

Εθνικό Μετσόβειο Πολυτεχνείο



Προσομοίωση ροών αερολύματος με ισχυρή σύζευξη πυρηνοποίησης-συμπύκνωσης στο πλαίσιο μοντέλων υπολογιστικής ρευστομηχανικής

Συγγραφέας: Χάρης Ευθυμίου

Επιβλέπων: Δημήτρης Μητράκος, Επίκουρος Καθηγητής

Τομέας Πυρηνικής Τεχνολογίας
Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών

National Technical University of Athens



CFD simulation of aerosol flows with strong nucleation-condensation coupling

Author: Charis Efthymiou

Supervisor: Dimitris Mitrakos, Assistant Professor

Nuclear Engineering Department
School of Mechanical Engineering

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.

Χαράλαμπος Ευθυμίου

Ένα μεγάλο ευχαριστώ

σε όλους τους δικούς μου ανθρώπους

και στον κ. Δημήτρη Μητράκο, επίκουρο καθηγητή ΕΜΠ και επιβλέποντα της εργασίας, για τη συνεχή του υποστήριξη και το αμείωτο ενδιαφέρον που επέδειξε καθ'όλη τη διάρκεια της εκπόνησης της διπλωματικής μου. Εκτιμώ απεριόριστα τη θέλησή του να βρει θέμα που να ταιριάζει στα ενδιαφέροντά μου, τη συνεχή επικοινωνία μας και το πόσο προσβάσιμος είναι, και φυσικά τις γνώσεις για την επιστήμη του αερολύματος που αποκόμισα από τη συνεργασία μας, πράγματα που δεν είναι καθόλου δεδομένα και για τα οποία είμαι πραγματικά ευγνώμων.

Σύνοψη

Στην παρούσα διπλωματική εργασία αναπτύχθηκε υπολογιστικό μοντέλο για την προσομοίωση της εξέλιξης ροής αερολύματος. Στόχος ήταν η ενσωμάτωση και η αξιολόγηση του συγκεκριμένου υπολογιστικού μοντέλου σε ευρέως διαδεδομένο εμπορικό πρόγραμμα υπολογιστικής ρευστομηχανικής (Ansys Fluent, Ansys R19.2).

Η εργασία εστίασε στην προσομοίωση ροών αερολύματος, στις οποίες είναι σημαντική η επίδραση εσωτερικών διεργασιών του αερολύματος, όπως η ομογενής πυρηνοποίηση και η συμπύκνωση, οι οποίες μπορεί να είναι ιδιαίτερα απαιτητικές στην υπολογιστική προσομοίωσή τους. Για την επίλυση της συμπύκνωσης, η οποία, ειδικά στην περίπτωση όπου συνυπάρχει με ισχυρή πυρηνοποίηση, παρουσιάζει σημαντικές δυσκολίες, χρησιμοποιήθηκε πρόσφατη μέθοδος η οποία έχει αναπτυχθεί στον Τομέα Πυρηνικής Τεχνολογίας.

Η συγκεκριμένη μέθοδος αποσκοπεί στην αποτελεσματική μείωση της αριθμητικής διάχυσης κατά τη επίλυση της διαδικασίας της συμπύκνωσης, ενώ διατηρεί εγγενώς τον αριθμό των σωματιδίων.

Η μεταφορά και δυναμική της σωματιδιακής φάσης του αερολύματος περιγράφεται από την Γενική Εξίσωση της Δυναμικής του Αερολύματος. Η εξίσωση αυτή επιλύεται σε συνδυασμό με την εξίσωση μεταφοράς του ατμού στην αέρια φάση, η οποία περιέχει κατάλληλους όρους πηγής για τη μοντελοποίηση των εσωτερικών διαδικασιών του αερολύματος (αλλαγή φάσης μέσω πυρηνοποίησης, συμπύκνωσης – εξάτμισης). Οι παραπάνω εξισώσεις μεταφοράς εισάγονται και επιλύονται στον κώδικα Fluent, με τη χρήση βαθμωτών εξαρτημένων μεταβλητών που ορίζονται από την χρήστη. Οι όροι πηγής των εξισώσεων επιλύονται με χρήση συναρτήσεων, σε γλώσσα c, που παρέχονται από τον χρήστη - User Defined Functions (UDF). Οι απαιτούμενες συναρτήσεις αναπτύχθηκαν και επαληθεύτηκαν εξ ολοκλήρου στο πλαίσιο της παρούσας εργασίας.

Για την αξιολόγηση της μεθόδου, τα υπολογιστικά αποτελέσματα συγκρίνονται με πειραματικά δεδομένα (Nguyen et al. 1986) για την περίπτωση πυρηνοποίησης-συμπύκνωσης σε αντιδραστήρα αερολύματος στρωτής ροής, καθώς και με αποτελέσματα παλαιότερων εργασιών. Η μεθοδολογία που αναπτύχθηκε στα πλαίσια της εργασίας προβλέπει πολύ ικανοποιητικά τις φυσικές διεργασίες και προσεγγίζει τις πειραματικές μετρήσεις, με ακρίβεια αντίστοιχης τάξης με προηγούμενες εργασίες.

Το μοντέλο θεωρείται ότι ενσωματώθηκε επιτυχώς στον CFD κώδικα Ansys Fluent, εμπλουτίζοντας σημαντικά τις δυνατότητες του κώδικα για προσομοίωση ροής αερολύματος υπό ισχυρή επίδραση πυρηνοποίησης-συμπύκνωσης. Με τον τρόπο αυτό επαυξάνονται οι δυνατότητες του Τομέα, αλλά και της ερευνητικής κοινότητας, εν γένει, για τη μελέτη των φυσικών μηχανισμών της δυναμικής του αερολύματος, αλλά και την προσομοίωση τεχνολογικών-βιομηχανικών εφαρμογών, στις οποίες η πρόβλεψη του αριθμού και της συνάρτησης κατανομής του μεγέθους των σωματιδίων είναι σημαντική.

Abstract

In this work, a computational model for the simulation of the evolution of an aerosol flow was developed. The main goal was the integration and the evaluation of this specific computational model in a commercially widespread computational fluid dynamics package (Ansys Fluent, Ansys R19.2).

This study was focused on the simulation of aerosol flows in which the effects of internal processes of aerosol, such as nucleation and condensation growth, are significant and also very challenging in their numerical and computational simulation. For the solution of condensational growth, which is truly demanding in its computational simulation, especially when coupled with homogeneous nucleation, we used a new method, developed here, in the Nuclear Engineering Department.

This particular method is aimed at effectively reducing the numerical diffusion that appears during the solution of condensational growth, while the particle number is inherently conserved.

Transport and dynamics of aerosol particle phase are described by the General Dynamic Equation of aerosol. This particular equation is solved combined with the vapor transport equation, in which suitable source terms for modeling internal aerosol processes (phase change via nucleation/condensation-evaporation) are incorporated. The transport equations mentioned above are integrated into and solved by the Fluent code using depended scalar variables defined by the user. The source terms of the equations are solved using functions, in C language, provided by the user - the so called User Defined Functions (UDF). The required functions were developed in whole and verified in the context of the present work.

To evaluate the method, its computational results are compared with experimental data (Nguyen et al. 1987) from experiments with laminar flow aerosol reactors, developed for the study of nucleation and condensation in aerosol flows. The results were also compared with those of older studies. The methodology was found to satisfactorily predict physical processes and approximate experimental measurements, with precision similar to that of older studies.

The model is believed to have been successfully integrated in the CFD code Ansys Fluent, significantly increasing this code's ability for simulating aerosol flow with strong nucleation-condensation coupling. In this way we enhanced the capacity of studying physical mechanisms of aerosol dynamics and simulating technological-industrial applications, in which the prediction of particle number and size distribution function is important, not only for the Department, but generally for the broader scientific community.

Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή	9
2	Βιβλιογραφική Ανασκόπηση	11
3	Βασική θεωρία της ΓΕΔΑ	13
3.1	Γενικά στοιχεία	13
3.2	Συνάρτηση κατανομής μεγέθους σωματιδίων	14
3.3	Φυσική αερολύματος	16
3.3.1	Εσωτερικές διαδικασίες	17
3.3.2	Εξωτερικές διαδικασίες	24
3.4	Μοντελοποίηση ροής αερολύματος	26
3.4.1	Γενική Εξίσωση της Δυναμικής του Αερολύματος	26
3.4.2	Συμπύκνωση	27
3.4.3	Ομογενής Πυρηνοποίηση	27
3.4.4	Συνολική μεταβολή λόγω εσωτερικών διαδικασιών	28
3.4.5	Τελική μορφή της ΓΕΔΑ	28
3.4.6	Η εξίσωση μεταφοράς του ατμού	28
3.5	Αριθμητικές μέθοδοι επίλυσης	29
3.5.1	Τμηματικές μέθοδοι	29
4	Η πειραματική διάταξη και η γεωμετρία του προβλήματος	33
4.1	Αντιδραστήρες αερολύματος στρωτής ροής (ΑΑΣΡ)	33
4.2	Βασικές αρχές λειτουργίας των ΑΑΣΡ	33
4.3	Ομογενής πυρηνοποίηση-συμπύκνωση DPB σε ΑΑΣΡ	35
5	Προτεινόμενο μοντέλο	38
5.1	Μέθοδοι επίλυσης εσωτερικών διαδικασιών	38
5.1.1	Διακριτοποίηση μεγέθους σωματιδίων	38
5.1.2	Πυρηνοποίηση	39
5.1.3	Συμπύκνωση	39
5.2	Η επίλυση της εξίσωσης του ατμού	43
5.3	Υπολογισμοί ρευστομηχανικής	43
6	Αποτελέσματα	45
6.1	Διερεύνηση υπολογιστικών παραμέτρων - Ανάλυση ευαισθησίας	45
6.1.1	Θερμοκρασία τοιχώματος	46
6.1.2	Χωρικό πλέγμα	47
6.1.3	Χρονικό βήμα	49
6.1.4	Διακριτοποίηση του μεγέθους των σωματιδίων	51
6.2	Αποτελέσματα προσομοίωσης διαφορετικών πειραματικών συνθηκών	53
6.2.1	Φαινομενολογία - Ανάλυση φυσικών μηχανισμών	53
6.2.2	Σύγκριση πειραματικών-υπολογιστικών αποτελεσμάτων	59
6.2.3	Η κατανομή μεγέθους	61
7	Συμπεράσματα	65
	Βιβλιογραφία	68

Παράρτημα

75

Κατάλογος συμβόλων

α	συντελεστής εξομάλυνσης
δ	συνάρτηση Dirac
λ	μέση ελεύθερη διαδρομή αερίου
μ_g	δυναμική συνεκτικότητα αερίου
ρ	πυκνότητα
ρ_ρ	πυκνότητα υγρού
ρ_p	πυκνότητα σωματιδίου
σ, σ_g	γεωμετρική τυπική απόκλιση κατανομής / επιφανειακή τάση
A_p	επιφάνεια σωματιδίου
C	γραμμομοριακή συγκέντρωση ατμού
C_c	συντελεστής διόρθωσης του Cunningham
C_m	κλάσμα μάζας ατμού στο περιβάλλον αέριο
C_s	συγκέντρωση του ατμού στην επιφάνεια του σωματιδίου
c	ταχύτητα φέροντος ρευστού
\bar{c}_α	μέση ταχύτητα των μορίων
D_p	συντελεστής διάχυσης σωματιδίου στο φέρον αέριο
D_v	συντελεστής διάχυσης του ατμού στο φέρον αέριο
d_{crit}	κρίσιμη διάμετρος πυρηνοποίησης
d_p	διάμετρος σωματιδίου
d_{pg}	διάμεσος διάμετρος σωματιδίου
E	ενέργεια
F_r	ακτινική συνιστώσα δύναμης F σε κυλινδρικές συντεταγμένες
F_x	αξονική συνιστώσα δύναμης F σε κυλινδρικές συντεταγμένες
I_{dp}	ρυθμός διόγκωσης σωματιδίου λόγω συμπύκνωσης
I_{m_p}	ρυθμός μεταβολής μάζας σωματιδίου λόγω συμπύκνωσης
J	ρυθμός σχηματισμού σωματιδίων κρίσιμης διαμέτρου
J_c, J_m	γραμμομοριακή ροή ατμού προς το σωματίδιο
$J_{classical}$	ρυθμός σχηματισμού σωματιδίων κρίσιμης διαμέτρου κατά την κλασική θεωρία πυρηνοποίησης
$J_{Girshick}$	ρυθμός σχηματισμού σωματιδίων κρίσιμης διαμέτρου κατά Girshick
Kn	αριθμός Knudsen
k	θερμική αγωγιμότητα φέροντος αερίου
k_p	θερμική αγωγιμότητα σωματιδίου
k_B	σταθερά του Boltzmann
L	λανθάνουσα θερμότητα
L_e	αδιάστατος αριθμός Lewis
M	μοριακό βάρος
m_F	μάζα ρευστού γύρω από το σωματίδιο
m_m	μάζα μορίου του υγρού
m_{mol}	μάζα μορίου του υγρού
m_p	μάζα σωματιδίου
N_{total}	συνολικός αριθμός σωματιδίων
N_v	συγκέντρωση των μορίων του ατμού
n	συνάρτηση πυκνότητας κατανομής μεγέθους των σωματιδίων
n_A	συνάρτηση πυκνότητας κατανομής μεγέθους των σωματιδίων ως προς την επιφάνεια

n_m	συνάρτηση πυκνότητας κατανομής μεγέθους των σωματιδίων ως προς τη μάζα
Pr	αριθμός Prandtl
ppm	αριθμός σωματιδίων ανά εκατομμύρια μέρη αέρα
p_r	πίεση ατμών στην επιφάνεια σωματιδίου
p_v	μερική πίεση ατμού
p_{sat}	πίεση κορεσμού
R	παγκόσμια σταθερά των αερίων
S	λόγος κορεσμού
Sc	αριθμός Schmidt
\mathbf{r}	διάνυσμα θέσης
T	θερμοκρασία
T_s	θερμοκρασία στην επιφάνεια του σωματιδίου
T_{sat}	θερμοκρασία κορεσμού
t	χρόνος
v_{liq}	όγκος υγρού
v_m	όγκος μορίου υγρού
u	ταχύτητα σωματιδίου

Υπογραφές

<i>coag</i>	συσσωμάτωση (coagulation)
<i>cond</i>	συμπύκνωση (condensation)
<i>g - p</i>	μετατροπή ατμού σε σωματίδια (gas-to-particle conversion)
<i>nucl</i>	πυρηνοποίηση

Αρτικόλεξα - Συντομεύσεις

ΑΑΣΡ	αντιδραστήρας αερολύματος στρωτής ροής
ΓΕΔΑ/GDE	γενική εξίσωση δυναμικής αερολύματος (general dynamic equation)
CFD	υπολογιστική ρευστομηχανική (computational fluid dynamics)
CICR	μέθοδος επανατοποθέτησης με κυβική παρεμβολή (cubic interpolation cumulative remapping)
DPB	Φθαλικός διβουτυλεστέρας (Dibutyl phthalate)
NOAA	Εθνική Υπηρεσία των Ωκεανών και του Περιβάλλοντος των ΗΠΑ
UDF	συνάρτηση καθορισμένη από το χρήστη (user defined function)
UDS	βαθμωτό μέγεθος καθορισμένο από το χρήστη (user defined scalar)
WHO	Παγκόσμιος Οργανισμός Υγείας

1 Εισαγωγή

Ως αερολύματα ορίζονται στερεά ή υγρά σωματίδια που βρίσκονται διεσπαρμένα σε φέρον αέριο. Το μέγεθος των σωματιδίων κυμαίνεται τυπικά από την ατομική κλίμακα των λίγων νανομέτρων(nm), μέχρι και τα 100μm (Hinds 1999). Χαρακτηριστικά παραδείγματα αποτελούν η ομίχλη και τα σύννεφα (υγρά σωματίδια σε αέριο) , η σκόνη και ο καπνός (στερεά σωματίδια σε αέριο).

Τις τελευταίες δεκαετίες το ενδιαφέρον για τη μελέτη του αερολύματος εντείνεται συνεχώς. Ο πρωταρχικός παράγοντας για αυτό είναι η πολύ σημαντική επίδραση των αερολυμάτων σε φαινόμενα που σχετίζονται με την κλιματική κρίση και έχουν δυσμενείς συνέπειες στον άνθρωπο και στο περιβάλλον. Για παράδειγμα, ο μαύρος άνθρακας, που ανήκει στην κατηγορία των αερολυμάτων που ονομάζονται σωματιδιακές εκπομπές, εκτιμάται ότι ίσως είναι η δεύτερη σημαντικότερη αιτία για την υπερθέρμανση του πλανήτη μετά το διοξείδιο του άνθρακα (CENTER FOR CLIMATE AND ENERGY SOLUTIONS 2010), ενώ η διασπορά του στην ατμόσφαιρα θεωρείται ότι επιδρά σημαντικά στα μοτίβα της νεφοποίησης και των βροχοπτώσεων (Climate Clean Air Coalition 2018). Επίσης, σημαντική ώθηση στην περαιτέρω επιστημονική ενασχόληση με τα αερολύματα έδωσε και η σύγχρονη υγειονομική κρίση που προκάλεσε η εξάπλωση της COVID-19, καθώς πολύ σημαντικός παράγοντας μετάδοσης είναι η αερομεταφορά του ιού από μικροσκοπικά σωματίδια (WHO 2022; D.Lewis 2022), που κατηγοριοποιούνται ως αερολύματα. Ένα άλλο επιστημονικό και τεχνολογικό πεδίο για το οποίο καίριας σημασίας είναι η κατανόηση της συμπεριφοράς των αερολυμάτων, είναι αυτό της πρόβλεψης της εξέλιξης και των επιπτώσεων ατυχημάτων και φυσικών καταστροφών, καθώς σε δασικές πυρκαγιές και σε πυρηνικά ατυχήματα έχουμε επικίνδυνες εκλύσεις για το περιβάλλον και την ανθρώπινη υγεία σε μορφή αερολύματος.

Στις περιπτώσεις που αναφέρθηκαν είναι καίριας σημασίας ο σαφής καθορισμός των ιδιοτήτων, όπως η χημική σύσταση ή το μέγεθος, και του πλήθους των σωματιδίων. Τα παραπάνω είναι δυναμικά και συνεχώς εξελισσόμενα μεγέθη, τα οποία διαδραματίζονται σε χρονικές κλίμακες που μπορεί να έχουν διακύμανση κατά τάξεις μεγέθους, κάνοντας την αριθμητική τους επίλυση αρκετά απαιτητική. Στις διάφορες εφαρμογές υπεισέρχονται πολύ συχνά πολύπλοκες, πολυδιάστατες ροές στις οποίες οι υπολογισμοί της δυναμικής του αερολύματος πρέπει να συνδυαστούν με υπολογισμούς ρευστομηχανικής (Mitrakos 2008; di Veroli and Rigopoulos 2011; Sewerin and Rigopoulos 2017a). Η αύξηση της υπολογιστικής ισχύος και η ανάπτυξη και εμπορική διάδοση αξιόπιστων πακέτων υπολογιστικής ρευστομηχανικής, όπως ο Ansys Fluent, δημιουργούν νέες δυνατότητες για την ανάπτυξη νέων μοντέλων αριθμητικής προσομοίωσης και επίλυσης. Παρόλα αυτά, για ροές που λαμβάνουν χώρα ταυτόχρονα εσωτερικές διεργασίες του αερολύματος, όπως η πυρηνοποίηση και η συμπύκνωση, η πρόκληση της ανάπτυξης μοντέλων ακριβείας παραμένει μεγάλη, λόγω πολύπλοκων αριθμητικών δυσκολιών που παρουσιάζονται.

Ο βασικός σκοπός της παρούσας εργασίας είναι η μοντελοποίηση ροών αερολύματος με ισχυρή επίδραση συμπύκνωσης – πυρηνοποίησης και η επίλυση της ΓΕΔΑ / GDE (Γενική Εξίσωση Δυναμικής Αερολύματος/ General Dynamic Equation), της βασικής εξίσωσης που περιγράφει τη μεταφορά και τη δυναμική του αερολύματος σε πολλές διαστάσεις, χρησιμοποιώντας το Ansys Fluent, ένα πολύ διαδεδομένο πακέτο υπολογιστικής ρευστομηχανικής. Το πρόγραμμα Ansys Fluent χρησιμοποιείται

για να οριστεί και να επιλυθεί το ρευστοδυναμικό πρόβλημα και να επιλυθεί η ΓΕΔΑ, αφού προηγουμένως έχει υλοποιηθεί και ενσωματωθεί στο Ansys Fluent το μοντέλο συμπύκνωσης και πυρηνοποίησης, που έχει τη μορφή κατάλληλων για την περίπτωση όρων πηγής. Η υλοποίηση έχει γίνει στη γλώσσα προγραμματισμού C και η ενσωμάτωση στο Ansys έγινε με χρήση UDF (User Defined Functions).

2 Βιβλιογραφική Ανασκόπηση

Η υπολογιστική προσομοίωση ροής ρευστού είναι ένα θέμα που έχει αναλυθεί εκτενώς στη βιβλιογραφία για πληθώρα εφαρμογών, γεωμετριών και προβλημάτων. Από την άλλη, η υπολογιστική προσομοίωση ροής αερολύματος έχει μελετηθεί σε αρκετά μικρότερο βαθμό και χαρακτηριστικό παράδειγμα αποτελεί και το υπολογιστικό πρόγραμμα που χρησιμοποιήθηκε στην παρούσα εργασία, το οποίο, ενώ είναι πάρα πολύ αξιόπιστο για την επίλυση ροών ρευστού, δεν παράγει αντίστοιχης ποιότητας αποτελέσματα για ροές αερολύματος, τουλάχιστον στη βασική του μορφή.

Οι δύο βασικές θεωρήσεις σύμφωνα με τις οποίες περιγράφεται και επιλύεται ένα πεδίο ρευστού είναι η Lagrangian και η Eulerian. Μια απλοποιημένη περιγραφή της διαφοράς μεταξύ των δύο μεθόδων είναι ότι για την επίλυση με Eulerian προσέγγιση απαιτείται η χρήση ενός σταθερού πλέγματος, ενώ οι Lagrangian προσεγγίσεις χρησιμοποιούν κινητούς κόμβους που ακολουθούν την κίνηση των μεμονωμένων σωματιδίων. Ενώ οι Lagrangian μέθοδοι επιφέρουν αρκετούς περιορισμούς, ειδικά σε ροές αερολύματος που μεταβάλλονται χρονικά (Mitsakou et al.2004), είναι αρκετά πιο διαδεδομένες από τις Eulerian μεθόδους. Το γεγονός αυτό μπορεί να καταδειχθεί και με μια γρήγορη αναζήτηση στη βιβλιογραφία, καθώς σε αναζήτηση στο *Journal of Aerosol Science*(Ιούνιος 2022) εμφανίζονται 497 αποτελέσματα για Lagrangian και 272 για Eulerian και 346 αποτελέσματα για Lagrangian+computational(υπολογιστικό/ή) και μόλις 187 για Eulerian+computational. Αυτό συμβαίνει γιατί η επίλυση συγκεκριμένων εσωτερικών διεργασιών, όπως η συμπύκνωση, είναι υπολογιστικά πολύ περίπλοκες και κοστοβόρες όταν συνδυάζονται με Eulerian υπολογισμούς ρευστομηχανικής.

Μέρος του μοντέλου που αναπτύχθηκε στην παρούσα εργασία αποτέλεσε μια καινούργια τμηματική μέθοδος(sectional method) (Mitrakos and Vouros 2022). Το μεγάλο πλεονέκτημα των τμηματικών μεθόδων είναι ότι μπορούν να προβλέψουν ικανοποιητικά ακόμα και τυχαία και πολύπλοκα σχήματα κατανομών μεγέθους. Για τον λόγο αυτό έχουν χρησιμοποιηθεί σε αρκετές εργασίες για την επίλυση πολυδιάστατων ροών (Pyykönen and Jokiniemi 2000; Mitrakos, Hiniis, and Housiadas 2007; Frederix et al. 2017). Από την άλλη, κατά την εφαρμογή των τμηματικών μεθόδων παρουσιάζεται το σημαντικό μειονέκτημα της αριθμητικής διάχυσης. Ακόμα και με τη χρήση εξελιγμένων μεθόδων αριθμητικής προσέγγισης, προβλήματα όπως η αριθμητική διάχυση του αριθμού σωματιδίων των τμημάτων δεν μπορεί να αποφευχθεί εύκολα (Mitrakos 2008). Η αρνητική επίδραση της αριθμητικής διάχυσης, μπορεί επιπλέον να είναι πολύ σημαντική στην επίλυση της πυρηνοποίησης, λόγω της εξαιρετικής ευαισθησίας της τελευταίας σε διάφορες παραμέτρους, ο οποίος επηρεάζεται από τα σφάλματα που εισάγει η αριθμητική διάχυση. Απλές λύσεις, όπως η αύξηση των τμημάτων διακριτοποίησης, έχουν μεν θετικά αποτελέσματα, εντούτοις προκαλούν μεγάλη αύξηση του υπολογιστικού χρόνου (Pyykönen and Jokiniemi 2000; Mitrakos, Hiniis, and Housiadas 2007; Garcia, Herranz, and Kissane 2016; Herranz et al. 2018).

Η τμηματική αυτή μέθοδος συνδυάστηκε με τεχνικές επανατοποθέτησης (remapping) του κινούμενου πλέγματος σε σταθερό. Η χρήση του κινούμενου πλέγματος για τη διακριτοποίηση του μεγέθους των σωματιδίων (Kim and Seinfeld 1990) παρέχει μεγάλη ακρίβεια στον υπολογισμό του μεγέθους κατά τη συμπύκνωση. Παρόλα αυτά, η χρήση τους επιφέρει επίσης πολύ σημαντικές δυσκολίες στο πλαίσιο Eulerian επίλυσης(Roussos, Alexopoulos, and Kiparissides 2006). Για τον λόγο

αυτό, η τμηματική μέθοδος με κινούμενο πλέγμα έχει συνδυαστεί με τεχνικές επανατοποθέτησης (remapping) του κινούμενου πλέγματος στο σταθερό. Το πρόβλημα αυτό μπορεί να αντιμετωπιστεί όταν το κινούμενο πλέγμα επανασχεδιάζεται και τοποθετείται πάνω στο σταθερό. Οι μέθοδοι επανατοποθέτησης του πλέγματος έχουν αρχικά χρησιμοποιηθεί για τη μελέτη των ατμοσφαιρικών διεργασιών (Lurmann et al. 1997) και έχουν χρησιμοποιηθεί και στη CFD προσομοίωση ροών αερολύματος με σημαντική επίδραση των εσωτερικών διεργασιών (Mitrakos, Hinis, and Housiadas 2007). Η μέθοδος της παρούσας εργασίας ανήκει στην οικογένεια των μεθόδων επανατοποθέτησης του κινούμενου πλέγματος σε σταθερό και ουσιαστικά αποτελεί εξέλιξη της τελευταίας. Τα πλεονεκτήματά της σε σχέση με προηγούμενες παρόμοιες μεθόδους είναι η απλότητά της και η από κατασκευής ιδιότητά της να διατηρεί σταθερό το συνολικό αριθμό των παραγόμενων σωματιδίων, ενώ συγχρόνως καταφέρνει να αντιμετωπίσει ικανοποιητικά την αριθμητική διάχυση με αυξημένη ευστάθεια και αξιοπιστία.

3 Βασική θεωρία της ΓΕΔΑ

3.1 Γενικά στοιχεία

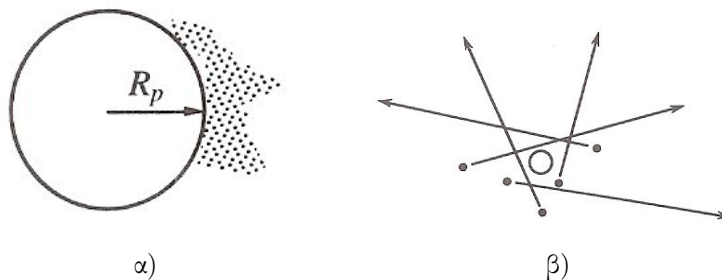
Οι βασικότερες ιδιότητες του αερολύματος είναι η συγκέντρωση και το μέγεθος των σωματιδίων. Η συγκέντρωση μετράται είτε σε αριθμό σωματιδίων ανά μονάδα μάζας του συστήματος φέροντος αερίου – σωματιδίων είτε σε αριθμό σωματιδίων ανά μονάδα όγκου. Όταν το φέρον αέριο είναι ατμοσφαιρικός αέρας, μπορεί να προσδιορίζεται σε αριθμό σωματιδίων ανά εκατομμύρια μέρη αέρα. Για παράδειγμα, η *Εθνική Υπηρεσία των Ωκεανών και του Περιβάλλοντος των ΗΠΑ* (U.S. NOAA) στις εκθέσεις αναφέρει τις συγκεντρώσεις ρυπαντών σε ppm (NOAA 2021). Επίσης, σε διάφορες εφαρμογές, όπως στη μελέτη της ατμοσφαιρικής ρύπανσης, είναι σημαντικές και οι χημικές ιδιότητες των αερολυμάτων.

Το μέγεθος των σωματιδίων είναι μια ιδιότητα που καθορίζεται και μοντελοποιείται δυσκολότερα καθώς αυτά, ειδικά τα σωματίδια στερεών, έχουν ακανόνιστο σχήμα. Τα σωματίδια συχνά προσεγγίζονται ως σφαίρες με μέτρο του μεγέθους τους να λαμβάνεται μια ισοδύναμη διάμετρος d ή d_p , δηλαδή μια διάμετρος που αν τα σωματίδια ήταν σφαιρικά θα είχαν την ίδια συμπεριφορά, με βάση κριτήρια που εμείς θέτουμε, με τα αντίστοιχα πραγματικά σωματίδια. 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 χρησιμοποιείται συννηθέστερα για τη μέτρηση της διαμέτρου των σωματιδίων είναι το μικρόμετρο (μm), αν και συχνά, σε περιπτώσεις νανοσωματιδίων, χρησιμοποιείται το νανόμετρο (nm).

Συχνά τα σωματίδια κατηγοριοποιούνται σύμφωνα με το μέγεθος τους. Τα ατμοσφαιρικά σωματίδια για παράδειγμα, χωρίζονται σε: λεπτόκοκκα (fine particles), με διάμετρο μικρότερη από $2\mu\text{m}$ (ή και κατά άλλους $1 \mu\text{m}$) και χονδρόκοκκα (coarse particles) με διάμετρο μεγαλύτερη από $2\mu\text{m}$ ($1 \mu\text{m}$) (Whitby 1978). Οι κατηγορίες αυτές μπορούν επίσης να διαιρεθούν σε υποκατηγορίες (βλέπε π.χ. Colbeck 1998), τα όρια των οποίων, ωστόσο, δεν είναι σαφώς καθορισμένα. Μια σημαντική κατηγορία σωματιδίων είναι τα νανοσωματίδια (nanoparticles), δηλαδή τα σωματίδια με διάμετρο μικρότερη από 100 nm .

Το μέγεθος των σωματιδίων επιδρά καταλυτικά στα χαρακτηριστικά του αερολύματος, καθώς ακόμα και η ίδια η φύση των νόμων που περιγράφουν τη συμπεριφορά του 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 αερίου μεταξύ δύο διαδοχικών συγκρούσεων και υπολογίζεται από την κινητική θεωρία των αερίων (Hirschfelder et al. 1964; Chapman and Cowling 1970).

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 1). Η πρώτη περιοχή (Σχήμα 1α) 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 σαν *συνεχής περιοχή* (*continuum regime*). Σε αυτή την περιοχή το περιβάλλον ρευστό συμπεριφέρεται σαν συνεχές μέσο θεωρώντας συνθήκη μη ολίσθησης (μηδενικής ταχύτητας) στην επιφάνεια του σωματιδίου. Για τον υπολογισμό της αντίστασης που ασκείται στο σωματίδιο μπορούν να χρησιμοποιηθούν οι εξισώσεις Navier-Stokes. Όταν η διάμετρος του σωματιδίου είναι πολύ μικρότερη από τη μέση ελεύθερη διαδρομή του αερίου ($Kn \gg 1$) (Σχήμα 1β), τότε το αέριο δεν μπορεί να θεωρηθεί σαν 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. Σ' 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.



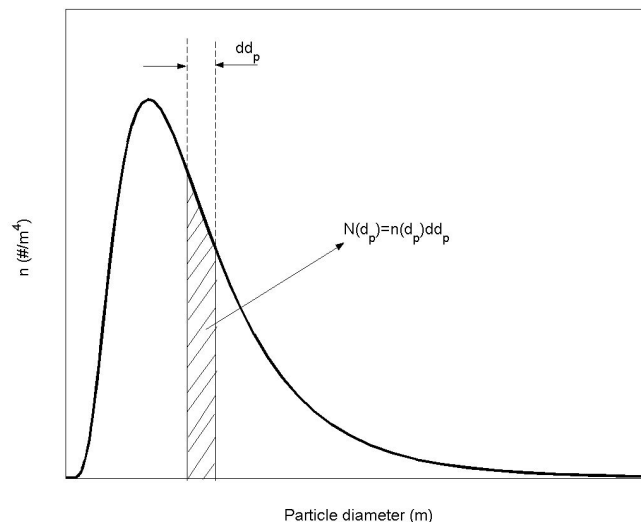
Σχήμα 1: Σχηματική περιγραφή των δύο οριακών περιοχών αλληλεπίδρασης φέροντος αερίου-σωματιδίου: α) συνεχή περιοχή $Kn \ll 1$ και β) ελεύθερη μοριακή περιοχή $Kn \gg 1$ (από Seinfeld and Pandis 1998)

3.2 Συνάρτηση κατανομής μεγέθους σωματιδίων

Ένα αερόλυμα, του οποίου όλα τα σωματίδια έχουν το ίδιο μέγεθος, ονομάζεται *μονοδισπαρμένο αερόλυμα* (*monodisperse aerosol*). Η περίπτωση μονοδισπαρμένου αερολύματος είναι πολύ σπάνια και μπορεί να προκύψει μόνο κάτω από τεχνητές και πλήρως ελεγχόμενες συνθήκες (Colbeck 1998). Για παράδειγμα, το ιδανικό προϊόν της βιομηχανικής παραγωγής νανοσωματιδίων θα ήταν ένα μονοδισπαρμένο αερόλυμα, καθώς σαν προϊόν θα εμφάνιζε πλήρη ομοιογένεια. Το αερόλυμα γενικά, υπό την επίδραση ποικίλων φυσικών διαδικασιών, αποκτά, σε σύντομο χρονικό διάστημα, ευρύ φάσμα μεγέθους σωματιδίων. Τέτοια αερόλυμα ονομάζονται *πολυδισπαρμένα αερόλυμα* (*polydisperse aerosols*) και είναι αυτά που απαντώνται στην πράξη,

προερχόμενα τόσο από φυσικές όσο και από ανθρωπογενείς πηγές και τεχνητές διεργασίες.

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 (Jacobson 1999; Friedlander 2000; Drossinos and 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 και ορίζεται μια διακριτή συνάρτηση εξαρτώμενη από τα διανύσματα θέσης και χρόνου. Αν και ο τρόπος αυτός είναι αυστηρά ακριβής, 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* $n(d_p, \mathbf{r}, t)$ (Σχ. 2), όπου \mathbf{r} το διάνυσμα χώρου και t ο χρόνος, η οποία ορίζεται έτσι ώστε το γινόμενο $n(d_p, \mathbf{r}, t) * dd_p$ 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 2: Παράδειγμα συνεχούς συνάρτησης πυκνότητας κατανομής για την περιγραφή του μεγέθους των σωματιδίων ενός αερολύματος (από Mitrakos 2008)

Σε κάποιες 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 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 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). Η λογαριθμοκανονική συνάρτηση κατανομής μεγέθους ενός αερολύματος δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

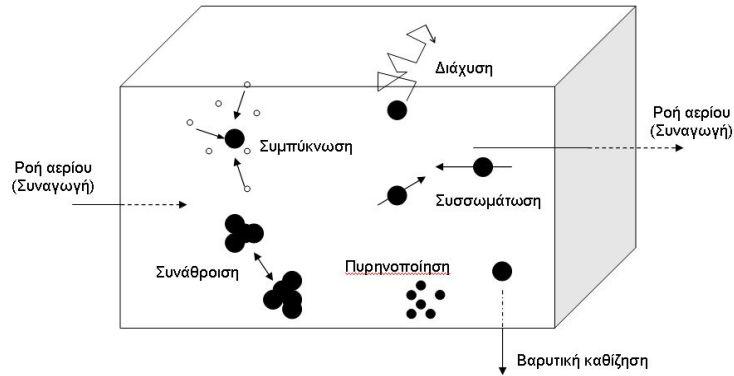
$$n(d_p) = \frac{N_{total}}{\sqrt{2\pi \ln \sigma_g}} \exp \left[-\frac{(\ln d_p - \ln d_{pg})^2}{2(\ln \sigma_g)^2} \right] \quad (3)$$

όπου d_{pg} 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_g η γεωμετρική τυπική απόκλιση (*geometrical standard deviation*) της κατανομής. Στο Σχήμα 2 απεικονίζεται ένα παράδειγμα λογαριθμοκανονικής κατανομής. Η λοξότητα της κατανομής και η ουρά που παρατηρείται για μεγάλα σωματίδια 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 διαφόρων 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 and Housiadas 2006). Αν θεωρήσουμε ένα στοιχειώδη όγκο (Σχήμα 3) 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 –συνάνθροιση και η μετατροπή της αέριας φάσης σε σωματιδιακή, μέσω πυρηνοποίησης και συμπύκνωσης –εξάτμισης. Στα πλαίσια της παρούσας εργασίας εστίασαμε στην πυρηνοποίηση και τη συμπύκνωση-εξάτμιση. Στις εξωτερικές διαδικασίες περιλαμβάνονται η μεταφορά σωματιδίων λόγω της ροής του φέροντος αερίου, η διάχυση και η κίνηση των σωματιδίων λόγω της επίδρασης εξωτερικών δυνάμεων, όπως η βαρύτητα, η θερμοφόριση κλπ.



Σχήμα 3: Στοιχειώδης όγκος, στον οποίο παρουσιάζονται οι κύριες διάφορες φυσικές διαδικασίες της μεταφοράς και της δυναμικής του αερολύματος (προσαρμοσμένο από Drossinos and Housiadas 2006).

3.3.1 Εσωτερικές διαδικασίες

3.3.1.1 Μετατροπή αέριας φάσης σε σωματιδιακή

Η παρουσία ατμού στην αέρια φάση ενδέχεται να επιδρά σημαντικά στην εξέλιξη της δυναμικής ενός αερολύματος, καθώς μπορεί να μεταβάλλει, μέσω της μεταφοράς μάζας από την ατμώδη φάση στη σωματιδιακή, τόσο τον αριθμό (ομογενής πυρηνοποίηση) όσο και το μέγεθος (συμπύκνωση-εξάτμιση) των σωματιδίων. Η ομογενής πυρηνοποίηση είναι η διαδικασία σχηματισμού νέων, εμβρυϊκών σωματιδίων (πυρήνες), τα οποία δεν προϋπήρχαν, απευθείας από τα μόρια του ατμού. Η συμπύκνωση είναι η διαδικασία εκείνη κατά την οποία ήδη υπάρχοντα σωματίδια, όπως αυτά που προέκυψαν λόγω πυρηνοποίησης, διογκώνονται εξαιτίας της μεταφοράς μάζας από την ατμώδη φάση στην επιφάνειά τους.

Μία πολύ σημαντική παράμετρος που καθορίζει τη μεταφορά μάζας από την ατμώδη φάση στη σωματιδιακή είναι ο *λόγος κορεσμού* (saturation ratio) S , που ορίζεται από την παρακάτω σχέση:

$$S = \frac{p_v(T)}{p_{sat}(T)} \quad (4)$$

όπου $p_v(T)$ είναι η μερική πίεση του ατμού και $p_{sat}(T)$ η πίεση κορεσμού (*saturation pressure*) ή πίεση ισορροπίας (*equilibrium pressure*) του ατμού σε θερμοκρασία T . Ανάλογα με τη τιμή του λόγου κορεσμού ο ατμός μπορεί να χαρακτηριστεί ως ακόρεστος ($S < 1$), κορεσμένος ($S = 1$) ή υπέρκορος ($S > 1$). Η πίεση κορεσμού έχει μετρηθεί για πολλές ενώσεις. Συνήθως υπολογίζεται από την εξίσωση Clausius-Clapeyron (βλέπε π.χ. Rogers and Yau 1989; Pruppacher and Klett 2000):

$$\ln p_{sat} = -\frac{ML}{RT} + B \quad (5)$$

Στην σχέση αυτή, M και L είναι το μοριακό βάρος και η λανθάνουσα θερμότητα ατμοποίησης του ατμού, αντίστοιχα, και R η παγκόσμια σταθερά των αερίων (ίση με 8.314 J/mole K). B είναι μία σταθερά, η οποία εξαρτάται από τη σύσταση του ατμού και μπορεί να υπολογιστεί εάν είναι γνωστό το σημείο βρασμού του. Αν ο ατμός

θεωρηθεί τέλειο αέριο τότε η εξίσωση (4) μπορεί να γραφεί ως εξής:

$$S = \frac{N_v k_B T}{p_{sat}(T)} \quad (6)$$

όπου N_v είναι η συγκέντρωση των μορίων του ατμού και k_B η σταθερά του Boltzmann ($k_B=1.381 \times 10^{23}$).

Από τη σχέση (6) προκύπτει ότι ο λόγος κορεσμού μπορεί να μεταβληθεί λόγω μεταβολής είτε της θερμοκρασίας είτε της συγκέντρωσης του ατμού. Μεταβολή στη θερμοκρασία του ρευστού μπορεί να προκύψει, για παράδειγμα, λόγω αδιαβατικής εκτόνωσης ή ψύξης μέσω αγωγής. Η συγκέντρωση του ατμού μπορεί να μεταβληθεί λόγω εξωτερικών πηγών, χημικών αντιδράσεων ή λόγω μετατροπής της ατμώδους φάσης σε σωματίδια (πυρηνοποίηση, συμπύκνωση/εξάτμιση).

α) Ομογενής πυρηνοποίηση

Στα αέρια μείγματα, ακόμα και σε καταστάσεις που δεν υφίσταται κορεσμός, δημιουργούνται συμπλέγματα μορίων, καθώς τα μόρια συσσωματώνονται λόγω των μεταξύ τους συγκρούσεων και της ύπαρξης κάποιων ηλεκτρικά φορτισμένων σωματιδίων, με πηγή φόρτισης για παράδειγμα την κοσμική ακτινοβολία. Όταν το αέριο σύστημα οδηγηθεί σε καταστάσεις υπερκορεσμού, η συγκέντρωση των μοριακών συμπλεγμάτων αρχίζει να μεγαλώνει, καθώς αυτά ενσωματώνουν και άλλα μεμονωμένα σωματίδια, και τελικά ξεπερνάει μια κρίσιμη διάμετρο d_p . Τα συσσωματώματα αυτά μετατρέπονται σε ευσταθείς πυρήνες, η ύπαρξη των οποίων σταδιακά μειώνει τον υπερκορεσμό στο σύστημα. Επειδή οι πυρήνες αυτοί προέρχονται από τον ίδιο τον ατμό, η διαδικασία αυτή ονομάζεται ομογενής πυρηνοποίηση. Η διάμετρος των εμβρυικών σωματιδίων (κρίσιμη διάμετρος-critical diameter) συνδέεται με τη θερμοκρασία και τον λόγο κορεσμού, σύμφωνα με την ακόλουθη σχέση (π.χ. Seinfeld and Pandis 1998; Friedlander 2000; Drossinos and Housiadas 2006):

$$d_{crit} = \frac{2\sigma v_{liq}}{k_B T \ln S} \quad (7)$$

Αν η σχέση αυτή αναδιαταχθεί και ως λόγος κορεσμού S ληφθεί ο λόγος της πίεσης των ατμών στην επιφάνεια του σωματιδίου, p_r , προς τη πίεση κορεσμού σε επίπεδη επιφάνεια (p_{sat}), τότε προκύπτει ότι:

$$p_r(d) = p_{sat} \exp\left(\frac{2\sigma v_m}{k_B T d}\right) \quad (8)$$

όπου v_m και σ είναι ο όγκος ενός μορίου του υγρού και η επιφανειακή τάση, αντίστοιχα. Από τη σχέση (8), που είναι γνωστή ως εξίσωση του Kelvin, προκύπτει ότι η πίεση των ατμών στην επιφάνεια ενός σωματιδίου είναι υψηλότερη (λόγω της καμπυλότητας) από την πίεση κορεσμού πάνω από επίπεδη ελεύθερη επιφάνεια του υγρού. Το φαινόμενο Kelvin είναι σημαντικό για σωματίδια με διάμετρο μικρότερη από 0.1 μm (Drossinos and Housiadas 2006).

Ο ρυθμός με τον οποίο σχηματίζονται σωματίδια κρίσιμης διαμέτρου μπορεί να υπολογιστεί από την κλασική θεωρία της πυρηνοποίησης (Frenkel 1955), σύμφωνα με

την παρακάτω σχέση (βλέπε π.χ. Seinfeld and Pandis 1998; Drossinos and Housiadas 2006):

$$J_{classical} = \frac{(C_m)^2(\rho)^2}{\rho_p m_m} \sqrt{\frac{2\sigma}{\pi m_m}} \exp\left(-\frac{\pi\sigma(d_{crit})^2}{3k_B T}\right) \quad (9)$$

Στην παραπάνω σχέση, C_m είναι το κλάσμα μάζας του ατμού στο περιβάλλον αέριο, ρ η πυκνότητα του περιβάλλοντος αερίου, ρ_p η πυκνότητα του υγρού και m_m η μάζα ενός μορίου του υγρού. Η κλασική θεωρία της πυρηνοποίησης προβλέπει ρυθμούς πυρηνοποίησης, οι οποίοι είναι συνήθως κατά τάξεις μεγέθους διαφορετικοί από αυτούς που μετρώνται πειραματικά. Αρκετές θεωρίες έχουν αναπτυχθεί για τον θεωρητικό υπολογισμό του ρυθμού πυρηνοποίησης, χωρίς ωστόσο κάποια από αυτές να είναι ικανή να προβλέψει αξιόπιστα και με ακρίβεια την ποσοτική σχέση του ρυθμού πυρηνοποίησης με τα μακροσκοπικά μεγέθη, δηλαδή με τη θερμοκρασία και τον λόγο κορεσμού.

Μία γνωστή παραλλαγή της κλασική θεωρίας της πυρηνοποίησης έχει προταθεί στην εργασία των Girshick and Chiu (1990). Σύμφωνα με αυτή, ο κλασικός ρυθμός πυρηνοποίησης πολλαπλασιάζεται με ένα διορθωτικό συντελεστή που προσδιορίζεται από την αυτο-συμβατότητα της κατανομής των συμπλεγμάτων των μορίων (self-consistency equilibrium cluster distribution):

$$J_{Girshick} = \frac{1}{S} \exp\left(\frac{\sqrt[3]{36\pi}(v_m)^2}{k_B T}\right) J_{classical} \quad (10)$$

Αν και η κλασική θεωρία της πυρηνοποίησης, όπως επίσης, και η τροποποιημένη θεωρία των Girshick and Chiu (1990) δεν προβλέπουν με ακρίβεια τον πραγματικό ρυθμό πυρηνοποίησης, παρόλα αυτά, χρησιμοποιούνται πολύ συχνά, λόγω της έλλειψης μίας θεωρίας που να περιγράφει ικανοποιητικά τον μηχανισμό της πυρηνοποίησης. Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιήθηκε για την περιγραφή του ρυθμού της πυρηνοποίησης ο τύπος του Girshick.

β) Συμπύκνωση

Σε περίπτωση υπερκορεσμού ενός ατμού ($S > 1$), τα σωματίδια διογκώνονται λόγω συμπύκνωσης. Η συμπύκνωση (ή η εξάτμιση) είναι το αποτέλεσμα της ροής μορίων του ατμού προς (ή από την) επιφάνεια του σωματιδίου, λόγω της διαφοράς πίεσης ανάμεσα στον περιβάλλοντα ατμό και στην επιφάνεια του σωματιδίου. Οι διαδικασίες της πυρηνοποίησης και της συμπύκνωσης ουσιαστικά απομακρύνουν το σύστημα από την κατάσταση υπερκορεσμού και τελικά επέρχεται η ισορροπία.

Το ζητούμενο είναι ο υπολογισμός του ρυθμού διόγκωσης (ή συρρίκνωσης) του σωματιδίου ή ισοδύναμα του ρυθμού μεταφοράς μάζας προς (ή από) το σωματίδιο. Ο ρυθμός αυτός εξαρτάται από τον λόγο κορεσμού, το μέγεθος του σωματιδίου και τον αριθμό Knudsen.

i) Συνεχής περιοχή

Στην περίπτωση μεγάλου σωματιδίου ($dp \gg \lambda$) το περιβάλλον αέριο μπορεί να θεωρηθεί ως συνεχές μέσο. Στη συνεχή περιοχή ο ρυθμός μεταφοράς μάζας στο σωματίδιο μπορεί να υπολογιστεί χρησιμοποιώντας τη θεωρία της διάχυσης. Η μη

μόνιμη εξίσωση διάχυσης για ένα ακίνητο σφαιρικό σωματίδιο, λαμβάνοντας υπόψη το νόμο του Fick (Bird et al. 1960; Eckert and Drake 1972) μπορεί να γραφεί ως εξής (Seinfeld and Pandis 1998):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 D_v \frac{\partial C}{\partial r} \right) \quad (11)$$

όπου C είναι η γραμμομοριακή συγκέντρωση του ατμού και D_v ο συντελεστής διάχυσης του ατμού στο φέρον αέριο. Αν θεωρηθούν οι ακόλουθες αρχικές και οριακές συνθήκες:

$$C(r, 0) = C_\infty, r > \frac{d_p}{2} \quad (12)$$

$$C(\infty, 0) = C_\infty \quad (13)$$

$$C\left(\frac{d_p}{2}, t\right) = C_s \quad (14)$$

τότε η γραμμομοριακή ροή του ατμού (moles/s) προς το σωματίδιο προκύπτει από την επίλυση της εξίσωσης (11) στη μόνιμη κατάσταση ($t \rightarrow \infty$) (Seinfeld and Pandis 1998):

$$J_c = \frac{4D_v M}{\rho_p d_p} (C_\infty - C_s) \quad (15)$$

όπου C_∞ είναι η συγκέντρωση του περιβάλλοντος ατμού και C_s η συγκέντρωση του ατμού στην επιφάνεια του σωματιδίου. Η σχέση μεταξύ C_∞ και C_s καθορίζει αν το σωματίδιο αναπτύσσεται ή συρρικνώνεται. Συγκεκριμένα, για $C_\infty > C_s$ λαμβάνει χώρα συμπύκνωση και επομένως το σωματίδιο διογκώνεται, ενώ για $C_\infty < C_s$ λαμβάνει χώρα εξάτμιση και το σωματίδιο συρρικνώνεται. Η εξίσωση (15), που δίνει τη ροή μάζας σε ένα σωματίδιο στη συνεχή περιοχή λόγω διάχυσης, είναι γνωστή ως εξίσωση του Maxwell.

Ο ρυθμός μεταβολής της μάζας του σωματιδίου μπορεί να υπολογιστεί από το ισοζύγιο μάζας στο σωματίδιο, ως ακολούθως:

$$\rho_p \frac{d}{dt} \left(\frac{\pi}{6} d_p^3 \right) = J_c M \quad (16)$$

όπου ρ_p είναι η πυκνότητα του σωματιδίου. Από τις εξισώσεις (15) και (16) προκύπτει ότι ο ρυθμός μεταβολής της διαμέτρου του σωματιδίου δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

$$\frac{dd_p}{dt} = \frac{4D_v M}{\rho_p d_p} (C_\infty - C_s) \quad (17)$$

Με τη βοήθεια της καταστατικής εξίσωσης των αερίων ($C = P/RT$), η εξίσωση (17) μπορεί στη συνέχεια να γραφεί, ως εξής:

$$\frac{dd_p}{dt} = \frac{4D_v M}{\rho_p d_p RT} (P_\infty - P_s) \quad (18)$$

Από τον ορισμό του λόγου κορεσμού προκύπτει άμεσα ότι η πίεση του περιβάλλοντος ατμού P_∞ δίνεται από τη σχέση $P_\infty = SP_{sat}$. Λόγω της καμπυλότητας, η πίεση του ατμού στην επιφάνεια του σωματιδίου P_s είναι μεγαλύτερη από τη πίεση κορεσμού επί

ελεύθερης επίπεδης επιφάνειας. Από την εξίσωση του Kelvin (εξ.(8)) προκύπτει ότι $P_s = S_r P_{sat}$. Αντικαθιστώντας τις σχέσεις αυτές στην εξίσωση (18) προκύπτει τελικά:

$$\frac{dd_p}{dt} = \frac{4D_v P_{sat}}{\rho_p d_p R_v T} (S - S_r) \quad (19)$$

όπου $R_v = R/M$ είναι η σταθερά του ατμού. Η εξίσωση αυτή δίνει το ρυθμό διόγκωσης ή συρρίκνωσης ενός σωματιδίου στη συνεχή περιοχή, λόγω διάχυσης ατμού, λαμβάνοντας υπόψη την επίδραση του φαινομένου Kelvin.

Η εξίσωση (19) αναφέρεται σε ισόθερμες συνθήκες. Κατά τη διάρκεια όμως της συμπύκνωσης ή εξάτμισης, στην επιφάνεια ενός σωματιδίου εκλύεται ή απορροφάται θερμότητα (λανθάνουσα θερμότητα), με αποτέλεσμα τη μεταβολή της θερμοκρασίας στην περιοχή γύρω από την επιφάνεια του σωματιδίου. Η κατανομή της θερμοκρασίας γύρω από το σωματίδιο μπορεί να υπολογιστεί από την επίλυση της μόνιμης εξίσωσης μεταφοράς θερμότητας. Αγνοώντας τη ροή Stefan (κίνηση του ρευστού λόγω βαθμίδας συγκέντρωσης), η εξίσωση αυτή μπορεί να αναχθεί σε μία απλή εξίσωση αγωγής (Seinfeld and Pandis 1998):

$$\frac{d^2 T}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dT}{dr} = 0 \quad (20)$$

με τις παρακάτω οριακές συνθήκες:

$$T\left(\frac{d_p}{2}, t\right) = T_s \quad (21)$$

$$T(\infty) = T_\infty \quad (22)$$

όπου T_s είναι η θερμοκρασία στην επιφάνεια του σωματιδίου και T_∞ η θερμοκρασία του περιβάλλοντος αερίου. Η T_s μπορεί να υπολογιστεί από το ισοζύγιο θερμότητας στην επιφάνεια του σωματιδίου, που περιγράφεται από την ακόλουθη σχέση:

$$-D_V \frac{dC}{dr} \Big|_{r=\frac{d_p}{2}} L A_p = k \left(\frac{dT}{dr} \right)_{r=\frac{d_p}{2}} 8\pi r^2 A_p + k_p \left(\frac{dT_p}{dr} \right)_{r=\frac{d_p}{2}} A_p \quad (23)$$

όπου k και k_p είναι η θερμική αγωγιμότητα του φέροντος αερίου και του σωματιδίου, T και T_p είναι η θερμοκρασία του φέροντος αερίου και του σωματιδίου αντίστοιχα και $A_p = \pi d_p^2$ η επιφάνεια του σωματιδίου. Ο ρυθμός ανάπτυξης του σωματιδίου μπορεί να προσδιοριστεί από την αριθμητική επίλυση του πεπλεγμένου προβλήματος μεταφοράς μάζας και θερμότητας. Τέτοιου είδους υπολογισμοί θα επιβάρυναν σημαντικά το υπολογιστικό κόστος σε πραγματικές εφαρμογές. Για το λόγο αυτό, η πεπλεγμένη μεταφορά μάζας και θερμότητας κατά τη διάρκεια της συμπύκνωσης αντιμετωπίζεται, συνήθως, προσεγγιστικά. Μία πολύ γνωστή προσεγγιστική, αναλυτική λύση, που χρησιμοποιείται ευρέως, είναι αυτή που προτάθηκε από τον Mason (1971). Σύμφωνα με αυτή ο ρυθμός ανάπτυξης ενός σωματιδίου, λαμβάνοντας υπόψη και τη μεταφορά θερμότητας, δίνεται από την ακόλουθη εξίσωση (εξίσωση του Mason):

$$\frac{dd_p}{dt} = \frac{4}{\rho_p d_p} \left(\frac{S - 1}{f_{mass} + f_{heat}} \right) \quad (24)$$

όπου f_{mass} και f_{heat} είναι ποσότητες που αντιστοιχούν στις συνεισφορές λόγω μεταφοράς μάζας (διάχυση ατμού) και μεταφοράς θερμότητας, αντίστοιχα:

$$f_{mass} = \frac{R_v T}{D_v p_{sat}(T)}, f_{heat} = \left(\frac{L}{R_v T} - 1 \right) \frac{L}{T k} \quad (25)$$

Αν στην εξίσωση του Mason ληφθεί υπόψη η επίδραση του φαινομένου Kelvin, κατά πλήρη αντιστοιχία με την εξ.(19), τότε προκύπτει η σχέση που δίνει το ρυθμό μεταβολής της διαμέτρου ενός σωματιδίου, λόγω συμπύκνωσης ή εξάτμισης, στη συνεχή περιοχή, λαμβάνοντας υπόψη μεταφορά μάζας και θερμότητας:

$$\frac{dd_p}{dt} = \frac{4}{\rho_p d_p} \left(\frac{S - S_r}{f_{mass} + f_{heat}} \right) \quad (26)$$

ii) Μοριακή και μεταβατική περιοχή

Στην μοριακή περιοχή ($dp \ll \lambda$) το περιβάλλον αέριο δεν μπορεί να θεωρηθεί πλέον ως συνεχές μέσο και επομένως η θεωρία της διάχυσης που περιγράφηκε παραπάνω δεν μπορεί να εφαρμοστεί. Σε αυτή την περίπτωση, η γραμμομοριακή ροή προς ένα σωματίδιο λαμβάνει χώρα λόγω της τυχαίας τρισδιάστατης κίνησης των μορίων του ατμού, και μπορεί να υπολογιστεί από την κινητική θεωρία των αερίων (Seinfeld and Pandis 1998):

$$J_m = \frac{\pi}{4} d_p^2 \bar{c}_A a (C_\infty - C_s) \quad (27)$$

Στην παραπάνω σχέση $\bar{c}_A = \sqrt{8k_B T / \pi m_{mol}}$ είναι η μέση ταχύτητα των μορίων (θερμική ταχύτητα) και m_{mol} η μάζα ενός μορίου του ατμού. Με a συμβολίζεται ο συντελεστής εξομάλυνσης ή πιθανότητα προσκόλλησης (accommodation coefficient ή sticking probability), που προσδιορίζεται πειραματικά. Συνήθως λαμβάνεται ίσος με τη μονάδα, ή ισοδύναμα θεωρείται ότι όλα τα μόρια που προσκρούουν στην επιφάνεια του σωματιδίου απορροφώνται από αυτό.

Στη μεταβατική περιοχή, όπου το σωματίδιο έχει διάμετρο της τάξης της ελεύθερης διαδρομής του ατμού, παύουν να ισχύουν, τόσο η κινητική θεωρία των αερίων, όσο και η θεωρία της διάχυσης. Στην περιοχή αυτή, η ροή των μορίων προς το σωματίδιο περιγράφεται από την εξίσωση του Boltzmann. Λόγω της απουσίας γενικής λύσης της εξίσωσης Boltzmann, για όλο το εύρος των αριθμού Knudsen και για αυθαίρετες μάζες ατμού και φέροντος αερίου, στη μεταβατική περιοχή χρησιμοποιούνται γενικά προσεγγιστικές λύσεις. Οι λύσεις αυτές βασίζονται σε τεχνικές προσαρμογής της ροής (flux-matching techniques) και παρουσιάστηκαν αρχικά από τον Fuchs (1964). Διάφορες σχέσεις έχουν προταθεί για την παρεμβολή της ροής των μορίων προς ένα σωματίδιο, μεταξύ της μοριακής και της συνεχούς περιοχής. Οι δύο πιο γνωστές από αυτές έχουν προταθεί από τους Fuchs και Sutugin (1971) και Loyalka (1983). Άλλες προσεγγίσεις έχουν παρουσιαστεί επίσης, από τους Sitarski και Nowakowski (1979) και Dahneke (1983). Διεξοδική παρουσίαση καθώς και σύγκριση μεταξύ των παραπάνω προσεγγίσεων γίνεται, για παράδειγμα, από τους Seinfeld και Pandis (1998).

Ουσιαστικά, οι προσεγγίσεις αυτές αποτελούν διορθωτικούς όρους, που ενσωματώνονται στις σχέσεις που περιγράφουν τη μεταφορά μάζας προς ένα σωματίδιο στη συνεχή ή στη μοριακή περιοχή. Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιείται ο διορθωτικός όρος κατά Fuchs and Sutugin (1971), τροποποιημένος ώστε να παρεμβάλλει κατάλληλα, τόσο τη μεταφορά μάζας, όσο και τη μεταφορά θερμότητας στο σωματίδιο κατά τη συμπύκνωση. Εισάγοντας τη διόρθωση μεγέθους κατά Fuchs και Sutugin στη σχέση για το ρυθμό συμπύκνωσης στη συνεχή περιοχή (εξ.(26)) προκύπτει:

$$\frac{dd_p}{dt} = \frac{4}{\rho_p d_p} \left(\frac{S - S_r}{f_{mass}/F_{FS}^{mass} + f_{heat}/F_{FS}^{heat}} \right) \quad (28)$$

Στην εξίσωση (28) F_{FS}^{mass} και F_{FS}^{heat} είναι οι συντελεστές διόρθωσης κατά Fuchs - Sutugin για τη μεταφορά μάζας και θερμότητας, αντίστοιχα (Fladerer et al. 2002; Laaksonen et al. 2005):

$$F_{FS}^{mass} = \frac{1 + Kn_v}{1 + 1.71Kn_v + 1.333Kn_v^2} \quad (29)$$

$$F_{FS}^{heat} = \frac{1 + Kn_g}{1 + 1.71Kn_g + 1.333Kn_g^2} \quad (30)$$

Η εξίσωση (28) χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό του ρυθμού συμπύκνωσης σε ολόκληρο το εύρος του μεγέθους των σωματιδίων. Για μεγάλα σωματίδια, η εξ. (28) συγκλίνει ακριβώς στην εξίσωση της συμπύκνωσης στη συνεχή περιοχή (εξ. (26)). Στη μοριακή περιοχή, ωστόσο, ο ρυθμός συμπύκνωσης που υπολογίζεται από την εξ. (28) είναι μεγαλύτερος κατά 20% από αυτόν που προβλέπεται από την εξ. (27) και επομένως η εξ. (28) αναμένεται να υπερεκτιμά τη συμπύκνωση μικρών σωματιδίων.

Θα πρέπει να σημειωθεί ότι έως τώρα η θεωρητική ανάλυση σχετικά με την ανάπτυξη ή συρρίκνωση ενός σωματιδίου περιορίστηκε στην περίπτωση της ροής ενός ατμού προς ή από την επιφάνεια του σωματιδίου. Χημικές αντιδράσεις στην επιφάνεια ή μέσα στον όγκο ενός σωματιδίου μπορούν επίσης να οδηγήσουν στη μεταβολή του μεγέθους του. Η αντίστοιχη θεωρία δεν παρουσιάζεται στην παρούσα εργασία διότι δεν εξετάζονται τέτοιοι μηχανισμοί. Περιγραφή αυτών των μηχανισμών γίνεται, για παράδειγμα, στο βιβλίο του Friedlander (2000). Η ροή των μορίων του ατμού στη θεωρία που παρουσιάστηκε οφείλεται αποκλειστικά στη διαφορά συγκέντρωσης του ατμού μεταξύ της επιφάνειας του σωματιδίου και του περιβάλλοντος αερίου. Άλλοι μηχανισμοί, όπως η ροή Stefan, η θερμική διάχυση (Soret effect) και το φαινόμενο Dufour, που μπορούν να προκαλέσουν ροή μορίων προς ή από ένα σωματίδιο (Kulmala and Vesala 1991), θεωρούνται δευτερεύοντες και δε λαμβάνονται υπόψη στην παρούσα εργασία.

3.3.1.2 Συσσωμάτωση

Τα σωματίδια ενός αερολύματος συγκρούονται συνεχώς μεταξύ τους και με τα σωματίδια του φέροντος αερίου/ατμού λόγω της σχετικής τους κίνησης. Η σχετική κίνηση μεταξύ των σωματιδίων μπορεί να προέρχεται από υδροδυναμικές, ηλεκτρικές, βαρυτικές, δυνάμεις λόγω μοριακής διάχυσης Brown ή άλλες δυνάμεις. Η διαδικασία κατά την οποία σωματίδια συγκρούονται μεταξύ τους, σχηματίζοντας μεγαλύτερα σωματίδια (συσσωμάτωμα), είναι γνωστή ως συσσωμάτωση (coagulation). Κατά τη συσσωμάτωση τα αρχικά σωματίδια συγχωνεύονται στο τελικό σωματίδιο, χάνοντας την αρχική τους ταυτότητα. Σε περιπτώσεις στερεών σωματιδίων, τα αρχικά σωματίδια ενδέχεται να διατηρούν τη μορφή τους, σχηματίζοντας έτσι ένα σύμπλεγμα (cluster) σωματιδίων. Η διαδικασία αυτή ονομάζεται συσσώρευση (agglomeration).

Στην παρούσα εργασία αγνοήθηκε η συσσωμάτωση ως μηχανισμός δημιουργίας νέων σωματιδίων ή διόγκωσης ήδη υπαρχόντων. Η μόνη επίδραση της που έμμεσα αφορά την παρούσα εργασία είναι η προαναφερθείσα δημιουργία μοριακών συμπλεγμάτων από τα οποία ξεκινά η διαδικασία της πυρηνοποίησης, αλλά η συγκεκριμένη διεργασία δεν υπεισέρχεται στους υπολογισμούς. Η επίδραση της συσσωμάτωσης στο πρόβλημα που

εξετάζεται στην παρούσα εργασία στο συνολικό αριθμό των σωματιδίων είναι αμελητέα, της τάξης του 0,5% στον συνολικό αριθμό σωματιδίων (Mitrakos 2008).

3.3.2 Εξωτερικές διαδικασίες

Όταν τα σωματίδια κινούνται μέσα στο φέρον ρευστό δέχονται την επίδραση διαφόρων δυνάμεων και διεργασιών. Ως μέρος του φέροντος ρευστού τείνουν να κινηθούν σύμφωνα με την κίνηση που επιβάλλεται από τις γραμμές ροής λόγω των λεγόμενων δυνάμεων αδιατάρακτης ροής. Λόγω όμως της επίδρασης εξωτερικών δυνάμεων, με κυριότερες τη βαρύτητα και την ιξώδη τριβή (δύναμη Stokes) με τα σωματίδια του ρευστού (Maxey 1987), τα σωματίδια τείνουν να διαφύγουν από τις γραμμές ροής και να κινηθούν ανάμεσα σε αυτές. Επίσης, όταν τα σωματίδια είναι μικρά, γίνονται σημαντικές και οι συγκρούσεις με τα μόρια του περιβάλλοντος ρευστού, με αποτέλεσμα η κίνησή τους να γίνεται ακανόνιστη, ένα φαινόμενο που ονομάζεται κίνηση ή μοριακή διάχυση Brown. Όλα τα παραπάνω μπορεί να έχουν σαν αποτέλεσμα την εναπόθεση μέρους των σωματιδίων σε κάποια επιφάνεια. Ο προσδιορισμός του πλήθους των σωματιδίων μιας ροής αερολύματος που τελικά εναποτίθενται είναι κεντρικό ζητούμενο στην επιστήμη του αερολύματος.

3.3.2.1 Εξωτερικές δυνάμεις

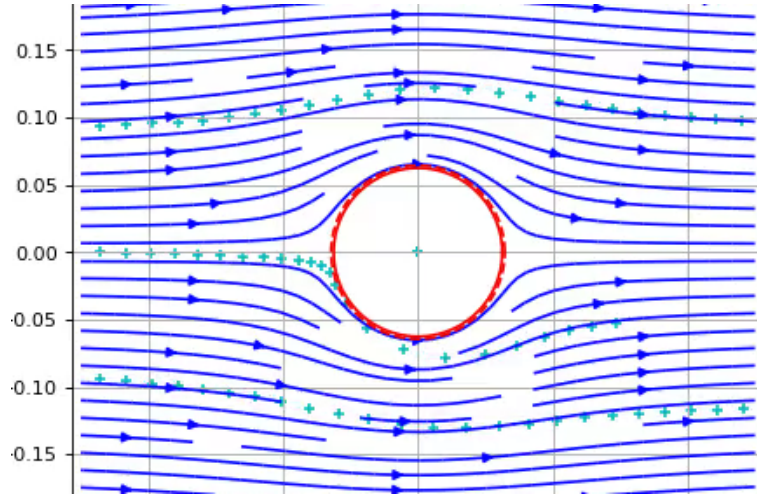
Ένας τρόπος (Maxey and Riley 1983) να περιγραφεί η εξίσωση της κίνησης, και άρα και η ισορροπία δυνάμεων που ασκούνται ένα σφαιρικό σωματίδιο εντός ενός ανομοιογενούς ή μεταβλητού πεδίου ροής, είναι ο εξής:

$$m_p \frac{dV}{dt} = (m_p - m_F)g - \frac{1}{2}m_F \frac{dV}{dt} + 6\pi\alpha\mu[u(Y, t) - V(t)] + m_F u \nabla u + \frac{1}{2}m_F V \nabla u \quad (31)$$

όπου m_p και m_F η μάζα του σωματιδίου και η μάζα του ρευστού γύρω από το σωματίδιο αντίστοιχα. Ο 1ος όρος στα δεξιά της εξίσωσης αντιστοιχεί στη βαρύτητα (άνωση), ο δεύτερος και ο τελευταίος στη δύναμη πρόσθετης μάζας, ο τρίτος στη δύναμη Stokes και ο τέταρτος στην αδρανειακή επιτάχυνση που θα ασκούνταν σε ένα μόριο ρευστού αν βρίσκονταν στη θέση του σωματιδίου (δύναμη αδιατάρακτης ροής). Οι υπόλοιπες μεταβλητές της σχέσης 31 δε θα αναλυθούν, καθώς όπως θα δειχθεί, στο πρόβλημά μας η μόνη δύναμη που έχει σημαντική επίδραση είναι αυτή της αδιατάρακτης ροής, που συνεπάγεται ότι τα σωματίδια ακολουθούν τις γραμμές ροής του ρευστού και έχουν ίδια ταχύτητα με αυτό, και η διάχυση.

Ήδη ο Maxey (Maxey 1987) έχει δείξει συγκρίνοντας περιπτώσεις διαφορετικών R , όπου $R = \rho_F/\rho_p = 4$, ότι σωματίδια που έχουν μικρή μάζα ακολουθούν τις γραμμές ροής του ρευστού, καθώς η δύναμη της βαρύτητας είναι μικρότερη και άρα δεν είναι ικανή να απομακρύνει το σωματίδιο από τις γραμμές ροής. Χρησιμοποιώντας την σχέση 31 υπολογίζουμε τις τροχιές της κίνησης σφαιρικών σωματιδίων σε ρευστό που ρέει γύρω από κύλινδρο, για $R = 4$. Όπως φαίνεται στο Σχήμα 4, τα σωματίδια ακολουθούν πιστά τις γραμμές ροής. Στη περίπτωση μας τα σωματίδια είναι ακόμα μικρότερα σε

διάμετρο και πυκνότητα, αφού προέρχονται από ατμώδες μίγμα και άρα το R τείνει στο 1, οπότε η επίδραση της βαρύτητας είναι ακόμα μικρότερη. Συνεπώς δικαιολογείται, με βάση τα παραπάνω, η παραδοχή που κάναμε ότι τα σωματίδια έχουν παντού την ίδια ταχύτητα με το φέρον ρευστό.



Σχήμα 4: Αερολύματα διαμέτρου της τάξης λίγων μm εγχύονται σε πεδίο ρευστού γύρω από κύλινδρο. Με σκούρο μπλε χρώμα διαγράφονται οι γραμμές ροής του πεδίου και ως γαλάζιοι σταυροί απεικονίζονται τα μεμονωμένα σωματίδια. Παρατηρούμε ότι και από τις τρεις διαφορετικές θέσεις έγχυσης τα σωματίδια ακολουθούν πιστά τις γραμμές ροής του πεδίου και ακόμα και αν παρεκκλίνουν για λίγο από αυτές, παραδείγματος χάρη λόγω της σύγκρουσης με τον κύλινδρο, γρήγορα η τροχιά τους ταυτίζεται ξανά με αυτές. Οι υπολογισμοί και το σχήμα έχουν πραγματοποιηθεί από τον γράφοντα σπουδαστή με κώδικα σε γλώσσα Python για τις ανάγκες παλαιότερης εργασίας του στο πλαίσιο μαθήματος.

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/ m^2s) λόγω διάχυσης υπολογίζεται από τον νόμο του Fick. Κατά τη διεύθυνση x η ροή J_x γράφεται:

$$J_x = -D_p \frac{\partial N}{\partial x} \quad (32)$$

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):

$$D_p = \frac{k_B T}{3\pi\mu_g d_p} C_c \quad (33)$$

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 (33) ο συντελεστής διάχυσης είναι αντιστρόφως ανάλογος με τη διάμετρο του σωματιδίου.

3.4 Μοντελοποίηση ροής αερολύματος

Οι διάφορες φυσικές διαδικασίες που περιγράφηκαν προηγουμένως έχουν σαν 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, αμελώντας την 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 στο χώρο και στο 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 Γενική Εξίσωση της Δυναμικής του Αερολύματος

Εκτός από τις εσωτερικές διεργασίες του αερολύματος, η κίνηση του φέροντος αερίου, η διάχυση και οι εξωτερικές δυνάμεις μεταβάλλουν επίσης τις συγκεντρώσεις, και άρα τη συνάρτηση κατανομής μεγέθους ενός αερολύματος στον χώρο και στον χρόνο. Αγνοώντας τις εσωτερικές διεργασίες, η εξίσωση της δυναμικής του αερολύματος μπορεί να περιγραφεί ως (Friedlander 2000):

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla(nv) = \nabla D_p \nabla v \quad (34)$$

όπου ο όρος $\nabla(nv)$ αφορά στη μεταφορά του σωματιδίου, με v την ταχύτητα του σωματιδίου, και ο όρος $\nabla D_p \nabla v$ στην κίνηση Brown του σωματιδίου, η οποία μακροσκοπικά γίνεται αντιληπτή ως διάχυση. Η ταχύτητα του σωματιδίου v μπορεί να αναλυθεί ως άθροισμα της ταχύτητας του περιβάλλοντος ρευστού σε εκείνο το σημείο του χώρου u και της σχετικής ταχύτητας του σωματιδίου ως προς το περιβάλλον ρευστό, τη λεγόμενη ταχύτητα ολίσθησης (slip velocity), c . Όπως έχει ήδη αναλυθεί στην παράγραφο 3.3.2.1 στην παρούσα εργασία θεωρήθηκε ότι στο σύνολο του χώρου που εξετάζεται τα σωματίδια έχουν την ίδια ταχύτητα με το ρευστό (φέρουσα φάση) και έτσι $c = 0 \rightarrow v = u$.

Με βάση τα παραπάνω η σχέση (34) μπορεί να γραφεί ως:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla(nu) = \nabla D_p \nabla u \quad (35)$$

Η παραπάνω αναπροσαρμογή της σχέσης (34) παρέχει σημαντική διευκόλυνση, καθώς τα CFD πακέτα της αγοράς μπορούν να υπολογίσουν με μεγάλη ακρίβεια τα χαρακτηριστικά μιας ροής ρευστού, όπως η ταχύτητά του στο χώρο, ενώ -όπως μπορεί να γίνει αντιληπτό και από τη σχέση (31), ο υπολογισμός της ταχύτητας των επιμέρους σωματιδίων του αερολύματος στο χώρο, όταν αυτά έχουν σχετική ταχύτητα σε σχέση με το φέρον αέριο, είναι πολύπλοκη και υπολογιστικά κοστοβόρα διαδικασία.

Οι εσωτερικές διεργασίες του αερολύματος μπορούν να μοντελοποιηθούν ως όροι πηγής S :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla(nu) = \nabla D_p \nabla u + S \quad (36)$$

3.4.2 Συμπύκνωση

Η επίδραση της συμπύκνωσης (και εξάτμισης) στην χρονική εξέλιξη της συνάρτησης κατανομής μπορεί να προκύψει από τον ισολογισμό των ροών των σωματιδίων σε ένα απείρως μικρό τμήμα του άξονα του μεγέθους των σωματιδίων (αριθμός σωματιδίων $m^{-1}s^{-1}$). Η διαδικασία εξαγωγής της εξίσωσης πραγματοποιείται σε πλήρη αντιστοιχία με το πρόβλημα της μονοδιάστατης συναγωγής (convection) ενός βαθμωτού μεγέθους στη ρευστομηχανική, όπου η συντεταγμένη του χώρου και η ταχύτητα του ρευστού αντικαθίστανται από τη διάμετρο και το ρυθμό διόγκωσης των σωματιδίων, αντίστοιχα. Η εξίσωση της συμπύκνωσης προκύπτει έτσι (Seinfeld and Pandis 1998; Friedlander 2000):

$$\frac{\partial n(d_p, t)}{\partial t} \Big|_{cond} = -\frac{\partial}{\partial t} [I_{d_p}(d_p, t)n(d_p, t)] \quad (37)$$

όπου $I_{d_p} = dd_p/dt$ είναι ο ρυθμός διόγκωσης των σωματιδίων, λόγω συμπύκνωσης (π.χ. εξ. (28)). Ανάλογα με την ανεξάρτητη μεταβλητή, η εξίσωση της συμπύκνωσης μπορεί να πάρει και άλλες μορφές. Αν για παράδειγμα, η ανεξάρτητη μεταβλητή είναι η μάζα των σωματιδίων, τότε η εξίσωση της συμπύκνωσης γράφεται:

$$\frac{\partial n(m_p, t)}{\partial t} \Big|_{cond} = -\frac{\partial}{\partial t} [I_{m_p}(m_p, t)n(m_p, t)] \quad (38)$$

όπου $n(m_p, t)$ είναι η συνάρτηση κατανομής μεγέθους των σωματιδίων, εκφρασμένη ως προς τη μάζα των σωματιδίων, δηλαδή αριθμός σωματιδίων με m_p μάζα από έως $m_p + dm_p$ και $I_{m_p}(m_p, t)$ ο ρυθμός μεταβολής της μάζας του σωματιδίου, λόγω συμπύκνωσης.

3.4.3 Ομογενής Πυρηνοποίηση

Κατά την ομογενή πυρηνοποίηση σχηματίζονται σωματίδια κρίσιμης διαμέτρου (d_{crit}), με ρυθμό ίσο με τον ρυθμό πυρηνοποίησης J (παράγραφος 3.3.1.1). Με την βοήθεια της συνάρτησης Dirac δ , η χρονική εξέλιξη ενός αερολύματος λόγω πυρηνοποίησης δίνεται από την ακόλουθη σχέση (Seinfeld and Pandis 1998; Friedlander 2000; Drossinos and Housiadas 2006):

$$\frac{\partial n(d_p, t)}{\partial t} \Big|_{nucl} = J\delta(d_p - d_{crit}) \quad (39)$$

με

$$\begin{aligned}\delta(d_p - d_{crit}) &= 1, \text{ αν } d_p = d_{crit} \\ \delta(d_p - d_{crit}) &= 0, \text{ αν } d_p \neq d_{crit}\end{aligned}$$

3.4.4 Συνολική μεταβολή λόγω εσωτερικών διαδικασιών

Η συνολική χρονική μεταβολή της συνάρτησης κατανομής του μεγέθους των σωματιδίων, λαμβάνοντας υπόψη όλες τις παραπάνω εσωτερικές διαδικασίες του αερολύματος ταυτόχρονα, προκύπτει, αθροίζοντας τις επιμέρους συνεισφορές κάθε διαδικασίας:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial n}{\partial t}|_{coag} + \frac{\partial n}{\partial t}|_{nucl} + \frac{\partial n}{\partial t}|_{cond} \quad (40)$$

Όπως έχει ήδη αναλυθεί, η συσσωμάτωση δεν λαμβάνεται υπόψη στην παρούσα εργασία. Συχνά οι όροι για την πυρηνοποίηση και τη συμπύκνωση αντικαθίστανται από έναν μόνο όρο, ο οποίος αναφέρεται στη μετατροπή του ατμού σε σωματίδια (gas-to-particle conversion):

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial n}{\partial t}|_{g-p} = S \quad (41)$$

3.4.5 Τελική μορφή της ΓΕΔΑ

Εισάγοντας στην εξίσωση (36) τους όρους των εσωτερικών διαδικασιών από την εξίσωση (40), προκύπτει τελικά η πλήρης ΓΕΔΑ:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla(nu) = \nabla D_p \nabla u + \frac{\partial n}{\partial t}|_{coag} + \frac{\partial n}{\partial t}|_{nucl} + \frac{\partial n}{\partial t}|_{cond} \quad (42)$$

Όπως έχει ήδη αναφερθεί, η εξίσωση αυτή είναι θεμελιώδης στην επιστήμη του αερολύματος. Η ΓΕΔΑ έχει ουσιαστικά τη μορφή μιας γενικής εξίσωσης μεταφοράς για τη συνάρτηση κατανομής μεγέθους, με όρους πηγής που περιγράφουν την επίδραση των εσωτερικών διαδικασιών της δυναμικής του αερολύματος.

3.4.6 Η εξίσωση μεταφοράς του ατμού

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. Η εξίσωση αυτή γράφεται ως ακολούθως:

$$\frac{\partial \rho C_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u C_m) - \nabla \cdot (\rho D_v \nabla C_m) = - \frac{\partial \rho C_m}{\partial t}|_{nucl} - \frac{\partial \rho C_m}{\partial t}|_{cond} \quad (43)$$

όπου C_m είναι το κλάσμα μάζας του ατμού στην αέρια φάση και ο D_v συντελεστής διάχυσης του ατμού στο φέρον αέριο. Η εξίσωση (43) έχει την μορφή μιας γενικής εξίσωσης μεταφοράς με όρους πηγής που περιγράφουν την επίδραση των εσωτερικών

διαδικασιών μετατροπής της ατμώδους φάσης σε σωματιδιακή στο κλάσμα μάζας του ατμού. Συγκεκριμένα, ο δεύτερος και ο τρίτος όρος στο πρώτο μέλος περιγράφουν τη μεταφορά (convection) και τη διάχυση (diffusion). Οι πρώτος και δεύτερος όρος πηγής στο δεύτερο μέλος αντιπροσωπεύουν το κλάσμα μάζας του ατμού που καταναλώνεται λόγω πυρηνοποίησης και συμπύκνωσης, αντίστοιχα.

3.5 Αριθμητικές μέθοδοι επίλυσης

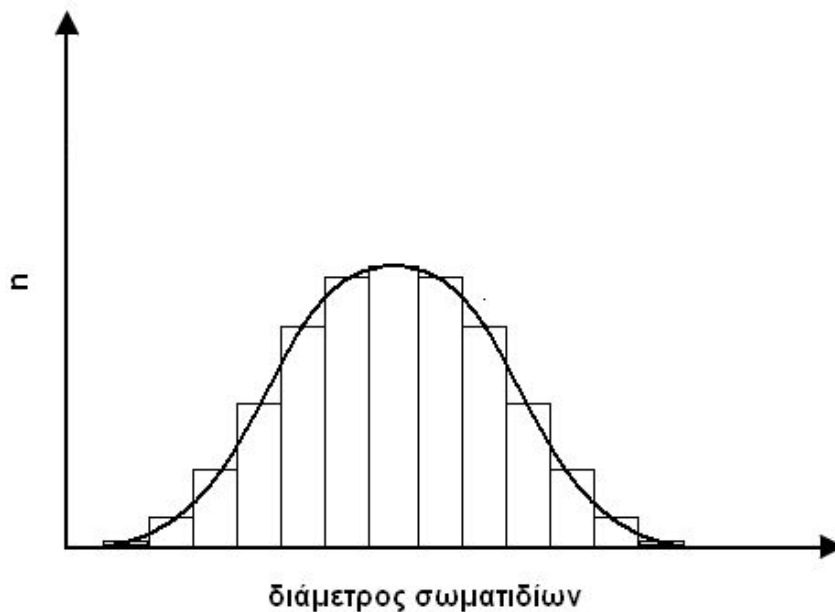
Η επίλυση της ΓΕΔΑ είναι συχνά ο κεντρικός στόχος στις διάφορες εφαρμογές της τεχνολογίας και της επιστήμης του αερολύματος. Η εξίσωση αυτή είναι μια ολοκληρωτική-διαφορική εξίσωση, για την οποία αναλυτικές λύσεις υπάρχουν μόνο σε περιορισμένες, ιδεατές περιπτώσεις (Ramabhadran et al. 1976; Katoshevski and Seinfeld 1997; Seinfeld and Pandis 1998). 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 μπορεί να είναι πολύπλοκη. Ακόμα και στην περίπτωση στατικού αερολύματος, όπου δεν υπάρχει ροή (εξ.(52)), παρουσιάζονται σημαντικές δυσκολίες. Οι δυσκολίες αυτές οφείλονται στην ύπαρξη του όρου της συμπύκνωσης, που 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, και συγκεκριμένα το μεγάλο εύρος των χρονικών σταθερών των διαφόρων διαδικασιών (stiffness). Συγκεκριμένα, οι χρονικές σταθερές των εσωτερικών διαδικασιών, για παράδειγμα της πυρηνοποίησης ή της συμπύκνωσης, 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 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 Τμηματικές μέθοδοι

Οι τμηματικές μέθοδοι (Gelbard et al. 1980) βασίζονται στη διακριτοποίηση του μεγέθους των σωματιδίων σε τμήματα (sections or bins). Η συνεχής συνάρτηση κατανομής μεγέθους προσεγγίζεται από ένα ιστόγραμμα που αποτελείται από πεπερασμένο αριθμό τμημάτων (σχ. 5), 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 διαφόρων τμημάτων της κατανομής. Η πυρηνοποίηση και η συσσωμάτωση μπορούν να επιλυθούν χωρίς ιδιαίτερες δυσκολίες, χρησιμοποιώντας σταθερό πλέγμα. Η πυρηνοποίηση μπορεί εύκολα να επιλυθεί, προσθέτοντας σωματίδια στο τμήμα που περιέχει την κρίσιμη διάμετρο, με ρυθμό ίσο με το ρυθμό πυρηνοποίησης.

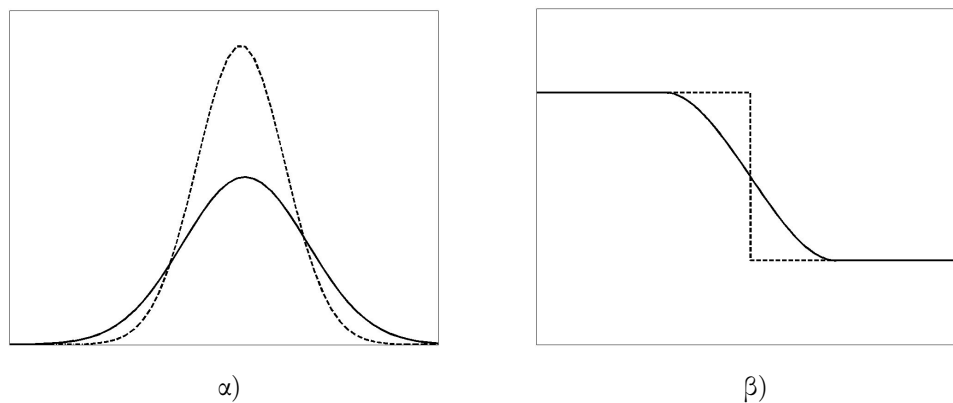


Σχήμα 5: Τμηματική αναπαράσταση συνάρτησης κατανομής μεγέθους σωματιδίων (από Mitrakos 2008).

Ο όρος της συμπίκνωσης κάνει τη ΓΕΔΑ υπερβολική ως προς το μέγεθος των σωματιδίων. Το σημαντικότερο πρόβλημα, που παρουσιάζεται κατά την επίλυση τέτοιων εξισώσεων, είναι η αριθμητική διάχυση (numerical diffusion). Η έλλειψη πληροφορίας για τη μορφή της συνάρτησης στις περιοχές ανάμεσα στα σημεία διακριτοποίησης προκαλεί μια τεχνητή διεύρυνση της συνάρτησης κατανομής, με ταυτόχρονη μείωση της τιμής κορυφής (σχ. 6α). Το πρόβλημα αυτό είναι αντίστοιχο με το ευρύτερα γνωστό πρόβλημα της αριθμητικής διάχυσης που εμφανίζεται κατά την αριθμητική επίλυση της συναγωγής ενός κύματος (σχ. 6β) στην υπολογιστική ρευστομηχανική, το οποίο έχει περιγραφεί εκτενώς στη βιβλιογραφία (π.χ. Hirsch 1988; Anderson 1995; Oran and Boris 2001; Ferziger and Perić 2002).

Το πρόβλημα της αριθμητικής διάχυσης μπορεί να αντιμετωπιστεί, χρησιμοποιώντας κινούμενο πλέγμα (moving grid) για τη διακριτοποίηση του μεγέθους των σωματιδίων (Gelbard 1990; Kim and Seinfeld 1990). Σύμφωνα με αυτή την τεχνική, τα τμήματα δεν παραμένουν σταθερά κατά τη διάρκεια του υπολογισμού, αλλά μπορούν να κινούνται κατά μήκος της συντεταγμένης (άξονα) κατεύθυνσης του μεγέθους των σωματιδίων, ακολουθώντας το νόμο της συμπίκνωσης. Η ΓΕΔΑ επιλύεται σε αυτή την περίπτωση, για κάθε τμήμα, πάνω στη χαρακτηριστική της συμπίκνωσης, αντιμετωπίζοντας έτσι αποτελεσματικά την αριθμητική διάχυση (Kumar and Ramkrishna III 1997; Chock and

Winkler 2000; Hu et al. 2005; Qamar and Warnecke 2007). Παρόλα αυτά, η χρήση κινούμενου πλέγματος παρουσιάζει πολύ σημαντικά προβλήματα κατά την επίλυση των άλλων διαδικασιών. Επειδή το πλέγμα του μεγέθους κινείται, ενδέχεται σε ενδιάμεσα στάδια του υπολογισμού να μην υπάρχει τμήμα που να περιέχει την κρίσιμη διάμετρο των σωματιδίων που δημιουργούνται από ομογενή πυρηνοποίηση. Το πρόβλημα αυτό μπορεί να αντιμετωπιστεί, προσθέτοντας τμήματα στο αριστερό άκρο του πλέγματος, στα οποία τοποθετούνται τα νέα σωματίδια που δημιουργούνται λόγω πυρηνοποίησης (Kumar and Ramkrishna III 1997; Pyykonen and Jokiniemi 2000). Με αυτό τον τρόπο, αυξάνεται ο συνολικός αριθμός των τμημάτων κατά τη διάρκεια των υπολογισμών, επιβαρύνοντας έτσι το υπολογιστικό κόστος, ιδιαίτερα σε περιπτώσεις όπου λαμβάνει χώρα έντονη πυρηνοποίηση. Το σημαντικότερο μειονέκτημα της χρήσης κινούμενου πλέγματος είναι οι ασυνέχειες που δημιουργούνται στο υπολογιστικό πλέγμα λόγω της μεγάλης μεταβλητότητας του μεγέθους των τμημάτων, καθιστώντας την ακατάλληλη για άμεση ενσωμάτωση σε Eulerian πλαίσιο επίλυσης (Zhang et al. 1999; Sewerin and Rigopoulos 2017b).



Σχήμα 6: Σχηματική περιγραφή της επίδρασης της αριθμητικής διάχυσης κατά την αριθμητική επίλυση του προβλήματος α) της συμπύκνωσης σωματιδίων ενός αερολύματος και β) της συναγωγής ενός κύματος (οι διακεκομμένες γραμμές αντιστοιχούν στην ακριβή λύση, ενώ οι συνεχείς γραμμές στην αριθμητική λύση) (από Mitrakos 2008).

Αντίθετα, η χρήση σταθερού πλέγματος δίνει τη δυνατότητα εύκολης και άμεσης επίλυσης της μεταφοράς του αερολύματος. Το σημαντικό αυτό πλεονέκτημα αποτελεί το λόγο για τον οποίο αρκετές εργασίες στη βιβλιογραφία έχουν σαν θέμα την ανάπτυξη μεθόδων για την μείωση της αριθμητικής διάχυσης κατά την επίλυση της συμπύκνωσης με σταθερό πλέγμα μεγέθους. Έχουν προταθεί σχήματα διακριτοποίησης δεύτερης ή και υψηλότερης τάξης ακρίβειας (για παράδειγμα σχήματα «τριών σημείων-three point discretization schemes») (David et al. 1991; Litster et al. 1995; Hounslow et al. 1998; Park and Rogak 2004), τα οποία είτε δεν μειώνουν την αριθμητική διάχυση ικανοποιητικά, είτε εμφανίζουν αρνητικές τιμές και ταλαντώσεις στη συνάρτηση κατανομής. Αρκετά ημι-Lagrangian σχήματα που χρησιμοποιούνται στην επίλυση της εξίσωσης συναγωγής, έχουν επίσης δοκιμαστεί στην επίλυση της εξίσωσης της συμπύκνωσης (Dhaniyala and Wexler 1996; Chock and Winkler 2000; Nguyen and Dabdub 2002; Yamamoto 2004). Ειδικά στην εργασία του Yamamoto (2004) παρουσιάζεται η εξίσωση της συμπύκνωσης, εκφρασμένη ως προς την αθροιστική συνάρτηση κατανομής. Η εξίσωση αυτή επιλύεται αριθμητικά, χρησιμοποιώντας ημι-Lagrangian σχήματα (Yabe and Aoki 1991; Yabe et al. 2001).

Ένα χρήσιμο συμπέρασμα που προέκυψε από αυτή την εργασία είναι ότι η χρήση της αθροιστικής συνάρτησης κατανομής επιτρέπει τη διατήρηση του αριθμού των σωματιδίων, ακόμα και σε περιπτώσεις απότομων κατανομών. Οι Lurmann et al. (1997) πρότειναν μια μέθοδο που συνδυάζει τα πλεονεκτήματα του σταθερού και του κινούμενου πλέγματος. Σύμφωνα με αυτή τη μέθοδο, η συμπύκνωση επιλύεται σε κινούμενο πλέγμα, όπου η αριθμητική διάχυση εξαλείφεται, και στη συνέχεια η συνάρτηση κατανομής επανατοποθετείται στο σταθερό χρησιμοποιώντας παρεμβολή spline. Κατά το βήμα της παρεμβολής, και ιδιαίτερα σε περιπτώσεις απότομων κατανομών, προκύπτουν αρνητικές τιμές της συνάρτησης κατανομής, οι οποίες μπορεί να οδηγήσουν σε μεγάλα σφάλματα στον υπολογισμό του αριθμού των σωματιδίων και σε σημαντικά προβλήματα αστάθειας.

Μια αξιολογημένη μέθοδος που έχει αναπτυχθεί για την αριθμητική επίλυση της συμπύκνωσης είναι η μέθοδος του κινούμενου κέντρου (moving center) (Jacobson 1997). Σύμφωνα με αυτή τη μέθοδο τα όρια των τμημάτων παραμένουν σταθερά κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης, αλλά το χαρακτηριστικό μέγεθος κάθε τμήματος μεταβάλλεται. Συγκεκριμένα, όταν κατά τη συμπύκνωση το χαρακτηριστικό μέγεθος (π.χ. διάμετρος ή όγκος σωματιδίων) ξεπεράσει τα όρια του τμήματος στο οποίο ανήκε αρχικά, όλα τα σωματίδια μεταφέρονται σε επόμενο τμήμα, το οποίο περιέχει το νέο μέγεθος των σωματιδίων. Στο τμήμα αυτό υπολογίζεται νέο χαρακτηριστικό μέγεθος (π.χ. όγκος, διάμετρος σωματιδίων), από το μέσο όρο του όγκου των σωματιδίων που προστέθηκαν και αυτών που προϋπήρχαν. Καθώς τα σωματίδια δεν μοιράζονται σε γειτονικά τμήματα, η αριθμητική διάχυση περιορίζεται σημαντικά. Από τη σύγκριση διάφορων μεθόδων, που χρησιμοποιούνται σε ατμοσφαιρικά μοντέλα αερολύματος, προέκυψε ότι η μέθοδος moving center είναι η προσφορότερη μέθοδος για την επίλυση της συμπύκνωσης (Zhang et al. 1999). Παρόλα αυτά, η μεταφορά όλων των σωματιδίων από ένα τμήμα σε ένα άλλο μπορεί να προκαλέσει ένα σημαντικό πρόβλημα, και συγκεκριμένα, είναι δυνατό να εμφανιστούν κενά τμήματα (τμήματα μηδενικής τιμής της συνάρτησης κατανομής). Αυτό προκαλεί σημαντικές ασυνέχειες και μπορεί να οδηγήσει ακόμα και σε μη ρεαλιστικές προβλέψεις (Korhonen et al. 2004). Το πρόβλημα αυτό γίνεται εντονότερο αν κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης εμφανίζονται απότομες κατανομές, όπως για παράδειγμα, οι περιπτώσεις όπου λαμβάνει χώρα έντονη πυρηνοποίηση.

4 Η πειραματική διάταξη και η γεωμετρία του προβλήματος

Στο συγκεκριμένο κεφάλαιο παρουσιάζεται συνοπτικά ο αντιδραστήρας αερολύματος στρωτής ροής (LFAG) που χρησιμοποιήθηκε σε πειράματα ομογενούς και ετερογενούς πυρηνοποίησης (Nguyen et al. 1987). Τα πλεονεκτήματα της συγκεκριμένης πειραματικής εφαρμογής είναι ο σαφής καθορισμός των χαρακτηριστικών της ροής του αερολύματος και η ακριβής μέτρηση των χαρακτηριστικών των σωματιδίων που προκύπτουν, δηλαδή της κατανομής του μεγέθους και του αριθμού τους.

4.1 Αντιδραστήρες αερολύματος στρωτής ροής (ΑΑΣΡ)

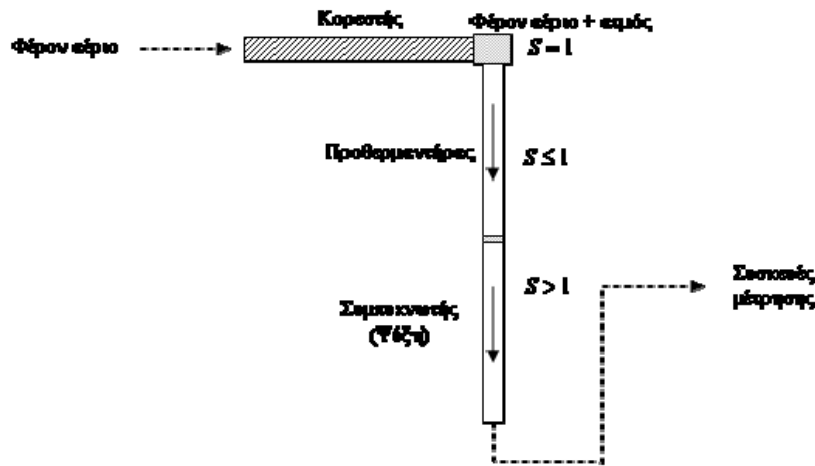
Οι αντιδραστήρες αερολύματος αποτελούν διατάξεις που κατά βάση εκμεταλλεύονται την ιδιότητα υπέρκορων ατμών να αποτελούν εστίες δημιουργίας εμβρυικών σωματιδίων και χρησιμοποιούνται τόσο στη βιομηχανία όσο και για ερευνητικές εφαρμογές. Στη βιομηχανία οι διατάξεις αυτές χρησιμεύουν στις δοκιμές της αποτελεσματικότητας φίλτρων, στη μέτρηση των εκπομπών από βιομηχανικά μηχανήματα και για την παραγωγή σύνθετων υλικών με προσοχή στις μικροσκοπικές τους ιδιότητες, όπως σκόνες (Wu and Flagan 1986; Puffeau 2016) και ναοφάρμακα (Eerikäinen et al. 2003). Στην έρευνα οι αντιδραστήρες αερολύματος χρησιμοποιούνται για τη μελέτη των εσωτερικών διεργασιών του αερολύματος, κυρίως της ομογενούς πυρηνοποίησης αλλά και της συμπύκνωσης, καθώς όπως έχει αναφερθεί η επιστήμη του αερολύματος απέχει ακόμα από τη σύνδεση των μακροσκοπικών με τις μικροσκοπικές του ιδιότητες και διεργασίες. Οι αντιδραστήρες αερολύματος λειτουργούν με πληθώρα ειδών συμπυκνούμενων αερίων, όπως οργανικά και μίγματα ατμού.

Στη συγκεκριμένη εργασία επικεντρωθήκαμε στη λειτουργία αντιδραστήρων αερολύματος στρωτής ροής (ΑΑΣΡ).

4.2 Βασικές αρχές λειτουργίας των ΑΑΣΡ

Στο Σχήμα 7 περιγράφονται οι βασικές αρχές λειτουργίας των ΑΑΣΡ, όπως χρησιμοποιούνται για τη μελέτη ομογενούς πυρηνοποίησης και συμπύκνωσης. Οι πειραματικές διατάξεις αποτελούνται γενικά από τρία βασικά μέρη: τον κορεστή (saturator), τον προθερμαντήρα (pre-heater) και το συμπυκνωτή (condenser). Το φέρον αέριο αρχικά εισέρχεται στον κορεστή, ο οποίος περιέχει την ένωση που μελετάται σε υγρή φάση, ώστε ο ατμός της ένωσης να αναμειχθεί με τη ροή του αερίου. Η κατασκευή του κορεστή πρέπει να εξασφαλίζει αρκετά μεγάλο χρόνο παραμονής του αερίου, ώστε το μίγμα στην έξοδο του να είναι κορεσμένο. Το κορεσμένο μείγμα (αέριο) οδηγείται, στη συνέχεια, μέσω σωληνώσεων σε έναν κυλινδρικό αγωγό, τον προθερμαντήρα. Ο ρόλος του προθερμαντήρα είναι να εξασφαλίζει την πλήρη ανάμειξη του ατμού όπως επίσης και την πλήρη ανάπτυξη της ροής έως την έξοδο του, δηλαδή έως την είσοδο του συμπυκνωτή. Η θερμοκρασία του προθερμαντήρα είναι μεγαλύτερη ή ίση με αυτή του κορεστή, ώστε να αποφεύγεται η συμπύκνωση του ατμού. Στην συνέχεια,

το αέριο μεταφέρεται στο συμπυκνωτή. Τα τοιχώματα του συμπυκνωτή διατηρούνται σε θερμοκρασία χαμηλότερη από αυτή του κορεστού, προκαλώντας απότομη ψύξη του αερίου. Η ψύξη αυτή, λόγω της εκθετικής μείωσης της πίεσης κορεσμού του ατμού με τη θερμοκρασία (βλέπε εξ. (5)), οδηγεί σε υψηλό υπερκορεσμό και στο σχηματισμό σωματιδίων λόγω ομογενούς πυρηνοποίησης.



Σχήμα 7: Σχηματική παράσταση των βασικών αρχών λειτουργίας ενός αντιδραστήρα αερολύματος στρωτής ροής, για την πειραματική μελέτη της ομογενούς πυρηνοποίησης και της συμπύκνωσης (από Mitrakos 2008).

Μία πολύ σημαντική παράμετρος της λειτουργίας των ΑΑΣΡ είναι η σχέση της ταχύτητας μεταφοράς της θερμότητας λόγω αγωγής, σε σχέση με την ταχύτητα μεταφοράς της μάζας λόγω διάχυσης. Η σχέση αυτή εκφράζεται με τον αδιάστατο αριθμό Lewis (Le):

$$Le = \frac{Sc}{Pr} = \frac{k}{\rho D_v C_p} \quad (44)$$

όπου, k είναι ο συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας του μίγματος, D_v ο συντελεστής διάχυσης του ατμού στο φέρον αέριο, C_p η ειδική θερμοχωρητικότητα του αερίου υπό σταθερή πίεση και ρ η πυκνότητα του μίγματος. Sc και Pr είναι οι αδιάστατοι αριθμοί Schmidt και Prandtl, για τη μεταφορά μάζας και θερμότητας, αντίστοιχα. Αν η μεταφορά θερμότητας λόγω αγωγής είναι ταχύτερη από τη μεταφορά μάζας λόγω διάχυσης ή ισοδύναμα αν ο αριθμός Le είναι μεγαλύτερος από τη μονάδα, τότε η πίεση κορεσμού ελαττώνεται γρηγορότερα από τη μερική πίεση του ατμού και η πυρηνοποίηση λαμβάνει χώρα σε μια ξεκάθαρα ορισμένη περιοχή στο κέντρο του συμπυκνωτή. Τα σωματίδια που σχηματίζονται λόγω ομογενούς πυρηνοποίησης, στη συνέχεια της διαδρομής τους, μέχρι την έξοδο του συμπυκνωτή, μεγαλώνουν σε μέγεθος λόγω συμπύκνωσης ή/και συσσωμάτωσης. Η μέτρηση του αριθμού και της κατανομής του μεγέθους των σχηματισμένων σωματιδίων πραγματοποιείται συνήθως στην έξοδο του συμπυκνωτή.

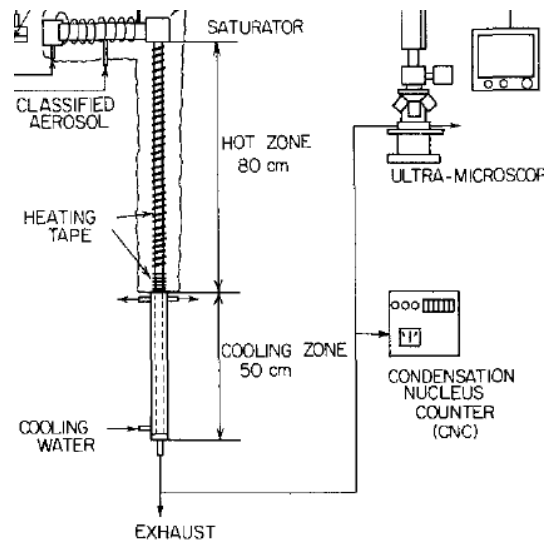
Ο ρόλος της συμπύκνωσης μπορεί να επηρεάσει σημαντικά τη λειτουργία των ΑΑΣΡ. Τα σωματίδια που παράγονται μέσω ομογενούς πυρηνοποίησης διογκώνονται λόγω συμπύκνωσης, καταναλώνοντας έτσι ατμό. Αν ο αριθμός των σωματιδίων είναι μικρός, η ποσότητα του ατμού που συμπυκνώνεται στην επιφάνειά τους είναι επίσης μικρή. Σε αυτή την περίπτωση, η επίδραση της συμπύκνωσης στο λόγο κορεσμού είναι

αμελητέα, και επομένως δεν επηρεάζει τον αριθμό των σχηματιζόμενων σωματιδίων μέσω πυρηνοποίησης, ο οποίος παραμένει εκθετική συνάρτηση της θερμοκρασίας του κορεστή (γραμμική περιοχή σε διάγραμμα ημι-λογαριθμικής κλίμακας). Αν ο ρυθμός πυρηνοποίησης είναι υψηλός (Nguyen et al. 1987; Fisenko and Brin 2006) και επομένως ο αριθμός των σχηματιζόμενων σωματιδίων είναι μεγάλος, τότε η ποσότητα του ατμού που καταναλώνεται μέσω της συμπύκνωσης είναι επίσης μεγάλη, και επιδρά στο λόγο κορεσμού και επομένως πρέπει να ληφθεί υπόψη. Σε αυτή την περίπτωση, το γράφημα του αριθμού των σωματιδίων με τη θερμοκρασία του κορεστή στο ημι-λογαριθμικό διάγραμμα παύει να είναι γραμμικό.

Στην περίπτωση που οι ΑΑΣΡ χρησιμοποιούνται για τη μέτρηση αποκλειστικά του ρυθμού ομογενούς πυρηνοποίησης, είναι αναγκαίο το εύρος των πειραματικών παραμέτρων να είναι τέτοιο, ώστε η λειτουργία τους να παραμένει στη γραμμική περιοχή. Σε εφαρμογές πειραματικής μελέτης ομογενούς πυρηνοποίησης, οι ΑΑΣΡ αναφέρονται συχνά και ως θάλαμοι διάχυσης στρωτής ροής (laminar flow diffusion chamber). Σημειώνεται ότι στην παρούσα διατριβή χρησιμοποιείται ο γενικευμένος όρος ΑΑΣΡ, ο οποίος περιλαμβάνει τις διατάξεις που χρησιμοποιούνται για την πειραματική μελέτη ομογενούς πυρηνοποίησης, αλλά και τις διατάξεις που χρησιμοποιούνται για τη σύνθεση νανοσωματιδίων.

4.3 Ομογενής πυρηνοποίηση-συμπύκνωση DPB σε ΑΑΣΡ

Για την πιστοποίηση του προτεινόμενου μοντέλου επιλέχθηκαν τα πειράματα ταυτόχρονης πυρηνοποίησης-συμπύκνωσης DPB σε ξηρό αέρα, στο πειραματικό σύστημα B (system B), όπως έχουν δημοσιευθεί στην εργασία των Nguyen et al. (1987). Στη διάταξη αυτή, ο συμπυκνωτής είναι κυλινδρικός με εσωτερική διάμετρο ίση με 1 cm και μήκος 52 cm. Τα τοιχώματα του προθερμαντήρα, ο οποίος έχει μήκος ίσο με 70 cm και εσωτερική διάμετρο ίση με αυτή του συμπυκνωτή, διατηρούνται σε θερμοκρασία ίση με αυτή του κορεστή. Μεταξύ του προθερμαντήρα και του συμπυκνωτή παρεμβάλλεται μια μεταβατική ζώνη μήκους 10 cm, . Ο αντιδραστήρας λειτουργεί σε ατμοσφαιρική πίεση (1 bar). Οι Nguyen et al. (1987) παρουσιάζουν εκτενείς μετρήσεις, τόσο για τη συγκέντρωση κατά αριθμό, όσο και για τη συνάρτηση κατανομής μεγέθους των παραγόμενων σωματιδίων στην έξοδο του συμπυκνωτή για διάφορες παροχές μάζας αέρα και θερμοκρασίες του κορεστή.



Σχήμα 8: Σχηματική παράσταση του ΑΑΣΡ του συστήματος Β (προσαρμοσμένο από Nguyen et al. 1987).

Στο σχήμα είναι εμφανές ότι η διάταξη μοιάζει πολύ και στην ουσία λειτουργεί ίδια με τη διάταξη που παρουσιάστηκε στο Σχήμα 7, καθώς αποτελείται από έναν κορεστή (saturator), μια θερμή ζώνη (HOT ZONE) που θερμαίνεται με θερμοταινίες (HEATING TAPE) και λειτουργεί ως προθερμαντήρας, και μια ψυχρή ζώνη (COOLING ZONE) που ψύχεται από ψυκτικό νερό (COOLING WATER) και λειτουργεί ως συμπυκνωτής. Στο τέλος της διάταξης υπάρχουν διάφορα μετρητικά όργανα για την εξακρίβωση του πλήθους και των ιδιοτήτων των παραγόμενων σωματιδίων.

Αν και τα πειράματα αυτά έχουν γίνει πριν τέσσερις σχεδόν δεκαετίες, οι βασικές αρχές της χρησιμοποιούμενης πειραματικής διάταξης έχουν παραμείνει αναλλοίωτες, και χαρακτηρίζουν τα πειράματα ομογενούς πυρηνοποίησης έως σήμερα. Τα συγκεκριμένα πειράματα επιλέχθηκαν για τον έλεγχο της προτεινόμενης μεθοδολογίας για δύο βασικούς λόγους. Ο πρώτος είναι ότι τα πειραματικά δεδομένα εκτείνονται στη μη γραμμική περιοχή, στην οποία οι διαδικασίες της πυρηνοποίησης και της συμπύκνωσης είναι έντονα πεπλεγμένες. Καθώς τα πειράματα περιγράφονται λεπτομερώς, τα δεδομένα σε αυτήν την περιοχή αποτελούν κατάλληλη αναφορά για τον έλεγχο του μοντέλου σε πραγματικές συνθήκες πολυδιάστατης ροής με έντονη πυρηνοποίηση και συμπύκνωση. Ο δεύτερος λόγος είναι ότι τα συγκεκριμένα πειράματα αποτελούν πειράματα αναφοράς που έχουν αναλυθεί εκτενώς στη βιβλιογραφία (Wilek and Stratmann 1997; Pyykönen and Jokiniemi 2000; Mitrakos 2008), και επομένως επιτρέπουν τη σύγκριση με άλλα μοντέλα.

Πίνακας: Διαστάσεις και πειραματικές συνθήκες για το σύστημα Β

Διάμετρος σωλήνα, D (cm)	1.0
Διάμετρος αγωγού, l (cm)	132
Θερμή ζώνη (cm)	70
Μεταβατική ζώνη (cm)	10
Ψυχρή ζώνη (cm)	52
Παροχή αέρα (liters min ⁻¹)	0.5
Θερμοκρασία κορεστή (°C)	70-100
Θερμοκρασία θερμής ζώνης (°C)	70-120

από Nguyen et al.1987

Το μοντέλο που κατασκευάστηκε στα πλαίσια της παρούσας εργασίας αφορά στην προσομοίωση του συστήματος Β. Ο αγωγός που εξετάζεται έχει μήκος 62 cm, τη μεταβατική ζώνη των 10 cm και τον συμπυκνωτή των 52 cm, και διάμετρο 1 cm. Η κυλινδρική γεωμετρία του προβλήματος επιτρέπει την προσομοίωση σε διδιάστατη αξονοσυμμετρική γεωμετρία. Η υπολογιστική γεωμετρία κατασκευάστηκε μέσω του Ansys Icem (Ansys 2019). Η κατασκευή του υπολογιστικού πλέγματος έγινε επίσης μέσω του Ansys Icem με ορθογωνικά κελιά.

5 Προτεινόμενο μοντέλο

5.1 Μέθοδοι επίλυσης εσωτερικών διαδικασιών

5.1.1 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 $N_{bin} + 1$ 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 :

$$dl_i = dl_{min} \lambda^{i-1}, i = 0, 1, \dots, N_{bin} \quad (45)$$

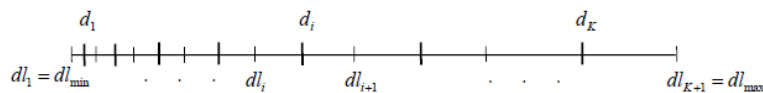
$$\lambda = 10^{\frac{\log_{10}(dl_{max}/dl_{min})}{N_{bin}}} \quad (46)$$

όπου, dl_{min} και dl_{max} είναι το ελάχιστο και το μέγιστο όριο του πλέγματος του μεγέθους των σωματιδίων, αντίστοιχα, και N_{bin} 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 συγκέντρωση κατ' αριθμό των σωματιδίων στο τμήμα αυτό, καθώς και η ολική συγκέντρωση των σωματιδίων N_{total} προσεγγίζονται ως ακολούθως (βλ. και Σχ. 5):

$$N_i = n_i \Delta d_i \quad (47)$$

$$N_{total} = \sum_{i=1}^K N_i = \sum_{i=1}^K n_i \Delta d_i \quad (48)$$

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 (από Mitrakos 2008).

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. Τα σωματίδια θεωρούνται ότι είναι σφαιρικά και επομένως ο όγκος και

η μάζα ενός σωματιδίου στο τμήμα i συνδέεται με τη χαρακτηριστική διάμετρο του τμήματος, αντίστοιχα, από τις παρακάτω σχέσεις:

$$v_i = \frac{\pi}{6} d_i^3 \quad (49)$$

$$m_i = \rho_p \frac{\pi}{6} d_i^3 \quad (50)$$

όπου ρ_p είναι η πυκνότητα μάζας της σωματιδιακής φάσης.

5.1.2 Πυρηνοποίηση

Η αριθμητική επίλυση της πυρηνοποίησης, στα πλαίσια τμηματικής περιγραφής με σταθερό πλέγμα, γίνεται εύκολα, προσθέτοντας τα σωματίδια που σχηματίζονται στο τμήμα της κατανομής που περιέχει την διάμετρο τους. Η διάμετρος αυτή είναι ίση με την κρίσιμη διάμετρο d_{crit} , η οποία δίνεται από την εξίσωση (7). Ο ρυθμός J με τον οποίο παράγονται σωματίδια κρίσιμης διαμέτρου (εμβρυϊκά σωματίδια) υπολογίζεται επιλέγοντας κάποια από τις γνωστές θεωρίες πυρηνοποίησης (βλ. παρ. 3.3.1.1). Η μεταβολή της τιμής της συνάρτησης κατανομής του μεγέθους των σωματιδίων σε χρονικό διάστημα Δt , λόγω πυρηνοποίησης, υπολογίζεται από την παρακάτω σχέση:

$$\Delta n_i = n_i^{dt} - n_i^0 = \frac{J}{\Delta d_i} \Delta t, \text{ αν } dl_i \leq d_{crit} \leq dl_{i+1} \quad (51)$$

$$\Delta n_i = 0, \text{ οπουδήποτε αλλού} \quad (52)$$

5.1.3 Συμπύκνωση

Στην παράγραφο 5.1.1 αναλύθηκε η διακριτοποίηση του μεγέθους των σωματιδίων σε τμήματα ενός σταθερού πλέγματος. Επίσης, έχει ήδη γίνει αναφορά στο σημαντικό πρόβλημα της αριθμητικής διάχυσης που παρουσιάζεται κατά την επίλυση της διαδικασίας της συμπύκνωσης. Για την αντιμετώπιση αυτού χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος του κινούμενου πλέγματος για τη διακριτοποίηση του μεγέθους των σωματιδίων (Kim and Seinfeld 1990). Σε αυτή τη μέθοδο τα τμήματα μεγέθους των σωματιδίων μπορούν να κινηθούν κατά μήκος της συντεταγμένης (άξονα) κατεύθυνσης του μεγέθους των σωματιδίων, ακολουθώντας τον νόμο της συμπύκνωσης. Συνεπώς, η εξέλιξη του μεγέθους της κατανομής μπορεί να προσδιοριστεί με μεγάλη ακρίβεια, ακόμα και όταν αυτή εμφανίζει μεγάλη ασυνέχεια και έχει μη ομαλό σχήμα. Ταυτόχρονα, όταν λαμβάνει χώρα σχηματισμός νέων σωματιδίων λόγω πυρηνοποίησης πρέπει να ληφθεί υπόψιν, ώστε να προστεθούν νέα τμήματα για την ενσωμάτωση των νέων σωματιδίων στο πλέγμα, κάτι που όμως μπορεί να αυξήσει σημαντικά το υπολογιστικό κόστος (Roussos, Alexopoulos, and Kiparissides 2006). Επίσης, επειδή το χαρακτηριστικό μέγεθος κάθε τμήματος μπορεί να μεταβάλλεται στα διαφορετικά σημεία του χώρου, οι μέθοδοι κινούμενου πλέγματος είναι πολύ δύσκολο να εφαρμοστούν σε Eulerian επίλυση της μεταφοράς του αερολύματος.

Λόγω των παραπάνω, οι μέθοδοι κινούμενου πλέγματος συνήθως συνδυάζονται με τεχνικές επανατοποθέτησης της μετατοπισμένης κατανομής στο σταθερό πλέγμα μεγέθους των σωματιδίων, ώστε όλες οι διαδικασίες, και ειδικότερα η μεταφορά, του αερολύματος να μπορούν να επιλυθούν άμεσα στο Eulerian πλέγμα. Τέτοιες

τεχνικές χρησιμοποιήθηκαν αρχικά τόσο για την ανάπτυξη ατμοσφαιρικών μοντέλων (Lurmann et al. 1997), όσο και αργότερα για την επίλυση ροών αερολύματος σε κλειστό χώρο (Mitsakou, Helmis, and Housiadas 2004) και σε συνδυασμό με υπολογισμούς ρευστομηχανικής (Mitrakos, Hiniis, and Housiadas 2007). Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιήθηκε μια νέα μέθοδος (Mitrakos and Vouros 2022) που ανήκει στην οικογένεια των μεθόδων επανατοποθέτησης κινούμενου πλέγματος για τη διακριτοποίηση της κατανομής μεγέθους των σωματιδίων και η οποία παρουσιάζεται σε αυτήν την παράγραφο.

Στην παράγραφο 3.4.2 έγινε μια μαθηματική περιγραφή της επίδρασης της διεργασίας της συμπύκνωσης στο μέγεθος των σωματιδίων. Ο ρυθμός συμπύκνωσης υπολογίζεται από τη σχέση (28) και θα συμβολίζεται με G εκ του *growth rate*. Έτσι τα μετατοπισμένα όρια της κάθε κλάσης θα δίνονται:

$$d_{p_i,limit}^{moved} = d_{p_i,limit} + G * dt \quad (53)$$

όπου dt το χρονικό βήμα των υπολογισμών και i ο αύξων αριθμός της κλάσης. Η νέα διάμετρος της κλάσης υπολογίζεται:

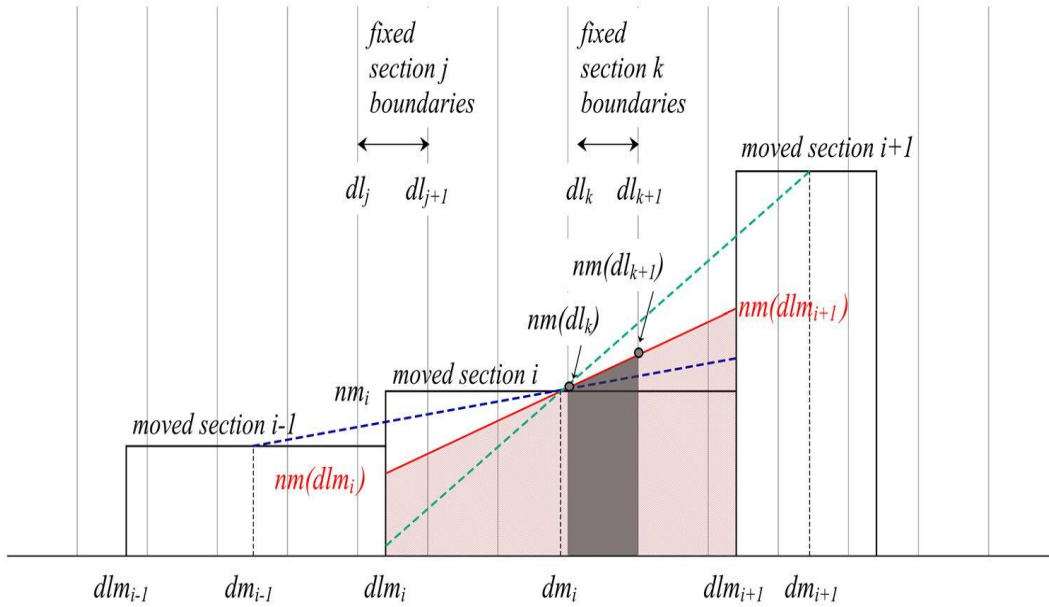
$$d_{p_i}^{moved} = \frac{d_{p_i,limit}^{moved} + d_{p_{i+1},limit}^{moved}}{2} \quad (54)$$

Κατά τη συμπύκνωση αλλάζει το μέγεθος των σωματιδίων και όχι ο συνολικός αριθμός τους. Αυτό που πρακτικά συμβαίνει κατά την υπολογιστική προσομοίωση είναι ότι τα σωματίδια μεταπηδούν από το ένα τμήμα μεγέθους σε κάποιο που αντιστοιχεί σε μεγαλύτερη χαρακτηριστική διάμετρο. Έτσι, η πυκνότητα της μετατοπισμένης κατανομής μπορεί να βρεθεί ως:

$$nm_i = n_i^0 \frac{(d_{p_{i+1},limit} - d_{p_i,limit})}{(d_{p_{i+1},limit}^{moved} - d_{p_i,limit}^{moved})} \quad (55)$$

Στη σχέση (55) τα nm_i και n_i^0 είναι η πυκνότητα κατανομής αριθμού των σωματιδίων για την i κλάση μετά και πριν αντίστοιχα. Η σχέση (55) ουσιαστικά αποτελεί έκφραση της διατήρησης του αριθμού των σωματιδίων της κάθε κλάσης κατά τη συμπύκνωση.

Στη συνέχεια, όπως αναλύθηκε παραπάνω, ακολουθεί η επανατοποθέτηση των μετακινημένων ορίων στο σταθερό πλέγμα. Κατά την εφαρμογή της μεθόδου παρουσιάζονται διαφορετικές περιπτώσεις όσον αφορά στα όρια της μετατοπισμένης κλάσης και στη σχέση τους με τα χαρακτηριστικά όρια του σταθερού πλέγματος. Για παράδειγμα, το ιδανικό θα ήταν τα νέα όρια της κλάσης, τόσο αυτό από τα αριστερά όσο και αυτό από τα δεξιά, να περικλείονταν από τα όρια ενός μόνο άλλου σταθερού τμήματος, και έτσι όλα τα σωματίδια που απαρτίζουν τη μετατοπισμένη κλάση να μπορούν να προστεθούν σε μια σταθερή κλάση. Στην πραγματικότητα όμως κάτι τέτοιο αποτελεί μια σπάνια περίπτωση και κατά κανόνα τα μετατοπισμένα τμήματα διασχίζουν πάνω από μία κλάση του σταθερού πλέγματος, χωρίς να συμπίπτουν τα όρια τους, οπότε απαιτείται ιδιαίτερος χειρισμός για να διαμοιραστεί στα τμήματα του σταθερού πλέγματος το πλήθος των σωματιδίων που απαρτίζουν τα μετατοπισμένα τμήματα.



Σχήμα 10: Σχηματική αναπαράσταση της μετατοπισμένης συνάρτησης κατανομής μεγέθους των σωματιδίων και της επανατοποθέτησής της σε σταθερό πλέγμα. Το σταθερό πλέγμα μεγέθους των σωματιδίων απεικονίζεται με τις γκρι καθέτους, ενώ με τις έντονες μαύρες γραμμές απεικονίζονται τρεις υποθετικές μετατοπισμένες κλάσεις. Οι μπλε και πράσινες διακεκομμένες γραμμές σημαίνουν τις προς τα αριστερά και δεξιά κλίσεις της κατανομής και η κόκκινη γραμμή τη μέση κλίση, η οποία χρησιμοποιείται για την προσέγγιση του σχήματος (κόκκινο τραπέζιο) του τμήματος της κατανομής που εμπίπτει εσωτερικά της μετατοπισμένης κλάσης. Το σκιασμένο με γκρι χρώμα τραπέζιο αποτελεί παράδειγμα του αριθμού των σωματιδίων που προστίθενται σε κάποια κλάση k του σταθερού πλέγματος (από Mitrakos and Vouros 2022).

Στο Σχήμα 10 παρουσιάζεται ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα του πως θα φαινόταν κάποια μετατοπισμένα τμήματα της κατανομής πάνω στο σταθερό πλέγμα. Το μετατοπισμένο τμήμα i (*moved section i* στο Σχήμα 10) όπως φαίνεται διαμοιράζεται μεταξύ αρκετών σταθερών τμημάτων, άλλες φορές καλύπτοντας το σύνολο της οριζόντιας διάστασής αυτών και άλλες φορές μόνο μέρος της. Επίσης, από το σχήμα μπορεί κανείς να αντλήσει πληροφορίες για τη μέθοδο (Mitrakos and Vouros 2022) διαμοιρασμού των σωματιδίων που επιλέχθηκε σε αυτή την εργασία. Όπως φαίνεται σε αυτό, η μετατοπισμένη κλάση i συνορεύει στα αριστερά με την μετατοπισμένη κλάση $i-1$ και στα δεξιά με την $i+1$ αντίστοιχα, με χαρακτηριστικές διαμέτρους dlm_i , dlm_{i-1} και dlm_{i+1} και πυκνότητα της κατανομής στα σημεία των χαρακτηριστικών διαμέτρων (μέσο του τμήματος) nm_i , nm_{i-1} και nm_{i+1} . Μια απλή υπόθεση που υιοθετήθηκε είναι ότι η πυκνότητα της κατανομής μεταβάλλεται γραμμικά μέσα σε κάθε τμήμα. Η κλίση της γραμμικής αυτής μεταβολής μπορεί να οριστεί με βάση τα γειτονικά μετατοπισμένα τμήματα και την κλίση ως εξής:

$$sl_i = \left(\frac{nm_i - nm_{i-1}}{dm_i - dm_{i-1}} + \frac{nm_{i+1} - nm_i}{dm_{i+1} - dm_i} \right) / 2 \quad (56)$$

Έτσι, το σχήμα της κατανομής στο μετατοπισμένο τμήμα ορίζεται από την ευθεία που περνάει από το μέσο του μετατοπισμένου τμήματος i , δηλαδή από το σημείο (dm_i, nm_i) , με κλίση sl_i . Ο συνολικός αριθμός των σωματιδίων στο τμήμα i θα είναι το εμβαδόν του τραpezίου που σχηματίζεται από την προαναφερθείσα ευθεία (κόκκινο χρώμα), τον άξονα του μεγέθους των σωματιδίων (οριζόντιος άξονας) και τα όρια

του τμήματος. Ένα μεγάλο πλεονέκτημα αυτής της προσέγγισης είναι ότι ο αριθμός σωματιδίων στο κάθε τμήμα διατηρείται, εφόσον η ευθεία περνάει από το μέσο του τμήματος, καθώς το τραπέζιο που προκύπτει ως σχήμα της κατανομής έχει το ίδιο εμβαδόν με το παραλληλόγραμμο που προηγούμενως αποτελούσε το χαρακτηριστικό της σχήμα.

Η πρακτική εφαρμογή της μεθόδου μπορεί να περιγραφεί ως εξής. Όπως έχει ήδη αναφερθεί, όταν ένα μετατοπισμένο τμήμα εσωκλείεται στο σύνολό του σε ένα τμήμα του σταθερού πλέγματος, τότε όλα τα σωματίδια του προστίθενται σε αυτό το τμήμα του σταθερού πλέγματος, ενώ σε αντίθετη περίπτωση τα σωματίδια του πρέπει να διαμοιραστούν στα τμήματα του σταθερού πλέγματος που αυτό διασχίζει. Στο Σχήμα 10 μπορεί κανείς να παρατηρήσει ότι στη δεύτερη περίπτωση θα υπάρχουν είτε σταθερά τμήματα τα οποία εσωκλείονται εξ' ολοκλήρου μέσα στο μετατοπισμένο τμήμα είτε σταθερά τμήματα στα όρια του μετατοπισμένου τμήματος που μόνο ένα μέρος τους περιέχεται σε αυτό. Χαρακτηριστικό παράδειγμα της πρώτης περίπτωσης αποτελεί το σταθερό τμήμα k (*fixed section k* στο Σχήμα 10), ενώ για τη δεύτερη το σκιασμένο με γκρι χρώμα σταθερό τμήμα i (*fixed section i* στο Σχήμα 10). Η συνεισφορά λοιπόν του μετατοπισμένου τμήματος i στο σταθερό τμήμα k που εσωκλείεται εξ' ολοκλήρου στο i θα είναι:

$$\Delta N_{i \rightarrow k} = \frac{nm(dl_{k+1} + nm(dl_k))}{2} (dl_{k+1} - dl_k) \quad (57)$$

με τις τιμές που λαμβάνει η μετατοπισμένη κατανομή στα όρια του σταθερού τμήματος να υπολογίζονται από τη σχέση 55 ως εξής:

$$nm(dl_k) = nm_i + sl_i(dl_k - dm_i) \quad (58)$$

Η συνεισφορά του μετατοπισμένου τμήματος i στα σταθερά τμήματα που βρίσκονται στα όρια του, όπως το j στο σχήμα 4 που αποτελεί το εξ' αριστερών όριο, θα είναι:

$$\Delta N_{i \rightarrow j} = \frac{nm(dl_{j+1} + nm(dlm_i))}{2} (dl_{j+1} - dlm_i) \quad (59)$$

εάν το $(dl_{j+1}, nm(dl_{j+1}))$ ανήκει στη μετατοπισμένη κατανομή ενώ το $(dl_j, nm(dl_j))$ όχι, δηλαδή το dl_j αποτελεί το εξ' αριστερών όριο του τμήματος i και δεν περιλαμβάνεται σε αυτό. Όταν συμβαίνει το ανάποδο, δηλαδή το dl_{j+1} αποτελεί το εκ' δεξιών όριο του τμήματος i και δεν περιλαμβάνεται σε αυτό, θα ισχύει:

$$\Delta N_{i \rightarrow j} = \frac{nm(dl_j + nm(dlm_i))}{2} (dlm_i - dl_j) \quad (60)$$

Οι τιμές που λαμβάνει η μετατοπισμένη κατανομή στα όρια του σταθερού τμήματος θα δίνονται σε αυτήν την περίπτωση από τη σχέση 57 αντικαθιστώντας σε αυτή το k με το $j+1$ ή το j εν αντιστοιχία με τα παραπάνω.

Όπως είναι λογικό, από την εφαρμογή της μεθόδου σε υπολογισμούς μπορούν να προκύψουν κάποιες παράλογες ή αφύσικες τιμές. Η ευθεία της παρεμβολής δε θα πρέπει να περνάει κάτω από τον οριζόντιο άξονα, καθώς τότε η πυκνότητα της κατανομής θα έπαιρνε αρνητικές τιμές. Για αυτό το λόγο είναι απαραίτητο να τεθούν κάποια ανώτατα όρια στις τιμές που μπορεί να λάβει η κλίση της ευθείας, σύμφωνα με τις εξής συνθήκες:

$$\begin{aligned} sl_i &= \min(sl_i, sl_{i,limit}^{west}), \text{ εάν } sl_i > 0 \\ sl_i &= -\min(|sl_i|, sl_{i,limit}^{east}), \text{ εάν } sl_i < 0 \end{aligned} \quad (61)$$

όπου τα αντίστοιχα όρια της κλίσης:

$$\begin{aligned} s_{i,limit}^{west} &= \frac{nm_i}{dm_i - dlm_i} \\ s_{i,limit}^{east} &= \frac{-nm_i}{dm_{i+1} - dlm_i} \end{aligned} \quad (62)$$

Η παραπάνω διαδικασία επαναλαμβάνεται σε κάθε χρονικό βήμα για όλα τα μη μηδενικά μετατοπισμένα τμήματα ώστε αυτά να επανατοποθετηθούν στο σταθερό πλέγμα.

5.2 Η επίλυση της εξίσωσης του ατμού

Κατά τις εσωτερικές διεργασίες του αερολύματος καταναλώνεται μάζα ατμού, από την οποία συντίθενται και διογκώνονται τα σωματίδια. Ουσιαστικά λοιπόν, ο όρος πηγής για τη μάζα του ατμού στην περίπτωση μας αποτελεί "καταβόθρα" μάζας (ή όγκου), δηλαδή λαμβάνει αρνητικές τιμές. Πρακτικά λοιπόν ο όρος πηγής της εξίσωσης του ατμού είναι:

$$S_{vapor} = -S_{growth} \quad (63)$$

, όπου το ο όρος πηγής S_{growth} έχει υπολογιστεί όπως περιγράφηκε στην προηγούμενη παράγραφο ως άθροισμα της επίδρασης της πυρηνοποίησης και της συμπύκνωσης. Έτσι η εξίσωση της δυναμικής του ατμού θα είναι:

$$\frac{\partial \rho C_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} C_m) - \nabla \cdot (\rho D_v \nabla C_m) = S_{vapor} \quad (64)$$

Έτσι οι όροι πηγής και κατ'επέκταση η εξίσωση μεταφοράς του ατμού επιλύεται από το Ansys κατά τον ίδιο τρόπο και παράλληλα με την επίλυση των εσωτερικών διεργασιών του αερολύματος.

5.3 Υπολογισμοί ρευστομηχανικής

Όπως έχει ήδη αναφερθεί, στην επίλυση των εσωτερικών διεργασιών του αερολύματος υπεισέρχονται μεγέθη ρευστομηχανικής, όπως η θερμοκρασία, η πίεση και η ταχύτητα του φέροντος αερίου. Είναι απαραίτητο λοιπόν να επιλυθεί και η ροή του συστήματος ρευστού-σωματιδίων. Τα μεγέθη της ρευστομηχανικής και οι υπολογισμοί που χρειάστηκαν για την παρούσα εργασία έγιναν όλοι μέσω του προγράμματος υπολογιστικής ρευστομηχανικής (CFD) Ansys Fluent (Ansys R19.2). Στην παράγραφο αυτή θα περιγραφούν εν συντομία οι υπολογισμοί ρευστομηχανικής.

Ουσιαστικά το Ansys Fluent επιλύει τις εξισώσεις διατήρησης της μάζας, της ορμής και της ενέργειας. Η πρώτη για διδιάστατες, αξονοσυμμετρικές γεωμετρίες γράφεται ως (Ansys Fluent Theory Guide 2013):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x) + \frac{\partial}{\partial r}(\rho v_r) + \frac{\rho v_r}{r} = S_m \quad (65)$$

Η εξίσωση διατήρησης της ορμής σε κυλινδρικές συντεταγμένες για για διδιάστατες, αξονοσυμμετρικές γεωμετρίες γράφεται ως (Ansys Fluent Theory Guide 2013) :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_x) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(r \rho v_x v_x) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v_r v_x) = -\frac{\partial p}{\partial x} + F_x \quad (66)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(r \rho v_x v_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v_r v_r) = -\frac{\partial p}{\partial r} + F_r \quad (67)$$

Η εξίσωση διατήρησης της ενέργειας που λύνει ο Fluent είναι η εξής (Ansys Fluent Theory Guide 2013):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot (\vec{v}(\rho E + p)) = -\nabla \cdot \left(\sum_j h_j J_j \right) + S_h \quad (68)$$

Ταυτόχρονα, ο Fluent μπορεί να λύσει και εξισώσεις μεταφοράς για επιπλέον βαθμωτά μεγέθη, όπως για παράδειγμα την εξίσωση μεταφοράς για ένα συστατικό ενός μίγματος. Επιπλέον, το πρόγραμμα παρέχει στους χρήστες του τη δυνατότητα να ορίζουν δικά τους μεγέθη, ώστε αυτό να επιλύσει τις εξισώσεις μεταφοράς τους, εμπλουτίζοντας έτσι πρακτικά τις δυνατότητες του τυπικού πακέτου του προγράμματος. Ο χρήστης μπορεί λοιπόν να υποδείξει στο πρόγραμμα τον τρόπο επίλυσης της εξίσωσης μεταφοράς ενός συγκεκριμένου μεγέθους μεταφορώνοντας δικά του προγράμματα σε γλώσσα C, τις λεγόμενες UDF (User Defined Functions - Εξισώσεις καθορισμένες από τον χρήστη). Αυτή ακριβώς η παρεχόμενη δυνατότητα του Fluent αξιοποιήθηκε και στη συγκεκριμένη εργασία, αφού οι διαδικασίες διακριτοποίησης του μεγέθους των σωματιδίων -η πυρηνοποίηση, η συμπύκνωση και η μοριακή διάχυση -που περιγράφηκαν παραπάνω μοντελοποιήθηκαν σε γλώσσα C και μεταφορτώθηκαν στα πρότυπα του Ansys Fluent ως UDF.

Η γενική εξίσωσης μεταφοράς για ένα βαθμωτό μέγεθος φ_k γράφεται ως εξής:

$$\frac{\partial \rho \varphi_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho u_i \varphi_k - \Gamma_k \frac{\partial \rho \varphi_k}{\partial x_i} \right) = S_{\varphi_k}, \quad k = 1, 2, \dots, N \quad (69)$$

όπου Γ_k ο συντελεστής διάχυσης και S_{φ_k} οι όροι πηγής. Στην περίπτωση μας το βαθμωτό μέγεθος φ_k είναι η συνάρτηση κατανομής μεγέθους n_k και οι όροι πηγής S_{φ_k} είναι όπως έχει ήδη αναλυθεί η πυρηνοποίηση και η συμπύκνωση. Έτσι, η σχέση 69 γράφεται ως:

$$\frac{\partial \rho n_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho u_i n_k - \Gamma_k \frac{\partial \rho n_k}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial n}{\partial t}|_{nucl} + \frac{\partial n}{\partial t}|_{cond}, \quad k = 1, 2, \dots, N \quad (70)$$

Η ροή αερολύματος επιλύεται πάντοτε σε μη-μόνιμη μορφή, ακόμα και για μόνιμα προβλήματα, όπως είναι και τα πειράματα που εξετάζονται. Η προσέγγιση αυτή επιτρέπει την ολοκλήρωση των όρων πηγής σε κάθε χρονικό βήμα ξεχωριστά για κάθε διαδικασία χρησιμοποιώντας για κάθε μία τις μεθόδους που περιγράφηκαν παραπάνω. Σε κάθε χρονικό βήμα της επίλυσης των εξισώσεων της υπολογιστικής ρευστομηχανικής αρχικά υπολογίζονται οι όροι πηγής, χρησιμοποιώντας τις συνθήκες της προηγούμενης χρονικής στιγμής. Οι τιμές αυτές των όρων πηγής εισάγονται στην επίλυση της ΓΕΔΑ και της εξίσωσης του ατμού με τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων από τον Fluent. Οι όροι πηγής για τις δύο εξισώσεις υπολογίζονται με UDF, ο κώδικας των οποίων παρατίθεται στο Παράρτημα της εργασίας.

6 Αποτελέσματα

Όπως έχει εξηγηθεί, για την πιστοποίηση του μοντέλου χρησιμοποιήθηκαν τα αποτελέσματα παλαιότερης σχετικής εργασίας (Nguyen et al.1987). Οι δοκιμές με το πρόγραμμα επικεντρώθηκαν σε δύο βασικούς άξονες. Στην πρώτη φάση πραγματοποιήθηκε ανάλυση ευαισθησίας σε σχέση με τις βασικές αριθμητικές παραμέτρους του μοντέλου, δηλαδή το χρονικό βήμα, το χωρικό πλέγμα και το πλέγμα του μεγέθους των σωματιδίων. Στη δεύτερη φάση ακολούθησε η δοκιμή του μοντέλου σε διαφορετικές πειραματικές συνθήκες και παραμέτρους. Η βασική παράμετρος σύγκρισης και στις δύο περιπτώσεις ήταν το **πλήθος των σωματιδίων** στην έξοδο που προβλέπονταν από το μοντέλο.

6.1 Διερεύνηση υπολογιστικών παραμέτρων - Ανάλυση ευαισθησίας

Υπάρχουν τρεις βασικές παράμετροι που καθορίζονται από το χρήστη και πρέπει να προσδιοριστούν, ώστε το μοντέλο της εργασίας κατά την εκτέλεσή του παρέχει ικανοποιητικά αποτελέσματα. Αυτές είναι το **μέγεθος του πλέγματος**, το **χρονικό βήμα των υπολογισμών** και το **πλήθος των τμημάτων** διακριτοποίησης του μεγέθους των σωματιδίων. Η ιδεατή συνθήκη εκτέλεσης του προγράμματος θα ήταν η ταυτόχρονη εφαρμογή και ενός πάρα πολύ διακριτοποιημένου πλέγματος και το μεγαλύτερου δυνατού πλήθους τμημάτων, καθώς και πολύ μικρού χρονικού βήματος υπολογισμών, ώστε τα αποτελέσματα που προκύπτουν να είναι όσο το δυνατόν πιο ακριβή. Ο συνδυασμός των παραπάνω μπορεί να δημιουργήσει προβλήματα, αφού κάθε φορά που μειώνεται το χρονικό βήμα ή αυξάνεται η διακριτοποίηση του πλέγματος, αυξάνεται παράλληλα το υπολογιστικό κόστος και ο συνολικός χρόνος εκτέλεσης του προγράμματος. Οι προσομοιώσεις με προγράμματα υπολογιστικής ρευστομηχανικής ανάλογα με τη συνθετότητα του προβλήματος, το πλήθος των δεδομένων και την επιθυμητή ακρίβεια, μπορεί να έχουν χρόνο εκτέλεσης από μερικά λεπτά έως και ολόκληρους μήνες. Ο κάθε χρήστης όμως συνήθως έχει στη διάθεση του περιορισμένο χρονικό διάστημα και άρα είναι απαραίτητο να επιλεγούν οι προαναφερθείσες παράμετροι με βάση έναν συνδυασμό επιθυμητής ακρίβειας των αποτελεσμάτων και ενός εύλογου χρονικού διαστήματος στο οποίο τερματίζεται το πρόγραμμα.

Η διαδικασία που ακολουθήσαμε στην παρούσα εργασία, και τα αποτελέσματα της θα παρουσιαστούν εκτενέστερα στις επόμενες παραγράφους, είναι η εξής:

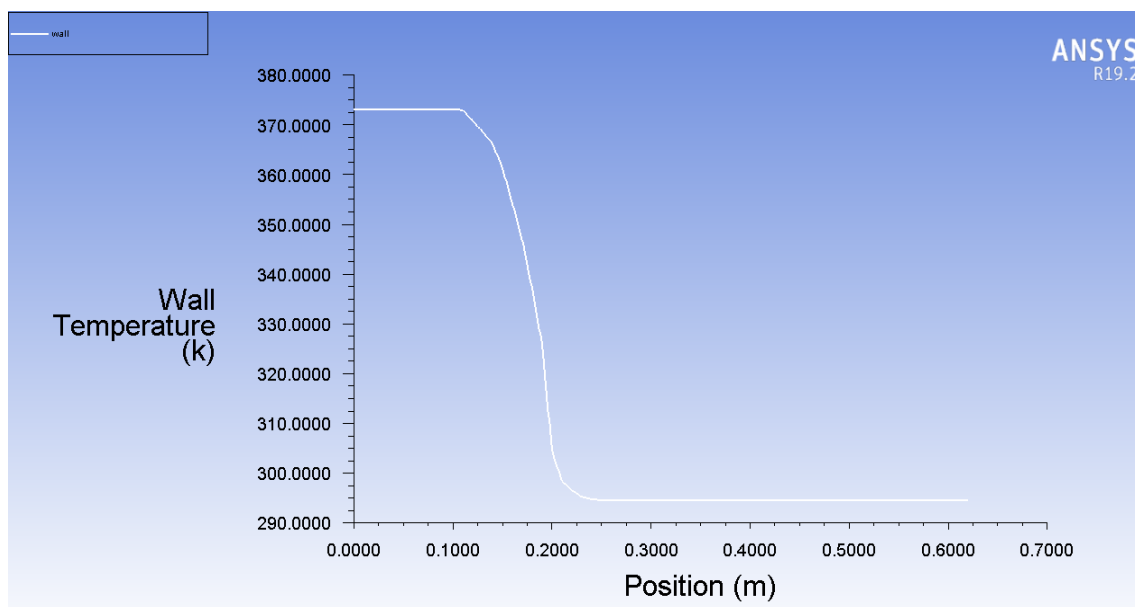
1. Αρχικά ορίστηκε ένα σταθερό χρονικό βήμα και ένα σταθερό πλήθος τμημάτων διακριτοποίησης του πλέγματος και δοκιμάστηκαν διάφορα πλέγματα με διαφορετικές διακριτοποιήσεις, μέχρι να καταλήξουμε σε κάποια σύγκλιση και οι τιμές των σωματιδίων στην έξοδο να μη μεταβάλλονται πάνω από 2%.
2. Εφόσον με την παραπάνω διαδικασία επιλέχθηκε ένα μέγεθος πλέγματος, εφαρμόστηκε παρόμοια διαδικασία και για την επιλογή του χρονικού βήματος. Διατηρώντας το πλέγμα και το πλήθος των τμημάτων σταθερό ανά δοκιμή,

το χρονικό βήμα των υπολογισμών μειωνόταν μέχρι τα αποτελέσματα να παρουσιάσουν την επιθυμητή σύγκλιση.

3. Επανάληψη παρόμοιας διαδικασίας και για το πλήθος των τμημάτων διακριτοποίησης, με αμετάβλητα πλέον το πλέγμα και το χρονικό βήμα και ίσα με αυτά που επιλέξαμε.

6.1.1 Θερμοκρασία τοιχώματος

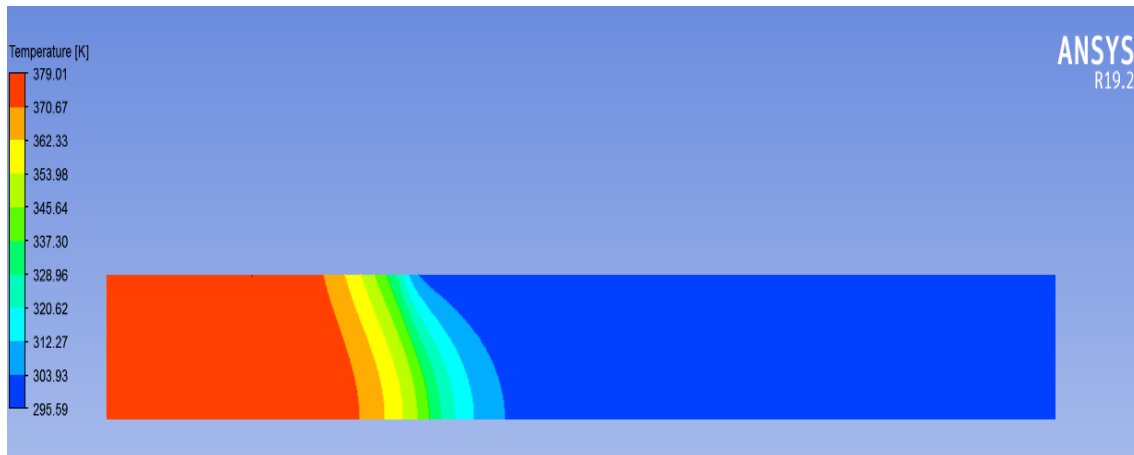
Στο Σχήμα 11 απεικονίζεται η κατανομή της θερμοκρασίας του τοιχώματος κατά την αξονική διεύθυνση. Στο συγκεκριμένο σχήμα απεικονίζεται η περίπτωση των 100°C ως θερμοκρασία κορεστή και η θερμοκρασία εξόδου είναι 21°C, όπως σε όλες τις περιπτώσεις που εξετάστηκαν. Στο σχήμα παρατηρείται ότι η θερμοκρασία στην αρχή της διάταξης είναι σταθερή (μεταβατική ζώνη) και στη συνέχεια αρχίζει να πέφτει, μέχρι να φτάσει στους 21°C. Η θερμοκρασία υπολογίζεται από το Fluent με βάση ένα θερμοκρασιακό προφίλ που του έχουμε παρέχει εμείς υποδεικνύοντας τη θερμοκρασία του τοιχώματος σε διαφορετικές θέσεις.



Σχήμα 11: Η θερμοκρασία του τοιχώματος του αντιδραστήρα, ως συνάρτηση της αξονικής θέσης (Οριακή Συνθήκη), για παροχή όγκου αέρα στον αντιδραστήρα 0.5lt/min, θερμοκρασία προθερμαντήρα 100°C και θερμοκρασία συμπυκνωτή 21°C.

Στο Σχήμα 12 παρουσιάζεται η θερμοκρασία του αερίου στη διάταξη, όπως υπολογίζεται με το παρόν μοντέλο για θερμοκρασία στην είσοδο και στον συμπυκνωτή ίση με 295.59 K (22.59 °C) και 379 K (106°C), αντίστοιχα, και παροχή ίση με 0.5lt/min. Ως οριακή συνθήκη για τη θερμοκρασία στο τοίχωμα λήφθηκε κατανομή ως προς την αξονική διεύθυνση (μεταξύ του κορεστή και του συμπυκνωτή μεσολαβεί μια μικρή μεταβατική ζώνη στην οποία η θερμοκρασία μειώνεται), η οποία εκτιμήθηκε με βάση διαθέσιμες πειραματικές μετρήσεις για τη θερμοκρασία του τοιχώματος στην έξοδο είναι. Ειδικότερα, με βάση τις τιμές της κατανομής της θερμοκρασία για το σύστημα B που δίνεται στο άρθρο των Nguyen et al. (1987), υπολογίστηκε αδιάστατο προφίλ θερμοκρασίας τοιχώματος. Από το αδιάστατο αυτό προφίλ υπολογίζονται στη

συνέχεια η κατανομή της θερμοκρασίας χρησιμοποιώντας τις τιμές της θερμοκρασίας του κορεστή και του συμπυκνωτή για κάθε πείραμα.

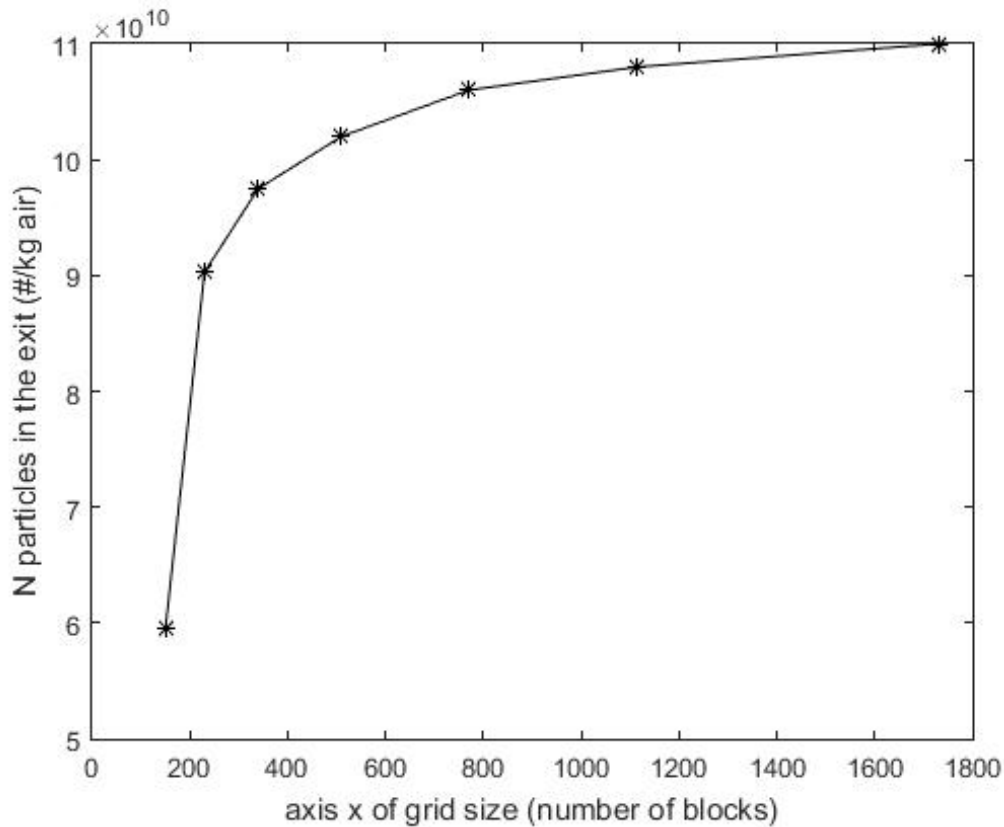


Σχήμα 12: Οι ισοθερμοκρασιακές καμπύλες-περιοχές στη διάταξη όπως υπολογίζονται και απεικονίζονται από το Ansys Fluent (Ansys R19.2) για θερμοκρασία στην είσοδο και στον συμπυκνωτή ίση με 295.59 K (22.59 °C) και 379 K (106°C), αντίστοιχα, και παροχή ίση με 0.5lt/min.

6.1.2 Χωρικό πλέγμα

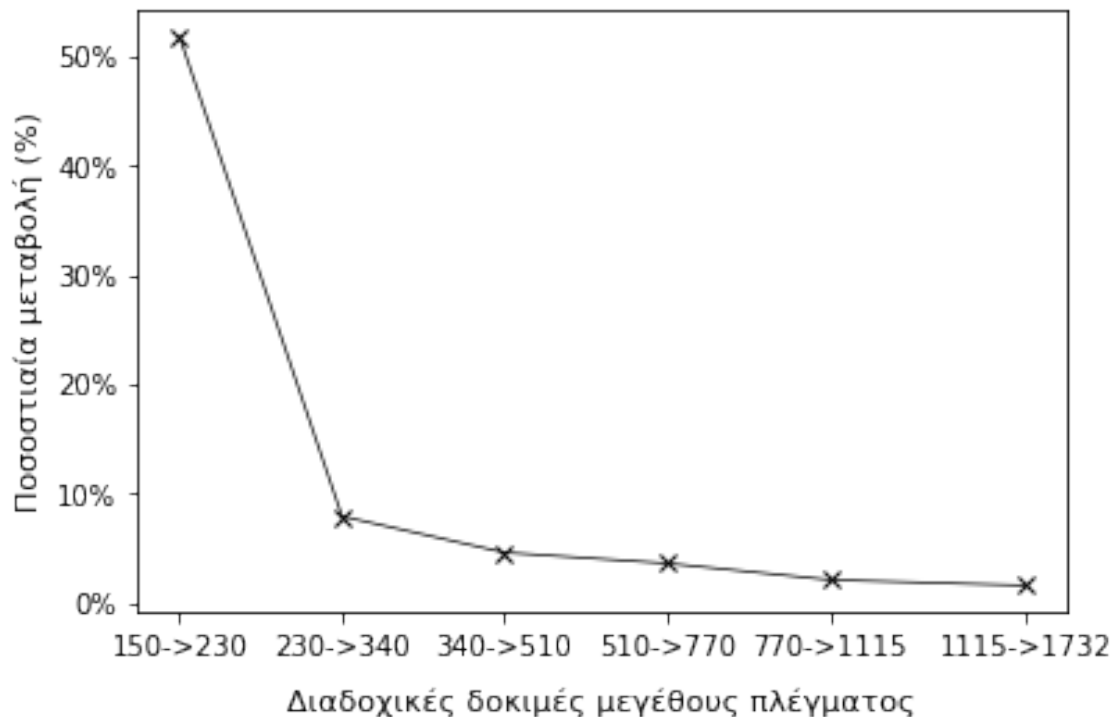
Όπως ήδη αναφέρθηκε, οι πρώτες δοκιμές που πραγματοποιήθηκαν στόχευαν στην επιλογή κατάλληλου πλέγματος διακριτοποίησης της γεωμετρίας της διάταξης. Αρχικά, ο οριζόντιος άξονας της γεωμετρίας χωρίστηκε σε 100 ίσους κόμβους και ο κάθετος άξονας αντίστοιχα σε 10. Η ακολουθία της αύξησης της διακριτοποίησης που εφαρμόστηκε ήταν απλή, καθώς σε κάθε επόμενη δοκιμή η διακριτοποίηση του κάθε άξονα αυξάνονταν γεωμετρικά κατά μιάμιση φορά, δηλαδή το επόμενο πλέγμα που δοκιμάστηκε ήταν διαστάσεων 150x15 κόμβοι, το μεθεπόμενο 230x23 και ούτω καθεξής.

Το χρονικό βήμα των δοκιμών επιλέχθηκε να είναι σταθερό 0.01s και τα τμήματα της κατανομής του μεγέθους ήταν 20. Τα αποτελέσματα των συγκεκριμένων δοκιμών παρουσιάζονται στο επόμενο διάγραμμα.



Σχήμα 13: Η υπολογιζόμενη μεταβολή του αριθμού των σωματιδίων στην έξοδο της διάταξης συναρτήσει του μεγέθους της διακριτοποίησης του χωρικού πλέγματος.

Όπως φαίνεται και στο Σχήμα 13, όσο ακόμα δοκιμάζονταν οι λιγότερο λεπτομερείς διακριτοποιήσεις - αυτές δηλαδή που αποτελούνταν από τους λιγότερους κόμβους - , τα διαδοχικά αποτελέσματα που έδινε το πρόγραμμα παρουσίαζαν μεγάλη διακύμανση μεταξύ τους, ενώ όσο οι κόμβοι του πλέγματος αυξάνονταν παρατηρούνταν η σύγκλιση που είναι εμφανής και στα διαγράμματα. Στο Σχήμα 14 φαίνεται και η ποσοστιαία μεταβολή των αποτελεσμάτων ανά διαδοχικές δοκιμές. Από το σχήμα εξάγεται το συμπέρασμα ότι για το μεγαλύτερο πλέγμα, δηλαδή 1732 x 173 κόμβοι, η τιμή της μεταβολής σε σχέση με την προηγούμενη δοκιμή είναι μικρότερη από το επιθυμητό όριο του 2% , οπότε εύλογα θα έπρεπε να είχε επιλεγεί αυτό ως πλέγμα με το οποίο θα συνεχίζονταν από εκεί και στο εξής οι υπολογισμοί. Η εφαρμογή όμως τόσο λεπτομερούς πλέγματος είχε σαν επίπτωση τη σημαντική αύξηση του χρόνου εκτέλεσης, καθώς στις δοκιμές που πραγματοποιήθηκαν με αυτό χρειαζόνταν περίπου μιάμιση μέρα για να συγκλίνει σε λύση το πρόγραμμα. Ταυτόχρονα, υποδιπλασιάζοντας το χρονικό βήμα ή διπλασιάζοντας τα διακριτά τμήματα μεγέθους των σωματιδίων, όπως και απαιτούνταν για την πιστοποίηση της μεθόδου, ο υπολογιστικός χρόνος θα αυξάνονταν σε βαθμό που δεν ήταν δυνατό να διατεθεί στα πλαίσια της παρούσας εργασίας. Για ένα συνδυασμό λοιπόν των παραπάνω λόγων, επιλέχθηκαν οι 770 κόμβοι στον οριζόντιο άξονα, καθώς ο χρόνος εκτέλεσης που απαιτούνταν ήταν σε λογικά πλαίσια και η μεταβολή των αποτελεσμάτων σε εκείνη την περιοχή ήταν πολύ κοντά στην επιθυμητή (μεταβολή 3,63% σε σχέση με το προηγούμενο πλέγμα (510x52) και μεταβολή του επόμενο πλέγματος(1115x115) 2,12% σε σχέση με αυτό).

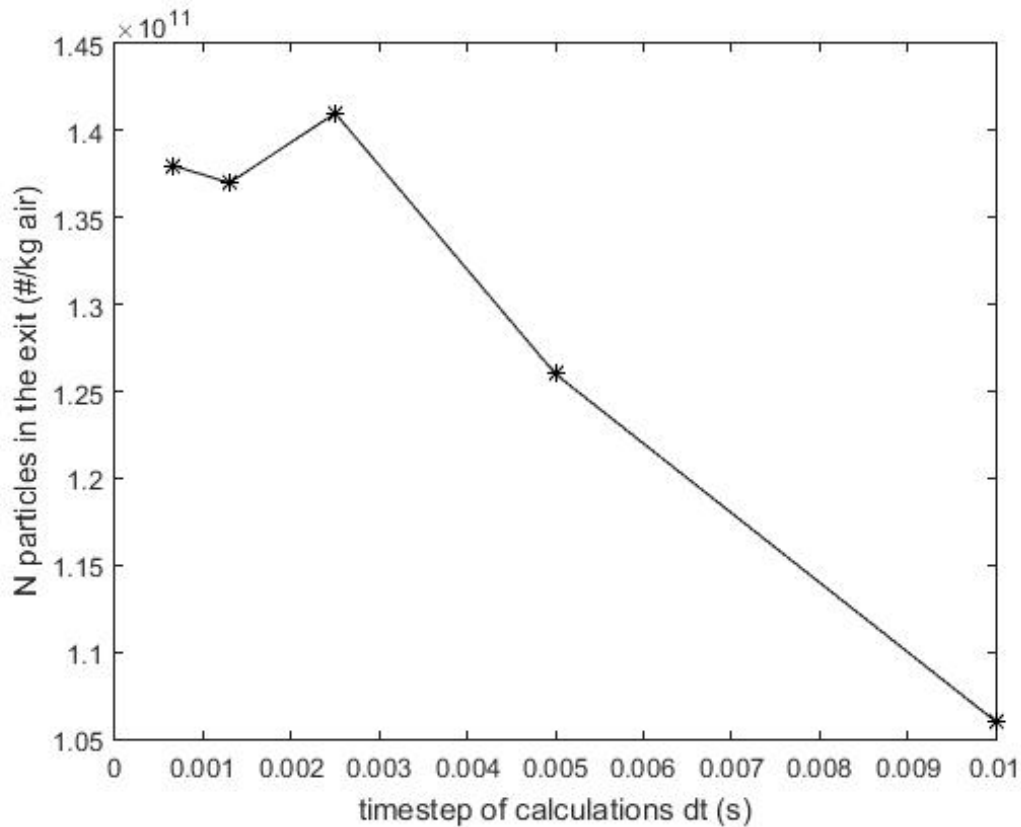


Σχήμα 14: Η ποσοστιαία μεταβολή των αποτελεμάτων ανάμεσα σε δύο διαδοχικές δοκιμές. Στον άξονα x είναι τοποθετημένες οι διαδοχικές δοκιμές μεγεθών πλέγματος (πχ 150->230 υποδηλώνει τη μεταβολή μεταξύ των αποτελεσμάτων για μεγέθη πλέγματος 150x15 και 230x23) και στον άξονα y η διαφορά μεταξύ των αποτελεσμάτων ως ποσοστό της δοκιμής που προηγήθηκε κάθε φορά.

Ακόμα, έγιναν δοκιμές για να διαπιστωθεί αν μπορεί να μειωθεί περαιτέρω ο υπολογιστικός χρόνος ελαττώνοντας τη διακριτοποίηση της κάθετης διάστασης y, για να εξακριβωθεί δηλαδή το πόσο σημαντική είναι η εξάρτηση της ακρίβειας των αποτελεσμάτων από τη διακριτοποίηση της κατακόρυφης διάστασης. Πράγματι, διαπιστώθηκε ότι ήταν δυνατό να μειωθεί κατά πολύ η διακριτοποίηση στον y άξονα. Έτσι, το πλέγμα στο οποίο καταλήξαμε και οι μετέπειτα υπολογισμοί έγιναν με τη χρήση αυτού ήταν διαστάσεων 770 x 23.

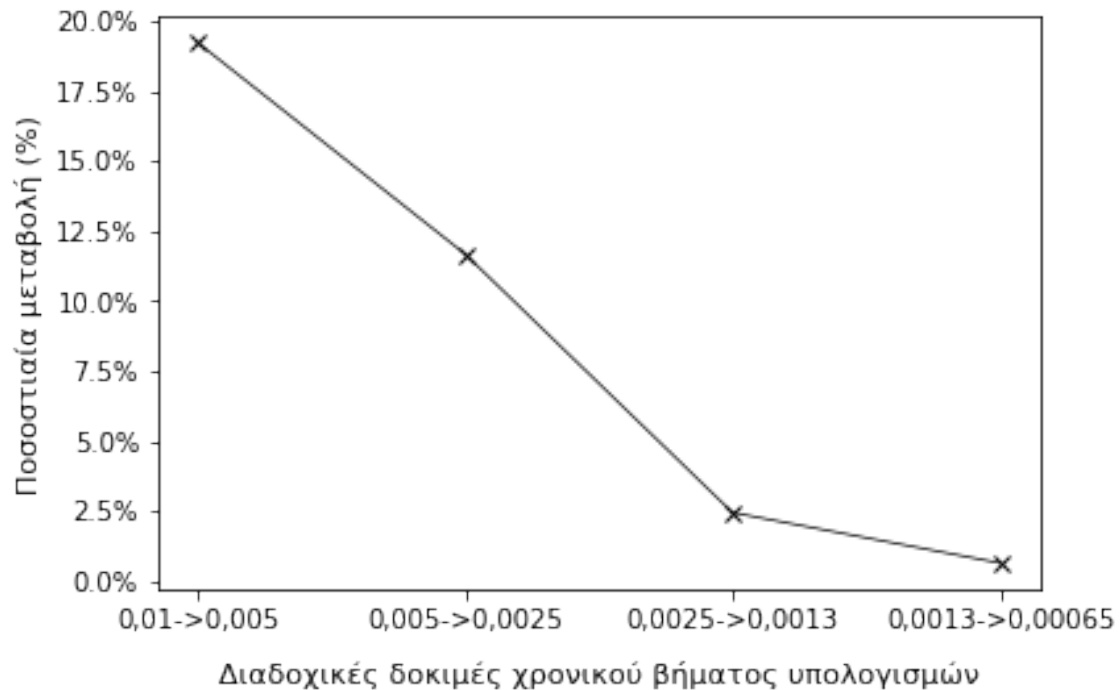
6.1.3 Χρονικό βήμα

Εφόσον το μέγεθος του πλέγματος καθορίστηκε, στη συνέχεια ακολούθησε η διαδικασία εύρεσης κατάλληλου χρονικού βήματος. Και πάλι, η εξέλιξη των δοκιμών ήταν απλή, καθώς σε κάθε δοκιμή υποδιπλασιάζονταν το χρονικό βήμα σε σχέση με το προηγούμενο. Το πρώτο χρονικό βήμα ήταν, όπως και στη διαδικασία επιλογής του πλέγματος, 0.01s, οπότε το επόμενο ήταν 0.005s, το επόμενο 0.0025s και ούτω καθεξής. Όπως φαίνεται και στο Σχήμα 15, αυτή τη φορά χρειάστηκαν λιγότερες δοκιμές, καθώς η καμπύλη σύγκλινε πολύ γρήγορα και ήδη μετά την 3η δοκιμή (0.0025s) οι τιμές κυμαίνονται γύρω από την ίδια περιοχή και η μεταβολή τους είναι πολύ μικρή.



Σχήμα 15: Η υπολογιζόμενη μεταβολή του αριθμού των σωματιδίων στην έξοδο της διάταξης συναρτήσει του χρονικού βήματος των υπολογισμών.

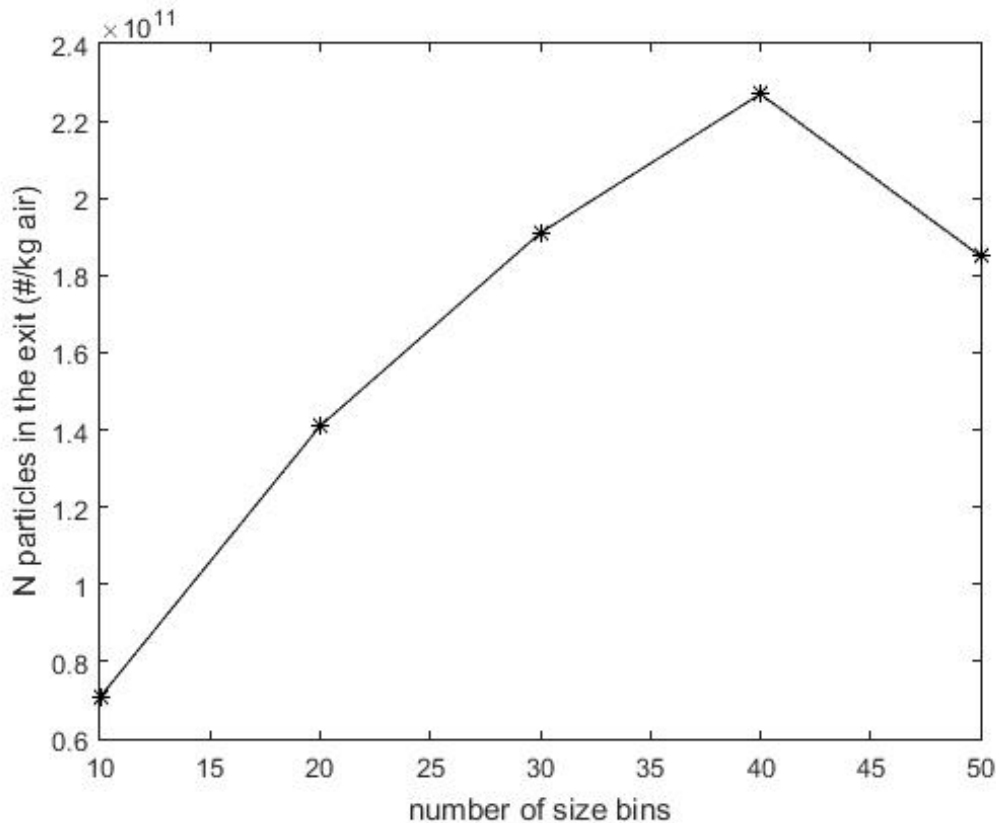
Όπως φαίνεται λοιπόν και στο Σχήμα 16, για χρονικά βήματα μικρότερα ή ίσα των 0,0025s, η διαφορά στα αποτελέσματα που δίνει το μοντέλο είναι γύρω στο 1-2%, όταν αυτά εκφράζονται ως ποσοστό μεταβολής σε σχέση με τα αποτελέσματα μια προηγούμενης δοκιμής χρονικού βήματος. Για το λόγο αυτό και σε συνδυασμό με το γεγονός ότι κάθε φορά που μειώνεται το χρονικό βήμα ο υπολογιστικός χρόνος αυξάνεται σημαντικά (για παράδειγμα ο χρόνος που απαιτείται για να ολοκληρωθούν οι υπολογισμοί για χρονικό βήμα 0,0013s είναι αρκετές περισσότερες ώρες από ότι αυτός που απαιτείται για χρονικό βήμα 0,0025s) επιλέχθηκε ως χρονικό βήμα των υπολογισμών τα 0,0025s.



Σχήμα 16: Η ποσοστιαία μεταβολή των αποτελεμάτων ανάμεσα σε δύο διαδοχικές δοκιμές χρονικού βήματος. Στον άξονα x είναι τοποθετημένες οι διαδοχικές δοκιμές χρονικού βήματος υπολογισμών (πχ 0,01->0,005 υποδηλώνει τη μεταβολή μεταξύ των αποτελεσμάτων για χρονικά βήματα υπολογισμού 0,01s και 0,005s) και στον άξονα y η διαφορά μεταξύ των αποτελεσμάτων ως ποσοστό της δοκιμής που προηγήθηκε κάθε φορά.

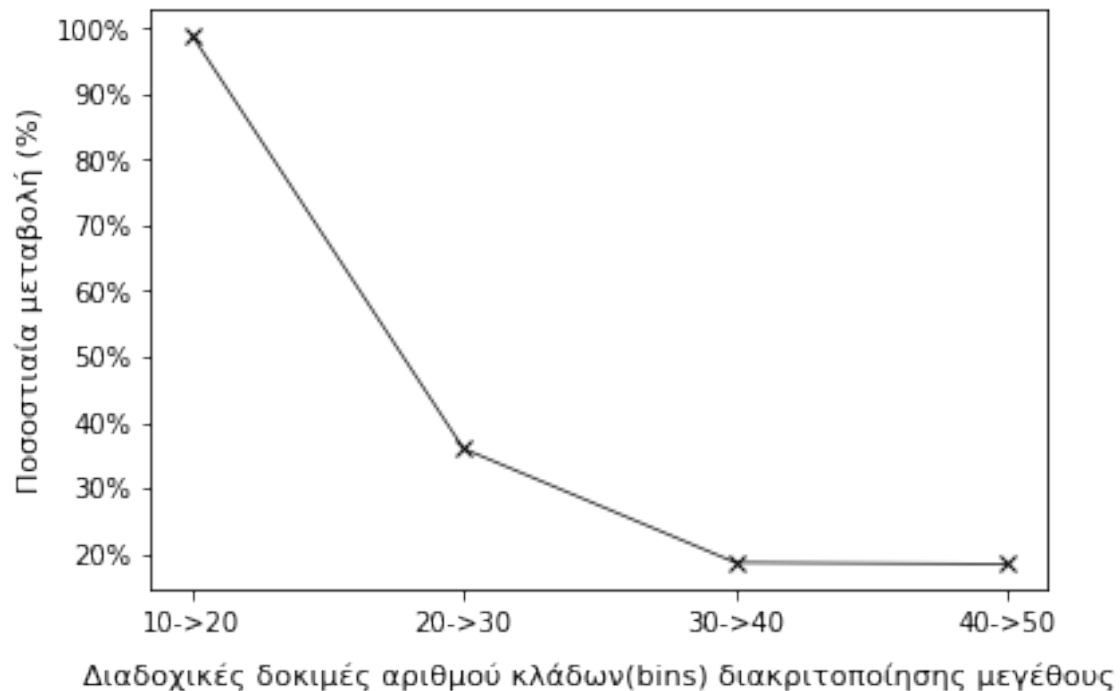
6.1.4 Διακριτοποίηση του μεγέθους των σωματιδίων

Το τελευταίο βήμα για τον καθορισμό των παραμέτρων εκτέλεσης του προγράμματος ήταν η εύρεση κατάλληλου πλήθους τμημάτων διακριτοποίησης. Στη συγκεκριμένη περίπτωση το εύρος των δοκιμών είναι περιορισμένο, καθώς για κάθε τμήμα επιλύονται ξεχωριστά οι εξισώσεις της συμπύκνωσης και της πυρηνοποίησης μέσω του Ansys Fluent και των UDF, όπως έχει αναλυθεί λεπτομερώς στα προηγούμενα κεφάλαια, και το πρόγραμμα έχει άνω όριο τις 50 UDF. Έτσι, δοκιμάστηκαν διαφορετικά πλήθη UDF ανά δεκάδες, δηλαδή 10, 20, 30, 40 και 50 κλάδοι διακριτοποίησης του μεγέθους των σωματιδίων. Στο Σχήμα 17 είναι εμφανής η διαφορά με τις προηγούμενες περιπτώσεις από άποψη πολυπλοκότητας του προβλήματος επιλογής παραμέτρων, αφού μεταξύ των διαφορετικών δοκιμών εμφανίστηκε σημαντική διακύμανση μεταξύ των τιμών του πλήθους σωματιδίων στην έξοδο.



Σχήμα 17: Η υπολογιζόμενη μεταβολή του αριθμού των σωματιδίων στην έξοδο της διάταξης συναρτήσει του αριθμού των κλάσεων μεγέθους.

Όπως φαίνεται στο σχήμα, μετά τα 30 bins, η τιμή των σωματιδίων στην έξοδο κορυφώνεται για 40 bins, σε μια αύξηση της τάξης του 19% σε σχέση με τα 30 bins, για να ξαναπέσει στα 50 bins, σε μια μείωση της τάξης του 18%. Η συμπεριφορά αυτή υποδηλώνει σύγκλιση με ταλάντωση γύρω από την τελική λύση και έχει παρατηρηθεί και στη δοκιμή και την αξιολόγηση της μεθόδου (Mitrakos and Vouros 2022). Η ίδια συμπεριφορά αυτή αναμένονταν και εδώ. Ωστόσο, λόγω του ορίου των επιπλέον εξισώσεων που μπορούν να επιλυθούν με τον Fluent, δεν είναι δυνατή η δοκιμή με περισσότερα τμήματα, ώστε να επαληθευτεί και εδώ η συμπεριφορά αυτή. Μπορεί επομένως να υποτεθεί από το σχήμα ότι για περισσότερα bins η τιμή του μεγέθους των σωματιδίων θα αρχίσει πλέον να συγκλίνει, αφού πλέον φαίνεται ότι υπάρχει μια περιοχή γύρω από την οποία η τιμή αυτή διακυμαίνεται με σχετικά μικρότερες αποκλίσεις. Στο Σχήμα 18 αποτυπώνεται αυτή ακριβώς η ποσοστιαία μεταβολή.



Σχήμα 18: Η ποσοστιαία μεταβολή των αποτελεσμάτων ανάμεσα σε δύο διαδοχικές δοκιμές αριθμού κλάδων διακριτοποίησης του μεγέθους. Στον άξονα x είναι τοποθετημένες οι διαδοχικές δοκιμές αριθμού τμημάτων (πχ 10->20 υποδηλώνει τη μεταβολή μεταξύ των αποτελεσμάτων για αριθμό κλάδων 10 και 20) και στον άξονα y η διαφορά μεταξύ των αποτελεσμάτων ως απόλυτη τιμή του ποσοστού της δοκιμής που προηγήθηκε κάθε φορά.

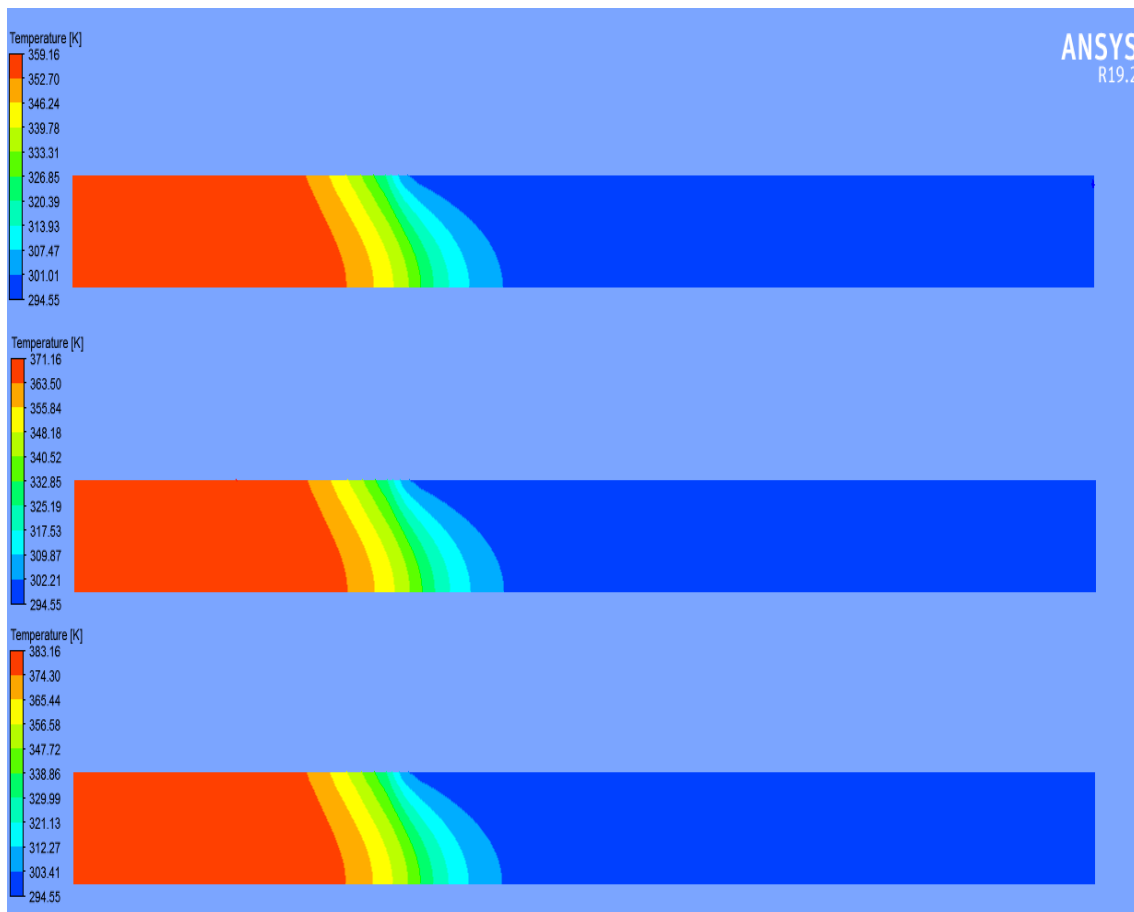
Όπως λοιπόν μπορεί να διαπιστωθεί, ο αριθμός των 50 τμημάτων δεν είναι αρκετός για την σύγκλιση των αποτελεσμάτων σε μεγαλύτερη ακρίβεια. Ωστόσο, η ακρίβεια που έχει επιτευχθεί μπορεί να θεωρηθεί ικανοποιητική για τέτοιου είδους προβλήματα. Παρόλα αυτά, ενδιαφέρονσα είναι η παρατήρηση ότι διαφορά των αποτελεσμάτων που προκύπτουν για 30 και 50 τμήματα είναι -3,24%. Το γεγονός αυτό σε συνδυασμό με τον πολύ μεγάλο υπολογιστικό χρόνο που απαιτεί η εκτέλεση του προγράμματος για 50 τμήματα (γύρω στις 48 ώρες), οδήγησαν στην επιλογή των 30 τμημάτων για τις δοκιμές της επόμενης φάσης.

6.2 Αποτελέσματα προσομοίωσης διαφορετικών πειραματικών συνθηκών

6.2.1 Φαινομενολογία - Ανάλυση φυσικών μηχανισμών

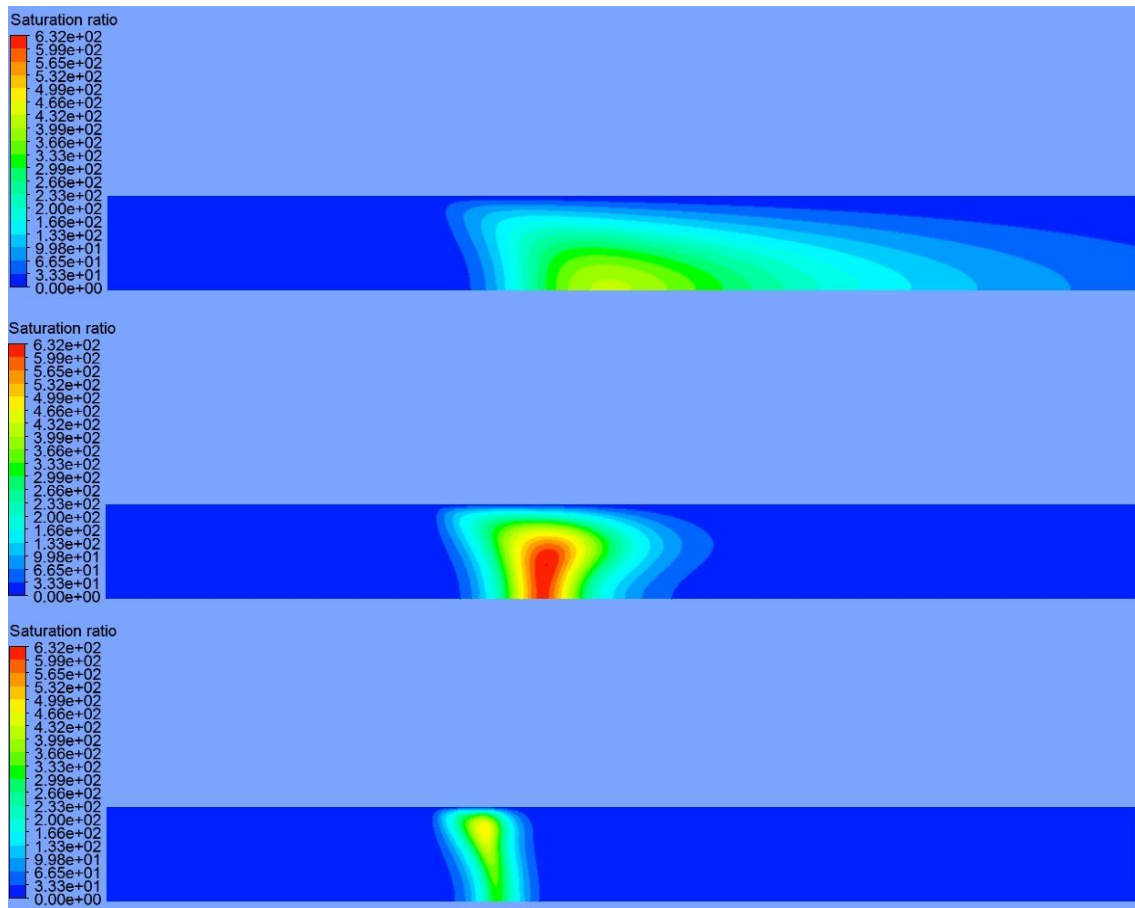
Στη δεύτερη φάση των δοκιμών έλαβε χώρα η εκτέλεση του προγράμματος για διαφορετικά θερμοκρασιακά προφίλ σε κάθε δοκιμή, μεταβάλλοντας δηλαδή τη θερμοκρασία του κορεστή και άρα όλο το προφίλ της θερμοκρασίας μέσα στη διάταξη, σύμφωνα με τα πειραματικά δεδομένα που είναι διαθέσιμα στην εργασία των Nguyen et al. (1987). Στην εργασία των Nguyen et al. (1987), παρέχονται γραφικά αποτελέσματα για την θερμοκρασία του τοιχώματος μόνο για μία περίπτωση για το σύστημα B που εξετάζεται. Από τα δεδομένα αυτά, στην παρούσα εργασία, υπολογίζεται η αδιάστατη

αξονική κατανομή της θερμοκρασίας του τοιχώματος. Θεωρώντας ότι αυτή παραμένει σταθερή για όλα τα πειράματα με την ίδια παροχή, και διαφορετική θερμοκρασία κορεστή, (άρα και προθερμαντήρα) εκτιμάται στη συνέχεια η αξονική κατανομή της θερμοκρασίας για κάθε πείραμα. Οι αξονικές κατανομές που υπολογίζονται με την παραπάνω διαδικασία εισάγονται ως οριακή συνθήκη για την θερμοκρασία του τοιχώματος. Στην παρούσα εργασία έγιναν δοκιμές ανά δύο θερμοκρασίες από 86 έως 110°C. Σε όλες τις περιπτώσεις η θερμοκρασία εξόδου ήταν 21°C. Στο Σχήμα 19 παρουσιάζονται τρία θερμοκρασιακά προφίλ, για τις ακραίες θερμοκρασίες 86 και 110°C και για μια μέση θερμοκρασία 98°C, όπως υπολογίζονται και απεικονίζονται από το Ansys Fluent.



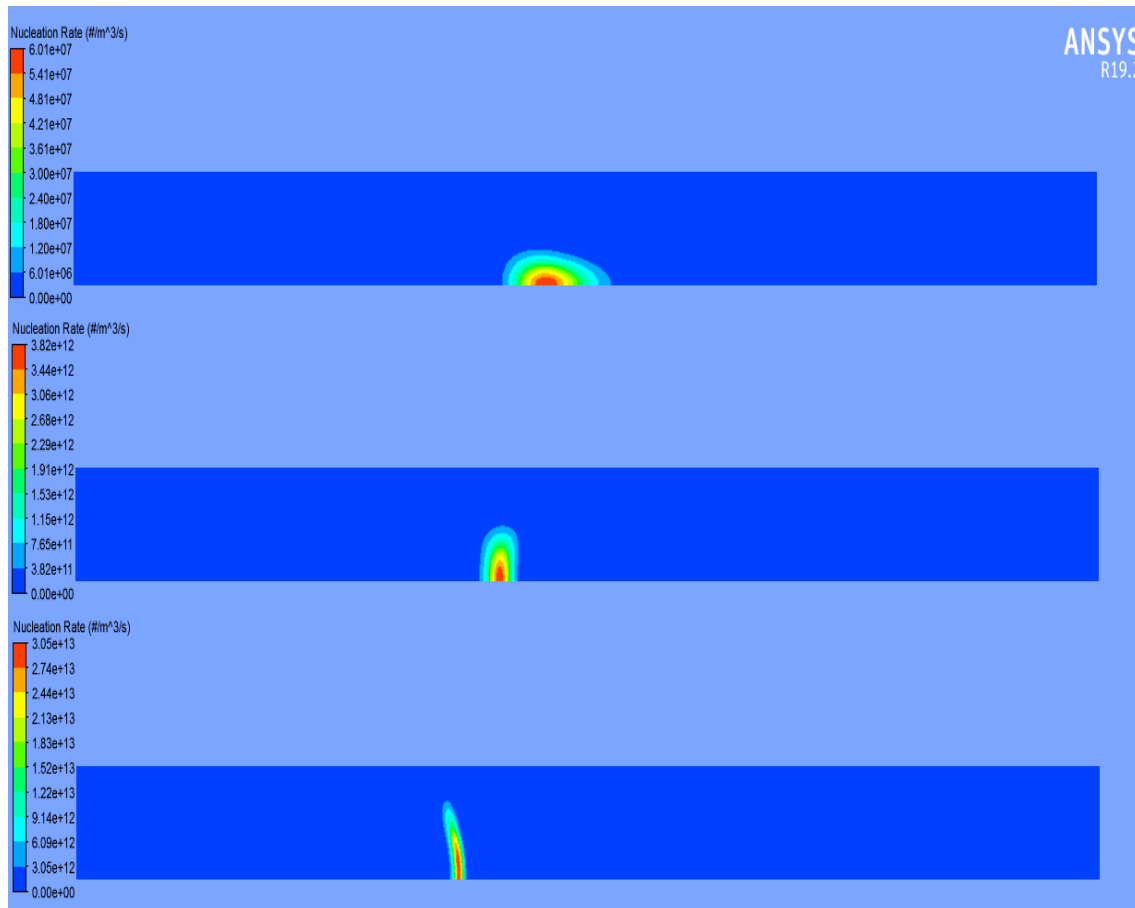
Σχήμα 19: Το προφίλ της θερμοκρασίας στη διάταξη για 86°C(359,16K), 98°C(371,16K) και 110°C(383,16K).

Παρατηρούμε ότι τα θερμοκρασιακά προφίλ για τις διαφορετικές θερμοκρασίες κορεσμού είναι πανομοιότυπα στην όψη. Αυτό συνεπάγεται ότι η πτώση από τη θερμοκρασία κορεσμού στη θερμοκρασία εξόδου είναι πιο απότομη για τις υψηλότερες θερμοκρασίες. Από τις σχέσεις του κεφαλαίου 3.3.1.1 δεν είναι εμφανής ποιά είναι η ακριβής εξάρτηση του ρυθμού πυρηνοποίησης από τη θερμοκρασία. Μια καινούργια μελέτη (Laufersky and Nann 2019) καταλήγει στο συμπέρασμα ότι αυξάνοντας τη θερμοκρασία ο ρυθμός, η κρίσιμη τιμή του υπερκορεσμού μειώνεται και ταυτόχρονα αυξάνεται ο ρυθμός πυρηνοποίησης. Το παραπάνω επιβεβαιώνεται και από τα διαγράμματα που ακολουθούν.



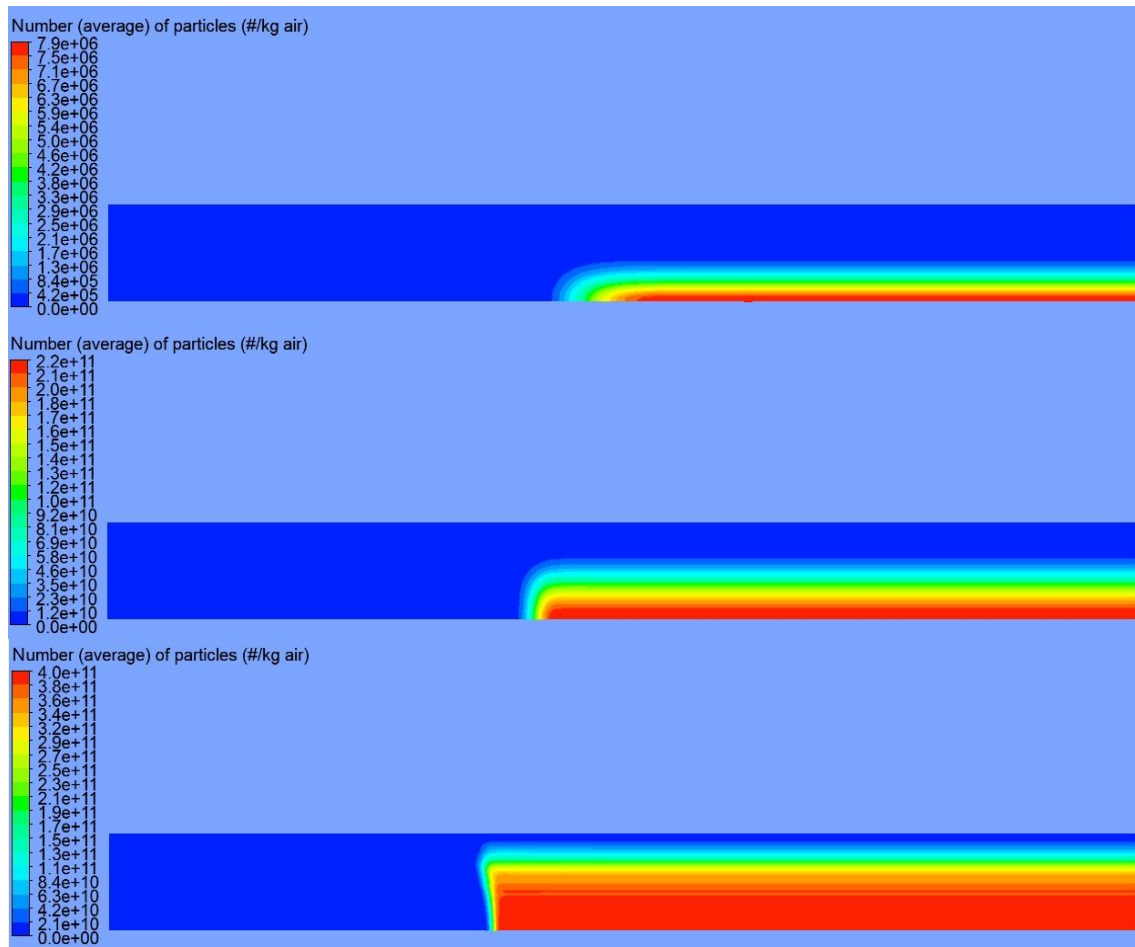
Σχήμα 20: Η κατανομή του λόγου κορεσμού S στη διάταξη για $86^{\circ}\text{C}(359,16\text{K})$, $98^{\circ}\text{C}(371,16\text{K})$ και $110^{\circ}\text{C}(383,16\text{K})$.

Στο Σχήμα 20 παρατηρούμε ότι η αύξηση της θερμοκρασίας κορεστή έχει σημαντική επίπτωση στην τιμή του λόγου κορεσμού, αλλά κυρίως στην περιοχή εμφάνισής του. Όπως αναφέρθηκε στο κεφάλαιο 3, η πυρηνοποίηση ανακουφίζει το σύστημα του αερολύματος από τον υπερκορεσμό και ουσιαστικά το οδηγεί ξανά στην ισορροπία. Είναι πιθανό λοιπόν, καθώς οι μεγάλες τιμές του ρυθμού πυρηνοποίησης που παρατηρούνται για τις υψηλότερες θερμοκρασίες, να ρίχνουν την τιμή του υπερκορεσμού, καθώς αντλούν συνεχώς μόρια από τον υπέρκορο ατμό. Έτσι, όπως φαίνεται και στο επόμενο σχήμα (Σχήμα 21), η τιμή του λόγου κορεσμού δεν φαίνεται ούτε να έχει γραμμική εξάρτηση από τη θερμοκρασία ούτε να έχει κάποια σημαντική επίδραση στις τιμές του ρυθμού πυρηνοποίησης, ενώ αντίθετα μεγάλοι ρυθμοί πυρηνοποίησης συνεπάγονται σημαντική και απότομη πτώση του λόγου κορεσμού.



Σχήμα 21: Η κατανομή του ρυθμού σχηματισμού σωματιδίων λόγω πυρηνοποίησης στη διάταξη, $J(\#/m^3/s)$, για θερμοκρασίες κορεσμού $86^\circ\text{C}(359,16\text{K})$, $98^\circ\text{C}(371,16\text{K})$ και $110^\circ\text{C}(383,16\text{K})$.

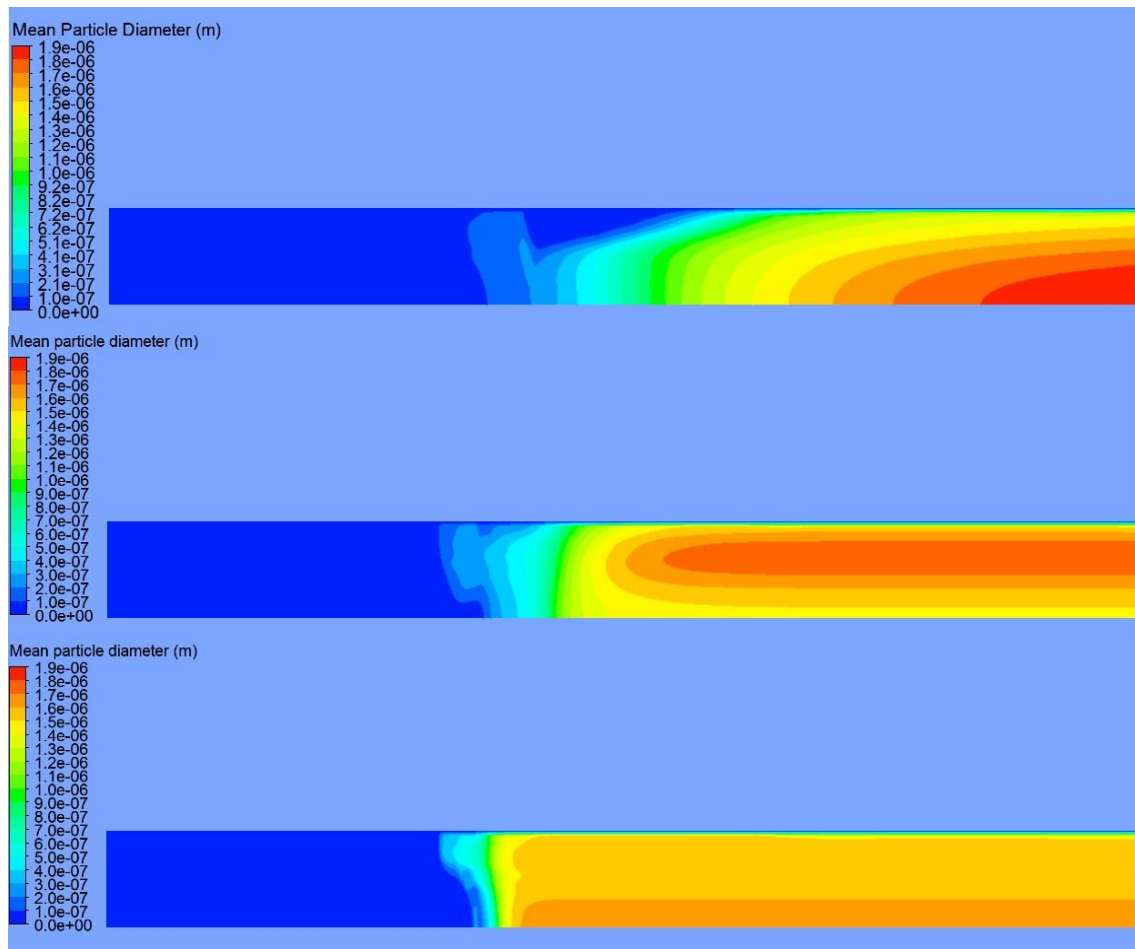
Από το Σχήμα 21 συμπεραίνεται ότι όσο μεγαλύτερη είναι η θερμοκρασία του κορεστού (δηλαδή όσο μεγαλύτερη είναι η συγκέντρωση ατμού στην είσοδο), η περιοχή της πυρηνοποίησης ταυτόχρονα στενεύει και ο ρυθμός πυρηνοποίησης γίνεται έως και πολλές τάξεις μεγαλύτερος. Αυτό πρακτικά συνεπάγεται ότι όσο μεγαλύτερος ο ρυθμός πυρηνοποίησης, τόσο περισσότερα τα σωματίδια που παράγονται σε μία μικρή περιοχή του χώρου. Αυτό είναι αναμενόμενο να συμβαίνει, καθώς όσο περισσότερα είναι τα σωματίδια, τόσο περισσότερη ποσότητα ατμού συμπυκνώνεται σε αυτά, ελαττώνοντας έτσι το λόγο κορεσμού και επομένως και το ρυθμό πυρηνοποίησης σε στενότερη περιοχή. Αυτό συνδέεται άμεσα και με την συμπεριφορά του λόγου κορεσμού στο προηγούμενο σχήμα (Σχήμα 20). Ο χαμηλός ρυθμός πυρηνοποίησης έχει ως συνέπεια την αργή κατανάλωση της ποσότητας του ατμού λόγω συμπύκνωσης και επομένως εμφανίζεται μια εκτεταμένη περιοχή στον αγωγό με υψηλές τιμές λόγου κορεσμού. Αντίθετα, υψηλός ρυθμός πυρηνοποίησης προκαλεί απότομη μείωση της συγκέντρωσης του ατμού στην αέρια φάση μέσω αλλαγής φάσης σε μια πολύ περιορισμένη περιοχή (Σχήμα 21). Τέλος, παρατηρώντας το σχήμα γίνεται κατανοητό γιατί είναι κομβικής σημασίας η κατάλληλη διακριτοποίηση του πλέγματος και ο καθορισμός του χρονικού βήματος υπολογισμών. Στις μεγάλες θερμοκρασίες επικρατούν πάρα πολύ μεγάλοι ρυθμοί πυρηνοποίησης, οι οποίοι εμφανίζονται σε πολύ μικρή περιοχή του χώρου και για ένα πολύ μικρό χρονικό διάστημα, και έτσι είναι πιθανό με άστοχη επιλογή των προαναφερθεισών παραμέτρων κατά τις επαναλήψεις στην εκτέλεση του προγράμματος να χανθεί σημαντικός αριθμός σωματιδίων.



Σχήμα 22: Η κατανομή αριθμού των παραγόμενων σωματιδίων στη διάταξη για θερμοκρασίες κορεσμού 86°C (359,16K), 98°C (371,16K) και 110°C (383,16K).

Στο σχήμα απεικονίζεται η κατανομή του αριθμού των σωματιδίων στη διάταξη. Όπως έχει ήδη αναφερθεί, μόνο η διαδικασία της ομογενούς πυρηνοποίησης μεταβάλλει τον αριθμό των σωματιδίων, οπότε τα αποτελέσματα που απεικονίζονται στο σχήμα είναι αναμενόμενα. Όσο μεγαλύτεροι είναι οι ρυθμοί πυρηνοποίησης που επικρατούν στη διάταξη, τόσο περισσότερα είναι τα σωματίδια που παράγονται. Όπως παρατηρείται η μεταβολή του αριθμού των σωματιδίων συμβαίνει μόνο σε μια πολύ μικρή περιοχή του χώρου, η οποία ταυτίζεται προφανώς με την περιοχή που συμβαίνει η ομογενής πυρηνοποίηση σε κάθε περίπτωση. Χαρακτηριστικό παράδειγμα αποτελεί η περίπτωση για θερμοκρασία κορεσμού 110°C , για την οποία το σχήμα της κατανομής του ρυθμού πυρηνοποίησης μέσα στη διάταξη φαίνεται να "γέρνει" προς τα πίσω και το ίδιο ακριβώς σχηματισμό εμφανίζει και η κατανομή του αριθμού των σωματιδίων. Ύστερα λοιπόν από την πολύ μικρή αυτή περιοχή που συμβαίνει η πυρηνοποίηση, το προφίλ της κατανομής του αριθμού των σωματιδίων παραμένει αμετάβλητο, όπως είναι σαφές και από την εικόνα. Όπως επίσης παρατηρείται, όσο μεγαλύτερη η θερμοκρασία του κορεστή τόσο πιο ευρεία είναι η διατομή του αγωγού μέσα την οποία σχηματίζεται σημαντικός αριθμός σωματιδίων. Το μέτωπο της πυρηνοποίησης, επομένως, συναντάται νωρίτερα, είναι πιο απότομο και καταλαμβάνει μεγαλύτερο μέρος της διατομής του αγωγού, όσο μεγαλύτερη είναι η θερμοκρασία του κορεστή. Η τελευταία φαίνεται να έχει σημαντική καθοριστική επίδραση όχι μόνο στη ποσοτικά χαρακτηριστικά του σχηματισμού των σωματιδίων αλλά και ποιοτική επίδραση στην

ίδια τη φαινομενολογία της αλλαγής φάσης.



Σχήμα 23: Η μέση διάμετρος (m) σωματιδίων κατά αριθμό για θερμοκρασία κορεσμού $^{\circ}\text{C}$ (359,16K), 98°C (371,16K) και 110°C (383,16K).

Στο Σχήμα 23 παρουσιάζεται η κατανομή της διαμέτρου των σωματιδίων στη διάταξη για τις διάφορες θερμοκρασίες κορεστή. Στο σχήμα παρατηρούμε ότι για τις μικρότερες θερμοκρασίες το προφίλ του μεγέθους των σωματιδίων μεταβάλλεται αισθητά κατά την αξονική κατεύθυνση, ενώ για τη μεγαλύτερη θερμοκρασία αυτό παραμένει κατά το μεγαλύτερο μέρος της διάταξης αμετάβλητο. Το πρώτο και βασικότερο συμπέρασμα που μπορεί να εξαχθεί από αυτό είναι ότι όσο μεγαλύτερες θερμοκρασίες επικρατούν τόσο μεγαλύτερη είναι η περιοχή στην οποία συμβαίνει η συμπύκνωση και άρα και η διόγκωση των σωματιδίων. Ενδεικτικό αυτού είναι η περίπτωση των 110°C , στην οποία, όπως παρουσιάστηκε στο Σχήμα 21, επικρατεί σε μια πολύ μικρή περιοχή του χώρου πολύ μεγάλος ρυθμός πυρηνοποίησης. Η αλλαγή φάσης σε αυτήν την περίπτωση λαμβάνει χώρα μέσα σε μια πολύ στενή περιοχή, με τα σωματίδια να αποκτούν το τελικό τους μέγεθος πολύ γρήγορα, κοντά στο μέτωπο της πυρηνοποίησης. Στις άλλες δύο περιπτώσεις το προφίλ της διαμέτρου των σωματιδίων είναι πιο ανομοιόμορφο και μια βασική τάση που παρατηρείται είναι η μεγέθυνση των σωματιδίων όσο αυτά κινούνται προς τα δεξιά του αγωγού, δηλαδή προς την έξοδο. Η προφανής αιτία για αυτό είναι ότι τα εμβρυϊκά σωματίδια που παράγονται κατά την ομογενή πυρηνοποίηση δεν είναι τόσο πολλά ώστε να καταναλώσουν μεγάλο μέρος της μάζας του ατμού και έτσι όσο κινούνται προς τα δεξιά διογκώνονται λόγω συμπύκνωσης. Αυτό συνάδει και με τη

μορφή της κατανομής του λόγου κορεσμού (Σχήμα 20) στο οποίο φαίνεται ότι όσο μικρότερη είναι η θερμοκρασία του κορεστή, τόσο πιο αργή είναι η μείωση του λόγου κορεσμού και άρα και η συγκέντρωση του ατμού στην αέρια φάση.

6.2.2 Σύγκριση πειραματικών-υπολογιστικών αποτελεσμάτων

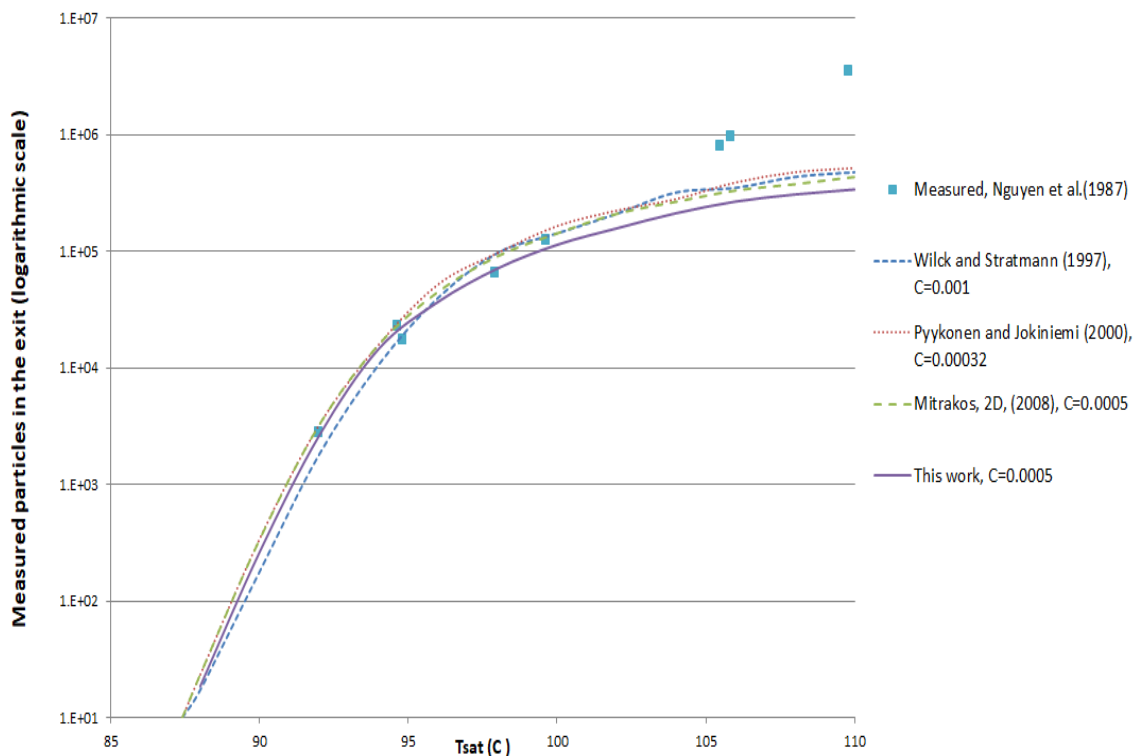
6.2.2.1 Αριθμός σωματιδίων

Στο Σχήμα 24 απεικονίζεται η μέση τιμή (bulk average) κατά αριθμό σωματιδίων στην έξοδο του συμπυκνωτή, ως συνάρτηση της θερμοκρασίας του κορεστή, όπως υπολογίζεται στην παρούσα ανάλυση. Για σύγκριση παρουσιάζονται οι πειραματικές μετρήσεις, όπως επίσης και τα αποτελέσματα δύο άλλων μοντέλων της βιβλιογραφίας, όπως αυτές παρουσιάστηκαν στο Mitrakos 2008. Για την εκτίμηση του ρυθμού πυρηνοποίησης στους παρόντες υπολογισμούς, χρησιμοποιήθηκε η τροποποιημένη θεωρία πυρηνοποίησης των Girshick and Chiu (1990) (εξ.(10)). Εξαιτίας της αδυναμίας των μακροσκοπικών θεωριών πυρηνοποίησης να περιγράψουν ποσοτικά το ρυθμό της ομογενούς πυρηνοποίησης, συνηθίζεται, σε προσομοιώσεις τέτοιου είδους, ο θεωρητικός ρυθμός πυρηνοποίησης να πολλαπλασιάζεται με μια διορθωτική σταθερά, ώστε να επιτευχθεί συμφωνία μεταξύ του υπολογιζόμενου και του πειραματικού αριθμού των σωματιδίων στην έξοδο (Nguyen et al. 1987; Phanse and Pratsinis 1989; Wilck and Stratmann 1997; Pyykönen and Jokiniemi 2000; Backman et al. 2002; Herrmann et al. 2006). Η σταθερά αυτή δεν είναι γνωστή εκ των προτέρων, αλλά πρέπει να προσδιοριστεί με δοκιμές. Στους παρόντες υπολογισμούς η τιμή της διορθωτικής σταθεράς θεωρήθηκε ίση με $C = 5 \times 10^{-4}$ (από Mitrakos 2008), η οποία είναι πολύ κοντά στις τιμές των Pyykönen and Jokiniemi (2000) ($C = 3.2 \times 10^{-4}$) και Wilck and Stratmann (1997) ($C = 1 \times 10^{-3}$).

Σε αυτό το σημείο θα γίνει μια αναφορά στα διαγράμματα που παρουσιάζονται στο σχήμα και αντλήθηκαν από τη βιβλιογραφία. Οι Pyykönen and Jokiniemi (2000) προσπάθησαν να προσομοιώσουν το συγκεκριμένο πείραμα με την τμηματική μέθοδο επιλύοντας τις εξισώσεις μεταφοράς (ΓΕΔΑ, εξίσωση μεταφοράς του ατμού) με κώδικα CFD. Συγκεκριμένα, η επίλυση των εξισώσεων έγινε χρησιμοποιώντας τον εμπορικό κώδικα CFD Fluent (παλαιότερη έκδοση από αυτή που χρησιμοποιήθηκε στην παρούσα εργασία) και στηρίζεται στις κλασικές μεθόδους επίλυσης CFD, δηλαδή στην πλήρη διακριτοποίηση των εξισώσεων και στη γραμμικοποίηση των όρων πηγής της πυρηνοποίησης και της συμπύκνωσης. Στο μοντέλο αυτό, ο όρος πηγής της συμπύκνωσης υπολογίζεται κατανέμοντας τα σωματίδια σε δύο γειτονικά τμήματα (size splitting method) (Pyykönen and Jokiniemi 2000; Jacobson and Turco 1995). Το σχήμα αυτό διατηρεί τον όγκο και τον αριθμό των σωματιδίων κάθε τμήματος, όμως, επειδή τα σωματίδια μοιράζονται σε δύο τμήματα, παρουσιάζει έντονη αριθμητική διάχυση. Τα αποτελέσματα των Pyykönen and Jokiniemi (2000) ήταν μη αποδεκτά, καθώς παρατηρήθηκε απόκλιση στον υπολογιζόμενο αριθμό των σωματιδίων μεγαλύτερη από μια τάξη μεγέθους, ενώ χρειάστηκε υπολογιστικός χρόνος μερικών ημερών. Στο Σχήμα 24 για τα αποτελέσματα που αντιστοιχούν στους Pyykönen and Jokiniemi έχει χρησιμοποιηθεί άλλος τρόπος για να υπολογιστούν τα μεγέθη της ρευστομηχανικής.

Παρατηρώντας το σχήμα, φαίνεται ότι δεν υπάρχει κάποιο μοντέλο το οποίο να υπερέχει

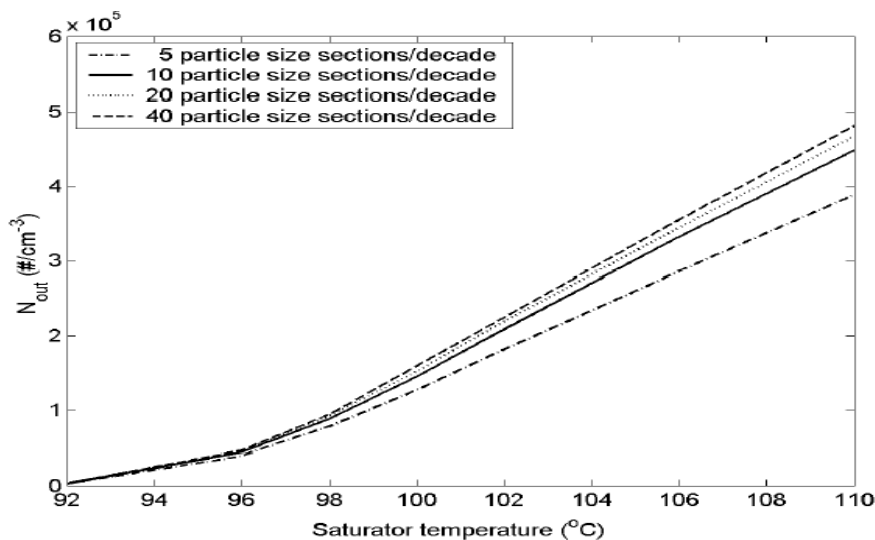
σημαντικά. Για τις μικρότερες θερμοκρασίες, τα αποτελέσματα που δίνουν τα μοντέλα είναι όλα πολύ κοντά μεταξύ τους. Ταυτόχρονα, για τις μικρές και τις μεσαίες θερμοκρασίες, είναι ικανοποιητικός και ο βαθμός προσέγγισης των πειραματικών δεδομένων, με τα μοντέλα να εναλλάσσονται ανά θερμοκρασία στο πιο προσεγγίζει καλύτερα τα πειραματικά δεδομένα. Σημειώνεται επίσης ότι, με βάση τα αποτελέσματα του σχήματος, για όλα τα μοντέλα παρατηρείται απόκλιση μεταξύ των υπολογισμών και των μετρήσεων για θερμοκρασίες κορεστή μεγαλύτερες από 100 °C. Σε αυτή την περιοχή τα μοντέλα φαίνεται να υποεκτιμούν το ρυθμό πυρηνοποίησης ή ισοδύναμα να υπερεκτιμούν το ρυθμό συμπύκνωσης. Οι Wilck and Stratmann (1997) προσπάθησαν να διασαφηνίσουν αυτές τις αποκλίσεις, πολλαπλασιάζοντας το ρυθμό της συμπύκνωσης με ένα συντελεστή μικρότερο της μονάδας, αλλά δεν κατάρθωσαν να καταλήξουν σε κάποιο συμπέρασμα. Η μέθοδος CICR (Cubic Interpolation Cumulative Remapping) (Mitrakos 2008) ουσιαστικά αποτελεί προγενέστερο μοντέλου αυτού που αναπτύχθηκε στην παρούσα εργασία και οι ουσιαστικές διαφορές με το δικό μας είναι τα προγράμματα που χρησιμοποιήθηκαν για τους υπολογισμούς ρευστομηχανικής, το πλήθος των τμημάτων διακριτοποίησης και η μέθοδος παρεμβολής για την προσέγγιση του αριθμού των σωματιδίων.



Σχήμα 24: Μέση συγκέντρωση κατά αριθμό των σωματιδίων στην έξοδο του αντιδραστήρα, ως συνάρτηση της θερμοκρασίας του κορεστή, όπως υπολογίζεται από το παρόν μοντέλο, σε σύγκριση με τους υπολογισμούς άλλων μοντέλων και με τα πειραματικά δεδομένα.

Ειδικότερα όσον αφορά στο μοντέλο μας, φαίνεται ότι προσεγγίζει πολύ ικανοποιητικά τα πειραματικά δεδομένα στις μικρές και στις μεσαίες θερμοκρασίες. Εκεί που αρχίζει να αποκλίνει σημαντικά είναι για τις μεγαλύτερες θερμοκρασίες και την προαναφερθείσα περιοχή που όλα τα μοντέλα υποεκτιμούν σε μεγάλο βαθμό το πλήθος των σωματιδίων. Στο Σχήμα 25 παρατηρεί κανείς ότι και για παλαιότερες μεθόδους υπήρχε η τάση να υποεκτιμάται σε μεγαλύτερο βαθμό ο αριθμός των σωματιδίων στην έξοδο της διάταξης

όσο λιγότερα τμήματα διακριτοποίησης δοκιμάζονταν. Ωστόσο, η επίδραση αυτή δεν φαίνεται να είναι ικανή να εξηγήσει τις αποκλίσεις για μεγαλύτερες θερμοκρασίες.



Σχήμα 25: Αριθμός σωματιδίων στην έξοδο της διάταξης για διαφορετικές θερμοκρασίες κορεσμού, όπως υπολογίστηκε από το 2d μοντέλο και τη μέθοδο CICR (από Mitrakos 2008).

6.2.3 Η κατανομή μεγέθους

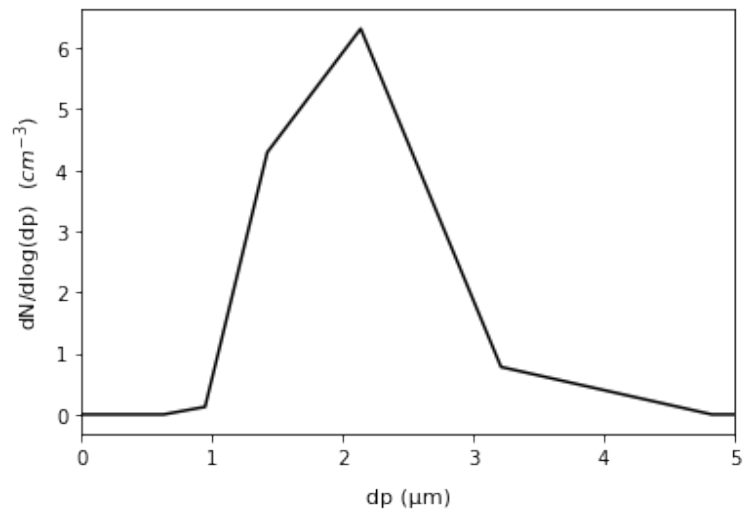
Στην παράγραφο αυτή αναλύονται τα αποτελέσματα όσον αφορά στην κατανομή μεγέθους των παραγόμενων σωματιδίων στην έξοδο του αντιδραστήρα. Η ανάλυση της κατανομής του μεγέθους των σωματιδίων είναι πολύ σημαντική τόσο για την πιστοποίηση της αποτελεσματικότητας του μοντέλου όσο και για την εξαγωγή χρήσιμων συμπερασμάτων για τη φαινομενολογία του πειράματος. Στην περίπτωση μας δεν κατέστη δυνατό να συγκριθούν τα υπολογιστικά με τα πειραματικά δεδομένα της εργασίας του Nguyen (Nguyen et al.1987), καθώς σε εκείνη την εργασία υπάρχουν δεδομένα μόνο για την περίπτωση που η παροχή στον αντιδραστήρα ήταν 1lt/λεπτό, ενώ το υπολογιστικό μοντέλο της παρούσας εργασίας είχε εκτελεστεί μόνο για 0,5lt/λεπτό.

Στο Σχήμα 26 παρουσιάζεται η κατανομή μεγέθους των παραγόμενων σωματιδίων στην έξοδο του αντιδραστήρα για τρεις διαφορετικές θερμοκρασίες κορεσμού. Οι κυριότερες διαφορές μεταξύ των διαγραμμάτων, πέραν φυσικά της κλίμακάς τους, είναι οι εξής δύο. Η πρώτη διαφορά που εμφανίζεται είναι ότι όσο μεγαλώνει η θερμοκρασία κορεσμού, το σχήμα της κατανομής γίνεται πιο οξύ και απότομο, κάτι που πρακτικά σημαίνει ότι όλο και μεγαλύτερος αριθμός σωματιδίων συγκεντρώνεται γύρω από τις αιχμές των κατανομών. Η δεύτερη διαφορά είναι ότι παρατηρείται μια τάση μετατόπισης των αιχμών των κατανομών προς τα αριστερά, δηλαδή μειώνεται η διάμετρος που χαρακτηρίζει το μεγαλύτερο πλήθος σωματιδίων. Όσο μεγαλύτερος είναι ο ρυθμός πυρηνοποίησης, τόσο περισσότερα είναι τα σωματίδια στα οποία πρέπει να μοιραστεί ο διαθέσιμος ατμός στην αέρια φάση κατά τη συμπύκνωση. Αυτό έχει ως άμεση συνέπεια, όσο περισσότερα είναι τα σωματίδια, τόσο να μειώνεται το τελικό τους μέγεθος. Από την άλλη όσο πιο μικρός είναι ο ρυθμός πυρηνοποίησης, τόσο πιο λίγα είναι τα σωματίδια στα οποία μοιράζεται ο ατμός και τόσο μεγαλύτερο το τελικό τους μέγεθος.

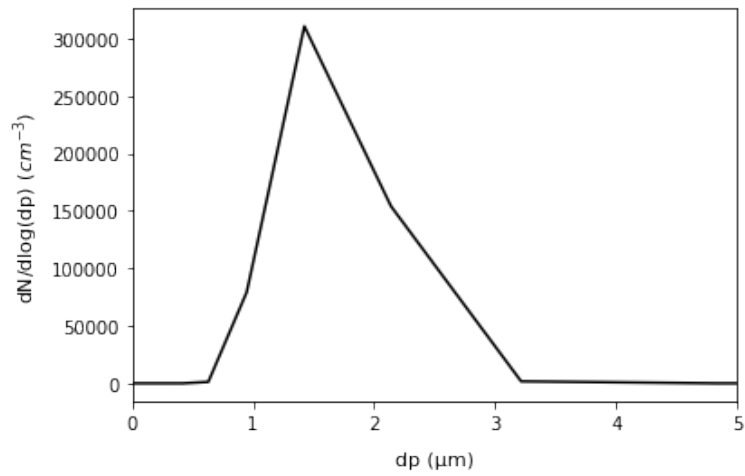
Όπως αναφέρθηκε στην εισαγωγή, το μέγεθος των σωματιδίων είναι κομβικός παράγοντας για τη μελέτη του αερολύματος, αφού έχει μεγάλη επίδραση στις ιδιότητές

του. Ελέγχοντας επομένως τον ρυθμό πυρηνοποίησης μέσω των μακροσκοπικών παραμέτρων της διαδικασίας, είναι δυνατόν να ελεγχθεί όχι μόνο ο τελικός αριθμός των σωματιδίων, αλλά και το μέγεθός τους. Ο ακριβής, ωστόσο, έλεγχος απαιτεί λεπτομερή κατανόηση και προσομοίωση της φαινομενολογίας, καθώς αυτή είναι αρκετά πολύπλοκη. Η αξιόπιστη προσομοίωση με κώδικες υπολογιστικής ρευστομηχανικής μπορεί επομένως να συνεισφέρει σημαντικά προς αυτή την κατεύθυνση.

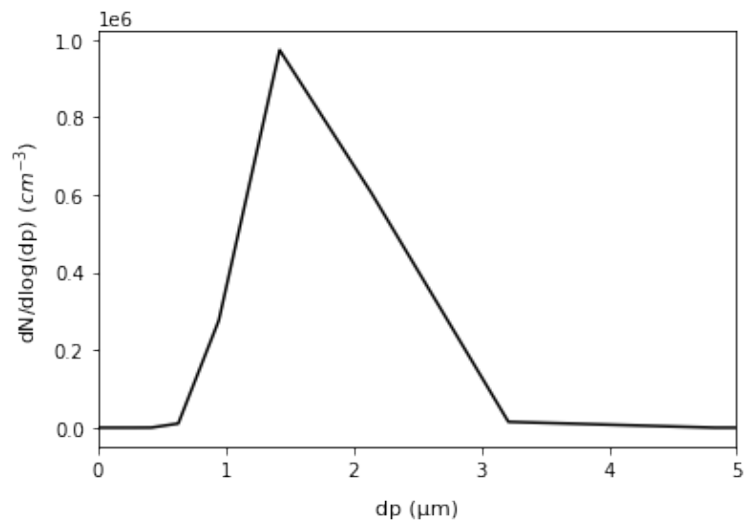
Ένα ακόμα αξιοσημείωτο συμπέρασμα που προκύπτει από την ανάλυση του Σχήματος 26 και τη μικρή διακύμανση του μεγέθους των σωματιδίων είναι ότι τα τμήματα που είναι μεγαλύτερα των $4\mu\text{m}$ παραμένουν κενά καθόλη τη διάρκεια των πειραμάτων και ανεξαρτήτως της θερμοκρασίας κορεσμού που επικρατεί. Αν κάτι τέτοιο μπορούσε να εξακριβωθεί με περεταίρω δοκιμές και αν διαπιστώνονταν ότι και για διαφορετικές πειραματικές συνθήκες δεν παράγονται σωματίδια μεγαλύτερου μεγέθους, δηλαδή τα τμήματα που αντιστοιχούν στις μεγαλύτερες διαμέτρους παραμένουν κενά, ίσως θα ήταν χρήσιμο να περιορίζονταν το εύρος μεγέθους των σωματιδίων. Κατά αυτό τον τρόπο θα αυξάνονταν τεχνητά η διακριτοποίηση σε ένα μικρότερο εύρος διαμέτρων χρησιμοποιώντας όμως το ίδιο πλήθος τμημάτων.



α)



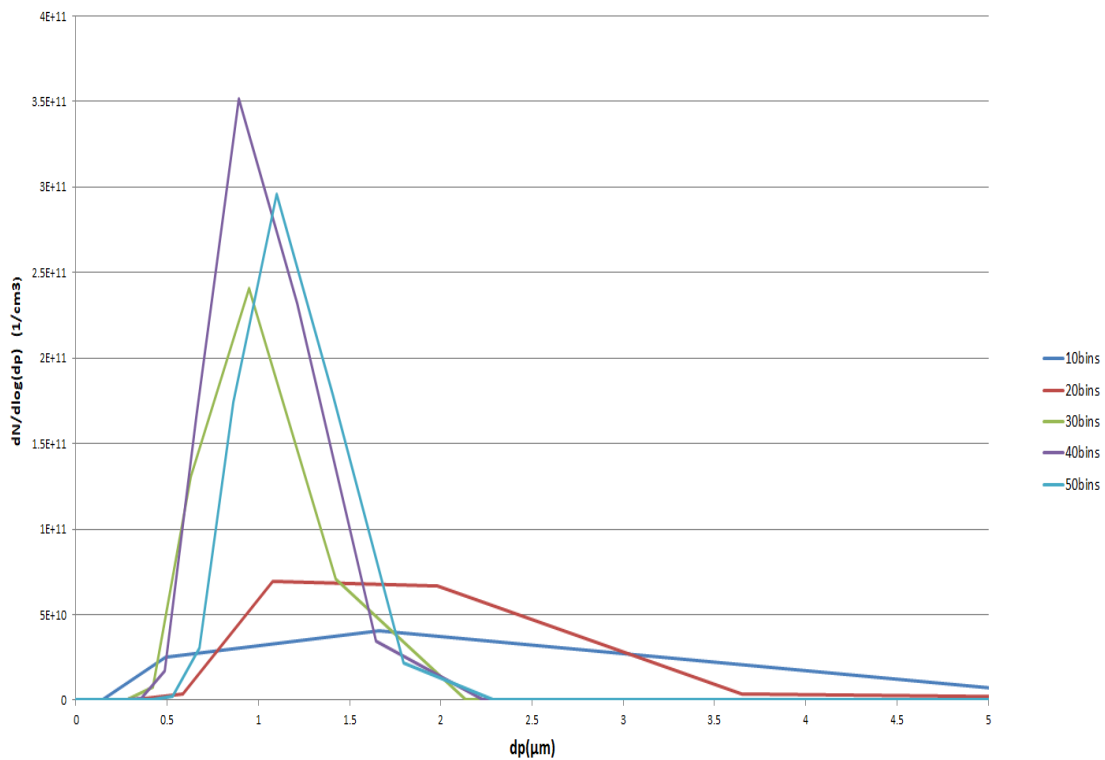
β)



γ)

Σχήμα 26: Η συνάρτηση κατανομής μεγέθους των σωματιδίων στην έξοδο του αντιδραστήρα για θερμοκρασία κορεσμού α) 86°C, β) 98°C και γ) 110°C.

Στο Σχήμα 27 παρουσιάζεται η κατανομή του μεγέθους των σωματιδίων για τα διαφορετικά πλήθη τμημάτων διακριτοποίησης του μεγέθους. Τα αποτελέσματα προέκυψαν από τις δοκιμές με το μοντέλο που περιγράφονται στο υποκεφάλαιο 6.1. Στο διάγραμμα είναι καταρχάς εμφανές ότι για τα μικρότερα πλήθη τμημάτων εμφανίζεται αριθμητική διάχυση, καθώς όπως φαίνεται οι κατανομές που αντιστοιχούν στα λιγότερα τμήματα έχουν μεγαλύτερο εύρος διαμέτρων και ταυτόχρονα μικρότερες κορυφές. Επίσης, παρατηρώντας το σχήμα των κατανομών συμπεραίνουμε ότι τα 10 και 20 τμήματα διακριτοποίησης δεν είναι ικανά να παρέχουν ακριβή αποτελέσματα, καθώς αποκλίνουν σε πολύ μεγάλο βαθμό σε σχέση με τα περισσότερα τμήματα. Από την άλλη, τα σχήματα που παράγει το μοντέλο για 30, 40 και 50 τμήματα διακριτοποίησης είναι όλα πολύ κοντά μεταξύ τους και φαίνεται ότι επιτυγχάνεται ως ένα βαθμό η επιθυμητή σύγκλιση. Τα παραπάνω επιβεβαιώνουν και τα αποτελέσματα του Σχήματος 18 και την επιλογή των 30 τμημάτων διακριτοποίησης. Τέλος, παρατηρούμε και πάλι ότι μοντέλο για τα 40 τμήματα προβλέπει μεγαλύτερο πλήθος σωματιδίων στην έξοδο από τις περιπτώσεις των 30 και από των 50 τμημάτων, καθώς πιθανότατα εκτιμά μεγαλύτερους ρυθμούς πυρηνοποίησης. Αυτό όπως εξηγήθηκε και προηγουμένως, σχετίζεται με τη μορφή της σύγκλισης της μεθόδου επίλυσης της συμπύκνωσης, η οποία γίνεται με μικρή ταλάντωση γύρω από την τελική λύση.



Σχήμα 27: Μέση συγκέντρωση κατά αριθμό των σωματιδίων στην έξοδο του αντιδραστήρα, ως συνάρτηση της θερμοκρασίας του κορεστή, όπως υπολογίζεται από το παρόν μοντέλο για διαφορετικούς αριθμούς τμημάτων μεγέθους σωματιδίων.

7 Συμπεράσματα

Στην παρούσα εργασία παρουσιάζεται και αναλύεται υπολογιστικό μοντέλο για την προσομοίωση και την αριθμητική επίλυση ροής αερολύματος με ισχυρή σύζευξη πυρηνοποίησης συμπίκνωσης. Ο βασικός στόχος ήταν η επιτυχής ενσωμάτωση του προτεινόμενου μοντέλου στον κώδικα υπολογιστικής ρευστομηχανικής Ansys Fluent ώστε να εμπλουτιστούν οι δυνατότητες αυτού όσον αφορά στην επίλυση ροών αερολύματος και των εσωτερικών διεργασιών τους. Σημαντική καινοτομία και μέρος του προτεινόμενου μοντέλου αποτέλεσε μια νέα τμηματική μέθοδος που είχε αναπτυχθεί στον Τομέα με στόχο την αποτελεσματική επίλυση των αριθμητικών προβλημάτων που εμφανίζονται κατά την επίλυση της συμπίκνωσης.

Βασικό κομμάτι της εργασίας αποτέλεσε η επίλυση της Γενικής Εξίσωσης της Δυναμικής του Αερολύματος (ΓΕΔΑ). Η ΓΕΔΑ είναι πεπλεγμένη, μέσω των διαδικασιών μετατροπής της ατμώδους φάσης σε σωματιδιακή, δηλαδή τις προαναφερθείσες ομογενή πυρηνοποίηση και συμπίκνωση, με την εξίσωση του ατμού. Οι εξισώσεις αυτές επιλύονται ταυτόχρονα σε πλήρως Eulerian σύστημα αναφοράς. Για την αριθμητική περιγραφή της συνάρτησης πυκνότητας κατανομής μεγέθους των σωματιδίων χρησιμοποιείται η τμηματική μέθοδος, διαμερίζοντας το φάσμα μεγέθους των σωματιδίων σε λογαριθμική κλίμακα. Η επίλυση βασίζεται σε μη-μόνιμη προσέγγιση, ακόμα και για τα μόνιμα προβλήματα (pseudo-transient approach). Η επίλυση των εξισώσεων μεταφοράς και δυναμικής του αερολύματος και του ατμού γίνεται μέσω κώδικα γραμμένου σε γλώσσα C που μεταφορτώνεται στο Fluent, το οποίο παράλληλα επιλύει και τις εξισώσεις του ρευστού.

Η βασική στόχευση της μεθόδου για την επίλυση της συμπίκνωσης ήταν ο επιτυχής συνδυασμός των πλεονεκτημάτων που προσφέρουν οι τμηματικές μέθοδοι, δηλαδή της ακριβούς πρόβλεψης, με την ταυτόχρονη διατήρηση του αριθμού των σωματιδίων και την εξάλειψη της αριθμητικής διάχυσης. Για την επίτευξη αυτού οι εξισώσεις της πυρηνοποίησης και της διόγκωσης (growth) και η εξίσωση του ατμού επιλύονταν με τη χρήση κινητού πλέγματος διακριτοποίησης του μεγέθους και στην συνέχεια τα σωματίδια επανατοποθετούνταν σε σταθερό πλέγμα (remapping). Η πρωταρχική αλλαγή σε σχέση με παλαιότερες τμηματικές μεθόδους που εφαρμόσαν επανατοποθέτηση σε σταθερό πλέγμα είναι ο τρόπος με τον οποίο γίνεται η συγκεκριμένη επανατοποθέτηση. Για το σκοπό αυτό χρησιμοποιούνται οι κλίσεις των κατανομών και το σχήμα τους επανασχεδιάζεται ως τραπέζιο, διατηρώντας έτσι και τον αριθμό των σωματιδίων σε κάθε τμήμα.

Η παρούσα εργασία αποτελεί μία από τις ελάχιστες που ασχολήθηκαν με την επίλυση ροών αερολύματος με ισχυρή επίδραση των εσωτερικών διεργασιών μέσω του Ansys Fluent. Για την πιστοποίηση του μοντέλου, τα αποτελέσματα που παρήγαγε συγκρίθηκαν με αυτά παλαιότερης εργασίας που αφορούσε πειραματική διάταξη αντιδραστήρα αερολύματος στρωτής ροής.

Αφού έγινε ο απαραίτητος προγραμματισμός σε γλώσσα C και το τελικό μοντέλο κατασκευάστηκε και ενσωματώθηκε στο Ansys Fluent, ακολούθησαν δύο φάσεις δοκιμών για την πιστοποίησή του. Στην πρώτη φάση ήταν απαραίτητο να καθοριστούν οι παράμετροι εκτέλεσης του υπολογιστικού μοντέλου, δηλαδή το πλέγμα της γεωμετρίας, το χρονικό βήμα και το πλέγμα διακριτοποίησης του μεγέθους. Οι δύο

Βασικοί άξονες για την επιλογή των τιμών των μεγεθών αυτών ήταν τα αποτελέσματα να μην εμφανίζουν απόκλιση μεγαλύτερη από μια επιθυμητή τιμή σε σχέση με αυτά των διαδοχικών τους δοκιμών και ταυτόχρονα ο χρόνος εκτέλεσης του προγράμματος να μην είναι υπερβολικός. Επίσης, εφόσον παρατηρούνταν σύγκλιση των αποτελεσμάτων του μοντέλου μεταξύ διαδοχικών δοκιμών, αυτό αποτελούσε μια πρώτη ισχυρή ένδειξη για την επιτυχή ενσωμάτωση του μοντέλου στο Fluent. Στη δεύτερη φάση των δοκιμών και εφόσον είχαν επιλεχθεί οι προαναφερθείσες παράμετροι, η εξέλιξη των δοκιμών αφορούσε την εφαρμογή διαφορετικών θερμοκρασιών κορεσμού κατά τα πρότυπα της πειραματικής διαδικασίας (Nguyen et al. 1987). Τα αποτελέσματα που προέκυψαν αποτέλεσαν το βασικό κριτήριο για την πιστοποίηση της επιτυχίας του μοντέλου, αφού συγκρίθηκαν τόσο με τα πειραματικά δεδομένα όσο και με τα αποτελέσματα παλαιότερων μεθόδων.

Κατά την εφαρμογή και πιστοποίηση του μοντέλου διαπιστώθηκαν τα εξής συμπεράσματα, τα οποία αφορούσαν τόσο στην εγγενή αποτελεσματικότητα της μεθόδου όσο και στο βαθμό επιτυχίας της ενσωμάτωσής του στο Ansys Fluent. Όπως διαπιστώθηκε, το μοντέλο παρείχε αρκετά ικανοποιητικά αποτελέσματα όσον αφορά στο συνολικό αριθμό των σωματιδίων που παράγονται από τη διάταξη όσο και στην κατανομή μεγέθους των σωματιδίων, μεγέθη που αποτελούσαν τις δύο βασικές παραμέτρους πιστοποίησης των αποτελεσμάτων. Ταυτόχρονα, με την επιλογή παραμέτρων εκτέλεσης που έγινε, αποφεύχθηκε το μεγάλο υπολογιστικό κόστος παλαιότερων μεθόδων. Το παραπάνω, σε συνδυασμό με το γεγονός του ότι ούτως ή άλλως το Ansys Fluent είναι ένα πολύ εύχρηστο πρόγραμμα που παρέχει ένα πολύ φιλικό περιβάλλον στο χρήστη του, αποδεικνύουν ότι έγιναν σημαντικά βήματα προς τη διευκόλυνση και τη γρηγορότερη επίλυση ροών αερολύματος μέσω της χρήσης διαδεδομένων CFD προγραμμάτων.

Από την άλλη πλευρά το μοντέλο παρουσίασε κάποιες αδυναμίες, ιδιαίτερα στις δοκιμές με τις μεγαλύτερες θερμοκρασίες κορεσμού. Η περιοχή αυτή αποτελούσε πρόβλημα για όλα τα μοντέλα της βιβλιογραφίας που συγκρίθηκαν με το δικό μας, καθώς τα αποτελέσματα τους εμφάνιζαν ανεξήγητα μεγάλη απόκλιση από τα πειραματικά δεδομένα. Το δικό μας μοντέλο εμφάνιζε λίγο μεγαλύτερη απόκλιση από τα υπόλοιπα, υποεκτιμώντας κάπως το πλήθος των σωματιδίων που παράγονταν από τη διάταξη. Η απόκλιση αυτή εντοπίσαμε ότι οφείλεται κατά κύριο λόγο στο πλήθος τμημάτων διακριτοποίησης του μεγέθους που χρησιμοποιήσαμε, κυρίως για χάριν εξοικονόμησης χρόνου, αφού η αύξηση τους συνεπάγονταν και σημαντική αύξηση του χρόνου εκτέλεσης του προγράμματος. Επίσης, σε αντίθεση με τις υπόλοιπες παραμέτρους εκτέλεσης του προγράμματος, δεν κατέστη δυνατό να προσδιοριστεί με βεβαιότητα η περιοχή τιμών του πλήθους τμημάτων διακριτοποίησης στην οποία το πρόγραμμα σύγκλιε, λόγω του ανώτατου ορίου των UDF που μπορούν να μεταφορτωθούν στο Fluent.

Για την αύξηση της ακρίβειας των υπολογισμών προτείνονται οι παρακάτω λύσεις. Η πρώτη και πιο εμφανής αλλαγή που μπορεί να εφαρμοστεί είναι η αύξηση των τμημάτων διακριτοποίησης, για την οποία το μόνο που απαιτείται είναι περισσότερος διαθέσιμος χρόνος. Όπως καταδείχθηκε με βάση τα αποτελέσματα τόσο της παρούσας εργασίας όσο και παλαιότερων το πιθανότερο είναι ότι οι δοκιμές αυτές θα έχουν άμεσα θετική επίπτωση. Άλλη μια δοκιμή που θα μπορούσε να αποφέρει θετικά αποτελέσματα είναι η πύκνωση του χωρικού πλέγματος στην περιοχή που συμβαίνει η ομογενής πυρηνοποίηση, και η επακόλουθη αραίωση του στις υπόλοιπες περιοχές

της γεωμετρίας. Με αυτό τον τρόπο είναι πιθανό διατηρώντας το μέγεθος του πλέγματος της γεωμετρίας να είναι ικανό το μοντέλο να εκτιμήσει το ίδιο ή και πιο αποτελεσματικά το ρυθμό πυρηνοποίησης, διατηρώντας ταυτόχρονα το πλήθος των τμημάτων διακριτοποίησης του μεγέθους στα 30. Αν αυτό το σενάριο ήταν επιτυχές, το μοντέλο θα παρείχε βελτιωμένα αποτελέσματα για τον ίδιο, πολύ ανεκτό χρόνο εκτέλεσης με την παρούσα εργασία. Επίσης, κατά την ανάλυση της κατανομής του μεγέθους των σωματιδίων παρατηρήθηκε ότι πολλά τμήματα διακριτοποίησης παραμένουν κενά, δηλαδή δεν παράγονται σωματίδια μεγαλύτερων διαμέτρων ποτέ και για καμία θερμοκρασία κορεσμού, τουλάχιστον όσον αφορά στο συγκεκριμένο πείραμα. Η συγκεκριμένη παρατήρηση καταδεικνύει τη δυνατότητα μείωσης του εύρους του μεγέθους που χρησιμοποιήθηκε για να καταταχτούν τα σωματίδια. Κατά αυτό τον τρόπο θα μπορούσαμε να μειώσουμε το ανώτατο όριο του σταθερού πλέγματος και έτσι το μειωμένο εύρος διαμέτρων θα διακριτοποιούνταν με μεγαλύτερη λεπτομέρεια χρησιμοποιώντας το ίδιο πλήθος τμημάτων με πριν. Επομένως έτσι μπορεί να παρακαμφθεί το μειονέκτημα του ορίου πλήθους UDF που θέτει από κατασκευής το Fluent, καθώς επιτυγχάνεται εμμέσως μεγαλύτερη διακριτοποίηση. Φυσικά και οι δύο παραπάνω λύσεις δεν μπορούν να χαρακτηριστούν γενικές, καθώς εξαρτώνται άμεσα από τα δεδομένα και αποτελέσματα του εκάστοτε προβλήματος και απαιτείται προεργασία για να μπορούν να εφαρμοστούν. Συνεπώς, για τη τελευταία περίπτωση χρειάζεται πρώτα να καθοριστεί το αν ισχύουν οι υποθέσεις που έχουν να κάνουν με τη φαινομενολογία της ροής που εξετάζεται, αν δηλαδή στη συγκεκριμένη ροή παράγονται σωματίδια με μικρό εύρος διαμέτρων. Ακόμα, και για τις δύο περιπτώσεις πρέπει να καθοριστεί η ακριβής περιοχή που συμβαίνει το φαινόμενο που εκμεταλλευόμαστε, δηλαδή στην πρώτη η περιοχή που συμβαίνει η πυρηνοποίηση και στη δεύτερη το ακριβές εύρος διαμέτρων στο οποίο συγκεντρώνεται ο μεγαλύτερος αριθμός σωματιδίων.

Εν κατακλείδι, στην παρούσα εργασία αναπτύχθηκαν και πιστοποιήθηκαν νέες μέθοδοι για την προσομοίωση ροών αερολύματος και ενσωματώθηκαν σε υπολογιστικά εργαλεία. Το υπολογιστικό μοντέλο που προέκυψε κατάφερε να προβλέψει με αρκετά ικανοποιητική ακρίβεια την εξέλιξη μιας πολύπλοκης ροής αερολύματος και μάλιστα με ανεκτό υπολογιστικό κόστος. Η επιτυχής ενσωμάτωση του σε διαδεδομένο κώδικα υπολογιστικής ρευστομηχανικής αποτελεί σημαντική εξέλιξη για τον Τομέα και τους ερευνητές που ασχολούνται με τη μελέτη των εσωτερικών διεργασιών του αερολύματος, καθώς απεμπλέκει το χρήστη από τους υπολογισμούς ρευστομηχανικής και ταυτόχρονα του παρέχει το πολύ φιλικό και αξιόπιστο περιβάλλον εργασίας του Ansys Fluent. Το μοντέλο θα μπορούσε να αποτελέσει σημαντικό εργαλείο σε πεδία έρευνας όπως αυτό της ατμοσφαιρικής φυσικής και χημείας, της πυρηνικής τεχνολογίας και της ανάλυσης πυρηνικών ατυχημάτων, και στη βιομηχανική παραγωγή νανοσωματιδίων. Επίσης, θα μπορούσε να αποτελέσει το εφαλτήριο για την πλήρη ενσωμάτωση μιας γενικότερης, αυτοματοποιημένης μεθόδου επίλυσης των εσωτερικών διεργασιών του αερολύματος από το Ansys Fluent, όπως ακριβώς μπορεί να επιλύσει αυτή τη στιγμή ροές ρευστού.

Βιβλιογραφία

Bird, R. B, Stewart, W. E. Lighthfoot, E. N (1960). *Transport phenomena*. John Wiley Sons, USA.

C2ES 2010. *What is black carbon?*, Center for Climate and Energy Solutions.

Climate Clean Air Coalition 2018. *ADDRESSING BLACK CARBON EMISSION INVENTORIES*. Report by the Climate and Clean Air Coalition Scientific Advisory Panel.

Chapmann, S. and Cowlin, T.G. 1970. *The mathematical theory of non-uniform gasses*. Cambridge, Cambridge University Press.

Chock, D. P. and Winkler, S. L. (2000). A trajectory-grid approach for solving the condensation and evaporation equations of aerosols. *Atmospheric Environment*. 34, 2957.

Colbeck, I. 1998. *Introduction to Aerosol Science*, in *Physical and chemical properties of aerosols* ed. I. Colbeck. Blackie Academic Professional.

Dahneke, B. (1983). Simple kinetic theory of Brownian diffusion in vapors and aerosols, in *Theory of Dispersed Multiphase Flow*, edited by R.E.Meyer. Academic Press, New York.

David, R., Villiermaux, J., Marchal, P. Kleinm J.-P. (1991). Crystallization and precipitation engineering-IV. Kinetic model of adipic acid crystallization. *Chemical Engineering Science*. 46, 1129.

Dhaniyala, S. and Wexler, A. S. (1996). Numerical schemes to model condensation and evaporation of aerosols. *Atmospheric Environment*. 30, 919.

di Veroli, G. Y., and S. Rigopoulos. 2011. Modeling of aerosol formation in a turbulent jet with the transported population balance equation-probability density function approach. *Phys. Fluids* 23 (4):043305. doi: 10.1063/1.3576913.

Drossinos, Y. and Housiadas, C. (2006). Aerosol Flows, in *Multiphase Flow Handbook*, C T Crowe, ed., CRC Press - Taylor Francis, Boca Raton (FL).

Eckert, E. R. G. and Drake R. M. Jr (1972). *Analysis of heat and mass transfer*. McGraw-Hill, USA.

Erikäinen, H., Watanabe, W., Kauppinen, E. I. and Ahonen, P. P. 2003. Aerosol flow reactor method for synthesis of drug nanoparticles. *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics*. 55, 357.

Fisenko, S.P. and Brin, A.A (2006). Heat and mass transfer and condensation interference in a laminar flow diffusion chamber. *J. Heat Mass Trans.* 49, 1004.

Fladerer, A., Kulmala, M. and Strey, R. (2002). Test of the applicability of Kulmala's analytical expression for the mass flux of growing droplets in highly supersaturated systems: growth of homogeneously nucleated water droplets. *Journal of Aerosol Science*. 33, 391.

- Frederix, E. M. A., A. K. Kuczaj, M. Nordlund, A. E. P. Veldman, and B. J. Geurts. 2017. Application of the characteristics- based sectional method to spatially varying aerosol formation and transport. *Journal of Aerosol Science*. 104: 123–40. doi: 10.1016/j.jaerosci.2016.10.008.
- Frenkel, J.(1995). *Kinetic theory of Liquids*. New York, Dover.
- Friedlander, S. K. 2000. *Smoke, dust, and haze – Fundamentals of aerosol dynamics*. 2nd ed. New York: Oxford University Press.
- Fuchs, N. A. (1964). *The mechanics of aerosols*. Dover Publication Inc., New York.
- Fuchs, N. A. and Sutugin, A. G. (1971). *High dispersed aerosols*, in *Topics in Current Aerosol Research (Part 2)*, edited by G.M.Hindy and J.R.Brock. Pergamon, New York
- Garcia, M., L. E. Herranz, and M. P. Kissane. 2016. Theoretical assessment of particle generation from sodium pool fires. *Progress in Nuclear Energy*. 310:470–83. doi: 10.1016/j.nucengdes.2016.10.024.
- Gelbard, F., Tambour, Y. and Seinfeld, J. H. (1980). Sectional representation for simulating aerosol dynamics. *Journal of Colloid and Interface Sciences*. 76, 541.
- Gelbard, F. (1990). Sectional representation for simulating aerosol dynamics. *Journal of Colloid and Interface Sciences*. 76, 541.
- Girshick, E. R. and Chiu, C.-P. (1990). Kinetic nucleation theory: A new expression for the rate of homogeneous nucleation from ideal supersaturated vapor. *Journal of Chemical Physics*. 93,1273
- Herranz, L. E., M. Garcia, M. P. Kissane, and C. Spengler. 2018. A lumped parameter modelling of particle generation from Na-pool fires in SFR containments. *Progress in Nuclear Energy*. 109:223–32. doi: 10.1016/j.pnucene.2018.08. 015.
- Hirschfelder, J.O., Curtiss, C.F. and Bird, R.B. (1964). *The Molecular Theory of Gases and Liquids*, Wiley.
- Hinds, W. C. (1999). *Aerosol technology: properties, behaviour and measurements of airborne particles*, John Wiley Sons Inc., New York.
- Hounslow, M.J., Ryall, R.L. and Mrashall, V.R. (1998). A discretised population balance for nucleation, growth and aggregation. *A.I.Ch.E. Journal*, 34, 1821.
- Hu, Q., Rohani, S. and Jutan, A. (2005). New numerical method for solving the dynamic population balance equations. *A.I.Ch.E. Journal*. 51, 3000.
- Jacobson, M. Z. (1999). *Fundamentals of Atmospheric Modeling*. Cambridge Univ. Press, New York.
- Katoshevski, D. and Seinfeld, J. H. (1997). Analytical Solution of the Multicomponent Aerosol General Dynamic Equation-without Coagulation. *Aerosol Science and Technology*. 24, 541.
- Kulmala, M. and Vesala, T. (1991). Condensation in the continuum regime. *Journal of Aerosol Science*. 22, 337.

- Kumar, S. and Ramkrishna, D. (1996). On the solution of population balance eq discretization-II. A moving pivot technique. *Chemical Engineering Science*. 51, 1333/1334.
- Laaaksonen, A., Vesala, T, Kulmala, M., Winkler, P. M, and Wagner, P. E. (2005). Commentary on cloud modelling and the mass accommodation coefficient of water. *Atmospheric Chemistry and Physics*. 2005, 5, 461.
- Laufersky, G. and Nann, T. (2019). *Physical Chemistry of Nanoparticle Syntheses in Comprehensive Nanoscience and Technology*. 2nd ed. Academic Press.
- Lewis, D. (2022). *Why the WHO took two years COVID is airborne*, Nature vol.604, 26.
- Litster, J. D., Smit, D. J. and Hounslow, M. J. (1995). Adjustable discretized population balance for growth and aggregation. *A.I.Ch.E. Journal* 41, 591.
- Loyalka, S. K. (1983). Modeling of condensation on aerosols, *Progress in Nuclear Energy*. 12, 1.
- Lurmann, F. W., Wexler, A. S., Pandis, S. N., Musarra, S., Kumar, N., Seinfeld, J. H. (1997). Modelling urban and regional aerosols- II. Application to California's south coast air basin. *Atmospheric Environment*. 31, 2695.
- Mason, B. J. (1971). *The physics of clouds*. Clarendon Press, Oxford.
- Maxey, M.R. and Riley, J.J. 1983. Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow. *The Physics of Fluids*. 26, 883.
- Maxey, M.R. 1987. The motion of small spherical particles in a cellular flow field. *The Physics of Fluids*. 30, 1915.
- Mitrakos, D., E. Hini, and C. Housiadas. 2007. Sectional modeling of aerosol dynamics in multi-dimensional flows. *Journal of Aerosol Science*. 41 (12):1076–88. doi: 10.1080/02786820701697804.
- Mitrakos, D. 2008. Αριθμητική προσομοίωση πολυφασικής ροής σε διασπορά - εφαρμογή στη δυναμική της ροής σωματιδίων.
- Mitrakos, D. and Vouros, A. 2022. Evaluating the solution of nucleation and condensational growth by a sectional moving grid– remapping method. *Journal of Aerosol Science and Technology*. 56,545. doi:10.1080/02786826.2022.2048790
- Mitsakou, C., C. Helmis, and C. Housiadas. 2004. Extrathoracic and thoracic deposition of inhaled hygroscopic particles. *Journal of Aerosol Science*. 35 (S2):S1127–S1128. doi: 10.1016/s0021-8502(19)30296-4.
- NOAA 2021. *Monthly Average Mauna Loa* . Graphs of Measurements for National Oceanic and Atmospheric Association.
- Nguyen, H. V., Okuyama, K., Mimura, T., Kousaka, Y., Flagan, R.C., and Seinfeld, J.H. (1987). Homogeneous and heterogeneous nucleation in a laminar flow reactor. *Journal of Colloid and Interface Science*. 119, 491.
- Nguyen, K. and Dabdub, D. (2002). Semi-Lagrangian flux scheme for the solution of the aerosol condensation/evaporation equation. *Aerosol Science Technology*. 36, 407

- Park, S.H. and Rogak, S.N. (1999). A novel fixed-sectional for the formation and growth of aerosol agglomerates. *Journal of Aerosol Science*. 31, 258.
- Phansee, G.M. and Pratsinis, S.E. (1989). Theory for aerosol generation in laminar flow condensers. *Aerosol Science and Technology*. 11, 100.
- Pruppacher, H. K. and Klett, J. D. (2000). *Microphysics of clouds and precipitation*, Kluwer Academic Publishers, Cambridge, USA.
- Pufleau, V. M. (2016). *Applications of Aerosol Technologies in the Silicon Industry* . McKelvey School of Engineering Theses Dissertations. 212.
- Pyykönen, J. and Jokiniemi, J. (2000). Computational fluid based sectional aerosol modelling schemes. *Journal of Aerosol Science*. 31, 531.
- Qamar, S. and Warnecke, G. (2007). Numerical solution of population balance equations for nucleation, growth and aggregation processes. *Computers and Chemical Engineering*. 31, 1576.
- Ramabhadran, T. E., Peterson, T. W. and Seinfeld, J. H. (1976). Dynamics of aerosols coagulation and condensation. *A. I. Ch. E. Journal*, 22, 840.
- Rogers R.R. and Yau M.K. 1989. *A short course in cloud physics*. 3d ed. Butterworth-Heinemann.
- Roussos, A.I., Alexopoulos, A. H. and Kiparissides, C. (2006). Dynamic evolution of PSD in continuous flow processes: A comparative study of fixed and moving grid numerical techniques. *Chemical Engineering Science*. 61, 124.
- Seinfeld, J. H. and Pandis, S. N. (1998). *Atmospheric chemistry and physics*. John Wiley Sons.
- Sewerin, F., and S. Rigopoulos. 2017a. An LES-PBE-PDF approach for modeling particle formation in turbulent reacting flows. *Phys. Fluids* 29 (10):105105. doi: 10.1063/1.5001343.
- Sewerin, F., and S. Rigopoulos. 2017b. An explicit adaptive grid approach for the numerical solution of the population balance equation. *Chem. Eng. Sci.* 168:250–70. doi: 10.1016/j.ces.2017.01.054.
- Sitariski, M. and Nowakowski, B. (1979). Condensation rate of trace vapor Knudsen aerosols from solution of the Boltzmann equation, *Journal of Colloid and Interface Science*. 72, 113.
- Whitby, K. T. (1978). The physical characteristics of sulfur aerosols, *Atmospheric Environment*. 12, 135.
- Wilck, M., and F. Stratmann. 1997, 2-D multicomponent modal aerosol model and its application to laminar flow reactors. *Journal of Aerosol Science*. 28 (6):959–72. doi: 10.1016/S0021-8502(96)00481-8.
- Wu, J. J., Flagan, R. C., Gregory, O. J. (1986). Submicron silicon powder production in an aerosol reactor. *Applied Physics Letters*, 49(2), 82-84. doi: 10.1063/1.97358

Yabe, T. and Aoki, T. (1991). A Universal Solver for Hyperbolic Equations by cubic-Polynomial Interpolation I. One-Dimensional Solver, *Computer Physics Communications*. 66, 219.

Yabe, T., Tanaka, R., Nakamura, T., and Xiao, F. (2001). An Exactly Conservative Semi-Lagrangian Scheme (CIP-CSL) in One Dimension, *Monthly Weather Review*. 129, 332.

Yamamoto, M. (2004). A solver for aerosol condensation equation semi-Lagrangian scheme with correction exactly conserving total particle number. *Aerosol Science and Technology*. 38, 1033.

Zhang, Y. Seigneur, C., Seinfeld, J. H., Jacobson, M, Z. and Binkowski, F. S. (1999). Simulation of aerosol dynamics: A comparative review of algorithms used in air quality models. *Aerosol Science and Technology*. 31, 487.

Κατάλογος σχημάτων

Σχήμα 1	Σχηματική περιγραφή των δύο οριακών περιοχών αλληλεπίδρασης φέροντος αερίου-σωματιδίου (από Seinfeld and Pandis 1998)	14
Σχήμα 2	Παράδειγμα συνεχούς συνάρτησης πυκνότητας κατανομής για την περιγραφή του μεγέθους των σωματιδίων ενός αερολύματος(από Mitrakos 2008)	15
Σχήμα 3	Στοιχειώδης όγκος, στον οποίο παρουσιάζονται οι κύριες διάφορες φυσικές διαδικασίες της μεταφοράς και της δυναμικής του αερολύματος (προσαρμοσμένο από Drossinos and Housiadas 2006).	17
Σχήμα 4	Σχηματική αναπαράσταση κίνησης σωματιδίων μικρού διαμέτρου αερολύματος γύρω από κύλινδρο.	25
Σχήμα 5	Τμηματική αναπαράσταση συνάρτησης κατανομής μεγέθους σωματιδίων(από Mitrakos 2008).	30
Σχήμα 6	Σχηματική περιγραφή της επίδρασης της αριθμητικής διάχυσης κατά την αριθμητική επίλυση του πρόβληματος(από Mitrakos 2008).	31
Σχήμα 7	Σχηματική παράσταση των βασικών αρχών λειτουργίας ενός αν-τιδραστήρα αερολύματος στρωτής ροής, για την πειραματική μελέτη της ομογενούς πυρηνοποίησης και της συμπύκνωσης (από Mitrakos 2008).	34
Σχήμα 8	Σχηματική παράσταση του ΑΑΣΡ του συστήματος Β (προσαρμοσμένο από Nguyen et al. 1987).	36
Σχήμα 9	Η μορφή του πλέγματος που χρησιμοποιείται για τη διακριτοποίηση του μεγέθους των σωματιδίων(από Mitrakos 2008).	38
Σχήμα 10	Σχηματική αναπαράσταση της μετατοπισμένης συνάρτησης κατανομής μεγέθους των σωματιδίων και της επανατοποθέτησής της σε σταθερό πλέγμα (από Mitrakos and Vouros 2022).	41
Σχήμα 11	Η θερμοκρασία του τοιχώματος του αντιδραστήρα, ως συνάρτηση της αξονικής θέσης (Οριακή Συνθήκη), για παροχή όγκου αέρα στον αντιδραστήρα 0.5lt/min, θερμοκρασία προθερμαντήρα 100°C και θερμοκρασία συμπυκνωτή 21°C.	46
Σχήμα 12	Οι ισοθερμοκρασιακές καμπύλες-περιοχές στη διάταξη όπως υπολογίζονται και απεικονίζονται από το Ansys Fluent (Ansys R19.2) για θερμοκρασία στην είσοδο και στον συμπυκνωτή ίση με 295.59 K (22.59 °C) και 379 K (106°C), αντίστοιχα, και παροχή ίση με 0.5lt/min.	47
Σχήμα 13	Η υπολογιζόμενη μεταβολή του αριθμού των σωματιδίων στην έξοδο της διάταξης συναρτήσει του μεγέθους της διακριτοποίησης του χωρικού πλέγματος.	48
Σχήμα 14	Η ποσοστιαία μεταβολή των αποτελεσμάτων ανάμεσα σε δύο διαδοχικές δοκιμές. Στον άξονα x είναι τοποθετημένες οι διαδοχικές δοκιμές μεγεθών πλέγματος.	49
Σχήμα 15	Η υπολογιζόμενη μεταβολή του αριθμού των σωματιδίων στην έξοδο της διάταξης συναρτήσει του χρονικού βήματος των υπολογισμών.	50

Σχήμα 16	Η ποσοστιαία μεταβολή των αποτελεσμάτων ανάμεσα σε δύο διαδοχικές δοκιμές χρονικού βήματος. Στον άξονα x είναι τοποθετημένες οι διαδοχικές δοκιμές χρονικού βήματος υπολογισμών.	51
Σχήμα 17	Η υπολογιζόμενη μεταβολή του αριθμού των σωματιδίων στην έξοδο της διάταξης συναρτήσει του αριθμού των κλάσεων μεγέθους.	52
Σχήμα 18	Η ποσοστιαία μεταβολή των αποτελεσμάτων ανάμεσα σε δύο διαδοχικές δοκιμές αριθμού τμημάτων διακριτοποίησης του μεγέθους.	53
Σχήμα 19	Το προφίλ της θερμοκρασίας στη διάταξη για 86°C(359,16K), 98°C(371,16K) και 110°C(383,16K).	54
Σχήμα 20	Η κατανομή του λόγου κορεσμού S στη διάταξη για 86°C(359,16K), 98°C(371,16K) και 110°C(383,16K).	55
Σχήμα 21	Η κατανομή του ρυθμού σχηματισμού σωματιδίων λόγω πυρηνοποίησης στη διάταξη, $J(\#/m^3/s)$, για θερμοκρασίες κορεσμού 86°C(359,16K), 98°C(371,16K) και 110°C(383,16K).	56
Σχήμα 22	Η κατανομή αριθμού των παραγόμενων σωματιδίων στη διάταξη για θερμοκρασίες κορεσμού 86°C(359,16K), 98°C(371,16K) και 110°C(383,16K).	57
Σχήμα 23	Η μέση διάμετρος (m) σωματιδίων κατά αριθμό για θερμοκρασία κορεσμού 86°C(359,16K), 98°C(371,16K) και 110°C(383,16K).	58
Σχήμα 24	Μέση συγκέντρωση κατά αριθμό των σωματιδίων στην έξοδο του αντιδραστήρα, ως συνάρτηση της θερμοκρασίας του κορεστή, όπως υπολογίζεται από το παρόν μοντέλο, σε σύγκριση με τους υπολογισμούς άλλων μοντέλων και με τα πειραματικά δεδομένα.	60
Σχήμα 25	Αριθμός σωματιδίων στην έξοδο της διάταξης για διαφορετικές θερμοκρασίες κορεσμού, όπως υπολογίστηκε από το 2d μοντέλο και τη μέθοδο CICR (από Mitrakos 2008).	61
Σχήμα 26	Η συνάρτηση κατανομής μεγέθους των σωματιδίων στην έξοδο του αντιδραστήρα για θερμοκρασία κορεσμού.	63
Σχήμα 27	Μέση συγκέντρωση κατά αριθμό των σωματιδίων στην έξοδο του αντιδραστήρα, ως συνάρτηση της θερμοκρασίας του κορεστή, όπως υπολογίζεται από το παρόν μοντέλο για διαφορετικούς αριθμούς τμημάτων μεγέθους σωματιδίων.	64

Παράρτημα

Στο παράρτημα της εργασίας παρουσιάζονται οι βασικότεροι κώδικες σε γλώσσα C που μεταφορτώθηκαν στο Ansys Fluent ως UDF. Στους δύο πρώτους κώδικες, που αντιστοιχούν στους όρους πηγής της ΓΕΔΑ και της εξίσωσης μεταφοράς του ατμού αντίστοιχα, ο χρήστης πρέπει στην εντολή "define nbin" να καθορίσει το επιθυμητό πλήθος UDF που θα επιλύσει ο Fluent.

Υπολογιστικός κώδικας σε γλώσσα C για μεταφόρτωση στο Ansys Fluent ως UDF που αναπαριστά τους όρους πηγής της ΓΕΔΑ

```
#include "udf.h"

#include "math.h"
#define nbin 30

DEFINE_SOURCE(growth_GDE_v1,c,t,dS,eqn)
{

    double J, Jclas, S, sigma, Cm, rp, rg, mm, dcrit, KB, T, um, P, wmG;
    double AVOG, wmV, RV, RUGas, psat, pV, Cv, AA, JGirsh, Girsh, Anucl, rcrit;
    double xs1, Saa, gmr, G;
    double DV, fpathV, fpathG, condG, ra, aKnf1, aKnf2, HL, Ssr, bm, bt;
    double ANm, ANt, d_i, vof_p, fw, fe, fw_max, fe_min, fi, Vi;
    int j1i, j2i;
    double j1[nbin], j2[nbin];

    /*int const nbin = 50;*/
    double dlf[nbin+1], vl[nbin+1], vlm[nbin+1], df[nbin], ddf[nbin], vm[nbin],
    double C[nbin], N[nbin], C1[nbin], cfixed[nbin], cnew[nbin];
    double dlm[nbin+1], nm[nbin], nlj1, nlj2, nlk1, nlk2, nlmwi, nlmei, CN[nbin];
    double Deltadis[nbin], dvm[nbin];

    double pi=3.1415926;
    double source=0.0;
    double dlmin=5.0e-10;
    double dlmax=100.0e-6;
    double logos=pow(10.0, (log10(dlmax/dlmin)/nbin));

    for (int i=0; i<nbin+1; i++)
```

```

{
  dlf[i]=dlmin*pow(logos,(i-1));
  vl[i] = dlf[i];
}

for (int i=0; i<nbin; i++)
{
  ddf[i]=dlf[i+1]-dlf[i];
  df[i]=0.5*(dlf[i+1]+dlf[i]);
  C[i]=C_UDSI_M1(c,t,i)*ddf[i];
  C1[i]=0.0;
  cfixed[i]=C_UDSI_M1(c,t,i);
  Deltadis[i]=0.0;
}

RUGas = 8.314;
AVOG = 6.023e23;
KB = 1.3806e-23;
wmV = 0.27835;
wmG = 0.02896;
RV = RUGas/wmV;
mm = wmV/AVOG;

T = C_T(c,t);
rg = C_R(c,t);
Cm = C_YI(c,t,0);
P = C_P(c,t) + 101325.0;
rp = 1000.0*(1.063-0.000826*(T-273.16));
DV = 1.e-4*0.0398*pow((T/273.16),1.5);
fpathV = 5.04e-8; /*3.0*DV/pow((8.0*KB*T/(pi*mm)),0.5);*/
fpathG = 100.0e-9;
condG = C_K_L(c,t);
Cv = Cm*rg;
pV=Cm*P*wmG/wmV;
um = mm/rp;
xs1=exp(21.497-11497.0/T);
psat=xs1*P;
S = pV/psat;
sigma = 1.0e-3*(35.3-0.0863*(T-273.16));
HL=1000.0*284.3*pow(((1.-T/784.0)/(1.-608/784.0)),0.38);

/* Nucleation */
if (S <= 1.1)
{
  J = 0.0;
  Jclas=0.0;
}

```

```

else
{
sigma = 1.0e-3*(35.3-0.0863*(T-273.16));
dcrit = 4.0*sigma*um/(KB*T*log(S));
/* Jclas = (Cv*Cv/rp/mm)*pow((2.0*sigma/pi/mm),0.5)*
    *exp(-pi*sigma*(dcrit*dcrit)/(3.0*KB*T));*/
Jclas = (Cm*Cm*rg*rg/rp/mm)*pow((2.0*sigma/pi/mm),0.5)*
    *exp(-pi*sigma*(dcrit*dcrit)/(3.0*KB*T));
AA = pow((36.0*pi*um*um),(1.0/3.0))*sigma/(KB*T);
Girsh = 1/S*exp(AA);
JGirsh = Girsh*Jclas;
J = 5.0e-4*JGirsh;
}

/* -----
/* Growth */
G=0.0;
for (int i=0; i<nbin+1; i++)
{
d_i=v1[i];
ra=d_i*0.5;
aKnf1=fpathV/ra;
aKnf2=fpathG/ra;
Ssr=S-exp(4.0*sigma*wmV/(d_i*RUgas*rp*T));
ANm=RV*T/(DV*psat);
ANt=(HL/(RV*T)-1.0)*HL/(condG*T); /* HL*HL*wmV/(condG*RUgas*T*T);*/
bm=(1.0+aKnf1)/(1.0+1.71*aKnf1+1.333*aKnf1*aKnf1);
bt=(1.0+aKnf2)/(1.0+1.71*aKnf2+1.333*aKnf2*aKnf2);
/* gmr=2.0*pi*d_i*Ssr/(ANm/bm+ANt/bt); */
G=4.0/(rp*d_i)*Ssr/(ANm/bm+ANt/bt);
if (G<0.0)
{
G=0.0;
}
/*G=2.0*gmr/(pi*rp*d_i*d_i);*/
/*printf("%f\n",G);*/

v1m[i]=v1[i]+G*CURRENT_TIMESTEP;

}

for(int i =0; i<nbin; i++)
{
N[i]=cfixd[i]*(v1[i+1]-v1[i]);
nm[i]=N[i]/(v1m[i+1]-v1m[i]);
}

```

```

N[i]=0.0;
vm[i]=0.5*(v1m[i+1]+v1m[i]);
dvm[i]=(v1m[i+1]-v1m[i]);
if (vm[i]<v1[1])
    {
        nm[i]=0.0;
    }
}

for (int i=0;i<nbin;i++)
{
for (int j=0;j<nbin;j++)
    {
        if (v1m[i]>=v1[j] && v1m[i]<v1[j+1])
            {
                j1[i]=j;
            }

        if (v1m[i+1]>=v1[j] && v1m[i+1]<v1[j+1])
            {
                j2[i]=j;
            }
    }
}

for (int i=1;i<nbin-1;i++)
{
if (nm[i]>0.0)
    {
        j1i=j1[i];
        j2i=j2[i];

        if (j1[i]==j2[i])
            {
                N[j1i]=N[j1i]+nm[i]*(v1m[i+1]-v1m[i]);
            }

        if (j2i>=j1i+1)
            {

```



```

fw = (nm[i]-nm[i-1])/(vm[i]-vm[i-1]);
fw_max = (nm[i]-0)/(vm[i]-v1m[i]);
fe = (nm[i+1]-nm[i])/(vm[i+1]-vm[i]);
fe_min = (0-nm[i])/(v1m[i+1]-vm[i]);
fi = 0.5*(fw+fe);

if (fi>0.0)
    {
        fi=MIN(fi,fw_max);
    }

    if (fi<0.0)
    {
        fi=-MIN(fabs(fi),fabs(fe_min));
    }

nlmwi = nm[i] + fi*(v1m[i]-vm[i]);
nlj1 = nm[i] + fi*(v1[j1i+1]-vm[i]);

if (j1i>=1 && j1i<=nbin-1)
    {
        N[j1i] = N[j1i] + 0.5*(nlmwi+nlj1)*(v1[j1i+1]-v1m[i]);
    }

nlj2 = nm[i] + fi*(v1[j2i]-vm[i]);
nlmei = nm[i] + fi*(v1m[i+1]-vm[i]);

if (j2i>=1 && j2i<=nbin-1)
    {
        N[j2i] = N[j2i] + 0.5*(nlj2 + nlmei)*(v1m[i+1]-v1[j2i]);
    }

for (int k=j1i+1;k<j2i;k++)
    {
        nlk1 = nm[i] + fi*(v1[k]-vm[i]);
        nlk2 = nm[i] + fi*(v1[k+1]-vm[i]);
        N[k] = N[k]+ 0.5*(nlk1+nlk2)*(v1[k+1]-v1[k]);
    }
}
}

```

```

for (int i=0; i<nbin; i++)
{
    cnew[i]=N[i]/ddf[i];
    Deltadis[i]=(cnew[i]-C_UDSI_M1(c,t,i));

    if (dcrit>=vl[i] & dcrit<vl[i+1])
    {
        Deltadis[i] = Deltadis[i] +J/ddf[i]/rg*CURRENT_TIMESTEP;
    }
}
source=rg*Deltadis[eqn-769]/CURRENT_TIMESTEP;
/* -----

/* Store particle variables in memory numbered 0 */
if (eqn = 769+nbin-1)
{
    double NumberCon = 0.0;
    double VolCon = 0.0;
    double Num=0.0;
    for (int i=1; i<nbin; i++)
    {
        Num += C_UDSI(c,t,i)*ddf[i]*df[i];
        NumberCon += C_UDSI(c,t,i)*ddf[i];
        VolCon += C_UDSI(c,t,i)*ddf[i]*pow((df[i]),3)*3.14/6.0;
    }
    C_UDMI(c,t,0) = NumberCon;
    C_UDMI(c,t,1) = VolCon;
    C_UDMI(c,t,2) = S;
    C_UDMI(c,t,3) = J;
    C_UDMI(c,t,4) = Num/NumberCon;
}

dS[eqn]=0.0;
return source;
}

```

Υπολογιστικός κώδικας σε γλώσσα C για μεταφόρτωση στο Ansys Fluent ως UDF που αναπαριστά τους όρους πηγής της εξίσωσης μεταφοράς του ατμού

```
#include "udf.h"

#include "math.h"
#define nbin 30

DEFINE_SOURCE(growth_VCE_v1,c,t,dS,eqn)
{

double J, Jclas, S, sigma, Cm, rp, rg, mm, dcrit, KB, T, um, P, wmG;
double AVOG, wmV, RV, RUGas, psat, pV, Cv, AA, JGirsh, Girsh, Anucl, rcrit;
double xs1, Saa, gmr, G;
double DV, fpathV, fpathG, condG, ra, aKnf1, aKnf2, HL, Ssr, bm, bt;
double ANm, ANt, d_i, vof_p,fw,fe,fw_max,fe_min, fi, Vi;
int j1i,j2i;
double j1[nbin],j2[nbin];

double dlf[nbin+1],v1[nbin+1],vlm[nbin+1], df[nbin], ddf[nbin], vm[nbin];
double C[nbin],N[nbin], C1[nbin], cfixed[nbin],cnew[nbin];
double dlm[nbin+1],nm[nbin],nlj1,nlj2,nlk1,nlk2,nlmwi,nlmei, CN[nbin],
double dvm[nbin],Deltadis[nbin];

double pi=3.1415926;
double source=0.0;
double dlmin=5.0e-10;
double dlmax=100.0e-6;
double logos=pow(10.0,(log10(dlmax/dlmin)/nbin));

for (int i=0; i<nbin+1; i++)
{
dlf[i]=dlmin*pow(logos,(i-1));
v1[i] = dlf[i];
}

for (int i=0; i<nbin; i++)
{
ddf[i]=dlf[i+1]-dlf[i];
df[i]=0.5*(dlf[i+1]+dlf[i]);
C[i]=C_UDSI_M1(c,t,i)*ddf[i];
C1[i]=0.0;
cfixed[i]=C_UDSI_M1(c,t,i);
```

```

Deltadis[i]=0.0;
}

RUgas = 8.314;
AVOG = 6.023e23;
KB = 1.3806e-23;
wmV = 0.27835;
wmG = 0.02896;
RV = RUgas/wmV;
mm = wmV/AVOG;

T = C_T(c,t);
rg = C_R(c,t);
Cm = C_YI(c,t,0);
P = C_P(c,t) + 101325.0;
rp = 1000.0*(1.063-0.000826*(T-273.16));
DV = 1.e-4*0.0398*pow((T/273.16),1.5);
fpathV = 5.04e-8; /*3.0*DV/pow((8.0*KB*T/(pi*mm)),0.5);*/
fpathG = 100.0e-9;
condG = C_K_L(c,t);
Cv = Cm*rg;
pV=Cm*P*wmG/wmV;
um = mm/rp;
xs1=exp(21.497-11497.0/T);
psat=xs1*P;
S = pV/psat;
sigma = 1.0e-3*(35.3-0.0863*(T-273.16));
HL=1000.0*284.3*pow(((1.-T/784.0)/(1.-608/784.0)),0.38);

/* Nucleation */
if (S <= 1.1)
{
    J = 0.0;
    Jclas=0.0;
}
else
{
    sigma = 1.0e-3*(35.3-0.0863*(T-273.16));
    dcrit = 4.0*sigma*um/(KB*T*log(S));
    /*Jclas = (Cv*Cv/rp/mm)*pow((2.0*sigma/pi/mm),0.5)*
        *exp(-pi*sigma*(dcrit*dcrit)/(3.0*KB*T));*/
    Jclas = (Cm*Cm*rg*rg/rp/mm)*pow((2.0*sigma/pi/mm),0.5)*
        *exp(-pi*sigma*(dcrit*dcrit)/(3.0*KB*T));
    AA = pow((36.0*pi*um*um),(1.0/3.0))*sigma/(KB*T);
    Girsh = 1/S*exp(AA);
    JGirsh = Girsh*Jclas;
    J = 5.0e-4*JGirsh;
}

```

```

/* Growth */
G=0.0;
for (int i=0; i<nbin+1; i++)
{
  d_i=v1[i];
  ra=d_i*0.5;
  aKnf1=fpathV/ra;
  aKnf2=fpathG/ra;
  Ssr=S-exp(4.0*sigma*wmV/(d_i*RUgas*rp*T));
  ANm=RV*T/(DV*psat);
  ANt=(HL/(RV*T)-1.0)*HL/(condG*T); /* HL*HL*wmV/(condG*RUgas*T*T); */
  bm=(1.0+aKnf1)/(1.0+1.71*aKnf1+1.333*aKnf1*aKnf1);
  bt=(1.0+aKnf2)/(1.0+1.71*aKnf2+1.333*aKnf2*aKnf2);
  /* gmr=2.0*pi*d_i*Ssr/(ANm/bm+ANt/bt); */
  G=4.0/(rp*d_i)*Ssr/(ANm/bm+ANt/bt);
  if (G<0.0)
  {
    G=0.0;
  }
  /*G=2.0*gmr/(pi*rp*d_i*d_i);*/
  /*printf("%f\n",G);*/

  v1m[i]=v1[i]+G*CURRENT_TIMESTEP;

}

for(int i =0; i<nbin; i++)
{
  N[i]=cfixed[i]*(v1[i+1]-v1[i]);
  nm[i]=N[i]/(v1m[i+1]-v1m[i]);
  N[i]=0.0;
  vm[i]=0.5*(v1m[i+1]+v1m[i]);
  dvm[i]=(v1m[i+1]-v1m[i]);
  if (vm[i]<v1[1])
  {
    nm[i]=0.0;
  }
}

for (int i=0;i<nbin;i++)
{

```

```

for (int j=0;j<nbin;j++)
    {
    if (v1m[i]>=v1[j] && v1m[i]<v1[j+1])
        {
        j1[i]=j;
        }

    if (v1m[i+1]>=v1[j] && v1m[i+1]<v1[j+1])
        {
        j2[i]=j;
        }
    }
}

for (int i=1;i<nbin-1;i++)
{
if (nm[i]>0.0)
    {
    j1i=j1[i];
    j2i=j2[i];

    if (j1[i]==j2[i])
        {
        N[j1i]=N[j1i]+nm[i]*(v1m[i+1]-v1m[i]);
        }

    if (j2i>=j1i+1)
        {

        fw = (nm[i]-nm[i-1])/(vm[i]-vm[i-1]);
        fw_max = (nm[i]-0)/(vm[i]-v1m[i]);
        fe = (nm[i+1]-nm[i])/(vm[i+1]-vm[i]);
        fe_min = (0-nm[i])/(v1m[i+1]-vm[i]);
        fi = 0.5*(fw+fe);

        if (fi>0.0)
            {
            fi=MIN(fi,fw_max);
            }

            if (fi<0.0)
                {
                fi=-MIN(fabs(fi),fabs(fe_min));
                }
            }
        }
    }
}

```

```

    }

    nlmwi = nm[i] + fi*(v1m[i]-vm[i]);
    nlj1 = nm[i] + fi*(v1[j1i+1]-vm[i]);

    if (j1i>=1 && j1i<=nbin-1)
        {
            N[j1i] = N[j1i] + 0.5*(nlmwi+nlj1)*(v1[j1i+1]-v1m[i]);
        }

    nlj2 = nm[i] + fi*(v1[j2i]-vm[i]);
    nlmei = nm[i] + fi*(v1m[i+1]-vm[i]);

    if (j2i>=1 && j2i<=nbin-1)
        {
            N[j2i] = N[j2i] + 0.5*(nlj2 + nlmei)*(v1m[i+1]-v1[j2i]);
        }

    for (int k=j1i+1;k<j2i;k++)
        {
            nlk1 = nm[i] + fi*(v1[k]-vm[i]);
            nlk2 = nm[i] + fi*(v1[k+1]-vm[i]);
            N[k] = N[k]+ 0.5*(nlk1+nlk2)*(v1[k+1]-v1[k]);
        }
    }

}

double dvol=0.0;
for (int i=0; i<nbin; i++)
{
    dvol += (N[i]-C_UDSI_M1(c,t,i)*ddf[i])*rp*pow((df[i]),3.0)*pi/6.0;
}

source=-rg*dvol/CURRENT_TIMESTEP - J*dcrit*dcrit*dcrit*pi/6.0*rp;

/* Store Saturation Ratio in memory numbered 3 */

dS[eqn]=0.0;
return source;
}

```

Υπολογιστικός κώδικας σε γλώσσα C για μεταφόρτωση στο Ansys Fluent ως UDS που αντιστοιχεί στη σταθερά διάχυσης του DPB στον αέρα

```
/*  
UDF for a temperature dependent DBP diffusivity property  
*/  
#include "udf.h"  
#include "math.h"  
#include "models.h"  
  
DEFINE_DIFFUSIVITY(db1_diff,c,t,i)  
{  
  real db1;  
  double dlf_i, dlf_ip1, di;  
  
  real nbin = N_UDS;  
  real T = C_T(c,t);  
  real kB = 1.381e-23;  
  real mg = 1.81e-5;  
  real dpmin = 0.5e-10;  
  real dpmax = 100.0e-6;  
  real l = 0.0504e-6;  
  
  double logos=pow(10.0,(log10(dpmax/dpmin)/nbin));  
  
  dlf_i = dpmin*pow(logos,(i-1));  
  dlf_ip1 = dpmin*pow(logos,(i));  
  di =(dlf_i+dlf_ip1)*0.5;  
  
  real cc = 1.0+ l/di*(2.34+1.05*exp(-0.39*di/l));  
  db1 = kB*T/3.0/M_PI/mg/di*cc;  
  
  return db1;  
}
```