/kg
    Num_out(i)=numdis(i)*ddfixed(i)/densG; % #/kg
end

PN10outnum=0;
PN23outnum=0;
for i=1:nbin
    if dlfixed(i)>10e-9
        PN10outnum=PN10outnum+numdis(i)*ddfixed(i);
        if dlfixed(i)>23e-9
            PN23outnum=PN23outnum+numdis(i)*ddfixed(i);
        end
    end
end
end
PN10outnum0=PN10outnum*densG0/densG; % #/m3 (0oC)
PN23outnum0=PN23outnum*densG0/densG; % #/m3 (0oC)
PN10ratio_num=PN10outnum0/PN10out0
PN23ratio_num=PN23outnum0/PN23out0

%PLOT n
figure(1)
semilogx(diameter1,n0logdp0*densG0/densGin,'b',diameter1,n0logdp1*densG0/d
ensG,'r',diameter1,n0logdpex*densG0/Gasdensity(end),'g-.')
axis([10 200 0 2.5e5])
xlabel('Dp, nm')
ylabel('dN/dlogDp, cm^-3')
legend('Inlet','Outlet (calculated)','Outlet (experimental)')

figure(2)
plot(xcoor,Tsurf-273.15,':', xcoor,Tgas-273.15, 'LineWidth',2)
xlabel('x (m)')
ylabel('T (^oC)')
legend('Wall Temperature', 'Gas Temperature')

figure(3)
semilogx(1e9*dfixed,Num_out./Num_in)
xlabel('Dp (nm)')
ylabel('Penetration Fraction')
xlim([1 100])
ylim([0.001 1])

function [XT,TG,TWALL]=gas_wall_temp(xtubel,xtube2,Ttubel,Ttube2)
pointnum=101;
XT=zeros(1,pointnum);
TWALL=zeros(1,pointnum);
TG=zeros(1,pointnum);
xstop=xtubel+xtube2;

```

```

for i=1:pointnum
    XT(i)=(i-1)*(xstop/(pointnum-1));
    if XT(i)<=xtubel
        TWALL(i)=Ttubel;
    else
        TWALL(i)=Ttube2;
    end
    TG(i)=273+270;
end

function d = reac_d(x,xtubel,xtube2,dtubel,dtube2)
if x<=xtubel
    d=dtubel;
elseif x>xtubel
    d=dtube2;
end
end

function P=system_pressure
global P
P=101325; % N/m^2

function [mg]=flowrates(Vin,rg)
mg=(Vin/60)*rg;

function [R,NA,k,gamma]=uni_constants
R=8.314;
NA=6.023e23;
k=1.3806e-23;
gamma=1.4;

function [mwG,RG,kG,miG,CpG]=cons_prop_gas(T)
global R mwG P
mwG=0.029;
RG=R/mwG;
kG=3.4405e-3+T*7.5177e-5;
niG=-1.1555e-14*T^3. + 9.5728e-11*T^2. + 3.7604e-08*T - 3.448e-06;
dG=P/(RG*T);
miG=niG*dG;
CpG=1005.0;

function [mg]=flowrates(Vin,rg)
mg=(Vin/60)*rg;

function F = PNs(par)
global sigma mu fraction dmax Ninf PN10 PN23
%%      par(1) = sigma
%%      par(2) = mu
% Normalized number cumulative (integrated) concentration
PN10cm3 = PN10*1e-6; % #/cm3 (Tgas)
PN23cm3 = PN23*1e-6; % #/cm3 (Tgas)
Ninfc3 = Ninf*1e-6; % #/cm3 (Tgas)
PN10_nd = PN10cm3/Ninfc3;
PN23_nd = PN23cm3/Ninfc3;
DPN_nd = (PN10_nd - PN23_nd);
% Normalized lognormal distribution

```

```

fun = @(di,sigma,mu) exp(-(log(di)-
log(mu)).^2/(2*log(sigma)^2))/((2*pi)^(1/2)*log(sigma)).*(1./di);
% System of equations (numerical integration performed using MATLAB tools)
F(1) = integral(@(di) fun(di,par(1),par(2)),10,23) - DPN_nd;
F(2) = integral(@(di) fun(di,par(1),par(2)),23,dmax) - PN23_nd;
end

```

```

function [numdis] = in_dist(nbin,Ninf,mu,sigma)
global dlfixed ddfixed
numdis=zeros(1,nbin);
nint=501;
for j=1:nbin
    sumnumint=0;
    for i=1:nint
        di=1e9*dlfixed(j)+((1e9*dlfixed(j+1)-1e9*dlfixed(j))...
        /(nint-1))*(i-1);
        nlog=Ninf*exp(-(log(di)-log(mu))^2/(2*log(sigma)^2))...
        /(sqrt(2*pi)*log(sigma))*(1/di);
        numint=nlog*(1e9*dlfixed(j+1)-1e9*dlfixed(j))/(nint-1);
        sumnumint=sumnumint+numint;
    end
    numdis(j)=sumnumint/ddfixed(j);
end
end

```

```

function [xstart,xstop,dreac]=reac_geom
global dreac
xstart=0;
xstop=4.0;
dreac=7.62e-2;

```

```

function [TWALLX]=Wall_temp_at_x(XT,TWALL,x)
TWALLX=interp1(XT,TWALL,x,'PCHIP');

```

```

function [Cf] = TGm_coeff(dreac,uG,miG,densG,Cp,kG)
Prf=Cp*miG/kG;
Rreac=dreac/2;
niG=miG/densG;
Ref=uG*dreac/niG;
ff=2/((1/((8/Ref)^10+(Ref/36500)^20)^(1/2))+(2.21*log(Ref/7))^10)^(1/5));
Nuf=(ff/2)*(Ref-1000)*Prf/(1+12.7*(ff/2)^(1/2)*(Prf^(2/3)-1));
Cf=2*Nuf/(Rreac*Ref*Prf);

```

```

function y=gvel(dreac,mdotG)
global densG
y=mdotG/densG/(pi*(dreac^2)/4);

```

```

function [densLiquidf,mfpathGf,thermdiffG,kP]=propg(Pf,Tf,mwgf,densGf)
global kG Cp miG TGX R P mwG
densLiquidf=2000; % (Rogak et al., 2019)
k_B=1.38e-23;
m_air=28.8*1.66e-27;
v_th=sqrt((2.*k_B*Tf)/m_air);
Pkpa = P*1e-3;
lamda_ref = 66.4e-9;
mfpathGf = lamda_ref*(101/Pkpa)*(TGX/293)*(1+110/293)/(1+110/TGX);

```



```

thermdiffG=kG/densGf/Cp;
kP=0.07;

function [yv,Eth]=pdepsn(di,xx,Tg)
global mfpG kG miG TGX uG densG dreac Cp R mwG TWALLX k kP densLiquid
Re = uG*dreac*densG/miG;
Pr = Cp*miG/kG;
Kni = 2*mfpG/di;
Cuni= 1+Kni*(1.17+0.53*exp(-0.78/Kni));
%% Brownian diffusion
Dp = k*TGX*Cuni/(3*pi*miG*di);
Scp = miG/(Dp*densG);
xplus = xx/(dreac*Re*Scp);
if xplus <= 0.01
    Sh = (1.077*(xplus^(-1/3)))-0.7;
else
    Sh= 3.657+6.874*((1000*xplus)^(-0.488))*(exp(-57.2*xplus));
end
Vd_mol = Dp*Sh/dreac;
%% Turbulent diffusion
Af = (1/((8/Re)^10+(Re/36500)^20)^0.5+(2.21*log(Re/7))^10)^(1/5);
Cf = 2/Af;
ufr = uG*(0.5*Cf)^0.5;
Vd_tdiff = 0.2*ufr*Scp^(-2/3)*Re^(-1/8);
%% Turbulent eddy impaction
tp = densLiquid*di^2*Cuni/(18*miG);
tpplus = tp*ufr^2*densG/miG;
Vd_teddy = min(6e-4*tpplus^2*ufr,0.1*ufr);
%% Gravitational sedimentation
% sin(th) = 1
g = 9.81;
Vd_sed = tp*g;
%% Thermophoresis
Kt = 2.294*Cuni*((kG/kP)+2.2*Kni)/((1+3.483*Kni)*(1+2*(kG/kP)+4.4*Kni));
Nu=(Cf/2)*(Re-1000)*Pr/(1+12.7*(Cf/2)^(1/2)*(Pr^(2/3)-1));
if TGX > TWALLX
    Vth = -Kt*(miG/(densG*TGX))*(TWALLX-TGX)/(dreac/Nu);
    Eth = 1-(TWALLX/Tg(1))^(Pr*Kt);
else
    Vth = 0;
    Eth = 0;
end
%% Total deposition velocity
yv = Vth + 0.0*Vd_sed + Vd_mol + Vd_tdiff + Vd_teddy; %Turbulent

function [K,vfix]=kernels(dagg,nbin)
global miG mfpG TGX densLiquid k
df=1.8; % fractal dimension
% df=1.6; % (Altenhoff et al., 2020; Yon et al., JAS 2021)
denseff=zeros(1,nbin);
vfix=zeros(1,nbin);
for n=1:nbin
    denseff(n)=510*(dagg(n)/100e-9)^(-0.52); % (Olfert & Rogak 2019)
    vfix(n)=pi/6*dagg(n)^3*denseff(n)/densLiquid;
end
K=zeros(nbin,nbin);

```

```

for i=1:nbin
    di=dagg(i);
    mi=denseff(i)*pi/6*di^3;
    ci=(8*k*TGX/pi/mi)^0.5;
    Kni=2*mfpahG/di;
    Cuni=1+Kni*(1.17+0.53*exp(-0.78/Kni));
    Diffi=(k*TGX/(3*pi*di*miG))*Cuni;
    lamdai=8*Diffi/pi/ci;
    gi=1/(3*di*lamdai)*((di+lamdai)^3-(di^2+lamdai^2)^(3/2))-di;
    for j=1:nbin
        dj=dagg(j);
        mj=denseff(j)*pi/6*dj^3;
        cj=(8*k*TGX/pi/mj)^0.5;
        Knj=2*mfpahG/dj;
        Cunj=1+Knj*(1.17+0.53*exp(-0.78/Knj));
        Diffj=(k*TGX/(3*pi*dj*miG))*Cunj;
        lamdaj=8*Diffj/pi/cj;
        gj=1/(3*dj*lamdaj)*((dj+lamdaj)^3-(dj^2+lamdaj^2)^(3/2))-dj;
        beta=((di+dj)/(di+dj+2*(gi^2+gj^2)^0.5)...
            +8*(Diffi+Diffj)/((di+dj)*(ci^2+cj^2)^0.5))^(-1);
        Kij_cont=(2*k*TGX/3/miG)*(vfix(i)^(1/df)+vfix(j)^(1/df))...
            *(Cuni/vfix(i)^(1/df)+Cunj/vfix(j)^(1/df));
        K(i,j)=Kij_cont*beta;
    end
end

function y=coag(cfixed,vfixed,ddfised,nbin,dx,K)
global uG
dt=dx/uG;
cold=cfixed;
NNold=cold.*ddfised;
NNnew=zeros(size(NNold));
    sumden1=0;
    for j1=1:nbin
        sumden1=sumden1+K(1,j1)*NNold(j1);
    end
    sumden1;
    NNnew(1)=(1/vfixed(1))*(vfixed(1)*NNold(1))/(1+dt*sumden1);
    for kk=2:nbin-1
        sumdenk=0;
        for jk=1:nbin
            Vkj=vfixed(kk)+vfixed(jk);
            if Vkj>=vfixed(kk) & Vkj<vfixed(kk+1)
                fkjk=((vfixed(kk+1)-Vkj)...
                    /(vfixed(kk+1)-vfixed(kk)))*(vfixed(kk)/Vkj);
            elseif Vkj>vfixed(kk-1) & Vkj<vfixed(kk)
                fkjk=1-((vfixed(kk)-Vkj)...
                    /(vfixed(kk)-vfixed(kk-1)))*(vfixed(kk-1)/Vkj);
            else
                fkjk=0;
            end
            sumdenk=sumdenk+(1-fkjk)*K(kk,jk)*NNold(jk);
        end
        sumdenk;
        sumnum=0;
        for jj=1:kk

```

```

sum2=0;
for ii=1:kk-1
    Vij=vfixed(ii)+vfixed(jj);
    if Vij>=vfixed(kk) & Vij<vfixed(kk+1)
        fijk=((vfixed(kk+1)-Vij)...
            /(vfixed(kk+1)-vfixed(kk)))*(vfixed(kk)/Vij);
    elseif Vij>vfixed(kk-1) & Vij<vfixed(kk)
        fijk=1-((vfixed(kk)-Vij)...
            /(vfixed(kk)-vfixed(kk-1)))*(vfixed(kk-1)/Vij);
    else
        fijk=0;
    end
    sum2=sum2+(fijk)*K(ii,jj)*vfixed(ii)*NNnew(ii)*NNold(jj);
end
sumnum=sumnum+sum2;
end
sumnum;
NNnew(kk)=(1/vfixed(kk))*(vfixed(kk)*NNold(kk)+dt*sumnum)...
/(1+dt*sumdenk);
end
sumnumnbin=0;
for jn=1:nbin
    sum22=0;
    for in=1:nbin-1
        if vfixed(in)+vfixed(jn)>=vfixed(nbin)
            sum22=sum22+K(in,jn)*vfixed(in)*NNnew(in)*NNold(jn);
        end
    end
    sumnumnbin=sumnumnbin+sum22;
end
NNnew(nbin)=(1/vfixed(nbin))*(vfixed(nbin)*NNold(nbin)+dt*sumnumnbin);
y=NNnew./(ddficed);

function F = ExpNs(parex)
global sigmaex muex fractionex dmax densG densG0
%%     parex(1) = sigmaex
%%     parex(2) = muex
% Normalized number cumulative (integrated) concentration
PN10cm3 = 6.84e4*densG(end)/densG0; % #/cm3 (Tgas)
PN23cm3 = 5.23e4*densG(end)/densG0; % #/cm3 (Tgas)
Ninfcm3 = PN10cm3/((100-fractionex)/100); % #/cm3 (Tgas)
PN10_nd = PN10cm3/Ninfcm3;
PN23_nd = PN23cm3/Ninfcm3;
DPN_nd = (PN10_nd - PN23_nd);
% Normalized lognormal distribution
fun = @(di,sigmaex,muex) exp(-(log(di)-
log(muex)).^2/(2*log(sigmaex)^2))/(2*pi)^(1/2)*log(sigmaex)).*(1./di);
% System of equations (numerical integration performed using MATLAB tools)
F(1) = integral(@(di) fun(di,parex(1),parex(2)),10,23) - DPN_nd;
F(2) = integral(@(di) fun(di,parex(1),parex(2)),23,dmax) - PN23_nd;
end

function [t_res,t_ag,t_bdiff,t_tdiff,t_tedd] = ...
timescales(xstop,dreac,Ninf,mu,uGm,Tgm,k,miGm,mfpathGm,densGm,densLiquidm)
t_res=xstop/uGm;
Kn=2*mfpathGm/(mu*1e-9);

```

```

Cun=1+Kn*(1.17+0.53*exp(-0.78/Kn));
Diff=(k*Tgm/(3*pi*mu*1e-9*miGm))*Cun;
mm=(508*(mu*1e-9/100e-9)^(-0.47))*pi/6*(mu*1e-9)^3;
c=(8*k*Tgm/pi/mm)^0.5;
lamda=8*Diff/pi/c;
g=1/(3*mu*1e-9*lamda)*((mu*1e-9+lamda)^3-((mu*1e-9)^2+lamda^2)^(3/2))-
mu*1e-9;
beta=((mu+mu)*1e-9/(mu*1e-9+mu*1e-9+2*(g^2+g^2)^0.5)+8*(Diff+Diff)...
/(1e-9*(mu+mu)*(c^2+c^2)^0.5))^(-1);
t_ag=(Ninf*8*k*Tgm*Cun*beta/(3*miGm))^(-1);
Rem = uGm*dreac*densGm/miGm;
Scm = miGm/(mu*1e-9*densGm);
fm=2/((1/((8/Rem)^10+(Rem/36500)^20)^(1/2))+(2.21*log(Rem/7))^10)^(1/5));
Shm=0.042*Rem*fm^(0.5)*Scm^(1/3); % JAS2008
Vdmol = mu*1e-9*Shm/dreac;
t_bdifff=(2*Vdmol/(dreac/2))^(-1);
ufrm = uGm*(0.5*fm)^0.5;
Vdtdifff = 0.2*ufrm*Scm^(-2/3)*Rem^(-1/8);
t_tdifff=(2*Vdtdifff/(dreac/2))^(-1);
tpm = densLiquidm*(mu*1e-9)^2*Cun/(18*miGm);
tpplussm = tpm*ufrm^2*densGm/miGm;
Vdtedd = min(6e-4*tpplussm^2*ufrm,0.1*ufrm);
t_tedd=(2*Vdtedd/(dreac/2))^(-1);
end

function [t_res2,t_therm] =
timescale_th(mu,dreac2,uGas2,Tgas2,Gasdensity2,mfpathGm,miGm,kGm,kPm,Cpm)
densGm = Gasdensity2(1);
uGm = uGas2(1);
t_res2 = 7.6/uGm;
Re = uGm*dreac2*densGm/miGm;
Pr = Cpm*miGm/kGm;
Kni = 2*mfpathGm/(mu*1e-9);
Cuni= 1+Kni*(1.17+0.53*exp(-0.78/Kni));
Kt = 2.294*Cuni*((kGm/kPm)+2.2*Kni)...
/((1+3.483*Kni)*(1+2*(kGm/kPm)+4.4*Kni));
Af = (1/((8/Re)^10+(Re/36500)^20)^0.5+(2.21*log(Re/7))^10)^(1/5);
Cf = 2/Af;
Nu=(Cf/2)*(Re-1000)*Pr/(1+12.7*(Cf/2)^(1/2)*(Pr^(2/3)-1));
Twallm = 273+23;
Tgm = Tgas2(1);
Vth = -Kt*(miGm/(densGm*Tgm))*(Twallm-Tgm)/(dreac2/Nu);
t_therm = (2*Vth/(dreac2/2))^(-1);

```


ΤΕΛΟΣ