

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΤΟΜΕΑΣ ΙΙ: ΑΝΑΛΎΣΗΣ, ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΥ ΚΑΙ ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΚΑΙ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ

Υπολογιστική ανάλυση προβλημάτων φαινομένων μεταφοράς με το ανοικτού κώδικα λογισμικό ELMER

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

του Ιωάννη Αργυρόπουλου

Επιβλέπων Καθηγητής: Μιχάλης Καβουσανάκης Ακαδημαικό Έτος: 2023-2024

Αθήνα, Οκτώβριος 2024

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή μου, κ. Μιχάλη Καβουσανάκη, για την επιστημονική καθοδήγηση και την υποστήριξη του, κατά την εκπόνηση της διπλωματικής μου εργασίας. Με εισήγαγε στον κόσμο της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής και μου έδωσε τη δυνατότητα να γνωρίσω ένα ανοικτό λογισμικό.

Η προτροπή του να πραγματοποιήσω προσωπική έρευνα προκειμένου να επιλέξω μία ρεαλιστική εφαρμογή προς μελέτη, το έναυσμα του να αντιμετωπίζω τα λάθη μου και κάθε δυσκολία που παρουσιάστηκε κατά την ενασχόληση μου με το λογισμικό, με ώθησαν να γίνω καλύτερος επαγγελματίας και Χημικός Μηχανικός.

Πιο σημαντικό από όλα, ήταν ο τρόπος σκέψης που μου μεταλαμπάδευσε, δηλαδή να μην επικεντρώνομαι στα εμπόδια, που πολλές φορές φαντάζουν ανυπέρβλητα, αλλά να εστιάζω τις δυνάμεις μου στην υπέρβαση τους.

Επίσης, ευχαριστώ τον Χημικό Μηχανικό Καλλιά Γεώργιο, ο οποίος με βοήθησε κατά τα πρώτα μου βήματα με το λογισμικό Elmer.

Ευχαριστώ την κοπέλα μου, Ζωή, που με στηρίζει και μου δίνει κίνητρο να γίνομαι καλύτερος.

Τέλος, χρωστάω πολλά στους γονείς μου, Κέλλυ και Αλέξανδρο, που με στήριξαν όλα τα χρόνια πριν και κατά την διάρκεια των σπουδών μου στο Πολυτεχνείο.

Πίνακας περιεχομένων

Κατάλογος Εικόνων	8
Κατάλογος Πινάκων	9
Κατάλογος Διαγραμμάτων	9
Περίληψη	10
Abstract	11
Κεφάλαιο 1: Διασπορά Άλμης Αφαλατώσεων σε υδάτινους αποδέκτες	13
1.1: Το ελλειμματικό ισοζύγιο γλυκού νερού	13
1.2: Η αφαλάτωση	14
1.3: Διαχείριση της άλμης αφαλατώσεων	17
1.3.1: Διάθεση στο περιβάλλον	17
1.3.2: Επεξεργασία προς ελαχιστοποίηση υγρών αποβλήτων	19
1.4: Διάθεση σε θαλάσσιους αποδέκτες	20
1.4.1: Περιβαλλοντικές επιπτώσεις	20
1.4.2: Περιορισμός των περιβαλλοντικών επιπτώσεων	24
1.4.3: Εργαλεία μοντελοποίησης της διασποράς άλμης	25
1.5: Σχεδιασμός διάταξης απόρριψης άλμης	26
1.5.1: Το φαινόμενο του κεκλιμένου πυκνού πίδακα	26
1.5.2: Εμπειρικό μοντέλο ανάμειξης	27
Κεφάλαιο 2: Μαθηματική Μοντελοποίηση	31
2.1: Εξισώσεις Navier-Stokes	31
2.2: Εξίσωση μεταφοράς μάζας	34
2.3: Η τυρβώδης ροή	
2.3.1: Ανάλυση κατά Reynolds	35
2.3.2: Reynolds Averaged Navier Stokes (RANS)	
2.4: Μοντελοποίηση των όρων τύρβης	40
2.4.1: Υπόθεση Boussinesq	40
2.4.2 : Το μοντελο k-ε	42

Κεφάλαιο 3: Η μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων και το λογισμικό Elmer	46
3.1: Η μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων (Μ.Π.Σ)	46
3.1.1: Τυπικά Βήματα Εφαρμογής της μεθόδου	46
3.1.2: Επίλυση μη γραμμικών εξισώσεων	50
3.1.3: Αστάθεια συναγωγικού όρου εξισώσεων μεταφοράς	51
3.2: Εφαρμογή σε πρόβλημα τυρβώδους ροής	52
3.2.1: Αριθμητικές δυσκολίες επίλυσης	52
3.2.2: Αλγόριθμος επίλυσης συζευγμένου συστήματος	55
3.2.3: Επιλογή συνοριακών συνθηκών για τις μεταβλητές k, ε	58
3.2.4: Συναρτήσεις τοιχώματος (Wall Functions)	60
3.3: Το λογισμικό ανοικτού κώδικα Elmer	64
3.3.1: Εισαγωγικά στοιχεία	64
3.3.2: Προγράμματα του πακέτου	65
3.3.3: Ροή εργασίας με χρήση συνοδευτικών ελεύθερων λογισμικών	67
Κεφάλαιο 4: Προσομοίωση πυκνού πίδακα υγρού σε συνθήκες Στρωτής Ροής	69
4.1: Μαθηματική διατύπωση προβλήματος	69
4.2: Βήματα ανάπτυξης προσομοίωσης	70
4.2.1: Κατασκευή Γεωμετρίας και Πλέγματος	70
4.2.2: Καθορισμός Παραμέτρων Προσομοίωσης	71
4.2.3: Καθορισμός Συνοριακών Συνθηκών	72
4.3: Παρουσίαση αποτελεσμάτων προσομοίωσης	73
4.3.1: Σύγκριση αποτελεσμάτων Elmer και Comsol	74
Κεφάλαιο 5: Προσομοίωση πυκνού πίδακα υγρού σε συνθήκες Τυρβώδους Ροή	ıς80
5.1: Μαθηματική διατύπωση προβλήματος	81
5.2: Προσομοίωση με το λογισμικό Comsol	82
5.2.1: Επιλογή Παραμέτρων	83
5.2.2: Σύγκριση αποτελεσμάτων με πειραματικές μετρήσεις	84
5.3: Η απόπειρα μοντελοποίησης της τυρβώδους ροής με το Elmer	87

Κεφάλαιο 6: Συμπεράσματα και προτάσεις	
6.1: Στόχοι και στοιχεία πρωτοτυπίας	89
6.2: Σχετικά με το λογισμικό Elmer	89
6.3: Προτάσεις για μελλοντική έρευνα	91
Βιβλιογραφικές πηγές	92
Παράρτημα Α	95

Κατάλογος Εικόνων

Εικόνα 1: Σκαρίφημα εισροών-εκροών αφαλάτωσης (Σημειώσεις Μαθήματος
Διαχείρισης Υδάτων, ΣΧΜ ΕΜΠ)16
Εικόνα 2: Χάρτης οργανισμών ενδιαφέροντος στις παράκτιες περιοχές της Μεσογείου.
Μωβ: παρουσία Posidonia Oceanica. Πορτοκαλί: παρουσία Cymodocea &
Zostera.(Pistocchi et al., 2020)22
Εικόνα 3: Στιγμιότυπο κεντρικού επιπέδου πυκνού πλουμίου. Η εικόνα ανακτήθηκε μέσω
3D φθορίωσης με χρήση laser (3DLIF) (PJW Roberts 2015)27
Εικόνα 4: Σχεδιάγραμμα κεκλιμένου πυκνού πίδακα, όπου σημειώνονται οι
χαρακτηριστικές γεωμετρικές παράμετροι (PJW Roberts 2015)30
Εικόνα 5: Ενδεικτική εικόνα της δομής του Solver Input File66
Εικόνα 6: Η γραφική διεπιφάνεια χρήστη του Elmer (Elmer GUI)67
Εικόνα 7: Τρισδιάστατη οπτική του χωρίου επίλυσης, από την διεπιφάνεια χρήστη του
Elmer70
Εικόνα 8: Προφίλ συγκέντρωσης στην επιφάνεια συμμμετρίας. Προσομοίωση με
Reynolds 10, γωνία 30 μοιρών, beta=1e-10. (Paraview)75
Εικόνα 9: Προφίλ συγκέντρωσης στην επιφάνεια συμμμετρίας. Προσομοίωση με
Reynolds 20, γωνία 30 μοιρών, beta=1e-10. (Paraview)77
Εικόνα 10: Προφίλ συγκέντρωσης στην επιφάνεια συμμμετρίας. Προσομοίωση με
Reynolds 50, γωνία 30 μοιρών, beta=3e-10. (Paraview)78
Εικόνα 11: Προφίλ συγκέντρωσης στην επιφάνεια συμμετρίας (Comsol)85

Κατάλογος Πινάκων

Κατάλογος Διαγραμμάτων

Διάγραμμα 1: Στάθμη υπόγειου υδροφορέα. (ypethe.gr/page/ypogeia-nera-thessalias).14
Διάγραμμα 2: Χρονική εξέλιξη ενεργών μονάδων αφαλάτωσης και δυναμικότητας (Jones
et al., 2019)15
Διάγραμμα 3: Διάγραμμα αδιάστατων μεταβλητών u+ συναρτήσει του $\log(y+)$ κοντά στο
τοίχωμα. Τα σημεία αναπαριστούν πειραματικές μετρήσεις. (Schlichting, H.,1979) 61
Διάγραμμα 4: Το προφίλ των όρων παραγωγής, καταστροφής, και διάχυσης ενέργειας k,
στο οριακό στρώμα (Greenshields & Weller, 2022)62
Διάγραμμα 5: Σύγκριση κατακόρυφων προφίλ συγκέντρωσης από Elmer (συνεχείς
γραμμές) και COMSOL (Διακεκομμένες γραμμές) για Reynolds 1076
Διάγραμμα 6: Σύγκριση κατακόρυφων προφίλ συγκέντρωσης από Elmer (συνεχείς
γραμμές) και COMSOL (Διακεκομμένες γραμμές) για Reynolds 2077
Διάγραμμα 7: Σύγκριση κατακόρυφων προφίλ συγκέντρωσης από Elmer (συνεχείς
γραμμές) και COMSOL (Διακεκομμένες γραμμές) για Reynolds 50
Διάγραμμα 8: Οριζόντια κατανομή συγκέντρωσης στο ύψος απόρριψης z=0.3m85
Διάγραμμα 9: Κατακόρυφο προφίλ συγκέντρωσης σε απόσταση x=0.77m86

Περίληψη

Στην παρούσα εργασία, επιχειρήθηκε η επίλυση ενός ρεαλιστικού προβλήματος διασποράς ρύπων, με χρήση του ελεύθερου λογισμικού Elmer, το οποίο βασίζεται στην Μέθοδο των Πεπερασμένων στοιγείων. Το πρόβλημα της διασποράς της άλμης αφαλατώσεων στη θάλασσα, προκαλεί σημαντικό επιστημονικό και νομοθετικό ενδιαφέρον, αφενός λόγω του περιβαλλοντικού αντικτύπου της διάθεσης άλμης στο θαλάσσιο οικοσύστημα, αφετέρου εξαιτίας των αυξανόμενων αναγκών σε καθαρό νερό από αφαλατώσεις. Η πλέον διαδεδομένη διάταξη απόρριψης άλμεων στη θάλασσα, αποτελείται από μία συστοιγία διαχυτήρων, που εκτοξεύουν την πυκνή άλμη με φορά προς τα πάνω. Σκοπός της εργασίας, είναι η χρήση του λογισμικού Elmer, προκειμένου να προσομοιωθεί η πορεία ενός πίδακα άλμης υψηλής πυκνότητας, κατά την έξοδό του από το στόμιο ενός διαχυτήρα. Για την επίλυση του προβλήματος, αναλύονται οι μαθηματικές εξισώσεις που το περιγράφουν. Αργικά, αναφέρονται οι κλασικές εξισώσεις της Ρευστομηγανικής, δηλαδή οι εξισώσεις μεταφοράς ορμής (Navier-Stokes) και μεταφοράς μάζας. Στην συνέχεια, παρατίθενται στοιχεία από τη θεωρία της τύρβης, περιγράφονται οι εξισώσεις Renyolds Averaged Navier Stokes (RANS) και το μοντέλο τύρβης k-ε. Έπειτα, παρουσιάζεται η Μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων, ενώ, αναφέρονται βασικά στοιχεία για το λογισμικό Elmer, τα προγράμματα που το συναποτελούν και μία ενδεικτική ροή εργασίας για τον χρήστη. Στο υπολογιστικό μέρος της εργασίας, πραγματοποιήθηκε η επίλυση μιας απλοποιημένης μορφής του προβλήματος του πίδακα σε συνθήκες στρωτής ροής. Πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις για διάφορες γωνίες ρίψης και ταχύτητες εξόδου, ενώ τα αποτελέσματα συγκρίθηκαν με τα αντίστοιγα που παρήγθησαν από το εμπορικό λογισμικό COMSOL Multiphysics. Τέλος, επιγειρήθηκε η επίλυση του προβλήματος σε συνθήκες τυρβώδους ροής, με γρήση του μοντέλου k-ε. Η επίλυση στο Comsol κρίθηκε επιτυγής, καθώς τα αποτελέσματα συμφωνούν με τα βιβλιογραφικά δεδομένα. Αντίθετα, η προσομοίωση του προβλήματος σε συνθήκες τυρβώδους ροής στο Elmer, συνοδεύτηκε με μία σειρά από σημαντικά εμπόδια (Απουσία εγγράφων τεκμηρίωσης του κώδικα, Ο κώδικας του Elmer για τα τυρβώδη μοντέλα δεν είναι πλήρως λειτουργικός, Περιορισμένοι υπολογιστικοί πόροι) και δεν κατέστη δυνατή, στο πλαίσιο της διπλωματικής εργασίας.

Λέξεις – Κλειδιά: Πίδακας πυκνού ρευστού, Τυρβώδης Ροή, Μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων, Λογισμικό Elmer

10

Computational analysis of transport phenomena with the open-source software Elmer

Abstract

This study aims at utilizing the open-source software Elmer, which is based on the Finite Element Method, to solve a real-world pollutant dispersion problem. The subject of successful dispersion of brine originating from desalination plants, comes with great scientific and law-making interest, due to the environmental impacts of brine on the marine ecosystem, as well as the increasing needs for clean water from desalination. The typical setup of brine discharge at seawater consists of multiple diffusers, which release the dense brine in upwards direction at a high speed. The purpose of this study is to model the fate of the dense brine plume, from exiting the diffuser nozzle onwards. For the mathematical solution of the problem, the classical Fluid Mechanics equations are examined, namely, Navier-Stokes and Mass Transport Equation, followed by an introduction of the theory of turbulence, RANS equations, and the k-epsilon turbulence model. Next, the Finite Element Method is briefly described, and the Elmer Software package is presented, along with the applied workflow. In the Computational part of the thesis, we first model a simple Laminar case for the dense jet problem, while adjusting jet angle and velocity parameters. Also, the results were compared with corresponding simulations from commercial software COMSOL Multiphysics. Finally, the k-epsilon turbulence model was used to simulate the turbulent flow case of the problem. Solution with Comsol was successful, as results are consistent with literature data. In contrast, Elmer simulation of turbulence was met with difficulties (Absence of corresponding documentation, Elmer code for turbulent models is not fully robust, limited computing resources) and was not made possible for this study.

Keywords: Dense Jet, Turbulence, Finite Element Method, Elmer Software

Κεφάλαιο 1: Διασπορά Άλμης Αφαλατώσεων σε υδάτινους αποδέκτες

1.1: Το ελλειμματικό ισοζύγιο γλυκού νερού

Το νερό στον πλανήτη γη βρίσκεται πρακτικά σε αφθονία (1.400 εκατομμύρια km³). Όμως, η ποσότητα γλυκού νερού σε επιφανειακές πηγές (λίμνες και ποτάμια) αντιστοιχεί στο 0,009% του συνολικού νερού στη γη, ενώ το υπόγειο (γλυκό) νερό υπολογίζεται στο 0,6%. Επομένως, το διαθέσιμο γλυκό νερό, το οποίο είναι απαραίτητο για την επιβίωση, την ανάπτυξη του ανθρώπινου πολιτισμού και την ευημερία σε καμία περίπτωση δεν είναι άφθονο, αλλά αποτελεί έναν πολύτιμο φυσικό πόρο.

Η αύξηση του παγκόσμιου πληθυσμού, η ραγδαία βιομηχανική ανάπτυξη, η χρήση νερού για τη γεωργία και η αστικοποίηση αποτελούν βασικούς λόγους, εξαιτίας των οποίων οι ανάγκες της ανθρωπότητας για καθαρό νερό αυξάνονται κατακόρυφα τις τελευταίες δεκαετίες. Ειδικότερα, τα Ηνωμένα Έθνη, υπολογίζουν πως από το 1980 και έπειτα, υπάρχει μέση ετήσια αύξηση στη ζήτηση καθαρού νερού της τάξης του 1%.

Παράλληλα, παράγοντες όπως η κλιματική αλλαγή, η ρύπανση πηγών γλυκού νερού και η εξάντληση πηγών λόγω ανθρώπινης δραστηριότητας, οδηγούν σε αλλοίωση πολλών υγροβιότοπων, εν τέλει σε περιορισμό του διαθέσιμου γλυκού νερού.

Συνδυάζοντας τα παραπάνω, εξάγεται το συμπέρασμα πως ασκείται πρωτοφανής επιβάρυνση στο υδατικό ισοζύγιο, σε σημείο που οι συμβατικές πηγές νερού δεν επαρκούν για την κάλυψη των αναγκών. (UNESCO, WWDR 2024)

Ακόμα και η Ελλάδα, μια χώρα με πλούσιες πηγές καθαρού νερού χάρη στη γεωμορφολογία της, δέχεται πίεση στο υδατικό της ισοζύγιο. Το συμπέρασμα, προκύπτει από την κατάσταση των υπόγειων νερών της Θεσσαλίας. Συγκεκριμένα, η χρόνια υπεράντληση νερού από τις γεωτρήσεις, έχει οδηγήσει σε πτώση της στάθμης στον υδροφόρο ορίζοντα του θεσσαλικού κάμπου, όπως φαίνεται ενδεικτικά, στις μετρήσεις από μία γεώτρηση στο Διάγραμμα 1. Το αποτέλεσμα: (α) η απόληψη νερού να πραγματοποιείται σε μεγαλύτερα βάθη, με μεγαλύτερο κόστος άντλησης για τους αγρότες, και (β) υπάρχει κίνδυνος υφαλμύρωσης του υπόγειου υδροφορέα, καθιστώντας το νερό ακατάλληλο για άρδευση σε βάθος χρόνου και υποβαθμίζοντας τις ιδιότητες του εδάφους. (Ειδική Γραμματεία Υδάτων, Σχέδιο Διαχείρισης Υ.Δ. Θεσαλλίας, 2014)



Διάγραμμα 1: Στάθμη υπόγειου υδροφορέα. (ypethe.gr/page/ypogeia-nera-thessalias)

Συνεπώς, η ανεπάρκεια των συμβατικών πηγών γλυκού νερού για την κάλυψη των σημερινών και μελλοντικών αναγκών είναι μία πραγματικότητα. Στην περίπτωση της Θεσσαλίας για την επίλυση του προβλήματος, μεσοπρόθεσμα, αρκεί η ορθή διαχείριση των υδάτων, με συνετή χρήση και εκτενέστερη αξιοποίηση έργων υποδομών, όπως φράγματα και συλλέκτες όμβριων. Εντούτοις, το έλλειμα καθαρού νερού απαιτεί αντιμετώπιση σε περιοχές με δυσμενέστερες συνθήκες στο ισοζύγιο νερού, όπως είναι οι περιοχές με ανομβρία, ή μικρά νησιά που δεν έχουν φυσικούς ταμιευτήρες νερού. Η διεργασία που πλέον διαδραματίζει κεντρικό ρόλο στην υδροδότηση των περιοχών αυτών (π.χ. Μέση Ανατολή, Νησιά του Αιγαίου) είναι η αφαλάτωση.

1.2: Η αφαλάτωση

Η αφαλάτωση επιτρέπει την επεξεργασία του αλμυρού θαλασσινού νερού, με σκοπό την παραγωγή καθαρού νερού για κάθε χρήση. Έτσι, δίνει την δυνατότητα εκμετάλλευσης μιας ανεξάντλητης πηγής νερού, ώστε να γεφυρωθεί το χάσμα μεταξύ των αυξανόμενων αναγκών και των στάσιμων ή μειούμενων φυσικών πηγών, αλλά και η επίτευξη οικουμενικής πρόσβασης σε καθαρό νερό, όπως περιγράφεται στον Στόχο Βιώσιμης Ανάπτυξης 6 των Ηνωμένων Εθνών, καθώς 2.2 δισεκατομμύρια ανθρώπων δεν είχαν πρόσβαση σε ασφαλείς πηγές καθαρού νερού το 2023.

Όπως αποτυπώνεται στο Διάγραμμα 2, η αφαλάτωση χρησιμοποιείται ευρέως από την δεκαετία του 80, ενώ αυξάνεται διαρκώς, τόσο ο αριθμός των λειτουργικών μονάδων αφαλάτωσης, όσο και η ολική δυναμικότητα σε παραγωγή καθαρού νερού. (Jones et al., 2019)



Διάγραμμα 2: Χρονική εξέλιξη ενεργών μονάδων αφαλάτωσης και δυναμικότητας (Jones et al., 2019)

Αφαλάτωση, ονομάζεται η κατεργασία του θαλασσινού (ή υφάλμυρου) νερού, στο οποίο υπάρχει υψηλή συγκέντρωση αλάτων, με σκοπό την ανάκτηση ρεύματος νερού, με συγκέντρωση αλάτων τέτοια, που να καθιστά το νερό αποδεκτό για ανθρώπινη χρήση και κατανάλωση. Συγκεκριμένα, στο θαλασσινό νερό υπάρχουν διαλυμένες ποσότητες από διάφορα ανόργανα συστατικά ή άλατα. Η συνολική περιεκτικότητα αλάτων στο νερό, ονομάζεται Αλατότητα (Salinity), μετριέται σε μονάδες αλατότητας (PSU), δηλαδή σε γραμμάρια αλάτων σε 1kg νερού. Η αλατότητα χρησιμοποιείται για την κατηγοριοποίηση του νερού σε γλυκό (<0.5 PSU), υφάλμυρο (0.5 έως 10 PSU) , και αλμυρό (30 έως 40 PSU). (Αυλωνίτης, 2012)

Στην Εικόνα 1, απεικονίζεται ένα απλουστευμένο διάγραμμα εισροών-εκροών για τις διεργασίες αφαλάτωσης, όπου εισέρχονται στην μονάδα η πρώτη ύλη (θαλασσινό νερό) και η απαιτούμενη ενέργεια της διεργασίας, ενώ παράγεται το καθαρό νερό και η άλμη (brine), ένα υγρό ρεύμα πυκνό σε άλατα. Επειδή, ο όρος «άλμη» αναφέρεται ανάλογα τα συμφραζόμενα με εννοιολογική σημασία «νερό με μεγάλο ποσοστό σε άλατα», στην ελληνική βιβλιογραφία το παραπροϊόν της αφαλάτωσης αναφέρεται περιφραστικά ως

«συμπύκνωμα άλμης», «άλμη αφαλατώσεων» ή ως «αλμόλοιπος» (σε νομοθετικά κείμενα).



Εικόνα 1: Σκαρίφημα εισροών-εκροών αφαλάτωσης (Σημειώσεις Μαθήματος Διαχείρισης Υδάτων, ΣΧΜ ΕΜΠ)

Οι τεχνολογίες που χρησιμοποιούνται για την επίτευξη του διαχωρισμού χωρίζονται σε 2 βασικές κατηγορίες: στις θερμικές μεθόδους αφαλάτωσης και στον διαχωρισμό με χρήση μεμβρανών. Οι θερμικές μέθοδοι ονομάζονται και μέθοδοι αλλαγής φάσης, αφού βασίζονται στην απόσταξη. Αξιοποιούν το γεγονός ότι κατά την θέρμανση του αλατούχου νερού, τα μόρια νερού εξατμίζονται λόγω του χαμηλού σημείου βρασμού, απομακρύνονται από το αλατούχο νερό, ψύχονται και συλλέγονται ως καθαρό νερό. Οι θερμικές μέθοδοι ήταν οι πρώτες που αναπτύχθηκαν, όμως μειονεκτούν εξαιτίας των υψηλών ενεργειακών απαιτήσεων για την θέρμανση, ενώ έχουν χαμηλά ποσοστά ανάκτησης καθαρού νερού¹, μόλις το 20 με 25% κατά μ.ό. για θαλασσινό νερό τροφοδοσίας. (Jones et al., 2019)

Αντίθετα, οι τεχνολογίες αφαλάτωσης μέσω μεμβρανών ή τεχνικές μίας φάσης, αναπτύχθηκαν αργότερα, ύστερα από την ανακάλυψη και παραγωγή των ημιπερατών μεμβρανών, οι οποίες επιτρέπουν τη διέλευση μορίων του νερού αλλά όχι τη διέλευση αλάτων. Η πιο διαδεδομένη μέθοδος αφαλάτωσης με βάση τις μεμβράνες είναι η αντίστροφη ώσμωση (Reverse Osmosis, RO) στην οποία βασίζεται το 70% της συνολικής δυναμικότητας των μονάδων αφαλάτωσης (Jones et al., 2019). Σε σύγκριση με τις παραδοσιακές θερμικές μεθόδους, η τεχνική της αντίστροφης ώσμωσης απαιτεί την αγορά εξειδικευμένων μεμβρανών υψηλού κόστους, όμως έχει πολύ μικρότερες ενεργειακές ανάγκες, ενώ φτάνει σε ανάκτηση 42% καθαρού νερού κατά μ.ό. από τροφοδοσία θαλασσινού νερού. (Αυλωνίτης, 2012)

¹ Το ποσοστό ανάκτησης καθαρού νερού, υπολογίζεται με βάση τον τύπο: $R = \frac{q_p}{q_f} * 100\%$, οπού Q_P είναι ο όγκος προϊόντος που παράγεται, από Q_f όγκο νερού τροφοδοσίας. Το ποσοστό ανάκτησης νερού σχετίζεται άμεσα με την αλατότητα στο απορριπτόμενο ρεύμα άλμης.

Τα τελευταία χρόνια αναπτύσσονται συνεχώς νέες τεχνολογίες αφαλάτωσης, όπως η ηλεκτροδιάλυση (ED) και η νανοδιήθηση (NF), οι οποίες συνεισφέρουν το 5% του παραγόμενου νερού από αφαλατώσεις, ενώ επιτυγχάνουν καλύτερα ποσοστά ανάκτησης καθαρού νερού, 86% και 69% αντίστοιχα. (Jones et al., 2019)

Παρά την κοινωνική σημασία της, η αφαλάτωση έχει σημαντικό περιβαλλοντικό αντίκτυπο το οποίο κατά κύριο λόγο αφορά, τις ενεργειακές απαιτήσεις της διεργασίας και τις επιπτώσεις από το ρεύμα παραγόμενης άλμης, που είναι και το αντικείμενο του παρόντος κεφαλαίου.

1.3: Διαχείριση της άλμης αφαλατώσεων

Η κάλυψη των αυξανόμενων υδατικών αναγκών μέσω της αφαλάτωσης, συνεπάγεται την παράλληλη παραγωγή τεράστιων ποσοτήτων άλμης. Για το έτος 2019 υπολογίστηκε ότι για την παραγωγή 95.4 εκατ. m³ πόσιμου νερού ημερησίως από αφαλατώσεις, η ποσότητα παραγόμενης άλμης αντιστοιχούσε σε 141.5 εκατ. m³ (Jones et al., 2019).

Το ρεύμα άλμης περιέχει αυξημένη αλατότητα, που κυμαίνεται από 50 έως 80 PSU, ανάλογα την αλατότητα του νερού τροφοδοσίας και τον βαθμό ανάκτησης καθαρού νερού. Ακόμα, σε αντιστοιχία με την τεχνολογία αφαλάτωσης που χρησιμοποιείται είναι πιθανό να περιέχονται μικρές συγκεντρώσεις χημικών που προστέθηκαν στην φάση της προεπεξεργασίας, αντικαθαλωτικά που χρησιμοποιούνται για τον καθαρισμό των μεμβρανών, μέταλλα λόγω της διάβρωσης σωληνώσεων κ.ά. Κατά συνέπεια, απαιτείται υπεύθυνη διαχείριση, καθώς ανεξέλεγκτη απόρριψη του ρεύματος άλμης στο έδαφος ή τους υδάτινους αποδέκτες ενδέχεται να επιφέρει αρνητικές συνέπειες στην ισορροπία των τοπικών οικοσυστημάτων. Πρόσφατα, έχουν αναπτυχθεί σε πιλοτικό στάδιο καινοτόμες λύσεις με σκοπό την περαιτέρω επεξεργασία και αξιοποίηση της άλμης αφαλατώσεων, προκειμένου να ελαχιστοποιηθεί, είτε να μηδενιστεί τελείως, η ποσότητα αποβλήτου. (Panagopoulos et al., 2019)

1.3.1: Διάθεση στο περιβάλλον

Η πιο απλή, φθηνή και ευρέως χρησιμοποιούμενη μέθοδος, αφορά την απόρριψη της άλμης σε υδάτινους αποδέκτες, συγκεκριμένα στην θάλασσα. Η άλμη επιστρέφει στο θαλάσσιο σώμα από το οποίο προήλθε, με αυξημένη συγκέντρωση αλάτων και περιέχοντας επιπλέον ποσότητες χημικών. Καθώς η σύσταση της διαφέρει από αυτήν του θαλασσινού νερού, ενδέχεται να διαταράξει την ισορροπία του θαλάσσιου οικοσυστήματος, και να έχει βλαπτικές ιδιότητες για ορισμένους οργανισμούς του βυθού. Όπως θα αναπτυχθεί παρακάτω, με κατάλληλο σχεδιασμό της απόρριψης στην θάλασσα, ώστε να επιτευχθεί έντονη αραίωση του ρύπου, οι περιβαλλοντικές επιπτώσεις ελαχιστοποιούνται.

Επιπλέον, έχουν αναπτυχθεί μία σειρά από εναλλακτικές πρακτικές διάθεσης της άλμης στο περιβάλλον, οι οποίες όμως έχουν περιορισμένη εφαρμοσιμότητα.

Η απόρριψη της άλμης στο δίκτυο αποχέτευσης είναι μία φθηνή μέθοδος που δεν απαιτεί επιπλέον εξοπλισμό απόρριψης, ενώ έχει θετικά στοιχεία καθώς το ρεύμα άλμης αραιώνεται απευθείας με τα αστικά λύματα. Η αλατότητα στο τελικό ρεύμα που θα οδηγηθεί στο σύστημα επεξεργασίας, απαιτείται να μην ξεπερνάει τους 3 PSU, ειδάλλως θα προκύψουν βλάβες στη μονάδα επεξεργασίας λυμάτων. Επομένως, η λύση αυτή εφαρμόζεται μόνο για μικρές μονάδες αφαλάτωσης, γιατί η παροχή άλμης πρέπει να είναι τουλάχιστον 20 φορές μικρότερη από την παροχή της αποχέτευσης.

Μια επιλογή διάθεσης για μονάδες αφαλάτωσης της ενδοχώρας είναι η έγχυση της άλμης σε γεωτρήσεις. Απαιτεί την διάνοιξη πηγαδιού βαθιά στο έδαφος, ώστε να ξεπεράσει σε βάθος τους υδροφορείς πόσιμου νερού, ώστε η άλμη να είναι εφικτό να αποτεθεί χωρίς να υποβαθμίσει την ποιότητα τους. Η συγκεκριμένη λύση συνεπάγεται πολύ μεγάλο κόστος εργασιών, ενώ συνοδεύεται από μελέτες της αντοχής του εδάφους, απορροφητικότητας των πετρωμάτων στο βάθος έγχυσης κ.α. για την επιλογή κατάλληλης τοποθεσίας.

Σε χώρες με έντονη ηλιοφάνεια και χαμηλή ένταση βροχοπτώσεων, υπάρχει η επιλογή κατασκευής λιμνών εξάτμισης. Πρόκειται για μεγάλες εκτάσεις γης, όπου κατασκευάζονται ρηχές τεχνητές λίμνες με αδιαπέραστα τοιχώματα. Εκεί, η άλμη αφήνεται μέχρι το νερό να εξατμιστεί. Οι λίμνες εξάτμισης αποτελούν την ακριβότερη μέθοδο διάθεσης της άλμης στο περιβάλλον, ενώ καταλαμβάνουν μεγάλες εκτάσεις γης.

Τέλος, η χρήση της άλμης για άρδευση αποτελεί μία μέθοδο επαναχρησιμοποίησης της άλμης που αντικαθιστά την κατανάλωση νερού. Η εφαρμογή έχει ενδιαφέρον για εδάφη όπου αναπτύσσεται χλωρίδα ανεκτική στην υψηλή αλατότητα ή για πότισμα γκαζόν. Παρόλα αυτά, η εκτεταμένη χρήση της άλμης για άρδευση μπορεί να υποβαθμίσει τον υπόγειο υδροφορέα. (Panagopoulos et al., 2019)

Όπως προκύπτει άμεσα, η διάθεση της άλμης στη θάλασσα αποτελεί την μοναδική εφαρμόσιμη επιλογή για τη πλειοψηφία των μονάδων αφαλάτωσης, ειδικά όσων είναι μεγάλης δυναμικότητας.

18

1.3.2: Επεξεργασία προς ελαχιστοποίηση υγρών αποβλήτων

Τα τελευταία χρόνια, ο σημαίνων ρόλος της αφαλάτωσης έχει δώσει κίνητρο στην επιστημονική κοινότητα να βελτιστοποιήσει κάθε πτυχή της διεργασίας. Έτσι, με βάση τους κινδύνους από τη διάθεσης άλμης στην θάλασσα και με γνώμονα την βιωσιμότητα και την κυκλικότητα της διεργασίας, έχουν αναπτυχθεί σε πειραματικό επίπεδο συστήματα επεξεργασίας της άλμης, με σκοπό την ελαχιστοποίηση ή τον μηδενισμό των υγρών αποβλήτων (Zero Liquid Discharge, ZLD).

Το σύστημα ZLD περιλαμβάνει την επεξεργασία της άλμης αφαλατώσεων σε πολλές φάσεις και βασίζεται στην σταδιακή ανάκτηση νερού και την όλο και μεγαλύτερη συμπύκνωση του ρεύματος άλμης. Αρχικά, στην φάση προεπεξεργασίας απομακρύνονται ουσίες που συντελούν στην φθορά των μεμβρανών. Έπειτα, ακολουθεί μία αλληλουχία διεργασιών, είτε διεργασίες μεμβρανών (που αναφέρονται ως φάση συμπύκνωσης), είτε θερμικές διεργασίες (φάση εξάτμισης). Στην ουσία, πρόκειται για τεχνολογίες που βασίζονται στις παραδοσιακές τεχνολογίες αφαλάτωσης, με την διαφορά ότι είναι σχεδιασμένες με στόχο την επεξεργασία τροφοδοσίας μεγαλύτερης αλατότητας. Μετά την φάση εξάτμισης, ακολουθεί η φάση κρυστάλλωσης, όπου απομένει μόνο στερεό υπόλειμμα. (Panagopoulos & Giannika, 2022)

Το θετικό των συγκεκριμένων συστημάτων είναι ότι παράγεται μεγαλύτερη ποσότητα καθαρού νερού, και ότι δεν υπάρχει υγρό απόβλητο. Παράλληλα, διερευνώνται τεχνολογίες, όπου θα πραγματοποιείται ανάκτηση αλάτων ώστε το σύστημα επεξεργασίας άλμης να αποκτήσει οικονομικό αντίκτυπο. Όμως, αξίζει να σημειωθεί ότι αρκετές από τις διεργασίες που περιλαμβάνονται στο σύστημα έχουν εξαιρετικά υψηλό κόστος, τόσο λόγω των εξειδικευμένων μεμβρανών, όσο και λόγο των ενεργοβόρων διεργασιών. Την ίδια στιγμή, υπάρχουν μόνο πιλοτικές εφαρμογές των ZLD συστημάτων.

Παρά το τεχνολογικό ενδιαφέρον και την πρόκληση κλιμάκωσης των παραπάνω συστημάτων, οι τεχνολογίες αξιοποίησης της άλμης βρίσκονται σε πρώιμο στάδιο, και δεν αποτελούν, προς το παρόν, ρεαλιστική λύση για την διαχείριση της άλμης. Οπότε, για το προσεχές μέλλον, η συντριπτική ποσότητα άλμης θα συνεχίσει να απορρίπτεται στην θάλασσα. Για αυτόν τον λόγο, έχει ιδιαίτερη σημασία, αφενός η γνώση των αρνητικών επιπτώσεων της άλμης για τους θαλάσσιους οργανισμούς, και η θεσμοθέτηση κανονισμών που θα επιβάλλουν την ορθή απόρριψη για την αποφυγή της υποβάθμισης του περιβάλλοντος.

1.4: Διάθεση σε θαλάσσιους αποδέκτες

Το ρεύμα της άλμης διαφέρει σε χαρακτηριστικά από το θαλασσινό νερό. Η παράμετρος ενδιαφέροντος, αφορά την υπερβάλλουσα τιμή αλατότητας σε σύγκριση με την αλατότητα της θάλασσας (Μεσόγειος: μέση αλατότητα 37.7 PSU), η οποία καθιστά την άλμη υγρό μεγαλύτερης πυκνότητας, με αποτέλεσμα να κατέρχεται στον πυθμένα, με το που εισαχθεί στην θάλασσα, επηρεάζοντας οργανισμούς του βυθού.

Επίσης, αν προέρχεται από θερμική μέθοδο αφαλάτωσης, η άλμη ενδέχεται να έχει μεγαλύτερη θερμοκρασία από το θαλασσινό νερό κατά 5 με 10°C. Η διαφορά θερμοκρασίας, επιδρά στην ισορροπία των θαλάσσιων οργανισμών, όμως η ένταση της μπορεί να ελαττωθεί μέσω αξιοποίησης της άλμης για ανάκτηση θερμότητας, ή λόγω πιθανής πτώσης της θερμοκρασίας κατά την διαδρομή από την έξοδο της μονάδας στον υποθαλάσσιο αγωγό μέχρι το σημείο εκροής. Επομένως, η διαφορά θερμοκρασίας έχει παροδικό χαρακτήρα, είναι εφικτό να θεραπευτεί πριν την απόρριψη του αποβλήτου, δεν αποτελεί ζητούμενο για τις μονάδες αντίστροφης ώσμωσης, οπότε δεν απασχολεί έντονα την βιβλιογραφία η πρόβλεψη των συνεπειών της.

Όσον αφορά τα διάφορα χημικά που εισέρχονται στην άλμη κατά την διεργασία της αφαλάτωσης, οι ποσότητες τους είναι μικρές στο απόβλητο, δεν προσδιορίζονται ποσοτικά, επομένως, η επίδρασή τους στους οργανισμούς του πυθμένα δεν είναι ξεκάθαρη, πέρα από μερικά ποιοτικά στοιχεία.

1.4.1: Περιβαλλοντικές επιπτώσεις

Τις πρώτες δεκαετίες μαζικής χρήσης της αφαλάτωσης για παραγωγή πόσιμου νερού το περιβαλλοντικό αντίκτυπο θεωρούνταν δευτερεύουσας σημασίας. Ως αποτέλεσμα υπήρχε ελλιπής καταγραφή της πρότερης κατάστασης του βυθού ή παρακολούθηση του περιβάλλοντος στο σημείο εκροής, προκειμένου να εντοπιστούν τυχόν βλαπτικές συνέπειες της απορριπτόμενης άλμης στο τοπικό περιβάλλον. Οπότε, παρά την πρόοδο και εξάπλωση της τεχνολογίας, υπήρξε υστέρηση στον τομέα του προσδιορισμού περιβαλλοντικών επιπτώσεων. Ακόμη, στις περισσότερες μελέτες που καταπιάνονται με το ζήτημα κυριαρχούν τα ποιοτικά και εμπειρικά στοιχεία, γεγονός που δυσχεραίνει την εξαγωγή ασφαλών συμπερασμάτων με γενική ισχύ. (D. A. Roberts et al., 2010)

Αξίζει να αναφερθεί μία αξιόλογη μελέτη για την επίδραση της άλμης στην ανάπτυξη των λιβαδιών της Posidonia Oceanica (Xevgenos et al., 2021). Η Posidonia Oceanica έχει επιστημονικό ενδιαφέρον για 2 λόγους. Πρώτον, για τον κεντρικό της ρόλο στο θαλάσσιο

οικοσύστημα, αφού αναπτύσσεται σχηματίζοντας λιβάδια στο βυθό, μέσω τον οποίων απορροφά διοξείδιο του άνθρακα και προσφέρει τροφή στους υπόλοιπους θαλάσσιους οργανισμούς, ενισχύοντας την βιοποικιλότητα. Άλλωστε, εξαιτίας της περιβαλλοντικής αξίας της θεωρείται από την ΕΕ οικότοπος προτεραιότητας. Δεύτερον, η υψηλή ευαισθησία της P. Oceanica στις μεταβολές του περιβάλλοντος την καθιστούν κατάλληλο βιοδείκτη (bioindicator), δηλαδή η κατάσταση της δίνει πληροφορίες για την υγεία του τοπικού οικοσυστήματος. Συγκεκριμένα, έχουν διαπιστωθεί επιπτώσεις στην ανάπτυξη και την συμπεριφορά των λιβαδιών της, για τιμές αλατότητας μεγαλύτερες από 39 PSU. Αν αναλογιστούμε ότι μέση αλατότητα της Μεσογείου είναι περίπου 37.7 PSU, τότε γίνεται αντιληπτό, ότι η παρακολούθησή της P. Oceanica μας πληροφορεί ακόμα και για πολύ μικρές μεταβολές της αλατότητας, της τάξης του 1 PSU.

Η πειραματική μέθοδος που ακολουθήθηκε αφορούσε την χρόνια παρακολούθηση της πυκνότητας βλαστών (Shoot Density) και της επιφάνειας φυλλώματος (Leaf Surface Area) της P. Oceanica, στις περιοχές εκροής άλμης των δύο μεγάλων μονάδων αφαλάτωσης της Κύπρου. Με χρήση στατιστικών εργαλείων, συγκρίθηκαν οι παράμετροι για την ανάπτυξη της P.Oceanica σε 3 σημεία ελέγχου: (α) στο σημείο εκροής της άλμης, (β) σε απόσταση 150m και (γ) σε μακρινή απόσταση ως δείγμα αναφοράς.

Τα αποτελέσματα των μετρήσεων ανέδειξαν πως οι τιμές πυκνότητας βλαστών και επιφάνειας φυλλώματος στη τοποθεσία εκροής ήταν μειωμένες σε σχέση με το δείγμα αναφοράς. Παράλληλα, στο δείγμα στα 150m από την εκροή, οι μεταβολές ήταν μικρές σε σχέση με το δείγμα αναφοράς. Το συμπέρασμα που εξήχθη ήταν πως η αυξημένη αλατότητα στο βυθό, εξαιτίας της απορριπτόμενης άλμης, είχε αρνητικές επιπτώσεις στον ρυθμό ανάπτυξης των λιβαδιών της P. Oceanica, όμως οι επιπτώσεις αυτές περιορίζονται στην περιοχή γύρω από το σημείο εκροής και δεν εκτείνονται σε μεγαλύτερες αποστάσεις. (Xevgenos et al., 2021)

Μια καταγραφή των περιβαλλοντικών επιπτώσεων που αναφέρονται συχνά στην βιβλιογραφία περιλαμβάνει:

- Αρνητικές επιπτώσεις στην ανάπτυξη της P. Oceanica για τιμές αλατότητας πάνω από 39 psu, με αυξημένη θνησιμότητα σε αλατότητα άνω των 42 psu. (Sola et al., 2020)
- Τα λιβάδια της Cymodocea Nodosa εμφανίζουν ανεκτικότητα σε ευρύτερες τιμές αλατότητας, σε σχέση με την P. Oceanica, ωστόσο, τιμές αλατότητας πάνω από τους 39-41psu, συνεπάγονται επιδράσεις στην ανάπτυξη του φυτού. (Sola et al., 2020)

- Οι κοραλλιογενείς ύφαλοι επηρεάζονται για μεταβολές στην αλατότητα μεγαλύτερες του 10%. (Panagopoulos et al., 2019)
- Έχουν παρατηρηθεί μειωμένα μεγέθη σε συγκεκριμένα είδη ψαριών στον Αραβικό κόλπο, τα οποία ζουν κοντά σε κοραλλιογενείς υφάλους. Στον Αραβικό κόλπο, οι μεταβολές στην αλατότητα είναι εντονότερες, λόγω της ισχυρής δραστηριότητας αφαλατώσεων. (D'Agostino et. al., 2021)
- Εντοπίζεται αυξημένη παρουσία ψαριών γύρω από τα σημεία εκροής άλμης. (Xevgenos et al., 2021)
- Η έντονη τύρβη που αναπτύσσεται πολύ κοντά στα σημεία εκροής άλμης, έχει αποτέλεσμα την παράσυρση και τραυματισμό μικρών ψαριών.

Τα ποσοτικά κριτήρια αλατότητας, για την διασφάλιση της υγείας των λιβαδιών Posidonia Oceanica, έχουν προσδιοριστεί ως εξής: πρώτον, η αλατότητα δεν πρέπει να ξεπερνάει τους 38.5psu σε πάνω από το 25% των μετρήσεων, δεύτερον, δεν πρέπει να ξεπερνάει τους 40psu σε πάνω από το 5% των μετρήσεων. (Sadhwani Alonso & Melián-Martel, 2018)



Εικόνα 2: Χάρτης οργανισμών ενδιαφέροντος στις παράκτιες περιοχές της Μεσογείου. Μωβ: παρουσία Posidonia Oceanica. Πορτοκαλί: παρουσία Cymodocea & Zostera.(Pistocchi et al., 2020)

Στην Εικόνα 2, καταγράφονται οι οικότοποι ενδιαφέροντος που βρίσκονται σε παράκτιες περιοχές. Μέσω της συστηματικής παρακολούθησης και καταγραφής τους, γίνονται γνωστές οι τοποθεσίες σημαντικών βιότοπων. Με αυτόν τον τρόπο, σε κάθε νέα μονάδα αφαλάτωσης που κατασκευάζεται, θα πραγματοποιείται σχεδιασμός της απόρριψης άλμης, ώστε να μην επιδρά στα προαναφερθέντα οικοσυστήματα.

Αξίζει να τονιστεί, πως οι περιβαλλοντικές επιπτώσεις συγκεντρώνονται σε μία μικρή περιοχή γύρω από την τοποθεσία απόρριψης. Δηλαδή, οι οργανισμοί επηρεάζονται έντονα σε ακτίνα λίγων δεκάδων μέτρων από το σημείο εκροής, όπου ακόμα η συγκέντρωση αλάτων διαφέρει σημαντικά από αυτή της θάλασσας. Οι επιδράσεις του ρύπου σε μεγαλύτερες αποστάσεις, είναι δυσδιάκριτες, αφού σε απόσταση 1000m η υπερβάλλουσα αλατότητα σπάνια ξεπερνάει τους 0,5 PSU. (D.A. Roberts, 2010)

Ακόμη, έχουν εκφραστεί φόβοι από την επιστημονική κοινότητα, σχετικά με αναντίστρεπτες μακρογρόνιες μεταβολές, εξαιτίας της επίδρασης των αφαλατώσεων στη σύσταση της θάλασσας, σχετικές με τη πιθανότητα μια μικρή αύξηση της μέσης αλατότητας να επιφέρει αλυσιδωτές αντιδράσεις στο οικοσύστημα με απρόβλεπτα αποτελέσματα. Η πιο δυσμενής περίπτωση είναι ο Περσικός κόλπος. Ένα αργά ανανεούμενο σύστημα, από το οποίο εξάγονται σημαντικές ποσότητες καθαρού νερού (περίπου το 50% της παγκόσμιας δυναμικότητας αφαλάτωσης είναι συγκεντρωμένο στις ακτές του Περσικού κόλπου). Συνεπώς, η ανθρωπογενής πίεση στο σύστημα λαμβάνει την μέγιστη τιμή της. Παρόλα αυτά, η επίδραση της αφαλάτωσης στο συνολικό ισοζύγιο νερού-αλάτων του Περσικού κόλπου, αντιστοιχεί μόλις στο 5% του αποτυπώματος της φυσικής διεργασίας της εξάτμισης². Παράλληλα, η προσομοίωση της κατάστασης του κόλπου μέχρι το έτος 2100, με χρήση προβλεπτικού μοντέλου, συνυπολογίζοντας την ραγδαία αύξηση στη δυναμικότητα αφαλάτωσης σε αυτό το διάστημα, έδωσε καθησυχαστικά αποτελέσματα. Συγκεκριμένα, στο δυσμενέστερο σενάριο, η αύξηση της συγκέντρωσης σε επίπεδο κόλπου θα είναι 1psu, ενώ για τα πιο ρεαλιστικά σενάρια, η αύξηση αυτή δεν θα ξεπερνά το 0,5 psu (Paparella et al., 2022).

Με βάση τα παραπάνω, συνάγεται άμεσα το συμπέρασμα, ότι ο σωστός σχεδιασμός της απόρριψης της άλμης αφαλάτωσης στη θάλασσα, είναι αναγκαία, αλλά και ικανή συνθήκη, ώστε να ελαχιστοποιηθούν οι δυσάρεστες περιβαλλοντικές επιπτώσεις.

² Η μακροσκοπική επίδραση της αφαλάτωσης στο ισοζύγιο νερού και αλάτων του αποδέκτη, μέσω της άντλησης θαλασσινού νερού, και έπειτα, μέσω της επανεισαγωγής στον αποδέκτη του διαλύματος άλμης, ισοδυναμεί με απόληψη καθαρού νερού, ίσης ποσότητας με το παραγόμενο καθαρό νερό.

1.4.2: Περιορισμός των περιβαλλοντικών επιπτώσεων

Όπως αναπτύχθηκε παραπάνω, η παράμετρος που καθορίζει το κατά πόσο οι οργανισμοί του βυθού θα υποβαθμιστούν από τις εκροές άλμης, σχετίζεται με την τοπική συγκέντρωση αλάτων. Επομένως, ο στόχος του συστήματος απόρριψης άλμης πρέπει να είναι η επίτευξη του καλύτερου δυνατού βαθμού αραίωσης του ρύπου, σε όσο το δυνατόν μικρότερη απόσταση από το σημείο εκροής. Αρκεί η κατάλληλη επιλογή της τοποθεσίας εκροής και σχεδιασμός της εγκατάστασης απόρριψης.

Ο βασικός παράγων που πρέπει να εξετάζεται κατά τον σχεδιασμό της διάθεσης της άλμης στη θάλασσα είναι το σημείο απόρριψης, τα βιολογικά, γεωμορφολογικά και υδρολογικά χαρακτηριστικά του. Ειδικότερα, η τοποθεσία που θα επιλεχθεί, είναι κεντρικής σημασίας να μην γειτνιάζει με προστατευόμενους οικοτόπους, όπως η P. Oceanica, οι οποίοι είναι ευαίσθητοι στις περιβαλλοντικές μεταβολές. Επίσης, η απόρριψη της άλμης έχει καλύτερα αποτελέσματα, όταν πραγματοποιείται με υποθαλάσσιο αγωγό που καταλήγει σε μεγάλη απόσταση από την ακτή, ώστε να μην επηρεάζει το παράκτιο περιβάλλον. Ταυτόχρονα, πρέπει να αποφεύγονται θέσεις με χαμηλούς ρυθμούς ανανέωσης των παρακείμενων υδάτων, όπως κόλποι, και οι απορρίψεις να κατευθύνονται σε τοποθεσίες με όσο το δυνατόν εντονότερα θαλάσσια ρεύματα, τα οποία συμβάλλουν στην έντονη ανάμειξη με τη θάλασσα. Τέλος, η επιλογή σημείων με έντονη κλίση βυθού ενισχύει περαιτέρω την αραίωση του ρύπου, αντί για σημεία με επίπεδο πυθμένα. (D. A. Roberts et al., 2010) (Bleninger & Jirka, 2008)

Σε ότι αφορά την διάταξη απόρριψης καθαυτή, προκειμένου να προκαλεί έντονη ανάμειξη του ρύπου, χρειάζεται να αξιοποιεί το σχετικό βάρος της άλμης, και μεγάλη ταχύτητα εκροής. Η απλούστερη διάταξη αυτής της μορφής είναι ένας σωλήνας μικρής διαμέτρου, ο οποίος απορρίπτει την άλμη με κλίση προς τα πάνω με μεγάλη ταχύτητα, οπότε δημιουργείται το φαινόμενο του κεκλιμένου πυκνού πίδακα ρευστού.

Όταν είναι εφικτό, μία ιδανική διάταξη απόρριψης αποτελείται από μία συστοιχία διαχυτήρων, τοποθετημένους με τρόπο τέτοιο ώστε να παρασύρουν στο πλούμιο όσο το δυνατόν μεγαλύτερο όγκο νερού. Για παράδειγμα, οι διαχυτήρες μπορούν να είναι τοποθετημένοι παράλληλα, με μικρή απόσταση μεταξύ τους, εκτοξεύοντας το υγρό στην ίδια ή σε αντίθετες κατευθύνσεις. Διαφορετική διάταξη, περιλαμβάνει διαχυτήρες που εκτοξεύουν τον ρύπο και σε 4 πλευρές (διάταξη Rosette). Η παραλλαγή που θα επιλεγεί, έχει να κάνει με τα γεωγραφικά χαρακτηριστικά της περιοχής και τα συνήθη θαλάσσια ρεύματα, ώστε να αξιοποιεί και τις γεωγραφικές ιδιαιτερότητες, μεγιστοποιώντας την διασπορά του ρύπου. (P. J. W. Roberts, 2015)

1.4.3: Εργαλεία μοντελοποίησης της διασποράς άλμης

Η διασπορά της άλμης στη θάλασσα από διατάξεις ενός ή πολλών διαχυτήρων, μπορεί να προβλεφθεί με την χρήση μαθηματικών μοντέλων. Η χρήση των μοντέλων διασποράς άλμης, εκτός από ερευνητικό ενδιαφέρον, έχει και πρακτική σημασία για τις βιομηχανίες αφαλάτωσης, καθώς μέσω των μοντέλων αυτών, μπορούν να αποδείξουν στις ρυθμιστικές αρχές, ότι η απόρριψη τηρεί τους κανονισμούς αραίωσης της άλμης. Στον Πίνακα 1 καταγράφονται περιπτώσεις, από κανονιστικές διατάξεις που βρίσκονται σε ισχύ για την διασπορά άλμης. (P. Roberts, 2015)

Region/Authority	Salinity Limit	Compliance point (relative to discharge)
US EPA	Increment ≤ 4 ppt	-
Carlsbad, CA	Absolute ≤ 40 ppt	1,000 ft (304.8 m)
Huntington Beach, CA	Absolute ≤ 40 ppt salinity (expressed as discharge dilution ratio of 7.5:1)	1,000 ft (304.8 m)
Western Australia guidelines	Increment < 5 %	-
Oakajee Port, Western Australia	Increment ≤ 1 ppt	-
Perth, Australia/ Western Australia EPA	Increment ≤ 1.2 ppt at 50 m and ≤ 0.8 ppt at 1,000 m	50 m and 1,000 m
Sydney, Australia	Increment ≤ 1 ppt	50-75 m
Gold Coast, Australia	Increment ≤ 2 ppt	120 m
Okinawa, Japan	Increment ≤ 1 ppt	Mixing zone boundary
Abu Dhabi	Increment $\leq 5 \%$	Mixing zone boundary
Oman	Increment ≤ 2 ppt	300 m

Πίνακας 1: Καταγραφή διεθνών κανονισμών για την διασπορά άλμης (Roberts, 2015)

Το απλούστερο μαθηματικό μοντέλο για την πρόβλεψη της πορείας του πλουμίου αμέσως μετά την εκροή, και για μικρές αποστάσεις (near-field) είναι το εμπειρικό μοντέλο ανάμειξης με βάση τη διαστατική ανάλυση, το οποίο θα αναπτυχθεί στην επόμενη ενότητα. Το μοντέλο αυτό, χρησιμοποιεί το εργαλείο της διαστατικής ανάλυσης, σε συνδυασμό με πειραματικά αποτελέσματα για το πλούμιο σε ήρεμο περιβάλλον υγρό, και δίνει προσεγγιστικές τιμές για την αραίωση και τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του πλουμίου.

Τα ολοκληρωτικά μοντέλα, ή μοντέλα παράσυρσης (Entrainment models), είναι μαθηματικά μοντέλα με ενσωματωμένες εμπειρικές παραμέτρους, τα οποία μελετάνε την συμπεριφορά συγκεκριμένων περιβαλλοντικών διεργασιών. Τα περιβαλλοντικά μοντέλα που αφορούν την συγκεκριμένη διεργασία είναι δύο τύπων. Πρώτον, τα μοντέλα κοντινής

απόστασης (near-field), όπως το CORMIX, τα οποία προσομοιώνουν το πίδακα σε κοντινή απόσταση, υπολογίζοντας μέσω παραμέτρων τον όγκο του παρασυρόμενου υγρού. Δεύτερον, υπάρχουν τα μοντέλα μεγάλων αποστάσεων (far-field), για την προσομοίωση της πορείας του ρύπου σε κλίμακα χιλιομέτρων, όπως το GEMS GCOM3D. Τα μοντέλα far-field, ενσωματώνουν δεδομένα βαθυμετρίας, την ταχύτητα του αέρα και δεδομένα για τα θαλάσσια ρεύματα. Και τα δύο είδη μοντέλων πραγματοποιούν προσεγγιστικούς, γρήγορους υπολογισμούς, χωρίς να ενσωματώνουν τις ειδικές αλληλεπιδράσεις στο πεδίο ροής. Αξιοποιούνται σε Μελέτες Περιβαλλοντικών Επιπτώσεων, και επιβεβαιώνουν την τήρηση των κανονισμών αραίωσης. (Bleninger & Jirka, 2008)

Η αριθμητική επίλυση του πεδίου ροής και όλων των εξισώσεων μεταφοράς στην περιοχή του πλουμίου, μέσω αριθμητικών μεθόδων, που θα επιχειρηθεί στην παρούσα εργασία, ανήκει στον κλάδο της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής (Computational Fluid Dynamics, CFD). Αρκετοί μελετητές έχουν καταφέρει να προσομοιώσουν λεπτομερώς το πυκνό πλούμιο αποβλήτου, χρησιμοποιώντας μεθόδους μοντελοποίησης της τυρβώδους ροής. Πλεονέκτημα των μεθόδων CFD, αποτελεί ότι μπορούν να υπολογίσουν τα πιο απαιτητικά φαινόμενα, όπως είναι οι διατάξεις πολλαπλών διαχυτήρων, ή η ενσωμάτωση των θαλάσσιων ρευμάτων στους υπολογισμούς κοντινής απόστασης. Όμως, σε σύγκριση με τα μοντέλα παράσυρσης, οι μέθοδοι CFD συνεπάγονται πιο δύσκολη διαδικασία για την ανάπτυξη των προσομοιώσεων, όπως και μεγάλύτερα υπολογιστικά κόστη. (P. J. W. Roberts, 2015)

1.5: Σχεδιασμός διάταξης απόρριψης άλμης

Όπως αναπτύχθηκε παραπάνω, η απόρριψη της άλμης μέσω κεκλιμμένου σωλήνα με μεγάλη ταχύτητα, μπορεί να επιτύχει την ικανοποιητική αραίωση της άλμης αφαλατώσεων, μέσα σε λίγες δεκάδες μέτρα. Παράλληλα, με την χρήση του ημιεμπειρικού μοντέλου ανάμειξης (Roberts, 1997), είναι δυνατόν να αξιολογηθούν άμεσα πολλές διαφορετικές διαρρυθμίσεις της απόρριψης, γεγονός που θα ήταν χρονοβόρο με τις κλασσικές πειραματικές διατάξεις.

1.5.1: Το φαινόμενο του κεκλιμένου πυκνού πίδακα

Στην Εικόνα 3, παρουσιάζεται στιγμιότυπο πειράματος πυκνού πλουμίου, το οποίο εκτοξεύεται με γωνία 60° από το οριζόντιο επίπεδο, σε ήρεμο περιβάλλον ρευστό.



Εικόνα 3: Στιγμιότυπο κεντρικού επιπέδου πυκνού πλουμίου. Η εικόνα ανακτήθηκε μέσω 3D φθορίωσης με χρήση laser (3DLIF) (PJW Roberts 2015)

Μέσα από τον χρωματισμό του πλουμίου, και από τους σχηματισμούς δινών στα σύνορά του, αποκαλύπτονται οι μηχανισμοί που ορίζουν την ένταση της ανάμειξης. Το πλούμιο της άλμης, αρχικά κατευθύνεται προς τα πάνω, λόγω της αρχικής ορμής εκτόξευσης από το στόμιο, όμως στη συνέχεια, η βαρυτική δύναμη εξουδετερώνει την αρχική ορμή του και στέλνει το πλούμιο στο πυθμένα της θάλασσας. Σε όλη την διάρκεια της διαδρομής του, η μεγάλη ταχύτητα του πλουμίου προκαλεί έντονα φαινόμενα τύρβης, εγκλωβίζοντας και συμπαρασύροντας μεγάλους όγκους παρακείμενου ρευστού. Με αυτόν τον τρόπο, ήδη από το σημείο πρόσκρουσης του πλουμίου με το έδαφος, έχει επιτευχθεί υψηλός βαθμός αραίωσης. Η αραίωση συνεχίζεται και για κάποια απόσταση ύστερα από το σημείο πρόσκρουσης, καθώς η ταχύτητα του πλουμίου παραμένει υψηλή, οπότε συνεχίζουν να είναι έντονες οι δίνες πάνω από το πυκνό ρευστό. Σε μεγαλύτερη απόσταση από το σημείο εκροής, τα φαινόμενα τύρβης σταδιακά αποσβένονται, και σχηματίζεται ξανά διαστρωματοποιημένη ροή, οπότε και ολοκληρώνεται το «κοντινό πεδίο» της απόρριψης (near field). (Roberts, 1997)

1.5.2: Εμπειρικό μοντέλο ανάμειξης

Πίδακας ρευστού εξέρχεται από ένα ακροφύσιο διαμέτρου D, με ταχύτητα U₀, και πυκνότητα ρ₀ στο σημείο εξόδου, μεγαλύτερη από την πυκνότητα του περιβάλλοντος ρευστού, ρ_α. Τότε, μπορεί να οριστεί η τροποποιημένη επιτάχυνση της βαρύτητας του αρχικού ρεύματος άλμης ως

$$g'_{0} = g * \frac{(\rho_{0} - \rho_{\alpha})}{\rho_{\alpha}},$$
 (1.1)

η οποία σχετίζεται με την «αισθητή» βαρυτική δύναμη που ασκείται στο πυκνό ρευστό. Η απόρριψη χαρακτηρίζεται από την αρχική ογκομετρική ροή Q, την ροή ορμής M, την ροή άνωσης B, όπως ορίζονται από τις εξισώσεις

$$Q = \frac{\pi * D^2}{4} * U_0 \quad \left[\frac{m^3}{s}\right],$$
 (1.2)

$$M = Q * U_0 = \frac{\pi * D^2}{4} * U_0^2 \quad \left[\frac{m^4}{s^2}\right]$$
(1.3)

 $B = Q * g'_{0} = \frac{\pi * D^{2}}{4} * U_{0} * g * \frac{(\rho_{0} - \rho_{\alpha})}{\rho_{\alpha}} \left[\frac{m^{4}}{s^{3}}\right].$ (1.4)

Με βάση τις παραπάνω κινηματικές ροές, μπορεί να οριστεί η κλίμακα μήκους όγκου,

και

$$L_Q = \frac{Q}{M^{\frac{1}{2}}} \,, \tag{1.5}$$

που χαρακτηρίζει την απόσταση εντός της οποίας η αρχική ογκομετρική παροχή είναι σημαντική για το πλούμιο. Δηλαδή, σε αποστάσεις X μεγαλύτερες από L_Q, η ογκομετρική παροχή του παρασυρόμενου υγρού είναι μεγαλύτερη από την αρχική ογκομετρική παροχή. Σε αποστάσεις από το σημείο εκροής, πολύ μεγαλύτερες από το μήκος όγκου L_Q , η επίδραση της αρχικής ροής όγκου δεν παίζει ρόλο στην διαμόρφωση της ροής, δηλαδή η ονομαστική ογκομετρική παροχή του αποβλήτου, είναι ασήμαντη σε σχέση με τον όγκο

$$L_M = \frac{M^{\frac{3}{4}}}{B^{\frac{1}{2}}},$$
 (1.6)

η οποία έχει φυσική έννοια την απόσταση $X = L_M$, όπου η κατακόρυφη ροή λόγω άνωσης γίνεται πιο σημαντική από την αρχική ροή ορμής.

Για την διαστατική ανάλυση του πλουμίου, πραγματοποιούνται κάποιες παραδοχές. Αρχικά, γίνεται δεκτή η προσέγγιση Boussinesq για την άλμη. Δηλαδή, η αρχική διαφορά πυκνότητας είναι ασήμαντη σε σχέση με την πυκνότητα του περιβάλλοντος ρευστού,

$$(\rho_0 - \rho_\alpha) \ll \rho_\alpha , \qquad (1.7)$$

άρα το ρευστό συμπεριφέρεται ως ασυμπίεστο.

Η ταχύτητα εκτόξευσης του ρευστού από το ακροφύσιο, είναι τέτοια ώστε να διαμορφώνονται συνθήκες τυρβώδους ροής. Ο αριθμός Reynolds, που χαρακτηρίζει την ροή, συνήθως είναι

$$Re = \frac{U_0 * \rho * L}{\mu} > 10^5 \,. \tag{1.8}$$

Άρα, το μοριακό ιξώδες, μ, μπορεί να αγνοηθεί, ενώ μικρές μεταβολές στον αριθμό Reynolds δεν επηρεάζουν την κατάσταση της ροής.

Όταν για τις κλίμακες μήκους ισχύει η συνθήκη

$$\frac{L_M}{L_Q} \gg 1 \iff \frac{U_O}{\left(\frac{\pi}{4}\right)^{1/4} * \sqrt{D * g'_0}} \gg 1, \qquad (1.9)$$

τότε, η ογκομετρική παροχή Q και αρχική ροή όγκου L_Q είναι ασήμαντες παράμετροι όσον αφορά τα χαρακτηριστικά της ροής. Πρακτικά, ο λόγος των κλιμάκων μήκους L_M/L_Q είναι ανάλογος με τον αδιάστατο αριθμό Froude της αρχικής ροής πίδακα. Δηλαδή, ο αριθμός Froude του πλουμίου στην έξοδο θα είναι

$$Fr_o = \frac{U_o}{\sqrt{D * g'_o}} \gg 1$$
. (1.10)

Όταν ικανοποιούνται οι 3 παραπάνω παραδοχές (Εξισώσεις 1.7, 1.8, 1.10), τότε από την διαστατική ανάλυση, όλες οι γεωμετρικές παράμετροι του πλουμίου θα είναι ανάλογες της κλίμακας μήκους L_M. Μετά από πράξεις, προκύπτει για την κλίμακα μήκους, ότι είναι ισοδύναμη με την έκφραση

$$L_M = \left(\frac{\pi}{4}\right)^{\frac{1}{4}} * D * Fr_0 , \qquad (1.11)$$

επομένως, μπορεί να διατυπωθεί, ότι για ροή του πυκνού πίδακα υπό δεδομένη γωνία θ, ισχύει

$$\frac{y}{D*Fr} = Const., \qquad (1.12)$$

όπου η απόσταση y αναφέρεται σε οποιοδήποτε γεωμετρικό χαρακτηριστικό του πλουμίου, όπως το μέγιστο ύψος ανύψωσης (Y_t) , είτε η οριζόντια απόσταση πρόσκρουσης (X_r) , δηλαδή η οριζόντια απόσταση από την εκροή στην οποία η κεντρική γραμμή του πλουμίου επιστρέφει στο ύψος εκροής.

Αντίστοιχα, ο βαθμός αραίωσης, S, που δίνεται από τον τύπο

$$S = \frac{g'_o}{g'} = \frac{\rho_0 - \rho_\alpha}{\rho - \rho_\alpha} , \qquad (1.13)$$

θα είναι, με βάση τη διαστατική ανάλυση, σε κομβικά σημεία της ροής ανάλογος του αριθμού Froude στο σημείο απόρριψης, *Fr*₀. Δηλαδή, ο βαθμός αραίωσης στο σημείο πρόσκρουσης S_i, και η τελική αραίωση, *S_m* μπορούν να προσδιοριστούν με ακρίβεια ±10% από τον τύπο

$$\frac{S}{Fr} = Const. \tag{1.14}$$

Οι παραπάνω γεωμετρικές παράμετροι, όπως και οι τοποθεσίες μέτρησης της αραίωσης αποτυπώνονται στο σκαρίφημα της Εικόνας 4.



Εικόνα 4: Σχεδιάγραμμα κεκλιμένου πυκνού πίδακα, όπου σημειώνονται οι χαρακτηριστικές γεωμετρικές παράμετροι (PJW Roberts 2015)

Ο πειραματικός προσδιορισμός των σταθερών αναλογίας για πίδακα γωνίας θ=60°, έδωσε τα παρακάτω αποτελέσματα (Roberts, 1997). Για το μέγιστο ύψος ανύψωσης,

$$\frac{\gamma_t}{D*Fr} = C_1 = 2.2$$
, (1.15)

για την οριζόντια θέση πρόσκρουσης,

$$\frac{X_i}{D * Fr} = C_4 = 2.4 , \qquad (1.16)$$

για τον βαθμό αραίωσης στο σημείο πρόσκρουσης

$$\frac{S_i}{Fr} = C_2 \approx 1.6,\tag{1.17}$$

για την μέγιστη αραίωση,

$$\frac{S_m}{Fr} = C_3 \approx 2.6 , \qquad (1.18)$$

η οποία υπολογίζεται στην θέση,

$$\frac{X_m}{D*Fr} = C_5 = 9.0. (1.19)$$

Στα επόμενα κεφάλαια, θα παρουσιαστούν οι μαθηματικές εξισώσεις που περιγράφουν το φαινόμενο του πυκνού πίδακα, η αριθμητική μέθοδος επίλυσης, καθώς και το λογισμικό που χρησιμοποιήθηκε για την προσομοίωσή του.

Κεφάλαιο 2: Μαθηματική Μοντελοποίηση

2.1: Εξισώσεις Navier-Stokes

Οι 3 φυσικοί νόμοι, στους οποίους στηρίζεται η μελέτη ροής των ρευστών, είναι ο νόμος διατήρησης μάζας σε ένα σύστημα

$$\left(\frac{dm}{dt}\right)_{\Sigma} = 0, \qquad (2.1)$$

ο δεύτερος νόμος κίνησης του Newton,

$$\vec{F} = \left(\frac{d\vec{P}}{dt}\right)_{\Sigma} = \left(\frac{d(m * \vec{u})}{dt}\right)_{\Sigma},$$
(2.2)

και ο νόμος διατήρησης της ενέργειας ενός συστήματος,

$$\dot{Q} - \dot{W} = \left(\frac{dE}{dt}\right)_{\Sigma}.$$
(2.3)

Σε ακίνητο όγκο ελέγχου (Ο.Ε.) ενός ρευστού μέσου, για μία εκτατική ιδιότητα του συστήματος B (πχ: μάζα m, ορμή P, ενέργεια E), ισχύει το Θεώρημα Μεταφοράς

$$\left(\frac{dB}{dt}\right)_{\Sigma} = \frac{d}{dt} \iiint_{V} b\rho dV + \oiint_{A} b\rho (\boldsymbol{u} * \boldsymbol{n}) dA, \qquad (2.4)$$

όπου b είναι η αντίστοιχη εντατική ιδιότητα $b = \frac{B}{m}$, ρ είναι η πυκνότητα του ρευστού, **u** η ταχύτητα του ρευστού και **n** το μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα σε κάθε σημείο της επιφάνειας του όγκου ελέγχου. Η έκφραση αυτή, σημαίνει, ότι ρυθμός μεταβολής μιας εκτατικής ιδιότητας του συστήματος (αριστερό μέλος), ισούται με το άθροισμα, του ρυθμού μεταβολής της ιδιότητας B του ρευστού που βρίσκεται εντός του Ο.Ε. (1^{ος} όρος δεξιού μέλους) και του ρυθμού καθαρής εκροής της ιδιότητας B από την επιφάνεια του όγκου ελέγχου, εξαιτίας της κίνησης του ρευστού (2^{ος} όρος δεξιού μέλους).

Αξιοποιόντας το Θεώρημα Απόκλισης (Gauss), ο όρος καθαρής εκροής της εξίσωσης 2.4, ισούται με

$$\iint_{A} b\rho(\boldsymbol{u} * \boldsymbol{n}) dA = \iiint_{V} \nabla * (b\rho \boldsymbol{u}) dV, \qquad (2.5)$$

οπότε, η 2.4 γίνεται

$$\left(\frac{dB}{dt}\right)_{\Sigma} = \frac{d}{dt} \iiint_{V} b\rho dV + \iiint_{V} \nabla * (b\rho \boldsymbol{u}) dV.$$
(2.6)

Εφαρμόζοντας την 2.6, σε στοιχειώδη όγκο ελέγχου και θέτοντας $B = m \rightarrow b = 1$, και συνδυάζοντας την εξίσωση διατήρησης μάζας (2.1), προκύπτει η Διαφορική Εξίσωση Συνέχειας,

$$\left(\frac{dm}{dt}\right)_{\Sigma} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla * (\rho \boldsymbol{u}) = 0.$$
(2.7)

Αν η ροή θεωρείται ασυμπίεστη, τότε η πυκνότητα (ρ) παραμένει σταθερή και η Δ.Ε. συνέχειας, γίνεται

$$\nabla * \boldsymbol{u} = 0 \rightarrow \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0,$$
 (2.8)

όπου με u, v, w συμβολίζονται οι 3 συνιστώσες του διανύσματος ταχύτητας u.

Αντίστοιχα, εφαρμόζοντας την 2.6 στον στοιχειώδη όγκο ελέγχου, θέτοντας $B = P = m * u \rightarrow b = u$, συνδυάζοντας με τον δεύτερο νόμο κίνησης του Newton (2.2), προκύπτει η εξίσωση

$$\left(\frac{d\boldsymbol{P}}{dt}\right)_{\Sigma} = \frac{\partial(\rho\boldsymbol{u})}{\partial t} + \nabla * (\rho\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}) = \Sigma \boldsymbol{F}, \qquad (2.9)$$

όπου το **uu** είναι τανυστής 2^{ης} τάξης, και ΣF η συνισταμένη δύναμη που ασκείται στον στοιχειώδη όγκο του ρευστού. Οι δυνάμεις που ασκούνται σε όγκο ελέγχου ενός ρευστού, χωρίζονται σε σωματικές και επιφανειακές. Στις απλές περιπτώσεις προβλημάτων ροής ρευστών (όπου δεν ασκείται ηλεκτρομαγνητικό ή άλλο πεδίο), η μόνη σωματική δύναμη που ασκείται είναι η βαρυτική. Όσον αφορά τις επιφανειακές δυνάμεις, αφορούν την αλληλεπίδραση του ρευστού με το περιβάλλον του, αποτελούνται από την πίεση (p) και τις ιξώδεις τάσεις (τ). Οι ιξώδεις τάσεις, αφορούν την δύναμη ανα μονάδα επιφάνειας που ασκείται σε σωματίδιο ρευστού, εξαιτίας της διαφοράς ταχύτητας με τα γειτονικά σωματίδια. Όλες οι επιφανειακές δυνάμεις που ασκούνται στο ρευστό, περιγράφονται σε οποιοδήποτε σημείο του χώρου από τον δυαδικό τάσεων **σ**. Συγκεκριμένα, η τάση που ασκείται σε επιφάνεια ανύσματος **n**, είναι

$$\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{n}} = \boldsymbol{n} \ast \boldsymbol{\sigma} = -p \ast \boldsymbol{n} + \boldsymbol{\tau} \ast \boldsymbol{n} \,. \tag{2.10}$$

Συνεπώς, για την συνισταμένη δύναμη που ασκείται σε στοιχειώδη όγκο ελέγχου, προκύπτει

$$\Sigma \boldsymbol{F} = \rho \boldsymbol{g} + \nabla * \boldsymbol{\sigma} = \rho \boldsymbol{g} - \nabla p + \nabla * \boldsymbol{\tau}.$$
(2.11)

Αντικαθιστώντας στην 2.9, προκύπτει η Διαφορική Εξίσωση Κίνησης,

$$\frac{\partial(\rho \boldsymbol{u})}{\partial t} + \nabla * (\rho \boldsymbol{u} \boldsymbol{u}) = \rho \boldsymbol{g} - \nabla p + \nabla * \boldsymbol{\tau}.$$
(2.12)

Για ασυμπίεστο ρευστό, μέσω χρήση ανυσματικής ταυτότητας

$$\nabla * (\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{u} * (\nabla \boldsymbol{u}) + \boldsymbol{u}(\nabla * \boldsymbol{u}) \stackrel{(2.8)}{\Longrightarrow} \nabla * (\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{u} * (\nabla \boldsymbol{u}), \qquad (2.13)$$

η 2.12 γίνεται

$$\rho \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + \rho \boldsymbol{u} * (\nabla \boldsymbol{u}) = \rho \boldsymbol{g} - \nabla p + \nabla * \boldsymbol{\tau}.$$
(2.14)

Ενώ, στην περίπτωση που το ρευστό είναι νευτωνικό, από τον νόμο Ιξώδους Newton-Poisson,

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\mu} * (\nabla \boldsymbol{u} + (\nabla \boldsymbol{u})^T), \qquad (2.15)$$

προκύπτει η ανυσματική εξίσωση Navier Stokes,

$$\rho\left(\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + \boldsymbol{u} * (\nabla \boldsymbol{u})\right) = \rho \boldsymbol{g} - \nabla p + \mu * \nabla^2 \boldsymbol{u}.$$
(2.16)

Στην παρούσα εργασία, θα λυθεί ένα πρόβλημα ροής ρευστού σε μόνιμη κατάσταση, επομένως, θα χρησιμοποιηθεί η εξίσωση Navier-Stokes σε μόνιμη κατάσταση. Η ανυσματική μορφή της είναι

$$\rho \boldsymbol{u} * (\nabla \boldsymbol{u}) = \rho \boldsymbol{g} - \nabla p + \mu * \nabla^2 \boldsymbol{u}.$$
(2.17)

Το αριστερό μέλος της εξίσωσης, είναι ο όρος συναγωγής, και αναπαριστά την μεταφορά ορμής, λόγω μακροσκοπικής κίνησης του ρευστού. Ο τρίτος όρος του δεξιού μέλους, είναι ο όρος ιξώδους διάχυσης της ορμής, και αντιπροσωπεύει την ποσότητα ορμής που μεταφέρεται σε γειτονικά σωματίδια ρευστού, εξαιτίας των τυχαίων κινήσεων των μορίων. Η σχέση μεταξύ αυτών των δύο όρων είναι κεντρικής σημασίας για τον χαρακτήρα της ροής που θα προκύψει. Ειδικότερα, ο αδιάστατος αριθμός Reynolds,

$$Re = \frac{\rho uL}{\mu} = \frac{uL}{\nu} , \qquad (2.18)$$

εκφράζει τον λόγο των αδρανειακών προς τις ιξώδεις δυνάμεις που ασκούνται στο ρευστό, ή εναλλακτικά τον λόγο των συναγωγικών όρων προς τους ιξώδεις όρους (διάχυσης). Όταν ο αριθμός Reynolds της ροής λαμβάνει τιμές μέχρι την κρίσιμη τιμή Reynolds (κυμαίνεται στα 2000~4000 για συνήθεις ροές), τότε η ροή είναι στρωτή. Πρόκειται για μία ροή, όπου τα γειτονικά στρώματα υγρού κινούνται ομαλά το ένα δίπλα στο άλλο. Τα πεδία ταχύτητας και πίεσης σε προβλήματα στρωτής ροής, μπορούν να επιλυθούν μέσω των εξισώσεων Navier-Stokes, που αναπτύχθηκαν στην συγκεκριμένη ενότητα.

Στις περιπτώσεις, όπου ο Αριθμός Reynolds της ροής ξεπερνάει την κρίσιμη τιμή, τότε ο χαρακτήρας της ροής αλλάζει, τα σωματίδια του ρευστού εκτελούν πολύπλοκες κινήσεις, και όσο ο Reynolds μεγαλώνει η ροή αποκτά χαοτικο χαρακτήρα. Αυτός ο τύπος ροής ονομάζεται τυρβώδης, και η επίλυση του με χρήση των κλασσικών εξισώσεων Navier-Stokes είναι υπολογιστικά απαιτητική. Η περιγραφή της τυρβώδους ροής θα ακολουθήσει στην Ενότητα 2.3.

2.2: Εξίσωση μεταφοράς μάζας

Για να περιγραφεί η συγκέντρωση μίας διαλυμένης ουσίας στο πεδίο ροής, θα αξιοποιηθεί το ισοζύγιο μάζας της ουσίας, σε έναν στοιχειώδη όγκο ελέγχου. Η μεταφορά της ουσίας από και προς τον όγκο ελέγχου μπορεί να πραγματοποιηθεί, είτε μέσω συναγωγής, δηλαδή μέσω της μακροσκοπικής κίνησης του ρευστού μέσου, είτε μέσω διάχυσης, δηλαδή μέσω της μοριακής κίνησης της ουσίας η οποία τείνει να εξισσοροπήσει τις διαφορές συγκέντρωσης. Το ισοζύγιο μάζας μιας διαλυμένης ουσίας ουσίας Α, είναι

$$\frac{dc}{dt} + \nabla * (c\boldsymbol{u}) = D_A \nabla^2 c + R_A, \qquad (2.19)$$

όπου **u** η ταχύτητα του ρευστού μέσου, D_A ο συντελεστής διάχυσης της ουσίας A, ενώ R_A είναι ο ρυθμός κατανάλωσης της ουσίας. Ο 1^{ος} όρος του αριστερού μέλους αφορά τον τοπικό ρυθμό μεταβολής της συγκέντρωσης της ουσίας, ο 2^{ος} όρος του αριστερού μέλους αναπαριστά την μεταφορά λόγω συναγωγής. Οι όροι του αριστερού μέλους, αν αθροιστούν, δίνουν την υλική παράγωγο της συγκέντρωσης, δηλαδή την μεταβολή συγκέντρωσης που αντισοιχεί σε ένα κινούμενο σωματίδιο υγρού. Ο πρώτος όρος του δεξιού μέλους αναπαριστά την μεταφορά της ουσίας λόγω διάχυσης.

2.3: Η τυρβώδης ροή

Τα περισσότερα πρακτικά προβλήματα ρευστομηχανικής, περιλαμβάνουν υψηλές ταχύτητες κίνησης του ρευστού, **u**, σε εξοπλισμό διαστάσεων, L>>1m, οπότε ο αριθμός Reynolds, $Re = \frac{uL}{v}$, λαμβάνει τιμές σημαντικά μεγαλύτερες από την κρίσιμη τιμή του. Η ροή με υψηλό αριθμό Reynolds ονομάζεται τυρβώδης (τύρβη: φασαρία, αναταραχή), και χαρακτηρίζονται από τις ακανόνιστες κινήσεις των σωματιδίων του ρευστού και τις συνεχείς μεταβολές των ιδιοτήτων τους.

2.3.1: Ανάλυση κατά Reynolds

Οι τυρβώδεις ροές, αρχικά μελετήθηκαν από τους επιστήμονες πειραματικά. Κατά την διεξαγωγή πειραμάτων, διαπιστώθηκε, ότι όλες οι ιδιότητες του πεδίου ροής, ήταν, μεν, συνεχώς μεταβαλλόμενες με μικρές και μεγάλες διακυμάνσεις στην τιμή τους, διατηρούσαν, ωστόσο, μία μέση τιμή. Σύμφωνα με τον Reynolds, κάθε ιδιότητα του πεδίου ροής σε ένα συγκεκριμένο σημείο, αναλύεται σε άθροισμα της μέσης τιμής της ιδιότητας αυτής και ενός όρου τυχαίας χρονικής διακύμανσης της τιμής αυτής. Συγκεκριμένα,

$$u(t) = U + u'(t), (2.20)$$

$$v(t) = V + v'(t),$$
 (2.21)

$$w(t) = W + w'(t),$$
 (2.22)

$$p(t) = P + p'(t),$$
 (2.23)

$$c(t) = C + c'(t),$$
 (2.24)

όπου οι όροι u(t), v(t) ... περιγράφουν την πραγματική μετρούμενη τιμή των μεταβλητών σε ένα συγκεκριμένο σημείο του πεδίου ροής. Οι όροι με κεφαλαία γράμματα (U, V, W, P, C) αφορούν την μέση τιμή που λαμβάνει η κάθε ιδιότητα στο συγκεκριμένο σημείο του πεδίου ροής. Ενώ, οι όροι u'(t), v'(t) κ.λ.π. αναπαριστούν τη στιγμιαία τυχαία διαταραχή της μεταβλητής, που θα αποκαλούνται εφ'εξής ως «τυρβώδης διαταραχή» της εκάστοτε μεταβλητής.

και

Η μέση τιμή των ιδιοτήτων για το αναφερθέν σημείο υπολογίζονται ως ο μέσος όρος των μετρήσεων στο συγκεκριμένο σημείο. Για παράδειγμα, για την συνιστώσα U της ταχύτητας, είναι

$$U = \overline{u(t)} = \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} u(t) dt.$$
 (2.25)

Στην περίπτωση που οι συνοριακές συνθήκες του προβλήματος παραμένουν αμετάβλητες, και δεν επιβάλλονται, μακροσκοπικές, χρονικά μεταβαλλόμενες διαταραχές στο πεδίο ροής, τότε το πρόβλημα μπορεί να θεωρηθεί ως Μόνιμης Κατάστασης. Στα προβλήματα Μόνιμης Κατάστασης, οι μ.ο. των ιδιοτήτων σε ορισμένο σημείο του πεδίου ροής, U, V, W, P, C, παραμένουν σταθεροί με τον χρόνο. Ονομάζονται μεταβλητές Μέσης Ροής (Mean Flow Variables), και η χωρική τους κατανομή δίνει τα Πεδία Μέσης Ροής. Να σημειωθεί, ότι η έννοια της Μέσης Ροής, δεν περιορίζεται στα προβλήματα μόνιμης κατάστασης, αλλά έχει εφαρμογή και σε χρονικά μεταβαλλόμενα προβλήματα τυρβώδους ροής. Έστω, ότι εκτελούνται επαναλαμβανόμενα πειράματα του χρονικά μεταβαλλόμενου προβλήματος, με μεγάλο πλήθος επαναλήψεων. Τότε η τιμή της μεταβλητής μέσης ροής, σε χρόνο t και σημείο P, προκύπτει από τον μέσο όρο των μετρήσεων της μεταβλητής στο σημείο P, σε χρόνο t από την εκκίνηση του πειράματος.

Όπως γίνεται κατανοητό, τα πεδία Μέσης Ροής έχουν άμεση σχέση με τη γεωμετρία και τις συνοριακές συνθήκες του προβλήματος. Αντίθετα, οι τιμές που λαμβάνουν οι όροι τυρβωδών διαταραχών δεν δίνουν πληροφορίες για χαρακτηριστικά του προβλήματος. Αντίθετα, έχει σημασία η διακύμανση (πχ: $\overline{u'}^2$), η τυπική απόκλιση των όρων αυτών(πχ: $\sqrt{\overline{u'}^2}$), καθώς και η μέση τιμή του γινομένου τυρβωδών διαραραχών διαφορετικών μεταβλητών (πχ: $\overline{u'} * v'$), η λεγόμενη «ροπή δεύτερης τάξης» (Second order moment). Τα παραπάνω στατιστικά εργαλεία, δίνουν ουσιώδεις πληροφορίες για τα χαρακτηριστικά της μέσης ροής, όπως θα αναλυθεί στην επόμενη υποενότητα.

Αφού παρουσιάστηκε η έννοια της Μέσης Ροής (Mean Flow), θα επιχειρηθεί να περιγραφούν τα περίπλοκα φαινόμενα που συμβαίνουν ταυτόχρονα, εντός της τυρβώδους ροής. Συνήθως, στην τυρβώδη ροή κυριαρχούν στροβιλώδη μοτίβα κίνησης, γνωστά ως δίνες (eddies), οι οποίες κατανέμονται σε όλη την περιοχή τυρβώδους ροής. Αξίζει να αναφερθεί η περιγραφή του φαινομένου της τύρβης από τον Davidson, ως «μία χωρικά πολύπλοκη κατανομή δινών, οι οποίες συνάγουν (μετακινούν) τον εαυτό τους κατά χαοτικό τρόπο» (Davidson, 2004).

Έστω απλό παραλληλόγραμμο χωρίο, στο οποίο το ενεργό πεδίο ροής είναι γεμάτο από μεγάλες κυκλικές δίνες, με διάμετρο αντίστοιχη με την γεωμετρία του προβλήματος, που περιστρέφονται αργά.

Έστω το ίδιο ακριβώς χωρίο σε δύο ακόμα περιστάσεις. Στην πρώτη περίσταση, ενεργεί στο χωρίο νέο πεδίο ροής, το οποίο πάλι αποτελείται από κυκλικές δίνες,
μικρότερες από τις προηγούμενες αλλά διακριτές με γυμνό μάτι (μεσαίου μεγέθους δίνες), οι οποίες περιστρέφονται πιο γρήγορα από τις μεγάλες δίνες.

Στην τελευταία περίσταση, το πεδίο ροής είναι γεμάτο από πολλές μικρές δίνες, όπου το ρευστό κινείται πολύ γρήγορα γύρω από τον εαυτό του.

Αν αθροιστούν τα τρία προαναφερθέντα πεδία ροής σε ένα πεδίο ροής, το παραγόμενο πεδίο, όπου θα συνυπάρχουν μεγάλες, μεσαίες και μικρές δίνες, θα αποτελεί μια απλοποιημένη απεικόνιση ενός πεδίου τυρβώδους ροής.

Οι μεγάλες δίνες του παραπάνω πεδίου προέρχονται από τις βαθμίδες ταχύτητας μέσης ροής. Ειδικότερα, όταν υπάρχουν έντονες βαθμίδες ταχύτητας μέσης ροής, δηλαδή σε στερεά τοιχώματα, ή στα άκρα ενός πίδακα μεγάλης ταχύτητας, τότε το ρευστό στο σύνορο των περιοχών αυτών δεν μπορεί να κινηθεί ομαλά και ο όγκος του αρχίζει να εκτελεί περιστροφικές κινήσεις γύρω από τον εαυτό του. Στην παραπάνω διαδικασία, καταναλώνεται ποσότητα ενέργειας από την μέση ροή και προσφέρεται στον όγκο που εκτελεί την περιγραφόμενη περιστροφική κίνηση. Αυτή είναι η γέννηση, ή παραγωγή, της τύρβης.

Οι μεγάλες δίνες του πεδίου ροής, κατά την κίνησή τους έρχονται αντιμέτωπες με δίνες μεσαίων μεγεθών. Από την μία, οι μεγάλες δίνες έχουν τη τάση να μεταφέρουν τις μεσαίες συνεχίζοντας την πορεία τους, από την άλλη, οι μεσαίες δίνες εκτελούν διαφορετική κίνηση την οποία θέλουν να διατηρήσουν. Αποτέλεσμα είναι, οι μεσαίες δίνες να παρασύρονται ανομοιόμορφα αλλοιώνοντας το κυκλικό σχήμα τους, ενώ οι μεγάλες δίνες έχουν τη περιστροφές μικρότερης διαμέτρου και γρηγορότερης ταχύτητας, προκειμένου να διατηρήσουν τη περιστροφική ορμή τους. Άρα, οι μεγάλες δίνες που δημιουργούνται λαμβάνοντας ενέργεια από την μέση ροή, καταναλώνουν ενέργεια κατά την αλληλεπίδρασή τους με μικρότερες δίνες, μικραίνοντας οι ίδιες στην πορεία.

Η ίδια ακριβώς διαδικασία πραγματοποιείται και στις δίνες μεσαίου μεγέθους, οι καταναλώνουν ενέργεια προς δίνες μικρότερου μεγέθους. Η ροή αυτή της ενέργειας, καταλήγει στις πολύ μικρές δίνες (μικροδίνες), οι οποίες καταναλώνουν έργο προκειμένου να υπερνικήσουν τις ιξώδεις δυνάμεις του ρευστού, μέχρι που καταστρέφονται. Το έργο τους μετατρέπεται σε εσωτερική θερμική ενέργεια, δηλαδή θερμικές απώλειες.

Η παραπάνω πορεία της ενέργειας αναφέρεται ως ενεργειακός καταρράκτης (Energy Cascade), και περιγράφει τους μηχανισμούς παραγωγής και καταστροφής της τύρβης (Kolmogorov, 1941).

2.3.2: Reynolds Averaged Navier Stokes (RANS)

Η x-συνιστώσα της εξίσωσης Navier-Stokes (2.16) είναι

$$\rho\left(\frac{\partial u_x}{\partial t} + \nabla * (u_x \boldsymbol{u})\right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \nabla^2 u_x \,. \tag{2.26}$$

Σε συνθήκες τυρβώδους ροής, οι μεταβλητές του πεδίου ροής υπόκεινται σε συνεχείς, ραγδαίες και ακανόνιστες μεταβολές. Η επίλυση του πεδίου ροής με τις εξισώσεις Navier-Stokes σε αυτές τις συνθήκες θα απαιτούσε πολύ πυκνό υπολογιστικό πλέγμα (Η έννοια θα εξηγηθεί στο Κεφάλαιο 3), και μεγάλο υπολογιστικό κόστος. Αντ'αυτού, θα χρειαστεί να εκφραστούν οι μεταβλητές της ως προς τα μεγέθη που είναι σημαντικά για την τυρβώδη ροή, δηλαδή ως προς τις μέσες τιμές των μεταβλητών και ως προς τους όρους τυρβώδους διαταραχών.

Η διαδικασία, που γενικεύει την εξίσωση Navier-Stokes και χρησιμοποιεί την μέση τιμή κάθε όρου, προκειμένου να εξάγει την μέση χρονικά μορφή της εξίσωσης, ονομάζεται Reynolds-Averaging, από την ανάλυση Reynolds (Εξισώσεις 2.20-2.24), στην οποία βασίζεται. Η συγκεριμένη μετατροπή, και αυτό πρέπει να είναι σαφές στον αναγνώστη, είναι μια απλοποίηση, διότι δεν προσθέτει νέες πληροφορίες στις εξισώσεις Navier-Stokes, αντίθετα, αφαιρεί πληροφορίες, πραγματοποιώντας προσεγγίσεις για την συμπερίληψη της επίδρασης των πολύπλοκων φαινομένων που λαμβάνουν χώρα στην τυρβώδη ροή (DC Wilkox, 1998).

Αρχικά, μεταβάλλονται οι συμβολισμοί της εξίσωση 2.20, ως $u_x = U_x + u'_x$. Από την Στατιστική, ισχύουν οι σχέσεις

$$\overline{u'(t)} = 0, \tag{2.27}$$

$$\frac{\partial u_x}{\partial t} = \frac{\partial U_x}{\partial t},\tag{2.28}$$

$$\overline{\nabla * (u_{\chi} \boldsymbol{u})} = \nabla * (U_{\chi} \boldsymbol{U}) + \nabla * (\overline{u'_{\chi} \boldsymbol{u}'}), \qquad (2.29)$$

$$\mu \nabla^2 u_x = \mu \overline{\nabla * (\nabla u_x)} = \mu \nabla^2 U_x, \qquad (2.30)$$

όπου **U** το διάνυσμα ταχύτητας μέσης ροής και **u**' το διάνυσμα ταχύτητας των στιγμιαίων τυρβωδών διαταραχών. Προκύπτει η εξίσωση

και

$$\rho\left(\frac{\partial U_x}{\partial t} + \nabla * (U_x \boldsymbol{U}) + \nabla * (\overline{u'_x \boldsymbol{u}'})\right) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \mu \nabla^2 U_x \qquad (2.31)$$

$$\rightarrow \frac{\partial U_x}{\partial t} + \nabla * (U_x \boldsymbol{U}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \nu \nabla^2 U_x - \nabla * (\overline{u'_x \boldsymbol{u}'}).$$
(2.32)

Η εξίσωση 2.32 αποτελεί την x-συνιστώσα των Reynolds Averaged Navier Stokes. Όλοι οι όροι της εκτός από τον τελευταίο είναι οι γνωστοί όροι της εξίσωσης Navier-Stokes, αντιπροσωπεύοντας τα ίδια φυσικά φαινόμενα. Ο τελευταίος όρος της εξίσωσης περιέχει τις $2^{ε_{\varsigma}}$ ροπές τυρβωδών διαταραχών, $\overline{u'_{x}u'_{x}}$, $\overline{u'_{x}u'_{y}}$, $\overline{u'_{x}u'_{z}}$. Από την στατιστική, η $2^{η}$ ροπή δύο τυχαίων μεταβλητών είναι μηδενική αν και μόνο αν οι μεταβλητές είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους. Λόγω της δομής της τύρβης, που περιέχει δομές στροβιλισμού, κατανοούμε ότι οι τυρβώδεις διαταραχές διαφορετικών συνιστωσών της ταχύτητας συνδέονται ισχυρά μεταξύ τους. Επομένως, οι $2^{ε_{\varsigma}}$ ροπές τους δεν θα είναι αμελητέες, αντίθετα, θα λαμβάνουν μεγάλες τιμές, και συνεπώς οι όροι αυτοί θα διαδραματίσουν σημαντικό ρόλο στο ισοζύγιο ορμής.

Αντιπροσωπεύουν την συνεισφορά της τύρβης στην μεταφορά ορμής. Μάλιστα, το γινόμενο των όρων αυτών με την πυκνότητα, πχ: $-\rho \overline{u'_x u'_y}$, έχει μονάδες [kg m⁻¹ s⁻²], ίδιες μονάδες με την ιξώδη τάση $\tau_{xy} = \mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x}\right)$. Για αυτόν τον λόγο, οι όροι $-\rho \overline{u'_x u'_y}$, $-\rho \overline{u'_x u'_z}$, κ.ά. ονομάζονται διατμητικές τάσεις Reynolds, ενώ οι όροι που περιέχουν διακυμάνσεις των τυρβωδών διαταραχών της ταχύτητας, $-\rho \overline{u'_x}^2$, $-\rho \overline{u'_y}^2$, $-\rho \overline{u'_z}^2$, ονομάζονται κάθετες τάσεις Reynolds.

Ξαναγράφοντας την εξίσωση 2.32 με την κατάλληλη μορφή για να αναδεικνύονται οι τάσεις Reynolds, και γράφοντας τα αντίστοιχα ισοζύγια ορμής για τις συνιστώσες y και z, προκύπτουν οι εξισώσεις

$$\frac{\partial U_x}{\partial t} + \nabla * (U_x U) =$$

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \nu \nabla^2 U_x + \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial (-\rho \overline{u'_x}^2)}{\partial x} + \frac{\partial (-\rho \overline{u'_x} u'_y)}{\partial y} + \frac{\partial (-\rho \overline{u'_x} u'_z)}{\partial z} \right), \quad (2.33)$$

$$\frac{\partial U_y}{\partial x} + \nabla * (U, U) =$$

$$-\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial y} + \nu\nabla^2 U_y + \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial(-\rho \overline{u'_x u'_y})}{\partial x} + \frac{\partial(-\rho \overline{u'_y}^2)}{\partial y} + \frac{\partial(-\rho \overline{u'_y u'_z})}{\partial z} \right), \qquad (2.34)$$

$$\frac{\partial U_z}{\partial t} + \nabla * (U_z \boldsymbol{U}) = -g - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + \nu \nabla^2 U_z + \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial (-\rho \overline{u'_x u'_z})}{\partial x} + \frac{\partial (-\rho \overline{u'_z u'_y})}{\partial y} + \frac{\partial (-\rho \overline{u'_z}^2)}{\partial z} \right), \quad (2.35)$$

οι οποίες, μαζί με την εξίσωση συνέχειας μέσης ροής

$$\nabla * \boldsymbol{U} = \boldsymbol{0}, \tag{2.36}$$

αποτελούν τις εξισώσεις Reynolds-Averaged Navier-Stokes.

Αντίστοιχα, από την 2.19, θέτοντας μηδενικό όρο αντίδρασης, με τις κατάλληλες μετατροπές, προκύπτει η εξίσωση μεταφοράς συγκέντρωσης Μέσης Ροής,

$$\frac{dC}{dt} + \nabla * (C\boldsymbol{U}) = D_A \nabla^2 C + \left(-\frac{\partial \overline{u'_x c'}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{u'_y c'}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{u'_z c'}}{\partial z} \right).$$
(2.37)

Ο τελευταίος όρος του δεξιού μέλους αντιπροσωπεύει την μεταφορά μάζας λόγω τύρβης.

2.4: Μοντελοποίηση των όρων τύρβης

Όπως γίνεται αντιληπτό, υπάρχουν 6 άγνωστοι όροι στις νέες εξισώσεις Navier Stokes μέσης ροής, και άλλοι 3 στην εξίσωση μεταφοράς μάζας, σε σχέση με τις αντίστοιχες εξισώσεις της στρωτής ροής. Προκειμένου να επιλυθούν τα πεδία ροής και συγκέντρωσης, είναι απαραίτητο πρώτα, να προσδιοριστούν οι άγνωστοι όροι.

Ο σκοπός της μοντελοποίησης της τύρβης, είναι ακριβώς η εφαρμογή κατάλληλων προσεγγίσεων για τους άγνωστους όρους, που να υπολογίζονται με βάση τις γνωστές ιδιότητες της ροής, ώστε να υπάρχει ικανός αριθμός εξισώσεων για το κλείσιμο (closure) του προβλήματος.

2.4.1: Υπόθεση Boussinesq

Όπως διαπιστώθηκε στην προηγούμενη ενότητα, οι άγνωστοι όροι των εξισώσεων ορμής, -ρu'_xu'_y, έχουν ίδιες διαστάσεις με τις ιξώδεις τάσεις, για αυτό και αποκαλούνται τάσεις Reynolds.

Η υπόθεση Boussinesq (1877), λέει ότι «υπάρχει αναλογία στην δράση των ιζωδών τάσεων και στην δράση των τάσεων στη μέση ροή». Η υπόθεση αυτή, έχει άμεση σχέση με την περιγραφή της τυρβώδους ροής με βάση τις δίνες και τον «καταρράκτη ενέργειας». Η τύρβη παράγεται στα σημεία με έντονο ρυθμό παραμόρφωσης μέσης ροής. Η τύρβη καταστρέφεται όταν δεν υπάρχει βαθμίδα ταχύτητας μέσης ροής.

Με βάση την υπόθεση Boussinesq, για τις διατμητικές τάσεις Reynolds, ισχύει η σχέση

$$\tau_{ij} = -\rho \overline{u'_{\iota} u'_{j}} = \mu_T \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right), \qquad (2.38)$$

ενώ για τις κάθετες τάσεις Reynolds, είναι

$$\tau_{i\iota} = -\rho \overline{u'_{\iota}}^2 = 2\mu_T \frac{\partial U_i}{\partial x_\iota} - \frac{2}{3}\rho k , \qquad (2.39)$$

όπου

$$k = \frac{1}{2} \left(\overline{u'_{x}}^{2} + \overline{u'_{y}}^{2} + \overline{u'_{z}}^{2} \right), \qquad (2.40)$$

είναι η συνολική κινητική ενέργεια της τύρβης ανά μονάδα μάζας ρευστού. Ενώ, ως μ_T συμβολίζεται το «ιξώδες τύρβης» (turbulent viscosity), με διαστάσεις ιξώδους [Pa s⁻¹].

Επίσης, μπορεί να οριστεί και το κινηματικό ιξώδες τύρβης (kinematic turbulent viscosity), $v_T = \frac{\mu_T}{\rho}$,με διαστάσεις [m² s⁻¹].

Κατ'αντιστοιχία, μοντελοποιείται και η επίδραση της τύρβης στην μεταφορά ουσιών, θερμότητας και λοιπών βαθμωτών μεγεθών, ως

$$-\overline{u'_{\iota}c'} = D_T \frac{\partial C}{\partial x}, \qquad (2.41)$$

όπου ως D_T συμβολίζεται η διαχυτότητα τύρβης (turbulent diffusivity) με μονάδες κινηματικού ιξώδους $[m^2 s^{-1}]$.

Στη στρωτή ροή, οι μηχανισμοί διάχυσης ορμής (μέσω του μοριακού ιξώδους) και της διάχυσης μάζας (μέσω της μοριακής διαχυτότητας) βασίζονται σε διαφορετικούς μηχανισμούς, οπότε οι τιμές τους συχνά διαφέρουν κατά αρκετές τάξεις μεγέθους. Αντίθετα, στην τυρβώδη ροή, ο μηχανισμός που προκαλεί την μεταφορά ορμής, μάζας, ενέργειας, βασίζεται στο ίδιο φυσικό φαινόμενο, δηλαδή στις έντονες δίνες, και την έντονη ανάμειξη όγκων ρευστού με διαφορετικές ιδιότητες. Επομένως, οι τιμές που θα λάβει η διαχυτότητα τύρβης, D_T , αναμένονται να είναι παρόμοιου μεγέθους με τις τιμές του κινηματικού ιξώδους τύρβης $ν_T$, με τον τυρβώδη αριθμό Semidt, Sc_T , να λαμβάνει τιμές κοντά στο 1 (στο λογισμικό Comsol, προτείνεται η τιμή 0.71). Ο τύπος υπολογισμού είναι

$$D_T = \frac{\nu_T}{Sc_T} \,. \tag{2.42}$$

Είναι εύχρηστη η ιδέα του ιξώδους τύρβης, λόγω της απλότητας του μοντέλου αναλογικής συσχέτισης τάσεων Reynolds με την παραμόρφωση μέσης ροής. Παραμένει φυσικά το ζητούμενο, που είναι η εύρεση μιας μεθόδου για τον υπολογισμό του. Μόνο που, πλέον, αντί να χρειάζεται να προσδιοριστούν 6 άγνωστοι όροι για την επίλυση των εξισώσεων Navier-Stokes, απαιτείται μία σχέση για τον προσδιορισμό ενός μόνο αγνώστου.

Όμως, είναι σημαντικο να σημειωθεί, πως κάθε απλοποίηση στους υπολογισμούς, συνεπάγεται και σημαντικές απώλειες στην ακρίβεια των υπολογισμών αυτών. Ειδικότερα, χρησιμοποιώντας την υπόθεση Boussinesq, ο χρήστης δέχεται ότι κάθε τάση Reynolds, έχει ακριβώς την ίδια σχέση με τον ρυθμό παραμόρφωσης της ροής στον οποίο αντιστοιχεί. Δηλαδή, το ιξώδες τύρβης είναι ισοτροπικό. Η παραδοχή αυτή δεν ισχύει σε περίπλοκες ροές.

2.4.2 : Το μοντελο k-ε

Προκειμένου να βρεθεί μία κατάλληλη σχέση που να περιγράφει το ιξώδες τύρβης, είναι χρήσιμες οι αρχές της διαστατικής ανάλυσης. Ειδικότερα, το κινηματικό ιξώδες τύρβης, έχει διαστάσεις $[m^2 s^{-1} = m * m/s]$. Με βάση την διαστατική ανάλυση, αρκεί, μία κατάλληλη κλίμακα ταχύτητας, U, και μία κλίμακα μήκους, L, οι οποίες να χαρακτηρίζουν την τύρβη. Οπότε θα είναι

$$\nu_T = C_{\mu} * U * L , \qquad (2.43)$$

όπου C_μ η σταθερά αναλογίας. Οι ποσότητες, U, L, που θα επιλεγούν είναι στόχος, να χαρακτηρίζουν κατάλληλα την τύρβη σε κάθε σημείο του πεδίου ροής, ώστε το παραγόμενο μέγεθος (ιξώδες τύρβης) να αντιστοιχεί όσο το δυνατόν καλύτερα στην ένταση του φαινομένου.

Ως χαρακτηριστική κλίμακα ταχύτητας της τύρβης, επιλέγεται η ρίζα της τυρβώδους κινητικής ενέργειας ανά μονάδα μάζας (2.40), οπότε

$$U = \sqrt{k} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\overline{u'_{x}}^{2} + \overline{u'_{y}}^{2} + \overline{u'_{z}}^{2} \right)}, \qquad (2.44)$$

Οι λόγοι της επιλογής είναι ολοφάνεροι. Η τυρβώδης κινητική ενέργεια (ή κινητική ενέργεια τύρβης), k, περιέχει στοιχεία για όλες τις συνιστώσες της τυρβώδους διακύμανσης της ταχύτητας, οπότε περιλαμβάνει μια πολύ καλή πρόβλεψη της έντασης της τύρβης, σε κάθε σημείο του πεδίου ροής.

Ο μαθηματικός προσδιορισμός της εξίσωσης, η οποία περιγράφει την μεταφορά, παραγωγή και καταστροφή της k στο πεδίο ροής, είναι μία δύσκολη διαδικασία. Περιληπτικά, περιλαμβάνει(Versteeg & Malalasekera, 2007):

(1) τον πολλαπλασιασμό κάθε μίας από τις 3 συνιστώσες εξισώσεις Navier-Stokes με την αντίστοιχη κυμαινόμενη ποσότητα u_i', την άθροιση των αποτελεσμάτων, δηλαδή

$$N(u_x) * u'_x + N(u_y) * u'_y + N(u_z) * u'_z,$$
(2.45)

όπου N() ο τελεστής Navier-Stokes,

(2) τον πολλαπλασιασμό κάθε μίας από τις 3 συνιστώσες εξισώσεις RANS με την αντίστοιχη κυμαινόμενη ποσότητα u_i', την άθροιση των αποτελεσμάτων, δηλαδή

$$R(U_x) * u'_x + R(U_y) * u'_y + R(U_z) * u'_z,$$
(2.46)

όπου R()ο τελεστής RANS,

(3) την αφαίρεση της ποσότητας 2.46 από την 2.45.

Προκύπτει η εξίσωση μεταφοράς τυρβώδους κινητικής ενέργειας, k :

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla * (\rho k \boldsymbol{U}) = \nabla * \left(-\overline{p' \boldsymbol{u}'} + 2\mu \overline{u_{\iota}' s_{\iota j}'} - \frac{1}{2}\rho \overline{u_{\iota}' * u_{\iota}' u_{j}'} \right) - 2\mu \sum_{ij} \overline{s_{\iota j}' s_{\iota j}'} + \sum_{ij} \left(-\rho \overline{u'_{\iota} u'_{j}} S_{ij} \right), \quad (2.47)$$

όπου $S_{ij} = \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i}$: είναι ο ρυθμός παραμόρφωσης μέσης ροής,

και $s_{ij}' = \frac{\partial u_i'}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j'}{\partial x_i}$: είναι ο ρυθμός παραμόρφωσης εξαιτίας των τυρβωδών διακυμάνσεων.

Οι όροι του αριστερού μέλους εκφράζουν, τον τοπικό ρυθμό μεταβολής, $\frac{\partial(\rho k)}{\partial t}$, και την μεταφορά της τυρβώδους κινητικής ενέργειας με συναγωγή, $\nabla * (\rho k U)$. Οι όροι του δεξιού μέλους εκφράζουν:

- $\nabla * 2\mu \overline{u_i' s_{ij'}}$: την μεταφορά λόγω μοριακής διάχυσης
- $\nabla * \left(-\frac{1}{2} \rho \overline{u_l' * u_l' u_j'} \right)$: the metaqorá lógw turbúdous diácushs
- ∇ * (-p'u'): την μεταφορά εξαιτίας συσχετίσεων διακυμάνσεων πίεσηςταχύτητας. Ο όρος συνήθως είναι αμελητέος και μπορεί να παραληφθεί.
- Σ_{ij}(-ρu'_iu'_jS_{ij}) = ρ * G: εκφράζει τον όρο παραγωγής της τυρβώδους κινητικής ενέργειας. Αλλιώς, εκφράζει το έργο που αποδίδει ο ρυθμός παραμόρφωσης μέσης ροής, για να υπερνικήσει τις τυρβώδεις τάσεις Reynolds. Όπως αναπτύχθηκε παραπάνω, η τύρβη "παράγεται" στις περιοχές όπου υπάρχει έντονη βαθμίδα ταχύτητας μέσης ροής.
- 2μ Σ_{ij} s_{ij} s_{ij} = ρ * ε : εκφράζει τον όρο καταστροφής της τυρβώδους κινητικής ενέργειας, και κατά συνέπεια τον ρυθμό θερμικών απωλειών. Ταυτίζεται με τον μέσο ρυθμό παραγωγής έργου, από μικροδίνες, για να υπερνικήσουν τις δυνάμεις του μοριακού ιξώδους.

Ο όρος καταστροφής της κινητικής ενέργειας ε, ανά μονάδα μάζας, είναι

$$\varepsilon = \nu * \sum \frac{\overline{\partial u_i'} \partial u_i'}{\partial x_j} \left[\frac{m^2}{\sigma^3} \right].$$
(2.48)

Η εξίσωση μεταφοράς τυρβώδους κινητικής ενέργειας, αν συμπτυχθούν οι όροι μοριακής και τυρβώδους διάχυσης, παραληφθεί ο όρος πίεσης, και μετατραπεί ο όρος παραγωγής με βάση τον ορισμό του ιξώδους τύρβης, είναι

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla * (\rho k \boldsymbol{U}) = \nabla * \left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_k} \nabla k\right) - \rho \varepsilon + 2\mu_T \sum_{ij} \left(S_{ij} S_{ij}\right), \qquad (2.49)$$

όπου $\mu_{eff} = \mu_T + \mu$, το αισθητό ιξώδες, και σ_κ σταθερά.

Αφού ολοκληρώθηκε η ανάλυση για την εξίσωση της τυρβώδους κινητικής ενέργειας k, μένει πλέον η επιλογή του χαρακτηριστικού μήκους της τύρβης, L, ώστε να προσδιοριστεί ο τύπος για το ιξώδες τύρβης, και να κλείσει το πρόβλημα. Μέχρι στιγμής, από 2.43 είναι

$$\nu_T = C_\mu * \sqrt{k} * L \,. \tag{2.50}$$

Για τον προσδιορισμό του χαρακτηριστικού μήκους τύρβης L, είναι λογικό να χρησιμοποιηθεί μία τιμή που να σχετίζεται με τα μεγέθη των μεγαλύτερων δινών. Σε αυτή την κλίμακα παράγεται η ενέργεια τύρβης. Όμως, ο όρος παραγωγής της ενέργειας τύρβης οφείλει να είναι πάντα ίδιας τάξης μεγέθους με τον ρυθμό καταστροφής της, ε. Επομένως, ο ρυθμός καταστροφής της ενέργειας τύρβης, μπορεί να αξιοποιηθεί στον προσδιορισμό του χαρακτηριστικού μήκους L. Με βάση τη διαστατική ανάλυση, μπορεί να είναι

$$L = \frac{k^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon} \left[\frac{\frac{m^{3}}{s^{3}}}{\frac{m^{2}}{s^{3}}} = m \right].$$
 (2.51)

Οπότε, το κινητικό ιξώδες τύρβης, μοντελοποιείται ως,

$$\nu_T = C_\mu * \sqrt{k} * \frac{k^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon} \to \nu_T = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} ,$$
(2.52)

ενώ, για το δυναμικό ιξώδες, είναι

$$\mu_T = C_{\mu} \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \,. \tag{2.53}$$

Η εξίσωση μεταφοράς του ρυθμού καταστροφής κινητικής ενέργειας, ε, προκύπτει

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \nabla * (\rho\varepsilon \boldsymbol{U}) = \nabla * \left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_{\varepsilon}} \nabla k\right) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} 2\mu_T \sum_{ij} \left(S_{ij} S_{ij}\right), \quad (2.54)$$

όπου $\sigma_{\varepsilon}, C_{1\varepsilon}, C_{2\varepsilon}$ σταθερές.

Ο όρος $C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} 2\mu_T \sum_{ij} (S_{ij}S_{ij})$ αναπαριστά τον ρυθμό παραγωγής της ποσότητας ε, ενώ ο όρος $C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k}$ τον ρυθμό καταστροφής της.

Οι τιμές των σταθερών του μοντέλου (Standard k-e Model), που περιλαμβάνονται στις εξισώσεις 2.49, 2.53, 2.54, είναι: $C_{\mu} = 0.09$, $\sigma_k = 1$, $\sigma_{\varepsilon} = 1.30$, $C_{1\varepsilon} = 1.44$, $C_{2\varepsilon} = 1.92$.

Πλεονεκτήματα του μοντέλου k-ε, αποτελούν η ευρεία χρήση του και οι επιβεβαιωμένες δυνατότητες του στην πρόβλεψη ροών με υψηλούς αριθμούς Reynolds. Όμως, με την εισαγωγή του προστίθενται δύο επιπλέον εξισώσεις στο σύστημα Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων προς επίλυση, επομένως το υπολογιστικο κόστος ανεβαίνει αρκετά. Επιδεικνύει ευαισθησία στις ροές με δυσμενή βαθμίδα πίεσης (adverse pressure

gradients), σε περιστροφικές ροές και σε περιοχές με πολύ μικρό αριθμό Reynolds (π.χ. το οριακό στρώμα που σχηματίζεται στα στερεά τοιχώματα). (Versteeg & Malalasekera, 2007)

Στο επόμενο κεφάλαιο, θα αναπτυχθεί συνοπτικά η αριθμητική μέθοδος και το λογισμικό που θα χρησιμοποιηθεί στην επίλυση του προβλήματος τυρβώδους ροής, ενώ, θα επισημανθούν οι επιλογές που πρέπει να γίνουν για την επίλυση του συστήματος εξισώσεων 2.49, 2.53.

Κεφάλαιο 3: Η μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων και το λογισμικό Elmer

3.1: Η μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων (Μ.Π.Σ)

Το πρόβλημα του πυκνού πίδακα ρευστού, το οποίο αναπτύχθηκε στην ενότητα 1.5, είδαμε στο κεφάλαιο 2 ότι, εφόσον επιλεχθούν οι εξισώσεις k-ε για την μοντελοποίηση της τύρβης, περιγράφεται μαθηματικά από 7 μερικές διαφορικές εξισώσεις (2.33-2.37, 2.49, 2.53).

Ένα τέτοιο πρόβλημα, είναι αδύνατο να λυθεί αναλυτικά. Είναι απαραίτητο, να αξιοποιηθεί μία αριθμητική μέθοδος επίλυσης διαφορικών εξισώσεων. Στην παρούσα εργασία, θα χρησιμοποιηθεί το υπολογιστικό λογισμικό Elmer, το οποίο αξιοποιεί την Μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων (Finite Element Method, FEM). Η μέθοδος αυτή, αναπτύχθηκε τον 20° αιώνα, και εφαρμοζόταν κυρίως σε προβλήματα στατικής μηχανικής. Όμως, σταδιακά μέχρι τα τέλη του 20^{ου} αιώνα, διερευνήθηκε η εφαρμογή της στην επίλυση προβλημάτων ρευστομηχανικής. Οι δυνατότητες της μεθόδου αυξάνονται εκθετικά, με την άνοδο της ισχύος των υπολογιστικών συστημάτων.

Η βασική ιδέα της μεθόδου είναι ότι, διαιρώντας το χωρίο του προβλήματος σε πλήθος μικρότερων υποχωρίων (στοιχείων), είναι εφικτό, μέσω απλών μετατροπών, το πρόβλημα διαφορικών εξισώσεων να αναχθεί σε ένα σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων. Στόχος της μεθόδου, η απόκτηση λύσης, που περιλαμβάνει διακριτές τιμές των αγνώστων μεταβλητών σε πεπερασμένα σημεία του χωρίου, η οποία θα προσεγγίζει, όσο το δυνατόν αρτιότερα την πραγματική συνεχή λύση του φυσικού προβλήματος.

3.1.1: Τυπικά Βήματα Εφαρμογής της μεθόδου

Θα γίνει περιγραφή των τυπικών βημάτων εφαρμογής της ΜΠΣ, για πρόβλημα συνοριακών τιμών. Έστω, η εξίσωση μεταφοράς μάζας παραγόμενης ουσίας σε ακίνητο ρευστο μέσο, σε μόνιμη κατάσταση

$$-D\nabla^2 \mathcal{C} = r \ \sigma \tau o \ \Omega, \tag{3.1}$$

όπου $C \equiv C(\mathbf{x})$: Ω , το πεδίο συγκέντρωσης, $r \equiv r(\mathbf{x})$: Ω , ο ρυθμός παραγωγής της ουσίας στο χωρίο Ω (ανεξάρτητος από την C), D ο συντελστής διάχυσης της ουσίας στο ρευστό μέσο. Για να ολοκληρωθεί ο ορισμός του προβλήματος συνοριακών τιμών, πρέπει να επιβληθούν συνοριακές συνθήκες στο σύνολο του συνόρου του χωρίου Ω , $\partial\Omega$. Οι συνοριακές συνθήκες, είτε θα ορίζουν την τιμή της κύριας μεταβλητής της εξίσωσης (πχ: Συγκέντρωση, C) πάνω στο σύνορο, οπότε θα ονομάζονται Συνοριακές Συνθήκες Dirichlet, είτε θα ορίζουν την τιμή μίας δευτερεύουσας μεταβλητής της εξίσωσης (π.χ: ροή μάζας, J), οπότε θα ονομάζονται φυσικές συνοριακές συνθήκες (Neumann ή Robin). Επιβάλλεται φυσική συνοριακή συνθήκη (Neumann),

$$D(\boldsymbol{n} * \nabla C) = q(\boldsymbol{x}) \equiv q \ \sigma \tau o \ \partial \Omega, \tag{3.2}$$

όπου **n** το μοναδιαίο κάθετο άνυσμα σε κάθε σημείο του συνόρου ∂Ω, και D(**n** * ∇C): η εισροή της ουσίας, από ένα στοιχειώδες τμήμα του συνόρου ∂Ω. Οι εξισώσεις 3.1 και 3.2 ονομάζονται ισχυρή μορφή του προβλήματος συνοριακών τιμών.

Πρώτον, το χωρίο επίλυσης, Ω, διαιρείται σε μικρότερα τμήματα, ή στοιχεία, Ω^e. Όσο περισσότερα είναι τα στοιχεία, τόσο πιο ακριβής θα είναι η προσέγγιση της λύσης. Η μέθοδος ονομάζεται «Πεπερασμένων Στοιχείων», καθότι είναι ανέφικτο να γίνουν υπολογισμοί για άπειρα στοιχεία, όπου η προσέγγιση θα ήταν απολύτως ακριβής. Τα σημεία που καθορίζουν την γεωμετρία των στοιχείων λέγονται κόμβοι (nodes). Η ένωση όλων των πεπερασμένων στοιχείων, ονομάζεται Πλέγμα Πεπερασμένων Στοιχείων, Ω^h (Finite Element Mesh). Επομένως, η αυτοματοποιημένη υπολογιστική διαδικασία διαίρεσης του χωρίου λέγεται «Κατασκευή Πλέγματος».

Δεύτερον, διατυπώνεται η ισοδύναμη ασθενής μορφή του προβλήματος. Για να προκύψει η ασθενής μορφή (weak form), η εξίσωση 3.1 πολλαπλασιάζεται με συνάρτηση βάρους w, και ακολούθως, ολοκληρώνεται στο χωρίο επίλυσης, Ω, και αξιοποιείται η σχέση ολοκλήρωσης κατά παράγοντες, προκειμένου οι παράγωγοι 2^{ης} τάξης της C, να μετατραπούν σε παραγώγους 1^{ης} τάξης. Ο λόγος που γίνεται η παραπάνω μετατροπή, είναι ότι στην αρχική (ισχυρή) μορφή της διαφορικής εξίσωσης φυσικών προβλημάτων, περιλαμβάνεται (συνήθως) όρος με παράγωγο 2^{ης} τάξης του άγνωστου πεδίου C (π.χ. όρος διάχυσης στην εξίσωση μεταφοράς μάζας). Έτσι, μέσω της μετατροπής της σε ασθενή μορφή, προκύπτει ισοδύναμη έκφραση μόνο με 1^{ες} παραγώγους της συνάρτησης, ώστε να μην είναι απαίτηση η προσέγγιση της άγνωσης συνάρτησης με διπλά παραγωγίσιμες συναρτήσεις. Η ασθενής μορφή που προκύπτει, είναι

$$D\int_{\Omega} (\nabla w * \nabla C) d\Omega = \int_{\Omega} (w * r) d\Omega + \oint_{\partial\Omega} w * D(\boldsymbol{n} * \nabla C) d\Gamma.$$
(3.3)

$$\xrightarrow{(3.2)} D \int_{\Omega} (\nabla w * \nabla C) d\Omega = \int_{\Omega} (w * r) d\Omega + \oint_{\partial \Omega} (w * q) d\Gamma.$$
(3.4)

Τρίτον, η άγνωστη συνάρτηση C, προσεγγίζεται ως γραμμικός συνδυασμός συναρτήσεων βάσης (basis functions), φ_j,

$$C \approx C^e = \sum_{j=1}^N c_j * \varphi_j(x), \qquad (3.5)$$

όπου c_j: είναι οι άγνωστοι συντελεστές της προσέγγισης. Η παραπάνω (κλασσική) προσέγγιση άγνωστης συνάρτησης μέσω συναρτήσεων βάσης, αποκτά ειδικά χαρακτηριστικά στην μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων. Ειδικότερα, οι συναρτήσεις βάσεις που χρησιμοποιούνται στην ΜΠΣ, αντιστοιχούν, η κάθε μία, σε έναν κόμβο-j του πλέγματος Ω^h. Κάθε συνάρτηση φ_j λαμβάνει την τιμή 1 στον κόμβο-j, ενώ λαμβάνει μημηδενικές τιμές μόνο στα στοιχεία που γειτνιάζει ο συγκεκριμένος κόμβος. Οι παραπάνω συναρτήσεις βάσης, είναι πολυώνυμα με συγκεκριμένες ιδιότητες, και μπορούν να «παραχθουν» μέσω του υπολογιστικού κώδικα με αυτοματοποιημένο τρόπο.

Τέταρτον, από την ασθενή μορφή της εξίσωσης, θα κατασκευαστεί το μοντέλο πεπερασμένων στοιχείων. Συγκεκριμένα, η προσέγγιση 3.5 για το C αντικαθίσταται στην ασθενή μορφή 3.4. Πλέον, καθότι η 3.5 δεν ταυτίζεται με την πραγματική λύση C, η εξίσωση δεν ικανοποιείται επακριβώς, οπότε κατασκευάζεται το «Υπόλοιπο» (Residual), R, του οποίου το μέγεθος αποτελεί ένδειξη για την απόκλιση της προσέγγισης, $C^e = \sum_{j=1}^{N} c_j \varphi_j$, από την πραγματική συνάρτηση C. Το υπόλοιπο είναι

$$R = D \int_{\Omega} \left(\nabla \mathbf{w} * \nabla \sum_{j=1}^{N} c_j \varphi_j \right) d\Omega - \int_{\Omega} (\mathbf{w} * r) d\Omega - \oint_{\partial \Omega} \mathbf{w} * D \left(\mathbf{n} * \nabla \sum_{j=1}^{N} c_j \varphi_j \right) d\Gamma.$$
(3.6)

Σκοπός της μεθόδου, είναι ο προσδιορισμός των άγνωστων συντελεστών *c_j*, έτσι ώστε να ελαχιστοποιείται το υπόλοιπο R. Όμως, ο αριθμός των αγνώστων είναι N, όσοι και οι συντελεστές *c_j*, επομένως, απαιτούνται N σχέσεις για τον προσδιορισμό τους.

Για να παραχθούν οι N σχέσεις, θα χρειαστεί να παραχθούν N υπόλοιπα, R_i, προς ελαχιστοποίηση, το καθένα εκ των οποίων θα προκύπτει από το γινόμενο της Δ.Ε. με διαφορετική συνάρτηση βάρους w_i . Προκύπτει το ερώτημα της επιλογής κατάλληλων συναρτήσεων βάρους w_i . Η απλούστερη επιλογή, είναι η επιλογή ως συναρτήσεων βάρους, των ίδιων συναρτήσεων που χρησιμοποιήθηκαν ως συναρτήσεις βάσης. Δηλαδή,

$$w_i(x) = \varphi_i(x), \forall i \in 1, \dots, N.$$
(3.7)

Όταν κατά την εφαρμογή της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων, ισχύει η σχέση 3.7, η μέθοδος ονομάζεται Galerkin, και τα υπόλοιπα R_i, υπόλοιπα Galerkin. Το υπόλοιπο Galerkin, R_i του προβλήματος, γράφεται

$$R_{i} = \sum_{j=1}^{N} c_{j} D \int_{\Omega} \left(\nabla \varphi_{i} * \nabla \varphi_{j} \right) d\Omega - \int_{\Omega} (\varphi_{i} r) d\Omega - D \oint_{\partial \Omega} (\varphi_{i} * q) d\Gamma \approx 0, \qquad (3.8)$$

Παράγονται Ν εξισώσεις για τον προσδιορισμό των άγνωστων συντελεστών, c_j, της μορφής

$$\sum_{j=1}^{N} c_j K_{ij} = f_i, \gamma \iota \alpha \ i = 1, ..., N$$
(3.9)

όπου

$$K_{ij} = D \int_{\Omega} \left(\nabla \varphi_i * \nabla \varphi_j \right) d\Omega , \qquad (3.10)$$

και

$$f_i = \int_{\Omega} (\varphi_i r) d\Omega + D \oint_{\partial \Omega} (\varphi_i * q) d\Gamma.$$
(3.11)

Πέμπτο, λόγω της ύπαρξης Ν εξισώσεων και Ν αγνώστων, μπορεί να κατασκευαστεί αλγεβρικό σύστημα NxN, μέσω του οποίου να δύναται να βρεθούν οι τιμές των παραμέτρων c_j, που ελαχιστοποιούν τα υπόλοιπα R_i. Θα παραχθεί η μητρωική μορφή του προβλήματος, δηλαδή, η σχέση

$$\boldsymbol{K} * \boldsymbol{c} = \boldsymbol{f}. \tag{3.12}$$

Στην παραπάνω σχέση, **c** είναι το διάνυσμα των αγνώστων παραμέτρων c_j , **f** είναι το διάνυσμα του δεξιού μέλους του αλγεβρικού συστήματος με στοιχεία f_i (Εξίσωση 3.11), ενώ **K** είναι το μητρώο συντελεστών (coefficient matrix), με στοιχεία K_{ij} (Εξίσωση 3.10).

Για να κατασκευαστεί το παραπάνω σύστημα, χρειάζεται μία χρονοβόρα υπολογιστική διασικασία που ονομάζεται ανάλυση συνεισφορών (Assembly) των πεπερασμένων στοιχείων. Συγκεκριμένα, υπολογίζονται τα ολοκληρώματα στα υπόλοιπα R_i στοιχείο προς στοιχείο του πλέγματος. Για ένα τυπικό στοιχείο, όλες οι συναρτήσεις βάσης μηδενίζονται, εκτός από όσες αντιστοιχούν στους παρακείμενους κόμβους. Μέσω υπολογιστικού κώδικα, αντιστοιχίζονται οι μη-μηδενικές συναρτήσεις βάσης στο εκάστοτε στοιχείο του πλέγματος που αναλύεται, οπότε και υπολογίζεται η «συνεισφορά» του στοιχείου σε κάθε ένα από τα υπόλοιπα R_i. Η ίδια διαδικασία επαναλαμβάνεται για όλα τα στοιχεία του πλέγματος, και η κάθε ποσότητα (συνεισφορά) που προκύπτει, προστίθεται αυτοματοποιημένα στην κατάλληλη θέση του πίνακα **K**, ή του ανύσματος δεξιού μέλους, **b**.

Έκτο, ακολουθεί η επίλυση του γραμμικού συστήματος. Η επίλυση του συστήματος απαιτεί σημαντικό αριθμό απλών αλγεβρικών πράξεων. Σε απλά συστήματα μίας εξίσωσης, μπορεί να χρησιμοποιηθεί μία άμεση (direct) μέθοδος επίλυσης, όπως η μέθοδος απαλοιφής Gauss (Gauss Elimination). Ωστόσο, σε πολύπλοκα συστήματα η συγκεκριμένη μέθοδος δεσμεύει σημαντική υπολογιστική μνήμη, οπότε επιλέγονται επαναληπτικές (iterative) μέθοδοι επίλυσης. Οι επαναληπτικές μέθοδοι έχουν το πλεονέκτημα ότι μπορούν να λύσουν το σύστημα με λιγότερες πράξεις, όμως συχνά καθυστερούν στη σύγκλιση. Σε αυτές τις περιπτώσεις, το σύστημα πολλαπλασιάζεται με έναν πίνακα P, ο οποίος ονομάζεται «preconditioner», και έχει ιδιότητες τέτοιες, ώστε το ισοδύναμο σύστημα που θα προκύψει να έχει κατάλληλες ιδιότητες που να ευνοούν την γρήγορη σύγκλιση. Στο λογισμικό Elmer, αξιοποιούνται επαναληπτικές μέθοδοι σε υποχώρο Krylov (Krylov subspace method) (Ruokolainen et. al., 2023).

Τέλος, με βάση την παρηχθείσα λύση, υπολογίζονται όλες οι ποσότητες ενδιαφέροντος του φυσικού προβλήματος, για παράδειγμα με επιφανειακά ολοκληρώματα στα σύνορα του πεδίου (για τον υπολογισμό ροών), είτε με αποτίμηση της τιμής του πεδίου στα σημεία ενδιαφέροντος.

3.1.2: Επίλυση μη γραμμικών εξισώσεων

Η παραπάνω ακολουθία βημάτων, αφορά την επίλυση μίας γραμμικής διαφορικής εξίσωσης. Για την περίπτωση συστήματος μη γραμμικών διαφορικών εξισώσεων, όπως είναι οι εξισώσεις Navier-Stokes, θα αξιοποιηθεί κάποια μέθοδος γραμμικοποίησης του συστήματος (π.χ. η μέθοδος Picard). Η γενική ιδέα των επαναληπτικών μεθόδων επίλυσης του μη-γραμμικού συστήματος, είναι: (1) ο προσδιορισμός μίας αρχικής προσέγγισης της άγνωστης μεταβλητής $c^{(0)}$, (2) η γραμμικοποίηση των μη-γραμμικών όρων των εξισώσεων από την αρχική προσέγγιση $c^{(0)}$, με βάση την μέθοδο γραμμικοποίησης που επιλέχθηκε. Το σύστημα της 3.12 τροποποιείται σε

$$K^{(0)} * c^{(1)} = f^{(0)}, \qquad (3.13)$$

όπου $K^{(0)}$, $f^{(0)}$: ο πίνακας συντελεστών και το δεξί μέλος του συστήματος που παρήχθησαν από γραμμικοποίηση με βάση την προσέγγιση $c^{(0)}$. Από την επίλυση τους γραμμικού συστήματος 3.13 προκύπτει η προσέγγιση-1 για την άγνωστη μεταβλητή, $c^{(1)}$. Επαναλαμβάνεται η γραμμικοποίηση με βάση την προσέγγιση-1 και λύνεται ξανά το γραμμικό σύστημα, οπότε προκύπτει η προσέγγιση-2, $c^{(2)}$.

Η διαδικασία επαναλαμβάνεται, έως ότου η νέα προσέγγιση που προκύπτει, $c^{(i)}$, να μην διαφέρει σημαντικά από την προσέγγιση της προηγούμενης επανάληψης, $c^{(i-1)}$. Δηλαδή, οι μη-γραμμικές επαναλήψεις συνεχίζονται, εώς ότου η μεταβολή μεταξύ 2 διαδοχικών προσεγγίσεων, δ, να είναι μικρότερη από ένα όριο σύγκλισης που θα επιλεχθεί. Ειδικότερα, ως ένδειξη για το μέγεθος της μεταβολής, δ, μεταξύ διαδοχικών προσεγγίσεων μπορεί να επιλεχθεί, για παράδειγμα, η διαφορά της νόρμας των προσεγγίσεων,

$$\delta = 2 \frac{\left| |u_i| - |u_{i-1}| \right|}{|u_i| + |u_{i-1}|},\tag{3.14}$$

είτε η νόρμα της διαφοράς μεταξύ των διαδοχικών προσεγγίσεων

$$\delta = 2 \frac{|u_i - u_{i-1}|}{|u_i| + |u_{i-1}|}.$$
(3.15)

3.1.3: Αστάθεια συναγωγικού όρου εξισώσεων μεταφοράς

Για τα προβλήματα ροής ρευστών, παρουσιάζεται ένα σοβαρό αριθμητικό πρόβλημα πρόβλημα κατά την εφαρμογή της ΜΠΣ. Συγκεκριμένα, λαμβάνεται ως παράδειγμα η εξίσωση μεταφοράς μάζας ουσίας σε κινούμενο ρευστό,

$$\frac{dc}{dt} + \nabla * (C\boldsymbol{u}) = D_A \nabla^2 C + R_A, \qquad (3.16)$$

αλλά, αντί της συγκέντρωσης C, μπορεί να υποτεθεί οποιαδήποτε βαθμωτή ποσότητα Φ (θερμοκρασία T, τυρβώδης κιν. ενέργεια k, συνιστώσα ταχύτητας), οπότε τα συμπεράσματα γενικεύονται σε οποιαδήποτε εξίσωση μεταφοράς βαθμωτής ποσότητας σε κινούμενο ρευστό. Οι δύο μηχανισμοί που προκαλούν την μεταφορά μάζας, είναι η συναγωγή, που περιγράφεται για ασυμπίεστο ρευστό μέσο από τον όρο

$$\nabla * (C\boldsymbol{u}) \approx \boldsymbol{u} * \nabla C, \qquad (3.17)$$

και η διάχυση, που περιγράφεται από τον όρο $D_A \nabla^2 C$. Η επίδραση του κάθε μηχανισμού μεταφοράς, μπορεί να συγκριθεί μέσω του αριθμού Peclet,

$$Pe = \frac{|\boldsymbol{u}| * L}{D_A},\tag{3.18}$$

ο οποίος έχει εκφράζει τον λόγο της επίδρασης των συναγωγικών φαινομένων, προς την επίδραση των φαινομένων διάχυσης.

Έχει διαπιστωθεί πως, κατά την διακριτοποίηση της παραπάνω εξίσωσης με την μέθοδο των υπολοίπων Galerkin, όταν ο αριθμός Peclet είναι μεγαλύτερος του 1 σε στοιχείο του πλέγματος, τότε ο όρος συναγωγής στις διακριτοποιημένες εξισώσεις είναι ασταθής, οπότε στην λύση του πεδίου εμφανίζονται αριθμητικές ταλαντώσεις (oscillations, έντονες διακυμάνσεις).

Για μέγεθος πλέγματος h (ως μέγεθος πλέγματος αναφέρεται το χαρακτηριστικό μήκος ενός τυπικού στοιχείου του πλέγματος), ο αριθμός Peclet σε ένα στοιχείο είναι

$$Pe = \frac{|\boldsymbol{u}| * h}{2 * D_A}.$$
(3.19)

Θεωρητικά, ο χρήστης της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων, μπορεί να επιλέξει την κατασκευή πλέγματος με μέγεθος στοιχείων τόσο μικρό, προκειμένου ο αριθμός Peclet να μην ξεπερνάει ποτέ την μονάδα. Όμως, σε περιπτώσεις που η τιμή του συντελεστή διάχυσης είναι μικρή, π.χ. $D_A \approx 10^{-9}$, η παραπάνω επιλογή δεν είναι εφικτή υπολογιστικά, ακόμα και για πολύ χαμηλές ταχύτητες ροής. Συνεπώς, χρειάζεται να τροποποιηθεί η μέθοδος διακριτοποίησης, προκειμένου να επιτευχθεί σταθεροποίηση του συναγωγικού όρου της εξίσωσης, και οι λύσεις που αποκτούνται να είναι ομαλές. Αυτό γίνεται με την προσθήκη όρων σταθεροποίησης στην διακριτοποιημένη εξίσωση, αυξάνοντας «τεχνητά» την αριθμητική διάχυση, ώστε να προκύπτει ομαλή λύση. Κάποιες ευρέως χρησιμοποιούμενες τεχνικές σταθεροποίησης είναι η Stream Upwind Petrov-Galerkin (SUPG) και η Galerkin-Least-Squares (GLS) (Zienkiewicz et. al., 2014c). Οι τεχνικές σταθεροποίησης δεν θα αναλυθούν στο πλαίσιο της παρούσας διπλωματικής εργασίας.

3.2: Εφαρμογή σε πρόβλημα τυρβώδους ροής

Στο πλαίσιο της παρούσας εργασίας, προκαλεί ενδιαφέρον η συζήτηση ειδικών θεμάτων, σχετικά με την εφαρμογή της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων σε πρόβλημα τυρβώδους ροής, με χρήση του μοντέλου k-ε.

3.2.1: Αριθμητικές δυσκολίες επίλυσης

Οι εξισώσεις Reynolds Averaged Navier Stokes (2.33-2.36) που αναπτύχθηκαν στο προγούμενο κεφάλαιο, με χρήση του μοντέλου k-ε για την προσομοίωση της επίδρασης των όρων τυρβωδών διακυμάνσεων, μετατρέπονται στη μορφή

$$\frac{\partial U_x}{\partial t} + \nabla * (U_x U) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + (\nu + \nu_t) \nabla^2 U_x , \qquad (3.20)$$

$$\frac{\partial U_{y}}{\partial t} + \nabla * \left(U_{y} \boldsymbol{U} \right) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + (\nu + \nu_{t}) \nabla^{2} U_{y}, \qquad (3.21)$$

$$\frac{\partial U_z}{\partial t} + \nabla * (U_z \boldsymbol{U}) = -g - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + (\nu + \nu_t) \nabla^2 U_z, \qquad (3.22)$$

$$\nabla * \boldsymbol{U} = \boldsymbol{0}, \tag{3.23}$$

όπου v_t , το κινητικό ιξώδες τύρβης, δίνεται από την σχέση

$$\nu_T = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \,. \tag{3.24}$$

Γίνεται αντιληπτό, ότι οι παραπάνω εξισώσεις έχουν κοινά χαρακτηριστικά με τις κλασσικές εξισώσεις Navier-Stokes στρωτής ροής. Διαφέρουν, όμως, στον όρο διάχυσης της ορμής, καθώς στις κλασσικές Navier-Stokes ο συντελεστής διάχυσης είναι το μοριακό ιξώδες ν, ενώ στις εξισώσεις RANS αντικαθίσταται από το αισθητό ιξώδες,

$$\nu_{eff} = \nu + \nu_T = \nu + C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}.$$
(3.25)

Το σύστημα εξισώσεων 3.20-3.23, δεν μπορεί να επιλυθεί αυτόνομα, καθώς οι εξισώσεις εξαρτώνται από τα πεδία των τυρβωδών παραμέτρων k και ε. Στο κεφάλαιο 2, αναπτύχθηκαν οι εξισώσεις μεταφοράς 2.49 και 2.54, των ποσοτήτων k και ε,

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \nabla * (k\boldsymbol{U}) = \nabla * \left(\frac{\nu_{eff}}{\sigma_k} \nabla k\right) - \varepsilon + 2\nu_T \sum_{ij} (S_{ij} S_{ij}), \qquad (3.26)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \nabla * (\varepsilon \boldsymbol{U}) = \nabla * \left(\frac{\nu_{ef}}{\sigma_{\varepsilon}} \nabla k\right) - C_{2\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k} + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} 2\nu_T \sum_{ij} \left(S_{ij} S_{ij}\right).$$
(3.27)

Συνεπώς, για την επίλυση των πεδίων μέσης ροής U, P, τα οποία περιγράφονται από το σύστημα μερικών διαφορικών εξισώσεων, 3.20-3.23, είναι απαραίτητη η επίλυση του συστήματος εξισώσεων 3.26-3.27, που περιγράφουν την μεταβολή των παραμέτρων k-ε. Όμως, οι εξισώσεις 3.26-3.27, εξαρτώνται άμεσα από το πεδίο ταχύτητας U. Στην παραπάνω περίπτωση, τα δύο συστήματα είναι ισχυρά συζευγμένα μεταξύ τους (strongly coupled), κατά αμφίδρομο τρόπο. Αυτό σημαίνει πως είναι αναγκαία η ταυτόχρονη επίλυσή τους. Το γεγονός αυτό, αυξάνει τις υπολογιστικές απαιτήσεις του προβλήματος.

Επιπλέον, το σύστημα εξισώσεων 3.26-3.27 έχει ορισμένα χαρακτηριστικά που καθιστούν πρόκληση την επιτυχή επίλυση των πεδίων αυτών. Συγκεκριμένα, αν εφαρμοστούν τα βήματα διακριτοποίησης που περιγράφησαν στην ενότητα 3.1, θα διαπιστωθεί πως οι παραγόμενες διακριτοποιημένες εξισώσεις περιέχουν μη γραμμικούς όρους. Οι ιχυροί μη γραμμικοί όροι των εξισώσεων k-ε, καθώς και η ισχυρή σύζευξη με τις εξισώσεις μέσης ροής, καθιστούν τις εξισώσεις 3.26-3.27 αριθμητικά άκαμπτες (numerically stiff), δηλαδή, παρουσιάζουν φαινόμενα αστάθειας κατά την αριθμητική επίλυση τους, ενώ επηρεάζονται από μικρές μεταβολές των πεδίων, ακόμα και σε περιοχές που η συμπεριφορά των εξισώσεων είναι (θεωρητικά) ομαλή.

Οι τιμές των πεδίων k, ε, δύναται να μεταβάλλονται κατά πολλές τάξεις μεγέθους εντός του χωρίου επίλυσης του προβλήματος. Αυτό εξηγείται και από το γεγονός ότι το ιξώδες τύρβης, ν_t, το οποίο αποτιμάται σε κάθε σημείο του χωρίου μετά την επίλυση των 3.26-3.27, εκφράζει την ένταση των φαινομένων τύρβης. Άρα, καθώς αναμένονται αυξομοιώσεις στην ένταση της τύρβης, σχετικές με την φυσική του προβλήματος, αναμένεται ότι η τιμή των k, ε, ντ, θα παρουσιάζει έντονες, απότομες μεταβολές εντός του χωρίου επίλυσης.

Ακόμη, εξαιτίας των διακυμάνσεων, η εξίσωση 3.27, που περιγράφει την μεταβολή της παραμέτρου ε στο πεδίο ροής, ενδέχεται να προκαλέσει την αργή σύγκλιση ή και την απουσία σύγκλισης του αλγόριθμου επίλυσης, με την εμφάνιση αρνητικών τιμών στα πεδία k, ε, το οποίο είναι αφύσικο, και για αυτόν τον λόγο πρέπει να τεθούν όρια (clipping) στις επιτρεπόμενες τιμές των μεταβλητών.

Αν οι παραπάνω παράγοντες συνδυαστούν (ισχυρή σύζευξη με εξισώσεις ροής, μηγραμμικότητα, ευαισθησία στις μεταβολές, αναμενόμενες διακυμάνσεις τιμών k, ε), γίνεται κατανοητό ότι η επίλυση του συστήματος τυρβώδους ροής αποτελεί μία αριθμητική πρόκληση.

Για την αντιμετώπιση των παραπάνω δυσκολιών, προτείνονται μία σειρά από επιλογές για το πλέγμα, το χωρίο και τον αλγόριθμο επίλυσης του συζευγμένου συστήματος.

Καταργάς, το πλέγμα που θα κατασκευαστεί πρέπει να είναι πυκνό, δηλαδή τα στοιγεία να είναι αρκετά μικρά σε μέγεθος, ώστε να είναι δυνατόν να μοντελοποιήσουν τις μεταβολές στα πεδία k, ε, ειδικά στις περιοχές όπου υπάρχει έντονη μεταβολή των τιμών. Αν πρόκειται για πρόβλημα χρονικώς μεταβαλλόμενο, απαιτούνται, επιπλέον, πολύ μικρά χρονικά βήματα. Το πλέγμα προτείνεται να είναι δομημένο, ειδικά κοντά στα τοιχώματα του χωρίου, όμως στην βιβλιογραφία έχει διαπιστωθεί ότι η επίλυση των εξισώσεων k-ε σε μη δομημένο πλέγμα επιβαρύνει ελάχιστα την ακρίβεια των λύσεων, σε σχέση με αυτές που λαμβάνονται από το δομημένο πλέγμα (Zienkiewicz et. al., 2014). Όμως, οφείλεται προσοχή, τόσο για δομημένο, όσο και για μη δομημένο πλέγμα, όταν πραγματοποιείται πύκνωση του πλέγματος σε περιοχή ενδιαφέροντος. Η επιλογή της αυξομοίωσης του μεγέθους των στοιχείων στο χωρίο (Mesh Grading), είναι μεν επιθυμητή για την διευκόλυνση της σύγκλισης και την καλύτερη περιγραφή των περιοχών ενδιαφέροντος, περιέχει, δε, τον κίνδυνο της κακής συμπεριφοράς των εξισώσεων k-ε και της συνακόλουθης αποτυχίας σύγκλισης, στην περίπτωση που υπάρχουν έντονες αυξομοιώσεις στα γειτονικά στοιχεία του πλέγματος. Οπότε, τυχόν πύκνωση πρέπει να εφαρμόζεται κλιμακωτά στο χωρίο (Reddy & Gartling, 2010).

Για τη διαμόρφωση του χωρίου επίλυσης, ισχύουν οι ίδιες οδηγίες με τα περισσότερα μοντέλα υπολογιστικής ρευστομηχανικής (CFD). Το χωρίο οφείλει να εγκολπώνει στο εσωτερικό του όλη την περιοχή που εξελίσσεται το προς μελέτη φαινόμενο. Τα σύνορα εισόδου και εξόδου του ρευστού, να βρίσκονται όσο το δυνατόν πιο μακριά από την περιοχή ενδιαφέροντος, ώστε να μην συμβαίνουν έντονες μεταβολές των πεδίων κοντά σε αυτά, οπότε και οι επιβαλλόμενες συνοριακές συνθήκες (π.χ. μηδενική πίεση στην έξοδο) να μην επηρεάζουν κατά αφύσικο τρόπο την επίλυση του προβλήματος (Ferziger et. al., 2020).

Για την αντιμετώπιση των πιθανών ακραίων ή αρνητικών τιμών που θα εμφανιστούν στα πεδία των παραμέτρων k-ε, εφαρμόζεται άνω όριο στον προσδιορισμό του χαρακτηριστικού μήκους τύρβης, L, το οποίο χρησιμοποιείται στην εξίσωση 2.50. Δηλαδή, σε όλο το χωρίο εφαρμόζεται

$$L = \min\left\{\frac{k^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon}, L_{max}\right\},\tag{3.28}$$

όπου L_{max}: η μέγιστη επιτρεπόμενη τιμή που μπορεί να λάβει το χαρακτηριστικό μήκος τύρβης, που θα αντιστοιχεί με το χαρακτηριστικό μήκος του χωρίου. Όπου οι τιμές των παραμέτρων δίνουν επιτρεπόμενες τιμές για το μήκος τύρβης, L, η σχέση προσδιορισμού του ιξώδους καταλήγει να είναι η 3.24, αλλιώς το ιξώδες τύρβης προσδιορίζεται από την σχέση 2.50 για L=L_{max}. (Kuzmin & Mierka, 2006)

3.2.2: Αλγόριθμος επίλυσης συζευγμένου συστήματος

Ο αλγόριθμος επίλυσης που προτείνεται για την αντιμετώπιση των αριθμητικών θεμάτων που αναφέρονται παραπάνω, βασίζεται στον ισχυρό χαρακτήρα της σύζευξης μεταξύ των συστημάτων εξισώσεων 3.20-3.23 και 3.26-3.27.

Η επανάληψη-i, της επίλυσης του συζευγμένου συστήματος, έχει ως εξής:

- (1) Χρήση των πεδίων $U^{(i-1)}, V^{(i-1)}, W^{(i-1)}, P^{(i-1)}, k^{(i-1)}, \varepsilon^{(i-1)}, v_{eff}^{(i-1)}$, που αποκτήθηκαν από την προηγούμενη επανάληψη (i-1), για την γραμμικοποίηση των εξισώσεων RANS (3.20-3.23).
- (2) Εκτέλεση εξωτερικής επανάληψης (outer iteration) για την επίλυση του γραμμικοποιημένου συστήματος εξισώσεων RANS.
- (3) Ανανέωση των πεδίων U⁽ⁱ⁾, V⁽ⁱ⁾, W⁽ⁱ⁾, P⁽ⁱ⁾, με βάση τις νέες τιμές που υπολογίστηκαν. Χρησιμοποιώντας όμως, συντελεστή χαλάρωσης (Relaxation Factor) με τιμή από 0.5 εώς 0.9. Η έννοια του συντελεστή χαλάρωσης θα αναλυθεί παρακάτω.
- (4) Χρήση των πεδίων $U^{(i)}, V^{(i)}, W^{(i)}, P^{(i)}, k^{(i-1)}, \varepsilon^{(i-1)}, v_{eff}^{(i-1)},$ για την γραμμικοποίηση των εξισώσεων τύρβης k-ε (3.26-3.27).
- (5) Εκτέλεση εξωτερικής επανάληψης για την επίλυση του γραμμικοποιημένου συστήματος εξισώσεων k-ε.

- (6) Ανανέωση των πεδίων k⁽ⁱ⁾, ε⁽ⁱ⁾, με βάση τις τιμές που υπολογίστηκαν στο προηγούμενο βήμα. Ξανά, χρησιμοποιείται συντελεστής χαλάρωσης, όμοιος με αυτόν που χρησιμοποιείται για τα πεδία ροής.
- (7) Προσδιορισμός του νέου πεδίου του αισθητού ιξώδους, v_{eff}⁽ⁱ⁾, με βάση τις σχέσεις 2.50, 3.28 και 3.25 για το ιξώδες τύρβης και το αισθητό ιξώδες, αντίστοιχα.
- (8) Έλεγχος για το αν πληρούνται τα κριτήρια σύγκλισης. Αν πληρούνται, ο αλγόριθμος επίλυσης του συζευγμένου συστήματος τερματίζεται και επιστρέφονται τα πεδία που υπολογίστηκαν στην παρούσα επανάληψη, U⁽ⁱ⁾, V⁽ⁱ⁾, W⁽ⁱ⁾, P⁽ⁱ⁾, k⁽ⁱ⁾, ε⁽ⁱ⁾, v_{eff}⁽ⁱ⁾. Αλλιώς, τα πεδία αξιοποιούνται για την αρχικικοποίηση της επόμενης επανάληψης.

Ο συντελεστής χαλάρωσης, λ, είναι μία τιμή που κυμαίνεται συνήθως, από 0.5 εώς 1. Τιμή 1, συνεπάγεται ότι η ανανέωση των τιμών των προσδιοριζόμενων πεδίων πραγματοποιείται κανονικά, οπότε το πεδίο από την επίλυση του γραμμικοποιημένου συστήματος της τρέχουσας επανάληψης, $U^{(i)}$, αντικαθιστά απευθείας το πεδίο της προηγούμενης επανάληψης $U^{(i-1)}$. Αντίθετα, τιμή λ<1 συνεπάγεται

$$U^{(i)} = \lambda * \boldsymbol{U}^{(i)} + (1 - \lambda) * U^{(i-1)}, \qquad (3.29)$$

όπου με bold, $U^{(i)}$, συμβολίζεται το ακριβές πεδίο της λύσης της επανάληψης-i, το οποίο δεν αποθηκεύεται στην θέση του «τρέχοντος πεδίου», αντίθετα αποθηκεύεται σε μία προσωρινή μεταβλητή, και συνεισφέρει κατά λ, στον προσδιορισμό του ανανεωμένου πεδίου, $U^{(i)}$. Με αυτόν τον τρόπο γίνεται αντιληπτό, πως όσο μικρότερες οι τιμές του συντελεστή χαλάρωσης, λ , συνεπάγονται την πιο αργή, ομαλή ανανέωση των πεδίων του προβλήματος.

Μέσω του συντελεστή χαλάρωσης, επιτυγχάνεται η αντιμετώπιση της αριθμητικής ακαμψίας, ή της ευαισθησίας σε μεταβολές, που έχουν οι εξισώσεις τυρβώδους ροής. Η μεταβολή των πεδίων γίνεται με πιο ομαλό τρόπο, από επανάληψη σε επανάληψη, με αποτέλεσμα να αποφεύγονται οι έντονες αριθμητικές αστάθειες που οδηγούν το σύστημα σε απόκλιση. Προτείνονται τιμές από 0.5 εώς 0.9, που θα χρησιμοποιούνται και για τα 2 συστήματα εξισώσεων (Εξισώσεις RANS και Εξισώσεις k-e). Οι πιο μεγάλες τιμές, κοντά στο 0.9, χρησιμοποιούνται όταν υπάρχει δυνατότητα για πυκνό πλέγμα, είτε σε λιγότερο απαιτητικά προβλήματα. Από την άλλη, η χρήση τιμών μικρότερων ακόμα από το 0.5, θα έχει ως αποτέλεσμα την πιο ομαλή μεταβολή των πεδίων, άρα θα επιτευχθεί με ασφάλεια

σύγκλιση του συστήματος, η οποία όμως θα είναι πιο αργή, λόγω της αργής ανανέωσης των μεταβλητών, για αυτό και δεν επιλέγεται (Ferziger et.al., 2020).

Με τον παραπάνω αλγόριθμο, περιγράφεται η διαδικασία επίλυσης δύο συζευγμένων μη-γραμμικών συστημάτων (3.20-3.23 και 3.26-3.27). Στον αλγόριθμο, τα δύο συστήματα επιλύονται κατά σειρά, δηλαδή εκτελείται μία «μη -γραμμική επανάληψη» (η διαδικασία γραμμικοποίησης και επίλυσης που περιγράφηκε στην ενότητα 3.1.2) για το κάθε σύστημα, οι μεταβλητές του ανανεώνονται, και στην συνέχεια επιλύεται το άλλο σύστημα. Αυτό το είδος της επανάληψης ονομάζεται εξωτερική επανάληψη (outer iteration) και επιλέγεται στην επίλυση της τυρβώδους ροής, καθώς τα δύο συστήματα είναι έντονα συζευγμένα.

Η έννοια έρχεται σε αντίθεση με την «εσωτερική επανάληψη» (inner iteration), που επιλύει το κάθε μη γραμμικό σύστημα ξεχωριστά. Το κάθε σύστημα γραμμικοποιείται, το γραμμικοποιημένο σύστημα επιλύεται, τα πεδία της λύσης χρησιμοποιούνται για την εκ νέου γραμμικοποίηση του ίδιου συστήματος και η διαδικασία επαναλαμβάνεται μέχρι την σύγκλιση του, είτε για καθορισμένο αριθμό μη-γραμμικών επαναλήψεων. Το τελευταίο είδος επανάληψης χαρακτηρίζεται εσωτερική, καθώς επιχειρείται επαναλαμβανόμενη επίλυση και σύγκλιση του ενός εκ των συστημάτων του προβλήματος, διατηρώντας σταθερά τα πεδία των υπολοίπων συστημάτων (Ferziger et.al., 2020).

Στην βιβλιογραφία, υπάρχουν προτάσεις για έναν διαφορετικό, συνδυαστικό αλγόριθμο επίλυσης της τυρβώδους ροής. Συγκεκριμένα, στο βήμα (5), αντί για μία εξωτερική επίλυση του συστήματος εξισώσεων k-ε (3.26-3.27), πραγματοποιούνται 3 εώς 5 εσωτερικές επαναλήψεις. Ενώ, επιλέγεται για το σύστημα αυτό, ελαφρώς μικρότερη τιμή του συντελεστή χαλάρωσης, σε σχέση με τον συντελεστή χαλάρωσης για το σύστημα 3.20-3.23. Η παραπάνω μετατροπή, ανταποκρίνεται στον έντονα μη γραμμικό χαρακτήρα των εξισώσεων k-ε (3.26-3.27), αλλά και στο γεγονός ότι το σύστημα εξισώσεων k-ε, συγκλίνει πιο αργά σε σχέση με το σύστημα εξισώσεων Reynolds Averaged Navier Stokes (3.20-3.23) (Reddy & Gartling, 2010). Χαρακτηριστικό παράδειγμα, το λογισμικό COMSOL, το οποίο κατά την επίλυση της τυρβώδους ροής με χρήση του μοντέλου k-ε, εκτελεί 3 εσωτερικές επαναλήψεις του συστήματος εξισώσεων k-ε, μετά από κάθε εξωτερική επανάληψη του συστήματος εξισώσεων RANS.

3.2.3: Επιλογή συνοριακών συνθηκών για τις μεταβλητές k, ε

Όπως συμβαίνει και με τα κλασσικά προβλήματα στρωτής ροής, είναι απαραίτητος ο καθορισμός συνοριακών συνθηκών για κάθε μεταβλητή του πεδίου ροής, στο σύνολο των συνόρων του χωρίου επίλυσης.

Συγκεκριμένα για τις ποσότητες k-ε, η τιμή που θα λάβουν στο σύνορο εισόδου (Inflow), θα καθορίσει το μέγεθος των ποσοτήτων αυτών σε όλο το πεδίο ροής, άρα και τα χαρακτηριστικά των λύσεων που θα ανακτηθούν από το σύστημα. Επομένως, η επιλογή τους γίνεται με προσοχή.

Είναι πολύ σπάνια η ύπαρξη δεδομένων κατανομής, ή πειραματικών τιμών για τα k, ε, στα σύνορα εισόδου, για φυσικά προβλήματα. Επομένως, χρειάζεται να πραγματοποιηθεί μία λογική προσέγγιση, για τον προσδιορισμό τους.

Η ένταση των τυρβωδών διακυμάνσεων σε ένα σημείο, δίνεται από τον λόγο, της ρίζας μέσων τετραγώνων (root-mean-square, rms) των τυρβωδών διακυμάνσεων, προς το μέτρο της ταχύτητας μέσης ροής, U,

$$I_T = \frac{u'_{rms}}{|U|} = \frac{\sqrt{u'^2}}{|U|}.$$
 (3.30)

Η ποσότητα αυτή, εκφράζει το ποσοστό του μεγέθους των διακυμάνσεων σε σύγκριση με την ταχύτητα μέσης ροής. Αν παράλληλα, αξιοποιηθεί η σχέση 2.40 για την κινητική ενέργεια τύρβης, k, και γίνει η παραδοχή ότι οι διακυμάνσεις έχουν παρόμοια ένταση σε όλες τις συνιστώσες

$$\overline{u'_{x}}^{2} \approx \overline{u'_{y}}^{2} \approx \overline{u'_{z}}^{2} \approx \overline{u'_{z}}^{2}, \qquad (3.31)$$

τότε η κινητική ενέργεια μπορεί να διατυπωθεί ως

$$k = \frac{3}{2}\overline{u'^2},\tag{3.32}$$

και συνδυάζοντας με την 3.30, προκύπτει η σχέση για την κινητική ενέργεια στο σύνορο εισόδου

$$k_{inlet} = \frac{3}{2} * I_T^2 * |\boldsymbol{U}|^2.$$
(3.33)

Στις περισσότερες περιπτώσεις, η ταχύτητα εισόδου του ρευστού θα είναι γνωστή, οπότε απομένει ο προσδιορισμός της έντασης τύρβης, Ι_T. Η τιμή που θα επιλεχθεί σχετίζεται με το είδος του φυσικού προβλήματος και την διαίσθηση του χρήστη σχετικά με το φαινόμενο της τύρβης. Δηλαδή, κοντά στην έλικα της μηχανής ενός θαλάσσιου σκάφους αναμένονται υψηλές τιμές έντασης τύρβης, κοντά στο 10%, ενώ για την εξωτερική ροή του αέρα γύρω από κινούμενο όχημα επιλέγονται χαμηλές τιμές, κάτω του 1%. Στις συνήθεις εφαρμογές CFD σε αγωγούς, επιλέγονται τιμές μεταξύ 1 και 5%. Το πρόβλημα καθορισμού του I_T, δεν έχει προς το παρόν γενική απάντηση για κάθε περίπτωση, αν και προτείνονται ορισμένες σχέσεις συναρτήσει του αριθμού Reynolds (Greenshields & Weller, 2022).

Ο προσδιορισμός του όρου καταστροφής της τυρβώδους ενέργειας, ε, στην είσοδο του χωρίου, θα εξαρτάται από το χαρακτηριστικό μήκος τύρβης, L_T, από το οποίο προκύπτει η επιλογή της ποσότητας ε, στην ενότητα 2.4.2. Δηλαδή, θα προκύπτει με βάση την σχέση

$$\varepsilon_{inle} \approx \frac{k^{\frac{3}{2}}}{L_T},$$
 (3.34)

όπου το χαρακτηριστικό μήκος τύρβης, L_T, θα λαμβάνει τιμή περίπου στο 1/10 του χαρακτηριστικού μήκους του πεδίου ροής. Το χαρακτηριστικό μήκος του πεδίου ροής αφορά το εκάστοτε πρόβλημα, και μπορεί να αναφέρεται στο πάχος του οριακού στρώματος, δ, είτε στη διάμετρο αγωγού, D (Freziger et.al., 2020). Άρα, για παράδειγμα για τη ροή σε αγωγό θα χρησιμοποιηθεί η σχέση

$$\varepsilon_{inlet} \approx \frac{k^{\frac{3}{2}}}{0.1 * D}.$$
(3.35)

Εναλλακτικά, για τον προσδιορισμό της παραμέτρου ε στο σύνορο εισόδου, μπορεί να αξιοποιηθεί η αναμενόμενη τιμή ιξώδους τύρβης στην είσοδο, ν_T*,

$$\nu_T^* = C_\mu \frac{k_{inlet}^2}{\varepsilon_{inle}} \to \varepsilon_{inlet} \cong C_\mu \frac{k_{inlet}^2}{\nu_T^*}.$$
(3.36)

Συγκεκριμένα, στα σημεία με έντονα τυρβώδη φαινόμενα, αναμένεται το ιξώδες τύρβης, ν_T^* , να λαμβάνει μεγαλύτερες τιμές από το μοριακό ιξώδες του ρευστού, αλλά να παραμένει σε ρεαλιστικές τιμές ιξώδους για συνήθη ρευστά (Greenshields & Weller, 2022).

Ο προσδιορισμός κατάλληλων τιμών των παραμέτρων k, ε, για σύνορα εισόδου, στα οποία δεν εκδηλώνονται έντονα φαινόμενα τύρβης, αποτελεί μία πρόκληση. Στην βιβλιογραφία, εντοπίζονται ελάχιστες σχετικές αναφορές. Διαισθητικά, καταλήγουμε στο συμπέρασμα, ότι επιλέγονται τιμές χαμηλής έντασης τύρβης ($I_T = 1\%$) για τον προσδιορισμό της k_{inlet} . Αντίστοιχα, στα σύνορα χωρίς έντονη παρουσία τύρβης, το αναμενόμενο ιξώδες τύρβης θα λαμβάνει τιμές μικρότερες, ή έστω περίπου ίσες, με το μοριακό ιξώδες, $v_T^* \approx v \approx 10^{-6}$. Οπότε, μία δυνατότητα προσδιορισμού του ε_{inlet} , είναι η αξιοποίηση της εξίσωσης 3.36.

Στα σύνορα συμμετρίας και στα σύνορα εξόδου του χωρίου, επιλέγονται συνθήκες Neumann για τις παραμέτρους τύρβης, δηλαδή $\frac{\partial k}{\partial n} = 0$ και $\frac{\partial \varepsilon}{\partial n} = 0$, όπου n είναι το κάθετο άνυσμα της επιφάνειας του συνόρου. (Versteeg & Malalasekra, 2007)

Στις περιοχές πολύ κοντά σε στερεά τοιχώματα, η συμπεριφορά του ρευστού και της τύρβης κυριαρχείται από διαφορετικούς μηχανισμούς σε σχέση με το υπόλοιπο ρευστό, καθώς η σχετική ταχύτητα του ρευστού μηδενίζεται, όπως και τα φαινόμενα τύρβης. Η ειδική μεταχείριση που απαιτείται, για τις συνοριακές συνθήκες σε στερεά τοιχώματα, θα αναπτυχθεί παρακάτω.

3.2.4: Συναρτήσεις τοιχώματος (Wall Functions)

Λόγω της συνθήκης μη ολίσθησης, η ταχύτητα των σωματιδίων ρευστού, που βρίσκονται ακριβώς πάνω σε επίπεδο τοίχωμα, είναι μηδενική. Ξεκινώντας από το συγκεκριμένο σημείο, και παρατηρώντας τα σωματίδια του ρευστού σε αυξανόμενη απόσταση από το στερεό τοίχωμα, η εφαπτομενική συνιστώσα της ταχύτητας, u_x, αυξάνεται ραγδαία, έως ότου λάβει την τιμή του περιβάλλοντος ρευστού, u_{max}. Η λεπτή περιοχή στην οποία εντοπίζεται η ραγδαία μεταβολή της ταχύτητας ροής μέχρι το σημείο που το ρευστό αποκτά την τελική του ταχύτητα, ονομάζεται οριακό στρώμα.

Έχει διαπιστωθεί, ότι για ροές με μεγάλους αριθμούς Reynolds, το προφίλ της εφαπτομενικής συνιστώσας ταχύτητας u_x(y), επιδεικνύει οικουμενική (universal) συμπεριφορά. Δηλαδή, εκφράζονται οι αδιάστατες μορφές της ταχύτητας του ρευστού, u, και της απόστασης από το τοίχωμα, y,

$$u^+ = \frac{u}{v_f},\tag{3.37}$$

και

$$y^+ = \frac{y * v_f}{v},\tag{3.38}$$

αντίστοιχα, όπου v_f : η ταχύτητα διάτμησης (friction velocity), που σχετίζεται με την διατμητική τάση στο τοίχωμα $\tau_w = \rho v_f^2$. Το προφίλ της αδιάστατης ταχύτητας $u^+(y^+)$, είναι κοινό, ανεξάρτητα από τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του πεδίου ροής, π.χ. για ροή πάνω από επίπεδο τοίχωμα, για ροή σε αγωγό κ.ά. Για αυτόν τον λόγο, λέμε ότι το προφίλ ταχύτητας στο οριακό στρώμα έχει οικουμενικό χαρακτήρα.



Διάγραμμα 3: Διάγραμμα αδιάστατων μεταβλητών u+ συναρτήσει του log(y+) κοντά στο τοίχωμα. Τα σημεία αναπαριστούν πειραματικές μετρήσεις. (Schlichting, H.,1979)

Με βάση την παραπάνω αδιαστατοποίηση σε συνδυασμό με πλήθος πειραματικών μετρήσεων, έχει επιβεβαιωθεί ότι το οριακό στρώμα επιδεικνύει όμοια συμπεριφορά για ροές με μεγάλους αριθμούς Reynolds. Όπως φαίνεται στο Διάγραμμα 3, το οριακό στρώμα μπορεί να χωριστεί σε 3 περιοχές: πρώτον, τη περιοχή πολύ κοντά στο τοίχωμα όπου υπάρχει γραμμική σχέση μεταξύ υ και y, την ενδιάμεση περιοχή, και την περιοχή λίγο πιο μακριά από το τοίχωμα όπου υ και y έχουν λογαριθμική σχέση.

Στην περιοχή που χαρακτηρίζεται με τιμές y⁺<5, πολύ κοντά στο τοίχωμα, δημιουργείται το ιξώδες υπόστρωμα (viscous sublayer). Στην συγκεκριμένη περιοχή, η επίδραση του τοιχώματος είναι πολύ ισχυρή, οπότε η ταχύτητα παραμένει σε επίπεδα στρωτής ροής, και η μεταφορά ορμής κυβερνάται από το μοριακό ιξώδες. Ταχύτητα και απόσταση έχουν γραμμική σχέση, $u^+ = y^+$.

Στην ενδιάμεση περιοχή (buffer layer), που εντοπίζεται συνήθως για τιμές y⁺ μεταξύ 5 και 30, η επίδραση του τοιχώματος είναι αντίστοιχου μεγέθους με την επίδραση των αδρανειακών δυνάμεων, οπότε η εφαπτομενική ταχύτητα u_x , αρχίζει να αυξάνεται κατά την y διεύθυνση με μεγαλύτερο ρυθμό.

Η περιοχή του οριακού στρώματος, όπου y⁺>30, ονομάζεται λογαριθμική περιοχή, ή αδρανειακό υπόστρωμα (inertial sublayer). Αδρανειακό ονομάζεται, καθώς πλέον οι αδρανειακές δυνάμεις (ρ* u_{max}^2) κυριαρχούν σε σχέση με τις ιξώδεις δυνάμεις και την επίδραση του τοιχώματος, οπότε καθορίζουν την μεταφορά ορμής. Η σχέση που συνδέει τα αδιάστατα μεγέθη u^+ και y^+ είναι λογαριθμική, και για ομαλά τοιχώματα, δίνεται από την εξίσωση

$$u^{+} = 2.4 * \ln y^{+} + 5.21.$$
 (3.39)

Η εξίσωση 3.18 αναφέρεται και ως ο λογαριθμικός νόμος του τοιχώματος (log-law) (Ferziger et. al. 2020).

Για την μοντελοποίηση μίας ροής που περιέχει στερεό τοίχωμα υπάρχει η επιλογή της προσομοίωσης του συνόλου του οριακού στρώματος, μέχρι και το τοίχωμα. Η επιλογή αυτή σημαίνει ότι θα χρησιμοποιηθεί η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων (ή άλλη αριθμητική μέθοδος), προκειμένου να περιγράψει τις ραγδαίες μεταβολές των ιδιοτήτων της ροής στο οριακό στρώμα. Συνεπάγεται η απαίτηση για υπερβολικά μικρό μέγεθος πλέγματος κοντά στο τοίχωμα, δηλαδή έχει τεράστιο υπολογιστικό κόστος. Επιπλέον, εξαιτίας της επιβολής μηδενικής τιμής για το k στο επίπεδο του τοιχώματος και των ραγδαίων μεταβολών για k και ε στην περιοχή του οριακού στρώματος, θα εμφανιστούν πολύ σημαντικά αριθμητικά προβλήματα, όπως αναπτύχθηκε στην ενότητα 3.2.1.

Για τους παραπάνω λόγους, αντί της κοστοβορας προσομοίωσης του πλήρους οριακού στρώματος, επιλέγεται η μετακίνηση του χωρίου επίλυσης κατά μία μικρή απόσταση πάνω από το τοίχωμα. Δηλαδή, όλοι οι υπολογισμοί θα περιλαμβάνουν μέρος του οριακού στρώματος, και θα αξιοποιούν το νόμο για το προφίλ ταχύτητας της λογαριθμικής περιοχής, όπως και όλες τις οικουμενικές ιδιότητές του.

Έστω ότι το πρώτο στοιχείο του υπολογιστικού πλέγματος, P, βρίσκεται σε απόσταση y_p , από το τοίχωμα. Ιδανικά, η απόσταση αυτή θα αντιστοιχεί στην λογαριθμική περιοχή του οριακού στρώματος, δηλαδή $30 < y_P^+ < 500$. Στο σημείο αυτό, η επίδραση του τοιχώματος θα προσδιοριστεί με βάση τις εμπειρικές σχέσεις, χωρίς να απαιτούνται υπολογισμοί υψηλού κόστους.

Επομένως, όλες οι ιδιότητες ενδιαφέροντος, όπως η τάση που ασκεί το ρευστό στο τοίχωμα, τ_w, ή το μέγεθος των όρων παραγωγής και καταστροφής της τυρβώδους κινητικής ενέργειας k, μπορούν να εξαχθούν από το εμπειρικό προφίλ της ταχύτητας.



Διάγραμμα 4: Το προφίλ των όρων παραγωγής, καταστροφής, και διάχυσης ενέργειας k, στο οριακό στρώμα (Greenshields & Weller, 2022)

Ειδικότερα, ο όρος παραγωγής της κινητικής ενέργειας τύρβης, G, λαμβάνει την μέγιστη τιμή του στην ενδιάμεση περιοχή του οριακού στρώματος, όπως φαίνεται στο Διάγραμμα 4. Για την ίδια την παράμετρο k, προκύπτει ότι λαμβάνει επίσης την μέγιστη τιμή της στην περιοχή όπου $10 < y^+ < 15$, και πιο μακριά από το τοίχωμα η κατανομή της τείνει σε μία ασυμπτωτική τιμή για μεγάλα y^+ . Επομένως, η επιλογή που γίνεται για την τυρβώδη κινητική ενέργεια στο σύνορο του (νέου) χωρίου επίλυσης, k_P, είναι αυτό της μηδενικής κλίσης

$$\left(\frac{\partial k}{\partial y}\right)_{p} = 0. \tag{3.40}$$

Αντίστοιχα, η τιμή που επιλέγεται για την παράμετρο ε, είναι

$$\varepsilon_P = \frac{C_{\mu}^{\frac{3}{4}} k_P^{\frac{3}{2}}}{0.4 * y_P},\tag{3.41}$$

όπου, y_P η «ανύψωση» του χωρίου επίλυσης, k_P η τιμή της παραμέτρου k στο συγκεκριμένο σημείο, ενώ C_μ=0.09 σταθερά του μοντέλου k-ε. Με την προυπόθεση το σύνορο του χωρίου επίλυσης βρίσκεται στην λογαριθμική περιοχή του οριακού στρώματος, για την οποία τίθεται το χαλαρό όριο, $y_P^+ > 11$ (Greenshields & Weller, 2022).

Ένα σημαντικό μειονέκτημα της εφαρμογής των συναρτήσεων τοιχώματος σε ορισμένα φυσικά προβλήματα, αφορά την αδυναμία της εκ των προτέρων γνώσης για το αν η απόσταση y_p από το τοίχωμα, θα αντιστοιχεί στην λογαριθμική περιοχή του οριακού στρώματος για όλη την έκταση του τοιχώματος. Καθώς οι ιδιότητες του πεδίου ροής μεταβάλλονται, παράλληλα μεταβάλλεται η διατμητική τάση του τοιχώματος, άρα αλλάζουν και οι παράμετροι των αδιάστατων u και y. Επομένως, η καθολική ορθότητα εφαρμογής των συναρτήσεων τοιχώματος δεν μπορεί να διασφαλιστεί. Ειδική περίπτωση αυτού του φαινομένου, είναι η τα προβλήματα ροής με σημεία στασιμότητας (stagnation points) πάνω στο τοίχωμα, όπου τοπικά η ταχύτητα λαμβάνει πολύ μικρές τιμές. Μία περίπτωση ροής που περιλαμβάνει σημείο στασιμότητας, είναι η ροή του πυκνού πίδακα ρευστού, καθώς γύρω από το σημείο πρόσκρουσης του ρευστού στον πυθμένα η εφαπτομενική συνιστώσα της ταχύτητας λαμβάνει πολύ μικρές τιμές. Σε αυτές τις περιοχές, η εφαρμογή των συναρτήσεων τοιχώματος συνεπάγεται την εισαγωγή σφαλμάτων κατά την επίλυση των πεδίων ροής. Παρά την συγκεκριμένη αδυναμία, οι συναρτήσεις τοιχώματος παραμένουν ο μοναδικός πρακτικός τρόπος να προσομοιωθεί η τυρβώδης ροή κοντά σε τοίχωμα, όταν χρησιμοποιείται το μοντέλο k-ε (Reddy & Gartling, 2010).

3.3: Το λογισμικό ανοικτού κώδικα Elmer

Το Elmer είναι ένα λογισμικό πακέτο που αξιοποιεί την Μέθοδο Πεπερασμένων Στοιχείων, για την επίλυση φυσικών προβλημάτων. Κύριο γνώρισμά του η δυνατότητα να μοντελοποιήσει πολλά διαφορετικά φυσικά φαινόμενα, αλλά και συνδυασμούς τους. Παράλληλα, είναι ένα λογισμικό ανοικτού κώδικα, γεγονός που σημαίνει ότι ένας χρήστης μπορεί να επέμβει στους κώδικες, τροποποιώντας τις διαδικασίες επίλυσης, να ενσωματώσει κώδικες για επίλυση νέων φυσικών φαινομένων κ.α. (Raback & Malinen, 2023)

Τα αντίστοιχα εμπορικά λογισμικά πακέτα απαιτούν σημαντικά ποσά για την παροχή δικαιωμάτων χρήσης, σε αντίθεση με το Elmer, το οποίο προσφέρεται δωρεάν στην παγκόσμια επιστημονική κοινότητα.

3.3.1: Εισαγωγικά στοιχεία

Το Elmer ξεκίνησε να αναπτύσσεται το 1995, μέσω της συνεργασίας Φινλανδικών ινστιτούτων, πανεπιστημίων, εταιριών, κέντρων τεχνολογίας κ.α. Αρχικό πεδίο ανάπτυξης ήταν ο τομέας της υπολογιστικής ρευστομηχανικής (CFD), ενώ στην συνέχεια οι δυνατότητες του Elmer επεκτάθηκαν και σε άλλα επιστημονικά πεδία. Κύριος φορέας ανάπτυξης του λογισμικού παραμένει το φινλανδικό επιστημονικο κέντρο CSC-IT, όμως ενθαρρύνεται η συνεισφορά των χρηστών.

Τα μαθηματικά μοντέλα που μπορούν να επιλυθούν στο Elmer περιλαμβάνουν: προβλήματα μεταφοράς θερμότητας, ροής ρευστών, μεταφοράς και αντίδρασης χημικών ουσιών, ανάλυσης ελαστικότητας στερεών, ακουστικής, ηλεκτρομαγνητισμού κ.ά. Το λογισμικό δίνει στον χρήστη την δυνατότητα να προσομοιώσει φαινόμενα, όπου τα παραπάνω μοντέλα συνυπάρχουν, δηλαδή να επιλύσει συζευγμένα (coupled) προβλήματα. Για ορισμένες περιπτώσεις συζευγμένων προβλημάτων, όπως είναι η αλληλεπίδραση στερεού-ρευστού, το Elmer δίνει την επιλογή στον χρήστη να διαμορφώσει αυτόματα ένα ενιαίο, ισχυρά συζευγμένο σύστημα. Στις υπόλοιπες περιπτώσεις, αφήνεται στον χρήστη να διαμορφώσει το κατάλληλο αλγόριθμο επίλυσης-

64

σύζευξης των συστημάτων, μέσω των εντολών που θα δώσει στον επιλύτη του Elmer (ElmerSolver), ο οποίος θα παρουσιαστεί παρακάτω.

Παράλληλα, στο πακέτο περιλαμβάνεται πληθώρα αριθμητικών μεθόδων για να αξιοποιηθούν από τον χρήστη. Ονομαστικά αναφέρονται μερικές δυνατότητες: διάφορες εκδοχές των πεπερασμένων στοιχείων, σχήματα χρονικής ολοκλήρωσης, ευθείς (direct) και επαναληπτικοί (iterative) επιλύτες γραμμικών συστημάτων, δυνατότητες παράλληλης επεξεργασίας. Επιπλέον, ειδικά για την επίλυση προβλημάτων ροής ρευστών, όπου απαιτείται η σταθεροποίηση του συναγωγικού όρου, μπορούν να αξιοποιηθούν μια σειρά από τεχνικές σταθεροποίησης, όπως η SUPG (Streamline upwind Petrov–Galerkin). (Ruokolainen et. al., 2023)

Αποτελει γνώρισμα αρκετών ανοικτών λογισμικών, το γεγονός ότι δεν αναπτύσσουν επαρκώς μεθόδους για την ενημέρωση και εκμάθηση των χρηστών. Στο Elmer η παραπάνω διαπίστωση ισχύει μερικώς. Ειδικότερα, υπάρχουν έγγραφα (Documentation) που παρουσιάζουν διεξοδικά (αλλά όχι εξαντλητικά) τα επιμέρους εργαλεία και προγράμματα του Elmer, ενώ δίνονται παραδείγματα ανάπτυξης απλών προβλημάτων με το λογισμικό. Με τα παραπάνω, μαζί με την καλή γνώση των πεπερασμένων στοιχείων, ο χρήστης μπορεί να αξιοποιήσει το Elmer ικανοποιητικά. Ωστόσο, τα Έγγραφα δεν είναι επαράδειγμα, ενώ έχουν αναπτυχθεί οι κώδικες για πολλά μοντέλα τύρβης, εντούτοις, απουσιάζει σχεδόν κάθε αναφορά στα Έγγραφα, με αποτέλεσμα ο χρήστης να μην είναι σε θέση να γνωρίσει βασικά στοιχεία του κώδικα, όπως οι απαιτούμενες εντολές για την ρύθμιση των εκάστοτε μοντέλων. Μέσα από τον διαδικτυακό τόπο συζήτησης για το Elmer (Elmer Discussion Forum - Index page (elmerfem.org)) παρέχεται υποστήριξη στους χρήστες, κυρίως από την ομάδα του CSC.

3.3.2: Προγράμματα του πακέτου

Το κεντρικό κομμάτι του λογισμικού πακέτου Elmer, είναι ο επιλυτής του, ElmerSolver. Στον Solver, εισάγεται ένα αρχείο τύπου .sif (Solver Input File), στο οποίο περιέχονται όλες οι πληροφορίες της προσομοίωσης. Ειδικότερα, το SIF περιλαμβάνει, τη τοποθεσία των αρχείων πλέγματος (mesh.*), τα χαρακτηριστικά του μοντέλου προς επίλυση, τις εξισώσεις, παραμέτρους υλικού, συνοριακές συνθήκες, βαρυτικές δυνάμεις, τον αλγόριθμο σύζευξης εξισώσεων, τη διαδικασία επίλυσης των γραμμικών και μη γραμμικών συστημάτων, όπως και την τοποθεσία και τα είδη των αρχείων που θα εξαχθούν. Είναι ένα δομημένο αρχείο κειμένου, το οποίο κατασκευάζεται από τον χρήστη.



Εικόνα 5: Ενδεικτική εικόνα της δομής του Solver Input File

Στην Εικόνα 5, φαίνεται ένα ενδεικτικό κομμάτι κώδικα του αρχείου εντολών sif. Ο επιλύτης ακολουθεί όλες τις οδηγίες που δίνονται στο αρχείο SIF για να λύσει το πρόβλημα.



Εικόνα 6: Η γραφική διεπιφάνεια χρήστη του Elmer (Elmer GUI)

Σημαντικό ρόλο για το λογισμικό, έχει και η γραφική διεπιφάνεια χρήστη (Graphical User Interface, Elmer GUI), η οποία απεικονίζεται στην Εικόνα 6. Η βασική λειτουργία του Elmer GUI είναι η διευκόλυνση του χρήστη στην συγγραφή του αρχείου SIF. Συγκεκριμένα, μέσα από την γραφική επιφάνεια, ο χρήστης μπορεί να εισαχθεί στις λειτουργίες και τα διάφορα μέρη του λογισμικού, να οπτικοποιήσει το υπολογιστικό πλέγμα, και να επιλέξει τιμές για τις διάφορες παραμέτρους της προσομοίωσης. Έτσι, μετά το πέρας των επιλογών στο Elmer GUI, ο χρήστης δύναται να παράγει αυτοματοποιημένα το αντίστοιχο αρχείο SIF. Τα παραπάνω στοιχεία, καθιστούν το Elmer GUI ένα εργαλείο «εισαγωγής» του νέου χρήστη στο λογισμικό Elmer, και εκμάθησης των λειτουργιών του λογισμικού.

Όμως, πρέπει να σημειωθεί, ότι στο Elmer GUI δεν περιλαμβάνεται το σύνολο των εντολών που μπορούν δοθούν στον επιλύτη, παρά μόνο βασικές εντολές. Συνεπώς, ο χρήστης που θέλει να αξιοποιήσει το σύνολο των δυνατοτήτων του Elmer, χρειάζεται να εξοικειωθεί με την συγγραφή και τροποποίηση του αρχείου εντολών.

3.3.3: Ροή εργασίας με χρήση συνοδευτικών ελεύθερων λογισμικών

Η ροή εργασίας που χρησιμοποιήθηκε παρουσιάζεται παρακάτω.

Αρχικά, στην φάση της προεπεξεργασίας χρησιμοποιήθηκε το ελεύθερο λογισμικό Gmsh (<u>https://gmsh.info</u>) για την κατασκευή της γεωμετρίας και την παραγωγή του υπολογιστικού πλέγματος. Το πλέγμα εξάγεται σε αρχείο τύπου .msh, ώστε να διαβαστεί από το Elmer.

Στην συνέχεια, αξιοποιούνται οι δυνατότητες του της επιφάνειας χρήστη Elmer GUI. Σε πρώτη φάση, δημιουργείται ο φάκελος του Elmer Project (εδώ περιέχονται όλα τα αρχεία που σχετίζονται με την προσομοίωση). Έπειτα, εισάγεται το αρχείο πλέγματος .msh, για το οποίο το ElmerGUI καλεί αυτόματα το λογισμικό ElmerGrid, προκειμένου να το διαβάσει και να επιστρέψει 4 αρχεία πλέγματος (mesh.*) σε μορφή κατάλληλη για να διαβαστεί από τον Solver. Εισάγονται οι βασικές παράμετροι του προβλήματος, επιλέγονται οι οριακές συνθήκες κ.ά.

Όταν ολοκληρωθεί η κύρια δουλειά προεπεξεργασίας, επιλέγεται να παραχθεί (Generate) το αρχείο Sif, με βάση τις οδηγίες που δόθηκαν μέχρι στιγμής. Ο χρήστης, μπορεί να ανοίξει και να παρατηρήσει το αρχείο εντολών. Επιπλέον, μπορεί να εισάγει εντολές που δεν προσφέρονται από το GUI, είτε να διαμορφώσει κατάλληλο script όπου εκτελεί την προσομοίωση πολλές φορές μέσω της εντολής RUN, μεταβάλλοντας ενδιάμεσα τις παραμέτρους του προβλήματος.

Ο Solver εκτελείται και ακολουθεί τις οδηγίες από το αρχείο εντολών SIF. Παράλληλα, με την διαδικασία επίλυσης, παρουσιάζονται αναλυτικά τα βήματα που ακολουθούνται στο παράθυρο Solver Log, όπως και δεδομένα σχετικά με το σύστημα που εκτελείται, τον αριθμό της επανάληψης, τον βαθμό σύγκλισης.

Το σύνηθες αρχείο αποτελεσμάτων που παράγεται από τον ElmerSolver είναι αρχείο τύπου .vtu, το οποίο είναι κατάλληλο προς εισαγωγή στο λογισμικό Paraview. Το λογισμικό Paraview είναι επίσης ελεύθερο και χρησιμεύει στην οπτικοποιήση και μετεπεξεργασία αποτελεσμάτων (https://www.paraview.org). Επιπλέον, αν είναι επιθυμητή η παραγωγή διαγραμμάτων όπου θα γίνεται σύγκριση με άλλες πηγές δεδομένων, το Paraview δίνει την δυνατότητα για εξαγωγή δεδομένων από το αρχείο vtu (πχ. τιμή μεταβλητής σε μία γραμμή του χωρίου), και μετατροπή τους σε αρχείο csv, προκειμένου να διασταυρωθούν με πειραματικά ή άλλα δεδομένα σε λογισμικό Spreadsheet (πχ. Excel).

68

Κεφάλαιο 4: Προσομοίωση πυκνού πίδακα υγρού σε συνθήκες Στρωτής Ροής

Προσομοιώνεται, σε τρεις διαστάσεις, η συμπεριφορά πυκνού πίδακα υγρού που εκτοξεύεται από ακροφύσιο με κλίση προς τα επάνω, το οποίο αναπτύχθηκε στην ενότητα 1.5. Στο παρόν κεφάλαιο, η μοντελοποίηση του φαινομένου πραγματοποιείται σε συνθήκες στρωτής ροής.

Η μοντελοποίηση του προβλήματος σε στρωτή ροή δεν έχει εφαρμογή στις ρεαλιστικές συνθήκες απόρριψης άλμης. Όμως, η προσομοίωση είναι χρήσιμη για δύο λόγους. Αφενός, δίνει την δυνατότητα να προσομοιωθεί μια απλούστερη φυσική εκδοχή του υπό μελέτη φαινομένου, ώστε στη συνέχεια οι απαιτητικές φυσικές να εισαχθούν σταδιακά στο μοντέλο. Αφετέρου, χρησιμεύει ως ένας έλεγχος-επαλήθευση των μεθόδων επίλυσης που χρησιμοποιεί το Elmer, αφού τα αποτελέσματα θα διασταυρωθούν με αντίστοιχα από ένα εμπορικό λογισμικό και θα εντοπιστούν τυχόν πηγές σφαλμάτων.

4.1: Μαθηματική διατύπωση προβλήματος

Το πρόβλημα του πυκνού πίδακα, σε συνθήκες στρωτής ροής, περιγράφεται μαθηματικά από τις κλασσικές εξισώσεις Navier-Stokes για ασυμπίεστο ρευστό, σε μόνιμες συνθήκες

$$\boldsymbol{u} * \nabla u_x = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \nabla^2 u_x, \qquad (4.1)$$

$$\boldsymbol{u} * \nabla u_{y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu \nabla^{2} u_{y}, \qquad (4.2)$$

$$\boldsymbol{u} * \nabla u_z = -g * \frac{(\rho - \rho_\alpha)}{\rho_\alpha} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu \nabla^2 u_z, \qquad (4.3)$$

$$\nabla * \boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}, \tag{4.4}$$

όπου ρ_α: είναι η πυκνότητα του περιβάλλοντος ρευστού, και ρ: η πυκνότητα του ρευστου. Επιπλέον, χρησιμοποιείται η εξίσωση μεταφοράς μάζας, αποκαλούμενη συχνά ως εξίσωση συναγωγής-διάχυσης (advection-diffusion equation) εκφρασμένη ως προς την συγκέντρωση του ρύπου, σε μόνιμη κατάσταση

$$\nabla * (c\boldsymbol{u}) = D_A \nabla^2 c. \tag{4.5}$$

Χρησιμοποιούνται οι εξισώσεις για ασυμπίεστο ρευστό, παρόλο που ο πίδακας που εισέρχεται στο χωρίο έχει αυξημένη πυκνότητα. Αυτό συμβαίνει, διότι για μικρές μεταβολές της πυκνότητας ενός ρευστού μέσου, έως 5%, μπορεί να αξιοποιηθεί η προσέγγιση Boussinesq. Σύμφωνα με την προσέγγιση, αν η διαφορά πυκνότητας, (ρ-ρ_α), που οφείλεται στην διαφορά συγκέντρωσης δεν είναι σημαντική ως προς την συνολική πυκνότητα του ρευστού, το ρευστό θεωρείται πρακτικά ασυμπίεστο. Ενώ, η διαφορά πυκνότητας στο ρευστό, συμπεριλαμβάνεται στις Navier-Stokes, αλλά μόνο ως όρος σωματικής δύναμης στην z-συνιστώσα των Navier-Stokes, 4.3, δηλαδή,

$$F_z = g * \frac{(\rho_\alpha - \rho)}{\rho_\alpha}, \tag{4.6}$$

4.2: Βήματα ανάπτυξης προσομοίωσης

4.2.1: Κατασκευή Γεωμετρίας και Πλέγματος

Το πρόβλημα θα επιλυθεί σε τρισδιάστατο παραλληλεπίπεδο, μήκους L=1m, ύψους H=0.5m, βάθους W=0.2m.

Το επίπεδο y=0, αποτελεί το επίπεδο συμμετρίας του προβλήματος.

Η είσοδος του πίδακα, πραγματοποιείται από μία οπή, ελλειπτικού σχήματος στο επίπεδο x=0. Το κέντρο της οπής βρίσζεται στο σημείο (x=0, y=0, z=0.2). Η τομή σχεδιάζεται κατά το ήμισυ, λόγω της συμμετρικότητας του προβλήματος και έχει ελλειπτικό σχήμα, καθώς αναπαριστά την τομή ενός κεκλιμένου σωλήνα με το κατακόρυφο επίπεδο. Η οριζόντια διάμετρος της έλλειψης είναι d=0.04m, που αντιστοιχεί σε σωλήνα ίσης διαμέτρου.



Για γωνία σωλήνα κλίσης θ, η κατακόρυφη διάμετρος είναι: $\frac{0.04}{Cos(\theta)}$.

Εικόνα 7: Τρισδιάστατη οπτική του χωρίου επίλυσης, από την διεπιφάνεια χρήστη του Elmer.

Στην Εικόνα 7, όπου απεικονίζεται το χωρίο επίλυσης, είναι διακριτή η πύκνωση των στοιχείων του πλέγματος, κοντά στο σύνορο εισόδου του πίδακα. Η πύκνωση του πλέγματος κοντά στο σύνορο εισόδου, βασίζεται στο γεγονός πως στην κοντινή περιοχή θα αναπτυχθεί έντονη κλίση ταχύτητας, και θα υπάρχουν απότομες μεταβολές για τις μεταβλητές του πεδίου ροής. Το μοντέλο που θα αναπτυχθεί, είναι επιθυμητό να περιγράφει επαρκώς τις συγκεκριμένες μεταβολές.

Η εισαγωγή της γεωμετρίας και η κατασκευή του πλέγματος πραγματοποιήθηκε με χρήση του λογισμικού Gmsh. Ο κώδικας εντολών για την κατασκευή της γεωμετρίας, όπως επίσης και ο κώδικας για αρχείο SIF του Elmer, το οποίο περιλαμβάνει σε μορφή εντολών τις επιλογές παραμέτρων και συνοριακών συνθηκών, περιλαμβάνονται στο Παράρτημα Α.

4.2.2: Καθορισμός Παραμέτρων Προσομοίωσης

<u>Εξισώσεις</u>: Θα επιλυθούν οι εξισώσεις Navier-Stokes, καθώς και η εξίσωση μεταφοράς μάζας.

Επιλύεται πλήρως το μη γραμμικό σύστημα των Navier-Stokes, με όσες εσωτερικές επαναλήψεις απαιτούνται προκειμένου να συγκλίνει, και στην συνέχεια επιλύεται το γραμμικό σύστημα για το πεδίο συγκέντρωσης. Ο παραπάνω αλγόριθμος αφορά μία επανάληψη μόνιμης κατάστασης (Steady State Iteration). Θα πραγματοποιηθούν όσες επαναλήψεις μόνιμης κατάστασης απαιτούνται, μέχρι να επιτευχθεί σύγκλιση των άγνωστων πεδίων.

<u>Υλικό</u>: Επιλέγονται οι ιδιότητες του νερού σε θερμοκρασία περιβάλλοντος ως ιδιότητες του ρευστού μέσου, δηλαδή ρ=1000kg/m³, μ=1.002e-3 Pa.s, D=1e-9

<u>Σωματική Δύναμη</u>: Για λόγους απλούστευσης του προβλήματος, η σχέση της διαφοράς πυκνότητας, (ρ-ρ_α), με την συγκέντρωση C του ρύπου, θεωρείται γραμμική. Επιπλέον, επιλέγεται ως σύμβαση η τιμή συγκέντρωσης ίση με μονάδα (C = 1) να αναφέρεται στην αρχική συγκέντρωση του πίδακα, ενώ το περιβάλλον ρευστό να έχει μηδενική συγκέντρωση ($C \approx 0$).

Ως παράμετρος beta, θα αναγράφεται ο παράγοντας αύξησης της πυκνότητας του ρευστού, για τιμή συγκέντρωσης ίση με 1, δηλαδή

$$beta = \frac{\rho_0 - \rho_\alpha}{\rho_\alpha}.$$
(4.7)

Στην παράμετρο beta, θα δίνονται αυθαίρετες τιμές, σε κάθε προσομοίωση. Πρώτον, η δύναμη άνωσης, απαιτείται να είναι παρόμοιας τάξης μεγέθους με την αρχική κατακόρυφη ορμή του πίδακα, προκειμένου να αποτυπωθεί το υπό διερεύνηση φαινόμενο στην ολότητά του. Δεύτερον, προκειμένου να μελετηθούν τα χαρακτηριστικά του πλουμίου σε διαφορετικές συνθήκες.

Με βάση τις παραπάνω παραδοχές, από την εξίσωση 4.7, η δύναμη λόγω διαφοράς συγκέντρωσης του ρύπου σε οποιοδήποτε σημείο του ρευστού, θα είναι

$$F_z = -g * beta * C . \tag{4.8}$$

Για παράδειγμα, αν χρειάζεται να μοντελοποιηθεί, αρχική διαφορά πυκνότητας που ισούται με το 0,1% της πυκνότητας του νερού, ή, αλλιώς: $beta = \frac{\rho - \rho_0}{\rho} = 10^{-3}$, εφαρμόζεται η παρακάτω σχέση για την δύναμη στο *Elmer* (Body Force -> Navier-Stokes Tab), επιλέγεται *Force* 3 = *Variable Concentration; Real MATC* " – tx * 9.81 * 1e - 3".

4.2.3: Καθορισμός Συνοριακών Συνθηκών

Στο σύνορο του τοιχώματος (z=0) εφαρμόζεται συνθήκη μη ολίσθησης.

Στο επίπεδο συμμετρίας (**y=0**), όλες οι κλίσεις (gradients) των πεδίων του προβλήματος είναι μηδενικές, ενώ μηδενική είναι και η συνιστώσα της ταχύτητας που είναι κάθετη στο επίπεδο. Στο Elmer, επιλέγονται: Velocity 2 = 0 και Concentration Flux = 0.

Στα επίπεδα z=H, και y=W εφαρμόζεται, επίσης συνθήκη συμμετρίας.

Στο σύνορο εξόδου (Outlet, **x=L**), εφαρμόζονται οι συνθήκες μηδενικής πίεσης και μηδενικής ροής συγκέντρωσης (λόγω διάχυσης). Στο Elmer, εισάγονται ως External Pressure = 0 και Concentration Flux = 0.

Στο σύνορο εισόδου του θαλάσσιου ρεύματος (Inlet Sea), δηλαδή το σύνορο **x=0**, εξαιρουμένης της ελλειπτικής οπής, αναπαρίσταται η είσοδος θαλάσσιου ρεύματος μηδενικής συγκέντρωσης ρύπου. Το ρεύμα αυτό, χρησιμοποιείται για την είσοδο ρευστού μηδενικής συγκέντρωσης στο χωρίο. Η συγκεκριμένη τροποποίηση του φυσικού φαινομένου που αναπαρίσταται (όπου το περιβάλλον ρευστό είναι ήρεμο), είναι αναγκαία, ώστε να καθίσταται δυνατή η προσομοίωση σε συνθήκες μόνιμης κατάστασης. Οι επιλογές που εισάγονται στο Elmer, είναι: *Velocity* 1 = 1*e* – 6, *Velocity* 2 = 0, *Velocity* 3 = 0 και Concentration = 0.
Στο σύνορο εισόδου του ρύπου (Inlet Dense), εφαρμόζεται συνθήκη Dirichlet για την συγκέντρωση, $C_0 = 1$. Οι συνιστώσες u και w της ταχύτητας εισόδου, επιλέγονται με βάση την γωνία εισόδου του πίδακα, θ. Το μέτρο της ταχύτητας εισόδου θα είναι: $U_0 = 1e - 5 m/s$.

Δηλαδή εφαρμόζεται στο σύνορο:

 $\begin{aligned} &Velocity \ 1 \ = \ \cos\theta * 1e - 5 \ , \\ &Velocity \ 2 \ = \ 0 \ , \\ &Velocity \ 3 \ = \ \sin\theta * 1e - 5 \ , \\ &Concentration \ = \ 1. \end{aligned}$

Σημείωση: Οι τιμές ταχύτητας που αναφέρονται, αφορούν τις προσομοιώσεις με αριθμό Reynolds=10. Για τις προσομοιώσεις σε μεγαλύτερους αριθμούς Reynolds, οι ταχύτητες εισόδου αυξάνονται ανάλογα και για τα δύο σύνορα εισόδου.

Ως αρχική συνθήκη (initial condition), η οποία διευκολύνει την επίλυση του αριθμητικού προβλήματος, επιλέγονται οι ίδιες τιμές με την συνοριακή συνθήκη του θαλάσσιου ρεύματος (Inlet Sea).

4.3: Παρουσίαση αποτελεσμάτων προσομοίωσης

Πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις του πυκνού πίδακα ρευστού, σε συνθήκες στρωτής ροής, για τιμές Reynolds 10, 20 και 50. Σε κάθε μία από τις 3 περιπτώσεις, προσομοιώθηκαν οι γωνίες 30°, 45° και 60°, για την έξοδο του πυκνού ρευστού.

Η τιμή της παραμέτρου beta που επιλέχθηκε ήταν 1e-10, για τους αριθμούς Reynolds 10 και 20, ενώ για τον αριθμό Reynolds 50 επιλέχθηκε beta = 3e-10. Οι τιμές αυτές δεν έχουν κάποια φυσική σημασία. Ο ρόλος τους είναι να παράγουν δύναμη αρνητικής άνωσης τέτοια, ώστε το φαινόμενο να μπορεί να μελετηθεί εντός του επιλεγμένου χωρίου.

Όλες οι προσομοιώσεις επαναλήφθηκαν με τις ίδιες ακριβώς επιλογές σε χωρίο, παραμέτρους και οριακές συνθήκες, μέσω του εμπορικού λογισμικού Comsol. Τα αποτελέσματα από το Comsol, αξιοποιήθηκαν ως αναφορά, για να μελετηθούν τα σφάλματα στην τυπική μέθοδο αριθμητικής επίλυσης του Elmer.

Προκειμένου να πραγματοποιηθεί η σύγκριση των αποτελεσμάτων κατά δομημένο τρόπο, επιλέχθηκε να αντιπαρατεθούν τα κατακόρυφα προφίλ της συγκέντρωσης, σε οριζόντια απόσταση x=0.5m από την είσοδο του πίδακα, στο επίπεδο συμμετρίας (y=0). Τα αποτελέσματα στη συγκεκριμένη γραμμή, αποθηκεύτηκαν σε αρχεία dat, μέσω της

εξίσωσης SaveLine του Elmer, τα οποία εισήχθησαν στο Microsoft Excel, για να παραχθούν τα κοινά διαγράμματα.

Το πλήθος των στοιχείων του πλέγματος ήταν στο Elmer 50~80.000 για Reynolds 10 και 20, ενώ κατασκευάστηκε πυκνότερο πλέγμα 150.000 στοιχείων για τις προσομοιώσεις σε Reynolds 50. Στο Comsol, όλες οι προσομοιώσεις έγιναν σε πλέγμα 190.000 στοιχείων.

Στο Elmer χρησιμοποιήθηκαν P1/P1 στοιχεία για την επίλυση των Navier-Stokes (γραμμικές συναρτήσεις βάσεις για την περιγραφή ταχύτητας και πίεσης) και εφαρμόστηκε η μέθοδος σταθεροποίησης Galerkin Least Squares (GLS). (Καλλιάς Γ., 2023)

Στο Comsol, επίσης αξιοποιήθηκαν P1/P1 στοιχεία για την επίλυση των Navier-Stokes, αλλά εφαρμόστηκε η μέθοδος σταθεροποίησης Streamline and Crosswind Diffusion.

Διαπιστώθηκε ότι, κατά την αύξηση του αριθμού Reynolds της ροής, υπήρχε αυξανόμενη απόκλιση στο προφίλ συγκέντρωσης μεταξύ των αποτελεσμάτων Elmer και Comsol. Το σφάλμα αυτό, μπορεί να αποδοθεί στην διαφορετική τεχνική σταθεροποίησης του συναγωγικού όρου από τα δύο λογισμικά.

4.3.1: Σύγκριση αποτελεσμάτων Elmer και Comsol

Θα παρουσιαστούν κατά σειρά, συγκριτικά αποτελέσματα για το κατακόρυφο προφίλ συγκέντρωσης στη θέση x=0.5m, στο επίπεδο συμμετρίας, για αριθμούς Reynolds 10, 20 και 50, στα Διαγράμματα 5, 6 και 7, αντίστοιχα. Πριν από κάθε διάγραμμα, θα δίνεται στον αναγνώστη το αντίστοιχο προφίλ συγκέντρωσης στην επιφάνεια συμμετρίας (Εικόνες 8, 9, 10). Με αυτόν τον τρόπο, ο ανανγώστης αντιλαμβάνεται την κατάσταση της ροής σε κάθε μία από τις 3 περιπτώσεις, ώστε να κατανοήσει καλύτερα το περιεχόμενο των διαγραμμάτων που ακολουθούν.

Για τα προφίλ στην επιφάνεια συμμετρίας, έχει επιλεχθεί για λόγους τυπικότητας, να δίνεται το αποτέλεσμα της προσομοίωσης με γωνία 30°. Η επιλογή της συγκεκριμένης γωνίας, δεν έχει ξεχωριστή σημασία, αφού, όπως προκύπτει από τα διαγράμματα, η γωνία απόρριψης ελάχιστα επηρεάζει το κατακόρυφο προφίλ συγκέντρωσης, στις συνθήκες στρωτής ροής.



Εικόνα 8: Προφίλ συγκέντρωσης στην επιφάνεια συμμμετρίας. Προσομοίωση με Reynolds 10, γωνία 30 μοιρών, beta=1e-10. (Paraview)

Στην προσομοίωση με Reynolds 10, beta=1e-10, το πλούμιο προσκρούει στο έδαφος, περίπου στο μέσον του χωρίου (Εικόνα 8). Συνεπώς, αναμένεται για το κατακόρυφο προφίλ συγκέντρωσης στο μέσο του χωρίου, η συγκέντρωση να λαμβάνει τις μεγαλύτερες τιμές της κοντά στο τοίχωμα. Από το Διάγραμμα 5 γίνεται αντιληπτό, ότι η γωνία απόρριψης δεν διαδραματίζει ιδιαίτερο ρόλο στο προφίλ της συγκέντρωσης στις συγκεκριμένες συνθήκες. Όμως, εύκολα διαπιστώνεται ότι τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων του Elmer διαφέρουν σε σχέση με αυτά του Comsol, καθώς το Elmer δίνει εμφανώς μεγαλύτερες τιμές συγκέντρωσης στο κέντρο του πλουμίου, κατά περίπου 20%.



Διάγραμμα 5: Σύγκριση κατακόρυφων προφίλ συγκέντρωσης από Elmer (συνεχείς γραμμές) και COMSOL (Διακεκομμένες γραμμές) για Reynolds 10

Διερευνώντας το φαινόμενο περαιτέρω, στην Εικόνα 9 δίνονται τα αποτελέσματα συγκέντρωσης για Reynolds 20 και beta=1e-10. Παρατηρούμε, ότι η ταχύτητα έχει διπλασιαστεί, ενώ η δύναμη της άνωσης του πλουμίου παραμένει ίδια. Όπως είναι αναμενόμενο, το πλούμιο ταξιδεύει μεγαλύτερη απόσταση προτού προσκρούσει στον πυθμένα.

Τα προφίλ συγκέντρωσης στην θέση x=0.5m παρουσιάζουν μέγιστες τιμές περίπου στο μέσο του ύψους του χωρίου, όπως φαίνεται στο Διάγραμμα 6. Παράλληλα, γίνεται αντιληπτό, πως το σφάλμα του Elmer στον υπολογισμό της συγκέντρωσης στο κέντρο του πλουμίου έχει μεγαλώσει, καθώς οι διαφορές συγκέντρωσης κυμαίνονται στο 35 με 40%. Επιπλέον, η συγκέντρωση στο Elmer φτάνει σε τιμές μεγαλύτερες της μονάδας στο κέντρο του πλουμίου. Συνεπώς, είναι ένα πιθανό ενδεχόμενο η γέννεση και μετάδοση κάποιου είδους αριθμητικού σφάλματος στο πεδίο συγκέντρωσης, λόγω της αριθμητικής μεθόδου επίλυσης του Elmer.



Εικόνα 9: Προφίλ συγκέντρωσης στην επιφάνεια συμμμετρίας. Προσομοίωση με Reynolds 20, γωνία 30 μοιρών, beta=1e-10. (Paraview)



Διάγραμμα 6: Σύγκριση κατακόρυφων προφίλ συγκέντρωσης από Elmer (συνεχείς γραμμές) και COMSOL (Διακεκομμένες γραμμές) για Reynolds 20

Οι παραπάνω υποψίες ενισχύονται, από τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων για ροή με Reynolds 50. Στο συγκεκριμένο παράδειγμα, η ταχύτητα έχει αυξηθεί, το ίδιο και η παράμετρος βάρους του πλουμίου, beta, προκειμένου το φαινόμενο να διαμορφώνεται

εντός του χωρίου επίλυσης, όπως συμβαίνει πράγματι, και αποτυπώνεται στην Εικόνα 10. Πλέον, φαίνεται από το χρωματισμό του πεδίου συγκέντρωσης, ότι είναι μεγαλύτερη η περιοχή της επιφάνειας όπου η συγκέντρωση λαμβάνει τιμές μεγαλύτερες του 1, αλλά και αρνητικές τιμές. Προφανώς, το αποτέλεσμα αυτό είναι μη φυσικό, και οφείλεται σε αριθμητικά σφάλματα από την μέθοδο επίλυσης. Με απλή παρατήρηση, διαπιστώνεται ότι η πηγή του σφάλματος, βρίσκεται στα όρια του συνόρου εισόδου του πίδακα. Το Διάγραμμα 7, απλώς επιβεβαιώνει τα προηγούμενα συμπεράσματα.



Εικόνα 10: Προφίλ συγκέντρωσης στην επιφάνεια συμμμετρίας. Προσομοίωση με Reynolds 50, γωνία 30 μοιρών, beta=3e-10. (Paraview)



Διάγραμμα 7: Σύγκριση κατακόρυφων προφίλ συγκέντρωσης από Elmer (συνεχείς γραμμές) και COMSOL (Διακεκομμένες γραμμές) για Reynolds 50.

Από την παραπάνω ανάλυση, διαπιστώθηκε ότι η τυπική μέθοδος διακριτοποίησης και αριθμητικής επίλυσης του Elmer, για την εξίσωσης μεταφοράς συγκέντρωσης, έχει αδυναμία στην σταθεροποίηση του συναγωγικού όρου. Αυτό, γίνεται αντιληπτό καθώς με αύξηση του αριθμού Reynolds της ροής, τα σφάλματα γίνονται εντονότερα.

Κεφάλαιο 5: Προσομοίωση πυκνού πίδακα υγρού σε συνθήκες Τυρβώδους Ροής

Στο παρόν κεφάλαιο, θα παρουσιαστεί η προσομοίωση του πυκνού πίδακα υγρού, σε τυρβώδεις συνθήκες ροής, ώστε να προσεγγίζονται οι ρεαλιστικές συνθήκες απόρριψης της άλμης. Για την μοντελοποίηση της επίδρασης των τυρβωδών διακυμάνσεων στη ροή, θα χρησιμοποιηθεί το μοντέλο k-ε. Επιλέχθηκαν οι ακόλουθες παράμετροι για το πρόβλημα:

- Ταχύτητα εκροής: u = 0.1 m/s
- Διάμετρος σωλήνα εκροής: D = 0.05m
- Αρχική διαφορά πυκνότητας, $beta = \rho_0 \rho_a = 0.25 \frac{kg}{m^3}$
- Ο αριθμός Froude του πίδακα θα είναι: $Fr_0 = \frac{u_0}{\sqrt{D*g*^{beta}/\rho_{\alpha}}} = 9.03$

Η απόπειρα ρεαλιστικής αποτύπωσης του φυσικού φαινομένου είναι χρήσιμη, όμως συνοδεύεται από αυξημένα υπολογιστικά κόστη. Στο πρόβλημα που επιλύθηκε στο Comsol και παρουσιάζεται στο παρόν κεφάλαιο, υπάρχουν, μεν, συνθήκες τυρβώδους ροής, όμως, δεν προσομοιώνονται οι ρεαλιστικές συνθήκες απόρριψης της άλμης³. Η αυξημένη ταχύτητα (~1m/s) στο ρεαλιστικό πρόβλημα, συνεπάγεται πολύ πιο ισχυρό συναγωγικό όρο και αυξημένο υπολογιστικό κόστος επίλυσης (απαιτήσεις για πυκνότερο Πλέγμα, περισσότερες επαναλήψεις για σύγκλιση του προβλήματος, πιο απαιτητική επίλυση της πρόσκρουσης του πλουμίου στο τοίχωμα του πυθμένα). Ο λόγος που δεν προσομοιώθηκαν οι ρεαλιστικές συνθήκες, και αντ'αυτού η προσομοίωση έγινε για χαμηλότερη ταχύτητα, u, και μικρότερες διαφορές πυκνότητας, beta, αφορά στην ανεπάρκεια των υπολογιστικών πόρων που ήταν διαθέσιμες για την εργασία.

Στην Ενότητα 5.3, αναλύονται οι προσπάθειες που έγιναν για την μοντελοποίηση της τυρβώδους ροής με το λογισμικό Elmer, και τους λόγους για τους οποίους ο συγκεκριμενος στόχος της εργασίας δεν επετεύχθη.

³ Η ακριβής «αναπαράσταση» της απορριπτόμενης άλμης, συνεπάγεται διαφορά πυκνότητας με το θαλασσινό νερό, beta, η οποία θα κυμαίνεται μεταξύ των τιμών $20 \sim 30 \frac{kg}{m^3}$. Για την αναπαράσταση του φαινομένου στο ίδιο χωρίο επίλυσης, διατηρώντας σταθερή διάμετρο, D, και αριθμό Froude, θα απαιτούνταν ταχύτητα απόρριψης της τάξης του 1m/s.

5.1: Μαθηματική διατύπωση προβλήματος

Το σύστημα περιγράφεται μαθηματικά από τις εξισώσεις RANS,

$$\frac{\partial U_x}{\partial t} + \nabla * (U_x \boldsymbol{U}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + (\nu + \nu_t) \nabla^2 U_x, \qquad (5.1)$$

$$\frac{\partial U_y}{\partial t} + \nabla * \left(U_y \boldsymbol{U} \right) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + (\nu + \nu_t) \nabla^2 U_y, \qquad (5.2)$$

$$\frac{\partial U_z}{\partial t} + \nabla * (U_z \boldsymbol{U}) = -g * \frac{\rho - \rho_\alpha}{\rho_\alpha} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + (\nu + \nu_t) \nabla^2 U_z, \qquad (5.3)$$

$$\nabla * \boldsymbol{U} = \boldsymbol{0}, \tag{5.4}$$

όπου $\nu_t,$ το κινητικό ιξώδες τύρ
βης, δίνεται από την σχέση

$$\nu_T = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} . \tag{5.5}$$

Οι παράμετροι τύρβης k, ε, περιγράφονται από τις εξισώσεις

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \nabla * (k\boldsymbol{U}) = \nabla * \left(\frac{\nu_{eff}}{\sigma_k} \nabla k\right) - \varepsilon + 2\nu_T \sum_{ij} (S_{ij}S_{ij}), \qquad (5.6)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \nabla * (\varepsilon \boldsymbol{U}) = \nabla * \left(\frac{\nu_{eff}}{\sigma_{\varepsilon}} \nabla k\right) - C_{2\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k} + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} 2\nu_T \sum_{ij} \left(S_{ij} S_{ij}\right).$$
(5.7)

Ο όρος σωματικής δύναμης⁴ στην εξίσωση z-ορμής, μπορεί να παρασταθεί στο Comsol με βάση την εξίσωση 4.8 ως $-\frac{g*beta*C}{\rho_a}$, οπότε η 5.3 θα γίνει

$$\frac{\partial U_z}{\partial t} + \nabla * (U_z \boldsymbol{U}) = -\frac{g * beta * C}{\rho_a} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + (\nu + \nu_t) \nabla^2 U_z.$$
(5.8)

Το πεδίο συγκέντρωσης περιγράφεται από την εξίσωση

$$\nabla * (c\boldsymbol{u}) = D_T \nabla^2 \mathbf{c}, \tag{5.9}$$

όπου $D_T = \frac{v_T}{sc_T}$ ο συντελεστής διάχυσης λόγω τύρβης, που είναι κατά τάξεις μεγέθους μεγαλύτερος από τον συντελεστή μοριακού ιξώδους, D_a .

Συνολικά, το φυσικό φαινόμενο περιγράφεται από 7 μερικές διαφορικές εξισώσεις, οι οποίες είναι χωρισμένες σε 3 συστήματα (4 εξισώσεις RANS, 2 εξισώσεις k-ε, 1 εξίσωση συγκέντρωσης).

⁴ Ο λόγος που χρησιμοποιείται διαφορετικός ορισμός της δύναμης άνωσης, και του όρου beta, στο παρόν Κεφάλαιο, σε σχέση με το Κεφάλαιο 4, είναι η διαφορετική μοντελοποίηση του όρου της δύναμης στην εξίσωση Navier Stokes, από τα λογισμικά Elmer και Comsol. Στο Elmer ορίζεται η δύναμη ανά μονάδα μάζας (Body Force), ενώ στο Comsol ορίζεται η δύναμη ανά μονάδα όγκου (Volume Force). Η συγκεκριμένη αλλαγή είναι διεκπαιρεωτικού χαρακτήρα, αλλά διευκρινίζεται για την αποφυγή παρερμηνειών από τον αναγνώστη.

5.2: Προσομοίωση με το λογισμικό Comsol

Θα προσομοιωθεί ο πυκνός πίδακας που εκτοξεύεται υπό γωνία 45°, για αυτό και θα διαμορφωθεί κατάλληλα η ελλειπτική οπή για την είσοδο του ρύπου.

Τα χαρακτηριστικά του χωρίου επίλυσης, είναι παρόμοια με το ορθογώνιο παραλληλεπίπεδο του Κεφαλαίου 4, και θα παρουσιαστούν παρακάτω.

Είναι επιθυμητό, τα σύνορα του χωρίου (Πάνω επίπεδο z, Πλάγιο επίπεδο y, Επίπεδο x Εκροής), να είναι όσο το δυνατόν απομακρυσμένα από τα σημεία ενδιαφέροντος της ροής. Δηλαδή, το φαινόμενο της ανύψωσης του πλουμίου, και της πρόσκρουσης στο βυθό, να έχει αναπτυχθεί πλήρως, εντός των ορίων του χωρίου επίλυσης.

Όμως, όσο εκτενέστερο είναι το υπολογιστικό χωρίο, τόσο αυξάνεται ραγδαία το υπολογιστικό κόστος της επίλυσης. Επομένως, θα επιλεχθούν σύνορα τέτοια, ώστε να εγκολπώνουν το φαινόμενο, χωρίς όμως να εκτοξεύουν το υπολογιστικό κόστος. Για τον ίδιο λόγο, το πλέγμα θα είναι πυκνό στην είσοδο του ρύπου, στο τοίχωμα και στο επίπεδο συμμετρίας, και θα αραιώνει στον κύριο όγκο του χωρίου.

Για την ορθή επιλογή των διαστάσεων, έτσι ώστε, αφενός, να μην «περιορίζεται» φαινόμενο προς διερεύνηση, και αφετέρου περιορίζεται, κατά το δυνατόν το υπολογιστικό κόστος, χρησιμοποιούνται οι «αναμενόμενες» αποστάσεις ανύψωσης και πρόσκρουσης του πλουμίου, με βάση τα πειραματικά δεδομένα.

Για πυκνό πλούμιο, που εκτοξεύεται με γωνία 45°, από την βιβλιογραφία (Kheirkhah Gildeh, 2013) δίνονται οι αναμενόμενες τιμές:

Μέγιστο ύψος ανύψωσης (terminal rise height):

$$y_t \approx 1.6 * D * Fr, \tag{5.10}$$

Οριζόντια απόσταση πρόσκρουσης στο επίπεδο εκροής:

$$x_r \approx 3.3 * D * Fr, \tag{5.11}$$

Μέγιστη ανύψωση της κεντρικής γραμμής του πλουμίου:

$$y_p \approx 1.1 * D * Fr, \tag{5.12}$$

Οριζόντια απόσταση εμφάνισης της μέγιστης ανύψωση της κεντρικής γραμμής

$$x_p \approx 1.8 * D * Fr. \tag{5.13}$$

Για τιμές u = 0.1m/s, $beta = 0.25 \frac{kg}{m^3}$, και διάμετρο εισόδου D = 0.05m, οι παραπάνω τιμές διαμορφώνονται σε $y_t \approx 0.5$ και $x_r \approx 1.5$.

Οι διαστάσεις ύψους και μήκους του χωρίου, επιλέγονται ως εξής:

Ύψος χωρίου: H = 1.2m.

Μήκος χωρίου: L = 2m.

Πλάτος χωρίου: $W = H_3 = 0.4m$, καθώς αναμένεται μικρότερη εγκάρσια διασπορά του πλουμίου προς το πλάι.

5.2.1: Επιλογή Παραμέτρων

Στο Πίνακα 2, δίνονται συνοπτικά οι παράμετροι που επιλέχθηκαν για την ανάπτυξη της προσομοίωσης στο Comsol.

11000	2. $2.$ $3.$ $3.$ $3.$ $3.$ $3.$ $3.$ $3.$ 3		is no to compot.		
Name	Expression	Value Description			
L	2 [m]	2 m	Domain Length		
н	1.2 [m]	1.2 m	Domain Height		
W	0.4 [m]	0.4 m	Domain Width		
theta	pi/4 [rad]	0.7854 rad	jet angle		
u_in	0.1[m/s]	0.1 m/s	inlet velocity		
z_inlet	0.3 [m]	0.3 m	Inlet Height		
Diameter	0.05[m]	0.05 m	inlet diameter		
beta	0.25[N/mol]	0.25 kg·m/(s²·mol)	Buoyancy Force Coeff		
Re	L*u_in*1e6 [s/m^2]	2E5	***Reynolds Number***		
g	9.81 [m/s^2]	9.81 m/s²	Gravitational Accel		
g_0	g*beta/1000	0.0024525 kg·m²/(s ⁴ ·mol)	Modified init Grav. Accel		
Q_in	u_in*pi*Diameter^2/4	1.9635E-4 m³/s	Volume Flux		
М	Q_in*u_in	1.9635E-5 m ⁴ /s ²	Momentum Flux		
В	Q_in*g*beta/1000	4.8155E-7 kg·m⁵/(s⁵·mol)	Buoyancy Flux		
L_m	(M^(3/4))/(B^(1/2))	0.42506	Momentum Length Scale		
L_q	Q_in/(M^(1/2))	0.044311 m	Source Length Scale		
Lq_Lm_rat	Lg/Lm	0.10425	Source to Momentum Ratio		
Lm_Lq_rat	L_m/L_q*0.94	9.0171	Momentum to Source Ratio		
Froude	u_in/sqrt(g_0*Diameter)	9.0305	***Froude Number***		
u_sea	u_in/20	0.005 m/s			
Re_sea	u_sea*1e6 [s/m]	5000			
Q_sea	u_sea*H*W	0.0024 m³/s			
k_in	3/2*(0.05*u_in)^2	3.75E-5 m²/s²			
ep_in	0.09^(3/4)*k_in^(3/2)/0.07/Diameter	1.0781E-5 m²/s³			
nt_in	0.09*k_in^2/ep_in	1.1739E-5 m²/s			
k_sea	3/2*(0.01*u_sea)^2	3.75E-9 m²/s²			
ep_sea	0.09^(3/4)*k_sea^(3/2)/0.01[m]	3.7734E-12 m²/s³			
nt_sea	0.09*k_sea^2/ep_sea	3.3541E-7 m²/s			

Πίνακας 2: Οι παράμετροι της προσομοίωσης τυρβώδους ροής με το Comsol.

Στο Πίνακα 3, παρουσιάζονται οι προσομοιώσεις που πραγματοποιήθηκαν. Για κάθε περίπτωση, υπολογίζονται τα αποτελέσματα της διαστατικής ανάλυσης, τα αναμενόμενα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του πλουμίου, όπως και οι χρόνοι επίλυσης. Επιχειρήθηκε να γίνει η προσομοίωση με σταδιακή αύξηση της παραμέτρου βάρους του πλουμίου, beta. Η συγκεκριμένη μέθοδος εφαρμόζεται συχνά, για την σταδιακή επίτευξη σύγκλισης σε δύσκολα προβλήματα, όπου ένα φορτίο αυξάνεται σταδιακά, με τους υπολογισμούς να αρχικοποιούνται με βάση τα αποτελέσματα του προηγούμενου βήματος.

Στο συγκεκριμένο πρόβλημα, η μέθοδος σταδιακής αύξησης φορτίου αποτυγχάνει, καθώς στα επίπεδα βάρους στα οποία, το πλούμιο «κατεβαίνει», και προσεγγίζει το όριο του τοιχώματος, υπάρχουν έντονα φαινόμενα αστάθειας.

Γρηγορότερα αποτελέσματα επετεύχθησαν, όταν επιχειρήθηκε απευθείας η επίλυση με την επιθυμητή τιμή φορτίου, beta=0.25.

L [m]	2	2	2	2	2	2		
H [m]	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2		
W [m]	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,4		
Diameter [m]	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05		
theta [degrees]	45	45	45	45	45	45		
u_in [m/s]	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1		
beta	0,04	0,06	0,08	0,1	0,12	0,25		
Reynolds	200000	200000	200000	200000	200000	200000		
Q_in [m3/s]	0,00019635	0,000196	0,000196	0,000196	0,000196	0,000196		
u_sea [m/s]	0,002	0,002	0,002	0,002	0,002	0,005		
Q_sea [m3/s]	0,00144	0,00144	0,00144	0,00144	0,00144	0,0024		
Segregated Solver Iterations	92	28	45	32	did not	149		
					converge			
Dimensional Analysis								
M [m4/s2]	1,963E-05	1,963E-05	1,963E-05	1,963E-05	1,963E-05	1,963E-05		
B [m4/s3]	7,705E-08	1,156E-07	1,541E-07	1,926E-07	2,311E-07	4,815E-07		
L_M [m]	1,063	0,868	0,751	0,672	0,614	0,425		
L_Q [m]	0,044	0,044	0,044	0,044	0,044	0,044		
L_Q/L_M	0,042	0,051	0,059	0,066	0,072	0,104		
L_M/L_Q	23,982	19,581	16,958	15,167	13,846	9,593		
Froude_0	22,543	18,406	15,940	14,257	13,015	9,017		
Y_terminal (45 degrees)	1,240	1,012	0,877	0,784	0,716	0,496		
X_impact (45 degrees)	3,720	3,037	2,630	2,352	2,147	1,488		

Πίνακας 3: Καταγραφή των προσομοιώσεων αυζανόμενου βάρους beta, με τα αναμενόμενα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του πλουμίου.

5.2.2: Σύγκριση αποτελεσμάτων με πειραματικές μετρήσεις

Η Εικόνα 11, αποτυπώνει το προφίλ συγκέντρωσης του πλουμίου στο επίπεδο συμμετρίας, προσφέροντας στον αναγνώστη, μία καλή εικόνα για τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του.



Εικόνα 11: Προφίλ συγκέντρωσης στην επιφάνεια συμμετρίας (Comsol)

Στο Διάγραμμα 8, παρουσιάζεται η συγκέντρωση στο ύψος απόρριψης (z=0.3m), το μέγιστο εντοπίζεται σε απόσταση x=1.6m. Δηλαδή, το πλούμιο, με βάση την προσομοίωση, κατέρχεται στο επίπεδο απόρριψης, σε οριζόντια απόσταση 1.6m, όταν αναμενόμενη τιμή με βάση την εξίσωση 5.11 είναι τα 1.49m.



Διάγραμμα 8: Οριζόντια κατανομή συγκέντρωσης στο ύψος απόρριψης z=0.3m

Αντίστοιχα, λαμβάνοντας κατακόρυφα προφίλ της συγκέντρωσης κοντά στην περιοχή που διακρίνεται οπτικά η μέγιστη ανύψωση του πλουμίου, αυτή προσδιορίζεται στην οριζόντια απόσταση 0.77m από την είσοδο. Το κατακόρυφο προφίλ της συγκέντρωσης στην θέση x=0.77m φαίνεται στο Διάγραμμα 9, από όπου διαπιστώνεται, ότι το μέγιστο ύψος της κεντρικής γραμμής του πλουμίου βρίσκεται στο σημείο (0.77m, 0.7m).

Δηλαδή η μέγιστη ανύψωση της κεντρικής γραμμής του πλουμίου είναι $y_p = 0.7 - 0.3 = 0.4m$, όταν από την εξίσωση 5.12, αναμένεται η τιμή 0.49m.

Την ίδια στιγμή η οριζόντια απόσταση της μέγιστης ανύψωσης υπολογίζεται στο $x_p = 0.77m$, όταν από την εξίσωση 5.13 αναμένεται η τιμή 0.81m.



Διάγραμμα 9: Κατακόρυφο προφίλ συγκέντρωσης σε απόσταση x=0.77m

Οι παραπάνω διαφορές των γεωμετρικών χαρακτηριστικών του πλουμίου που προσομοιώθηκε, σε σχέση με τις αναμενόμενες εμπειρικές τιμές με βάση την διαστατική ανάλυση, ενδέχεται να οφείλονται:

- στο μικρό υπολογιστικό χωρίο, το ανώτερο σύνορο του οποίου περιορίζει την ανάπτυξη του πλουμίου προς τα πάνω. Έτσι εξηγείται εν μέρει η σημαντικά μικρότερη τιμή για τοy_p.
- στο θαλάσσιο ρεύμα το οποίο προστέθηκε στις συνθήκες της ροής, και το οποίο αυξάνει κατά έναν μικρό βαθμό την οριζόντια απόσταση πρόσκρουσης.
- στο υπολογιστικό πλέγμα που χρησιμοποιήθηκε. Ειδικότερα, οι ραγδαίες
 μεταβολές των πεδίων στα όρια του πίδακα απαιτούν πολύ μικρό υπολογιστικό
 χωρίο για να περιγραφούν ορθά.
- στα εγγενή χαρακτηριστικά και αδυναμίες του μοντέλου k-ε.

Ταυτόχρονα, ο βαθμός αραίωσης στο σημείο πρόσκρουσης του πλουμίου (στο οριζόντιο επίπεδο z=0.3m), υπολογίζεται από την συγκέντρωση $C_r \approx 0.14$ στην κεντρική γραμμή του πλουμίου. Οπότε, ο βαθμός αραίωσης θα είναι

$$S_r = \frac{1}{C_r} \approx 7.1 \,. \tag{5.14}$$

Από την βιβλιογραφία, αναμενόμενη τιμή αραίωσης στο σημείο πρόσκρουσης, για πίδακα γωνίας 45°, είναι

$$S_r = 1.6 * Fr \approx 14.4$$
. (5.15)

Ο υπολογισμός για την αραίωση φαίνεται εσφαλμένος, αλλά από την βιβλιογραφία προκύπτει οτι τα μοντέλα RANS και ειδικά οι εξισώσεις της οικογένειας k-ε, υποτιμούν

σημαντικά την αραίωση του πλουμίου (Kheirkhah Gildeh, 2013). Συνεπώς, το σφάλμα αυτό είναι αναμενόμενο και εγγενές στο μοντέλο τύρβης που χρησιμοποιήθηκε.

5.3: Η απόπειρα μοντελοποίησης της τυρβώδους ροής με το Elmer

Η προσομοίωση της τυρβώδους ροής με το λογισμικό Elmer δεν κατέστη δυνατή στο χρονικό πλαίσιο της παρούσας διπλωματικής εργασίας. Έγιναν πολλές προσπάθειες, δοκιμάστηκαν διάφορες διατάξεις του προβλήματος. Επιχειρήθηκε η επίλυση του πίδακα (jet) σε δύο διαστάσεις, αρχικά, αλλά η σύγκλιση του συστήματος δεν ήταν εφικτή. Η απάντηση για την απουσία σύγκλισης αναζητήθηκε στη θεωρία, στα εγχειρίδια της τύρβης, στην εφαρμογή των οριακών συνθηκών, στις προχωρημένες τεχνικές υλοποίησης του μοντέλου k-ε σε υπολογιστικό κώδικα. Όμως, μπορούμε να καταλήξουμε με σχετική ασφάλεια ότι οι λόγοι που ο συγκεκριμένος στόχος δεν κατέστη εφικτός οφείλονται στα παρακάτω:

- (1) Έλλειψη τεκμηρίωσης για τον κώδικα του μοντέλου k-ε. Δηλαδή, λείπουν από τον χρήστη βασικές πληροφορίες, όπως, τα κατάλληλα Keywords για την ρύθμιση των παραμέτρων επίλυσης του μοντέλου στο SIF, αλλά και η επεξήγηση της ακριβούς μεθόδου υλοποίησης του μοντέλου k-ε στον συγκεκριμένο υπολογιστικό κώδικα.
- (2) Έλλειψη ικανών παραδειγμάτων μοντελοποίησης τυρβώδους ροής στο Elmer. Το μοναδικό παράδειγμα που προσφέρεται από τα έγγραφα του Elmer είναι το Backstep σε 2D (Poή σε κανάλι με απότομη αύξηση διατομής). Όπως είναι κατανοητό, το πρόβλημα αυτό είναι ένα πολύ απλό παράδειγμα τυρβώδους ροής, ελάχιστης υπολογιστικής δυσκολίας σε σχέση με το διερευνώμενο πρόβλημα. Είναι ενδεικτικό, ότι με σχετική έρευνα στο διαδίκτυο και στα φόρουμ, βρέθηκαν ελάχιστα παραδείγματα εφαρμογών του κώδικα k-ε του Elmer από χρήστες του λογισμικού, σίγουρα πολύ λιγότερα από τις διαδικτυακές απορίες σχετικά με την εφαρμογή του συγκεκριμένου κώδικα.
- (3) Οι ίδιοι οι developers παραδέχονται ότι δεν αποτελεί προτεραιότητα η ανάπτυξη του κώδικα της τύρβης, και πως τα συγκεκριμένα κομμάτια του λογισμικού δεν είναι πλήρως εύρωστα⁵. Ο κώδικας για το k-ε και τα υπόλοιπα τυρβώδη μοντέλα, έχει αναπτυχθεί εδώ και δεκαετίες, αλλά παραμένει στάσιμος. Η ανάπτυξη και υποστήριξη του λογισμικού, κατευθύνεται σε άλλες εφαρμογές.

⁵ "They have been in principle verified but they are not terribly robust", διαδικτυακό σχόλιο του Peter Raback (Developer του Elmer) σχετικά με το κώδικα για τα μοντέλα τύρβης (23 Μαρτίου 2021)

- (4) Το πρόβλημα του πίδακα (jet), αποτελεί έναν επιπλέον παράγοντα δυσκολίας. Καθώς, πολύ σημαντικές μεταβολές των μεταβλητών του πεδίου ροης, πραγματοποιούνται σε ένα λεπτό στρώμα ρευστού στα όρια του πίδακα. Το συγκεκριμένο λεπτό στρώμα, απαιτεί πλέγμα πολύ μικρού μεγέθους προκειμένου να περιγραφεί σωστά. Όμως, η θέση του στρώματος στο χωρίο δεν είναι εκ των προτέρων γνωστή, μόνο κατά προσέγγιση.
- (5) Οι υπολογιστικοί πόροι που ήταν διαθέσιμοι για την εργασία ήταν περιορισμένοι. Κατά συνέπεια: (α) πολλά εργαλεία ανάλυσης, ήταν αδύνατο να αξιοποιηθούν (π.χ. η σημαντική πύκνωση του πλέγματος προκειμένου να βρεθεί συγκλίνουσα λύση, είτε η χρονικά μεταβαλλόμενη ανάλυση του προβλήματος με σκοπό τον προσδιορισμό της γέννησης των ασταθειών), και (β) ακόμα και η διερεύνηση φαινομένων σε αραιό πλέγμα, ή σε 2 διαστάσεις (όπως η επίδραση της θέσης των συνόρων, επιβολή διαφορετικών συνοριακών συνθηκών, αξιοποίηση διαφορετικών τεχνικών επίλυσης) είχε σημαντικό χρονικό αντίκτυπο.

Συνεπώς, επιχειρήθηκε να λυθεί ένα αριθμητικά απαιτητικό πρόβλημα, με χρήση ενός κώδικα μη επιβεβαιωμένων δυνατοτήτων (για εφαρμογές πέρα από τις στοιχειώδεις), του οποίου οι επιλογές ρύθμισης δεν ήταν γνωστές, με περιορισμένους υπολογιστικούς πόρους, ως μέρος μιας διπλωματικής εργασίας.

Με βάση τα παραπάνω, το πείραμα αυτό δεν κρίνεται ως αποτυχημένο, καθώς μπορεί να μην προέκυψε η επιθυμητή προσομοίωση, όμως κατά την διάρκεια του έδωσε το έναυσμα για μελέτη, για προβληματισμό, για αναζήτηση και αξιοποίηση κάθε πιθανής πηγής που μπορούσε να δώσει κάποια χρήσιμη πληροφορία σχετικά με το πρόβλημα. Εν τέλει οδήγησε στην απόκτηση πολλών χρήσιμων γνώσεων, στον κλάδο της υπολογιστικής ρευστομηχανικής (CFD).

Κεφάλαιο 6: Συμπεράσματα και προτάσεις

6.1: Στόχοι και στοιχεία πρωτοτυπίας

Στόχος της παρούσας εργασίας, ήταν η αξιοποίηση ενός ανοικτού λογισμικου, για την επίλυση ενός ρεαλιστικού, πολύπλοκου προβλήματος της διασποράς ρύπων. Επομένως, οι στόχοι και τα καινοτόμα στοιχεία της εργασίας, είναι προς δύο κατευθύνσεις.

Πρώτα, στόχοι εκπαιδευτικοί, για την περαιτέρω διερεύνηση και αξιοποίηση του ανοικτού λογισμικού Elmer, την γνωριμία της Σχολής Χημικών Μηχανικών με αυτό, αρχικά στα πλαίσια διπλωματικών εργασιών. Η εκπόνηση της διπλωματικής εργασίας συνέβαλλε σε αυτό, δίνοντας πληροφορίες για το κατά πόσο μπορεί να ενταχθεί το συγκεκριμένο εργαλείο στην εκπαιδευτική διαδικασία, και να χρησιμοποιηθεί από φοιτητές που δεν θα έχουν απαραίτητα γνώση της Μεθόδου Πεπερασμένων Στοιχείων, ή γενικά καλή γνώση υπολογιστικών μεθόδων.

Δεύτερον, ήταν στόχοι ερευνητικοί, καθώς αφορούσε την επίλυση ενός ρεαλιστικού προβλήματος με το συγκεκριμένο λογισμικό. Όμως, πρωτοτυπία δεν αποτελεί η καθ'αυτή λύση του προβλήματος, αφού η χρήση τυρβωδών μοντέλων για την προσομοίωση του πυκνού πίδακα ρευστού έχει πραγματοποιηθεί διεξοδικά από ουκ ολίγους ερευνητές τα τελευταία 15 χρόνια. Αντίθετα, η χρήση του λογισμικού Elmer για την επίλυση ενός τόσο απαιτητικού προβλήματος θα ήταν όντως καινοτόμα.

Η εργασία κρίνεται επιτυχής ως προς τον πρώτο στόχο, καθώς η τριβή με το λογισμικό, σε διαφορετικά επίπεδα θεωρητικού υποβάθρου, παρέχει πράγματι, σημαντικές πληροφορίες. Για λόγους που περιγράφηκαν στην προηγούμενη ενότητα, ο δέυτερος στόχος δεν κατέστη εφικτός.

6.2: Σχετικά με το λογισμικό Elmer

Το Elmer, ως ανοικτό λογισμικό, απευθύνεται κατά πρώτο λόγο σε έμπειρους χρήστες, που είναι εξοικειωμένοι με την μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων και τις μεθόδους ανάλυσης CFD. Υπάρχει ελάχιστο υλικό στο διαδίκτυο, το οποίο να μπορεί να εισάγει τον νέο χρήστη, από την προσομοίωση των πολύ στοιχειωδών παραδειγμάτων με το Elmer (πχ: Backstep), σε σταδιακά πολυπλοκότερα προβλήματα. Αυτή η έλλειψη, είναι απαραίτητο να καλυφθεί με την εμπειρία του χρήστη από άλλα εμπορικά λογισμικά CFD, όπως αξιοποιήθηκε το Comsol, στην συγκεκριμένη εργασία. Το σενάριο, ένας «στοχοπροσηλωμένος» ερευνητής να μελετήσει διεξοδικά τα Έγγραφα του Elmer, και χωρίς πρότερη εμπειρία CFD να αποκτήσει την ευχέρεια, ώστε να λύνει δύσκολα προβλήματα με το Elmer, όπως το πρόβλημα που αναπτύχθηκε στην εργασία, κρίνεται πολύ δύσκολο να επιτευχθεί.

Επιπλέον, σε αντίθεση με τα εμπορικα λογισμικά, όπου η λεπτομερής διαδικασία σύζευξης συστημάτων είναι έτοιμη και χρησιμοποιείται αυτόματα κατά περίπτωση στις αντίστοιχες «διεπιφάνειες» των μοντέλων, στο Elmer όλη η διαδικασία επίλυσης εξαρτάται από τις γνώσεις και την διαίσθηση του χρήστη. Συνεπώς, ένας έμπειρος χρήστης, γνώστης των προχωρημένων τενχικών διακριτοποίησης, σταθεροποίησης κ.τ.λ. μπορεί, πράγματι, να αξιοποιήσει στο έπακρο τις δυνατότητες του λογισμικού. Αντίθετα, ένας λιγότερο έμπειρος χρήστης, είτε περιστασιακός χρήστης των εμπορικών λογισμικών θα αντιμετωπίσει μεγάλες δυσκολίες.

Επιπλέον, εντοπίζονται οι ελλείψεις που αναφέρθηκαν προηγουμένως, όσον αφορά τα Έγγραφα Τεκμηρίωσης (Documentation) του Elmer. Τα έγγραφα είναι σε μεγάλο βαθμό ικανοποιητικά, όσον αφορά την επεξήγηση των βασικών αριθμητικών εργαλείων και δυνατοτήτων του λογισμικού. Όμως, δεν υπήρχε σχεδόν καμία αναφορά στην εφαρμογή των μοντέλων τύρβης, και γενικότερα αργούν να ενσωματωθούν στα έγγραφα οι νέες δυνατότητες του λογισμικού.

Τέλος, το πιο σημαντικό θέμα, ως αποτέλεσμα των παραπάνω, είναι το εξής: σε ένα σενάριο που οι υπολογισμοί αποκλίνουν, είναι πολύ δύσκολο για τον μέσο χρήστη να διαπιστώσει ποιος παράγοντας ευθύνεται. Ευθύνεται ένας «κακός» αλγόριθμος επίλυσης; Ευθύνεται μία αφύσικη τοποθέτηση συνόρου (αφύσικη συνοριακή συνθήκη), ή μια αστάθεια οφειλόμενη σε «κακό» πλέγμα; Ευθύνεται μία ελλιπής ή λάθος γνώση του χρήστη όσον αφορά το διερευνώμενο φυσικό φαινόμενο;

Επισημαίνεται, ότι τα παραπάνω δεν κατατίθονται, προφανώς, ως νύξη στους developers του κώδικα. Το αντίθετο. Οι απαιτήσεις συνδυαστικών προχωρημένων γνώσεων από διαφορετικά πεδία (Μαθηματικά, Προγραμματισμός, διάφορες φυσικές), για να καταφέρουν να αναπτύξουν τον αλγόριθμο, τους καθιστούν άξιους θαυμασμού. Ακόμα, η διάθεση του συγκεκριμένου λογισμικού δωρεάν στην επιστημονική κοινότητα και η καθημερινή υποστήριξη των επίδοξων χρηστών CFD από την ερευνητική ομάδα στον διαδικτυακο τόπο του φόρουμ, αποτελεί παράδειγμα ανιδιοτελούς προσφοράς στην επιστήμη. Θα ήταν παράλογο να ζητηθούν από αυτούς περισσότερα.

Για αυτόν τον λόγο, είναι, που οι δυνατότητες και πρακτικές αδυναμίες του λογισμικού οφείλουν να αναδειχθούν, ώστε ο νέος επιστήμονας τις γνωρίζει, να μην φοβηθεί, αλλά να αγκαλιάσει το συγκεκριμένο εργαλείο. Άλλωστε, το πνεύμα του ανοικτού κώδικα είναι ακριβώς η διάδοση και ευρεία χρήση (προσφορά προς το κοινό), η οποία σε βάθος χρόνου

90

θα επιτρέψει στους καλύτερους να συνεισφέρουν πίσω στον κώδικα. Αυτό είναι το παράδειγμα που έχει κάνει τα εργαλεία ανοικτού λογισμικού κυρίαρχα σε άλλους κλάδους της επιστήμης (π.χ. Python).

Βλέποντας την πορεία της εργασίας εκ των υστέρων, θα ήταν συμβουλή στον νεότερο εαυτό η πιο συστηματική, οργανωμένη δουλειά, δίνοντας πρώτα βάση αυστηρά στην θεωρία, από τα Φαινόμενα Μεταφοράς, την λεπτομερή γνώση του τυρβώδους μοντέλου θα αξιοποιηθεί, μέχρι τις βασικές αρχές της Μεθόδου Πεπερασμένων Στοιχείων, αλλά και με έμφαση σε ορισμένα προχωρημένα θέματα ως προς τις αδυναμίες της και το πώς διορθώνονται. Η «τυφλή» απόπειρα μοντελοποίησης με το Elmer στα πρώτα στάδια της εργασίας, πέρα από το ότι δεν έφερε αποτελέσματα, ούτε δίδαξε ή έδωσε κάποια σημαντική εμπειρία. Αντίθετα, ήταν η γνώση λεπτομερών στοιχείων της θεωρίας και η μελέτη των εγγράφων, που αύξησε, τις δυνατότητες αξιοποίησης του λογισμικού.

6.3: Προτάσεις για μελλοντική έρευνα

Ως μελλοντική έρευνα, κρίνεται ως εύλογος ο στόχος της επιτυχούς διεκπεραίωσης προσομοίωσης του προβλήματος που διερευνήθηκε στη συγκεκριμένη εργασία, και η περαιτέρω διερεύνηση των δυνατοτήτων του λογισμικού Elmer και σε διαφορετικούς κλάδους φυσικής.

Ωστόσο, το ζητούμενο της περαιτέρω διερεύνησης της διασποράς άλμης, για πρακτικές εφαρμογές στην απόρριψη μονάδων στα ελληνικά νησιά, ενώ έχει περιβαλλοντικό και νομοθετικό ενδιαφέρον, δεν απευθύνεται τόσο στην μοντελοποίηση με CFD, όσο στην αξιοποίηση των αποτελεσμάτων των near-field CFD αναλύσεων, σε συνδυασμό με εμπειρική πρόβλεψη της πορείας του ρύπου σε μεγάλες αποστάσεις, με χρήση περιβαλλοντικών και ωκεανογραφικών μοντέλων.

Βιβλιογραφικές πηγές

- Bleninger, T., & Jirka, G. H. (2008). Modelling and environmentally sound management of brine discharges from desalination plants. *Desalination*, 221(1–3), 585–597. <u>https://doi.org/10.1016/J.DESAL.2007.02.059</u>
- Davidson, P. A. (2004). Turbulence: An Introduction for Scientists and Engineers (First Edition). OUP Oxford.
- Ferziger, J. H., Perić, M., & Street, R. L. (2020). Computational Methods for Fluid Dynamics. Springer International Publishing. <u>https://doi.org/10.1007/978-3-319-99693-6</u>
- Gildeh, Hossein Kheirkhah. (2013). Numerical Modeling of Thermal/Saline Discharges in Coastal Waters. Department of Civil Engineering, University of Ottawa, Canada.
- Greenshields, C. and Weller, H. (2022) Notes on Computational Fluid Dynamics: General Principles. CFD Direct Ltd, Reading, UK. <u>https://doc.cfd.direct/notes/cfd-generalprinciples/</u>
- Jones, E., Qadir, M., van Vliet, M. T. H., Smakhtin, V., & Kang, S. mu. (2019). The state of desalination and brine production: A global outlook. *Science of The Total Environment*, 657, 1343–1356. <u>https://doi.org/10.1016/J.SCITOTENV.2018.12.076</u>
- Kolmogorov, A.N. (1941) The Local Structure of Turbulence in Incompressible Viscous Fluid for Very Large Reynolds Numbers. Doklady Akademii Nauk SSSR, 30, 301-304. <u>https://www.jstor.org/stable/51980</u>
- Kuzmin, D., Mierka, O., & Turek, S. (2007). On the implementation of the κ-ε turbulence model in incompressible flow solvers based on a finite element discretisation. *International Journal of Computing Science and Mathematics*, 1(2/3/4), 193. <u>https://doi.org/10.1504/IJCSM.2007.016531</u>
- Panagopoulos, A., & Giannika, V. (2022). Decarbonized and circular brine management/valorization for water & valuable resource recovery via minimal/zero liquid discharge (MLD/ZLD) strategies. *Journal of Environmental Management*, 324, 116239. <u>https://doi.org/10.1016/J.JENVMAN.2022.116239</u>
- Panagopoulos, A., Haralambous, K. J., & Loizidou, M. (2019). Desalination brine disposal methods and treatment technologies - A review. *Science of The Total Environment*, 693, 133545. https://doi.org/10.1016/J.SCITOTENV.2019.07.351
- Paparella, F., D'Agostino, D., & A. Burt, J. (2022). Long-term, basin-scale salinity impacts from desalination in the Arabian/Persian Gulf. *Scientific Reports*, 12(1), 20549. <u>https://doi.org/10.1038/s41598-022-25167-5</u>

- Pistocchi, A., Bleninger, T., & Dorati, C. (2020). Screening the hurdles to sea disposal of desalination brine around the Mediterranean. *Desalination*, 491, 114570. https://doi.org/10.1016/J.DESAL.2020.114570
- Raback, P., & Malinen, M. (2023). Overview of Elmer. CSC-IT Centre for Science. Ανακτήθηκε από: https://research.csc.fi/web/elmer/documentation
- Raback, P., Malinen, M., Ruokolainen, J., Pursula, A., Zwinger, T., & Eds. (2023). Elmer Models Manual. CSC-IT Center for Science. Ακακτήθηκε από: https://research.csc.fi/web/elmer/documentation
- Reddy, J. N., & Gartling, D. K. (2010). The Finite Element Method in Heat Transfer and Fluid Dynamics. CRC Press. https://doi.org/10.1201/9781439882573
- Roberts, D. A., Johnston, E. L., & Knott, N. A. (2010). Impacts of desalination plant discharges on the marine environment: A critical review of published studies. *Water Research*, 44(18), 5117–5128. https://doi.org/10.1016/J.WATRES.2010.04.036
- Roberts, P. J. W., Adrian, F., & Greg, D. (1997). Mixing in Inclined Dense Jets. *Journal* of Hydraulic Engineering, 123(8), 693–699. <u>https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-</u> 9429(1997)123:8(693)
- Roberts, P.J.W. (2015). Near Field Flow Dynamics of Concentrate Discharges and Diffuser Design. In: Missimer, T., Jones, B., Maliva, R. (eds) Intakes and Outfalls for Seawater Reverse-Osmosis Desalination Facilities. Environmental Science and Engineering(). Springer, Cham. <u>https://doi.org/10.1007/978-3-319-13203-7_17</u>
- Ruokolainen, J., Malinen, M., Raback, P., Zwinger, T., Pursula, A., & Byckling, M. (2023). ElmerSolver Manual. CSC-IT Center for Science. Ανακτήθηκε από: https://research.csc.fi/web/elmer/documentation
- Schlichting, H. (1979) Boundary Layer Theory. 7th Edition, McGraw-Hill, New York
- UNESCO World Water Assessment Programme (2024). The United Nations World Water Development Report 2024: water for prosperity and peace (WWDR 2024). France. https://unesdoc.unesco.org/ark:/48223/pf0000388948

Versteeg, H.K. and Malalasekera, W. (2007) An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method (Second Edition). Pearson Education, Harlow.

Wilcox, David. (2006). Turbulence Modeling for CFD (Third Edition) D C W Industries

Xevgenos, D., Marcou, M., Louca, V., Avramidi, E., Ioannou, G., Argyrou, M., Stavrou, P., Mortou, M., & Küpper, F. C. (2021). Aspects of environmental impacts of seawater desalination: Cyprus as a case study. *Desalination and Water Treatment*, 211, 15–30. <u>https://doi.org/10.5004/dwt.2021.26916</u>

- Zienkiewicz, O. C., Taylor, R. L., & Nithiarasu, P. (2014a). Chapter 1 Introduction to the Equations of Fluid Dynamics and the Finite Element Approximation. In O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor, & P. Nithiarasu (Eds.), *The Finite Element Method for Fluid Dynamics (Seventh Edition)* (Seventh Edition, pp. 1–29). Butterworth-Heinemann. <u>https://doi.org/10.1016/B978-1-85617-635-4.00001-7</u>
- Zienkiewicz, O. C., Taylor, R. L., & Nithiarasu, P. (2014b). Chapter 2 Convection-Dominated Problems: Finite Element Approximations to the Convection-Diffusion-Reaction Equation. In O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor, & P. Nithiarasu (Eds.), *The Finite Element Method for Fluid Dynamics (Seventh Edition)* (Seventh Edition, pp. 31–85). Butterworth-Heinemann. <u>https://doi.org/10.1016/B978-1-85617-635-4.00002-9</u>
- Zienkiewicz, O. C., Taylor, R. L., & Nithiarasu, P. (2014c). Chapter 8 Turbulent Flows.
 In O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor, & P. Nithiarasu (Eds.), *The Finite Element Method for Fluid Dynamics (Seventh Edition)* (Seventh Edition, pp. 283–308).
 Butterworth-Heinemann. <u>https://doi.org/10.1016/B978-1-85617-635-4.00008-X</u>

Αυλωνίτης Σ.Α. (2012), Εισαγωγή στην τεχνολογία νερού και αφαλάτωσης, Εκδ. Ίων.

- Ειδική Γραμματεία Υδάτων (2014), Σχέδιο Διαχείρισης Λεκάνων Απορροής Υδατικού Διαμερίσματος Θεσσαλίας. Παραδοτέο 08: Ανάλυση ανθρωπογενών πιέσεων και των επιπτώσεών τους στα επιφανειακά και στα υπόγεια υδατικά συστήματα. Ανακτήθηκε από: <u>https://wfdver.ypeka.gr/el/project/gr08-08-approved-</u> <u>management-human-pressure-gr/</u>
- Κάλλιας Γ. (2023). Υπολογιστική ανάλυση φαινομένων μεταφοράς με το ανοικτού κώδικα λογισμικό Elmer. ΕΜΠ. <u>http://dx.doi.org/10.26240/heal.ntua.26918</u>

Παράρτημα Α

Κώδικας αρχείου γεωμετρίας (.geo Script) στο Gmsh, για την κατασκευή του χωρίου του

<u>Κεφαλαίου 4</u>:

- *ms*=0.03;
- *L=1;*
- *H*=0.5;
- *W*=0.2;
- *h*=0.2;
- *r*0=0.02;
- *theta=Pi/6;*
- r=r0/Cos(theta);
- $Point(1) = \{0, 0, 0, ms/2\};$
- *Point(2)={0,W,0,ms/2};*
- $Point(3) = \{L, W, 0, ms/2\};$
- $Point(4) = \{L, 0, 0, ms/2\};$
- *Point(5)*={0,0,H,ms/2};
- *Point(6)*={0, *W*,*H*,*ms*};
- *Point(7)={L,W,H,ms};*
- *Point(8)={L,0,H,ms/2};*
- *Point(9)={0,0,h,ms/10};*
- *Point(10)*={0,0,*h*-*r*,*ms*/10};
- $Point(11) = \{0, 0, h+r, ms/10\};$
- $Point(12) = \{0, r0, h, ms/10\};$
- *Line(1)={1,2};*
- *Line(2)={2,3};*
- *Line(3)={3,4};*
- *Line(4)*={4,1};
- $Line(5) = \{5, 6\};$
- *Line(6)*={6,7};
- *Line(7)={7,8};*
- *Line(8)*={8,5};
- *Line(9)={1,10};*
- *Line(10)={11,5};*
- *Line(11)*={10,11};

35 *Ellipse(14)={10,9,12};* 36 *Ellipse(15)={11,9,12};* 37 $Line(16) = \{2, 6\};$ 38 *Line(17)={3,7};* 39 $Line(18) = \{4, 8\};$ 40 41 *Curve* $Loop(1) = \{1, 2, 3, 4\};$ *Curve Loop(2)={5,6,7,8};* 42 43 *Curve Loop*(3)={1,16,-5,-10,15,-14,-9}; 44 *Curve Loop(4)={-11,14,-15};* 45 *Curve Loop*(5)={2,17,-6,-16}; 46 *Curve Loop(6)*={4,9,11,10,-8,-18}; 47 *Curve Loop*(7)={3,18,-7,-17}; 48 49 *Surface(1)={1};* 50 *Surface(2)={2};* 51 Plane Surface(3)={3}; 52 *Surface(4)={4};* 53 *Surface(5)*={5}; 54 Plane Surface(6)={6}; 55 *Surface(7)={7};* 56 *Surface Loop(1)={1,2,3,4,5,6,7};* 57

58 *Volume*(1)={1}

<u>Αρχείο Εντολών SIF, για το πρόβλημα στρωτής ροής σε Reynolds 10, γωνία 30° και</u> beta=1e-10:

```
2
       CHECK KEYWORDS Warn
 3
       Mesh DB "." "."
 4
       Include Path ""
 5
       Results Directory "./Results"
 6
      End
 7
 8
      Simulation
 9
       Max Output Level = 5
10
       Coordinate System = Cartesian
11
       Coordinate Mapping(3) = 123
12
       Simulation Type = Steady state
13
       Steady State Max Iterations = 200
14
       Output Intervals(1) = 1
15
       Solver Input File = case.sif
16
       Post File = Re10 beta1e-10 deg30.vtu
17
      End
18
19
      Constants
20
       Gravity(4) = 0 - 109.82
21
      End
22
23
      Body 1
24
       Target Bodies(1) = 1
25
       Name = "Body 1"
26
       Equation = 1
27
       Material = 1
28
       Body Force = 1
29
       Initial condition = 1
30
      End
31
32
      Solver 1
33
       Equation = Navier-Stokes
34
       Variable = Flow Solution[Velocity:3 Pressure:1]
```

1

Header

35	Procedure = "FlowSolve" "FlowSolver"
36	Exec Solver = Always
37	Stabilize = True
38	Optimize Bandwidth = True
39	Steady State Convergence Tolerance = 1.0e-5
40	Nonlinear System Convergence Tolerance = 1.0e-5
41	Nonlinear System Max Iterations = 10
42	Nonlinear System Newton After Iterations = 3
43	Nonlinear System Newton After Tolerance = 1.0e-3
44	Nonlinear System Relaxation Factor $= 0.8$
45	Linear System Solver = Iterative
46	Linear System Iterative Method = BiCGStab
47	Linear System Max Iterations = 500
48	Linear System Convergence Tolerance = 1.0e-10
49	Linear System Preconditioning = ILU0
50	Linear System ILUT Tolerance = 1.0e-3
51	Linear System Abort Not Converged = False
52	Linear System Residual Output = 10
53	Linear System Precondition Recompute = 1
54	End
55	
56	Solver 2
57	Equation = Advection Diffusion Equation
58	Procedure = "AdvectionDiffusion" "AdvectionDiffusionSolver"
59	Variable = Concentration
60	Exec Solver = Always
61	Stabilize = True
62	Optimize Bandwidth = True
63	Steady State Convergence Tolerance = 1.0e-5
64	Nonlinear System Convergence Tolerance = 1.0e-7
65	Nonlinear System Max Iterations = 1
66	Linear System Solver = Iterative
67	Linear System Iterative Method = BiCGStab
68	Linear System Max Iterations = 1000
69	Linear System Convergence Tolerance = 1.0e-10
70	BiCGstabl polynomial degree = 2
71	Linear System Preconditioning = ILU0

```
73
        Linear System Abort Not Converged = False
 74
        Linear System Residual Output = 10
 75
        Linear System Precondition Recompute = 1
 76
       End
 77
 78
       Equation 1
 79
        Name = "NS AdvDiff"
 80
        Concentration Convection = Computed
 81
        Concentration Units = Absolute Mass
 82
        Active Solvers(2) = 12
 83
       End
 84
 85
       Material 1
 86
        Name = "Water (room temperature)"
 87
        Density = 998.3
 88
        Concentration Diffusivity = 1e-9
 89
        Sound speed = 1497.0
 90
        Heat Conductivity = 0.58
 91
        Relative Permittivity = 80.1
 92
        Heat Capacity = 4183.0
 93
        Viscosity = 1.002e-3
 94
        Compressibility Model = Incompressible
 95
        Heat expansion Coefficient = 0.207e-3
 96
       End
 97
 98
       Body Force 1
 99
        Name = "Negative Buoyancy and Limiters"
100
        Flow Bodyforce 3 = Variable Concentration; Real MATC "-tx*9.81*1e-10"
101
       End
102
103
       Initial Condition 1
104
        Name = "InitialCondition Zero"
105
        Velocity 1 = 1e-6
106
        Velocity 2 = 0
        Concentration = 0
107
108
       End
109
110
       Boundary Condition 1
```

```
111
        Target Boundaries(1) = 3
112
        Name = "Inlet Sea"
113
        Velocity 3 = 0
114
        Velocity 1 = 1e-6
115
        Concentration = 0
116
        Velocity 2 = 0
117
       End
118
119
       Boundary Condition 2
120
        Target Boundaries(1) = 4
121
        Name = "Inlet Dense"
122
        Velocity 1 = 0.866e-5
123
        Concentration = 1
124
        Velocity 2 = 0
125
        Velocity 3 = 0.5e-5
126
       End
127
128
       Boundary Condition 3
129
        Target Boundaries(1) = 7
130
        Name = "Outlet"
131
        Velocity 3 = 0
132
        External Pressure = 0
133
        Velocity 2 = 0
134
        Concentration Flux = 0
135
       End
136
137
       Boundary Condition 4
138
        Target Boundaries(1) = 1
139
        Name = "Wall"
140
        Noslip wall BC = True
141
        Concentration Flux = 0
142
       End
143
144
       Boundary Condition 5
145
        Target Boundaries(2) = 5.6
146
        Name = "Symmetry Sides"
147
        Concentration Flux = 0
148
        Velocity 2 = 0
```

- 149 End
 150
 151 Boundary Condition 6
 152 Target Boundaries(1) = 2
 153 Name = "Symmetry Top"
 154 Velocity 3 = 0
- 155 Concentration Flux = 0
- 156 End