

Μελέτη φαινομένων καύσης σε παράλληλα συστήματα πολλαπλών επεξεργαστών

Διδακτορική διατριβή από τον
Γκατζούλη Β. Αθανάσιο
Μηχανολόγο Μηχανικό

Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών
Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας

Υποβλήθηκε για την απόκτηση του τίτλου του
Διδάκτορα του Πανεπιστημίου Δυτικής Μακεδονίας

Επιβλέπων:

Τομπουλίδης Ανανίας, Καθηγητής ΠΔΜ

Τριμελής επιτροπή:

Τομπουλίδης Ανανίας, Καθηγητής ΠΔΜ

Μπάρτζης Ιωάννης, Καθηγητής ΠΔΜ

Τουρλιδάκης Αντώνιος, Αναπληρωτής Καθηγητής ΠΔΜ

Κοζάνη 2009

*Στους γονείς μου, Βασίλη και Κατερίνα
και στον αδερφό μου Μίλτο*

Ευχαριστίες

Η παρούσα διδακτορική διατριβή ξεκίνησε επίσημα τον Μάιο του 2005 στο Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας (ΠΔΜ) και συγκεκριμένα στο Εργαστήριο Θερμοδυναμικής και Θερμικών Μηχανών του Τμήματος Μηχανολόγων Μηχανικών (ΤΜΜ). Η έρευνα που πραγματοποιήθηκε, εντάχθηκε στο ερευνητικό πρόγραμμα του εργαστηρίου, με αντικείμενο την «Εξοικονόμηση ενέργειας, μείωση εκπομπών, βελτίωση λειτουργικών χαρακτηριστικών και βαθμού απόδοσης ΑΗΣ, με την ανάπτυξη και εφαρμογή σύγχρονων τεχνολογιών ανάλυσης, παρακολούθησης και βελτιστοποίησης». Η έρευνά υλοποιήθηκε στα πλαίσια του Επιχειρηματικού Προγράμματος ΠΕΝΕΔ 2003 (ΓΕΝΙΚΗ ΓΡΑΜΜΑΤΕΙΑ ΕΡΕΥΝΑΣ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ, Ε.Π. ΑΝΤΑΓΩΝΙΣΤΙΚΟΤΗΤΑ) και χρηματοδοτήθηκε από την Ευρωπαϊκή Ένωση (ΕΚΤ) κατά 75% και το Ελληνικό Δημόσιο (ΥΠΙΑΝ-ΓΓΕΤ) κατά 25%.

Αρχικά θα ήθελα να ευχαριστήσω όλους τους ανθρώπους που με βοήθησαν στην πορεία της προετοιμασίας και ολοκλήρωσης της διδακτορικής μου διατριβής. Ιδιαίτερα, θέλω να εκφράσω τις ευχαριστίες μου στον καθηγητή και επιβλέποντά μου κ. Τομπουλίδη Ανανία, για την άριστη ακαδημαϊκή καθοδήγηση που μου προσέφερε, τη διαρκή ενασχόληση και ενδιαφέρον που επέδειξε όλα αυτά τα χρόνια και πάνω από όλα τη φιλία του. Βρέθηκε στο πλευρό μου και με στήριξε ιδιαίτερα, σε όλες τις δυσκολίες που παρουσιάστηκαν.

Ευχαριστώ τον καθηγητή κ. Φρουζάκη Χρήστο, για την ξεχωριστή συνεργασία που είχαμε, την απλόχερη βοήθεια και υποστήριξη που μου προσέφερε, καθώς επίσης και τις συμβουλές που μου έδωσε κατά τη διάρκεια διεξαγωγής της έρευνας μου.

Παράλληλα, ευχαριστώ τον Δρ. Marco Kueng για τις γνώσεις που μου πρόσφερε για την εφαρμογή του μοντέλου προσεγγιστικής ανέλιξης (ADM) και τον Δρ. Πολίτη Μαυρίκιο και τον Kerkemeier Stefan για την τεχνική υποστήριξη και την επίλυση προβλημάτων που προέκυψαν κατά τη μεταγλώττιση του κώδικα που αναπτύχθηκε, στη συστοιχία των πολλαπλών επεξεργαστών που διαθέτει το ΤΜΜ.

Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστώ τους καθηγητές κ. Τουρλιδάκη Αντώνιο, κ. Μπάρτζη Ιωάννη και κ. Μπούρη Δημήτριο για το χρόνο που μου αφιέρωσαν και για τις συζητήσεις που είχαμε μαζί.

Είμαι ευγνώμων στους συναδέλφους και φίλους, Βακουφτσή Ελένη, Μελίνα Πετρίδου, Τζολάκη Γιώργο, Θεοδορίδη Αντώνη, Κόνια Φώτη, Τάσο Κοπανίδη, Ελένη Αγαλερίδου, Σοφία Μαυρίδου και Βασίλη Νασερεντίν για τις υποδείξεις, τη στήριξη που μου προσέφεραν όλα αυτά τα χρόνια και τις ωραίες στιγμές που περάσαμε μαζί.

Ευχαριστώ επίσης θερμά την Αρετή Διαμαντοπούλου , η οποία στάθηκε στο πλευρό μου και με στήριξε σε όλη τη διάρκεια διεξαγωγής της ερευνάς μου, χωρίς ποτέ να με εγκαταλείψει.

Τέλος, δεν βρίσκω λόγια να εκφράσω τις πιο θερμές μου ευχαριστίες στους γονείς μου, Βασίλη και Κατερίνα και στον αδερφό μου Μίλτο, για τη σημαντική υποστήριξη και την υπομονή τους όλα αυτά τα χρόνια.

Γκατζούλης Αθανάσιος

Πρόλογος

Η καύση και ειδικότερα ο έλεγχος των διεργασιών που σχετίζονται με αυτή, αποτελεί εάν όχι το βασικότερο, έναν από τους βασικότερους λόγους της ύπαρξης ζωής στον πλανήτη, όπως αυτή έχει εξελιχθεί σήμερα. Μία απλή παρατήρηση στο περιβάλλον μας, είναι αρκετή να αποτελέσει έναν ικανοποιητικό λόγο, υπέρμαχο της προηγούμενης παρατήρησης και απόδειξη της σημαντικότητας και του ρόλου των διεργασιών καύσης. Η θερμοκρασία του χώρου στον οποίο ζούμε, είναι αποτέλεσμα μίας άμεσης διεργασίας καύσης, η οποία λαμβάνει χώρα σε ένα καυστήρα πετρελαίου ή φυσικού αερίου, ή μίας έμμεσης, η οποία απορρέει από τον ηλεκτρισμό, ο οποίος συνδέεται άμεσα με την καύση οργανικών ορυκτών καυσίμων. Επιπρόσθετα περισσότερο από το 50% της παραγόμενης ηλεκτρικής ενέργειας ανά τον κόσμο προέρχεται μέσω της καύσεως άνθρακα ή άλλων οργανικών καυσίμων, ενώ ένας άλλος τομέας, ο οποίος συνηγορεί στην αναγκαιότητα της κατανόησης των φαινομένων που λαμβάνουν χώρα κατά την καύση αποτελεί αυτός των μεταφορών. Η αποδοτικότητα, η αξιοπιστία, η λειτουργικότητα και κυρίως η βιωσιμότητα αυτού είναι άρρηκτα συνδεδεμένη με την επάρκεια, τη διαθεσιμότητα και την καύση των οργανικών καυσίμων. Γενικότερα μπορεί να ειπωθεί ότι οι περισσότερες βιομηχανικές παραγωγικές μονάδες και οι συσκευές που χρησιμοποιούν στον κύκλο περάτωσης του τελικού προϊόντος, βασίζονται έμμεσα ή άμεσα σε διεργασίες καύσης. Έχοντας αναφέρει τις θετικές πλευρές και τη σπουδαιότητα της καύσης και γενικότερα των διεργασιών της, είναι απαραίτητο να αναφερθεί και το κύριο μειονέκτημα αυτής, το οποίο σχετίζεται με τη μόλυνση του περιβάλλοντος, γεγονός που δεν αναιρεί, αλλά καθιστά περισσότερο επιτακτική την ανάγκη κατανόησης και μελέτης της. Ως γνωστόν όλες οι παραγωγικές διαδικασίες έχουν σαν αποτέλεσμα την παραγωγή καυσαερίων και αέριων ρύπων, οι οποίοι επηρεάζουν την ισορροπία του οικοσυστήματος και τη συγκέντρωση των συστατικών της ατμόσφαιρας, με τελικό απότοκο την μόλυνση της τελευταίας.

Με βάση τα προαναφερθέντα διαπιστώνεται ότι η καύση αποτελεί ένα αντικείμενο προς μελέτη και έρευνα, ιδιαίτερα στη σημερινή εποχή, όπου το ενεργειακό πρόβλημα είναι αυτό που θα καθορίσει τη βιωσιμότητα και τη μελλοντική πορεία της ανθρωπότητας. Η ανάγκη για ορθολογική χρήση ενέργειας, βελτίωση αυτής, αύξησης του βαθμού απόδοσης και μείωσης των εκπεμπόμενων ρύπων από τους σταθμούς

παραγωγής ενέργειας απαιτεί την κατανόηση και δυνατότητα μεταβολής των συνθηκών καύσης, για καλύτερη αξιοποίηση των διαθέσιμων ενεργειακών πόρων.

Κίνητρο - Στόχος - Συνεισφορά

Θέμα της διδακτορικής διατριβής αποτέλεσε η υπολογιστική διερεύνηση τυρβωδών διεργασιών καύσης με τη χρήση της μεθόδου προσομοίωσης μεγάλων δινών (Large Eddy Simulation - LES), βασισμένη στο μοντέλο προσεγγιστικής ανέλιξης (Approximate Deconvolution Model - ADM) καθώς και στο μοντέλο Smagorinsky (κλασσικό και δυναμικό) σε συνδυασμό με τη μέθοδο των σταθερών φλογιδίων (steady flamelets) και με τη βοήθεια των τρισδιάστατων φασματικών πεπερασμένων στοιχείων (spectral elements). Στόχος τέθηκε η ανάπτυξη υπολογιστικών μοντέλων για διεργασίες καύσης, καθώς και η ανάλυση, στάθμιση και επαλήθευση τους με πειραματικά και άλλα δεδομένα, για την κατανόηση των φυσικοχημικών φαινομένων και των μηχανισμών κατά τις διεργασίες καύσης, με τελικό σκοπό τον έλεγχο και τη βελτίωση της απόδοσης των διεργασιών αυτών, καθώς και τη μείωση των εκπεμπόμενων ρύπων.

Η προσομοίωση των συστημάτων και των γεωμετριών, στις οποίες λαμβάνει χώρα καύση είναι ιδιαίτερα περίπλοκη, όχι μόνο λόγω των υπολογιστικών προβλημάτων σχετικών με την επίλυση των εξισώσεων ροής, αλλά και λόγω δυσκολίας στη μαθηματική περιγραφή των σημαντικών χημικών και φυσικών διεργασιών που λαμβάνουν χώρα στα συστήματα αυτά. Κύριο πρόβλημα και δυσκολία αποτελεί η ύπαρξη πολλών κλιμάκων και χαρακτηριστικών μεγεθών κατά την ανάπτυξη της ροής, τα οποία καθορίζονται όχι μόνο από το ισόθερμο ροϊκό πεδίο, αλλά και από τη φύση και τη δομή της φλόγας, που αυξάνουν σε μεγάλο βαθμό το υπολογιστικό κόστος προσομοίωσης και το βαθμό μαθηματικής δυσκολίας τέτοιων εφαρμογών.

Οι κύριοι στόχοι της διδακτορικής διατριβής και τα επιμέρους ζητήματα που διαπραγματεύεται η εργασία μπορούν να συνοψιστούν στα εξής:

- Ανάπτυξη λογισμικού για να επεκταθεί ο ήδη υπάρχων κώδικας με την εφαρμογή της μεθόδου «Προσομοίωσης των Μεγάλων δινών» (Large Eddy Simulation - LES) βασισμένη στη μέθοδο «Προσεγγιστικής Ανέλιξης» (Approximate Deconvolution Model - ADM) καθώς και στο μοντέλο Smagorinsky (κλασσικό και δυναμικό).

- Λεπτομερής μελέτη και κατανόηση της φυσικής και αριθμητικής συμπεριφοράς του κλάσματος ανάμιξης Z (mixture fraction) με τη μέθοδο προσομοίωσης μεγάλων δινών καθώς και τη μέθοδο της άμεσης προσομοίωσης.
- Μελέτη της δυνατότητας σύζευξης της τελικής μεθοδολογίας και του κώδικα που προέκυψε, με ένα μοντέλο σταθερών φλογιδίων, το οποίο θα πιστοποιηθεί με αποτελέσματα άμεσης προσομοίωσης, για τη μελέτη της χημείας της αέριας φάσης.

Βασική συνεισφορά και πρωτοτυπία της παρούσας διδακτορικής διατριβής στο συγκεκριμένο πεδίο έρευνας, αποτέλεσε το γεγονός ότι η ανάπτυξη του λογισμικού που πραγματοποιήθηκε και η διεξαγωγή των προσομοιώσεων, έγινε με τη χρησιμοποίηση και τη μεταφορά των μοντέλων προσεγγιστικής ανέλιξης (ADM) και Smagorinsky (κλασσικό και δυναμικό) στον πολυωνυμικό χώρο. Η μελέτη της επίδρασης του πυρήνα του φίλτρου και της συμπεριφοράς των διαφόρων μοντέλων που χρησιμοποιούνται στην προσομοίωση μεγάλων δινών δεν έχει διερευνηθεί λεπτομερώς στον πολυωνυμικό χώρο. Με την παρούσα διδακτορική διατριβή δίνεται έμφαση στο ρόλο της μοντελοποίησης και στη γενικότερη φιλοσοφία που διέπει τη μεταφορά της εφαρμογής συγκεκριμένων μοντέλων από το φυσικό στον πολυωνυμικό χώρο, ενώ παράλληλα μελετάται και η δυνατότητα σύζευξης μεταξύ αυτών, του μοντέλου των σταθερών φλογιδίων (steady flamelet) και των φασματικών πεπερασμένων στοιχείων (spectral elements) για την υπολογιστική προσομοίωση τυρβωδών φλογών διάχυσης. Επιπρόσθετα δίνεται έμφαση στη στάθμιση και πιστοποίηση του μοντέλου σταθερών φλογιδίων που χρησιμοποιήθηκε στη διατριβή με αποτελέσματα άμεσης προσομοίωσης με τη χρήση αναλυτικής πινακοποιημένης χημείας.

Περίληψη

Το 1^ο μέρος της έρευνας που πραγματοποιήθηκε στην παρούσα διδακτορική διατριβή στοχεύει στη μεταφορά των εργαλείων και μεθόδων που χρησιμοποιούνται στο φυσικό χώρο (finite volumes) στο φασματικό και στην περαιτέρω ανάλυση και στάθμιση τους σε αυτόν, με τη χρήση της μεθόδου προσομοίωσης μεγάλων δινών σε συνδυασμό με τα φασματικά πεπερασμένα στοιχεία. Η μελέτη της επίδρασης του πυρήνα του φίλτρου και της συμπεριφοράς των διαφόρων μοντέλων που

χρησιμοποιούνται στην προσομοίωση μεγάλων δινών δεν έχει διερευνηθεί διεξοδικά στον πολυωνυμικό χώρο και βασική συνεισφορά και πρωτοτυπία της παρούσας διδακτορικής διατριβής αποτέλεσε η ανάπτυξη της μεθοδολογίας και του λογισμικού που πραγματοποιήθηκε στο χώρο αυτό. Στο 2^ο μέρος της διατριβής μελετήθηκε επιπρόσθετα η δυνατότητα σύζευξης των μοντέλων που προέκυψαν, με το μοντέλο των σταθερών φλογιδίων και τα φασματικά πεπερασμένα στοιχεία, έτσι ώστε να είναι δυνατή η μελέτη φλογών διάχυσης. Η δυνατότητα σύζευξης περιλαμβάνει την επίλυση του κλάσματος ανάμιξης Z , καθώς επίσης και τον έλεγχο αξιοπιστίας του μοντέλου σταθερών φλογιδίων.

Τα μοντέλα που χρησιμοποιήθηκαν στο 1^ο μέρος της έρευνας είναι το μοντέλο προσεγγιστικής ανέλιξης (ADM) και μοντέλο Smagorinsky (κλασσικό και δυναμικό). Κύρια γεωμετρία στάθμισης και ελέγχου αξιοπιστίας των μοντέλων στον πολυωνυμικό χώρο, αποτέλεσε η δέσμη ασυμπίεστου ρευστού ομοροής (Coflow Jet) με $Re = 2000$ (τυρβώδης ροή). Όσο αφορά στο 2^ο μέρος της διατριβής, η αντίστοιχη γεωμετρία που χρησιμοποιήθηκε, για τον έλεγχο της αξιοπιστίας του μοντέλου σταθερών φλογιδίων (steady flamelet) και της δυνατότητας τελικής σύζευξης αυτού με τα μοντέλα επίλυσης του ροϊκού πεδίου, ήταν αυτή της αντικριστής δέσμης (Opposed Jet) με $Re = 100, 200, 300, 400$ και 500 (συμπιεστή, στρωτή ροή) με καύσιμο υδρογόνο (H_2).

Στην περίπτωση επίλυσης του ασυμπίεστου πεδίου ροής, με τη χρήση του μοντέλου προσεγγιστικής ανέλιξης (ADM), καθώς και με τροποποιήσεις ή βελτιώσεις του, οι προβλέψεις του δεν ήταν ικανοποιητικές σε σύγκριση με αυτές της άμεσης προσομοίωσης στην μεταβατική περιοχή της γεωμετρίας της δέσμης. Από την άλλη πλευρά το δυναμικό μοντέλο Smagorinsky παρουσίασε καλύτερα αποτελέσματα, όσο αφορά στην πρόβλεψη της έντασης της τύρβης, σε σχέση με το μοντέλο προσεγγιστικής ανέλιξης. Ωστόσο οι τελικές προβλέψεις δεν ήταν το ίδιο ικανοποιητικές με αυτές του κλασσικού μοντέλου Smagorinsky με συντελεστή $C_s = 0.1$, το οποίο και τελικά επιλέχθηκε για την επίλυση της εξίσωσης μεταφοράς του κλάσματος ανάμιξης Z στο 2^ο μέρος της διατριβής. Επιπλέον προσπάθεια για την περαιτέρω βελτίωση των αποτελεσμάτων του δυναμικού μοντέλου Smagorinsky, επιδιώχθηκε με τη χρήση του Λαγκρανσιανού μοντέλου Smagorinsky (Lagrangian Dynamic Model – LDSM), χωρίς όμως ιδιαίτερα αποτελέσματα.

Επιπρόσθετα με τα παραπάνω για τη μελέτη της δυνατότητας σύζευξης των μοντέλων που επιλέχθηκαν και του μοντέλου σταθερών φλογιδίων, επιλύθηκε, με τη μέθοδο

προσομοίωσης μεγάλων δινών, η εξίσωση μεταφοράς του κλάσματος ανάμιξης Z . Κατόπιν της επίλυσης του προβλήματος κλεισίματος (closure problem), με τη χρησιμοποίηση της υπόθεσης κλίσης ταχύτητας (gradient diffusion hypothesis), διαπιστώθηκε ότι με την εφαρμογή της μεθόδου προσομοίωσης μεγάλων δινών όλα τα μοντέλα, τόσο το μοντέλο Smagorinsky με σταθερό συντελεστή C_s , όσο και αυτό με δυναμικό υπολογισμό του συντελεστή C_d υπερεκτιμούσαν και / ή υποεκτιμούσαν τις τιμές του κλάσματος ανάμιξης, προβλέποντας για αυτό τιμές μεγαλύτερες της μονάδος και μικρότερες του μηδενός. Το μοντέλο Smagorinsky με σταθερό συντελεστή $C_s = 0.2$ παρουσίασε καλύτερη συμπεριφορά όσο αφορά στην πρόβλεψη των μέγιστων και ελάχιστων τιμών του κλάσματος ανάμιξης, δίνοντας τη μικρότερη απόκλιση από της αντίστοιχες θεωρητικές 1 και 0. Αντίστοιχα το μοντέλο Smagorinsky με $C_s = 0.1$, το οποίο έδωσε τα καλύτερα αποτελέσματα στην επίλυση του ροϊκού πεδίου, παρουσίασε μεγαλύτερες αποκλίσεις από το 0 και το 1, γεγονός το οποίο οφείλεται στο μικρότερο χαρακτήρα σκέδασης του συγκεκριμένου μοντέλου. Τα δυναμικά μοντέλα που χρησιμοποιήθηκαν, παρουσίασαν όμοια συμπεριφορά, ενώ οι αποκλίσεις από τη μέγιστη και ελάχιστη θεωρητική τιμή του κλάσματος ανάμιξης Z παρουσίασαν το ίδιο εύρος τιμών, το οποίο εξαρτάται από το μέγεθος της ενέργειας που αποκόπτει η χρησιμοποιούμενη κάθε φορά συνάρτηση πυρήνα του φίλτρου. Εκτεταμένες προσομοιώσεις με διαφορετικό βαθμό πολυωνυμικής προσέγγισης και τη χρησιμοποίηση μίας εναλλακτικής μεθόδου προσομοίωσης μεγάλων δινών, βελτίωσαν αισθητά τα τελικά αποτελέσματα.

Τελευταίο στάδιο μελέτης και έρευνας αποτέλεσε η χρήση και στάθμιση ενός κώδικα σταθερών φλογιδίων με αποτελέσματα άμεσης προσομοίωσης. Για το λόγο αυτό τα αποτελέσματα του ανοιχτού κώδικα των σταθερών φλογιδίων FlameMaster συγκρίθηκαν και πιστοποιήθηκαν, με αποτελέσματα άμεσης προσομοίωσης μίας στρωτής συμπιεστής ροής φλόγας διάχυσης αντικριστής γεωμετρίας (Opposed Jet Flame) με καύσιμο H_2 και με τη βοήθεια πινακοποιημένης αναλυτικής χημείας.

Διάθρωση της διατριβής

Η παρούσα διδακτορική διατριβή αποτελείται από 6 κεφάλαια. Στο 1^ο κεφάλαιο δίνεται μία γενική και σύντομη περιγραφή των μεθόδων υπολογιστικής προσομοίωσης που χρησιμοποιούνται για τη διερεύνηση, μελέτη και ανάλυση

πρότυπων βιομηχανικών ή μη εφαρμογών, καθώς επίσης και οι διαφορές και ομοιότητες μεταξύ πειραματικών μετρήσεων και υπολογιστικής προσομοίωσης. Στο 2^ο κεφάλαιο αναλύονται οι εξισώσεις για τυρβώδη, μίας φάσεως, ενός στοιχείου και σταθερής πυκνότητας ροής. Για την επίλυση αυτών χρησιμοποιήθηκε ένας κώδικας βασισμένος σε φασματικά πεπερασμένα στοιχεία, η δομή του οποίου διαμορφώθηκε ανάλογα με τις απαιτήσεις της μεθόδου προσομοίωσης μεγάλων δινών (Large Eddy Simulation – LES), καθώς και αυτών του προβλήματος κλεισίματος των εξισώσεων (closure problem) με τη μέθοδο προσεγγιστικής ανέλιξης (Approximate Deconvolution Model - ADM) και τη χρήση του μοντέλου Smagorinsky (κλασσικό και δυναμικό). Παράλληλα γίνεται εκτενής μαθηματική περιγραφή του μοντέλου προσεγγιστικής ανέλιξης (Approximate Deconvolution Model – ADM) και του μοντέλου Smagorinsky (κλασσικό και δυναμικό), ενώ επιπρόσθετα αναλύεται η διαδικασία διαμόρφωσης των εξισώσεων και η τελική μορφή αυτών στην περίπτωση εφαρμογής των μοντέλων που προαναφέρθηκαν. Εν συνεχεία το 3^ο κεφάλαιο αφορά στην υπολογιστική προσομοίωση μίας ισόθερμης γεωμετρίας δέσμης (jet), η οποία είναι η πρότυπη γεωμετρία που προσομοιώθηκε με τη χρησιμοποίηση της μεθόδου άμεσης προσομοίωσης (DNS) και αυτής των μεγάλων δινών (LES). Στο συγκεκριμένο κεφάλαιο παρουσιάζονται τα αποτελέσματα του μοντέλου προσεγγιστικής ανέλιξης (ADM), καθώς και οι προσπάθειες βελτίωσης αυτών μέσω της επίδρασης των διαφόρων παραμέτρων του μοντέλου. Παράλληλα παρουσιάζονται οι αντίστοιχες προβλέψεις του μοντέλου Smagorinsky και διερευνάται ο ρόλος της συνάρτησης του πυρήνα του φίλτρου και η επίδραση αυτού στα τελικά αποτελέσματα. Στο 4^ο και 5^ο κεφάλαιο παρουσιάζεται η μελέτη της δυνατότητας σύζευξης του μοντέλου με το οποίο επιλύεται το ροϊκό πεδίο και του αντίστοιχου που επιλέχθηκε για την καύση (κώδικας FlameMaster). Συγκεκριμένα το 4^ο κεφάλαιο αφορά στην υπολογιστική επίλυση της εξίσωσης μεταφοράς του κλάσματος ανάμιξης Z και στη μαθηματική διερεύνηση της συμπεριφοράς του με τη μέθοδο προσομοίωσης μεγάλων δινών και τη χρήση του μοντέλου Smagorinsky (κλασσικό και δυναμικό), καθώς επίσης και τη χρήση μίας διαφορετικής διαδικασίας φιλτραρίσματος, η οποία μπορεί να χαρακτηριστεί ως εναλλακτική μέθοδος προσομοίωσης μεγάλων δινών. Επίσης αναλύονται τα βασικά προβλήματα που προέκυψαν κατά την εφαρμογή της μεθόδου και αποτέλεσαν εμπόδιο στην περαιτέρω ανάπτυξη αυτής. Στο 5^ο κεφάλαιο γίνεται μία προσπάθεια επίλυσης του προβλήματος της δομής της φλόγας με τη χρήση του μοντέλου των σταθερών φλογιδίων (κώδικας

FlameMaster). Για την πιστοποίηση και τη στάθμιση του μοντέλου των σταθερών φλογιδίων που χρησιμοποιήθηκε στην παρούσα διδακτορική διατριβή έγινε υπολογιστική προσομοίωση μίας στρωτής φλόγας σε γεωμετρία αντικριστής δέσμης (Opposed Jet), τα αποτελέσματα της οποίας συγκρίθηκαν με τα αντίστοιχα του μοντέλου φλογιδίων στο χώρο του κλάσματος ανάμιξης Z . Τέλος στο 6^ο κεφάλαιο παρουσιάζονται τα τελικά αποτελέσματα και τα γενικότερα συμπεράσματα, τα οποία προέκυψαν από την παρούσα διδακτορική διατριβή, ενώ παράλληλα δίνονται πιθανές κατευθύνσεις για μελλοντική έρευνα και περαιτέρω ανάλυση.

Περιεχόμενα

Κεφάλαιο 1^ο: Βιβλιογραφική ανασκόπηση

Εισαγωγή.....	σελ. 1
1.1 Χαρακτηρισμός Ροών.....	σελ. 1
1.2 Πείραμα και αριθμητική προσομοίωση.....	σελ. 4
1.3 Προσομοίωση μεγάλων δινών και πρόβλημα κλεισίματος (LES – closure problem).....	σελ. 8
1.4 Μοντέλα για την επίλυση του προβλήματος κλεισίματος (closure – problem).....	σελ. 12
1.4.1 Εισαγωγή.....	σελ. 12
1.4.2 Functional modeling.....	σελ. 13
1.4.3 Structural modeling.....	σελ. 17

Κεφάλαιο 2^ο: Μαθηματική περιγραφή των εξισώσεων – Διαδικασία φιλτραρίσματος στον πολυωνυμικό χώρο

Εισαγωγή.....	σελ. 24
2.1 Low – Mach Number Flows – Μαθηματικές Εξισώσεις.....	σελ. 25
2.2 Αδιαστατοποίηση των εξισώσεων.....	σελ. 27
I. Αδιαστατοποίηση της εξίσωσης μάζας.....	σελ. 27
II. Αδιαστατοποίηση της εξίσωσης ορμής.....	σελ. 27
III. Αδιαστατοποίηση της εξίσωσης μεταφοράς θερμότητας σε περίπτωση που $C_p = \text{σταθερό}$	σελ. 28
IV. Αδιαστατοποίηση της καταστατικής εξίσωσης.....	σελ. 29
2.3 Favre Filtered μορφή των εξισώσεων.....	σελ. 31
2.4 Μοντέλο προσεγγιστικής ανέλιξης (Approximate Deconvolution Model – ADM).....	σελ. 33
2.5 Μοντέλο Smagorinsky (Smagorinsky model – SM).....	σελ. 36
2.5.1 Κλασικό μοντέλο Smagorinsky (Constant Smagorinsky Model – CSM).....	σελ. 38
2.5.2 Δυναμικό μοντέλο Smagorinsky (Dynamic Smagorinsky Model – DSM).....	σελ. 39
2.6 Κώδικας φασματικών πεπερασμένων στοιχείων – Χωρική και χρονική διακριτοποίηση.....	σελ. 42
2.6.1 Διαμόρφωση των εξισώσεων στην περίπτωση του μοντέλου προσεγγιστικής ανέλιξης (Approximate Deconvolution Model – ADM).....	σελ. 44
2.6.2 Διαμόρφωση των εξισώσεων στην περίπτωση του μοντέλου Smagorinsky με σταθερό C_s και δυναμικό υπολογισμού αυτού.....	σελ. 45
2.7 Διαδικασία φιλτραρίσματος.....	σελ. 46
2.7.1 Επιλογή συναρτήσεων πυρήνα/μεταφοράς (kernel function) – Μοντέλο προσεγγιστικής ανέλιξης.....	σελ. 49
2.7.2 Επιλογή συναρτήσεων πυρήνα / μεταφοράς (kernel function) – Δυναμικό μοντέλο Smagorinsky (Dynamic Smagorinsky Model).....	σελ. 51

2.7.3 Ισοδυναμία των εναλλακτικών τρόπων φιλτραρίσματος.....	σελ. 54
2.7.4 Έλεγχος της διαδικασίας φιλτραρίσματος.....	σελ. 55

Κεφάλαιο 3^ο: Υπολογιστική προσομοίωση ισόθερμης δέσμης ομοροής (Isothermal Coflow Jet)

Εισαγωγή.....	σελ. 59
3.1 Περιγραφή της ισόθερμης δέσμης (Isothermal Jet).....	σελ. 59
3.2 Ιστορική αναδρομή στις ροές δέσμης [ισόθερμες (isothermal) και μη ισόθερμες (non-isothermal)].....	σελ. 64
3.3 Αναλυτική Γεωμετρία – Υπολογιστικό Πλέγμα – Οριακές συνθήκες.....	σελ. 69
3.4 Μοντέλο Προσεγγιστικής Ανέλιξης (ADM) - Μοντέλο Smagorinsky με σταθερό συντελεστή (CSM) – Άμεση Προσομοίωση.....	σελ. 72
3.5 Επίδραση του συντελεστή χαλάρωσης του Μοντέλου Προσεγγιστικής Ανέλιξης.....	σελ. 75
3.6 Επίδραση της διαφορετικής επιλογής του μήκους του φίλτρου.....	σελ. 77
3.7 Επίδραση του σταθερού συντελεστή C_s του μοντέλου Smagorinsky.....	σελ. 79
3.8 Επίδραση του δυναμικού συντελεστή C_s του μοντέλου Smagorinsky.....	σελ. 84
3.8.1 Μοντέλο εύρεσης μέσης τιμής του συντελεστή C_d ακολουθώντας τροχιές σωματιδίων στο χρόνο (lagrangian type averaging model).....	σελ. 91
3.9 Έλεγχος ανεξαρτησίας αποτελεσμάτων από το πλέγμα.....	σελ. 95
3.10 Συμπεράσματα.....	σελ. 96

Κεφάλαιο 4^ο: Μαθηματική περιγραφή και επίλυση της εξίσωσης μεταφοράς του κλάσματος ανάμιξης Z

Εισαγωγή.....	σελ. 98
4.1 Μέθοδοι προσομοίωσης μεγάλων δινών τυρβωδών φλογών διάχυσης.....	σελ. 99
4.1.1 Σταθερό και χρονικά μεταβαλλόμενο μοντέλο φλογιδίων (steady – unsteady flamelet model).....	σελ. 100
4.1.2 Μοντέλα κλεισίματος με χρησιμοποίηση ροπών υπό συνθήκη (Conditional Moment Closure – CMC).....	σελ. 103
4.1.3 Μοντέλα επίλυσης συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας με βάση την πυκνότητα (transported Filtered Density Function Models - FDFM).....	σελ. 104
4.2 Εισαγωγή στη μέθοδο των φλογιδίων – Εξίσωση μεταφοράς κλάσματος ανάμιξης Z – Αδιαστατοποίηση.....	σελ. 106
I. Αδιαστατοποίηση της εξίσωσης μεταφοράς του κλάσματος ανάμιξης.....	σελ. 109
4.3 Favre Filtered μορφή της εξίσωσης του κλάσματος ανάμιξης – Πρόβλημα κλεισίματος – Διακριτοποίηση.....	σελ. 110
4.4 Αποτελέσματα προσομοίωσης.....	σελ. 112
4.5 Εναλλακτική μέθοδος προσομοίωσης μεγάλων δινών – Νέο πλέγμα.....	σελ. 124

4.6 Συμπεράσματασελ. 131

Κεφάλαιο 5^ο: Μοντέλο σταθερών φλογιδίων – Υπολογιστική προσομοίωση αντικριστής δέσμης (Opposed Jet)

Εισαγωγή.....σελ. 135

5.1 Κώδικας επίλυσης εξισώσεων σταθερών φλογιδίων (FlameMaster).....σελ. 136

5.2 Διαμόρφωση της εξίσωσης μεταφοράς χημικού στοιχείου i – Αδιαστατοποίηση – Διακριτοποίηση – Τελικό σύστημα εξισώσεων.....σελ. 138

I. Αδιαστατοποίηση της εξίσωσης μεταφοράς χημικού στοιχείου iσελ. 139

II. Χρονική διακριτοποίηση της εξίσωσης μεταφοράς χημικού στοιχείου iσελ. 140

5.3 Περιγραφή γεωμετρίας αντικριστής δέσμης (Opposed Jet) – Οριακές συνθήκες – Υπολογιστικό πλέγμα.....σελ. 141

5.3.1 Περιγραφή γεωμετρίας αντικριστής δέσμης (Opposed Jet).....σελ. 141

5.3.2 Οριακές συνθήκες – Παράμετροι.....σελ. 143

5.3.3 Υπολογιστικό πλέγμα.....σελ. 144

5.4 Αποτελέσματα άμεσης προσομοίωσης (Direct Numerical Simulation – DNS).....σελ. 145

5.5 Σύγκριση αποτελεσμάτων άμεσης προσομοίωσης με τα αντίστοιχα του κώδικα FlameMaster στο χώρο του κλάσματος ανάμιξης.....σελ. 159

5.6 Συμπεράσματα.....σελ. 166

Κεφάλαιο 6^ο: Γενικά Συμπεράσματα

Εισαγωγή.....σελ. 170

6.1 Γενικά συμπεράσματα.....σελ. 170

6.2 Στόχοι που επιτεύχθηκαν – Μελλοντική έρευνα.....σελ. 176

Βιβλιογραφία – Αναφορές.....σελ. 179

Ακρωνύμια:

ADM - Approximate Deconvolution Model
CFD - Computational Fluid Dynamics
CMC - Conditional Moment Closure
CSM - Constant Smagorinsky Model
DNS - Direct Numerical Simulation
DSM - Dynamic Smagorinsky Model
FDFM - Filtered Density Function Models
LDSM – Lagrangian Dynamic Smagorinsky Model
LES - Large Eddy Simulation
Ma – Αριθμός Mach
PDF – Probability Density Function
Pr – Αριθμός Prandtl
RANS - Reynolds Average Navier-Stokes
Re – Αριθμός Reynolds
Sc – Αριθμός Schmidt
Sc_t – Τυρβώδης αριθμός Schmidt
SDS - Semi - Deterministic Simulation
URANS - Unsteady Reynolds Average Navier-Stokes

Σημειογραφία:

<i>Σύμβολο</i>	<i>Περιγραφή</i>
a_q	χρονικοί συντελεστές του σχήματος που χρησιμοποιείται (explicit)
β_q	χρονικοί συντελεστές του σχήματος που χρησιμοποιείται (implicit)
C_p	θερμική αγωγιμότητα
C_s	σταθερά μοντέλου Smagorinsky
C_d	δυναμική σταθερά μοντέλου Smagorinsky
d_j	διάμετρος δέσμης στην είσοδο
dt	χρονικό βήμα
D	μοριακός συντελεστής διάχυσης
D_t	τυρβώδης συντελεστής διάχυσης
Δ	μήκος πλέγματος
$\bar{\Delta}$	μήκος φίλτρου δοκιμής
ε	σκέδαση ενέργειας
$E(k)$	ενέργεια φάσματος
G	συνάρτηση πυρήνα του φίλτρου

h	ειδική ενθαλπία
h_i	πολυώνυμα παρεμβολής Lagrange
$\underline{\underline{I}}$	μοναδιαίος τανυστής
k	κινητική ενέργεια τύρβης
κ_{ct}	συχνότητα αποκοπής
L	χαρακτηριστικό μήκος
l_k	κλίμακα Kolmogorov
λ	θερμική αγωγιμότητα
m	μάζα
min	ελάχιστο
max	μέγιστο
MB	μοριακό βάρος
μ	δυναμικό ιξώδες
N_d	βαθμός προσεγγιστικής ανέλιξης
N_x	αριθμός πεπερασμένων στοιχείων στην x-κατεύθυνση
N_t	αριθμός χρονικών βημάτων
N	βαθμός πολωνύμων παρεμβολής
n	αριθμός χρονικού βήματος
Π	τελεστής δυναμικού φίλτρου Smagorinsky
p_1	θερμοδυναμική πίεση
p_2	υδροδυναμική πίεση
p_{mod}	πίεση διαιρεμένη με την πυκνότητα
Q_N	τελεστής αντιστροφής του φίλτρου
Q	«θερμική» κλίση (thermal divergence)
r	ακτίνα
R	σταθερά μίγματος
\mathbb{R}	παγκόσμια σταθερά αερίων
ρ	πυκνότητα
$\underline{\underline{S}}$	τανυστής διατμητικών τάσεων
$T(\underline{x}, t)$	θερμοκρασιακό πεδίο
Tr	ίχνος τανυστή (άθροισμα των διαγώνιων στοιχείων ενός τανυστή)
t	χρόνος
$\underline{\underline{\tau}}^{sgs}$	τανυστής υποπλεγματικών κλιμάκων (subgrid scale tensor)
$\underline{\underline{\tau}}^{sgs}_{=test}$	τανυστής υποπλεγματικών κλιμάκων μετά την εφαρμογή του φίλτρου δοκιμής (test subgrid scale tensor)
$\underline{u}(\underline{x}, t)$	διάνυσμα ταχύτητας $(u, v, w)^T$
u	μέτρο αξονικής ταχύτητας
v	μέτρο ακτινικής ταχύτητας
ν_{eff}	«δραστικό» κινηματικό ιξώδες (effective viscosity)
ν_{mol}	μοριακό κινηματικό ιξώδες (molecular viscosity)
ν_{ref}	κινηματικό ιξώδες αναφοράς (reference viscosity)
ν_t	κινηματικό ιξώδες τύρβης (turbulent eddy viscosity)

w	μέτρο αζιμουθιακής ταχύτητας
\underline{x}	διάνυσμα χωρικών διαστάσεων $(x, y, z)^T$
x	κατεύθυνση στον x – άξονα
x_i	σημεία Gauss Lobatto Legendre
χ_u	συντελεστής χαλάρωσης
\mathcal{X}	βαθμωτός ρυθμός σκέδασης (scalar dissipation rate)
Y	κλάσμα μάζας
y	κατεύθυνση στον y – άξονα
z	κατεύθυνση στον z – άξονα
Z	κλάσμα ανάμιξης
$\dot{\omega}_i$	όρος πηγής στοιχείου i
Φ	τυχαία μεταβλητή
ξ	συναρτήσεις Boyd
∇	ανάδελτα
$\frac{\partial}{\partial t}$	χρονική παράγωγος
$\frac{\partial}{\partial x_i}$	χωρική παράγωγος
$()'$	διακύμανση
$()^*$	πεδίο ανέλιξης
$(\tilde{ })$	φιλτραρισμένη τιμή με βάση την πυκνότητα (favre filtering)
$(\bar{ })$	φιλτραρισμένη τιμή (filtering)
$(\widehat{ })$	φιλτραρισμένη τιμή με βάση το φίλτρο δοκιμής (test filtered)
∞	περιοχή αδιατάρακτης ροής
\bullet	εσωτερικό γινόμενο
\vdots	double contraction

Κεφάλαιο 1^ο

Βιβλιογραφική ανασκόπηση

Εισαγωγή

Σκοπός αυτού του κεφαλαίου είναι η γενική και σύντομη περιγραφή των μεθόδων υπολογιστικής προσομοίωσης που χρησιμοποιούνται για τη διερεύνηση, μελέτη και ανάλυση πρότυπων βιομηχανικών ή μη εφαρμογών. Στην ενότητα 1.1 γίνεται ένας διαχωρισμός μεταξύ των ροών που συναντώνται στην πράξη και πώς αυτές είναι δυνατό να μελετηθούν με τη μέθοδο της άμεσης προσομοίωσης (Direct Numerical Simulation – DNS) και τη μέθοδο προσομοίωσης μεγάλων δινών (Large Eddy Simulation – LES). Στη συνέχεια, στην ενότητα 1.2 αναλύονται τα κύρια πλεονεκτήματα της υπολογιστικής προσομοίωσης και περιγράφεται η δυνατότητα σύζευξης αυτής με το πείραμα, ενώ παράλληλα αναφέρεται η προοπτική εφαρμογής των συγκεκριμένων εργαλείων σε πρακτικές εφαρμογές. Επιπρόσθετα η παράγραφος 1.3 αποτελεί μία γενική περιγραφή της μεθόδου προσομοίωσης μεγάλων δινών (LES), στην οποία αναλύεται η ουσία της εισαγωγής μοντέλων για την επίλυση του προβλήματος κλεισίματος, που προκύπτει από την εφαρμογή ενός φίλτρου κατά τη χρησιμοποίηση της μεθόδου στις γενικές εξισώσεις περιγραφής της ροής. Τέλος στο τελευταίο μέρος του κεφαλαίου, στην ενότητα 1.4 αναφέρονται και περιγράφονται περιληπτικά τα πιο διαδεδομένα μοντέλα που χρησιμοποιούνται στη μέθοδο προσομοίωσης μεγάλων δινών, καθώς και οι δύο μεγάλες κατηγορίες στις οποίες ανήκουν.

1.1 Χαρακτηρισμός Ροών

Οι ροές που παρουσιάζονται στη φύση μπορούν να χωριστούν γενικά σε δύο μεγάλες κατηγορίες: στρωτές και τυρβώδεις. Μία ροή είναι δυνατόν να αναπτυχθεί αρχικά σαν στρωτή και να μεταβεί σε τυρβώδη λόγω μίας αστάθειας, αφού προηγουμένως μεσολαβήσει μία κατάσταση μεταβατικού χαρακτήρα. Γενικά θα μπορούσαμε να πούμε ότι η τυρβώδης ροή είναι αποτέλεσμα της μη δυνατότητας απόσβεσης

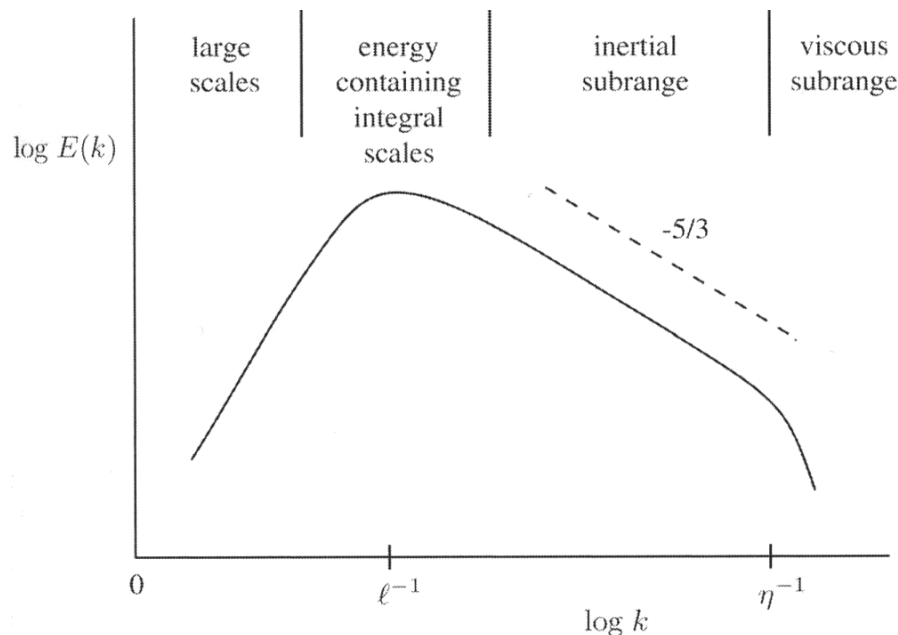
ασταθειών από την επίδραση του ιξώδους - χαρακτηριστική ιδιότητα του ρευστού -, που δημιουργούνται στη ροή [Pope - 2002]. Εν συνεχεία το ροϊκό πεδίο παρουσιάζει τυχαίες διακυμάνσεις, που οδηγούν στη διατάραξη ολόκληρης της ροής και στην εμφάνιση μεγάλων και μικρών δινών, οι οποίες αλληλεπιδρούν μεταξύ τους. Το πρώτο πείραμα που έγινε για τον χαρακτηρισμό των καταστάσεων της ροής είναι αυτό του Osborne Reynolds, κατά το οποίο η μετάβαση από στρωτή σε τυρβώδη ροή - που σχετίζεται άμεσα με τον αδιάστατο αριθμό που φέρει το όνομά του (Reynolds number) - έγινε ορατή με τη βοήθεια μίας διαφορετικού χρώματος ροϊκής γραμμής μέσα στο συνολικό ροϊκό πεδίο [Tennekes - 2001].

Στις περισσότερες τεχνικές και βιομηχανικές εφαρμογές, η καύση λαμβάνει χώρα κυρίως σε τυρβώδη και λιγότερο σε στρωτά ροϊκά πεδία. Ο λόγος της παραπάνω διαπίστωσης έχει διπλό χαρακτήρα. Πρώτον, η τύρβη αυξάνει την ένταση των διεργασιών που σχετίζονται με την ανάμιξη, γεγονός που ενισχύει και βοηθά την καύση και δεύτερον, δια μέσου της καύσεως εκλύεται θερμότητα και επομένως το ροϊκό πεδίο γίνεται περισσότερο ασταθές λόγω των αδρανειακών (buoyancy forces) και των δυνάμεων που οφείλονται στην εκτόνωση των καυσαερίων (gas expansion forces), καταστάσεις που μειώνουν το χρονικό διάστημα μετάβασης στην τυρβώδη κατάσταση. Ως εκ τούτου η τύρβη παίζει ένα πάρα πολύ σημαντικό ρόλο κατά τη καύση διαφόρων υλών και είναι αναγκαία η κατανόηση και μελέτη της.

Για την καλύτερη 'ποιοτική' κατανόηση ενός τυρβώδους ροϊκού πεδίου είναι σκόπιμος ο διαχωρισμός των διαφόρων δομών και / ή κλιμάκων που εμφανίζονται σε αυτό, σύμφωνα με τη βιβλιογραφία.

Η θεωρία του Kolmogorov το 1941 για την ισότροπη τύρβη [Pope 2003] - η τιμή του πεδίου της ταχύτητας παραμένει στατιστικά αμετάβλητη ύστερα από μετατόπιση (translation), περιστροφή (rotation) ή ανάκλαση / αντικατοπτρισμό (reflection) του συστήματος συντεταγμένων -, υποθέτει μία σταθερή μεταφορά κινητικής ενέργειας από τις μεγάλες δίνες (large scales) στις μικρές (small scales), η οποία τελικά σκεδάζεται μέσω της επίδρασης του ιξώδους σε αυτές (energy cascade hypothesis). Η μεγαλύτερη κλίμακα (scale) που εμφανίζεται σε ένα τυρβώδες ροϊκό πεδίο, αποτελεί το άνω όριο της δυνατότητας ύπαρξης δίνης τέτοιου μεγέθους. Στην περίπτωση για παράδειγμα μίας ροής διαμέσου ενός καναλιού η μεγαλύτερη κλίμακα τύρβης που μπορεί να εμφανιστεί είναι δυνατό να έχει μέγεθος ίση με τη διάμετρο αυτού. Η δεύτερη κλίμακα που εμφανίζεται είναι η integral length scale, η οποία από φυσικής απόψεως αποτελεί τη μέση τιμή του συνόλου των μεγάλων κλιμάκων που

εμφανίζονται στο ροϊκό πεδίο. Η κλίμακα integral είναι πάντα μικρότερη της κλίμακας που αναφέρθηκε προηγουμένως. Το κάτω όριο, όσο αφορά στο μέγεθος των κλιμάκων, αποτελεί η κλίμακα Kolmogorov (Kolmogorov scale), στην οποία η κίνηση των δινών και η αλληλεπίδρασή τους με το περιβάλλον, επηρεάζεται από το ιξώδες, ενώ τέλος η κλίμακα μεταξύ των δύο προαναφερθέντων (integral και kolmogorov), ονομάζεται Taylor scale. Η απεικόνιση όλων των παραπάνω μπορεί να γίνει ευκολότερα στο φασματικό χώρο (χώρος συχνοτήτων). Στο σχήμα 1.1 φαίνεται το λογαριθμικό διάγραμμα, που δείχνει την κατανομή της τυρβώδους κινητικής ενέργειας σε σχέση με το μήκος κύματος [Kraichman - 1971]. Η ένταση της κινητικής ενέργειας της τύρβης ορίζεται ως: $E(k) \approx \varepsilon^{2/3} \cdot k^{-5/3}$, όπου το ε αναφέρεται στη σκέδαση ενέργειας και το k στο μήκος κύματος.



Σχήμα 1.1: Σχηματική αναπαράσταση της τυρβώδους φασματικής κινητικής ενέργειας σαν συνάρτηση του μήκους κύματος k [Norbert - 2002].

Για μικρά μήκη κύματος, τα οποία αντιστοιχούν σε μεγάλες δίνες, η ενέργεια ανά μονάδα μήκους κύματος αυξάνει με έναν νόμο δύναμης (power law) από k^2 έως k^4 . Το εύρος αυτής της περιοχής καθορίζεται από τις αστάθειες των μεγάλων δινών, οι οποίες εξαρτώνται από τις οριακές συνθήκες της ροής. Επιπλέον παρατηρείται ότι η κινητική ενέργεια παρουσιάζει ένα μέγιστο, που αντιστοιχεί στην περιοχή των integral scales, κάτι το οποίο είναι φυσιολογικό και αναμενόμενο, λόγω του ότι οι δίνες αυτού του μεγέθους περιέχουν το μεγαλύτερο ποσοστό της κινητικής ενέργειας

ολόκληρου του φάσματος. Για μεγαλύτερα μήκη κύματος, εμφανίζεται μία περιοχή η οποία είναι γνωστή ως inertial subrange, το κύριο χαρακτηριστικό της οποίας είναι η σχέση που παρουσιάζεται μεταξύ της κινητικής ενέργειας και του μήκους κύματος, γνωστής και ως νόμος $-5/3$. Πέραν αυτής της περιοχής οριοθετείται το τελευταίο εύρος των κλιμάκων, το άνω όριο της οποίας καθορίζεται από την κλίμακα του Kolmogorov και στην οποία κυριαρχεί η επίδραση του ιξώδους. Η εκθετική μείωση της τυρβώδους κινητικής ενέργειας σε αυτό το εύρος εξηγείται από την επίδραση του ιξώδους στις δίνες, των οποίων το μέγεθος είναι της τάξεως της κλίμακας του Kolmogorov. Από όλα τα παραπάνω γίνεται φανερό ότι σε ένα τυρβώδες ροϊκό πεδίο η κινητική ενέργεια μεταφέρεται από τις μεγαλύτερες δίνες σε μικρότερες, μέσω της αλληλεπίδρασης των τελευταίων (χωρίς να αποκλείεται σε ορισμένες περιπτώσεις η αντίθετη φορά στην κατεύθυνση κίνησης της ενέργειας -backscatter-), και εν συνεχεία σκεδάζεται δια μέσου των μικρότερων δινών με την επίδραση του ιξώδους σε αυτές [Norbert 2002].

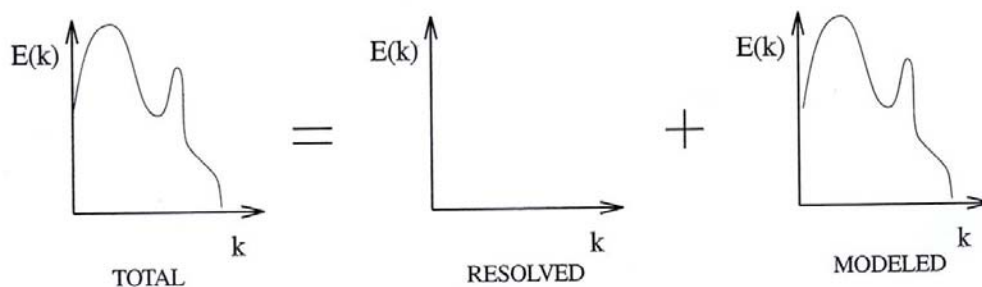
1.2 Πείραμα και αριθμητική προσομοίωση

Το πείραμα και η αριθμητική προσομοίωση είναι δύο ευρέως χρησιμοποιούμενα εργαλεία για τη μελέτη των φαινομένων καύσης και γενικότερα των ρευστομηχανικών προβλημάτων. Η πειραματική μελέτη της καύσης είναι κάτι που εφαρμόστηκε αρχικά για τον υπολογισμό των διαφόρων παραμέτρων που σχετίζονται με αυτή και συνεχίζει να εφαρμόζεται ακόμη και σήμερα. Παρόλα αυτά, λόγω της πολυπλοκότητας των πειραμάτων, της δυσκολίας εύρεσης και χρήσης κατάλληλων συσκευών για ικανοποιητικές μετρήσεις και του υψηλού κόστους των πειραματικών διατάξεων, είναι δύσκολη, εάν όχι ακατόρθωτη η πλήρης ανάλυση και η ανάλυση ευαισθησίας των διαφόρων κάθε φορά παραμέτρων. Για το λόγο αυτό η χρήση της υπολογιστικής ρευστομηχανικής (Computational Fluid Dynamics - CFD) χρησιμοποιείται όλο και περισσότερο σήμερα από την παγκόσμια ερευνητική κοινότητα. Όπως είναι γνωστό, οι διάφορες ροές και οτιδήποτε σχετίζεται με αυτές μπορούν να περιγραφούν - με ή χωρίς προσεγγίσεις και υποθέσεις - από ένα σύστημα μερικών διαφορικών (partial-differential) ή ολοκληρωτικών διαφορικών (integro-differential) εξισώσεων (Navier-Stokes), οι οποίες δεν μπορούν να λυθούν αναλυτικά πέραν ορισμένων χαρακτηριστικών και απλών περιπτώσεων [Ferziger - 2002, Chung

- 2002, Anderson - 1995, Pierre - 2004]. Για να είναι εφικτή η εύρεση μίας προσεγγιστικής λύσης αριθμητικά, θα πρέπει να χρησιμοποιηθεί μία μέθοδος διακριτοποίησης, το κύριο γνώρισμα της οποίας είναι η όσον το δυνατόν καλύτερη προσέγγιση του συστήματος των διαφορικών εξισώσεων με ένα τελικό σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων, η επίλυση του οποίου επιτυγχάνεται με τη βοήθεια ηλεκτρονικού υπολογιστή. Οι διάφορες προσεγγίσεις αφορούν ένα πεπερασμένο χώρο (domain) και / ή χρόνο (time), με τελικό αποτέλεσμα την αριθμητική επίλυση των εξισώσεων σε συγκεκριμένες θέσεις στο χώρο και χρόνο. Όπως η ακρίβεια των πειραματικών δεδομένων είναι άρρηκτα συνδεδεμένη με την ποιότητα και την ακρίβεια των διατάξεων που χρησιμοποιούνται, μία παρόμοια εξάρτηση παρουσιάζεται μεταξύ της ακρίβειας της τελικής προσεγγιστικής λύσης και της μεθόδου διακριτοποίησης, που χρησιμοποιήθηκε [Heath – 2002, Pierre - 2004]. Με βάση λοιπόν αυτά που αναφέρθηκαν στην ενότητα 1.1, για να έχουμε την καλύτερη δυνατή ποιότητα αποτελεσμάτων θα πρέπει να λάβουμε υπόψη μας όλες τις χωρικές και χρονικές κλίμακες (space and time scales) κατά την επίλυση των εξισώσεων Navier-Stokes. Για το λόγο αυτό η διακριτοποίηση του χώρου, θα πρέπει να είναι αρκετά πυκνή (fine), ώστε να είναι σε θέση να περιλάβει όλες τις κλίμακες (scales) αριθμητικά, πράγμα το οποίο επιτυγχάνεται με την επιλογή ενός χρονικού και χωρικού βήματος, το οποίο είναι μικρότερο αυτού που αντιστοιχεί στο χαρακτηριστικό μήκος και χρόνο, που σχετίζεται με τη μικρότερη ενεργή κλίμακα της αναλυτικής λύσης [Batchelor - 1998, Anderson - 1995, Marcel - 2008, Pierre - 2004]. Η μέθοδος αριθμητικής επίλυσης του συστήματος των διαφορικών εξισώσεων που περιγράφουν τη ροή για όλες τις χωρικές και χρονικές κλίμακες ονομάζεται άμεση αριθμητική επίλυση (DNS – Direct Numerical Simulation). Στην περίπτωση που το εύρος των κλιμάκων είναι πολύ μεγάλο, όπως για παράδειγμα στις τυρβώδεις ροές, το πρόβλημα επίλυσης γίνεται πολύ δύσκολο, με την έννοια ότι ο λόγος των μεγαλύτερων κλιμάκων προς τις μικρότερες αυξάνεται πάρα πολύ - integral scales / Kolmogorov scales = $O(Re^{3/4})$ [Pierre - 2004] -, πράγμα το οποίο αποτελεί ένα από τα μεγαλύτερα μειονεκτήματα της μεθόδου, καθώς είναι απαγορευτικό για την επίλυση προβλημάτων μεγάλων αριθμών Reynolds, που συναντώνται στην πράξη και για το λόγο αυτό η μέθοδος αυτή παραμένει ερευνητικού κυρίως ενδιαφέροντος [Norbert - 2002, Ferziger - 2002, Chung - 2002, Anderson - 1995]. Για να είμαστε λοιπόν σε θέση να υπολογίσουμε αριθμητικά μία προσεγγιστική λύση πρέπει να

μειώσουμε τον αριθμό των βαθμών ελευθερίας, για τις οποίες επιλύουμε το σύστημα των εξισώσεων που περιγράφουν το πρόβλημα, χωρίς όμως να επηρεάσουμε, όσο είναι αυτό εφικτό το τελικό αποτέλεσμα. Υπάρχουν διάφοροι τρόποι μείωσης του αριθμού των βαθμών ελευθερίας του προβλήματος [Pierre - 2004]:

- 1) Υπολογίζοντας τη στατιστική μέση τιμή της προσεγγιστικής λύσης άμεσα (Reynolds Averaged Navier Stokes - RANS) [Launder - 1972], μέθοδος η οποία χρησιμοποιείται ευρέως στις βιομηχανικές εφαρμογές, λόγω της απλότητας και της ταχύτητας που αυτή προσφέρει. Στην μέθοδο αυτή η ακριβής λύση ϕ θεωρείται ότι αποτελεί το άθροισμα δύο πεδίων, της στατιστικής μέσης τιμής και της διακύμανσης, $\phi = \bar{\phi} + \phi'$. Ο διαχωρισμός αυτός είναι γνωστός στην αγγλική βιβλιογραφία ως Reynolds Decomposition [Norbert - 2002, Pope - 2003, Tennekes - 2001, Jean - 2000]. Μία γραφική απεικόνιση του τρόπου λειτουργίας της μεθόδου φαίνεται στο σχήμα 1.2, στο οποίο απεικονίζεται το ενεργειακό φάσμα της λύσεως στο φασματικό χώρο και το άθροισμα των δύο προαναφερθέντων πεδίων.

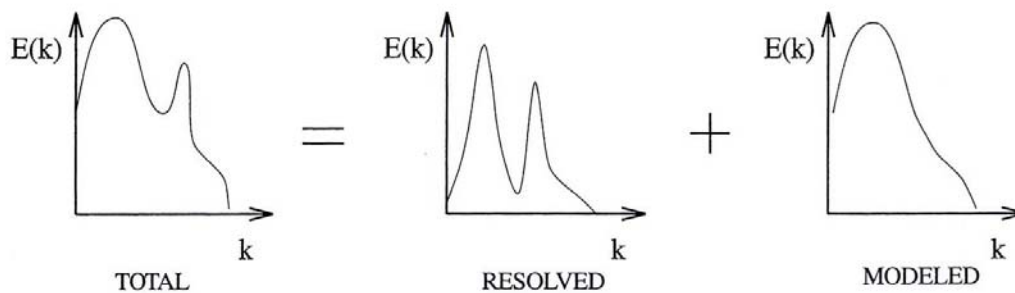


Σχήμα 1.2: Ανάλυση του ενεργειακού φάσματος της λύσεως με βάση τη μέθοδο RANS - Reynolds Averaged Navier Stokes - (συμβολική αναπαράσταση) [Pierre - 2004].

Η διακύμανση στην περίπτωση αυτή δεν προσομοιώνεται άμεσα από το υπολογιστικό σχήμα (numerical scheme) που χρησιμοποιείται, αλλά λαμβάνεται υπόψη μέσω ενός τυρβώδους μοντέλου. Το μαθηματικό μοντέλο που προκύπτει είναι αυτό των σταθερών στο χρόνο εξισώσεων Navier-Stokes. Η μέθοδος αυτή είναι κατάλληλη για προσομοίωση και εύρεση μέσων τιμών, μόνον εφόσον το μοντέλο τύρβης που χρησιμοποιείται είναι ικανό να αναπαραστήσει τη διακύμανση αποτελεσματικά [Pierre - 2004].

- 2) Υπολογίζοντας μόνο συγκεκριμένα modes χαμηλών κυρίως συχνοτήτων (της τάξεως των εκατοντάδων hertz) και το μέσο πεδίο (mean field). Η αριθμητική

αυτή προσέγγιση αναφέρεται με διάφορες ονομασίες, ανάλογα με το πόσο πυκνό ή αραιό είναι το πλέγμα της αριθμητικής διακριτοποίησης που χρησιμοποιείται και του αριθμού των modes που υπολογίζονται: Unsteady Averaged Navier Stokes (URANS) , Semi - Deterministic Simulation (SDS) [Pope - 2002], Very Large-Eddy Simulation (VLES) [Pope - 2002, Ferziger - 2002] και μερικές φορές Coherent Structure Capturing [Van der Ven - 1995, Bastin - 1997]. Στην κατηγορία αυτή το ροϊκό πεδίο ϕ θεωρείται ότι είναι το άθροισμα τριών όρων: ο πρώτος αναπαριστά το χρονικό μέσο της ακριβούς λύσης, ο δεύτερος το στατιστικό μέσο υπό συνθήκη (conditional statistical average) και ο τρίτος την τυρβώδη διακύμανση. Η γραφική αναπαράσταση του τρόπου λειτουργίας της συγκεκριμένης μεθόδου φαίνεται στο σχήμα 1.3, η οποία αφορά στο φασματικό χώρο - Fourier space [Pierre - 2004].

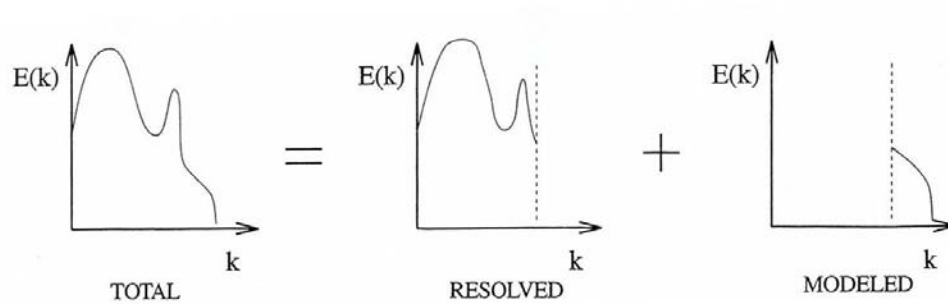


Σχήμα 1.3: Ανάλυση του ενεργειακού φάσματος της λύσεως με βάση τη μέθοδο URANS - Unsteady Reynolds Averaged Navier Stokes -, στην περίπτωση ύπαρξης μίας κυρίαρχης / επικρατέστερης συχνότητας (συμβολική αναπαράσταση) [Pierre - 2004].

Όπως στην προηγούμενη μέθοδο έτσι και σε αυτή η τυχαία διακύμανση λαμβάνεται υπόψη μέσω κάποιου μοντέλου, ενώ το άθροισμα της χρονικής μέσης τιμής και της μέσης τιμής υπό συνθήκη, αποτελεί τη μεταβλητή που υπολογίζεται από το μαθηματικό μοντέλο. Εφόσον η περίπτωση αυτή αποτελεί μία μεταβλητή χρονικά προσέγγιση, σε αντίθεση με τη σταθερή χρονικά προηγούμενη, η τελική λύση προσομοιώνεται καλύτερα, λόγω των περισσότερων δεδομένων που περιέχονται σε αυτή.

- 3) Υπολογίζοντας τα modes χαμηλών συχνοτήτων στο χώρο άμεσα και μοντελοποιώντας την επίδραση των modes υψηλών συχνοτήτων, σε αυτά των χαμηλών συχνοτήτων (Large Eddy Simulation - LES), με τη χρησιμοποίηση

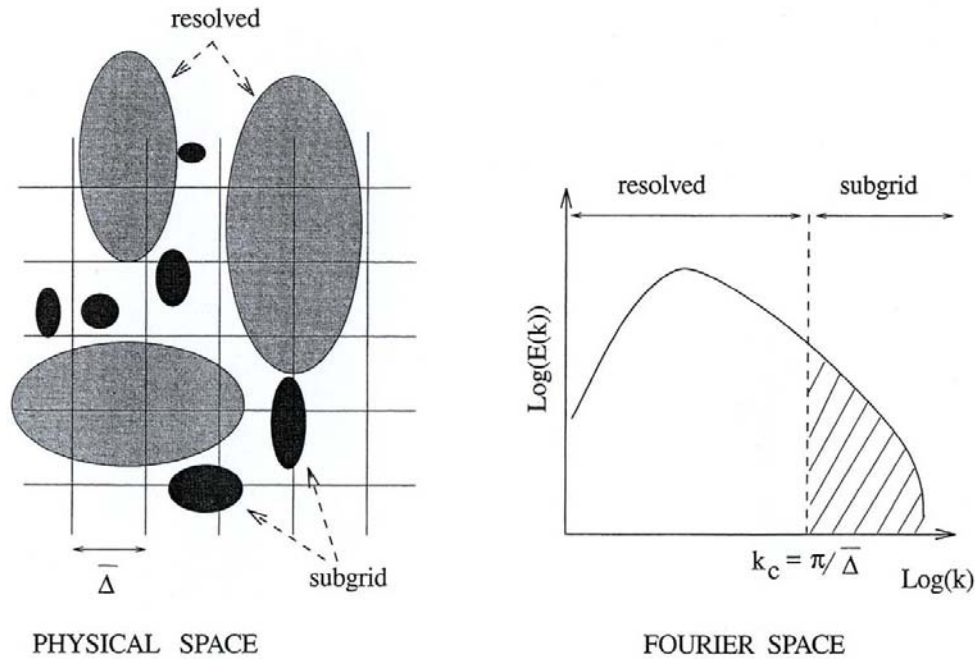
κατάλληλων υπολογιστικών εργαλείων. Η συγκεκριμένη μέθοδος αποτελεί το αντικείμενο αυτής της διδακτορικής διατριβής και θα αναλυθεί διεξοδικότερα παρακάτω. Προς το παρόν στο γράφημα του σχήματος 1.4 απεικονίζεται η γενική ιδέα εφαρμογής της [Pierre - 2004, Pope - 2003, Ferziger - 2002, Launder - 1972].



Σχήμα 1.4: Ανάλυση του ενεργειακού φάσματος της λύσεως με βάση τη μέθοδο LES –Large Eddy Simulation-(συμβολική αναπαράσταση) [Pierre - 2004].

1.3 Προσομοίωση μεγάλων δινών και πρόβλημα κλεισίματος (LES – closure problem)

Για την κατανόηση του όρου προσομοίωσης μεγάλων δινών (Large-Eddy-Simulation - LES) [Ferziger - 2002, Chung - 2002, Anderson - 1995, Marcel - 2008] είναι απαραίτητος ο διαχωρισμός των κλιμάκων (scales) της τύρβης σε δύο μεγάλες κατηγορίες, με απώτερο σκοπό τη μείωση των βαθμών ελευθερίας του προβλήματος. Για να είναι εφικτός ένας τέτοιος διαχωρισμός πρέπει να οριστεί μία κλίμακα αποκοπής (cutoff length scale). Οι κλίμακες, οι οποίες είναι μεγαλύτερες από το μήκος της κλίμακας αποκοπής (cutoff length) ονομάζονται μεγάλες κλίμακες ή κλίμακες οι οποίες υπολογίζονται αναλυτικά (large scales και / ή resolved scales), ενώ αυτές που είναι μικρότερες αυτού του ορίου, μικρές ή υποπλεγματικές κλίμακες (small scales και / ή unresolved scales). Τα παραπάνω φαίνονται στο σχήμα 1.5, όπου η αριστερή πλευρά αυτού αναφέρεται στο φυσικό χώρο και η δεξιά αφορά στο φασματικό χώρο (Fourier space).



Σχήμα 1.5: Σχηματική αναπαράσταση του απλούστερου διαχωρισμού των κλιμάκων: το φίλτρο του πλέγματος και το θεωρητικό φίλτρο είναι τα ίδια, τα οποία αναπαριστώνται στο χώρο του φάσματος (Fourier space) με ένα μήκος κύματος αποκοπής, το οποίο διαχωρίζει τις κλίμακες που επιλύονται αναλυτικά (resolved scales), με τις υποπλεγματικές κλίμακες (subgrid scales). Το μήκος κύματος αποκοπής δηλώνεται με k_c , το οποίο υπολογίζεται άμεσα από το μήκος του φίλτρου αποκοπής $\bar{\Delta}$ στο φυσικό χώρο. Στη συγκεκριμένη περίπτωση, το $\bar{\Delta}$ θεωρείται ίσο με το μήκος του υπολογιστικού πλέγματος [Pierre – 2004].

Στη μέθοδο προσομοίωσης μεγάλων δινών (Large-Eddy-Simulation - LES), οι μεγαλύτερες τρισδιάστατες, ασταθείς κλίμακες (scales) τύρβης επιλύονται αναλυτικά και άμεσα, ενώ η επίδραση των μικρότερων λαμβάνεται υπόψη με τη βοήθεια και τη χρησιμοποίηση ενός μοντέλου. Ο διαχωρισμός μεταξύ τους επιτυγχάνεται με τη χρησιμοποίηση φίλτρων χαμηλών συχνοτήτων (low pass filter), τα οποία καθορίζουν τη συχνότητα αποκοπής. Η βασική ιδέα της μεθόδου στηρίζεται στο γεγονός ότι οι μεγάλες κλίμακες τύρβης περιέχουν το μεγαλύτερο ποσοστό ενέργειας, σε αντίθεση με τις μικρές, οι οποίες σχετίζονται με τη σκέδαση αυτής. Συμπερασματικά λοιπόν είναι δυνατό να λεχθεί ότι η επίλυση των μεγάλων κλιμάκων και η μοντελοποίηση της επίδρασης και / ή της συσχέτισης των μικρών με τις μεγάλες μπορεί να προσφέρει μία αρκετά καλή προσέγγιση του πεδίου ροής, που επιλύεται.

Χρησιμοποιώντας ως μέτρο σύγκρισης την υπολογιστική ισχύ που απαιτείται για τις μεθόδους που αναφέρθηκαν παραπάνω, μπορούμε να συμπεράνουμε ότι η

προσομοίωση μεγάλων δινών βρίσκεται ανάμεσα στις μεθόδους RANS, η οποία αποτελεί το κάτω όριο αυτής της κλίμακας, και DNS, η οποία βρίσκεται στο άνω όριο αυτής. Το αριθμητικό κόστος για μία προσομοίωση μεγάλων δινών (LES) είναι μεγαλύτερο από τη μέθοδο RANS και μικρότερο της μεθόδου DNS, ενώ δίνει πολύ καλύτερα αποτελέσματα από την πρώτη - από την οποία προκύπτουν μόνο οι μέσες τιμές των διαφόρων μεγεθών προς επίλυση - και λιγότερο αναλυτικά αποτελέσματα από τη δεύτερη.

Ωστόσο τόσο η μέθοδος RANS, όσο και η αντίστοιχη LES παρουσιάζουν ένα βασικό μειονέκτημα, το οποίο είναι γνωστό στη βιβλιογραφία ως πρόβλημα κλεισίματος (closure problem). Κατά την εφαρμογή της μεθόδου RANS στο σύστημα των εξισώσεων που περιγράφει το πρόβλημα, δημιουργούνται, λόγω των μη γραμμικών όρων και των όρων συναγωγής της εξίσωσης ορμής, επιπρόσθετοι όροι της μορφής $\overline{u'_i \cdot u'_j}$, όπου το u'_i είναι η διακύμανση της ταχύτητας, η ομαδοποίηση των οποίων αποτελεί έναν τανυστή, που ονομάζεται τανυστής υποπλεγματικών κλιμάκων (subgrid stress tensor). Ο τανυστής αυτός αποτελείται από 6 συσχετίσεις (correlations) μεταξύ των διακυμάνσεων της ταχύτητας, οι οποίες περιγράφουν την επίδραση αυτών στο μέσο πεδίο. Λόγω του ότι οι όροι αυτοί είναι άγνωστοι, απαιτείται ο προσδιορισμός επιπλέον εξισώσεων, κάτι το οποίο δεν είναι αδύνατο, οδηγεί όμως το τελικό σύστημα των εξισώσεων σε αδιέξοδο, καθώς οι επιπλέον εξισώσεις περιλαμβάνουν όρους της μορφής $\overline{u'_i \cdot u'_j \cdot u'_k}$, οι οποίες αποτελούν τριπλές συσχετίσεις μεταξύ των διακυμάνσεων της ταχύτητας. Η αναγωγική αυτή διαδικασία αυξάνει κάθε φορά το μέγεθος του τανυστή με αποτέλεσμα το τελικό σύστημα που προκύπτει να παραμένει ανεπίλυτο, καθώς ο τελικός αριθμός των αγνώστων είναι μεγαλύτερος από αυτό των εξισώσεων. Συμπερασματικά λοιπόν το παραπάνω πρόβλημα είναι αδύνατο να επιλυθεί με την προαναφερθείσα αναγωγική μέθοδο. Επιβάλλεται λοιπόν ένας διαφορετικός τρόπος προσέγγισης, αυτός που αφορά τη μοντελοποίηση των αγνώστων όρων. Διάφορα μοντέλα που δίνουν λύση στο παραπάνω πρόβλημα περιγράφονται αναλυτικά από τους Launder - 1972, Marcel - 2008, Pierre - 2004.

Σε συμφωνία με τα παραπάνω, κατά την εφαρμογή της μεθόδου LES, και συγκεκριμένα στο στάδιο κατά το οποίο γίνεται η εφαρμογή του φίλτρου στο σύστημα των διαφορικών εξισώσεων που περιγράφουν το εκάστοτε πρόβλημα, δημιουργούνται όροι, η αριθμητική επίλυση των οποίων είναι αναπόφευκτη χωρίς τη

χρησιμοποίηση κάποιου μοντέλου, αποτελεσματικού όσο αφορά την πρόβλεψή τους. Οι άγνωστοι όροι (subgrid ή / και residual scale terms) που εμφανίζονται λόγω της αλληλεπίδρασης των μικρών με τις μεγάλες κλίμακες τύρβης, επιλύονται με τη χρησιμοποίηση διαφόρων μοντέλων φυσικής ή μη σημασίας. Συνοψίζοντας μπορούμε να αναφέρουμε ότι η μέθοδος LES γίνεται με εφαρμογή τεσσάρων βασικών βημάτων-σταδίων [Pope - 2003]:

- 1) Μία διαδικασία εφαρμογής ενός φίλτρου στο φυσικό ή στο φασματικό χώρο, η οποία αναλύει την ταχύτητα u σε ένα άθροισμα μίας μέσης τιμής, που αποτελεί τη φιλτραρισμένη συνιστώσα (filtered, resolved) - συνιστώσα η οποία υπολογίζεται αριθμητικά και εξαρτάται από τα γεωμετρικά μακροσκοπικά χαρακτηριστικά της εκάστοτε προς προσομοίωση διάταξης - , και μίας διακύμανσης, η οποία αντιπροσωπεύει την αφιλτράριστη συνιστώσα (unfiltered, unresolved) - συνιστώσα η επίδραση της οποίας στην προηγούμενη λαμβάνεται υπόψη μέσω μοντέλου και δεν υπολογίζεται αριθμητικά - . Η πρώτη - τρισδιάστατη και χρονικά μεταβαλλόμενη - αντιπροσωπεύει τις μεγάλες κλίμακες τύρβης (large scales), ενώ η δεύτερη αφορά στις μικρές κλίμακες (small scales) και παρουσιάζει έναν πιο γενικό χαρακτήρα και συμπεριφορά, η οποία καθορίζεται από το ιξώδες - χαρακτηριστική ιδιότητα του ρευστού -.
- 2) Οι εξισώσεις του ροϊκού πεδίου που αφορούν στο φιλτραρισμένο πεδίο της ταχύτητας προκύπτουν από τις εξισώσεις Navier–Stokes. Οι άγνωστοι όροι (residual stress tensor), προκύπτουν από την εφαρμογή του φίλτρου (1^ο στάδιο) σε αυτές.
- 3) Χρησιμοποίηση κατάλληλου μοντέλου, για την επίλυση του προβλήματος κλεισίματος (closure problem), που δημιουργείται από το φιλτράρισμα των εξισώσεων. Το βήμα αυτό αποτελεί ουσιαστικά τη διατύπωση μίας υπόθεσης με τη μορφή μαθηματικού μοντέλου, η οποία αφορά στη συμπεριφορά και στον τρόπο αλληλεπίδρασης των μικρών κλιμάκων σε σχέση με τις μεγάλες.
- 4) Οι τελικές φιλτραρισμένες εξισώσεις επιλύονται αριθμητικά - κατά τη διάρκεια της διαδικασίας λαμβάνεται υπόψη το μοντέλο που χρησιμοποιήθηκε στο τρίτο βήμα - για τη φιλτραρισμένη μόνο τιμή της ζητούμενης μεταβλητής, που αποτελεί μία καλή προσέγγιση της κίνησης των μεγάλων κλιμάκων τύρβης και του ροϊκού πεδίου που περιγράφουν.

1.4 Γενικά μοντέλα για την επίλυση του προβλήματος κλεισίματος (closure problem)

1.4.1. Εισαγωγή

Η μέθοδος προσομοίωσης μεγάλων δινών [Smagorinsky - 1963, Lilly - 1967, Deardorff - 1974] ξεκίνησε από την απαίτηση μελέτης μετεωρολογικών εφαρμογών και προσομοίωσης του ατμοσφαιρικού οριακού στρώματος [Mason - 1994]. Η ανάπτυξη και η εκτίμηση για την εγκυρότητα της μεθόδου ξεκίνησε από τη μελέτη ισότροπης τύρβης [Kraichnan - 1976, Chasnov - 1991], και εν συνεχεία εφαρμόστηκε στην περίπτωση πλήρους ανεπτυγμένης ροής σε κανάλι [Deardorff - 1970, Schuman - 1975, Moin & Kim - 1982, Piomelli - 1993]. Ένα πρωταρχικό βήμα στο πεδίο αυτό υπήρξε η εφαρμογή της μεθόδου σε πολύπλοκες γεωμετρίες, οι οποίες παρουσιάζονται στις περισσότερες μηχανολογικές εφαρμογές [Akselvoll & Moin - 1996, Haworth & Jansen - 2000]. Η συλλογή των εργασιών του Galperin και Orszag - 1993 παρουσιάζει μία περίληψη της ιστορίας της μεθόδου LES και του εύρους των εφαρμογών της.

Όπως αναφέρθηκε και σε προηγούμενη ενότητα, η μοντελοποίηση των υποπλεγματικών κλιμάκων τύρβης (subgrid scales), απαιτεί την εκτίμηση της αλληλεπίδρασης μεταξύ μικρών και μεγάλων κλιμάκων, η οποία μαθηματικά αποτελεί τον όρο $\nabla \cdot \tau$ (subgrid scale tensor), για την προσεγγιστική εκτίμηση του, μέσω του φιλτραρισμένου πεδίου \bar{u} . Οι δυνατότητες μοντελοποίησης μπορούν να χωριστούν σε δύο μεγάλες κατηγορίες [Sagaut - 2000]:

- 1) Functional modeling: Στην περίπτωση αυτή απαιτείται η μοντελοποίηση της επίδρασης του τανυστή υποπλεγματικών τάσεων στη φιλτραρισμένη τιμή του πεδίου ταχύτητας και όχι η προσέγγιση του ίδιου. Η επίλυση του προβλήματος κλεισίματος (closure problem) μπορεί μαθηματικά να εκφραστεί μέσω της σχέσεως: $u' = H(\bar{u})$ ή $\tau = H(\bar{u})$.
- 2) Structural modeling: Στην περίπτωση αυτή απαιτείται η προσέγγιση του τανυστή υποπλεγματικών κενών με κατασκευή του μέσω της φιλτραρισμένης τιμής ή από ανάπτυξη κάποιας σειράς (series expansion). Η υπόθεση που υπεισέρχεται με τη χρησιμοποίηση του μοντέλου είναι της μορφής: $\nabla \cdot \tau = H(\bar{u})$.

Στις επόμενες παραγράφους αναλύονται τα μοντέλα που χρησιμοποιούνται σε κάθε μία από τις παραπάνω κατηγορίες, με αναφορές από τη βιβλιογραφία και το διεθνή τύπο.

1.4.2 Functional modeling

Τα μοντέλα που ανήκουν σε αυτή την κατηγορία είναι δυνατόν χωριστούν στις παρακάτω γενικές περιοχές :

A) Φασματικά μοντέλα (spectral models):

Τα μοντέλα που ανήκουν σε αυτή την κατηγορία είναι όλα μοντέλα ιξώδους δίνης (eddy viscosity models), αφορούν στο φασματικό χώρο και βασίζονται στην υπόθεση κατά Kraichnan [Kraichnan - 1971]:

- 1) Μοντέλο Chollet - Lesieur [Chollet - 1981]: Το συγκεκριμένο μοντέλο χρησιμοποιεί μία αναλυτική έκφραση για το ιξώδες σε συνάρτηση του μήκους κύματος στο σημείο αποκοπής, γεγονός που το κάνει αποτελεσματικό στην πρόβλεψη των φαινομένων που λαμβάνουν χώρα στην περιοχή αυτή (π.χ. αύξηση της μεταφερόμενης ενέργειας προς τις υποπλεγματικές κλίμακες). Παρέχει δηλαδή την εξάρτηση του ιξώδους με την κατανομή της κινητικής ενέργειας στο σημείο αποκοπής. Μόνο το μέγεθος της μεταφερόμενης ενέργειας αποτελεί μεταβλητή και όχι η υποτιθέμενη μορφή αυτής.
- 2) Μοντέλο effective viscosity [Chollet - 1989]: Το μοντέλο αυτό αποτελεί στην ουσία μία απλούστευση του προηγούμενου και βασίζεται στις ίδιες υποθέσεις και παραδοχές. Το ιξώδες είναι ανεξάρτητο του μήκους κύματος και υπολογίζεται έτσι ώστε να εξασφαλίζει την ίδια μέση τιμή, με αυτή του μοντέλου Chollet - Lesieur. Είναι για το λόγο αυτό πιο εύκολο να υπολογιστεί, αλλά το βασικό μειονέκτημα του είναι ότι δεν λαμβάνει υπόψη τα φαινόμενα που συμβαίνουν στην περιοχή γύρω από τη συχνότητα αποκοπής.
- 3) Δυναμικό φασματικό μοντέλο (dynamic spectral model) [Metais - 1992]: Αποτελεί μία επέκταση και βελτίωση του πρώτου, η οποία επιτυγχάνεται με τη χρησιμοποίηση διαφορετικής κλίσης της φασματικής κατανομής ενέργειας,

στην περιοχή inertial subrange, από την αυτή που λαμβάνεται στην υπόθεση κατά Kraichnan (π.χ. $-5/3$). Ενώ λοιπόν το μοντέλο Chollet - Lesieur λαμβάνει υπόψη μόνο την κατανομή ενέργειας στην περιοχή της αποκοπής, το παρόν μοντέλο επεκτείνεται στην περιγραφή της κλίσης της καμπύλης κατανομής ενέργειας (στο φασματικό χώρο) στην ίδια περιοχή. Με τη βελτίωση αυτή, είναι δυνατή η μη χρησιμοποίηση του μοντέλου σε περιπτώσεις και σε περιοχές της ροής όπου η κινητική ενέργεια στη συχνότητα αποκοπής είναι μη μηδενική, αλλά η μεταφορά αυτής από τις μεγάλες στις υποπλεγματικές κλίμακες τύρβης είναι μηδενική. Οι υποθέσεις και η δυνατότητα πρόβλεψης τοπικών φαινομένων στην περιοχή της αποκοπής αυτού του μοντέλου είναι ίδιες με αυτές του μοντέλου Chollet – Lesieur.

- 4) Μοντέλο Lesieur – Rogallo [Lesieur - 1989]: Αποτελεί και αυτό, όπως το προηγούμενο επέκταση του μοντέλου Chollet – Lesieur, επέκταση η οποία αφορά τον υπολογισμό της εντάσεως μεταφοράς της ενέργειας μέσω μίας δυναμικά μεταβαλλόμενης διεργασίας. Λόγω αυτού είναι δυνατόν να ληφθούν υπόψη αλλαγές στη φύση της μεταφοράς ενέργειας προς τις υποπλεγματικές κλίμακες τύρβης, ενώ η δυναμική διαδικασία αφορά στην εισαγωγή περισσότερης πληροφορίας στο μοντέλο, μέσω της ενέργειας, που περικλείεται στις μεγαλύτερες από τις κλίμακες που επιλύονται.
- 5) Μοντέλα που βασίζονται στην αναλυτική θεωρία της τύρβης και των τυρβωδών ροών: Κύριο χαρακτηριστικό των μοντέλων αυτών είναι ότι υπολογίζουν το ιξώδες, που αφορά τις υποπλεγματικές κλίμακες, χωρίς καμία περαιτέρω υπόθεση για τη μορφή ή / και την κλίση του ενεργειακού φάσματος αυτών (η κλίση στην περιοχή του inertial subrange είναι αυτή του μοντέλου Chollet - Lesieur ($-5/3$)). Για το λόγο αυτό τα συγκεκριμένα μοντέλα γίνονται γενικότερα από όλα τα προηγούμενα, ικανά να συμπεριλάβουν πολύπλοκα φυσικά φαινόμενα. Η προσέγγιση αυτή έχει χρησιμοποιηθεί από τους Boersma - 1998, Chollet - 1983a, Chollet - 1983b και Bertoglio - 1984a, Bertoglio - 1984b. Το βασικό μειονέκτημα όμως αφορά στην κωδικοποίησή τους - για να είναι κατάλληλα για χρησιμοποίηση σε υπολογιστικούς κώδικες - και στην υπολογιστική ισχύ και χρόνο που απαιτούν για την επίλυση του προβλήματος.

B) Η επόμενη κατηγορία αναφέρεται σε μοντέλα που σχετίζονται με το φυσικό χώρο και στηρίζονται είτε στις κλίμακες που επιλύονται άμεσα, είτε στην ενέργεια στην περιοχή της αποκοπής, είτε τέλος στις υποπλεγματικές κλίμακες τύρβης. Αυτά είναι τα ακόλουθα :

- 1) Το μοντέλο Smagorinsky [Smagorinsky – 1963, Bogey - 2006]: Βασίζεται στον υπολογισμό διαφορών μεγεθών μέσω των κλιμάκων τύρβης, οι οποίες επιλύονται (resolved scales). Το συγκεκριμένο μοντέλο χρησιμοποιεί μία σχέση μεταξύ του ιξώδους των υποπλεγματικών κλιμάκων (subgrid viscosity) και των κλίσεων (gradients) των κλιμάκων που επιλύονται. Ως γνωστόν όμως αυτό εισάγει μία φυσική ασυνέχεια λόγω του ότι το ιξώδες των υποπλεγματικών κλιμάκων είναι μη μηδενικό καθώς το πεδίο ταχύτητας εμφανίζει χωρικές διακυμάνσεις, ακόμα και εάν αυτό είναι στρωτό και επιλύονται όλες οι κλίμακες. Η υπόθεση λοιπόν που συνδέει την ύπαρξη των υποπλεγματικών κλιμάκων με τις κλίσεις του μέσου πεδίου, απαιτεί την ανάπτυξη μοντέλων, τα οποία έχουν να κάνουν με ροές πλήρως τυρβώδεις ή περιλαμβάνουν υποπλεγματικές κλίμακες σε όλο το εύρος τους. Το συγκεκριμένο πρόβλημα παρουσιάζεται σε όλα τα μοντέλα, τα οποία στηρίζονται στις μεγάλες κλίμακες τύρβης.
- 2) Structure Function Model [Metais - 1992]: Αποτελεί επέκταση στο φυσικό χώρο των μοντέλων, τα οποία έχουν σαν βάση την ενέργεια στο σημείο αποκοπής. Οι εφευρέτες του [Metais - 1992] πρότειναν την εκτίμηση της ενέργειας στη συχνότητα αποκοπής με τη βοήθεια μίας δευτέρου βαθμού συνάρτησης ταχύτητας (second order velocity structure function). Η δυσκολία όμως αυτού να διατηρήσει την πληροφορία τοπικά σταθερή στο φυσικό και στο φασματικό χώρο, αποτελεί ένα από τα κυριότερα μειονεκτήματά του.
- 3) Μοντέλο βασισμένο στην κινητική ενέργεια των υποπλεγματικών κλιμάκων τύρβης [Horiuti - 1985, Schumann - 1975, Yoshizawa - 1991, Yoshizawa - 1985, Moeng - 1984, Stevens - 1999, Kim - 1999]: Στην περίπτωση αυτή η περιεχόμενη στο φάσμα κινητική ενέργεια αποτελεί μία επιπλέον μεταβλητή του προβλήματος, για την οποία επιλύεται μία ακόμη εξίσωση μεταφοράς. Για το λόγο αυτό είναι θεωρητικά πιο αποτελεσματικό από τα προηγούμενα, με το βασικό του όμως μειονέκτημα να παραμένει η αύξηση του αριθμού των

υποθέσεων που αυτό απαιτεί (μοντελοποίηση επιπλέον όρων, οριακές συνθήκες).

- 4) Μοντέλο Yoshizawa: Έχει βασικά τα ίδια πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα με το προηγούμενο, ανήκει όμως στην κατηγορία μοντέλων που στηρίζονται στις υποπλεγματικές κλίμακες, λόγω του ότι περιλαμβάνει μία επιπλέον εξίσωση για τη μεταφορά ενός μεγέθους, το οποίο σχετίζεται με μία χαρακτηριστική υποπλεγματική κλίμακα [Pierre - 2004].
- 5) Mixed Scale Model [Sagaut – 2000, Sagaut - 1996]: Βασίζεται στη συλλογή πληροφοριών που σχετίζονται τόσο με τις υποπλεγματικές κλίμακες, όσο και με αυτές που επιλύονται άμεσα, χωρίς ωστόσο να χρησιμοποιεί επιπρόσθετες εξισώσεις μεταφοράς, όπως συμβαίνει στη περίπτωση του μοντέλου Yoshizawa. Τα δεδομένα και τα μεγέθη που αφορούν στις υποπλεγματικές κλίμακες προκύπτουν από αυτά των μεγάλων κλιμάκων, με τη βοήθεια γραμμικής ή άλλου είδους παρεμβολής στο πεδίο συχνοτήτων (φασματικός χώρος – Fourier space). Το συγκεκριμένο μοντέλο μπορεί να χαρακτηριστεί σαν ένα ενδιάμεσο μοντέλο μεταξύ αυτών που βασίζονται στις υποπλεγματικές κλίμακες και αυτών που προκύπτουν με τη χρησιμοποίηση επιπλέον εξισώσεων από τις μεγάλες κλίμακες τύρβης.

Γ) Μία τρίτη ομάδα μοντέλων που ανήκουν στη πρώτη γενική κατηγορία που αναφέρθηκε στην αρχή της ενότητας 1.4.1 (structural modeling), αποτελείται κυρίως από μοντέλα, τα οποία αποτελούν βελτιώσεις των προηγούμενων στο φυσικό χώρο. Η βελτίωση αυτή δεν αφορά στην αλλαγή ή / και στην μετατροπή της δομής του μοντέλου εξολοκλήρου, αλλά στη διατήρηση αυτής σταθερής και στην πρόσθεση νέων μεταβλητών - στην περίπτωση των μοντέλων που στηρίζονται στις μεγάλες κλίμακες - , ή επιπλέον υποθέσεων. Στη συνέχεια παρουσιάζεται μία σειρά μοντέλων, τα οποία ανήκουν σε μία κατηγορία, κύριο χαρακτηριστικό της οποίας αποτελεί η χρησιμοποίηση μίας δυναμικής στο χώρο και στο χρόνο διαδικασίας, που αφορά στον υπολογισμό των διαφόρων αυτών σταθερών. Η γενική φιλοσοφία της όλης διαδικασίας σχετίζεται με την επιλογή ενός φίλτρου δοκιμής (test filter) και την εφαρμογή αυτού στις κλίμακες τύρβης που επιλύονται άμεσα. Το τελικό πεδίο που προκύπτει κατόπιν της εφαρμογής του φίλτρου δοκιμής αντιστοιχεί στις υψηλότερης συχνότητας κλίμακες τύρβης, οι οποίες λαμβάνονται υπόψη από την προσομοίωση. Τέτοιου τύπου διαδικασίες αποτελούν οι:

- 1) Germano - Lilly Dynamic Procedure: Ο Germano [Pierre - 2004, Germano - 1991, Stolz - 1999], πρότεινε έναν αλγόριθμο δυναμικού υπολογισμού της σταθεράς C_d του μοντέλου Smagorinsky, σε κάθε χωρική και χρονική θέση. Μέσω της διαδικασίας αυτής, η οποία είναι εφαρμόσιμη σε οποιοδήποτε μοντέλο, επιτυγχάνεται η χωρική και δυναμική εξάρτηση του μέχρι τώρα σταθερού (σε χώρο και σε χρόνο) συντελεστή C_d .
- 2) Lagrangian Dynamic Procedure: Αποτελεί διαδικασία κατά την οποία υπολογίζεται η μέση τιμή ενός συντελεστή κατά την ομοιογενή κατεύθυνση (homogeneous direction) και έχει ως βασικό μειονέκτημα τη μη εφαρμογή του μοντέλου σε πολύπλοκες γεωμετρίες, οι οποίες είναι εντελώς ανομοιογενείς. Μία τεχνική επίλυσης του προαναφερθέντος προβλήματος αποτελεί η επιλογή της τροχιάς των στοιχείων ρευστού και όχι της ομοιογενούς κατεύθυνσης, ως κατεύθυνση με βάση την οποία θα γίνει η εύρεση της μέσης τιμής [Meneveau - 1996].
- 3) Constrained Localized Dynamic Procedure [Pierre - 2004]: Αποτελεί μία διαδικασία, η οποία εφαρμόζεται σε περιπτώσεις ανομοιογένειας (heterogeneous direction) και βασίζεται στην ιδέα ελαχιστοποίησης ενός προβλήματος ολοκλήρωσης, μεταβλητού στο χώρο, και όχι τοπικού σε αυτόν - διαδικασία η οποία εφαρμόζεται στο μοντέλο Germano - Lilly -.

1.4.3 Structural modeling

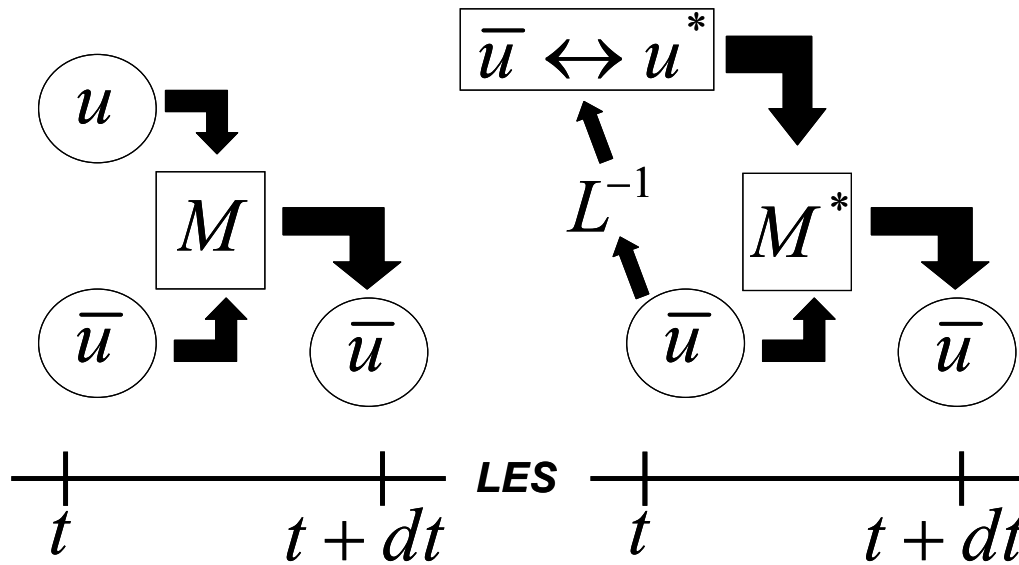
Η οικογένεια αυτών των μοντέλων δεν απαιτεί γνώση εκ των προτέρων της φύσης των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των υποπλεγματικών κλιμάκων και αυτών που επιλύονται άμεσα. Τα συγκεκριμένα μοντέλα μπορούν να χωριστούν στις παρακάτω γενικές κατηγορίες [Pierre - 2004]:

- 1) Μοντέλα που προκύπτουν από ανάπτυξη σειρών (formal series expansion): Χαρακτηριστικό των συγκεκριμένων αποτελεί η δυνατότητα δημιουργίας τους, χωρίς τη χρησιμοποίηση της γνώσης των φυσικών φαινομένων που λαμβάνουν χώρα κατά την εξέλιξη της ροής, παρά μόνο με την ανάλυση των διαφόρων όρων, που εμφανίζονται στις φιλτραρισμένες εξισώσεις της ροής (Navier-Stokes equations). Η κατηγορία αυτή περιλαμβάνει μοντέλα, τα οποία

προκύπτουν μέσω της διαδικασίας της προσεγγιστικής ανέλιξης (approximate deconvolution models) ή μη γραμμικά μοντέλα.

- 2) Μοντέλα το οποία στηρίζονται στην αρχή της ομοιότητας των κλιμάκων τύρβης (scale similarity models): Μέσω αυτής της ομοιότητας επιτυγχάνεται η συσχέτιση και ομοιότητα μεταξύ των διαφόρων δομών της ροής σε διάφορα επίπεδα φιλτραρίσματος. Παρόλο που τα μοντέλα αυτά είναι παρόμοια σαν βάση με τα προηγούμενα - τύπου ανέλιξης - , η βασική διαφορά τους με τα τελευταία οφείλεται στο γεγονός της φυσικής τους βάσης και όχι των μαθηματικών υποθέσεων.
- 3) Μοντέλα συνδυασμού (mixed model): Όπως αναφέρει και το όνομά τους αποτελούν μία κατηγορία μοντέλων, η οποία είναι ένας γραμμικός συνδυασμός μεταξύ των structural και functional μοντέλων. Παρόλο που ξεκίνησαν στη βάση της ομοιότητας κλιμάκων (scale similarity), πρόσφατες αναφορές δείχνουν ότι αποτελούν φυσικό μέρος των μοντέλων ανέλιξης (deconvolution models).
- 4) Στην πρώτη από τις τρεις προαναφερθείσες κατηγορίες ανήκουν τα μοντέλα ανέλιξης (deconvolution), τα οποία ορισμένες φορές αναφέρονται και ως μοντέλα αναστροφής της διαδικασίας φιλτραρίσματος (defiltering models): Η βασική ιδέα πάνω στην οποία στηρίζεται η δημιουργία και η εφαρμογή τους απεικονίζεται στο σχήμα 1.6 - στην αριστερή πλευρά του οποίου αναπαριστάται μία ιδανική προσομοίωση μεγάλων δινών (LES), ενώ στη δεξιά πλευρά αυτού μία ιδανική προσέγγιση της προσομοίωσης μεγάλων δινών - και είναι η εξής: η όλη διαδικασία στοχεύει στη δυνατότητα υπολογισμού και στην ανακατασκευή ή / και όσο το δυνατόν καλύτερη αναπαραγωγή του αφιλτράριστου πεδίου από το φιλτραρισμένο, το οποίο έχει επιλυθεί.

Τα γενικά μοντέλα συνέλιξης δεν βασίζονται σε φυσικές παραδοχές, πράγμα το οποίο συμβαίνει με τα μοντέλα τύπου eddy viscosity, (με την παραδοχή κλίσης ή βαθμίδας - gradient assumption hypothesis -), και επιπλέον οι μοντελοποιημένες τυρβώδεις τάσεις συγκλίνουν ασυμπτωτικά στην ακριβή λύση, εφόσον το μήκος του φίλτρου συγκλίνει στο μηδέν.



Σχήμα 1.6: Αριστερά: Γραφική αναπαράσταση μίας ιδανικής προσομοίωσης μεγάλων δινών (LES – Large Eddy Simulation). Δεξιά: Γραφική αναπαράσταση της αντίστροφης μοντελοποίησης και ανακατασκευής του αφιλτράριστου πεδίου από το φιλτραρισμένο [Kueng - 2007].

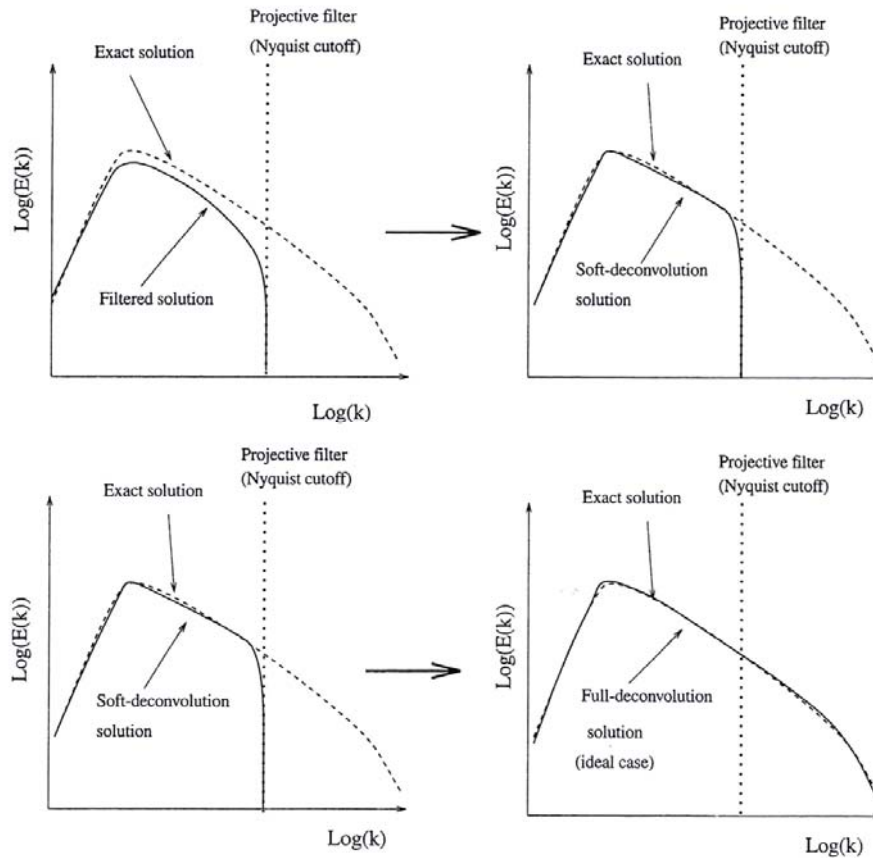
Πριν τη θεωρητική ανάλυση της διεργασίας είναι σκόπιμο να αναφέρουμε τα εξής :

- 1) Η μέθοδος είναι αποτελεσματική στην περίπτωση που το είδος του φίλτρου που χρησιμοποιείται είναι αντιστρέψιμο. Σε αντίθετη περίπτωση η απώλεια πληροφορίας κατά τη διάρκεια της διαδικασίας αντιστροφής του φίλτρου είναι αρκετά μεγάλη με τελικό απότοκο τη λανθασμένη σε μικρό ή σε μεγάλο βαθμό ανακατασκευή της αφιλτράριστης τιμής του πεδίου της ταχύτητας από τη φιλτραρισμένη αυτού. Θεωρητικά η αντιστροφή της διαδικασίας φιλτραρίσματος είναι δυνατή στην περίπτωση ομαλών φίλτρων [Pierre - 2004].
- 2) Στην πράξη, κατά τη διάρκεια διεξαγωγής της προσομοίωσης το φίλτρο λόγω του πλέγματος είναι πάντα υπαρκτό, εξαιτίας του πεπερασμένου αριθμού διακριτών κόμβων ή σημείων που χρησιμοποιούνται για την επίλυση του προβλήματος. Επιπλέον ως συνέπεια του θεωρήματος Nyquist [Brigham - 1974], ένα φίλτρο μη αντιστρεπτό, με μήκος και χρόνο αποκοπής ίσο με $2\Delta x$ και $2\Delta t$ αντίστοιχα - το Δx αντιπροσωπεύει το μήκος του υπολογιστικού πλέγματος που χρησιμοποιείται για την προσομοίωση και το Δt το χρονικό βήμα του αριθμητικού σχήματος επίλυσης -, είναι και αυτό σε συνεχή παρουσία. Το φίλτρο δηλαδή που χρησιμοποιείται στις πρακτικές εφαρμογές

είναι ένας συνδυασμός μεταξύ ενός φίλτρου ανέλιξης με μήκος $\bar{\Delta}$ και ενός φίλτρου που σχετίζεται με το μήκος πλέγματος που χρησιμοποιείται. Το τελευταίο μπορεί να θεωρηθεί φίλτρο με απότομη αποκοπή σε μήκος κύματος $k_c = \pi/\Delta x$. Με βάση τα παραπάνω συνάγεται το συμπέρασμα ότι η διαδικασία της ανέλιξης δεν είναι δυνατό να ανακατασκευάσει δομές και κλίμακες τύρβης μικρότερες από $2\Delta x$ [Pierre - 2004]. Ακολουθώντας την ορολογία κατά Adams προκύπτουν τα δύο παρακάτω προβλήματα :

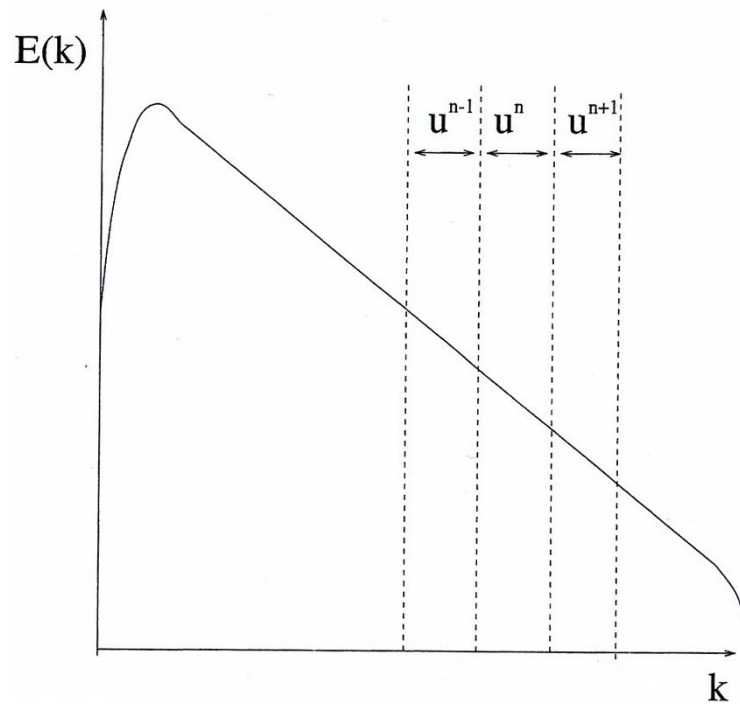
- 1) Το πρόβλημα της ήπιας ανέλιξης (soft deconvolution) : αναφέρεται στην αναπαραγωγή του αφιλτράριστου πεδίου από το φιλτραρισμένο για συχνότητες από 0 έως $\pi/\Delta x$, η οποία είναι δυνατόν να επιτευχθεί με δύο τρόπους :
 - I. Διαδικασίες, οι οποίες στηρίζονται στην επαναληπτική ανακατασκευή - αναπαραγωγή - του αντίστροφου φίλτρου [Adams - 2001, Stolz - 2001a, Stolz 2001b, Stolz - 1999a, Stolz - 1999b].
 - II. Διαδικασίες, οι οποίες βασίζονται στην ανακατασκευή του φίλτρου με την ανάπτυξη αυτού σε σειρά Taylor [Lubbers - 2001].
- 2) Το πρόβλημα της ισχυρής ανέλιξης (hard deconvolution): αποτελεί το πρόβλημα το οποίο δεν επιλύεται στην περίπτωση I, καθώς η επίδραση των κλιμάκων τύρβης, μικρότερες του $2\Delta x$, δεν έχουν ληφθεί υπόψη σε αυτήν, αφήνοντας ανεπίλυτο το πρόβλημα κλεισίματος (closure problem) των εξισώσεων. Η πληροφορία λοιπόν, που εμπεριέχεται στις κλίμακες αυτές χάνεται εξολοκλήρου και για το λόγο αυτό απαιτείται η χρησιμοποίηση ενός μοντέλου - μπορεί να χρησιμοποιηθεί ένα μοντέλο της κατηγορίας functional - για την δυνατότητα κέρδους του μεγαλύτερου μέρους αυτής.

Στο σχήμα 1.7 παρουσιάζονται γραφικά τα δύο παραπάνω προβλήματα και η τελική θεωρητική επίλυση αυτών.



Σχήμα 1.7: Σχηματική αναπαράσταση του συνολικού προβλήματος ανέλιξης. Επάνω: Πρόβλημα ήπιας ανέλιξης. Κάτω: Ιδεατή θεωρητικά λύση για το συνολικό πρόβλημα (ήπιας και ισχυρής) ανέλιξης [Pierre - 2004].

Στη δεύτερη υποκατηγορία των μοντέλων structural, ανήκουν τα μοντέλα που βασίζονται στην αρχή της ομοιότητας των κλιμάκων τύρβης (scale similarity models) [Bardina - 1980]. Με βάση την υπόθεση αυτή θεωρείται μία ομοιότητα μεταξύ των μεγαλύτερων κλιμάκων τύρβης που μοντελοποιούνται και των μικρότερων κλιμάκων τύρβης που επιλύονται αναλυτικά. Με αυτή λοιπόν τη θεώρηση η καμπύλη της ενέργειας όπως αυτή απεικονίζεται στο φασματικό χώρο, μπορεί να θεωρηθεί ότι αποτελείται από 3 περιοχές: 1) τις μεγαλύτερες κλίμακες τύρβης που επιλύονται, 2) τις μικρότερες κλίμακες τύρβης και 3) τις υποπλεγματικές κλίμακες τύρβης οι οποίες δεν επιλύονται, αλλά μοντελοποιούνται. Με βάση λοιπόν τα παραπάνω η καμπύλη της ενέργειας στο χώρο του φάσματος είναι αυτή που εικονίζεται στο σχήμα 1.8, στο οποίο φαίνονται καθαρά οι τρεις προαναφερθείσες περιοχές.



Σχήμα 1.8: Φασματική ανάλυση βασισμένη στην υπόθεση ομοιότητας κλιμάκων (scale similarity hypothesis) [Pierre - 2004].

Το πιο χαρακτηριστικό παράδειγμα μοντέλου που ανήκει σε αυτή την κατηγορία είναι το μοντέλο Bardina (Bardina's model) [Bardina - 1980], το οποίο χρησιμοποιεί μία πολυωνυμική αναστροφή, σε σχέση με το φίλτρο που χρησιμοποιείται [Guerts - 2007]. Η φυσική σημασία του μοντέλου εμπεριέχεται στο γεγονός ότι καταφέρνει να μοντελοποιήσει τον τυρβώδη τανυστή τάσεων (turbulent stress tensor), αγνοώντας τα Reynolds και Cross stresses, χρησιμοποιώντας παράλληλα μόνο τα Leonard stresses [James - 2000], για τα οποία ένα άλλο φίλτρο (explicit filter) εφαρμόζεται στη φιλτραρισμένη τιμή του πεδίου ροής.

Επιπρόσθετα το μοντέλο Liu-Meneveau-Katz [Pierre - 2004], το οποίο στην ουσία αποτελεί μία γενίκευση του προηγούμενου μοντέλου, χρησιμοποιεί δύο διαδοχικά φίλτρα με διαφορετικές συχνότητες αποκοπής, με τελικό αποτέλεσμα την ικανότητα υπολογισμού των διακυμάνσεων των μικρών κλιμάκων τύρβης.

Μία παραλλαγή του μοντέλου Liu-Meneveau-Katz, αποτελεί το μοντέλο δυναμικής ομοιότητας (dynamic similarity model), με βάση το οποίο ο υπολογισμός της εντάσεως (intensity) του τανυστή υποπλεγματικών κενών (subgrid scale tensor) γίνεται με μία δυναμική διαδικασία, πράγμα το οποίο δεν γινόταν με κανένα από τα προηγούμενα μοντέλα που αναφέρθηκαν.

Το κύριο μειονέκτημα των μοντέλων της κατηγορίας functional είναι, ότι παρόλο που λαμβάνουν υπόψη τη μεταφορά ενέργειας μεταξύ πλεγμάτων και υποπλεγμάτων κλιμάκων τύρβης, η πρόβλεψη τους αναφορικά με τη δομή του τανυστή υποπλεγμάτων κλιμάκων είναι μέτρια, με τελικό αποτέλεσμα τη λανθασμένη σε μικρό ή σε μεγάλο βαθμό προσέγγιση της τελικής λύσεως. Από την άλλη πλευρά, τα μοντέλα τα οποία βασίζονται στην υπόθεση ομοιότητας μεταξύ των διαφόρων κλιμάκων τύρβης ή στη μέθοδο της συνέλιξης, ενώ προσεγγίζουν καλύτερα τη δομή του τανυστή υποπλεγμάτων κλιμάκων, η μοντελοποίηση της μεταφοράς της ενέργειας από τις μεγάλες προς τις μικρές κλίμακες τύρβης (στη συχνότητα αποκοπής - φασματικός χώρος -) δεν επιτυγχάνεται το ίδιο αποτελεσματικά, όπως στα προηγούμενα μοντέλα. Η απαίτηση λοιπόν του συνδυασμού των παραπάνω, η οποία αφορά τόσο στη σωστή πρόβλεψη της δομής του τανυστή υποπλεγμάτων κενών, όσο και στη σωστή μοντελοποίηση μεταφοράς ενέργειας αποτέλεσε το πρώτο βήμα στη δημιουργία μοντέλων, γνωστά με το όνομα mixed models.

Ο Shao et al. [Shao - 1999] πρότειναν ένα διαχωρισμό της μεταφερόμενης κινητικής ενέργειας, που λαμβάνει χώρα στο σημείο αποκοπής (σημείο στο οποίο ενεργεί το φίλτρο), ο οποίος αναπαριστά το ρόλο των functional και scale similarity models, μέσω της θεώρησης του τανυστή των υποπλεγμάτων κενών ως άθροισμα 2 όρων, ενός που αναφέρεται στο αργά μεταβαλλόμενο μέρος του τανυστή και ενός που αφορά στο γρήγορα μεταβαλλόμενο. Παραδείγματα τέτοιων μοντέλων αποτελούν τα μοντέλα Smagorinsky - Bardina [Pierre - 2004], one - parameter dynamic mixed model -, το οποίο χρησιμοποιεί μία δυναμική διαδικασία υπολογισμού βασισμένη στη σχέση του Germano - Lilly [Sheikhi - 2004] και το μοντέλο N-parameter mixed dynamic [Pierre - 2004], που είναι στην ουσία μία επέκταση του τελευταίου.

Κεφάλαιο 2^ο

Μαθηματική περιγραφή των εξισώσεων – Διαδικασία φιλτραρίσματος στον πολυωνυμικό χώρο

Εισαγωγή

Σκοπός αυτού του κεφαλαίου είναι η ανάλυση των εξισώσεων για τυρβώδη, μίας φάσεως, ενός στοιχείου και σταθερής πυκνότητας ροής. Για την επίλυση αυτών χρησιμοποιήθηκε ένας κώδικας βασισμένος σε φασματικά πεπερασμένα στοιχεία [Fischer - 2000, Tomboulides - 1999], η δομή του οποίου διαμορφώθηκε ανάλογα με τις απαιτήσεις της μεθόδου LES και αυτών του προβλήματος κλεισίματος των εξισώσεων (closure problem) με τη μέθοδο ADM (Approximate Deconvolution Model) [Stolz - 1999] και τη χρήση του μοντέλου Smagorinsky (κλασσικό και δυναμικό) [Smagorinsky - 1963, Germano - 1991]. Στην ενότητα 2.1 αναλύονται οι εξισώσεις που περιγράφουν μαθηματικά ροές χαμηλού αριθμού Mach, ενώ στην επόμενη ενότητα 2.2 πραγματοποιείται η αδιαστατοποίηση αυτών με τη χρήση αδιάστατων μεγεθών. Η τελική μορφή των παραπάνω εξισώσεων, ύστερα από την εφαρμογή του φίλτρου σε αυτές, για την χρησιμοποίησή τους στη μέθοδο προσομοίωσης μεγάλων δινών παρουσιάζεται στην ενότητα 2.3. Στις επόμενες ενότητες 2.4 και 2.5 γίνεται εκτενής μαθηματική περιγραφή του μοντέλου προσεγγιστικής ανέλιξης (Approximate Deconvolution Model - ADM) και του μοντέλου Smagorinsky (κλασσικό και δυναμικό), ενώ παράλληλα στην παράγραφο 2.6 αναλύεται η διαδικασία διαμόρφωσης των εξισώσεων και η τελική μορφή αυτών στην περίπτωση εφαρμογής των μοντέλων που προαναφέρθηκαν. Τέλος στην τελευταία ενότητα 2.7 του κεφαλαίου διερευνάται η διαδικασία φιλτραρίσματος στον πολυωνυμικό χώρο και μελετάται εκτενέστερα η ισοδυναμία μεταξύ των διαφορετικών επιλογών της συνάρτησης μεταφοράς και / ή πυρήνα (kernel function) του φίλτρου. Παράλληλα ελέγχεται η όλη διαδικασία φιλτραρίσματος και μελετάται η επίδραση του φίλτρου μέσω της χρησιμοποίησης γνωστών συναρτησιακών σχέσεων.

2.1 Low – Mach Number Flows – Μαθηματικές Εξισώσεις

Η φυσική κατάσταση ενός ρευστού είναι δυνατό να περιγραφεί μαθηματικά από το διανυσματικό πεδίο ταχυτήτων $\underline{u}(\underline{x}, t)$, το οποίο αποτελεί μία μαθηματική συνάρτηση του χρόνου t και του τρισδιάστατου χώρου \underline{x} , και δύο τυχαίων θερμοδυναμικών βαθμωτών μεταβλητών (για παράδειγμα πίεση $p(\underline{x}, t)$ και θερμοκρασία $T(\underline{x}, t)$). Για τη γνώση αυτών των μεγεθών είναι απαραίτητη η επίλυση ενός συστήματος διαφορικών εξισώσεων που περιγράφουν μαθηματικά την εκάστοτε ροή. Το μεγαλύτερο μέρος των υπολογιστικών προσομοιώσεων βασίζεται στις θεμελιώδεις εξισώσεις της μηχανικής των ρευστών, οι οποίες είναι :

- Η εξίσωση διατήρησης της μάζας
- Η εξίσωση της ορμής, η οποία είναι αποτέλεσμα του 2^{ου} νόμου του Newton (Navier-Stokes equations) - 3 εξισώσεις, κάθε μία από τις οποίες αναφέρεται σε μία κατεύθυνση του συστήματος συντεταγμένων -.
- Η εξίσωση διατήρησης της ενέργειας

Για να είναι δυνατή η προσομοίωση και η τελική επίλυση του ροϊκού πεδίου, επιπρόσθετα με τις προηγούμενες εξισώσεις απαιτούνται επιπλέον N εξισώσεις για τα χημικά στοιχεία και μία καταστατική εξίσωση. Το τελικό λοιπόν προς επίλυση σύστημα που προκύπτει αποτελείται από $N + 5$ μερικές διαφορικές εξισώσεις και μία καταστατική εξίσωση ισορροπίας. Η θεώρηση ενός μόνου στοιχείου στη ροή μειώνει τον αριθμό του συστήματος των εξισώσεων που επιλύονται σε 6.

Ως γνωστόν στη μαθηματική προσομοίωση συμπιεστής ροής χαμηλής ταχύτητας, η ύπαρξη υψηλής συχνότητας ακουστικών κυμάτων αποτελεί έναν από τους κυριότερους περιορισμούς στο χρονικό βήμα επίλυσης της μεθόδου. Η χρησιμοποίηση τεχνικών διαταραχής (perturbation) [Rehm - 1978] στις περιπτώσεις ροών χαμηλού αριθμού Mach, είναι ένα μέσο για την αποφυγή αυτών των κυμάτων από το τελικό σύστημα εξισώσεων. Με την εφαρμογή της μεθόδου η θερμοδυναμική πίεση p_1 δεν αποτελεί πλέον συνάρτηση των χωρικών συντεταγμένων \underline{x} , με τελικό αποτέλεσμα την απαλοιφή των ακουστικών κυμάτων στη ροή. Σε αντίθεση με τη θερμοδυναμική, η υδροδυναμική πίεση, p_2 , είναι αυτή που εμφανίζεται στις εξισώσεις ορμής Navier-Stokes, ενώ όσο αφορά στην εξίσωση της ενέργειας, αυτή αποτελείται μόνο από τη θερμική (λανθάνουσα - sensible) ενθαλπία ή τη

θερμοκρασία. Πρέπει να τονιστεί ότι όλοι οι δυναμικοί συντελεστές μ (δυναμικό ιξώδες), λ (θερμική αγωγιμότητα), ρD (ρ : πυκνότητα και D : συντελεστής διάχυσης), και C_p (ειδική θερμοχωρητικότητα) που εμφανίζονται στη συνέχεια θεωρούνται ανεξάρτητοι της θερμοκρασίας, με αποτέλεσμα οι κινηματικοί συντελεστές ν (κινηματικό ιξώδες), α (συντελεστής θερμικής διάχυσης) και D να αποτελούν άμεση συνάρτηση της θερμοκρασίας.

Το σύστημα των εξισώσεων που περιγράφει τη ροή αποτελείται από τις παρακάτω μερικές διαφορικές εξισώσεις:

- **Εξίσωση διατήρησης μάζας**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u}) = 0 \quad (2.1)$$

- **Εξίσωση ορμής (Navier - Stokes equations)**

$$\left[\frac{\partial \rho \underline{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} \underline{u}) \right] = \rho \left[\frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + (\underline{u} \cdot \nabla) \underline{u} \right] = -\nabla p_2 + \nabla \cdot (\underline{\mu} \cdot \underline{\underline{S}}) \quad (2.2)$$

- **Εξίσωση διατήρησης ενέργειας**

$$c_p \left[\frac{\partial \rho T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} T) \right] = \nabla \cdot [\lambda (\nabla T)] \quad (2.3)$$

- **Καταστατική εξίσωση**

$$p = \rho R T \quad (2.4)$$

Στις παραπάνω εξισώσεις το σύμβολο $\underline{u} = \underline{u}(\underline{x}, t)$ αποτελεί το διανυσματικό πεδίο ταχυτήτων, το $p_2(\underline{x})$ την υδροδυναμική πίεση, το $T = T(\underline{x}, t)$ τη θερμοκρασία και το $\rho = \rho(T)$ την πυκνότητα. Οι ποσότητες C_p , μ , λ , αποτελούν τη μέση θερμοχωρητικότητα, το δυναμικό ιξώδες και τη θερμική αγωγιμότητα αντίστοιχα. Το σύμβολο $\underline{\underline{S}}$ αναφέρεται στον τανυστή των διατμητικών τάσεων και ορίζεται ως εξής:

$$\underline{\underline{S}} = \nabla \underline{u} + (\nabla \underline{u})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \underline{u}) \underline{\underline{I}}, \text{ όπου το } \underline{\underline{I}} \text{ αποτελεί το μοναδιαίο τανυστή.}$$

2.2 Αδιαστατοποίηση των εξισώσεων

Για την αδιαστατοποίηση των εξισώσεων είναι απαραίτητη η χρήση αδιάστατων μεγεθών και αριθμών. Τα μεγέθη που χρησιμοποιήθηκαν για την αδιαστατοποίηση είναι: L_∞ μήκος, u_∞ ταχύτητα, $t_\infty = L_\infty/u_\infty$ χρόνος, ρ_∞ πυκνότητα, $p_\infty = \rho_\infty u_\infty^2$ πίεση, c_{p_∞} θερμοχωρητικότητα και λ_∞ θερμική αγωγιμότητα. Ο δείκτης ∞ αναφέρεται στην περιοχή της αδιατάρακτης ροής (far field region), ενώ το σύμβολο $\hat{\cdot}$, όπου αναφέρεται στη συνέχεια συμβολίζει το αδιάστατο μέγεθος.

I. Αδιαστατοποίηση της εξίσωσης μάζας

Με τη χρησιμοποίηση της εξίσωσης (2.1) και των προαναφερθέντων αδιάστατων μεγεθών προκύπτει ότι:

$$\frac{\partial \hat{\rho} \rho_\infty}{\partial \hat{t} t_\infty} + \frac{1}{L_\infty} \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \rho_\infty \hat{u} u_\infty) = 0 \quad (2.5)$$

$$\frac{\rho_\infty}{t_\infty} \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \hat{t}} + \frac{\rho_\infty u_\infty}{L_\infty} \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{u}) = 0 \quad (2.6)$$

$$\frac{u_\infty \rho_\infty}{L_\infty} \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \hat{t}} + \frac{\rho_\infty u_\infty}{L_\infty} \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{u}) = 0 \quad (2.7)$$

$$\frac{L_\infty}{u_\infty \rho_\infty} \cdot \frac{u_\infty \rho_\infty}{L_\infty} \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \hat{t}} + \frac{L_\infty}{u_\infty \rho_\infty} \cdot \frac{\rho_\infty u_\infty}{L_\infty} \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{u}) = 0 \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \hat{t}} + \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{u}) = 0 \quad (2.9)$$

II. Αδιαστατοποίηση της εξίσωσης ορμής

Με τη χρησιμοποίηση της εξίσωσης (2.2) και των προαναφερθέντων αδιάστατων μεγεθών προκύπτει ότι:

$$\rho \left[\frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + (\underline{u} \cdot \nabla) \underline{u} \right] = \left[\frac{\partial \rho \underline{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} \underline{u}) \right] = -\nabla p_2 + \nabla \cdot (\underline{\mu} \cdot \underline{\underline{S}}) \quad (2.10)$$

$$\left[\frac{\partial(\hat{\rho}\rho_\infty\hat{u}_\infty)}{\partial\hat{t}_\infty} + \frac{1}{L_\infty}\hat{\nabla}\cdot(\hat{\rho}\rho_\infty\hat{u}_\infty\hat{u}_\infty) \right] = -\frac{1}{L_\infty}\hat{\nabla}\hat{p}_2p_\infty + \frac{1}{L_\infty}\hat{\nabla}\cdot\left(\hat{\mu}\mu_\infty\cdot\left(\frac{1}{L_\infty}\hat{\nabla}\hat{u}_\infty + \frac{1}{L_\infty}(\hat{\nabla}\hat{u}_\infty)^T - \frac{2}{3}\frac{1}{L_\infty}(\hat{\nabla}\cdot\hat{u}_\infty)\underline{\underline{I}}\right)\right) \quad (2.11)$$

$$\left[\frac{\rho_\infty u_\infty}{t_\infty} \frac{\partial(\hat{\rho}\hat{u})}{\partial\hat{t}} + \frac{\rho_\infty u_\infty^2}{L_\infty}\hat{\nabla}\cdot(\hat{\rho}\hat{u}\hat{u}) \right] = -\frac{p_\infty}{L_\infty}\hat{\nabla}\hat{p}_2p_\infty + \frac{\mu_\infty u_\infty}{L_\infty^2}\hat{\nabla}\cdot\left(\hat{\mu}\cdot\left(\hat{\nabla}\hat{u} + (\hat{\nabla}\hat{u})^T - \frac{2}{3}(\hat{\nabla}\cdot\hat{u})\underline{\underline{I}}\right)\right) \quad (2.12)$$

$$\left[\frac{\rho_\infty u_\infty^2}{L_\infty} \frac{\partial(\hat{\rho}\hat{u})}{\partial\hat{t}} + \frac{\rho_\infty u_\infty^2}{L_\infty}\hat{\nabla}\cdot(\hat{\rho}\hat{u}\hat{u}) \right] = -\frac{p_\infty}{L_\infty}\hat{\nabla}\hat{p}_2p_\infty + \frac{\mu_\infty u_\infty}{L_\infty^2}\hat{\nabla}\cdot\left(\hat{\mu}\cdot\left(\hat{\nabla}\hat{u} + (\hat{\nabla}\hat{u})^T - \frac{2}{3}(\hat{\nabla}\cdot\hat{u})\underline{\underline{I}}\right)\right) \quad (2.13)$$

$$\frac{L_\infty}{\rho_\infty u_\infty^2} \cdot \left[\frac{\rho_\infty u_\infty^2}{L_\infty} \frac{\partial(\hat{\rho}\hat{u})}{\partial\hat{t}} + \frac{\rho_\infty u_\infty^2}{L_\infty}\hat{\nabla}\cdot(\hat{\rho}\hat{u}\hat{u}) \right] = -\frac{L_\infty}{\rho_\infty u_\infty^2} \cdot \frac{p_\infty}{L_\infty}\hat{\nabla}\hat{p}_2 + \frac{L_\infty}{\rho_\infty u_\infty^2} \cdot \frac{\mu_\infty u_\infty}{L_\infty^2}\hat{\nabla}\cdot\left(\hat{\mu}\cdot\left(\hat{\nabla}\hat{u} + (\hat{\nabla}\hat{u})^T - \frac{2}{3}(\hat{\nabla}\cdot\hat{u})\underline{\underline{I}}\right)\right) \quad (2.14)$$

$$\left[\frac{\partial(\hat{\rho}\hat{u})}{\partial\hat{t}} + \hat{\nabla}\cdot(\hat{\rho}\hat{u}\hat{u}) \right] = -\frac{L_\infty}{\rho_\infty u_\infty^2} \cdot \frac{p_\infty}{L_\infty}\hat{\nabla}\hat{p}_2 + \frac{\mu_\infty}{\rho_\infty u_\infty L_\infty} \cdot \hat{\nabla}\cdot\left(\hat{\mu}\cdot\left(\hat{\nabla}\hat{u} + (\hat{\nabla}\hat{u})^T - \frac{2}{3}(\hat{\nabla}\cdot\hat{u})\underline{\underline{I}}\right)\right) \quad (2.15)$$

$$\left[\frac{\partial(\hat{\rho}\hat{u})}{\partial\hat{t}} + \hat{\nabla}\cdot(\hat{\rho}\hat{u}\hat{u}) \right] = -\hat{\nabla}\hat{p}_2 + \frac{1}{\frac{\rho_\infty u_\infty L_\infty}{\mu_\infty}} \cdot \hat{\nabla}\cdot\left(\hat{\mu}\cdot\left(\hat{\nabla}\hat{u} + (\hat{\nabla}\hat{u})^T - \frac{2}{3}(\hat{\nabla}\cdot\hat{u})\underline{\underline{I}}\right)\right) \quad (2.16)$$

$$\left[\frac{\partial(\hat{\rho}\hat{u})}{\partial\hat{t}} + \hat{\nabla}\cdot(\hat{\rho}\hat{u}\hat{u}) \right] = -\hat{\nabla}\hat{p}_2 + \frac{1}{\text{Re}} \cdot \hat{\nabla}\cdot\left(\hat{\mu}\cdot\left(\hat{\nabla}\hat{u} + (\hat{\nabla}\hat{u})^T - \frac{2}{3}(\hat{\nabla}\cdot\hat{u})\underline{\underline{I}}\right)\right) \quad (2.17)$$

$$\left[\frac{\partial(\hat{\rho}\hat{u})}{\partial\hat{t}} + \hat{\nabla}\cdot(\hat{\rho}\hat{u}\hat{u}) \right] = \hat{\rho} \left[\frac{\partial\hat{u}}{\partial\hat{t}} + (\hat{u}\cdot\nabla)\hat{u} \right] = -\hat{\nabla}\hat{p}_2 + \frac{1}{\text{Re}} \cdot \hat{\nabla}\cdot\left(\hat{\mu}\cdot\left(\hat{\nabla}\hat{u} + (\hat{\nabla}\hat{u})^T - \frac{2}{3}(\hat{\nabla}\cdot\hat{u})\underline{\underline{I}}\right)\right) \quad (2.18)$$

$$\left[\frac{\partial\hat{u}}{\partial\hat{t}} + (\hat{u}\cdot\nabla)\hat{u} \right] = -\frac{1}{\hat{\rho}}\hat{\nabla}\hat{p}_2 + \frac{\nu}{\text{Re}} \cdot \hat{\nabla}\cdot\left(\left(\hat{\nabla}\hat{u} + (\hat{\nabla}\hat{u})^T - \frac{2}{3}(\hat{\nabla}\cdot\hat{u})\underline{\underline{I}}\right)\right) \quad (2.19)$$

III. Αδιαστατοποίηση της εξίσωσης μεταφοράς θερμότητας σε περίπτωση που $C_p = \text{σταθερό}$

Με τη χρησιμοποίηση της εξίσωσης (2.3) και των προαναφερθέντων αδιάστατων μεγεθών προκύπτει ότι:

$$\frac{\partial\rho c_p T}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho u T) = \nabla\cdot[\lambda(\nabla T)] \quad (2.20)$$

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \underline{u} \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot [\lambda (\nabla T)] \quad (2.21)$$

$$\hat{c}_p c_{p_\infty} \left(\frac{\partial \hat{\rho} \hat{T}}{\partial \hat{t}} + \frac{1}{L_\infty} \hat{\nabla} \cdot (\hat{\underline{u}} \hat{T}) \right) = \frac{1}{L_\infty} \hat{\nabla} \cdot \left[\hat{\lambda} \left(\frac{1}{L_\infty} \hat{\nabla} \hat{T} \right) \right] \quad (2.22)$$

$$\hat{c}_p \frac{\rho_\infty c_{p_\infty} T_\infty}{t_\infty} \frac{\partial \hat{\rho} \hat{T}}{\partial \hat{t}} + \hat{c}_p \frac{\rho_\infty c_{p_\infty} u_\infty T_\infty}{L_\infty} \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{\underline{u}} \hat{T}) = \frac{\lambda_\infty T_\infty}{L_\infty^2} \hat{\nabla} \cdot [\hat{\lambda} (\hat{\nabla} \hat{T})] \quad (2.23)$$

$$\hat{c}_p \frac{u_\infty \rho_\infty c_{p_\infty} T_\infty}{L_\infty} \frac{\partial \hat{\rho} \hat{T}}{\partial \hat{t}} + \hat{c}_p \frac{\rho_\infty c_{p_\infty} u_\infty T_\infty}{L_\infty} \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{\underline{u}} \hat{T}) = \frac{\lambda_\infty T_\infty}{L_\infty^2} \hat{\nabla} \cdot [\hat{\lambda} (\hat{\nabla} \hat{T})] \quad (2.24)$$

$$\hat{c}_p \frac{L_\infty}{u_\infty \rho_\infty c_{p_\infty} T_\infty} \cdot \frac{u_\infty \rho_\infty c_{p_\infty} T_\infty}{L_\infty} \frac{\partial \hat{\rho} \hat{T}}{\partial \hat{t}} + \hat{c}_p \frac{L_\infty}{u_\infty \rho_\infty c_{p_\infty} T_\infty} \cdot \frac{\rho_\infty c_{p_\infty} u_\infty T_\infty}{L_\infty} \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{\underline{u}} \hat{T}) = \frac{L_\infty}{u_\infty \rho_\infty c_{p_\infty} T_\infty} \cdot \frac{\lambda_\infty T_\infty}{L_\infty^2} \hat{\nabla} \cdot [\hat{\lambda} (\hat{\nabla} \hat{T})] \quad (2.25)$$

$$\hat{c}_p \frac{\partial \hat{\rho} \hat{T}}{\partial \hat{t}} + \hat{c}_p \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{\underline{u}} \hat{T}) = \frac{L_\infty}{u_\infty \rho_\infty c_{p_\infty} T_\infty} \cdot \frac{\lambda_\infty T_\infty}{L_\infty^2} \hat{\nabla} \cdot [\hat{\lambda} (\hat{\nabla} \hat{T})] \quad (2.26)$$

$$\hat{c}_p \frac{\partial \hat{\rho} \hat{T}}{\partial \hat{t}} + \hat{c}_p \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{\underline{u}} \hat{T}) = \frac{L_\infty}{u_\infty \rho_\infty c_{p_\infty} T_\infty} \hat{\nabla} \cdot [\hat{\lambda} (\hat{\nabla} \hat{T})] \quad (2.27)$$

$$\hat{c}_p \frac{\partial \hat{\rho} \hat{T}}{\partial \hat{t}} + \hat{c}_p \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{\underline{u}} \hat{T}) = \frac{\lambda_\infty}{u_\infty L_\infty} \hat{\nabla} \cdot [\hat{\lambda} (\hat{\nabla} \hat{T})] \quad (2.28)$$

$$\hat{c}_p \left(\frac{\partial \hat{\rho} \hat{T}}{\partial \hat{t}} + \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{\underline{u}} \hat{T}) \right) = \frac{1}{\text{RePr}} \hat{\nabla} \cdot [\hat{\lambda} (\hat{\nabla} \hat{T})] \quad (2.29)$$

$$\hat{c}_p \left(\frac{\partial \hat{\rho} \hat{T}}{\partial \hat{t}} + \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{\underline{u}} \hat{T}) \right) = \hat{\rho} \hat{c}_p \left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial \hat{t}} + \hat{\underline{u}} \cdot \hat{\nabla} \hat{T} \right) = \frac{\hat{\lambda}}{\text{RePr}} \hat{\nabla} \cdot [(\hat{\nabla} \hat{T})] \quad (2.30)$$

$$\left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial \hat{t}} + \hat{\underline{u}} \cdot \hat{\nabla} \hat{T} \right) = \frac{\hat{\lambda}}{\hat{\rho} \hat{c}_p} \hat{\nabla} \cdot [(\hat{\nabla} \hat{T})] \quad (2.31)$$

$$\left(\frac{\partial \hat{T}}{\partial \hat{t}} + \hat{\underline{u}} \cdot \hat{\nabla} \hat{T} \right) = \frac{\hat{\alpha}}{\text{RePr}} \hat{\nabla} \cdot [(\hat{\nabla} \hat{T})] \quad (2.32)$$

IV. Αδιαστατοποίηση της καταστατικής εξίσωσης

Με τη χρησιμοποίηση της εξίσωσης (2.4) και των προαναφερθέντων αδιάστατων μεγεθών προκύπτει ότι:

$$\hat{p} p_\infty = \hat{\rho} \rho_\infty R \hat{T} T_\infty \quad (2.33)$$

Η σταθερά R στην περίπτωση μίγματος, το οποίο περιέχει N συστατικά μπορεί να γραφεί ως:

$$R = \frac{\sum_{i=1}^N R_i m_i}{m_\infty} = \frac{\mathbb{R}}{m_\infty} \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{M_i} = \mathbb{R} \frac{n_\infty}{m_\infty} = \frac{\mathbb{R}}{M_\infty}, \quad (2.34)$$

όπου R_i και m_i η σταθερά και η μάζα του συστατικού i αντίστοιχα, m_∞ , n_∞ και M_∞ η μάζα, τα μόρια και το μοριακό βάρος του συστατικού αναφοράς (όλο το μίγμα) και \mathbb{R} η παγκόσμια σταθερά με τιμή 8.3166 J/mol/K. Επομένως η σχέση (2.33) με τη βοήθεια της σχέσης (2.34) μπορεί να γραφεί ως:

$$\hat{p}_\infty = \hat{\rho}_\infty \frac{\mathbb{R}}{M_\infty} \hat{T}_\infty \quad (2.35)$$

$$\hat{p} = \frac{\rho_\infty \mathbb{R} T_\infty}{p_\infty M_\infty} \hat{\rho} \hat{T} \quad (2.36)$$

Εάν θέσουμε $\frac{\rho_\infty \mathbb{R} T_\infty}{p_\infty M_\infty} = 1$ τότε:

$$\hat{p} = \hat{\rho} \hat{T} \quad (2.37)$$

Επιπλέον εάν η θερμοδυναμική πίεση δεν μεταβάλλεται με το χρόνο η τελική μορφή της αδιαστατοποιημένης καταστατικής εξίσωσης είναι:

$$1 = \hat{\rho} \hat{T} \quad (2.38)$$

Επομένως η τελική μορφή του συστήματος εξισώσεων που προκύπτει στην αδιαστατοποιημένη του μορφή είναι η παρακάτω, η οποία αποτελείται από τις εξισώσεις (2.9), (2.19), (2.32), (2.38) όπου έχει παραληφθεί παραληφθεί το σύμβολο \wedge για ευκολία στην ανάγνωση. Όλα τα μεγέθη που εμφανίζονται σε αυτές τις εξισώσεις είναι αδιάστατα :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u}) = 0 \quad (2.39)$$

$$\left[\frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + (\underline{u} \cdot \nabla) \underline{u} \right] = -\frac{1}{\rho} \nabla p_2 + \frac{\nu}{\text{Re}} \cdot \nabla \cdot \left(\nabla \underline{u} + (\nabla \underline{u})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \underline{u}) \underline{I} \right) \quad (2.40)$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t} + \underline{u} \cdot \nabla T \right) = \frac{a}{\text{Re Pr}} \nabla^2 T \quad (2.41)$$

$$1 = \rho T \quad (2.42)$$

Οι αδιαστατοποιημένοι αριθμοί Re και Pr είναι αντίστοιχα οι αριθμοί Reynolds και

$$\text{Prandtl} : \text{Re} = \frac{u_\infty L_\infty \rho_\infty}{\mu_\infty} = \frac{u_\infty L_\infty}{\nu_\infty} \quad \text{και} \quad \text{Pr} = \frac{\mu_\infty c_{p\infty}}{\lambda_\infty}$$

Στο τελικό σύστημα των εξισώσεων που προκύπτει η ταχύτητα και η πυκνότητα περιέχονται τόσο στις εξισώσεις ορμής όσο και σε αυτή της ενέργειας περιπλέκοντας την επίλυση του συστήματος αυτών. Η μέθοδος επίλυσης που χρησιμοποιείται στον υπάρχοντα κώδικα αποδεσμεύει (decouples) τη θερμοχημεία από το πεδίο ταχυτήτων με τέτοιο τρόπο ώστε να είναι απλούστερη η αριθμητική επίλυση αυτού. Ακολουθώντας την ανάλυση κατά Tomboulides - 1999 υπολογίζεται η κλίση του διανυσματικού πεδίου ταχυτήτων $\nabla \cdot \underline{u}$, σε αντίθεση με τους κώδικες επίλυσης ασυμπίεστων ροών στους οποίους $\nabla \cdot \underline{u} = 0$. Μετά από υπολογισμούς αναλύθηκε και βρέθηκε ότι η κλίση αυτή είναι ίση με:

$$\nabla \cdot \underline{u} = \left\{ \frac{1}{\text{Re Pr}} \nabla^2 T \right\} \quad (2.43)$$

Η εξίσωση (2.43) αντικαθιστά την εξίσωση διατήρησης μάζας (2.39)

Συνάγεται λοιπόν το συμπέρασμα ότι το τελικό σύστημα των αδιαστατοποιημένων εξισώσεων που προκύπτει είναι το παρακάτω:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t} + \underline{u} \cdot \nabla T \right) = \frac{a}{\text{Re Pr}} \nabla^2 T \quad (2.44)$$

$$\nabla \cdot \underline{u} = \left\{ \frac{1}{\text{Re Pr}} \nabla^2 T \right\} \quad (2.45)$$

$$\left[\frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + (\underline{u} \cdot \nabla) \underline{u} \right] = -\frac{1}{\rho} \nabla p_2 + \frac{\nu}{\text{Re}} \cdot \nabla \cdot \left(\nabla \underline{u} + (\nabla \underline{u})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \underline{u}) \underline{I} \right) \quad (2.46)$$

$$1 = \rho T \quad (2.47)$$

Τονίζεται ότι οι παραπάνω εξισώσεις αναφέρονται μόνο σε ένα στοιχείο. Στην περίπτωση ασυμπίεστης ροής και για ισόθερμη ροή στο οποίο δεν υπάρχουν μεταβολές θερμοκρασίας, το σύστημα των τελικών εξισώσεων διαμορφώνεται στο:

$$\nabla \cdot \underline{u} = 0 \quad (2.48)$$

$$\left[\frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + (\underline{u} \cdot \nabla) \underline{u} \right] = -\frac{1}{\rho} \nabla p_2 + \frac{\nu}{\text{Re}} \cdot \nabla \cdot \left(\nabla \underline{u} + (\nabla \underline{u})^T \right) \quad (2.49)$$

2.3 Favre Filtered μορφή των εξισώσεων

Η τυρβώδης κίνηση αποτελεί μία τυχαία και ακανόνιστη διεργασία, η οποία όπως έχει αναφερθεί, αποτελείται από ένα μεγάλο εύρος κλιμάκων. Για την επίλυση λοιπόν προβλημάτων στα οποία είναι αναγκαία η χρησιμοποίηση και η επίλυση διαφορικών

εξισώσεων, που περιγράφουν την τυρβώδη κίνηση είναι απαραίτητη η μείωση των βαθμών ελευθερίας του προβλήματος για την ταυτόχρονη μείωση του υπολογιστικού κόστους και χρόνου των υπολογισμών και/ή προσομοιώσεων. Όπως αναφέρθηκε και στο 1^ο κεφάλαιο, η μέθοδος που χρησιμοποιείται ευρέως είναι αυτή της προσομοίωσης μεγάλων δινών, σύμφωνα με την οποία η εφαρμογή ενός χωρικού φίλτρου στο συνολικό σύστημα εξισώσεων μειώνει τις προς επίλυση κλίμακες του ροϊκού πεδίου. Για ροές με μεγάλες αλλαγές στην πυκνότητα του ρευστού, όπως είναι αυτές κατά τις οποίες λαμβάνει χώρα καύση, χρησιμοποιούνται μέσες τιμές ποσοτήτων, οι οποίες έχουν προκύψει με βάση την πυκνότητα [Norbert - 2002]. Έτσι το συνολικό διανυσματικό πεδίο ταχυτήτων θεωρείται ότι αποτελεί το άθροισμα μίας μέσης τιμής και μίας διακύμανσης. Η ανάλυση αυτή γίνεται με την προϋπόθεση ότι η μέση τιμή του γινομένου της διακύμανσης της ταχύτητας επί την πυκνότητα να είναι ίση με το μηδέν, σε αντίθεση με την ανάλυση κατά Reynolds, σύμφωνα με την οποία η μέση τιμή της διακύμανσης της ταχύτητας είναι μηδέν. Η μέθοδος αυτή είναι γνωστή και ως Favre Filtering. Κατά την εφαρμογή του χωρικού φίλτρου σε μία τυχαία μεταβλητή Φ , ο γενικός κανόνας που ισχύει, απορρέει από την παρακάτω σχέση:

$$\tilde{\Phi} = \frac{\overline{\Phi\rho}}{\rho} \quad (2.50)$$

όπου η ευθεία γραμμή δηλώνει το χωρικό φίλτρο, ενώ η περισπωμένη το Favre filtering.

Με την εφαρμογή του φίλτρου στο σύστημα των εξισώσεων (2.48) και (2.49) για ασυμπιεστή ροή και με την υπόθεση ότι η φιλτραρισμένη τιμή της παραγώγου μίας μεταβλητής f και η παράγωγος της φιλτραρισμένης τιμής δεν διαφέρουν σημαντικά

(the filter commutes), δηλαδή: $\left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial x}\right) = \frac{\partial(\tilde{f})}{\partial x}$, τότε καταλήγουμε στη φιλτραρισμένη

μορφή των εξισώσεων.

$$\overline{\nabla \cdot \underline{u}} = 0 \Rightarrow \nabla \cdot \tilde{\underline{u}} = 0 \quad (2.51)$$

$$\rho \left[\frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + (\underline{u} \cdot \nabla) \underline{u} \right] = \left[\frac{\partial(\rho \underline{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} \underline{u}) \right] = -\nabla p_2 + \frac{1}{\text{Re}} \cdot \nabla \cdot \left(\mu \cdot \left(\nabla \underline{u} + (\nabla \underline{u})^T \right) \right) \quad (2.52)$$

$$\rho \left[\frac{\partial \tilde{\underline{u}}}{\partial t} + (\tilde{\underline{u}} \cdot \nabla) \tilde{\underline{u}} \right] = \left[\frac{\partial(\tilde{\rho} \tilde{\underline{u}})}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{\underline{u}} \tilde{\underline{u}}) \right] = -\nabla \tilde{p}_2 + \frac{1}{\text{Re}} \nabla \cdot \left(\mu \cdot \left(\nabla \tilde{\underline{u}} + (\nabla \tilde{\underline{u}})^T \right) \right) \quad (2.53)$$

$$\overline{\rho T} = 1 \Rightarrow \overline{\rho \tilde{T}} = 1 \quad (2.54)$$

Εάν οι μεταβολές της πυκνότητας λόγω της θερμοκρασίας είναι αμελητέες:

$$\overline{\rho} = 1 \quad (2.55)$$

Στις παραπάνω εξισώσεις ο όρος μεταφοράς (convective term, $\nabla \cdot (\overline{\rho \underline{u} \underline{u}})$ ή $(\overline{\rho \cdot (\underline{u} \cdot \nabla) \underline{u}})$) είναι άγνωστος, λόγω της μη γνωστής τιμής του διανυσματικού πεδίου της ταχύτητας \underline{u} , δεδομένου ότι το συνολικό σύστημα εξισώσεων επιλύεται για τη φιλτραρισμένη τιμή αυτού $\underline{\tilde{u}}$, δημιουργώντας το πρόβλημα κλεισίματος (closure problem). Για την αντιμετώπιση του προβλήματος αυτού στην παρούσα διδακτορική διατριβή χρησιμοποιήθηκαν 2 διαφορετικά μοντέλα. Το μοντέλο προσεγγιστικής ανέλιξης (Approximate Deconvolution Model – ADM) [Stolz - 1999] και το μοντέλο Smagorinsky (κλασσικό [Smagorinsky – 1963] και δυναμικό [Germano - 1991]). Αρχικά δεν λήφθηκαν υπόψη μεταβολές πυκνότητας λόγω θερμοκρασιακών μεταβολών ή χημικών αντιδράσεων. Οι εξισώσεις οι οποίες επιλύθηκαν αφορούν στην ασυμπίεστη ροή και ο λόγος για τον οποίο έγινε κάτι τέτοιο, αφορά στον έλεγχο της αξιοπιστίας τόσο του μοντέλου προσεγγιστικής ανέλιξης (ADM) όσο και του μοντέλου Smagorinsky στη δυνατότητα πρόβλεψης των διαφόρων μεγεθών του ροϊκού πεδίου. Στις ενότητες 2.4 και 2.5 διαμορφώνεται το τελικό σύστημα των εξισώσεων όπως αυτό προκύπτει μετά από την επίλυση του προβλήματος κλεισίματος αυτών, με τη χρήση των μοντέλων προσεγγιστικής ανέλιξης (Approximate Deconvolution Model – ADM) και του μοντέλου Smagorinsky (κλασσικό και δυναμικό).

2.4 Μοντέλο προσεγγιστικής ανέλιξης (Approximate Deconvolution Model – ADM)

Με φυσικούς όρους θα μπορούσαμε γενικά να πούμε ότι τα μοντέλα υποπλεγματικών κλιμάκων (subgrid scale models) προσπαθούν να μοντελοποιήσουν ή / και να αναπαραστήσουν τη μεταφορά ενέργειας από τις μεγάλες κλίμακες τύρβης, οι οποίες επιλύονται αναλυτικά (resolved scales), στις μικρές υποπλεγματικές κλίμακες, που δεν επιλύονται και στις οποίες λαμβάνει χώρα η τελική σκέδαση της μεταφερόμενης ενέργειας, μέσω της επίδρασης του ιξώδους. Η μέθοδος της προσεγγιστικής ανέλιξης

μπορεί να θεωρηθεί ότι ανήκει στα μοντέλα ομοιότητας (scale similarity models) [Bardina – 1980, Pierre – 2004].

Η διαδικασία φιλτραρίσματος σε μία χωρική περιοχή $[\Delta \cdot \alpha, \Delta \cdot \beta]$, ορίζεται από τη σχέση:

$$\bar{\Phi}(x) = G * \Phi = \int_{x-\Delta \cdot \beta}^{x-\Delta \cdot \alpha} G\left(\frac{x-x'}{\Delta}, x\right) \Phi(x') \frac{dx'}{\Delta} \quad (2.56)$$

όπου Δ, Φ, G αποτελούν το σταθερό μήκος του φίλτρου, μία τυχαία μεταβλητή και τον πυρήνα του φίλτρου αντίστοιχα. Η μέθοδος στοχεύει στη δυνατότητα υπολογισμού και στην ανακατασκευή ή / και όσο το δυνατόν καλύτερη αναπαραγωγή του αφιλτράριστου πεδίου από το φιλτραρισμένο, το οποίο έχει επιλυθεί [Stolz – 1999, Domaradzki - 2000]. Με βάση λοιπόν το φιλτραρισμένο πεδίο υπολογίζεται το πεδίο ανέλιξης (deconvoluted field), μέσω της παρακάτω διεργασίας:

$$\Phi^* = Q_N * \bar{\Phi} \approx \Phi \quad (2.57)$$

όπου το $\Phi^*, \bar{\Phi}$ και Q_N αποτελούν το πεδίο ανέλιξης, το φιλτραρισμένο πεδίο και τον τελεστή προσεγγιστικής ανέλιξης, ο οποίος ισούται περίπου με τον αντίστροφο πυρήνα του φίλτρου G^{-1} και δίνεται από τη μαθηματική σειρά:

$$Q_N = \sum_{v=0}^N (I - G)^v \approx G^{-1} \quad (2.58)$$

όπου I είναι ο μοναδιαίος τελεστής και το N υποδηλώνει την τάξη της ανέλιξης. Ο λόγος που χρησιμοποιείται η προσεγγιστική τιμή για τον αντίστροφο πυρήνα του φίλτρου είναι απλός και οφείλεται κατά κύριο λόγο στο γεγονός ότι η αναλυτική αντιστροφή του φίλτρου δεν είναι πάντα μαθηματικά εφικτή.

Με βάση τις παραπάνω σχέσεις και το φιλτραρισμένο πεδίο υπολογίζεται το πεδίο ανέλιξης (deconvoluted field), μέσω της παρακάτω διεργασίας:

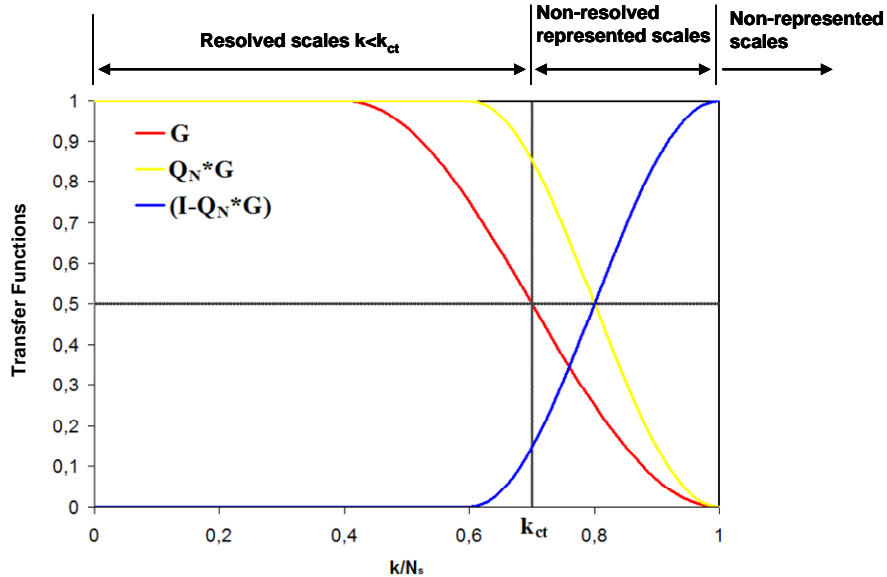
$$\underline{u}^* = Q_N * \bar{u} = \bar{u} + (\bar{u} + \bar{u}) + (\bar{u} - 2\bar{u} + \bar{u}) + \dots = 3\bar{u} - 3\bar{u} + \bar{u} + \dots \quad (2.59)$$

όπου το N υποδηλώνει την τάξη της ανέλιξης [Keung - 2007]. Μετά τον υπολογισμό των προαναφερθέντων ποσοτήτων, είναι δυνατή η επίλυση του συστήματος των εξισώσεων που προκύπτει από την εφαρμογή του φίλτρου, κατόπιν προσέγγισης των μη γραμμικών όρων σε οποιαδήποτε από τις εξισώσεις διατήρησης μάζας, ορμής ή ενέργειας με απευθείας αντικατάσταση των μη φιλτραρισμένων ποσοτήτων με την προσεγγιστική τους ανέλιξη (approximate deconvolution). Σύμφωνα όμως με τους

[Stolz - 1999 - 2001a - 2001b], η επίδραση των μη αντιπροσωπευτικών κλιμάκων τύρβης (non-represented) στις κλίμακες οι οποίες επιλύονται αναλυτικά δεν είναι δυνατόν να προέρθει μόνο με την παραπάνω αντικατάσταση, η οποία αφορά τη χρησιμοποίηση του πεδίου ανέλιξης Φ^* αντί του πραγματικού πεδίου Φ , στο μη γραμμικό όρο συναγωγής των εξισώσεων (convective non-linear term). Για την μοντελοποίηση λοιπόν της μεταφερόμενης ενέργειας μέσω αυτής της αλληλεπίδρασης προστίθεται στις εξισώσεις ένας όρος χαλάρωσης μετά την εφαρμογή του φίλτρου. Στο σχήμα 2.1 φαίνεται γραφικά η γενική ιδέα που χρησιμοποιείται για τη μοντελοποίηση της αλληλεπίδρασης μεταξύ των κλιμάκων τύρβης που επιλύονται αναλυτικά και των μη αντιπροσωπευτικών από το πλέγμα. Η τεταγμένη του διαγράμματος αφορά το μήκος κύματος (Fourier space), ενώ η τεταγμένη αναφέρεται στις τιμές:

- Κόκκινη γραμμή: πυρήνας του φίλτρου G
- Κίτρινη γραμμή: τον τελεστή $Q_N * G$
- Μπλε γραμμή: αντίστροφος τελεστής προσεγγιστικής ανέλιξης $Q_N \approx G^{-1}$

•Μοντέλο για την αλληλεπίδραση των κλιμάκων που επιλύονται (resolved scales with $k < k_{ct}$) με αυτές που δεν αναπαριστώνται από το πλέγμα (non-represented with $k > 1$)



•Συντελεστής χαλάρωσης, που επιδρά στις κλίμακες που δεν επιλύονται (non-resolved represented scales), αλλά μοντελοποιούνται: $\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} = -\chi_u (I - Q * G) * \bar{u}_i^N$

Σχήμα 2.1: Γραφική παράσταση του πυρήνα του φίλτρου G , του τελεστή $Q_N * G$ και του αντίστροφου τελεστή προσεγγιστικής ανέλιξης $Q_N \approx G^{-1}$ [LES summer school - 2004].

Ο μη γραμμικός όρος συναγωγής των εξισώσεων μπορεί να προσεγγιστεί λοιπόν με βάση την παρακάτω ισότητα:

$$\overline{(\underline{u} \cdot \nabla) \underline{u}} = \overline{(\underline{u}^* \cdot \nabla) \underline{u}^*} + \chi_u (I - Q_N * G) * \tilde{\underline{u}} \quad (2.60)$$

Επομένως η Favre filtered μορφή του συστήματος των εξισώσεων (2.51) και (2.53) σε συνδυασμό με το μοντέλο προσεγγιστικής ανέλιξης και με τη θεώρηση αμελητέας βαρυτικής επίδρασης, παίρνουν την παρακάτω τελική μορφή, η οποία αποτελεί και το τελικό σύστημα των εξισώσεων που επιλύονται από τον υπάρχοντα κώδικα:

$$\nabla \cdot \tilde{\underline{u}} = 0 \quad (2.61)$$

$$\bar{\rho} \left[\frac{\partial \tilde{\underline{u}}}{\partial t} + \overline{(\underline{u}^* \cdot \nabla) \underline{u}^*} \right] = -\nabla \bar{p}_2 + \frac{1}{\text{Re}} \nabla \cdot \left(\mu \cdot \left(\nabla \tilde{\underline{u}} + (\nabla \tilde{\underline{u}})^T \right) \right) - \bar{\rho} \chi_u (I - Q_N * G) * \tilde{\underline{u}} \quad (2.62)$$

2.5 Μοντέλο Smagorinsky (Smagorinsky Model - SM)

Το μοντέλο Smagorinsky [Smagorinsky - 1963] ανήκει στην κατηγορία μοντέλων ιξώδους (eddy viscosity models). Όλα τα μοντέλα της συγκεκριμένης κατηγορίας βασίζονται στην υπόθεση ότι το τελικό αποτέλεσμα των υποπλεγματικών δομών (SGS stresses) της ροής είναι η αυξημένη μεταφορά και σκέδαση ενέργειας. Τέτοια φαινόμενα στις στρωτές ροές σχετίζονται με το ιξώδες του ρευστού, με αποτέλεσμα η ίδια φιλοσοφία να μεταφέρεται και στις τυρβώδεις ροές, στις οποίες ο όρος των υποπλεγματικών κλιμάκων (subgrid scale) μοντελοποιείται με τη χρησιμοποίηση ενός τυρβώδους ιξώδους. Σε αντίθεση με το προηγούμενο μοντέλο (ADM), η φυσική βάση πάνω στην οποία δομείται όλη η φιλοσοφία του μοντέλου Smagorinsky, πηγάζει από την υπόθεση ότι οι μικρές κλίμακες τύρβης βρίσκονται σε ισορροπία, ισοσταθμίζοντας την παραγωγή και τη σκέδαση ενέργειας μέσω του τυρβώδους ιξώδους, γνωστό και ως eddy viscosity. Όπως αναφέρθηκε και στην ενότητα 1.3 η εφαρμογή ενός φίλτρου στο γενικό σύστημα των εξισώσεων, που περιγράφει μαθηματικά και φυσικά το προς εξέταση κάθε φορά σύστημα, δημιουργεί το πρόβλημα κλεισίματος αυτών, το οποίο επιλύεται μέσω της χρησιμοποίησης κάποιου μοντέλου. Ο άγνωστος όρος των εξισώσεων αποτελεί ένα τανυστή, ο οποίος καλείται τανυστής υποπλεγματικών κλιμάκων (subgrid scale tensor) και αντιπροσωπεύει την αλληλεπίδραση μεταξύ των κλιμάκων τύρβης που επιλύονται αναλυτικά και άμεσα,

με αυτές που μοντελοποιούνται. Δεδομένου ότι στην περίπτωση μας η ροή θεωρείται ασυμπίεστη διαιρώντας με την πυκνότητα τη σχέση (2.53) προκύπτει ότι:

$$\frac{\partial \tilde{\underline{\underline{u}}}}{\partial \hat{t}} + \nabla \cdot (\tilde{\underline{\underline{u}}}) = -\nabla \bar{p}_{\text{mod}} + \frac{1}{\text{Re}} \nu_{\text{mol}} \nabla \cdot (\tilde{\underline{\underline{S}}}) \quad (2.63)$$

Για την επίλυση του προβλήματος κλεισίματος προστίθεται και στα 2 μέλη της παραπάνω εξίσωσης ο όρος $\nabla \cdot (\tilde{\underline{\underline{u}}})$:

$$\frac{\partial \tilde{\underline{\underline{u}}}}{\partial \hat{t}} + \nabla \cdot (\tilde{\underline{\underline{u}}}) + \nabla \cdot (\tilde{\underline{\underline{u}}}) = -\nabla \bar{p}_{\text{mod}} + \frac{1}{\text{Re}} \nu_{\text{mol}} \nabla \cdot (\tilde{\underline{\underline{S}}}) + \nabla \cdot (\tilde{\underline{\underline{u}}}) \quad (2.64)$$

$$\frac{\partial \tilde{\underline{\underline{u}}}}{\partial \hat{t}} + \nabla \cdot (\tilde{\underline{\underline{u}}}) = -\nabla \bar{p}_{\text{mod}} + \frac{1}{\text{Re}} \nu_{\text{mol}} \nabla \cdot (\tilde{\underline{\underline{S}}}) + \nabla \cdot (\tilde{\underline{\underline{u}}}) - \nabla \cdot (\tilde{\underline{\underline{u}}}) \quad (2.65)$$

$$\frac{\partial \tilde{\underline{\underline{u}}}}{\partial \hat{t}} + \nabla \cdot (\tilde{\underline{\underline{u}}}) = -\nabla \bar{p}_{\text{mod}} + \frac{1}{\text{Re}} \nu_{\text{mol}} \nabla \cdot (\tilde{\underline{\underline{S}}}) - \nabla \cdot (\tilde{\underline{\underline{u}}}) \quad (2.66)$$

$$\frac{\partial \tilde{\underline{\underline{u}}}}{\partial \hat{t}} + \nabla \cdot (\tilde{\underline{\underline{u}}}) = -\nabla \bar{p}_{\text{mod}} + \frac{1}{\text{Re}} \nu_{\text{mol}} \nabla \cdot (\tilde{\underline{\underline{S}}}) - \nabla \cdot (\underline{\underline{\tau}}^{\text{sgs}}) \quad (2.67)$$

όπου ο όρος \bar{p}_{mod} είναι η πίεση διαιρεμένη με την πυκνότητα, ν_{mol} το κινηματικό μοριακό ιξώδες της ροής και ο όρος $\underline{\underline{\tau}}^{\text{sgs}}$ αποτελεί τον τανυστή υποπλεγματικών κλιμάκων (subgrid scale), ο οποίος όπως αναφέρθηκε απαιτεί μοντελοποίηση. Από κατασκευής του ο συγκεκριμένος τανυστής είναι ανισότροπος και για το λόγο αυτό είναι δυνατόν να χωριστεί σε δύο μέρη, από τα οποία το ένα να αφορά το ισότροπο μέρος (isotropic part) και το υπόλοιπο το ανισότροπο (anisotropic ή deviatoric part):

$$\underline{\underline{\tau}}^{\text{sgs}} = \frac{1}{3} \text{Tr}(\underline{\underline{\tau}}^{\text{sgs}}) \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{\tau}}^d \quad \text{ή} \quad \tau_{ij}^{\text{sgs}} = \frac{1}{3} \tau_{kk}^{\text{sgs}} \delta_{ij} + \tau_{ij}^d \quad (2.68)$$

όπου δ_{ij} αποτελεί το δέλτα του Kronecker, οι δείκτες ij υποδηλώνουν άθροιση κατά επανάληψη (Einstein summation) και $\text{Tr}(\underline{\underline{\tau}}^{\text{sgs}})$ είναι το άθροισμα των στοιχείων της κύριας διαγωνίου του τανυστή. Με βάση τη σχέση (2.68) η σχέση (2.67) διαμορφώνεται ως εξής:

$$\frac{\partial \tilde{\underline{\underline{u}}}}{\partial \hat{t}} + \nabla \cdot (\tilde{\underline{\underline{u}}}) = -\nabla \bar{p}_{\text{mod}} + \frac{1}{\text{Re}} \nu_{\text{mol}} \nabla \cdot (\tilde{\underline{\underline{S}}}) - \nabla \cdot \left(\frac{1}{3} \text{Tr}(\underline{\underline{\tau}}^{\text{sgs}}) \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{\tau}}^d \right) \quad (2.69)$$

$$\frac{\partial \tilde{\underline{\underline{u}}}}{\partial \hat{t}} + \nabla \cdot (\tilde{\underline{\underline{u}}}) = -\nabla \left(\bar{p}_{\text{mod}} + \frac{1}{3} \text{Tr}(\underline{\underline{\tau}}^{\text{sgs}}) \right) + \frac{1}{\text{Re}} \nu_{\text{mol}} \nabla \cdot (\tilde{\underline{\underline{S}}}) - \nabla \cdot (\underline{\underline{\tau}}^d) \quad (2.70)$$

Το ισότροπο μέρος του τανυστή $(\frac{1}{3} \text{Tr}(\underline{\underline{\tau}}^{\text{sgs}}) \underline{\underline{I}} \text{ ή } \frac{1}{3} \tau_{kk}^{\text{sgs}} \delta_{ij})$ προστίθεται στον όρο της υδροδυναμικής κλίσης πίεσης και δεν απαιτεί περαιτέρω μοντελοποίηση [Randy -

2004]. Επιπρόσθετα στην περίπτωση που η ροή είναι ασυμπίεστη, όπως και στην περίπτωση μας, ο όρος αυτός είναι ίσος με το 0, καθόσον αποτελεί την απόκλιση ταχύτητας $\nabla \cdot \underline{\tilde{u}} = \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{w}}{\partial z} = 0$, όπου $\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w}$ είναι οι 3 συνιστώσες του διανυσματικού ροϊκού πεδίου $\underline{\tilde{u}}$.

Στηριζόμενοι στη βασική υπόθεση του μοντέλου Smagorinsky που αναφέρθηκε στην αρχή της παρούσας ενότητας το ανισότροπο τμήμα των υποπλεγματικών κλιμάκων (subgrid scale), $\underline{\tau}^d$, μοντελοποιείται με βάση τη σχέση :

$$\underline{\tau}^d = \underline{\tau}^{sgs} - \frac{1}{3} Tr(\underline{\tau}^{sgs}) \underline{I} = -2\nu_t \underline{\tilde{S}} \quad (2.71)$$

όπου ν_t είναι το ιξώδες λόγω τύρβης (turbulent eddy viscosity) ορισμένο από τη σχέση: $\nu_t = (C_s \Delta)^2 |\underline{\tilde{S}}|$, με τον όρο Δ να υποδηλώνει το μήκος του φίλτρου, C_s το συντελεστή του μοντέλου Smagorinsky και $|\underline{\tilde{S}}| = (2\underline{\tilde{S}} : \underline{\tilde{S}})^{1/2}$ το μέτρο του τανυστή των διατμητικών τάσεων. Με βάση λοιπόν το ιξώδες της τύρβης, η εξίσωση (2.70) παίρνει τη μορφή:

$$\frac{\partial \underline{\tilde{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{\tilde{u}} \underline{\tilde{u}}) = -\nabla \left(\bar{p}_{mod} + \frac{1}{3} Tr(\underline{\tau}^{sgs}) \underline{I} \right) + \frac{1}{Re} \nu_{mol} \nabla \cdot (\underline{\tilde{S}}) + \nabla \cdot (2\nu_t \underline{\tilde{S}}) \quad (2.71)$$

$$\frac{\partial \underline{\tilde{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{\tilde{u}} \underline{\tilde{u}}) = -\nabla \left(\bar{p}_{mod} + \frac{1}{3} Tr(\underline{\tau}^{sgs}) \underline{I} \right) + \frac{1}{Re} \nu_{tot} \nabla \cdot (\underline{\tilde{S}}) \quad (2.72)$$

όπου $\nu_{tot} = \nu_{mol} + 2\nu_t$ είναι το συνολικό ιξώδες, το οποίο αποτελεί το άθροισμα του μοριακού και του τυρβώδους αντίστοιχα.

2.5.1 Κλασσικό Μοντέλο Smagorinsky (Constant Smagorinsky Model - CSM)

Στην περίπτωση του κλασσικού μοντέλου Smagorinsky απαιτείται ο ορισμός 2 παραμέτρων, του συντελεστή C_s , που όπως υποδηλώνει και το όνομα του μοντέλου παραμένει σταθερός και παίρνει τιμές από 0.1 έως και 0.2 και του μήκους του φίλτρου Δ . Λόγω της χρησιμοποίησης της μεθόδου των φασματικών πεπερασμένων στοιχείων ο ορισμός του μήκους του φίλτρου Δ , δεν είναι πλήρως ξεκάθαρος, λόγω της συσσώρευσης κομβικών σημείων στα όρια του κάθε στοιχείου. Η αρχική επιλογή που έγινε στην παρούσα διδακτορική διατριβή αφορούσε στην επιλογή 2 διαφορετικών ορισμών του φίλτρου. Στον 1^ο, το μέγεθός του φίλτρου αποτελεί

συνάρτηση της τοπικής θέσης σε κάθε κομβικό σημείο του πλέγματος, ενώ στον 2^ο το μήκος αυτού είναι μία μέση διακριτή τιμή σε κάθε φασματικό πεπερασμένο στοιχείο, ανεξάρτητο της θέσης μέσα σε αυτό [Bouffanais - 2007]. Το μέγεθος του φίλτρου ορίζεται μαθηματικά από τη σχέση:

$$\Delta(x, y, z) = (\Delta_1(x)\Delta_2(y)\Delta_3(z))^{1/3} = \left(\frac{\Delta x \Delta y \Delta z}{N_x N_y N_z} \right)^{1/3} \quad (2.73)$$

όπου Δ_x , Δ_y και Δ_z είναι οι αντίστοιχες πλεγματικές αποστάσεις του κάθε κελιού σε κάθε διεύθυνση και N_x , N_y , N_z ο βαθμός του πολυωνύμου παρεμβολής στις κατευθύνσεις x , y και z αντίστοιχα. Ο ορισμός του μήκους του φίλτρου που αφορά στον τοπικό χαρακτήρα αυτού υπολογίστηκε μέσω της απόστασης μεταξύ των κομβικών σημείων του πλέγματος. Με βάση το 2^ο τρόπο ορισμού του μήκους του φίλτρου, ο αριθμητής στην παραπάνω σχέση μπορεί να θεωρηθεί σαν τον όγκο του κάθε πεπερασμένου κελιού και μπορεί να υπολογιστεί εύκολα από το ολοκλήρωμα της Ιακωβιανής σε αυτό. Όπως προέκυψε και θα δειχθεί σε επόμενη ενότητα, οι δύο διαφορετικοί ορισμοί του φίλτρου έδειξαν μικρές διαφορές στην πρόβλεψη των τάσεων Reynolds και τελικά χρησιμοποιήθηκε ο 2^{ος}.

2.5.2 Δυναμικό Μοντέλο Smagorinsky (Dynamic Smagorinsky Model- DSM)

Το βασικό μειονέκτημα του κλασσικού μοντέλου Smagorinsky είναι η σταθερή τιμή του συντελεστή C_s που όμως δεν έχει την ίδια τιμή για τους διάφορους τύπους ροών που συναντούνται στην πράξη. Επιπλέον το συγκεκριμένο μοντέλο δεν επιτρέπει την προσαρμογή της παραμέτρου C_s σε περιοχές ιδιαίτερης σημασίας, όπως είναι οι περιοχές κοντά σε τοιχώματα ή περιοχές υψηλής διάτμησης και επιπρόσθετα απαγορεύει την αντίστροφη μεταφορά ενέργειας από τις μικρές κλίμακες τύρβης στις μεγάλες (back-scatter), που θα έπρεπε να χαρακτηρίζεται από αρνητικές τιμές του συντελεστή C_s . Όπως διαπιστώθηκε και από τα τελικά αποτελέσματα των προσομοιώσεων, τα οποία παρουσιάζονται στο 3^ο κεφάλαιο, σε περιοχές διατμητικών τάσεων η τιμή του συντελεστή του μοντέλου πρέπει να είναι πολύ μικρότερη από αυτήν που αντιστοιχεί σε ισότροπη τύρβη. Ένα άλλο σημαντικό μειονέκτημα του σταθερού μοντέλου Smagorinsky, όπως προαναφέρθηκε στην παράγραφο 2.5.1, αποτελεί και ο «ασαφής» ορισμός του μήκους του φίλτρου Δ στην περίπτωση των

φασματικών πεπερασμένων στοιχείων, λόγω της συσσώρευσης αρκετών σημείων κοντά στα όρια αυτών.

Η βασική ιδέα πάνω στην οποία στηρίζεται η έννοια της ομοιότητας κλιμάκων (scale similarity) και του μοντέλου Smagorinsky με σταθερό συντελεστή C_s , με βάση την οποία οι μικρότερες κλίμακες τύρβης μπορούν να δώσουν πληροφορίες για το χαρακτήρα και τη φυσική που διέπει τις αντίστοιχες μεγαλύτερες, μπορεί να επεκταθεί περαιτέρω και να εξελιχθεί σε δυναμικό μοντέλο ή διαδικασία. Το δυναμικό μοντέλο Smagorinsky επιτρέπει στο συντελεστή C_d να μεταβάλλεται τόσο χωρικά όσο και χρονικά. Η δυναμική διαδικασία, η οποία χρησιμοποιήθηκε στη παρούσα διδακτορική διατριβή περιγράφεται από τους Germano - 1991, Habisreutinger - 2003, Blackburn - 2003, Randy - 2004, Schmidt - 2001. Η όλη διεργασία βασίζεται στην εισαγωγή ενός δεύτερου φίλτρου μεγέθους $\tilde{\Delta}$ (φίλτρο δοκιμής - test filter), το οποίο είναι συνήθως διπλάσιο από αυτό του βασικού φίλτρου Δ (grid filter), του οποίου το μέγεθος ορίζεται από αυτό του πλέγματος. Με την εφαρμογή του φίλτρου δοκιμής στις ήδη φιλτραρισμένες εξισώσεις Navier-Stokes, δημιουργείται εκ νέου το πρόβλημα κλεισίματος αυτών. Με την εφαρμογή του φίλτρου δοκιμής στην εξίσωση (2.72) προκύπτει ότι:

$$\frac{\partial \hat{\underline{\underline{u}}}}{\partial \hat{t}} + \nabla \cdot (\hat{\underline{\underline{u}}\hat{\underline{\underline{u}}}) = -\widehat{\nabla \bar{p}_{mod}} + \frac{1}{Re} \nu_{mol} \nabla \cdot (\hat{\underline{\underline{S}}}) - \nabla \cdot (\hat{\underline{\underline{u}}\hat{\underline{\underline{u}}}} - \hat{\underline{\underline{u}}\hat{\underline{\underline{u}}}}) \quad (2.73)$$

$$\frac{\partial \hat{\underline{\underline{u}}}}{\partial \hat{t}} + \nabla \cdot (\hat{\underline{\underline{u}}\hat{\underline{\underline{u}}}) = -\widehat{\nabla \bar{p}_{mod}} + \frac{1}{Re} \nu_{mol} \nabla \cdot (\hat{\underline{\underline{S}}}) - \nabla \cdot (\hat{\underline{\underline{u}}\hat{\underline{\underline{u}}}} - \hat{\underline{\underline{u}}\hat{\underline{\underline{u}}}}) \quad (2.74)$$

$$\frac{\partial \hat{\underline{\underline{u}}}}{\partial \hat{t}} + \nabla \cdot (\hat{\underline{\underline{u}}\hat{\underline{\underline{u}}}) = -\widehat{\nabla \bar{p}_{mod}} + \frac{1}{Re} \nu_{mol} \nabla \cdot (\hat{\underline{\underline{S}}}) \quad (2.75)$$

Για την επίλυση του προβλήματος κλεισίματος προστίθεται και στα 2 μέλη της παραπάνω εξίσωσης ο όρος $\nabla \cdot (\hat{\underline{\underline{u}}\hat{\underline{\underline{u}}})$:

$$\frac{\partial \hat{\underline{\underline{u}}}}{\partial \hat{t}} + \nabla \cdot (\hat{\underline{\underline{u}}\hat{\underline{\underline{u}}}) + \nabla \cdot (\hat{\underline{\underline{u}}\hat{\underline{\underline{u}}}) = -\widehat{\nabla \bar{p}_{mod}} + \frac{1}{Re} \nu_{mol} \nabla \cdot (\hat{\underline{\underline{S}}}) + \nabla \cdot (\hat{\underline{\underline{u}}\hat{\underline{\underline{u}}}) \quad (2.76)$$

$$\frac{\partial \hat{\underline{\underline{u}}}}{\partial \hat{t}} + \nabla \cdot (\hat{\underline{\underline{u}}\hat{\underline{\underline{u}}}) = -\widehat{\nabla \bar{p}_{mod}} + \frac{1}{Re} \nu_{mol} \nabla \cdot (\hat{\underline{\underline{S}}}) + \nabla \cdot (\hat{\underline{\underline{u}}\hat{\underline{\underline{u}}}) - \nabla \cdot (\hat{\underline{\underline{u}}\hat{\underline{\underline{u}}}) \quad (2.77)$$

$$\frac{\partial \hat{\underline{\underline{u}}}}{\partial \hat{t}} + \nabla \cdot (\hat{\underline{\underline{u}}\hat{\underline{\underline{u}}}) = -\widehat{\nabla \bar{p}_{mod}} + \frac{1}{Re} \nu_{mol} \nabla \cdot (\hat{\underline{\underline{S}}}) - \nabla \cdot (\hat{\underline{\underline{u}}\hat{\underline{\underline{u}}}} - \hat{\underline{\underline{u}}\hat{\underline{\underline{u}}}}) \quad (2.78)$$

$$\frac{\partial \hat{\underline{\underline{u}}}}{\partial \hat{t}} + \nabla \cdot (\hat{\underline{\underline{u}}\hat{\underline{\underline{u}}}) = -\widehat{\nabla \bar{p}_{mod}} + \frac{1}{Re} \nu_{mol} \nabla \cdot (\hat{\underline{\underline{S}}}) - \nabla \cdot (\hat{\underline{\underline{u}}\hat{\underline{\underline{u}}}} - \hat{\underline{\underline{u}}\hat{\underline{\underline{u}}}}) \quad (2.79)$$

όπου ο όρος $\underline{\underline{\tau}}_{test}^{sgs} = \widehat{\underline{\underline{u}}\underline{\underline{u}}} - \widehat{\underline{\underline{u}}}\widehat{\underline{\underline{u}}}$ αποτελεί τον τανυστή υποπλεγματικών κλιμάκων του φίλτρου δοκιμής. Στην περίπτωση αυτή ο όρος των υποπλεγματικών κλιμάκων αναπαριστά την επίδραση των φιλτραρισμένων με το φίλτρο δοκιμής μικρών κλιμάκων τύρβης στις αντίστοιχες μεγάλες. Στις εξισώσεις το σύμβολο $\hat{\cdot}$ δηλώνει το φίλτρο δοκιμής και το σύμβολο \sim το φίλτρο πλέγματος.

Εάν θεωρήσουμε ότι ο τανυστής υποπλεγματικών κενών $\underline{\underline{\tau}}^{sgs}$ καθώς επίσης και ο αντίστοιχος $\underline{\underline{\tau}}_{test}^{sgs}$ έχουν παρόμοια φυσική συμπεριφορά τότε το ισότροπο μέρος και των δύο μπορεί να εκφραστεί με βάση το ίδιο μοντέλο. Επομένως για τον καθένα από αυτούς ισχύει ότι:

$$\underline{\underline{\tau}}^{sgs_d} = \underline{\underline{\tau}}^{sgs} - \frac{1}{3} Tr(\underline{\underline{\tau}}^{sgs}) \underline{\underline{I}} = -2\nu_t \underline{\underline{\tilde{S}}} = -2(C_s \Delta)^2 \left| \underline{\underline{\tilde{S}}} \right| \underline{\underline{\tilde{S}}} \quad (2.80)$$

και η φιλτραρισμένη τιμή αυτού:

$$\widehat{\underline{\underline{\tau}}^{sgs_d}} = -2(C_s \Delta)^2 \left| \underline{\underline{\tilde{S}}} \right| \underline{\underline{\tilde{S}}} \quad (2.81)$$

$$\underline{\underline{\tau}}_{test}^{sgs_d} = \underline{\underline{\tau}}_{test}^{sgs} - \frac{1}{3} Tr(\underline{\underline{\tau}}_{test}^{sgs}) \underline{\underline{I}} = -2\nu_t \underline{\underline{\hat{S}}} = -2(C_s \hat{\Delta})^2 \left| \underline{\underline{\hat{S}}} \right| \underline{\underline{\hat{S}}} \quad (2.82)$$

Φιλτράροντας με το φίλτρο δοκιμής τον τανυστή $\underline{\underline{\tau}}^{sgs} = \widehat{\underline{\underline{u}}\underline{\underline{u}}} - \widehat{\underline{\underline{u}}}\widehat{\underline{\underline{u}}}$ προκύπτει ότι $\widehat{\underline{\underline{\tau}}^{sgs}} = \widehat{\underline{\underline{u}}\underline{\underline{u}}} - \widehat{\underline{\underline{u}}}\widehat{\underline{\underline{u}}}$, εξίσωση της οποίας ο πρώτος όρος του 2^{ου} μέρους είναι ο όρος που εμφανίζεται στον τανυστή υποπλεγματικών κλιμάκων του φίλτρου δοκιμής $\underline{\underline{\tau}}_{test}^{sgs} = \widehat{\underline{\underline{u}}\underline{\underline{u}}} - \widehat{\underline{\underline{u}}}\widehat{\underline{\underline{u}}}$. Συνδυάζοντας τις δύο τελευταίες σχέσεις καταλήγουμε στην ισότητα κατά Germano:

$$\underline{\underline{L}} = \underline{\underline{\tau}}_{test}^{sgs} - \widehat{\underline{\underline{\tau}}^{sgs}} = \widehat{\underline{\underline{u}}\underline{\underline{u}}} - \widehat{\underline{\underline{u}}}\widehat{\underline{\underline{u}}} - \widehat{\underline{\underline{u}}\underline{\underline{u}}} + \widehat{\underline{\underline{u}}}\widehat{\underline{\underline{u}}} = \widehat{\underline{\underline{u}}}\widehat{\underline{\underline{u}}} - \widehat{\underline{\underline{u}}}\widehat{\underline{\underline{u}}} \Rightarrow \underline{\underline{L}} = \underline{\underline{\tau}}_{test}^{sgs} - \widehat{\underline{\underline{\tau}}^{sgs}} = \widehat{\underline{\underline{u}}}\widehat{\underline{\underline{u}}} - \widehat{\underline{\underline{u}}}\widehat{\underline{\underline{u}}} \quad (2.83)$$

Συνδυασμός των σχέσεων (2.81), (2.82) και (2.83) οδηγεί στην παρακάτω σχέση:

$$\underline{\underline{L}} = \underline{\underline{\tau}}_{test}^{sgs} - \widehat{\underline{\underline{\tau}}^{sgs}} = -2(C_s \Delta)^2 \left| \underline{\underline{\tilde{S}}} \right| \underline{\underline{\tilde{S}}} + 2(C_s \hat{\Delta})^2 \left| \underline{\underline{\hat{S}}} \right| \underline{\underline{\hat{S}}} \Rightarrow \underline{\underline{L}} = -2(C_s \Delta)^2 \underline{\underline{M}} \quad (2.84)$$

$$\text{Όπου ο τανυστής } \underline{\underline{M}} \text{ δίνεται από τη σχέση: } \underline{\underline{M}} = \left(\frac{\hat{\Delta}}{\Delta} \right)^2 \left| \underline{\underline{\tilde{S}}} \right| \underline{\underline{\tilde{S}}} - \left| \underline{\underline{\hat{S}}} \right| \underline{\underline{\hat{S}}} \quad (2.85)$$

Για να προκύψει μία διακριτή βαθμωτή τιμή του δυναμικού συντελεστή $C_d = (C_s \Delta)^2$ του μοντέλου Smagorinsky σε κάθε σημείο του υπολογιστικού

πλέγματος από τη σχέση (2.84), η τελευταία πολλαπλασιάζεται (double contraction) από αριστερά και δεξιά με τον τανυστή $\underline{\underline{M}}$.

$$\underline{\underline{L}} : \underline{\underline{M}} = -2(C_s \Delta)^2 \underline{\underline{M}} : \underline{\underline{M}} \Rightarrow (C_s \Delta)^2 = -\frac{1}{2} \frac{\underline{\underline{L}} : \underline{\underline{M}}}{\underline{\underline{M}} : \underline{\underline{M}}} \Rightarrow C_d = -\frac{1}{2} \frac{\underline{\underline{L}} : \underline{\underline{M}}}{\underline{\underline{M}} : \underline{\underline{M}}} \quad (2.86)$$

Με βάση την παραπάνω ανάλυση προκύπτει ότι κατά την εφαρμογή του δυναμικού μοντέλου Smagorinsky δεν είναι απαραίτητος ο ορισμός του μήκους του φίλτρου εκ των υστέρων με την έννοια ότι κατά τη διαδικασία υπολογισμού του δυναμικού συντελεστή C_d απαιτείται μόνο η γνώση του λόγου του φίλτρου πλέγματος προς το φίλτρο δοκιμής, ο οποίος όπως αναφέρθηκε λαμβάνεται συνήθως ίσος με 2 (στην παρούσα διδακτορική διατριβή λήφθηκε ίσος με 2). Επιπλέον ο συντελεστής έχει τη δυνατότητα να μεταβάλλεται τόσο χωρικά όσο και χρονικά με αποτέλεσμα το μοντέλο να διαθέτει από την κατασκευή του μία δυνατότητα αναπροσαρμογής σε περιοχές υψηλής ή χαμηλής διάτμησης. Επομένως θεωρητικά παρέχεται η δυνατότητα διαφορετικής πρόβλεψης και προσαρμογής του μοντέλου στις διάφορες περιοχές του ροϊκού πεδίου.

2.6 Κώδικας φασματικών πεπερασμένων στοιχείων – Χωρική και χρονική διακριτοποίηση

Ο κώδικας ο οποίος χρησιμοποιήθηκε και επεκτάθηκε στην παρούσα διδακτορική διατριβή αναπτύχθηκε αρχικά από τους Fischer & Tufo - 2000 και βασίζεται στα φασματικά πεπερασμένα στοιχεία [Deville - 2002]. Η συμπεριφορά του μοντέλου προσεγγιστικής ανέλιξης (ADM) και του μοντέλου Smagorinsky σε συνδυασμό με τα φασματικά πεπερασμένα στοιχεία δεν έχει ερευνηθεί πλήρως, καθόσον δεν είναι ξεκάθαρη η φυσική συμπεριφορά αυτών στην περίπτωση που η διαδικασία φιλτραρίσματος λαμβάνει χώρα στον πολυωνυμικό και όχι στο φυσικό χώρο (πεπερασμένοι όγκοι -finite volume-), κάτι το οποίο διερευνάται εκτενέστερα στη συνέχεια.

Η χωρική διακριτοποίηση του συστήματος των εξισώσεων γίνεται, αφού προηγουμένως ολόκληρη η υπολογιστική περιοχή έχει χωριστεί σε εξάεδρα, τα οποία εν συνεχεία μέσω μετασχηματισμού συντεταμένων μετατρέπονται σε κανονικοποιημένα εξάεδρα. Μετέπειτα όλα τα δεδομένα του προβλήματος και οι μεταβλητές αυτού εκφράζονται ως ανάπτυγμα σειράς πολωνύμων Lagrange βαθμού

N_s υπολογισμένων στα κομβικά σημεία Gauss – Lobatto x_i [Canuto - 1988]. Η προσεγγιστική τιμή μίας συνάρτησης $f(x)$ στην περίπτωση μονοδιάστατου χώρου μπορεί να εκφραστεί ως:

$$f(x) = \sum_{i=0}^{N_s} f_i \cdot h_i(x), \text{ με } h_i(x) = \prod_{k=0, k \neq i}^{N_s} \frac{(x - x_k)}{(x_i - x_k)} \quad (2.87)$$

όπου $h_i(x)$ είναι το πολυώνυμο Lagrange βαθμού i , f_i οι συντελεστές του αναπτύγματος της σειράς και x_i είναι τα κομβικά σημεία Gauss – Lobatto τα οποία προκύπτουν από τη σχέση:

$$x_i = -\cos\left(\frac{i\pi}{N_s}\right), \text{ με } i = 0, \dots, N_s \quad (2.88)$$

Για τη χρονική διακριτοποίηση ο υπάρχων κώδικας χρησιμοποιεί ένα μικτό σχήμα explicit - implicit 2^ο βαθμού (Backward Differentiation 2nd order), όπου όλοι οι όροι του τελικού συστήματος των εξισώσεων διακριτοποιούνται με τη χρήση μόνο προηγούμενων τιμών (explicit), εκτός από τον όρο της πίεσης και του ιξώδους, για τη διακριτοποίηση των οποίων απαιτείται η χρήση τόσο προηγούμενων όσο και επόμενων χρονικών περιόδων (implicit).

Στην περίπτωση συμπιεστής ροής με ένα είδος και με τη θεώρηση μεταβολών θερμοκρασίας το τελικό διακριτοποιημένο στο χρόνο σύστημα εξισώσεων που προκύπτει με τη χρήση της μεθόδου άμεσης προσομοίωσης είναι:

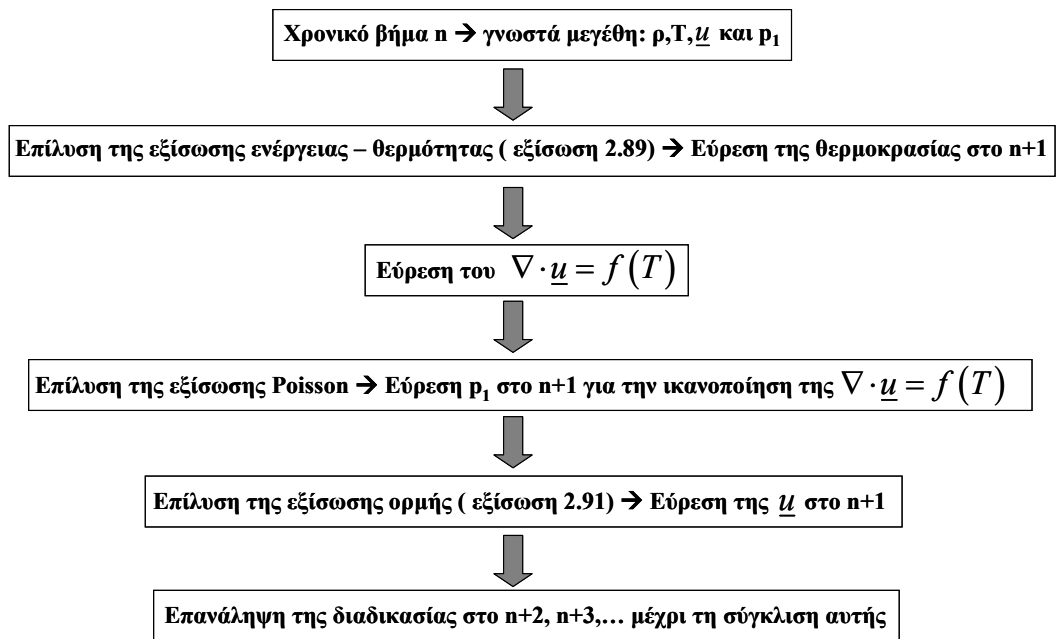
$$\frac{1}{\Delta t} \left(\sum_{q=0}^J \alpha_q T^{n+1-q} \right) = - \left(\sum_{q=0}^J \beta_q \underline{u}^{n-q} \right) \cdot \nabla T^{n+1} + \frac{a}{\text{Re Pr}} \nabla^2 T^{n+1} \quad (2.89)$$

$$Q^{n+1} = \frac{1}{\text{Re Pr}} \nabla^2 T^{n+1} \quad (2.90)$$

$$\frac{1}{\Delta t} \sum_{q=0}^J \alpha_q \underline{u}^{n+1-q} = - \sum_{q=0}^{J-1} \beta_q (\underline{u} \cdot \nabla \underline{u})^{n-q} - \frac{1}{\rho} \nabla p^{n+1} + \frac{\nu}{\text{Re}} \nabla^2 \underline{S}^{n+1} \quad (2.91)$$

Όπου Δt το χρονικό βήμα της μεθόδου, α_q και β_q οι συντελεστές του explicit και implicit μέρους του J βαθμού του σχήματος που χρησιμοποιείται [Orszag - 1986, Karniadakis - 1991] και Q^{n+1} ή “θερμική” κλίση (thermal divergence) [Tomboulides - 1999].

Στο παρακάτω ροϊκό διάγραμμα απεικονίζεται γενικά η επαναληπτική διαδικασία που γίνεται κατά τη διάρκεια επίλυσης των εξισώσεων από τον κώδικα.



Υποθέτοντας ότι τη χρονική στιγμή n είναι γνωστά τα μεγέθη ρ, T, \underline{u} και p_1 , πυκνότητα, θερμοκρασία, ταχύτητα και υδροδυναμική πίεση αντίστοιχα, από την εξίσωση (2.89) υπολογίζεται η θερμοκρασία στο χρονικό βήμα $n+1$ η οποία χρησιμοποιείται στην καταστατική εξίσωση (2.42) για τον υπολογισμό της πυκνότητας στο ίδιο βήμα. Εν συνεχεία υπολογίζεται η κλίση του πεδίου ταχύτητας από την εξίσωση (2.90), το οποίο αποτελεί συνάρτηση της κλίσης του θερμοκρασιακού πεδίου. Μετέπειτα επιλύεται μία εξίσωση Poisson για την πίεση p_1 στο βήμα $n+1$, έως ότου να ικανοποιηθεί η τιμή της κλίσης του πεδίου ταχύτητας που υπολογίστηκε από την εξίσωση (2.90). Η εξίσωση Poisson προκύπτει από την κλίση της εξίσωσης της ορμής και περιγράφεται αναλυτικά από τους [Tomboulides et al. - 1999]. Τέλος επιλύεται η εξίσωση της ορμής (2.91) για την εύρεση του ροϊκού πεδίου ταχύτητας \underline{u} στο χρονικό βήμα $n+1$ και η διαδικασία επαναλαμβάνεται για τα επόμενα χρονικά βήματα $n+2, n+3, \dots$, έως τη σύγκλιση της υπολογιστικής διεργασίας.

2.6.1 Διαμόρφωση των εξισώσεων στην περίπτωση του μοντέλου προσεγγιστικής ανέλιξης (Approximate Deconvolution Model - ADM)

Στην περίπτωση του μοντέλου προσεγγιστικής ανέλιξης, όπως αυτό διατυπώθηκε στην παράγραφο 2.4 και με τη θεώρηση ασυμπίεστης ροής χωρίς θερμοκρασιακές

μεταβολές, με ένα είδος, το τελικό σύστημα των χρονικά διακριτοποιημένων εξισώσεων που προκύπτει μετά από την επίλυση του προβλήματος κλεισίματος αυτών είναι:

$$Q^{n+1} = 0 \quad (2.92)$$

$$\frac{1}{\Delta t} \sum_{q=0}^J \alpha_q \tilde{\underline{u}}^{n+1-q} = -\bar{\rho} \sum_{q=0}^{J-1} \beta_q \left[\chi_u (I - Q_N * G) + \tilde{\underline{u}} (\underline{u}^* \cdot \nabla) \underline{u}^* \right]^{n-q} - \frac{1}{\bar{\rho}} \nabla \bar{p}_{\text{mod}}^{n+1} + \frac{\nu}{\text{Re}} \nabla \tilde{\underline{S}}^{n+1} \quad (2.93)$$

2.6.2 Διαμόρφωση των εξισώσεων στην περίπτωση του μοντέλου Smagorinsky με σταθερό C_s και δυναμικό υπολογισμού αυτού (Constant Smagorinsky Model - CSM και Dynamic Smagorinsky Model - DSM)

Στην περίπτωση του μοντέλου Smagorinsky (κλασσικό και δυναμικό), όπως αυτό διατυπώθηκε στην παράγραφο 2.5.1 και 2.5.2 και με τη θεώρηση ασυμπίεστης ροής χωρίς θερμοκρασιακές μεταβολές, με ένα είδος, το τελικό σύστημα των χρονικά διακριτοποιημένων εξισώσεων που προκύπτει μετά από την επίλυση του προβλήματος κλεισίματος αυτών είναι:

$$Q^{n+1} = 0 \quad (2.94)$$

$$\frac{1}{\Delta t} \sum_{q=0}^J \alpha_q \tilde{\underline{u}}^{n+1-q} = -\sum_{q=0}^{J-1} \beta_q \left[(\tilde{\underline{u}} \cdot \nabla \tilde{\underline{u}}) + \frac{2\nu_{\text{exp}}}{\text{Re}} \nabla \tilde{\underline{S}} \right]^{n-q} - \frac{1}{\bar{\rho}} \nabla \bar{p}_{\text{mod}}^{n+1} + \frac{\nu_{\text{impl}}}{\text{Re}} \nabla \tilde{\underline{S}}^{n+1} \quad (2.95)$$

Για να μειωθεί η επίδραση της συνεισφοράς διάχυσης του όρου κλίσης των υποπλεγματικών κλιμάκων ($\nabla \tilde{\underline{S}}^{n+1}$), όσο αφορά στην ευστάθεια του υπολογιστικού κώδικα ακολουθήθηκε η διαδικασία που αναφέρεται στους Blackburn – 2003 και Schmidt - 2001, κατά την οποία το άθροισμα του μοριακού και του τυρβώδους ιξώδους $\nu_{\text{eff}} = \nu_{\text{mol}} + \nu_t$ αναλύθηκε σε μία συνιστώσα η οποία είναι χωρικά σταθερή ν_{eff} και σε μία δεύτερη η οποία μεταβάλλεται ($\nu_{\text{eff}} - \nu_{\text{ref}}$). Το μέρος του συνολικού ιξώδους στο οποίο χρησιμοποιήθηκαν μόνο προηγούμενες τιμές (explicit) για τη χρονική διακριτοποίηση αφορά στο $\nu_{\text{exp}} = \nu_{\text{eff}} - \nu_{\text{ref}}$, ενώ για τον όρο ν_{ref} χρησιμοποιήθηκαν τόσο επόμενες όσο και προηγούμενες τιμές $\nu_{\text{imp}} = \nu_{\text{ref}}$. Επομένως η εξίσωση (2.95) διαμορφώνεται στην:

$$\frac{1}{\Delta t} \sum_{q=0}^J \alpha_q \tilde{u}^{n+1-q} = - \sum_{q=0}^{J-1} \beta_q \left[(\tilde{u} \cdot \nabla \tilde{u}) + \frac{2(v_{eff} - v_{ref})}{Re} \nabla \tilde{S} \right]^{n-q} - \frac{1}{\bar{\rho}} \nabla \bar{p}_2^{n+1} + \frac{v_{ref}}{Re} \nabla \tilde{S}^{n+1} \quad (2.96)$$

Η επιλογή του όρου v_{ref} γίνεται με κριτήριο τη διατήρηση της σταθερότητας της υπολογιστικής διεργασίας. Οι Blackburn et al. - 2003 χρησιμοποίησαν για την τιμή του v_{ref} την μέγιστη τιμή του v_{eff} σε ολόκληρο το υπολογιστικό πλέγμα. Στην παρούσα διδακτορική διατριβή, όπως θα αναλυθεί διεξοδικά στο κεφάλαιο 3 δεν χρησιμοποιήθηκε κάποια κατεύθυνση ομοιογένειας της ροής για την εύρεση ενός μέσου χρονικού όρου με αποτέλεσμα η διακύμανση της μέγιστης του όρου v_{eff} να είναι αρκετά μεγάλη, γεγονός που είχε ως συνέπεια την αποσταθεροποίηση της υπολογιστικής διαδικασίας. Για το λόγο αυτό για την τιμή του v_{ref} επιλέχθηκε η χωρική μέση τιμή του v_{eff} σε ολόκληρο το υπολογιστικό πλέγμα, η διακύμανση της οποίας ήταν πολύ χαμηλότερη σε σχέση με την αντίστοιχη της μέγιστης τιμής αυτού.

2.7 Διαδικασία φιλτραρίσματος

Η διαδικασία φιλτραρίσματος λαμβάνει χώρα στον πολυωνυμικό χώρο. Στο χώρο αυτό οποιαδήποτε μεταβλητή με συγκεκριμένο πεδίο ορισμού μπορεί να θεωρηθεί σαν άθροισμα συντελεστών επί την τιμή συγκεκριμένων πολυωνύμων παρεμβολής σε σημεία του πεδίου ορισμού της. Μαθηματικά σε μία χωρική διάσταση και με τη χρησιμοποίηση των πολυωνύμων Legendre - Lagrange [Karniadakis - 1999, Deville - 2002] η παραπάνω διαπίστωση μπορεί να γραφεί ως εξής:

$$u(x_i) = \sum_{j=0}^{N_s} u'_j \cdot h_j(x_i) \quad (2.97)$$

όπου x_i είναι τα σημεία διακριτοποίησης του υπολογιστικού πλέγματος, $u(x_i)$, η τιμή της μεταβλητής στο αντίστοιχο σημείο, u'_j ο j συντελεστής της πολυωνυμικής προσέγγισης και $h_j(x_i)$ είναι η τιμή του πολυωνύμου Lagrange βαθμού j στο σημείο διακριτοποίησης x_i . Λόγω της εξ ορισμού ιδιότητας των πολυωνύμων Lagrange, βάση της οποίας οι τιμές των συντελεστών δεν μειώνονται με αύξηση του πολυωνυμικού βαθμού j , η διαδικασία φιλτραρίσματος δεν επηρεάζει ιδιαίτερα το

τελικό αποτέλεσμα της φιλτραρισμένης τιμής της μεταβλητής. Για το λόγο αυτό ενδείκνυται η χρησιμοποίηση των πολυωνύμων Legendre [Jan - 2008]. Με βάση λοιπόν τα πολυώνυμα Legendre η σχέση (2.97) γράφεται ως:

$$u(x_i) = \sum_{j=0}^N u'_j \cdot L_j(x_i) \quad (2.98)$$

ή με τη μορφή πινάκων:

$$\underline{u} = \underline{L} \cdot \underline{u}' \quad (2.99)$$

Η βασική ιδέα της διαδικασίας φιλτραρίσματος περιλαμβάνει το φιλτράρισμα της μεταβλητής μέσω του φιλτραρίσματος των συντελεστών u'_j με τη χρησιμοποίηση μίας συνάρτησης μεταφοράς μίας διάστασης (1-D function), οι διακριτές τιμές τις οποίας περιλαμβάνονται στις διαγώνιες θέσεις ενός πίνακα \underline{D}_F . Λόγω της διαγώνιας θέσης που κατέχουν οι τελευταίες, ο συγκεκριμένος πίνακας επιδρά μόνο στους συντελεστές u'_j και όχι στα πολυώνυμα παρεμβολής αυτά καθαντά. Η διαδικασία φιλτραρίσματος αρχικά αφορά στο φιλτράρισμα των συντελεστών u'_j μέσω της σχέσης:

$$\underline{u}' = \underline{D}_F \cdot \underline{u}' \quad (2.100)$$

Επομένως από τη σχέση (2.99) προκύπτει η φιλτραρισμένη προσεγγιστική τιμή $\bar{u}(x_i)$ της μεταβλητής $u(x_i)$:

$$\bar{u}(x_i) = \underline{L} \cdot \underline{u}' \quad (2.101)$$

η οποία με συνδυασμό των σχέσεων (2.99) και (2.100) οδηγεί στην τελική μαθηματική έκφραση της διαδικασίας φιλτραρίσματος:

$$\bar{u} = \underline{L} \cdot \underline{D}_F \cdot \underline{L}^{-1} \cdot u \quad (2.102)$$

Η μορφή των πινάκων \underline{L} , \underline{L}^{-1} , \underline{D}_F φαίνεται παρακάτω:

$$\underline{D}_F = \begin{bmatrix} \text{diag}(1) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \text{diag}(2) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \text{diag}(j) \end{bmatrix}$$

$$\underline{\underline{L}} = \begin{bmatrix} L_1(x_1) & L_2(x_1) & \dots & L_j(x_1) \\ L_1(x_2) & L_2(x_2) & \dots & L_j(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ L_1(x_i) & L_2(x_i) & \dots & L_j(x_i) \end{bmatrix} \quad \underline{\underline{L}}^{-1} = \begin{bmatrix} L_1(x_1) & L_1(x_2) & \dots & L_1(x_i) \\ L_2(x_1) & L_2(x_2) & \dots & L_2(x_i) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ L_j(x_1) & L_j(x_2) & \dots & L_j(x_i) \end{bmatrix}$$

Υπάρχουν δύο δυνατότητες εφαρμογής του φίλτρου. Η πρώτη αφορά στη διαδικασία φιλτραρίσματος κατά την οποία τα όρια των πεπερασμένων στοιχείων παραμένουν ανέπαφα κατά τη διάρκεια αυτής (Boyd space [Boyd - 1998]), με αποτέλεσμα την αποφυγή της τελικής άμεσης συνάθροισης (direct stiffness summation). Η δεύτερη έρχεται σε αντίθεση με την προηγούμενη επηρεάζοντας τα όρια των στοιχείων κατά την εφαρμογή της (Legendre space [Canuto - 1988]).

Η πρακτική εφαρμογή των παραπάνω γίνεται, αφού προηγουμένως η μεταβλητή $u(x_i)$ με πεδίο συγκεκριμένο πεδίο ορισμού x [κάτω όριο, πάνω όριο], εκφραστεί με τη μορφή νέων βασικών συναρτήσεων ξ_m στο μετασχηματισμένο χώρο $[-1,+1]$. Εάν θεωρήσουμε οριακές συνθήκες Dirichlet για τη μεταβλητή $u(x_i)$ της μορφής:

$u(-1) = a$ και $u(+1) = \beta$ τότε ο μετασχηματισμός στο χώρο Boyd, με τη βοήθεια των συναρτήσεων ξ_m μπορεί να γίνει μέσω της σχέσης:

$$u(x) = \frac{a + \beta}{2} + \frac{\beta - a}{2} + \sum_m^{N_B} u'_m \xi_m(x) \quad (2.103)$$

όπου οι συναρτήσεις βάσης Boyd καθορίζονται από την:

$$\xi_m(x) = \begin{cases} L_0(x) & , \text{εάν } m = 0 \\ L_1(x) & , \text{εάν } m = 1 \\ L_m(x) - L_{m-2}(x) & , \text{εάν } m > 1 \end{cases} \quad (2.104)$$

Επομένως σε κάθε σημείο διακριτοποίησης η προσεγγιστική τιμή της μεταβλητής u μπορεί να γραφεί ως:

$$\begin{aligned} u_N(x_i) &= \frac{a + \beta}{2} + \frac{\beta - a}{2} x_i + \sum_m^{N_B} u'_m \xi_m(x_i) \\ &= \frac{a + \beta}{2} + \frac{\beta - a}{2} x_i + \sum_m^{N_B} u'_m \xi_{im} \\ &= \frac{a + \beta}{2} + \frac{\beta - a}{2} x_i + \underline{\underline{\Xi}} u' \end{aligned} \quad (2.105)$$

όπου ο πίνακας $\underline{\underline{\Xi}}$ περιέχει τις τιμές μετασχηματισμού $\underline{\underline{\Xi}} = \xi_m(x_i) = \xi_m(x_i)$. Η διαδικασία φιλτραρίσματος στο χώρο Boyd πραγματοποιείται μέσω της σχέσης:

$$\bar{u}_N = \frac{a + \beta}{2} + \frac{\beta - a}{2} \underline{x} + \underline{\Xi} \cdot \underline{D}_F \cdot \underline{\Xi}^{-1} \underline{u}_N \quad (2.106)$$

Από την οποία όπως παρατηρείται τα όρια των πεπερασμένων στοιχείων δεν επηρεάζονται.

Στην περίπτωση που η διαδικασία φιλτραρίσματος λαμβάνει χώρα στο χώρο Legendre τότε οι σχέσεις (2.103), (2.104), (2.105) και (2.102) διαμορφώνονται αντίστοιχα στις:

$$u(x) = \sum_m^{N_L} u'_m \xi_m(x) \quad (2.107)$$

$$\xi_m(x) = L_m(x) \quad (2.108)$$

$$u_N(x_i) = \sum_m^{N_B} u'_m \xi_m(x_i) = \sum_m^{N_B} u'_m \xi_{im} = \underline{\Xi} \cdot \underline{u}' \quad (2.109)$$

$$\bar{u}_N = \underline{\Xi} \cdot \underline{D}_F \cdot \underline{\Xi}^{-1} \underline{u}_N \quad (2.110)$$

Από την τελευταία σχέση προκύπτει ότι τα όρια των πεπερασμένων στοιχείων επηρεάζονται κατά τη διεργασία με αποτέλεσμα να απαιτείται η εφαρμογή της άμεσης συνάθροισης (direct stiffness summation) μετά τη διαδικασία φιλτραρίσματος, για την αποφυγή ανεπιθύμητων απότομων μεταβολών στα όρια των στοιχείων.

2.7.1 Επιλογή συναρτήσεων πυρήνα / μεταφοράς (kernel function) - Μοντέλο προσεγγιστικής ανέλιξης (Approximate Deconvolution Model - ADM)

Όπως αναφέρθηκε και στην προηγούμενη ενότητα η βασικότερη παράμετρος της διαδικασίας φιλτραρίσματος είναι η μορφή της συνάρτησης μεταφοράς / πυρήνα (kernel function), η οποία χρησιμοποιείται για το φιλτράρισμα των συντελεστών της σειράς του πολυωνυμικού αναπτύγματος, που χρησιμοποιείται για την προσέγγιση της αναλυτικής λύσης.

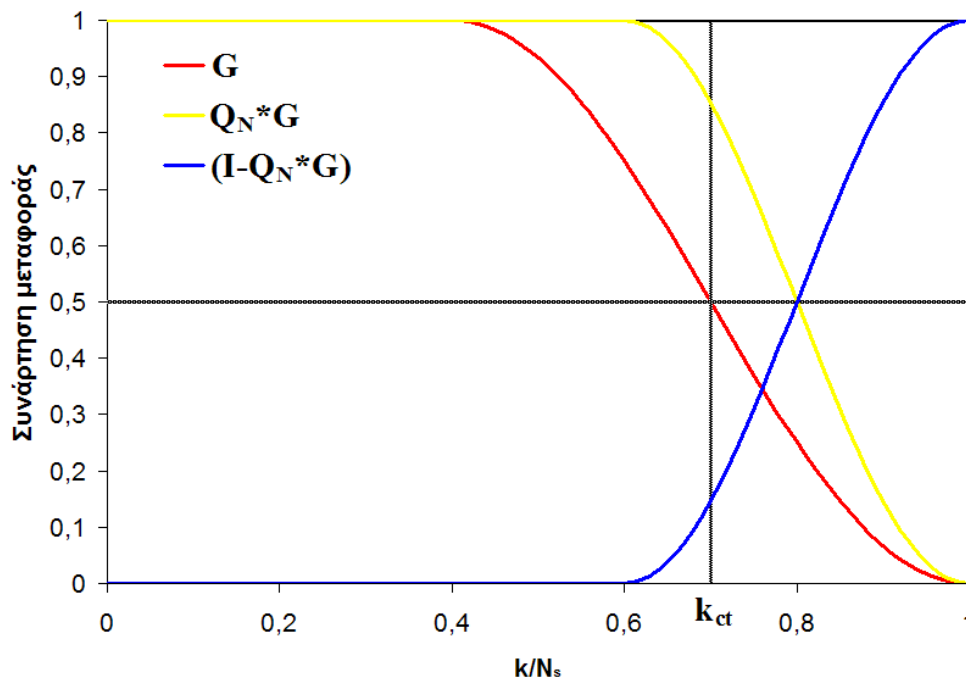
Στην περίπτωση του μοντέλου προσεγγιστικής ανέλιξης η μορφή της συνάρτησης μεταφοράς βασίστηκε στους Stolz και Adams - 2001, ενώ η εισαγωγή της στον υπάρχοντα κώδικα έγινε από τον Marco Kueng και είναι η παρακάτω:

$$G\left(\frac{\kappa}{N_s}, \kappa_{ct}\right) = \begin{cases} 1 & , \text{εάν } \frac{\kappa}{N_s} \leq 1 - \kappa_{ct} \\ \frac{1}{2} \left[1 + \cos \left(\frac{\pi \cdot \left(\frac{\kappa}{N_s} - \kappa_{ct} \right)}{2 \cdot (1 - \kappa_{ct})} + \frac{1}{2} \cdot \pi \right) \right] & , \text{διαφορετικά} \\ 0 & , \text{εάν } \frac{\kappa}{N_s} > 1 - \kappa_{ct} \end{cases} \quad (2.111)$$

όπου κ είναι ο πολυωνυμικός βαθμός προσέγγισης, N_s ο μέγιστος πολυωνυμικός βαθμός και κ_{ct} η συχνότητα αποκοπής.

Στο σχήμα 2.2 απεικονίζεται η μονοδιάστατη συνάρτηση πυρήνα του φίλτρου για $\kappa_{ct} = 0.7$, σε σχέση με τον πολυωνυμικό βαθμό προσέγγισης $\kappa (0 < \kappa < N_s)$, καθώς επίσης και η συνάρτηση μεταφοράς του. Η συχνότητα αποκοπής ορίστηκε με βάση τη σχέση:

$$G\left(\frac{\kappa}{N_s} = \kappa_{ct}\right) = \frac{1}{2} \quad (2.112)$$



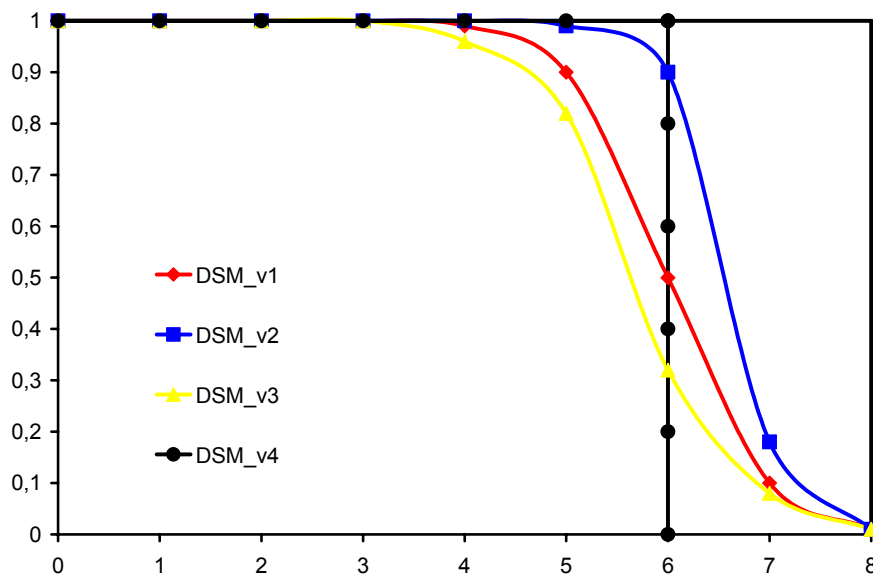
Σχήμα 2.2: Συναρτήσεις μεταφοράς του φίλτρου (G), του τελεστή ($Q_N * G$) και του φίλτρου υψηλών συχνοτήτων του όρου χαλάρωσης ($I - Q_N * G$) για συχνότητα αποκοπής $\kappa_{ct} = 0.7$.

Επιπλέον παρουσιάζεται η συνάρτηση μεταφοράς του τελεστή $(Q_{N_d} * G)$ και το φίλτρο υψηλών συχνοτήτων του όρου χαλάρωσης $(I - (Q_{N_d} * G))$

2.7.2 Επιλογή συναρτήσεων πυρήνα / μεταφοράς (kernel function) - Δυναμικό μοντέλο Smagorinsky (Dynamic Smagorinsky Model - DSM)

Στην περίπτωση του δυναμικού μοντέλου Smagorinsky χρησιμοποιήθηκαν δύο εναλλακτικοί τρόποι δημιουργίας του φίλτρου. Ο 1^{ος} αφορά στην κατάλληλη επιλογή της μονοδιάστατης συνάρτησης μεταφοράς μέσω της χρησιμοποίησης του διαγώνιου πίνακα $\underline{D_F}$, ενώ η 2^η βασίζεται στη θεωρία των Fischer και Mullen - 2001 και εφαρμόζεται σε επίπεδο πεπερασμένων στοιχείων.

1^{ος} τρόπος: Στο σχήμα 2.3 απεικονίζεται η μονοδιάστατη συνάρτηση μεταφοράς του φίλτρου στην περίπτωση πολυωνύμων παρεμβολής 9^{ου} βαθμού. Στην παρούσα διδακτορική διατριβή χρησιμοποιήθηκαν 4 εναλλακτικές συναρτήσεις μεταφοράς, κάθε μία από τις οποίες θα αναφέρεται εν συνεχεία ως DSM_v1, DSM_v2, DSM_v3 και DSM_v4. Όλες οι συναρτήσεις επιδρούν και / ή αποκόπτουν τις υψηλές συχνότητες (modes) της χρησιμοποιούμενης μεταβλητής.



Σχήμα 2.3: Μονοδιάστατη συνάρτηση φίλτρου για τις περιπτώσεις DSM_v1, DSM_v2, DSM_v3 και DSM_v4.

Στον πίνακα 2.1 παρουσιάζεται το ποσοστό κατά το οποίο επηρεάζει η διαδικασία φιλτραρίσματος τα modes υψηλών συχνοτήτων του αναπτύγματος του αθροίσματος, που χρησιμοποιείται για την προσέγγιση της λύσης. Όλες οι συναρτήσεις μεταφοράς που χρησιμοποιήθηκαν επιδρούν μετά το 4^ο mode. Η συνάρτηση μεταφοράς DSM_v3 αποκόπτει το μεγαλύτερο μέρος της ενέργειας με τις DSM_v1 και DSM_v2 να ακολουθούν. Όσο αφορά στην DSM_v4, αυτή αποτελεί ένα απότομο φίλτρο υψηλών συχνοτήτων κατά την εφαρμογή του οποίου παραλείπονται εντελώς οι δύο τελευταίοι όροι του αναπτύγματος που χρησιμοποιείται για την προσέγγιση της λύσης.

Πίνακας 2.1: Επίδραση της συνάρτησης πυρήνα (kernel function) στους πολυωνυμικούς όρους του αναπτύγματος της σχέσεως (2.97).

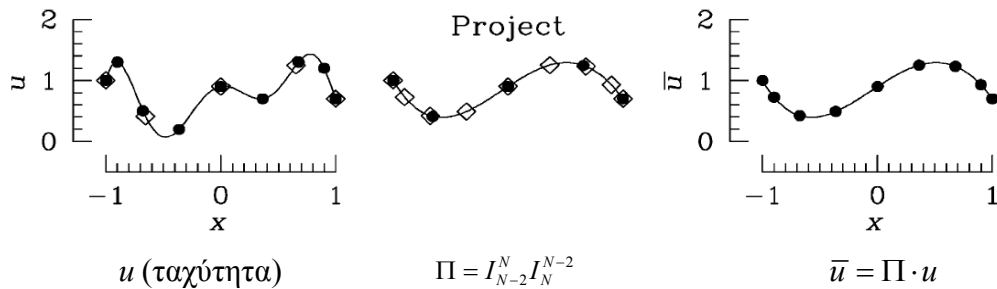
ΦΙΛΤΡΟ	DSM_v1	DSM_v2	DSM_v3	DSM_v4
<i>mode_5</i>	1%	0%	4%	0%
<i>mode_6</i>	10%	1%	18%	0%
<i>mode_7</i>	50%	10%	68%	0%
<i>mode_8</i>	90%	82%	92%	100%
<i>mode_9</i>	100%	100%	100%	100%

2^{ος} τρόπος: Ο 2^{ος} τρόπος βασίζεται στη θεωρία των Fischer και Mullen -2001 και εφαρμόζεται σε επίπεδο φασματικών πεπερασμένων στοιχείων. Οι φιλτραρισμένες τιμές του ροϊκού πεδίου ταχύτητας και πίεσης προκύπτουν από την προβολή των πεδίων σε ένα σύνολο βασικών συναρτήσεων μικρότερου πολυωνυμικού βαθμού. Με τον τρόπο αυτό οι αρχικές τιμές μίας μεταβλητής σε συγκεκριμένες κομβικές θέσεις προβάλλονται στις ίδιες κομβικές θέσεις με τη διαφορά ότι στη δεύτερη περίπτωση έχουν χρησιμοποιηθεί πολώνυμα παρεμβολής, τα οποία αντιστοιχούν σε μικρότερο αριθμό Gauss - Lobatto -Legendre (GLL) σημείων. Η επέκταση της διαδικασίας φιλτραρίσματος στις τρεις διαστάσεις είναι εφικτή μέσω υπολογισμών που στηρίζονται σε πολλαπλασιασμό πινάκων [Blackburn - 2003, Bouffanais - 2007]. Για παράδειγμα σε μία διάσταση, εάν I_{N-2}^N είναι ο τελεστής ο οποίος παρεμβάλει ένα πολώνυμο βαθμού N-2 με $N_p = N-1$ κόμβους σε ένα σύνολο N κόμβων τότε ο τελεστής $\Pi = I_{N-2}^N I_N^{N-2}$ παρεμβάλλει στα GLL σημεία βαθμού N-2 μία οποιαδήποτε

μεταβλητή ορισμένη στα ίδια GLL σημεία βαθμού N και τη μεταφέρει πίσω στο αρχικό πλέγμα βαθμού N . Η μαθηματική μορφή του τελεστή I_N^{N-2} έχει τη μορφή:

$$I_N^{N-2} = \frac{\prod_{\substack{p=0 \\ p \neq j}}^N (x_j - x_p)}{\prod_{\substack{q=0 \\ q \neq k}}^N (x_k - x_q)}, \quad j = 0, \dots, M, \quad k = 0, \dots, N-2 \quad (2.113)$$

Η διαδικασία φιλτραρίσματος απεικονίζεται στο σχήμα 2.4.



Σχήμα 2.4: Γραφική απεικόνιση της διαδικασίας φιλτραρίσματος στον πολυωνυμικό χώρο.

Στην παρούσα διδακτορική διατριβή μετά από έλεγχο ανεξαρτησίας των λύσεων και μετά από βιβλιογραφική ανασκόπηση, ο αριθμός των κόμβων στο υπολογιστικό πλέγμα για κάθε κελί ορίστηκε ίσος με 9, ενώ ο βαθμός των πολυωνύμων του φίλτρου δοκιμής ίσος με 8 (7 κόμβοι).

Η διαδικασία φιλτραρίσματος όπως περιγράφηκε παραπάνω αφορά σε όλα τα μοντέλα και σε μία χωρική διάσταση. Όπως αναφέρθηκε προηγουμένως η επέκταση της διεργασίας σε 2 ή 3 χωρικές διαστάσεις μπορεί να γίνει μέσω κατάλληλου πολλαπλασιασμού μητρών / πινάκων. Για παράδειγμα εάν η μεταβλητή που πρόκειται να φιλτραριστεί αποτελεί συνάρτηση δύο χωρικών διαστάσεων η διαδικασία φιλτραρίσματος περιγράφεται μαθηματικά από τη σχέση $\bar{u} = \Pi \cdot u \cdot \Pi^T$, ενώ για την περίπτωση τριών διαστάσεων από την:

$$\bar{u} = (\Pi \cdot u \cdot \Pi^T) \cdot \Pi \quad (2.114)$$

Ο δείκτης T στην παραπάνω σχέση υποδηλώνει τον ανάστροφο πίνακα.

2.7.3 Ισοδυναμία των εναλλακτικών τρόπων φιλτραρίσματος

Για να ελεγχθεί η ισοδυναμία των δύο εναλλακτικών τρόπων φιλτραρίσματος που εφαρμόστηκαν στην περίπτωση του δυναμικού μοντέλου Smagorinsky (DSM) εφαρμόστηκε η αντίστροφη διεργασία, με σκοπό να προσδιοριστεί εάν υπάρχει διαγώνιος πίνακας $\underline{\underline{D}}_F$ ή να βρεθεί η μορφή αυτού, στην περίπτωση χρησιμοποίησης του τελεστή $\Pi = I_{N-2}^N I_N^{N-2}$. Η μαθηματική μορφή του τελεστή φιλτραρίσματος στην περίπτωση χρήσης του διαγώνιου πίνακα $\underline{\underline{D}}_F$ δίνεται από τη σχέση (2.110), στην οποία ο πίνακας $\underline{\underline{\Xi}}$ περιέχει τις τιμές της μεταβλητής στο μετασχηματισμένο χώρο ξ [-1,+1] και είναι γνωστός εκ των υστέρων. Εάν υποθέσουμε επιπλέον ότι γνωρίζουμε το φιλτραρισμένο πεδίο της μεταβλητής μέσω του 2^{ου} τρόπου φιλτραρίσματος (σχέση 2.114), τότε η μεταβλητή $\underline{\underline{u}}_N$ της σχέσης (2.110) είναι γνωστή και η ισοδυναμία των δύο διαδικασιών φιλτραρίσματος (σχέσεις 2.110 και 2.114) επιτυγχάνεται εάν ο τελεστής Π είναι ίσος και / ή ισοδύναμος με τον τελεστή $\underline{\underline{\Xi}} \cdot \underline{\underline{D}}_F \cdot \underline{\underline{\Xi}}^{-1}$, κάτι το οποίο μαθηματικά εκφράζεται με βάση τη σχέση:

$$\Pi = \underline{\underline{\Xi}} \cdot \underline{\underline{D}}_F \cdot \underline{\underline{\Xi}}^{-1} \quad (2.115)$$

Εάν πολλαπλασιάσουμε και τα δύο μέλη της σχέσης (2.115) από αριστερά με $\underline{\underline{\Xi}}^{-1}$ και από δεξιά με $\underline{\underline{\Xi}}$ τότε προκύπτει η μορφή που θα έχει ο πίνακας $\underline{\underline{D}}_F$ στην περίπτωση του 2^{ου} τρόπου φιλτραρίσματος μέσω της παρακάτω ακολουθίας πράξεων:

$$\Pi = \underline{\underline{\Xi}} \cdot \underline{\underline{D}}_F \cdot \underline{\underline{\Xi}}^{-1} \Rightarrow \underline{\underline{\Xi}}^{-1} \cdot \Pi \cdot \underline{\underline{\Xi}} = \underline{\underline{\Xi}}^{-1} \cdot \underline{\underline{\Xi}} \cdot \underline{\underline{D}}_F \cdot \underline{\underline{\Xi}}^{-1} \cdot \underline{\underline{\Xi}} \Rightarrow \underline{\underline{\Xi}}^{-1} \cdot \Pi \cdot \underline{\underline{\Xi}} = \underline{\underline{I}} \cdot \underline{\underline{D}}_F \cdot \underline{\underline{I}} \Rightarrow \underline{\underline{D}}_F = \underline{\underline{\Xi}}^{-1} \cdot \Pi \cdot \underline{\underline{\Xi}}$$

Επομένως η μορφή του πίνακα $\underline{\underline{D}}_F$ προκύπτει με πολλαπλασιασμό πινάκων οι οποίοι είναι εκ των υστέρων γνωστοί. Η μορφή του πίνακα $\underline{\underline{D}}_F$ που προέκυψε είναι η παρακάτω:

$$\underline{\underline{D}}_F = \begin{bmatrix} \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & -0.8523 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.116)$$

Όπως παρατηρείται ο πίνακας $\underline{\underline{D_F}}$ στην περίπτωση αυτή δεν είναι διαγώνιος. Ωστόσο παρατηρείται καθαρά ότι κατά τη διαδικασία του 2^{ου} τρόπου φιλτραρίσματος η επίδραση του πίνακα $\underline{\underline{D_F}}$ είναι μηδενική για τους έξι πρώτους συντελεστές του αναπτύγματος της σειράς της πολυωνμικής προσέγγισης της μεταβλητής. Ο πίνακας επιπλέον αποκόπτει τους δύο τελευταίους όρους της σειράς, κάτι το οποίο είναι αναμενόμενο καθόσον ο τελεστής που χρησιμοποιείται στο 2^ο τρόπο φιλτραρίσματος χρησιμοποιεί πολώνυμα βαθμού $N-2 = 9-2 = 7$, ενώ ταυτόχρονα επιδρά και στον 7^ο όρο της σειράς για την αποφυγή συσσώρευσης της ενέργειας κοντά στη συχνότητα αποκοπής. Συνάγεται λοιπόν το συμπέρασμα ότι η μορφή του πίνακα στην 2^η διεργασία φιλτραρίσματος δεν είναι διαγώνια, ωστόσο όμως η διεργασία είναι ισοδύναμη και παρέχει τα ίδια αποτελέσματα με την 1^η, εάν ο πίνακας $\underline{\underline{D_F}}$ αντικατασταθεί με αυτόν της σχέσης (2.116).

2.7.4 Έλεγχος της διαδικασίας φιλτραρίσματος

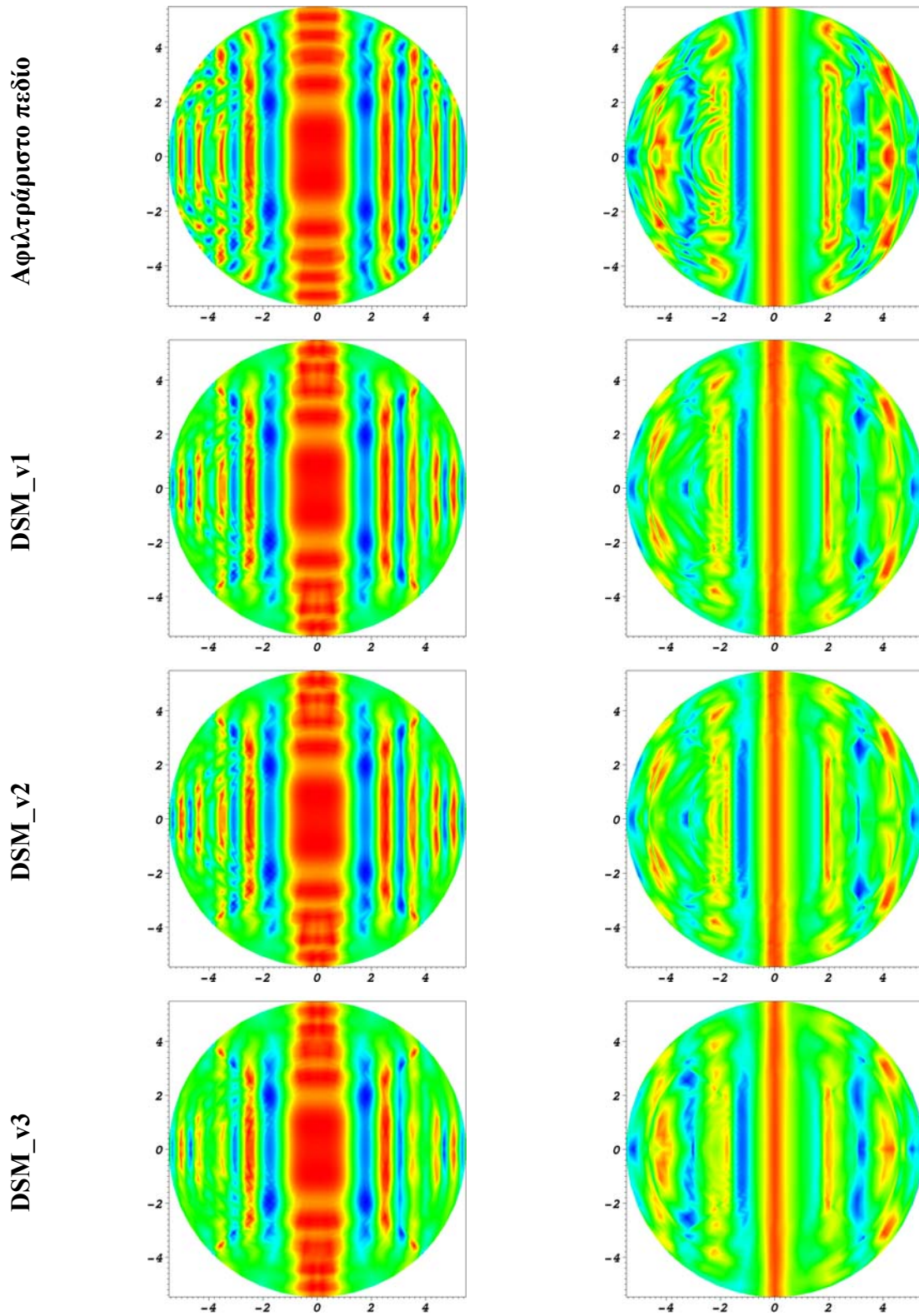
Για τον ποιοτικό έλεγχο της διαδικασίας φιλτραρίσματος επιλέχθηκε ως μεταβλητή μια τυχαία συνάρτηση και εν συνεχεία η ίδια υποβλήθηκε στη διαδικασία φιλτραρίσματος. Η επιλογή της συνάρτησης έγινε με την απαίτηση να περιέχει όσο το δυνατόν υψηλότερες συχνότητες (modes υψηλών συχνοτήτων), ώστε να είναι δυνατή η επίδραση του φίλτρου σε αυτή.

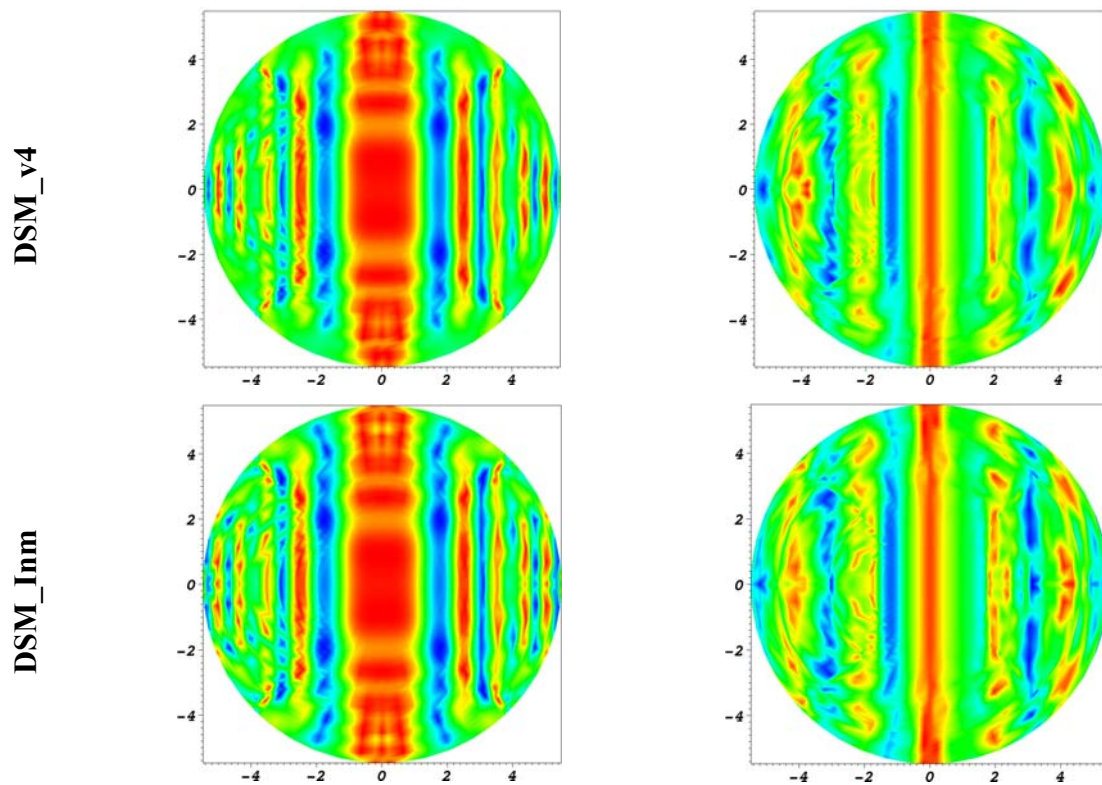
Στο σχήμα 2.5 απεικονίζεται η επίδραση του κάθε φίλτρου για δύο διαφορετικά πεδία συναρτήσεων:

$$1^{\text{η}} \text{ στήλη: } F(x, y) = \cos(y^2) + 10 \cdot \sin(\cos(x^2)) + \sin(y^2)$$

$$2^{\text{η}} \text{ στήλη: } F(x, y) = \sin(x^3) + \cos(x^3) + \tan(\cos(3 \cdot x))$$

$$F = \cos(y^2) + 10 \cdot \sin(\cos(x^2)) + \sin(y^2) \quad F = \sin(x^3) + \cos(x^3) + \tan(\cos(3 \cdot x))$$





Σχήμα 2.5: Επίδραση των διαφορετικών φίλτρων (DSM_v1, DSM_v2, DSM_v3, DSM_v4 και DSM_Inm που χρησιμοποιήθηκαν, σε δύο γνωστές συναρτήσεις $F(x,y)$.

Όπως προκύπτει από το σχήμα 2.5 οι διαφορές μεταξύ του αφιλτράριστου πεδίου και των αντίστοιχων φιλτραρισμένων δεν είναι ιδιαίτερα μεγάλες και όλα τα φίλτρα καταφέρνουν να αποκόψουν τις μεγάλες συχνότητες (μικρές δομές) ικανοποιητικά. Μεγαλύτερο μέρος της ενέργειας αποκόπτεται όπως φαίνεται στην περίπτωση που χρησιμοποιείται η συνάρτηση μεταφοράς DSM_v3, καθώς η επίδραση αυτής στους συντελεστές της σειράς του πολωνυμικού αναπτύγματος, που χρησιμοποιείται για την προσέγγιση της αναλυτικής λύσης είναι μεγαλύτερη (σχήμα 2.3 και πίνακας 2.1). Το φιλτραρισμένο πεδίο που προκύπτει από τη χρησιμοποίηση της συνάρτησης μεταφοράς DSM_v1 είναι πιο ομαλό σε σχέση με το αντίστοιχο της DSM_v2, καθώς το τελευταίο αποκόπτει μικρότερο μέρος της ενέργειας που περιλαμβάνουν οι μικρότερες δομές (δομές υψηλών συχνοτήτων). Όσο αφορά στην περίπτωση DSM_Inm, προκύπτει ότι αυτό διατηρεί τη δομή του αρχικού αφιλτράριστου πεδίου στο μεγαλύτερο βαθμό σε σχέση με τα υπόλοιπα. Με μία αρχική εκτίμηση μπορούμε να πούμε ότι η πληροφορία που περιέχεται στο φιλτραρισμένο πεδίο της περίπτωσης DSM_Inm αποτυπώνει σε μεγαλύτερο βαθμό αυτήν που περιέχεται στο αρχικό

αφιλτράριστο πεδίο, σε σχέση πάντα με τις υπόλοιπες περιπτώσεις φιλτραρίσματος. Στο επόμενο κεφάλαιο γίνεται εκτενής διερεύνηση της επίδρασης των παραπάνω φίλτρων στην ποιότητα των τελικών αποτελεσμάτων της προσομοίωσης, καθώς επίσης και σύγκριση μεταξύ τους.

Κεφάλαιο 3^ο

Υπολογιστική προσομοίωση ισόθερμης δέσμης ομοροής (Isothermal Coflow Jet)

Εισαγωγή

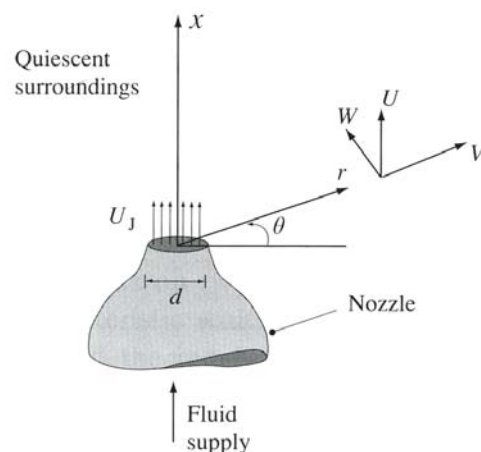
Το παρόν κεφάλαιο αφορά στην υπολογιστική προσομοίωση μίας ισόθερμης γεωμετρίας δέσμης (jet) με τη χρήση της μεθόδου άμεσης προσομοίωσης (DNS) και προσομοίωσης μεγάλων δινών (LES). Στην ενότητα 3.1 γίνεται η περιγραφή της συγκεκριμένης πρότυπης γεωμετρίας που επιλέχθηκε ενώ στην επόμενη ενότητα 3.2 γίνεται μία σύντομη ιστορική αναδρομή στις ροές δέσμης, τόσο για την περίπτωση ισόθερμων ροών όσο και σε περιπτώσεις στις οποίες λαμβάνουν χώρα φαινόμενα καύσης. Η ενότητα 3.3 αφορά στην αναλυτική γεωμετρία και στο υπολογιστικό πλέγμα που χρησιμοποιήθηκε. Εν συνεχεία στις επόμενες παραγράφους 3.4, 3.5, 3.6, 3.7 και 3.8 παρουσιάζονται και αναλύονται τα τελικά αποτελέσματα και η σύγκριση μεταξύ των διαφόρων μεθόδων και μοντέλων που χρησιμοποιήθηκαν, ενώ παράλληλα πραγματοποιείται και μία ανάλυση ευαισθησίας με βάση τις διάφορες παραμέτρους που επηρεάζουν τη λειτουργία τους. Στην παράγραφο 3.9 πραγματοποιείται ο έλεγχος ανεξαρτησίας των τελικών αποτελεσμάτων από το χρησιμοποιούμενο υπολογιστικό πλέγμα, ενώ η τελευταία ενότητα 3.10 του κεφαλαίου συνοψίζει τα τελικά συμπεράσματα και παρατηρήσεις που προέκυψαν από την υπολογιστική μελέτη.

3.1 Περιγραφή της ισόθερμης δέσμης (Isothermal Jet)

Οι δέσμες (jets) ανήκουν σε μία κατηγορία διατάξεων η οποία χρησιμοποιείται σε πάρα πολλές πρακτικές και βιομηχανικές εφαρμογές. Η καύση, η αεροακουστική, η πρόωση καθώς επίσης και η σταθεροποίηση διαφόρων φλογών, αποτελούν χαρακτηριστικά παραδείγματα ροών, στα οποία οι διάφορες αστάθειες και μεγάλες δομές που δημιουργούνται σε όλη την έκταση του ροϊκού πεδίου, είναι άρρηκτα

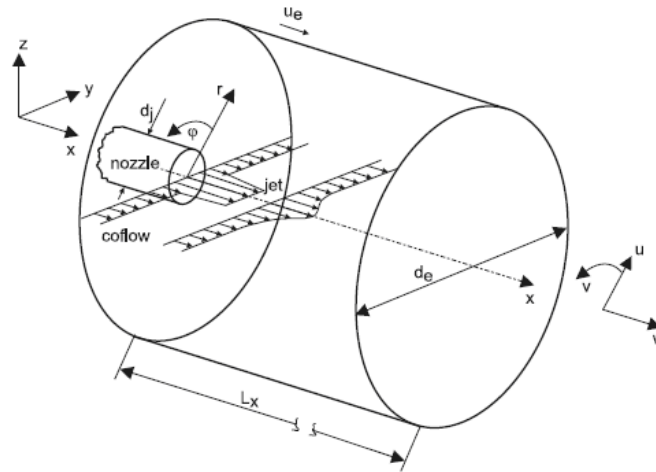
συνδεδεμένες με το ροϊκό πεδίο που εμφανίζεται στις διατάξεις δέσμης (jet). Οι ροές δέσμης από ερευνητική άποψη αποτελούν μία από τις πρότυπες ροές ελεύθερης διάτμησης (free shear flows). Συνάγεται λοιπόν το συμπέρασμα ότι τόσο στην περίπτωση των πρακτικών βιομηχανικών ή μη εφαρμογών, όσο και σε αυτή των ερευνητικών, οι ροές δέσμης (jet) αποτελούν διατάξεις, η πειραματική, θεωρητική και / ή υπολογιστική μελέτη των οποίων είναι σημαντική για την περαιτέρω κατανόηση της συμπεριφοράς τους και της δυνατότητας εξήγησης των φαινομένων που λαμβάνουν χώρα σε αυτά.

Μία συμμετρική δέσμη προκύπτει από τη ροή ρευστού διαμέσου ακροφυσίου - συνήθως κυλινδρικής διατομής - προς ένα ανοιχτό περιβάλλον. Στην περίπτωση που η δέσμη είναι ελεύθερης μορφής, απομακρυσμένη δηλαδή από οποιαδήποτε γεωμετρική δομή και η ροή διαμέσου του ακροφυσίου γίνεται προς ένα αδρανειακά σταθερό περιβάλλον τότε αυτή ονομάζεται ελεύθερη δέσμη (free jet), ενώ στην περίπτωση που η ροή διαμέσου του ακροφυσίου περιβάλλεται από ρεύμα ομοροής, τότε αυτή ονομάζεται δέσμη ομοροής ή coflowing jet. Η συμπεριφορά του ροϊκού πεδίου μετά την έξοδο του ρευστού από το ακροφύσιο εξαρτάται από πολλές παραμέτρους, οι χαρακτηριστικότερες των οποίων αποτελούν το επίπεδο θορύβου στο γεινιάζων περιβάλλον με το οποίο έρχεται σε επαφή το ρευστό, την εισαγωγή επιπλέον ποσότητας ρευστού από το περιβάλλον ρευστό του χώρου, καθώς επίσης και από τη γεωμετρία και την επιφάνεια του ακροφυσίου, οι οποίες καθορίζουν έμμεσα και τις οριακές συνθήκες στο ακροφύσιο (μέσες τιμές, διακυμάνσεις και συσχετίσεις).



Σχήμα 3.1: Σχηματική αναπαράσταση μίας ελεύθερης δέσμης (free jet) κυλινδρικής διατομής σε πολικό σύστημα συντεταγμένων [Pope - 2003].

Η ιδανική πειραματική διάταξη και το σύστημα συντεταγμένων για την μαθηματική περιγραφή και την ανάλυση των εξισώσεων που διέπουν το ροϊκό πεδίο στην περίπτωση μίας ελεύθερης δέσμης (free jet) φαίνεται στο σχήμα 3.1, ενώ στο σχήμα 3.2 απεικονίζεται η περίπτωση μίας δέσμης ομοροής.



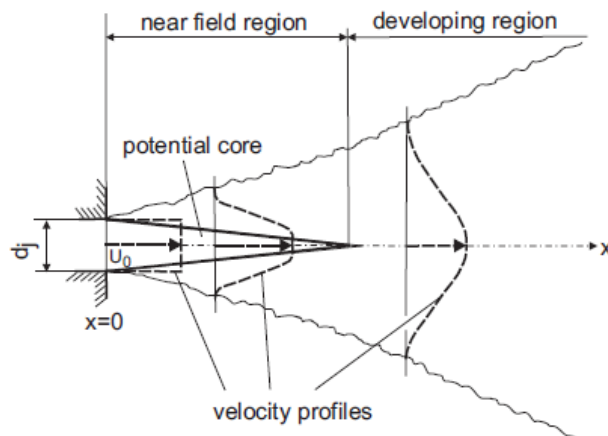
Σχήμα 3.2: Σχηματική αναπαράσταση μίας δέσμης ομοροής (coflow jet) κυλινδρικής διατομής σε πολικό σύστημα συντεταγμένων.

Η ροή στην περίπτωση αυτή είναι στατιστικά σταθερή και συμμετρική ως προς τον άξονα της δέσμης. Για το λόγο αυτό τα στατιστικά μεγέθη εξαρτώνται από την αξονική και ακτινική διεύθυνση (x και r), ενώ παράλληλα είναι ανεξάρτητα από το χρόνο και από την περιφερειακή διεύθυνση (θ). Οι συνιστώσες της ταχύτητας του ροϊκού πεδίου υποδηλώνονται με τα γράμματα u , v , w .

Μία παράμετρος μεγάλης σημασίας τόσο για τις συγκεκριμένες ροές και γενικότερα για κάθε ροή που παρουσιάζεται στην φύση, αποτελεί ο λόγος των δυνάμεων ιξώδους προς τις αδρανειακές δυνάμεις, γνωστός ως αριθμός Reynolds, με βάση των οποίου είναι δυνατός ο διαχωρισμός των διάφορων ροών που παρουσιάζονται στη φύση. Στην περίπτωση της ιδανικής ελεύθερης δέσμης το ροϊκό πεδίο περιγράφεται πλήρως από τα μεγέθη u , d και ν (αξονική ταχύτητα, διάμετρος ακροφυσίου δέσμης, κινηματικό ιξώδες), με βάση τα οποία προκύπτει η αδιαστατοποιημένη παράμετρος, που αποτελεί τον αριθμό Reynolds. Στην περίπτωση που η ροή διαμέσου του ακροφυσίου της δέσμης περιβάλλεται από ρεύμα ομοροής (coflowing jet), μία άλλη βασική παράμετρος, είναι η περίσσεια ταχύτητας $\lambda = \frac{u(0, r, \phi) - u_e}{u_e}$ στην είσοδο,

όπου το $u(0, r, \phi)$ αποτελεί την τοπική αξονική ταχύτητα της δέσμης στην είσοδο του ακροφυσίου και u_e την ταχύτητα του ρευστού ομοροής.

Ο αδιάστατος αριθμός Reynolds κάνει εφικτό το διαχωρισμό των ροών δέσμης σε διάφορες κατηγορίες. Στην περίπτωση που ο αριθμός Reynolds βρίσκεται μέσα στο εύρος $10 < Re < 30$ η ροή είναι στρωτή και παρουσιάζεται σαν μία ομαλή δέσμη ρευστού, σχεδόν γραμμική με ένα αποκλίνων σχήμα στο πάνω μέρος, το οποίο τείνει να γίνει χαοτικό με σχήμα μανιταριού. Η γραμμική περιοχή της δέσμης - το μήκος δηλαδή αυτής - αυξάνει σε συνδυασμό με τη δημιουργία δομών κυλινδρικής μορφής για αριθμούς Reynolds από 30 έως 150. Με επιπλέον αύξηση του αριθμού Reynolds το μήκος της δέσμης διακόπτεται, δημιουργώντας κενά, ενώ δομές πολυπλοκότερες αρχίζουν με την πάροδο του χρόνου να κυριαρχούν και να γίνονται εμφανείς στο συνολικό ροϊκό πεδίο. Για αριθμούς Reynolds πάνω από 300 και μέχρι 1000 η ροή γίνεται τυρβώδης μετά από ένα διακριτό μήκος δέσμης, ενώ για τιμές αυτού από 1000 έως 3000 η μετάβαση στην τυρβώδη κατάσταση γίνεται άμεσα, με το μήκος μετάβασης της δέσμης να μην είναι πλέον ορατό, όπως συμβαίνει για αριθμούς από 300 έως 1000. Τέλος για αριθμούς Reynolds πάνω από 3000 οι τυρβώδεις δομές που δημιουργούνται στο ροϊκό πεδίο δεν μεταβάλλονται σε σημαντικό βαθμό [Olsson 1996, Kueng - 2007].



Σχήμα 3.3: Σχηματική αναπαράσταση ροής ελεύθερης δέσμης [Kueng - 2007].

Για τιμές του αριθμού Reynolds, πάνω από 2000, περιπτώσεις οι οποίες αφορούν την παρούσα αναφορά, η ροή της δέσμης μπορεί να θεωρηθεί ότι αποτελείται από τρεις διακριτές περιοχές (σχήμα 3.3): α) την περιοχή κοντά στο ακροφύσιο, η οποία χαρακτηρίζεται ως μεταβατική περιοχή, στην οποία λαμβάνει χώρα αλλαγή της ροής

από στρωτή σε τυρβώδη, β) την απομακρυσμένη από το ακροφύσιο ροή, κύριο γνώρισμα της οποίας είναι η πλήρως ανεπτυγμένη τύρβη, με όλες τις κλίμακες αυτής να αλληλεπιδρούν μεταξύ τους και τέλος γ) την περιοχή η οποία αναπτύσσεται μεταξύ των δύο τελευταίων και θεωρείται περιοχή ανάπτυξης και συνδετικός κρίκος αυτών.

Η πρώτη από τις τρεις προαναφερθείσες περιοχές ξεκινά από την άκρη του ακροφυσίου εισαγωγής του ρευστού, το προφίλ της ταχύτητας του οποίου αποτελείται από το άθροισμα ενός συγκεκριμένου προφίλ (παραβολικό, υπερβολικό κτλ.) και διακυμάνσεων, οι οποίες εισάγονται με τη βοήθεια μίας γεννήτριας τύρβης τεχνητά, στις συνθήκες εισόδου (inflow generator) [Klein - 2003]. Σε μικρή απόσταση από το ακροφύσιο, δημιουργείται μία δομή δυναμικού πυρήνα, η οποία περιβάλλεται από αναπτυσσόμενα στρώματα ανάμιξης, που συναντούν τον άξονα συμμετρίας της δέσμης σε απόσταση τεσσάρων με πέντε διαμέτρων περίπου κατάντη της ροής, όπου και η δομή του πυρήνα εξαφανίζεται [Olsson - 1996]. Εν συνεχεία οι κυματοειδείς δομές του στρώματος ανάμιξης, οι οποίες μεταβάλλονται με το αρχικό οριακό στρώμα του ακροφυσίου, αλληλεπιδρούν περαιτέρω με το υπόλοιπο ροϊκό πεδίο και οδηγούν σε εμφάνιση πολυπλοκότερων δομών (δίνες σε μορφή δακτυλίου), κύριο γνώρισμα των οποίων αποτελεί η αστάθεια τους, που οδηγεί σε τελική μετάβαση σε τυρβώδη ροή και στην τρίτη περιοχή κατά μήκος της αξονικής γραμμής της δέσμης [Petersen - 1978]. Η έκταση της περιοχής ανάπτυξης (2^η περιοχή) κυμαίνεται από 5 διαμέτρους έως 80, πέραν της οποίας αρχίζει η τρίτη περιοχή, κύριο γνώρισμα της οποίας είναι η πλήρως ανεπτυγμένη τυρβώδης ροή και η ομοιότητα κλιμάκων (scale-similarity) μεταξύ των φυσικών μεγεθών και παραμέτρων [Dowling - 1990].

Σε ένα jet ομοροής το ροϊκό πεδίο επηρεάζεται επιπλέον και από την περίσσεια ταχύτητας λ. Σε περίπτωση που η τελευταία δεν είναι πάρα πολύ μικρή και το προς μελέτη ροϊκό πεδίο δεν βρίσκεται σε πολύ μεγάλη απόσταση από το ακροφύσιο, τότε οι περιοχές και ο τρόπος ανάπτυξης της ροής είναι παρόμοιος με αυτόν που περιγράφηκε προηγουμένως, με τη μόνη διαφορά ότι στην απομακρυσμένη από το ακροφύσιο περιοχή η συμπεριφορά και ανάπτυξη του ροϊκού πεδίου όσο αφορά στις δέσμες ομοροής είναι διαφορετική από αυτή αντίστοιχων ελεύθερων. Η ανάπτυξη της δέσμης ομοροής για παράδειγμα δεν είναι γραμμική στην απομακρυσμένη πάντα από το ακροφύσιο περιοχή, αλλά η δέσμη αναπτύσσεται (διαχέεται) με πιο αργό ρυθμό στην αξονική κατεύθυνση.

3.2 Ιστορική αναδρομή στις ροές δέσμης [ισόθερμες (isothermal) και μη ισόθερμες (non-isothermal)]

Η συγκεκριμένη ενότητα αναφέρεται στην πρόσφατη βιβλιογραφική ανασκόπηση των μεθόδων μεγάλης προσομοίωσης (LES), που χρησιμοποιούνται για την υπολογιστική διερεύνηση ροών τύπου δέσμης με ή χωρίς να λαμβάνουν χώρα φαινόμενα καύσης και αποτελεί μία απλή αναφορά και όχι λεπτομερή περιγραφή αυτών. Αναλύονται επιγραμματικά οι διάφορες μέθοδοι και τα μοντέλα που χρησιμοποιούνται, χωρίς να γίνεται εκτενή και λεπτομερή περιγραφή αυτών ή του τρόπου λειτουργίας τους. Η παρούσα διδακτορική διατριβή αφορά τις υποηχητικές φλόγες διάχυσης (non-premixed flames), η υπολογιστική διερεύνηση των οποίων θα είναι δυνατή στο μέλλον με επέκταση του υπάρχοντα κώδικα για καύση. Εξαιτίας της απαίτησης υποηχητικών ροών, οι ροές που μελετήθηκαν αφορούσαν περιπτώσεις χαμηλού αριθμού Mach, για την αποφυγή ακουστικών κυμάτων στη ροή [Rehm - 1978].

Μεγάλο μέρος των αναφορών για τις τυρβώδεις φλόγες διάχυσης είναι πειραματικές ενώ άλλες αφορούν περιπτώσεις χρήσης, είτε της μεθόδου άμεσης προσομοίωσης (DNS), είτε της προσομοίωσης μεγάλων δινών (LES), για συμπιεστές, χαμηλού αριθμού Mach ροές, στις οποίες εμφανίζονται κύματα πίεσης και δεν αποτελούν αντικείμενο της διδακτορικής διατριβής [Mankabadi - 1994, Bodey - 2003, Gamet - 1998, Uzun - 2003].

Χρησιμοποίηση της μεθόδου άμεσης αριθμητικής προσομοίωσης (Direct Numerical Simulation - DNS), για τη μελέτη αξισυμμετρικής φλόγας διάχυσης μεθανίου έγινε το 1991 από τους [Bardina - 1980], οι οποίοι μελέτησαν τη φύση και τη συμπεριφορά της ασταθούς αλληλεπίδρασης μεταξύ της φλόγας και των δινών που δημιουργούνται, στην περίπτωση κατά την οποία η βαρύτητα είναι μηδενική και στην περίπτωση που αυτή θεωρείται αμελητέα. Η σύγκριση των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης με πειραματικά δεδομένα, όσο αναφορά στις θερμοκρασίες σε τέσσερις διαφορετικές θέσεις της φλόγας έδειξαν αρκετά καλά αποτελέσματα, ενώ η εξήγηση της μορφής της κατανομής της θερμοκρασίας (διπλό peak στο προφίλ αυτής) και του τρεμοπαίγματος (flickering) της φλόγας, αποδόθηκε στην επίδραση των δινών που εισάγονται στην φλόγα λόγω βαρυτικών αλληλεπιδράσεων. Αντίθετα, στην περίπτωση με τη θεώρηση της μηδενικής βαρύτητας η φλόγα παρουσίαζε μία

ομοιόμορφη σταθερή δομή, χωρίς κινούμενες δίνες, όπως στην πρώτη περίπτωση, γεγονός το οποίο υποδεικνύει ότι η βαρύτητα αποτελεί σημαντικό παράγοντα και κυρίαρχη δύναμη στην περίπτωση των φλογών δέσμης διάχυσης. Το μοντέλο ωστόσο παρουσιάζει ένα μειονέκτημα, το οποίο αφορά στη γρηγορότερη πρόβλεψη της ανάπτυξης των εσωτερικών και εξωτερικών δομών που δημιουργούνται, γεγονός που αποδίδεται στις απώλειες λόγω ακτινοβολίας, οι οποίες δεν λήφθηκαν υπόψη.

Επιπρόσθετα με τα παραπάνω οι Grinstein και K.Kailasanath προχώρησαν στην προσομοίωση και υπολογιστική διερεύνηση μίας τρισδιάστατης φλόγας διάχυσης δέσμης για την καύση υδρογόνου [Grinstein - 1995], με τη μόνη διαφορά ότι το ακροφύσιο του jet ήταν τετραγωνικής διαμέτρου, σε αντίθεση με την προηγούμενη αναφορά η οποία αφορούσε δέσμη κυλινδρικής διαμέτρου. Τα αποτελέσματα κατέληξαν στο συμπέρασμα της μειωμένης εισαγωγής αέρα (entrainment) και του μεγέθους της αρχικής δέσμης, λόγω των χημικών αντιδράσεων και των φαινομένων διόγκωσης (expansion), που λαμβάνουν χώρα στην περιοχή κοντά στο ακροφύσιο, σε αντίθεση με τα αποτελέσματα τα οποία προκύπτουν για τις ροές δέσμης, κατά τις οποίες δεν λαμβάνεται υπόψη η καύση (isothermal cases). Ένα βήμα παραπέρα προχώρησαν οι [Jiang - 2003], οι οποίοι μελέτησαν τη δυναμική και τις δομές σε μία φλόγα διάχυσης δέσμης, λαμβάνοντας υπόψη την αλληλεπίδραση των τοιχωμάτων με αυτή και τις δυνάμεις λόγω βαρυτικής αλληλεπίδρασης. Μελετήθηκαν τέσσερις περιπτώσεις, οι οποίες αφορούσαν τα εξής: δύο περιπτώσεις, κατά τις οποίες το ακροφύσιο της δέσμης ήταν κυλινδρικής και τετραγωνικής διατομής αντίστοιχα και το καύσιμο ερχόταν σε επαφή με αδρανειακό και ακίνητο ρευστό (αέρα), και δύο, κατά τις οποίες η γεωμετρία της δέσμης ήταν ίδια με τις προηγούμενες, αλλά όλη η διάταξη αυτής περιβαλλόταν από τετραγωνικής διαμέτρου επιφάνεια (confined jet). Στην περίπτωση που η δέσμη δεν περιβάλλεται από το τοίχωμα, λόγω της τετραγωνικής γεωμετρίας του ακροφυσίου, η εισαγωγή (entrainment) αέρα είναι πιο αποτελεσματική από αυτή της δέσμης κυλινδρικής διατομής, εξαιτίας των δομών που δημιουργούνται λόγω της πολυπλοκότερης γεωμετρίας αυτού. Οι διατάξεις που περιβάλλονται από τοίχωμα σε σχέση με αυτές που είναι ελεύθερες από γεωμετρικές δομές παρουσιάζουν εντονότερη τάση για μετάβαση σε τυρβώδη κατάσταση. Λόγω της τετραγωνικής γεωμετρίας που περιβάλλει τη δέσμη, θα περίμενε κανείς η εισαγωγή αέρα να είναι μικρότερη σε αυτή την περίπτωση, παρόλα αυτά όμως, λόγω της πολυπλοκότερης αλληλεπίδρασης (η οποία οφείλεται στις δομές που δημιουργούνται στη ροή λόγω πιο περίπλοκης γεωμετρίας) της δέσμης με τα

τοιχώματα, η εισαγωγή αέρα παραμένει στα ίδια επίπεδα με αυτή των περιπτώσεων, κατά τις οποίες οι διατάξεις των δεσμών δεν περιβάλλονται από τοιχώματα. Σημαντική διαφορά, αποτελεί το γεγονός της αποτελεσματικότερης εισαγωγής αέρα στην περίπτωση δέσμης κυλινδρικής διατομής, από αυτή της τετραγωνικής διατομής, κάτι το οποίο ήταν αντίθετο με την περίπτωση στην οποία η δέσμη θα ήταν ελεύθερη από τοιχώματα. Δομές παρόμοιες με αυτές των προηγούμενων αναφορών, οι οποίες ευθύνονται για την εισαγωγή αέρα (entrainment) στη φλόγα, παρατηρήθηκαν και σε αυτή την περίπτωση.

Οι Boersma et al. - 1998 χρησιμοποίησαν τη μέθοδο DNS για τη μελέτη της εξάρτησης της ταυτομοιότητας (self – similar) της απομακρυσμένης από τη δέσμη περιοχής, με τις συνθήκες που επικρατούν στην είσοδο, ενώ οι Lubbers et al. - 2001 επεκτάθηκαν στη μελέτη της ταυτομοιότητας (self – similarity) βαθμωτής μεταβλητής στη γεωμετρία της τυρβώδους δέσμης.

Η μέθοδος άμεσης προσομοίωσης (DNS), χρησιμοποιήθηκε και συνεχίζει έως και σήμερα να χρησιμοποιείται επιπλέον και για την ποιοτική και ποσοτική σύγκριση των αποτελεσμάτων, τα οποία προκύπτουν από υπολογιστική διερεύνηση μέσω της μεθόδου προσομοίωσης μεγάλων δινών, καθώς επίσης και για την εγκυρότητα και ισχύ της τελευταίας [James - 2000].

Όλες οι προαναφερθείσες περιπτώσεις, αποτελούν περιπτώσεις κατά τις οποίες η υπολογιστική διερεύνηση του εκάστοτε φαινομένου γίνεται με τη μέθοδο άμεσης επίλυσης, κατά την οποία επιλύεται όλο το εύρος κλιμάκων τύρβης. Λόγω αυτού η μέθοδος άμεσης αριθμητικής επίλυσης έχει δύο μειονεκτήματα, τα οποία την καθιστούν λιγότερο ανταγωνιστική στο βιομηχανικό τομέα, στον οποίο κατά κόρον χρησιμοποιείται η μέθοδος RANS, που αποτελεί ένα από τα χρησιμότερα ερευνητικά εργαλεία της υπολογιστικής προσομοίωσης σε αυτόν. Τα δύο αυτά κύρια μειονεκτήματα αφορούν στην απαίτηση της μεγάλης χρονικής διάρκειας για την εξαγωγή αποτελεσμάτων και τελικών συμπερασμάτων και στην μεγάλη απαίτηση υπολογιστικής μνήμης και ισχύος. Απότοκος αυτών είναι η προσπάθεια μείωσης του χρόνου και της ισχύος που απαιτείται για την εξαγωγή των τελικών αποτελεσμάτων, των προερχόμενων από τις υπολογιστικές προσομοιώσεις, χωρίς να επηρεάζονται τα τελικά συμπεράσματα όσο αφορά στην ποιότητα και στην ισχύ τους. Μία μέθοδος που υπόσχεται τη δυνατότητα διεξαγωγής προσομοιώσεων σε λιγότερο χρόνο και με λιγότερη υπολογιστική ισχύ αποτελεί η μέθοδος προσομοίωσης μεγάλων δινών (LES).

Αναφορικά με τις ροές δέσμης οι [Ribault - 1999] προσομοίωσαν υπολογιστικά με τη συγκεκριμένη μέθοδο μία χωρικά αναπτυσσόμενη δέσμη κυλινδρικής διαμέτρου, με τη χρησιμοποίηση τριών διαφορετικών μοντέλων - το κλασσικό μοντέλο Smagorinsky, το δυναμικό μοντέλο Smagorinsky και το mixed model -, για την προσομοίωση των υποπλεγματικών κλιμάκων. Οι προσομοιώσεις αφορούσαν αρχικά αριθμούς Re της τάξεως των 3000, με τους οποίους έγιναν οι συγκρίσεις των πειραματικών και υπολογιστικών αποτελεσμάτων και επεκτάθηκαν μέχρι αριθμούς Re της τάξεως των 30000, τα αποτελέσματα των οποίων δεν συγκρίθηκαν με πειραματικά δεδομένα, λόγω ανυπαρξίας των τελευταίων, στις προαναφερθείσες συνθήκες. Τα αποτελέσματα της συγκεκριμένης αναφοράς κατάληξαν στο συμπέρασμα της καλύτερης συμπεριφοράς του δυναμικού μοντέλου Smagorinsky και του mixed model, σε σχέση με το κλασσικό μοντέλο Smagorinsky, το οποίο υπερεκτιμά τη σκέδαση της ενέργειας, που λαμβάνει χώρα στις μικρές κλίμακες τύρβης. Η συμπεριφορά του δυναμικού μοντέλου Smagorinsky σε σχέση με το δυναμικό mixed model, είναι παρόμοια, παρόλο που το πρώτο από τα δύο υπολογίζει μικρότερες τιμές των κλιμάκων που μοντελοποιούνται. Η εξήγηση της όμοιας συμπεριφοράς των δύο μοντέλων οφείλεται στο γεγονός της μεγαλύτερης τιμής των κλιμάκων που επιλύονται αναλυτικά με το δυναμικό μοντέλο Smagorinsky, η οποία αντισταθμίζει την μικρότερη τιμή των κλιμάκων που μοντελοποιούνται από αυτό.

Επέκταση των παραπάνω αποτελεί η αναφορά των Hong Yan et al. - 1999, στην οποία γίνεται σύγκριση δύο μοντέλων υποπλεγματικών κενών - Smagorinsky eddy viscosity model και του non-eddy viscosity stimulated small scale model -. Η σύγκριση μεταξύ των δύο κατέληξε στο συμπέρασμα ότι το πρώτο υπερεκτιμά την ένταση της τύρβης (turbulent intensity), ενώ το δεύτερο παρουσιάζει καλύτερη συμπεριφορά σε σχέση πάντα με τις διαθέσιμες πειραματικές μετρήσεις με τις οποίες γίνεται η σύγκριση και ο έλεγχός της εγκυρότητας αυτών.

Προσομοίωση ροών δέσμης, στις οποίες λαμβάνει χώρα και καύση έγιναν την ίδια χρονολογική περίοδο από τους [Desjardin - 1999], οι οποίοι προσομοίωσαν το σχηματισμό αιθάλης στην περιοχή κοντά στο ακροφύσιο της δέσμης σε μία φλόγα διάχυσης δέσμης ακετυλενίου - αέρα. Για το πρόβλημα κλεισίματος των εξισώσεων Navier-Stokes χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο Smagorinsky, ενώ για τις εξισώσεις που αφορούσαν το κλάσμα μάζας (mixture fraction), το αντίστοιχο πρόβλημα ξεπεράστηκε με τη χρησιμοποίηση της μεθόδου σταθερών φλογιδίων (steady flamelets assumption). Τα αποτελέσματα έδειξαν ότι πολλές από τις δομές που

δημιουργούνται στη ροή είναι δυνατό να αναπαρασταθούν αρκετά καλά με τη βοήθεια της προσομοίωσης μεγάλων δινών (LES).

Επιπρόσθετα με την προηγούμενη αναφορά οι [James - 2000] χρησιμοποίησαν ως μοντέλο για τις υδροδυναμικές κλίμακες υποπλεγματικών κενών μία παραλλαγμένη μορφή του μοντέλου Bardina, ενώ το πρόβλημα κλεισίματος (closure problem) των όρων που περιλαμβάνονται στην εξίσωση του κλάσματος ανάμιξης (mixture fraction), επιλύθηκε με τη χρησιμοποίηση της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας με βάση την πυκνότητα (Filtered Mass Density Function - FMDF). Η σύγκριση των αποτελεσμάτων με αυτά που προέκυψαν από τη μέθοδο DNS έδειξαν τη δυνατότητα χρήσης της μεθόδου LES και σε πιο πολύπλοκες ροές που εμπεριέχουν καύση.

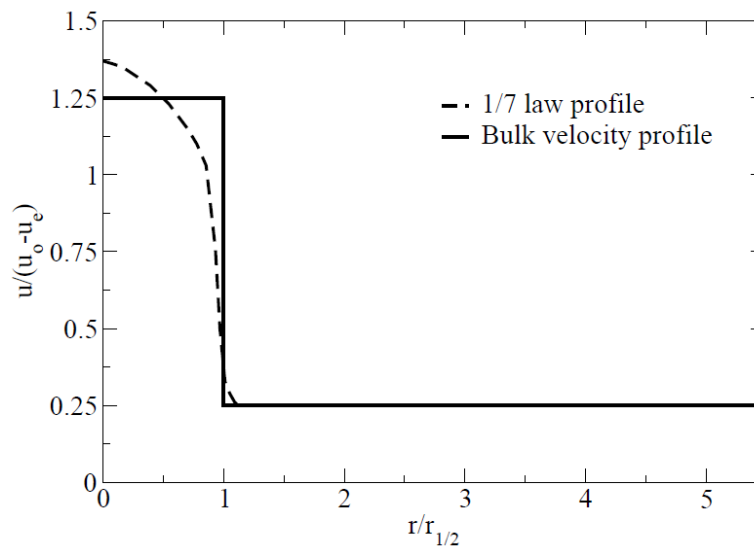
Υπολογιστική διερεύνηση με τη χρησιμοποίηση του μοντέλου eddy viscosity / diffusivity βασισμένο στη υπόθεση κατά Germano, για την επίλυση του προβλήματος κλεισίματος των αγνώστων υδροδυναμικών όρων των εξισώσεων, έγινε από τους [Kempf - 2004]. Η προσομοίωση αφορούσε μία φλόγα διάχυσης δέσμης, ενώ το κλείσιμο (closure problem) των αντίστοιχων αγνώστων όρων της εξίσωσης του κλάσματος ανάμιξης έγινε με τη χρησιμοποίηση της μεθόδου σταθερών φλογιδίων (steady flamelet method). Τα τελικά αποτελέσματα αποτέλεσαν απόδειξη της δυνατότητας της μεθόδου να αναπαραστή σωστά τις κύριες δομές του ροϊκού πεδίου.

Η πρώτη ρεαλιστική περιγραφή μίας τυρβώδους φλόγας με τη χρησιμοποίηση της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας μεταφοράς (Probability Density Function), για την επίλυση του κλεισίματος των όρων που αναφέρονται στις υποπλεγματικές κλίμακες, έγινε από τους Mustata - 2006, ενώ η υπολογιστική διερεύνηση της ίδιας διάταξης [φλόγα διάχυσης δέσμης μεθανίου - αέρα (Sandia D)], έγινε από τους Sheikhi - 2004 με τη χρησιμοποίηση της μεθόδου συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας του Eulerian Monte Carlo πεδίου.

Επέκταση της μεθόδου σε πολύπλοκες γεωμετρίες και περιστρεφόμενες δέσμες έγινε από τους Selle et al. - 2004 και Manuel - 2006, οι οποίοι ενίσχυσαν την άποψη της ικανότητας της μεθόδου για μελλοντική της εφαρμογή σε πολύπλοκες βιομηχανικές εφαρμογές.

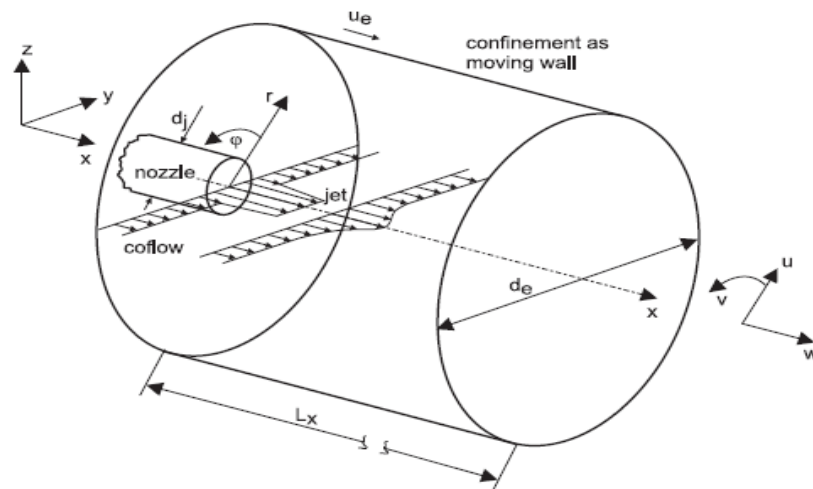
3.3 Αναλυτική Γεωμετρία – Υπολογιστικό Πλέγμα – Οριακές συνθήκες

Η αναλυτική γεωμετρία που μελετήθηκε στην παρούσα διατριβή αφορά στην προσομοίωση μίας κυλινδρικής δέσμης, από την οποία εισέρχεται ρευστό με ταχύτητα u_j (1/7 law profile) μέσα σε ένα ρεύμα ρευστού ομοροής ταχύτητας $u_e = 0.25$ (σχήμα 3.4).

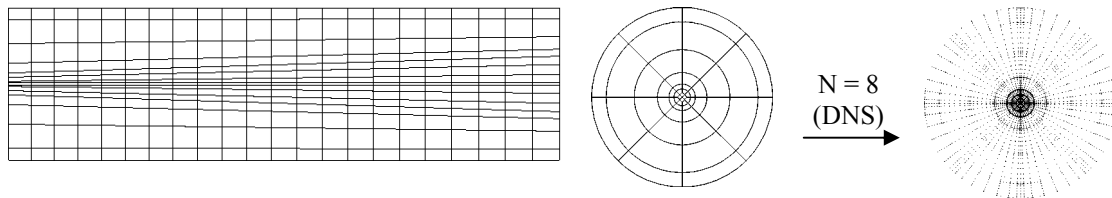


Σχήμα 3.4: Μέσο αξονικό προφίλ ταχύτητας την είσοδο της γεωμετρίας σε συνδυασμό με την bulk ταχύτητα u_e .

Τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της συνολικής διάταξης έχουν αδιαστατοποιηθεί με μήκος αναφοράς τη διάμετρο της δέσμης d_j , ταχύτητα αναφοράς τη διαφορά των ταχυτήτων $u_j - u_e$ και χρόνο αναφοράς το πηλίκο $d_j / (u_j - u_e)$. Με βάση τα μεγέθη αυτά ο αριθμός Reynolds, με τον οποίο πραγματοποιήθηκαν εκτενείς προσομοιώσεις με τη χρήση διαφορετικών μοντέλων τύρβης ήταν ίσος με 2000. Το συνολικό μήκος της διάταξης ανέρχεται σε $L = 40d_j$, ενώ η εξωτερική διάμετρος αυτής σε $d_e = 10.96d_j$ (σχήμα 3.5). Η ταχύτητα στην εξωτερική πλευρά της δέσμης (jet) λήφθηκε ίση με u_e , για την αποφυγή διείσδυσης ροής από το εξωτερικό περιβάλλον, ενώ για όλες τις μεταβλητές χρησιμοποιήθηκαν συνθήκες Neumann στην έξοδο της γεωμετρίας.



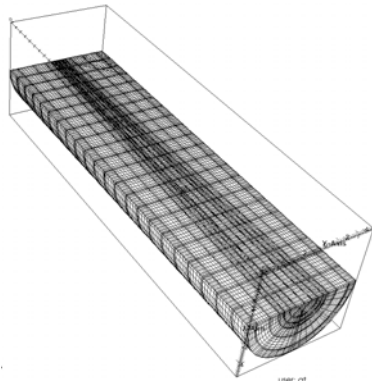
Σχήμα 3.5: Διάταξη της γεωμετρίας της δέσμης (jet).



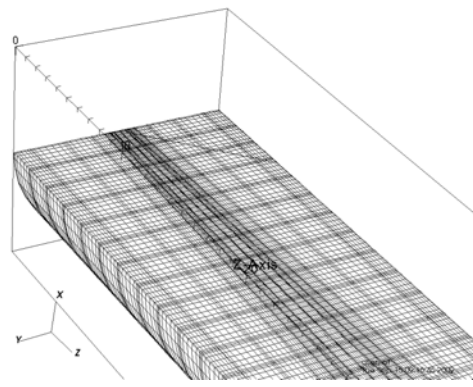
Σχήμα 3.6: Υπολογιστικό πλέγμα (επίπεδο xy , $z=0$).

Σχήμα 3.7: Υπολογιστικό πλέγμα (επίπεδο yz , $x=0$).

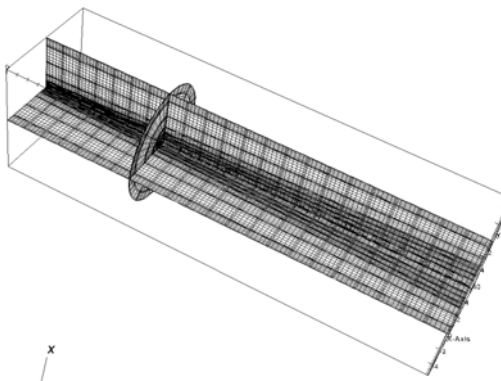
Για τη μέθοδο άμεσης προσομοίωσης χρησιμοποιήθηκε πλέγμα 1144 φασματικών πεπερασμένων στοιχείων με βαθμό πολωνύμων παρεμβολής ίσο με $N = 12$ (σχήμα 3.6 και 3.7) και χρονικό βήμα $dt = 0.001$. Η χωρική διακριτοποίηση είναι συγκρίσιμη με αυτή προηγούμενων μελετών [Rembold - 2003, Olsson – 1996]. Στα σχήματα 3.7, 3.8, 3.9 και 3.10 απεικονίζονται διάφορες τομές του υπολογιστικού πλέγματος στο χώρο και μεγέθυνση αυτών. Όπως φαίνεται και στα σχήματα έχει γίνει πύκνωση του πλέγματος στις περιοχές των διατμητικών τάσεων και στην κύρια περιοχή εμφάνισης της δέσμης.



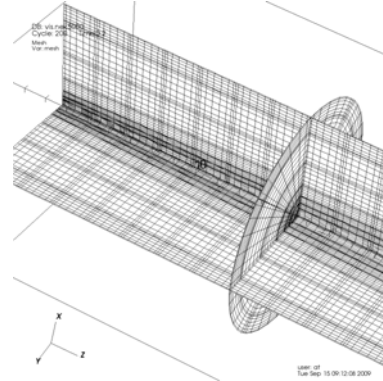
Σχήμα 3.7: Τομή του υπολογιστικού πλέγματος.



Σχήμα 3.8: Λεπτομέρεια του πλέγματος στην είσοδο της γεωμετρίας.



Σχήμα 3.9: Τριπλή τομή του υπολογιστικού πλέγματος στο χώρο.



Σχήμα 3.10: Λεπτομέρεια της τομής του σχήματος 3.9.

Οι σχέσεις με τις οποίες υπολογίστηκαν οι μέσες τιμές και οι συσχετίσεις των διαφόρων μεγεθών που επιλέχθηκαν για περαιτέρω έρευνα και μελέτη αποτελούν στην ουσία αθροίσματα, τα οποία έλαβαν χώρα κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης και είναι της παρακάτω γενικής μορφής:

$$\langle \phi \rangle = \frac{1}{N_t} \sum_{i=1}^{N_t} \phi(\underline{x}, t_i)$$

$$\langle \phi\phi \rangle = \frac{1}{N_t} \sum_{i=1}^{N_t} \phi(\underline{x}, t_i) \phi(\underline{x}, t_i)$$

$$\langle \phi\xi \rangle = \frac{1}{N_t} \sum_{i=1}^{N_t} \phi(\underline{x}, t_i) \xi(\underline{x}, t_i)$$

όπου ϕ , ξ αποτελούν τα φυσικά μεγέθη προς μελέτη, \underline{x} , t_i , το χωρικό διάνυσμα και ο χρόνος, ενώ N_t οι συνολικές χρονικές μονάδες της προσομοίωσης. Το σύμβολο \sum υποδηλώνει άθροιση, ενώ το $\langle \rangle$ μέσο όρο. Τα μεγέθη της εντάσεως της τύρβης,

η πρόβλεψη των οποίων αποτελεί και μέτρο της εγκυρότητας του εκάστοτε μοντέλου μεγάλων δινών, υπολογίστηκαν εν συνεχεία με βάση τις σχέσεις:

$$\langle \phi' \phi' \rangle = \langle \phi \phi \rangle - \langle \phi \rangle \langle \phi \rangle$$

$$\langle \phi' \xi' \rangle = \langle \phi \xi \rangle - \langle \phi \rangle \langle \xi \rangle$$

Όπου ϕ' και ξ' αφορά στη διακύμανση της μεταβλητής ϕ και ξ αντίστοιχα.

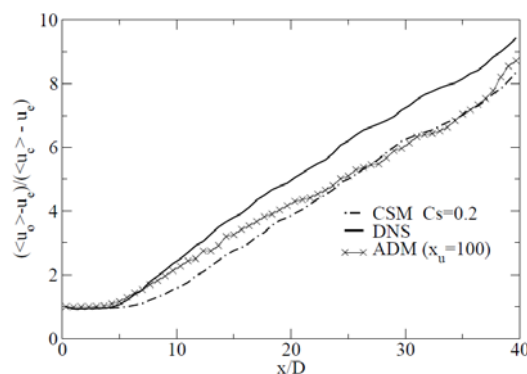
Όσο αφορά στο μοντέλο προσεγγιστικής ανέλιξης και στο μοντέλο Smagorinsky το πλέγμα των 1144 φασματικών πεπερασμένων στοιχείων διατηρήθηκε σταθερό ενώ μειώθηκε σε $N_s = 8$ ο βαθμός πολυωνυμικής παρεμβολής. Τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται αφορούν στατιστικά δεδομένα τα οποία υπολογίστηκαν κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης στο σύνολό της. Αρχικά προσομοιώθηκαν 200 αδιάστατες χρονικές μονάδες έτσι ώστε το ροϊκό πεδίο να αποκτήσει μία στατιστικά μόνιμη ως προς το χρόνο λύση χωρίς την επίδραση των αρχικών ροϊκών συνθηκών, η οποία εν συνεχεία χρησιμοποιήθηκε σαν αρχικό ροϊκό πεδίο για τους υπολογισμούς άμεσης προσομοίωσης (DNS) αλλά και της προσομοίωσης μεγάλων δινών (LES). Η τελική προσομοίωση αφορά υπολογιστικό χρόνο 400 έως και 600 αδιάστατων χρονικών μονάδων, οι οποίες αντιστοιχούν σε πραγματικό χρόνο 4 ημερών σε συστοιχία 64 πολλαπλών επεξεργαστών για κάθε μοντέλο που μελετήθηκε. Η αντίστοιχη πραγματική διάρκεια για τη μέθοδο της άμεσης προσομοίωσης και για τον ίδιο αριθμό επεξεργαστών υπολογίστηκε σε 5.5 έως 6 ημέρες.

3.4 Μοντέλο Προσεγγιστικής Ανέλιξης (ADM) - Μοντέλο Smagorinsky με σταθερό συντελεστή (CSM) - Άμεση Προσομοίωση

Όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως στην ενότητα 3.3, για τη μέθοδο άμεσης προσομοίωσης χρησιμοποιήθηκε πλέγμα 1144 φασματικών πεπερασμένων στοιχείων με βαθμό πολυωνύμων παρεμβολής ίσο με $N = 12$ και χρονικό βήμα $dt = 0.001$. Όσο αφορά στο μοντέλο προσεγγιστικής ανέλιξης και στο μοντέλο Smagorinsky το πλέγμα των 1144 φασματικών πεπερασμένων στοιχείων διατηρήθηκε σταθερό ενώ μειώθηκε σε $N = 8$ ο βαθμός πολυωνυμικής παρεμβολής. Ο συντελεστής χαλάρωσης του μοντέλου προσεγγιστικής ανέλιξης λήφθηκε ίσος με $\chi_u = 100$, ενώ ο συντελεστής C_s του μοντέλου Smagorinsky ίσος με 0.2, σύμφωνα πάντα με τη βιβλιογραφία [Stolz

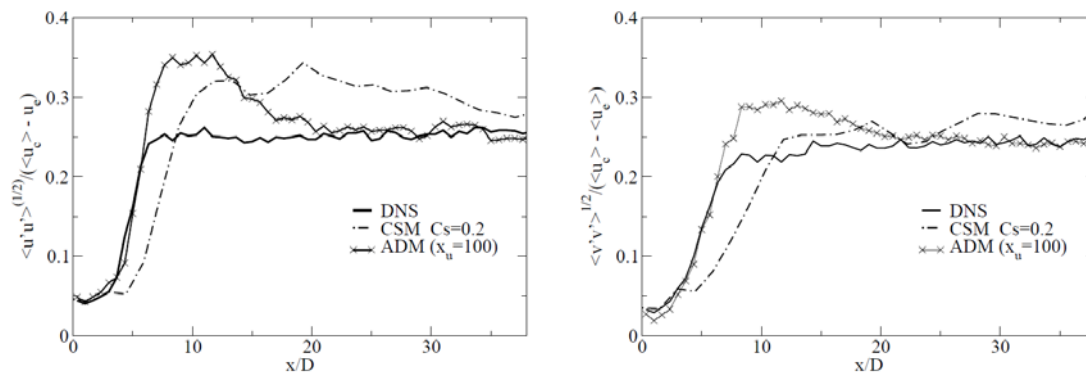
- 2001a, Stolz - 1999, Blackburn - 2003, Schmidt - 2001, Bouffanais - 2006]. Για τον έλεγχο της εγκυρότητας των μοντέλων υπολογίστηκαν οι συνιστώσες της έντασης της τύρβης στις τρεις χωρικές διευθύνσεις (αξονική, ακτινική και αζιμουθιακή) τόσο κατά μήκος της κεντρικής γραμμής της δέσμης όσο και σε τομές σε διάφορα σημεία αυτής. Κύρια περιοχή ενδιαφέροντος αποτελεί η μεταβατική περιοχή της δέσμης ($8 < x/D < 15$) και η δυνατότητα πρόβλεψης αυτής. Ο λόγος επιλογής της συγκεκριμένης περιοχής, για την αξιοπιστία των μοντέλων προσομοίωσης, δικαιολογείται από την ύπαρξη σε αυτή μεγάλων και μικρών κλιμάκων τύρβης καθώς και της ταυτόχρονης αλληλεπίδρασης μεταξύ αυτών. Η ακριβής πρόβλεψη της έντασης τύρβης στην περιοχή αυτή, σε σύγκριση με τα αποτελέσματα της άμεσης προσομοίωσης, αντικατοπτρίζει τη σωστή λειτουργία του μοντέλου και την ικανότητά του να προβλέψει τη μεταφορά ενέργειας από τις μεγάλες στις μικρές κλίμακες τύρβης. Περιοχή μικρότερου ενδιαφέροντος αποτελεί η περιοχή κοντά στην έξοδο της γεωμετρίας, η οποία είναι και η περιοχή ομοιότητας της δέσμης ($x/D > 20$). Η επιλογή του μοντέλου έγινε με βάση τις απαιτήσεις που επιβάλλει ο συνδυασμός βέλτιστης πρόβλεψης αυτού και στις δύο προαναφερθείσες περιοχές.

Στο σχήμα 3.11 αναπαρίσταται η ανάπτυξη της αξονικής μέσης ταχύτητας κατά μήκος του άξονα της δέσμης ως συνάρτηση της κατάντη απόστασης αυτού, για τη μέθοδο της άμεσης προσομοίωσης και τα μοντέλα προσεγγιστικής ανέλιξης (ADM) και Smagorinsky (CSM με $C_s=0.2$). Τα αποτελέσματα της μεθόδου άμεσης προσομοίωσης δείχνουν την αναμενόμενη γραμμική μείωση της ακτινικής ταχύτητας σε σχέση με την απόσταση x/D . Τα αντίστοιχα αποτελέσματα των μοντέλων της προσομοίωσης μεγάλων δινών συμφωνούν αρκετά καλά με αυτά της άμεσης προσομοίωσης, ωστόσο παρουσιάζουν μία απόκλιση μετά τη μεταβατική περιοχή της δέσμης (jet).



Σχήμα 3.11: Ακτινική μέση ταχύτητα κατά μήκος της δέσμης (jet) σε σχέση την κατάντη απόσταση.

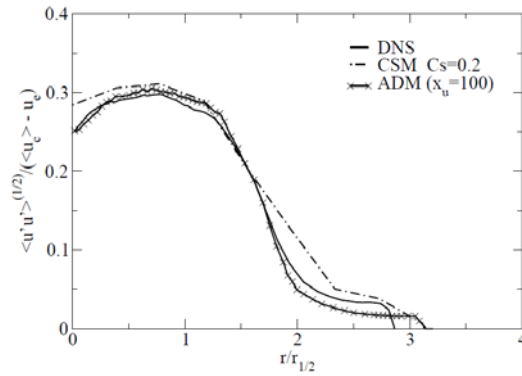
Στο σχήμα 3.12 παρουσιάζεται η αξονική (α) και ακτινική (β) συνιστώσα της έντασης της τύρβης κατά μήκος του άξονα της δέσμης. Τα αποτελέσματα του μοντέλου της προσεγγιστικής ανέλιξης (ADM) συμφωνούν με αυτά της άμεσης προσομοίωσης (DNS) μόνο στην περιοχή ομοιότητας (self similar region - $x/D > 20$), όπου η ροή έχει αναπτυχθεί πλήρως. Επιπλέον το μοντέλο αποτυγχάνει να προβλέψει την ένταση της τύρβης τόσο στην ακτινική όσο και στην αξονική διεύθυνση της δέσμης στη μεταβατική περιοχή του ροϊκού πεδίου ($7 < x/D < 15$). Οι τιμές της έντασης της τύρβης στην περιοχή αυτή είναι υπερεκτιμημένες κατά περίπου 30%.



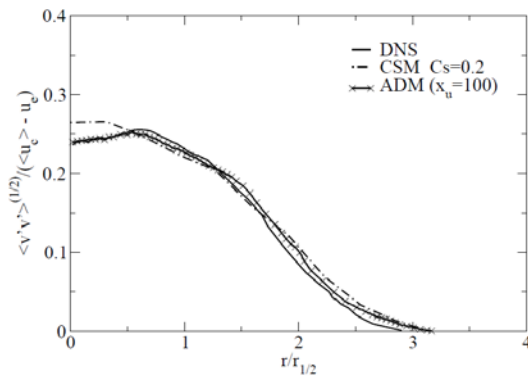
Σχήμα 3.12 (α): Αξονική ένταση τύρβης κατά μήκος του άξονα του της δέσμης (jet).

Σχήμα 3.12 (β): Ακτινική ένταση τύρβης κατά μήκος του άξονα της δέσμης (jet).

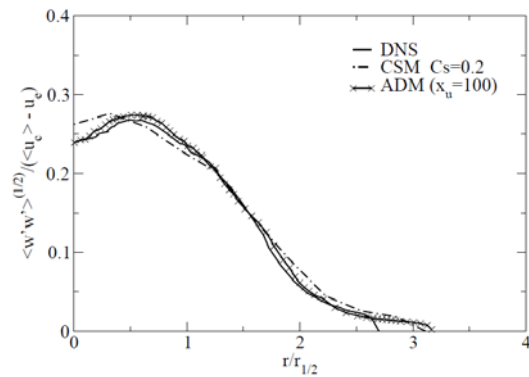
Το δεύτερο μοντέλο προσομοίωσης μεγάλων δινών, το μοντέλο Smagorinsky με $C_s=0.2$, παρουσίασε καλύτερη συμπεριφορά στην προσομοίωση στην μεταβατική περιοχή, μειώνοντας αρκετά την ένταση της τύρβης, ιδιαίτερα όσο αφορά την ακτινική συνιστώσα (Σχ.3.12(β)). Οι τιμές αυτές όσο αφορά στην αξονική κατεύθυνση είναι υπερεκτιμημένες κατά 20%, ενώ στην ακτινική συνιστώσα υπάρχει μία προσαύξηση της τάξεως του 3% - 5%. Το κύριο μειονέκτημα του συγκεκριμένου μοντέλου είναι η διατήρηση υψηλότερων τιμών από τις αντίστοιχες της άμεσης προσομοίωσης σε όλο το μήκος του άξονα της δέσμης ($x/D > 20$) και όχι μόνο στην περιοχή μετάβασης ($8 < x/D < 15$). Κάτι τέτοιο είναι αναμενόμενο όπως ήδη προαναφέρθηκε, εξαιτίας της αυξημένης σκέδασης του μοντέλου, κυρίως σε περιοχές ύπαρξης υψηλών διατμητικών τάσεων. Εν συνεχεία στο σχήμα 3.13 παρουσιάζονται οι ορθές τάσεις Reynolds στην αξονική (α), ακτινική (β) και αζιμουθιακή (γ) κατεύθυνση.



Σχήμα 3.13 (α): Ορθές τάσεις στην αξονική διεύθυνση για κατάντη απόσταση $x/D=35$.



Σχήμα 3.13 (β): Ορθές τάσεις στην ακτινική διεύθυνση για κατάντη απόσταση $x/D=35$.



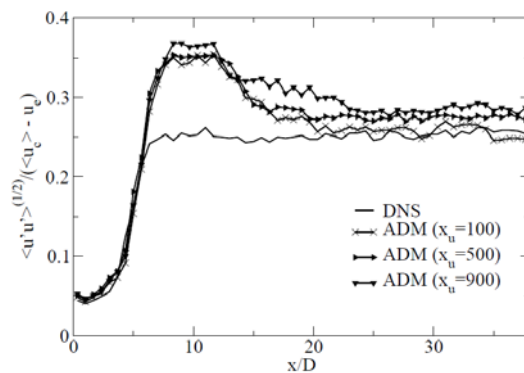
Σχήμα 3.13 (γ): Ορθές τάσεις στην αζιμουθιακή διεύθυνση για κατάντη απόσταση $x/D=35$.

Όπως προκύπτει για όλες τις συνιστώσες των ορθών τάσεων Reynolds στη θέση $x/D=35$ (περιοχή ομοιότητας) τα αποτελέσματα του μοντέλου ADM και του μοντέλου CSM με $C_s=0.2$ συμφωνούν αρκετά καλά με αυτά της άμεσης προσομοίωσης, με μία μικρή υπερεκτίμηση των τιμών που προβλέπει το μοντέλο Smagorinsky κοντά στην περιοχή του πυρήνα της δέσμης ($0 < r/r_{1/2} < 0.5$). Οι αποκλίσεις των τιμών από αυτές της άμεσης προσομοίωσης στην περιοχή αυτή είναι μέσα σε αποδεκτά όρια για την εγκυρότητα του μοντέλου CSM.

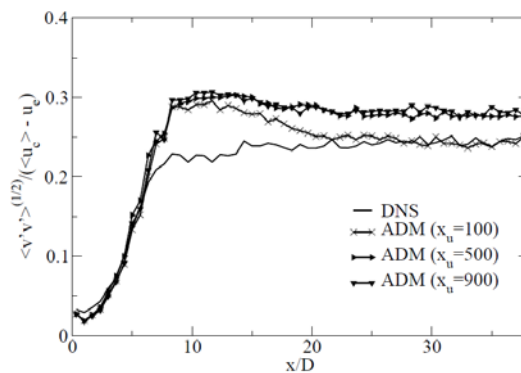
3.5 Επίδραση του συντελεστή χαλάρωσης του Μοντέλου Προσεγγιστικής Ανέλιξης

Για τη βελτίωση των αποτελεσμάτων και τη διερεύνηση της φυσικής σημασίας του συντελεστή χαλάρωσης του μοντέλου ADM χρησιμοποιήθηκαν δύο επιπλέον τιμές, $\chi_u=500$ και $\chi_u=900$. Ο λόγος που επιλέχθηκαν οι τιμές αυτές είναι αποτέλεσμα της συμπεριφοράς του μοντέλου στη μεταβατική περιοχή της δέσμης, που όπως

διαπιστώθηκε οι τιμές της έντασης τύρβης είναι υπερεκτιμημένες κατά 30% περίπου. Ο φυσικός ρόλος του συντελεστή χαλάρωσης του μοντέλου αφορά στην επίδραση των μικρών κλίμακων τύρβης με τις μεγάλες, ενώ ο ίδιος αποτελεί ένα μέτρο για τη μεταφορά ενέργειας μεταξύ τους. Η επιλογή του γίνεται με κριτήριο τη μη συσσώρευση ενέργειας κοντά στη συχνότητα αποκοπής. Η αρχική ιδέα αύξησης του συντελεστή έγινε με σκοπό την όσο το δυνατόν μεγαλύτερη μεταφορά ενέργειας από τις μεγάλες στις μικρές κλίμακες τύρβης, έτσι ώστε να μειωθεί η ένταση της τύρβης στη μεταβατική περιοχή ενδιαφέροντος.



Σχήμα 3.14 (α): Αξονική ένταση τύρβης κατά μήκος του άξονα του της δέσμης (jet).



Σχήμα 3.14 (β): Ακτινική ένταση τύρβης κατά μήκος του άξονα της δέσμης (jet).

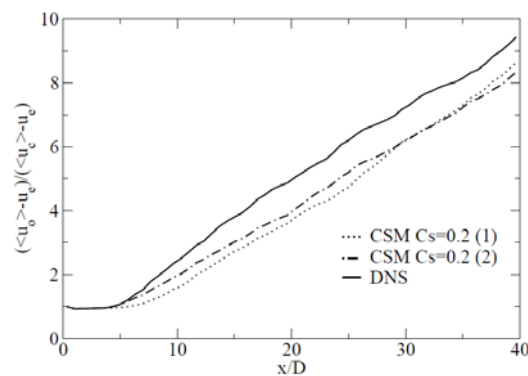
Οι προσομοιώσεις επαναλήφθηκαν για τις διαφορετικές τιμές του συντελεστή χαλάρωσης και τα αποτελέσματα της αξονικής (α) και της ακτινικής (β) συνιστώσας της έντασης της τύρβης κατά μήκος του άξονα της δέσμης φαίνονται στο σχήμα 3.14. Η μεταβολή του όρου χαλάρωσης είχε μικρή επίδραση στα αποτελέσματα, ενώ το πρόβλημα της αυξημένης έντασης τύρβης στην μεταβατική περιοχή παρέμεινε. Ο λόγος έγκειται κυρίως στο γεγονός ότι η δομή του όρου χαλάρωσης, όπως αυτή αναλύθηκε στο 2^ο κεφάλαιο δεν αποτελεί συνάρτηση μόνο του συντελεστή χαλάρωσης αυτού καθαυτού, αλλά εξαρτάται και από την επίδραση διαφόρων παραμέτρων. Στο σύνολο του, το μοντέλο ADM αποτελείται από παραμέτρους όπως ο πυρήνας του φίλτρου G , η συχνότητα αποκοπής k_{ct} , ο βαθμός πολυωνυμικής ανέλιξης N_d και ο συντελεστής χαλάρωσης χ_u . Ο τελευταίος αναπαριστά τις κλίμακες τύρβης οι οποίες μοντελοποιούνται και δεν περιγράφονται από το πλέγμα, συνυπολογίζοντας την επίδραση των μη γραμμικών αλληλεπιδράσεων. Η όλη φιλοσοφία του μοντέλου στηρίζεται στην εφαρμογή ενός φίλτρου υψηλών συχνοτήτων στο φασματικό χώρο και επηρεάζει μόνο τις κλίμακες τύρβης οι οποίες

αφορούν συχνότητες στο εύρος $k_{ct} < p < N$. Η πληροφορία η οποία ανακτάται από το φίλτρο υψηλών συχνοτήτων εξαρτάται από το βαθμό των πολυωνύμων παρεμβολής. Σε αντίθεση με τις ολικές φασματικές πεπερασμένες μεθόδους, στις οποίες ο βαθμός πολυωνυμικής προσέγγισης N είναι υψηλός (για παράδειγμα $N = 32$ έως και $N = 65$), τα φασματικά πεπερασμένα στοιχεία διαιρούν τη συνολική γεωμετρία σε έναν αριθμό πεπερασμένων στοιχείων και προσεγγίζουν τη λύση σαν μία σειρά αθροίσματος βασικών συναρτήσεων βαθμού N (στην παρούσα διατριβή $N = 8$). Το μοντέλο ADM που χρησιμοποιήθηκε στην παρούσα προσομοίωση μεγάλων δινών αποτελεί εφαρμογή του φίλτρου και του όρου χαλάρωσης σε κάθε φασματικό πεπερασμένο στοιχείο χωριστά και είναι προφανές ότι η πληροφορία που περιέχεται στις υψηλές συχνότητες βασίζεται σε πολύ λιγότερα modes, από την αντίστοιχη στα ολικά πεπερασμένα στοιχεία. Για το λόγο αυτό τα τελευταία περιλαμβάνουν περισσότερα modes στις υψηλές συχνότητες, με αποτέλεσμα η μορφή και η επίδραση του όρου χαλάρωσης να είναι αποτελεσματικότερη όσο αφορά στη μεταφορά ενέργειας στη συχνότητα αποκοπής. Ο λόγος λοιπόν της υπερεκτίμησης της εντάσεως της τύρβης είναι απότοκος της σύζευξης του μοντέλου προσεγγιστικής ανέλιξης ADM με τα φασματικά πεπερασμένα στοιχεία και την όλη διαδικασία φιλτραρίσματος στον πολυωνυμικό χώρο. Γεγονός το οποίο συνηγορεί με την παραπάνω παρατήρηση, αποτελεί η ένδειξη ότι για συντελεστή χαλάρωσης $\chi_u = 900$, η υπερεκτίμηση της εντάσεως της τύρβης είναι μεγαλύτερη, κάτι το οποίο έρχεται σε αντίθεση με το γεγονός, ότι η αύξηση του συντελεστή χαλάρωσης χ_u θα έχει σαν αποτέλεσμα και τη μείωση της εντάσεως της τύρβης λόγω καλύτερης μεταφοράς ενέργεια κοντά στη συχνότητα αποκοπής. Αυτή η παρατήρηση όμως απορρίπτεται, εάν κανείς θεωρήσει ότι η επίδραση του συνολικού όρου χαλάρωσης εξαρτάται από τον αριθμό των κλιμάκων (modes) που περιλαμβάνονται στις υψηλές συχνότητες, πάνω από τη συχνότητα αποκοπής.

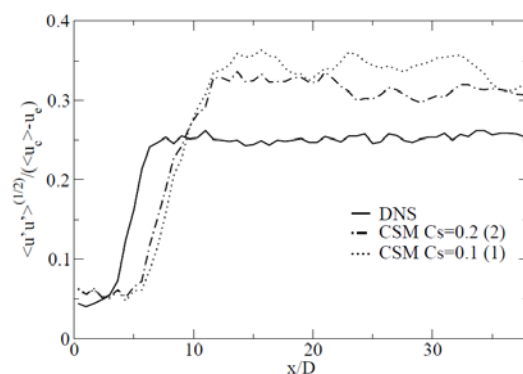
3.6 Επίδραση της διαφορετικής επιλογής του μήκους του φίλτρου

Όπως αναφέρθηκε στην ενότητα 2.5.1, για την επιλογή του μήκους του φίλτρου επιλέχθηκαν 2 διαφορετικοί ορισμοί αυτού. Στον 1^ο, το μέγεθος του φίλτρου αποτελεί

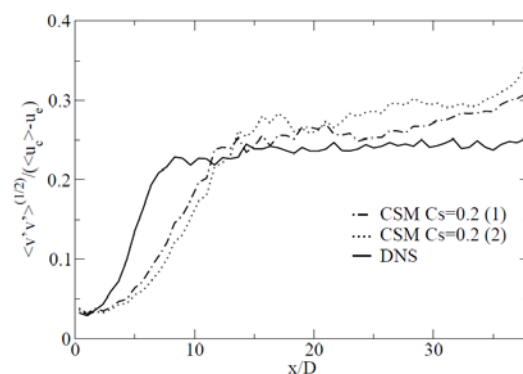
συνάρτηση της τοπικής θέσης σε κάθε κομβικό σημείο του πλέγματος (στα γραφήματα που ακολουθούν αναφέρεται ως CSM $C_s=0.2$ (1)), ενώ στον 2^ο το μήκος αυτού είναι μία μέση διακριτή τιμή σε κάθε φασματικό πεπερασμένο στοιχείο, ανεξάρτητο της θέσης μέσα σε αυτό (στα γραφήματα που ακολουθούν αναφέρεται ως CSM $C_s=0.2$ (2)). Στο σχήμα (3.15(α)) αναπαρίσταται η ανάπτυξη της αξονικής μέσης ταχύτητας κατά μήκος του άξονα της δέσμης ως συνάρτηση της κατάντη απόστασης αυτού, για τη μέθοδο της άμεσης προσομοίωσης και το κλασικό μοντέλο Smagorinsky με $C_s=0.2$, για τους 2 διαφορετικούς ορισμούς του φίλτρου που επιλέχθηκε. Επιπλέον στο σχήμα 3.16 παρουσιάζεται η αξονική (β) και ακτινική (γ) συνιστώσα της έντασης της τύρβης κατά μήκος του άξονα της δέσμης (jet), ενώ στο (δ) και (ε) παρουσιάζονται οι ορθές τάσεις Reynolds στην αξονική και ακτινική κατεύθυνση αντίστοιχα. Πρέπει να τονιστεί ότι σε όλα τα διαγράμματα παρουσιάζονται αποτελέσματα προσομοιώσεων που αφορούν στις 200 πρώτες στατιστικές χρονικές μονάδες.



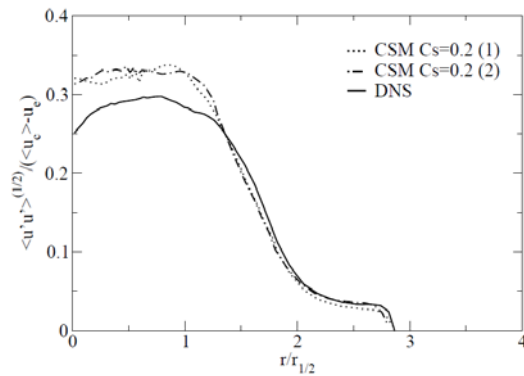
Σχήμα 3.16 (α): Ακτινική μέση ταχύτητα κατά μήκος της δέσμης (jet) σε σχέση την κατάντη απόσταση.



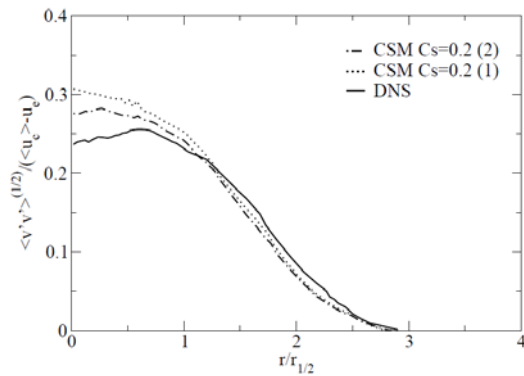
Σχήμα 3.16 (β): Αξονική ένταση τύρβης κατά μήκος του άξονα του της δέσμης (jet).



Σχήμα 3.16 (γ): Ακτινική ένταση τύρβης κατά μήκος του άξονα της δέσμης (jet).



Σχήμα 3.16 (δ): Ορθές τάσεις στην ακτινική διεύθυνση για κατάντη απόσταση $x/D=35$.



Σχήμα 3.16 (ε): Ορθές τάσεις στην αξονική διεύθυνση για κατάντη απόσταση $x/D=35$.

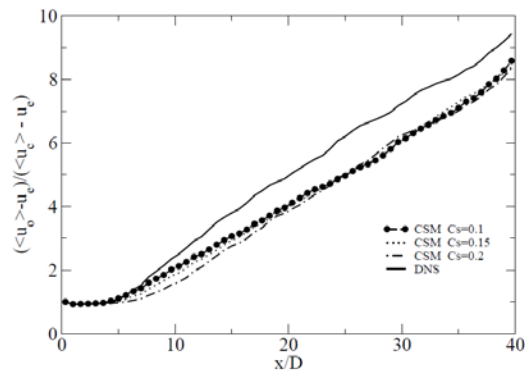
Όπως προκύπτει, οι δύο διαφορετικοί ορισμοί του φίλτρου έδειξαν μικρές διαφορές στην πρόβλεψη των τάσεων Reynolds και η επίδραση της επιλογής διαφορετικού μήκους φίλτρου μπορεί να χαρακτηριστεί αμελητέα.

Οι διαφορές οι οποίες παρατηρούνται μεταξύ των μοντέλων CSM $C_s=0.2 (1)$ και CSM $C_s=0.2 (2)$ μπορούν να αποδοθούν σε έλλειψη αρκετών στατιστικών πεδίων για την εύρεση τελικών, στατιστικά ανεξάρτητων μεταβλητών. Στις προσομοιώσεις που παρουσιάζονται στη συνέχεια του κεφαλαίου χρησιμοποιείται ο 2^{ος} ορισμός του μήκους του φίλτρου.

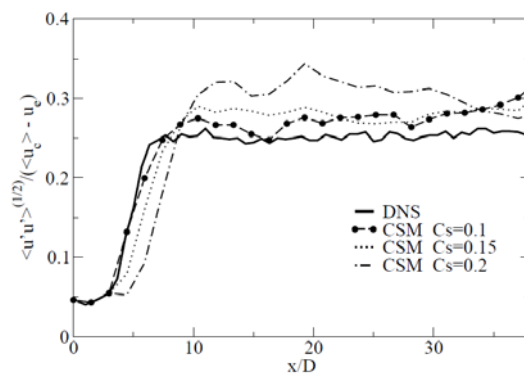
3.7 Επίδραση του σταθερού συντελεστή C_s του μοντέλου Smagorinsky

Όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως μία από τις σημαντικότερες παραμέτρους του μοντέλου Smagorinsky αποτελεί η σταθερά C_s . Ο άγνωστος όρος των υποπλεγματικών κλιμάκων μοντελοποιείται μέσω του τυρβώδους ιξώδους ν_t , το οποίο είναι συνάρτηση του συντελεστή C_s . Αύξηση του συντελεστή συνεπάγεται ταυτόχρονη αύξηση της μεταφοράς ενέργειας από τις μικρές στις μεγάλες κλίμακες τύρβης (μεγάλο ιξώδες λόγω τύρβης). Λόγω της φυσικής του το μοντέλο Smagorinsky έχει αυξημένο χαρακτήρα σκέδασης, ο οποίος είναι εμφανής σε περιοχές μεγάλης διάτμησης, όπως είναι περιοχές κοντά στα τοιχώματα ή περιοχές ρευστών που έρχονται σε επαφή. Ο αυξημένος χαρακτήρας σκέδασης του μοντέλου σε συνδυασμό με την ύπαρξη διατμητικών στρωμάτων στο ροϊκό πεδίο, περιοχές οι

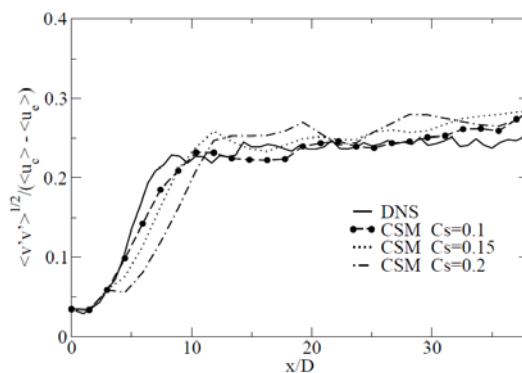
οποίες εμφανίζονται κοντά στον πυρήνα της δέσμης, όπου το ρευστό που εισέρχεται από τη διάμετρο της δέσμης έρχεται σε επαφή με το ρευστό ομοροής ταχύτητας $u_e = 0.25$, αποτέλεσαν τους βασικούς παράγοντες επιλογής δύο επιπλέον μικρότερων τιμών του συντελεστή C_s , $C_s=0.15$ και $C_s=0.1$. Οι προσομοιώσεις επαναλήφθηκαν για τις δύο προαναφερθείσες τιμές και τα τελικά αποτελέσματα συγκρίθηκαν με αυτά της μεθόδου άμεσης προσομοίωσης. Οι συγκρίσεις αφορούν στα μεγέθη της εντάσεως τύρβης στις τρεις συνιστώσες τόσο κατά μήκος του άξονα της δέσμης, όσο και σε διάφορες τομές αυτού. Στο σχήμα 3.17 απεικονίζονται τα αποτελέσματα της μέσης ταχύτητας (α), της αξονικής (β) και της ακτινικής (γ) συνιστώσας της έντασης της τύρβης κατά μήκος του άξονα της δέσμης.



Σχήμα 3.17 (α): Ακτινική μέση ταχύτητα κατά μήκος της δέσμης (jet) σε σχέση την κατάντη απόσταση.



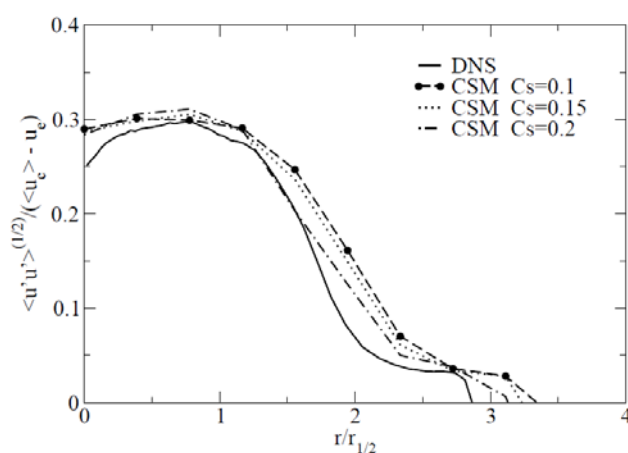
Σχήμα 3.17 (β): Αξονική ένταση τύρβης κατά μήκος του άξονα του της δέσμης (jet).



Σχήμα 3.17 (γ): Ακτινική ένταση τύρβης κατά μήκος του άξονα της δέσμης (jet).

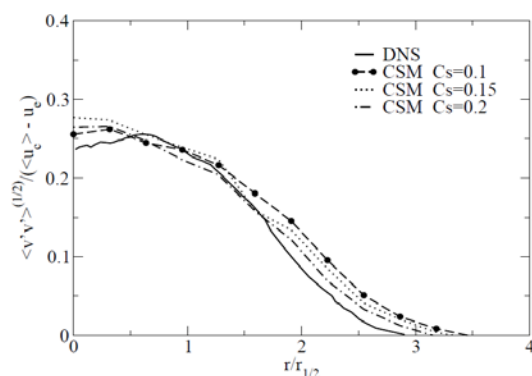
Όπως προκύπτει από το διάγραμμα του σχήματος 3.17 (α) και από τα αντίστοιχα (β) και (γ) η χρησιμοποίηση του μοντέλου CSM με $C_s=0.1$ μείωσε το ρυθμό πρόβλεψης της έναρξης μεταβατικής περιοχής στα επίπεδα του μοντέλου προσεγγιστικής ανέλιξης ADM, φαινόμενο το οποίο ενίσχυσε τον αρχικό ισχυρισμό ότι η

γρηγορότερη έναρξη της περιοχής μετάβασης οφειλόταν στον αυξημένο χαρακτήρα σκέδασης του μοντέλου CSM. Επιπλέον ενθαρρυντικό στοιχείο για την περαιτέρω χρησιμοποίηση του ίδιου μοντέλου αποτελεί το γεγονός ότι η ένταση της τύρβης τόσο στην αξονική όσο και στην ακτινική συνιστώσα μειώθηκε στα ίδια επίπεδα με αυτά της άμεσης προσομοίωσης. Ιδιαίτερα τα αποτελέσματα που αφορούν στην ακτινική διεύθυνση συμφωνούν σε πολύ καλό βαθμό με αυτά της άμεσης προσομοίωσης, ενώ η σύγκριση των αντίστοιχων μεγεθών στην αξονική διεύθυνση κρίνεται ικανοποιητική με μικρές αποκλίσεις της τάξεως του 2% με 3% στην περιοχή ομοιότητας της δέσμης.

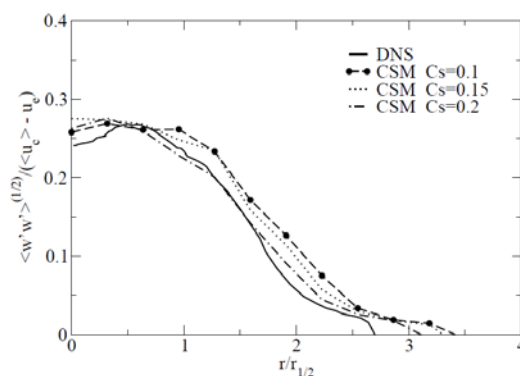


Σχήμα 3.18 (α): Ορθές τάσεις στην αξονική διεύθυνση για κατάντη απόσταση $x/D=35$.

Επίσης ο χαμηλότερος συντελεστής βελτίωσε σε μικρό βαθμό και τα αποτελέσματα στη θέση $x/D=35$ κατάντη του άξονα της δέσμης, όπως φαίνεται και από τα γραφήματα του σχήματος 3.18 (α), (β) και (γ), στην περιοχή του πυρήνα της δέσμης.

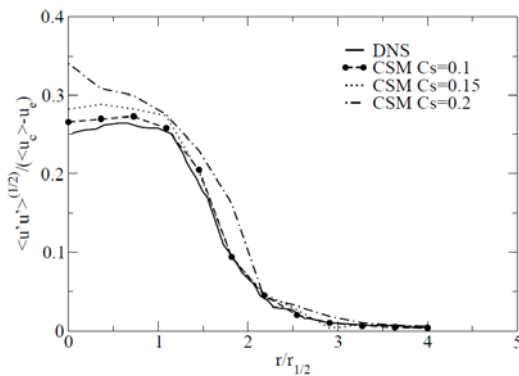


Σχήμα 3.18 (β): Ορθές τάσεις στην ακτινική διεύθυνση για κατάντη απόσταση $x/D=35$.

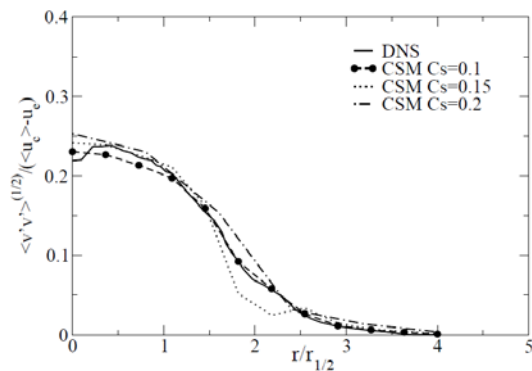


Σχήμα 3.18 (γ): Ορθές τάσεις στην αζιμουθιακή διεύθυνση για κατάντη απόσταση $x/D=35$.

Στην περιοχή ομοιότητας κλιμάκων της δέσμης ($x/D=35$), όπως παρατηρήθηκε στα προηγούμενα διαγράμματα όλα τα μοντέλα με σταθερό συντελεστή C_s δίνουν ικανοποιητικά αποτελέσματα χωρίς ιδιαίτερες διαφορές. Η διαφορά της χρήσης διαφορετικού συντελεστή C_s γίνεται εμφανής στην κύρια περιοχή ενδιαφέροντος της δέσμης ($8 < x/D < 20$), η οποία αποτελεί τη μεταβατική περιοχή αυτής. Στο σχήμα 3.19 παρουσιάζονται οι ορθές τάσεις Reynolds στην αξονική (α) και στην ακτινική (β) κατεύθυνση για κατάντη απόσταση $x/D=15$.



Σχήμα 3.19 (α): Ορθές τάσεις στην αξονική διεύθυνση για κατάντη απόσταση $x/D=15$.

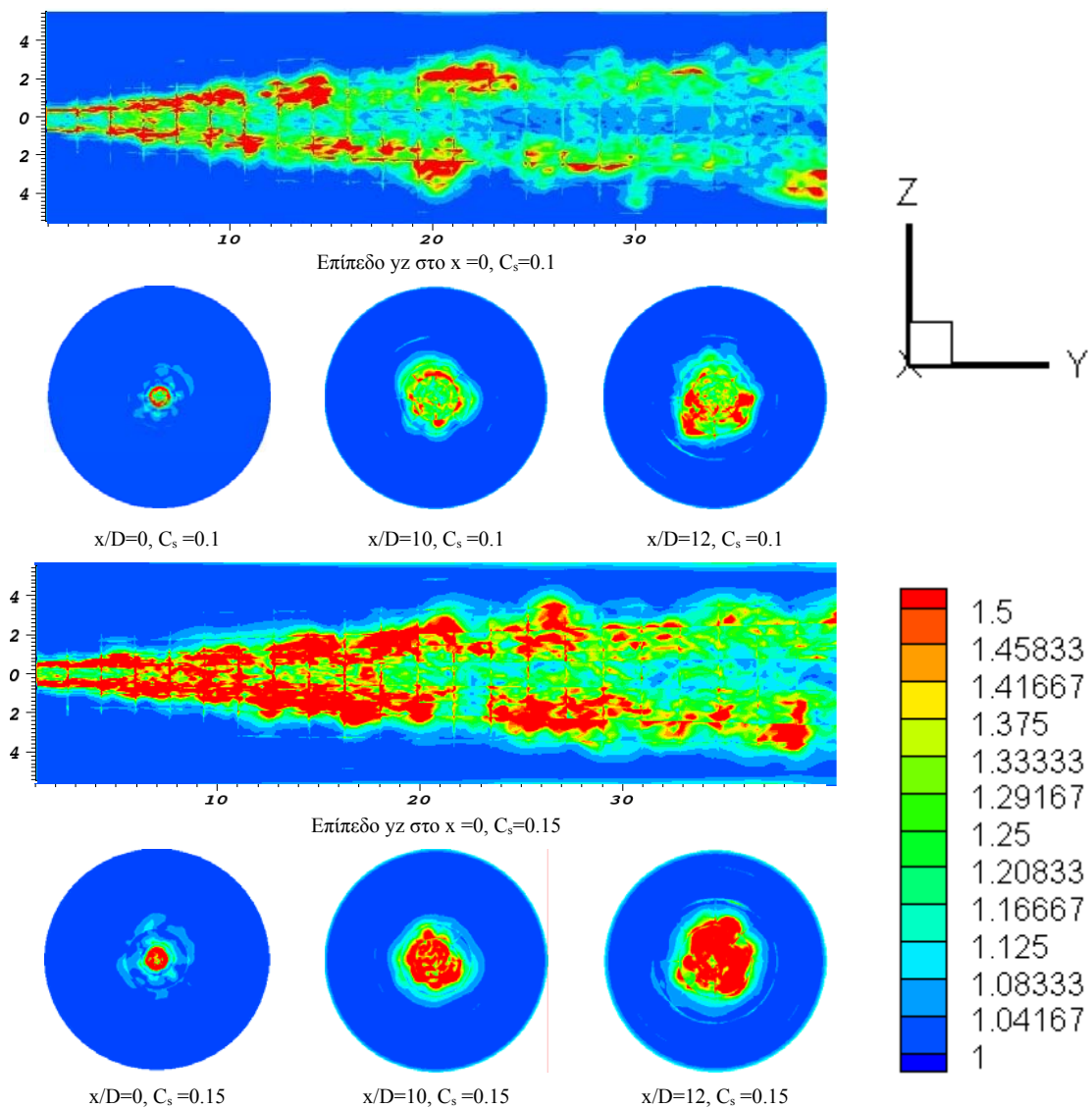


Σχήμα 3.19 (β): Ορθές τάσεις στην ακτινική διεύθυνση για κατάντη απόσταση $x/D=15$.

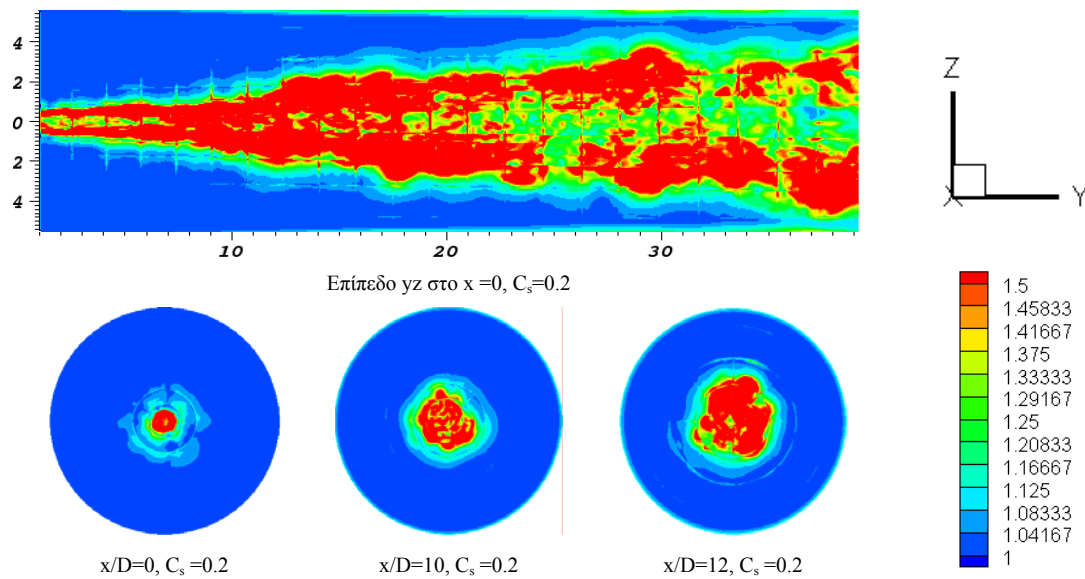
Όσο αφορά στις ορθές τάσεις στην ακτινική διεύθυνση αυτές συμφωνούν με τα αποτελέσματα της άμεσης προσομοίωσης στην περίπτωση που ο συντελεστής πάρει την τιμή $C_s = 0.1$. Οι άλλες δύο περιπτώσεις ($C_s = 0.15$ και $C_s = 0.2$) δίνουν υπερεκτιμημένη τιμή της έντασης της τύρβης κοντά στην περιοχή του πυρήνα της δέσμης. Παρόμοια συμπεριφορά σε μικρότερο όμως βαθμό παρατηρείται και στις ορθές τάσεις Reynolds στην αξονική διεύθυνση.

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει και η στιγμιαία κατανομή του μέσου χωρικού τυρβώδους ιξώδους σε σχέση με το μοριακό. Κατά τη χρονική διακριτοποίηση των εξισώσεων ο όρος του μέσου χωρικού τυρβώδους ιξώδους και κατά συνέπεια ο άγνωστος όρος των υποπλεγματικών κενών, που μοντελοποιείται μέσω της υπόθεσης κλίσης διάχυσης (gradient diffusion hypothesis), διακριτοποιείται με βάση μόνο προηγούμενες χρονικές στιγμές (explicit). Για το λόγο αυτό, ο λόγος του μέσου χωρικού τυρβώδους ιξώδους προς το μοριακό πρέπει να διατηρείται σε χαμηλά επίπεδα, έτσι ώστε να μην αποσταθεροποιείται η υπολογιστική διαδικασία και να μην παρατηρούνται φαινόμενα απόκλισης, τα οποία μπορούν να οδηγήσουν σε κατάρρευση της προσομοίωσης. Όπως αναφέρθηκε και στην ενότητα 2.6.2 για την

τιμή του v_{ref} χρησιμοποιήθηκε η μέγιστη τιμή του v_{eff} σε ολόκληρο το υπολογιστικό πλέγμα. Στα σχήματα 3.20 (α) και (β) απεικονίζεται ο λόγος του τυρβώδους ιξώδους σε σχέση με το μοριακό στην είσοδο της γεωμετρίας και σε 2 κατάντη αποστάσεις της δέσμης ($x/D = 10, 12$) και στο επίπεδο yz στη θέση $x=0$. Η φυσική δομή της δέσμης απεικονίζεται σε ικανοποιητικό βαθμό ενώ παράλληλα φαίνεται και ο αυξημένος χαρακτήρας σκέδασης του μοντέλου με συντελεστή $C_s=0.2$, σε σχέση με το αντίστοιχο με $C_s=0.1$. Η ύπαρξη μεγαλύτερων τιμών ιξώδους στον πυρήνα της δέσμης και στις περιοχές ύπαρξης υψηλών διατμητικών τάσεων πιστοποιείται από το μεγαλύτερο ποσοστό που καταλαμβάνει η περιοχή κόκκινου χρώματος στο σχήμα 3.20 (β) (περίπτωση με $C_s=0.2$).



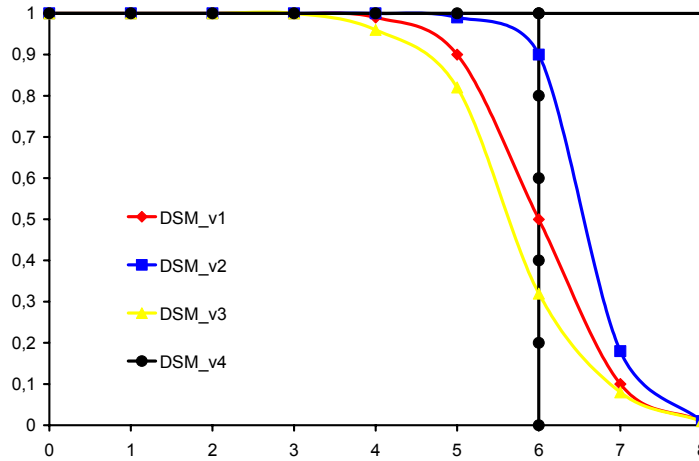
Σχήμα 3.20 (α): Λόγος μέσου χωρικού ιξώδους προς μοριακό σε κατάντη αποστάσεις $x/D=0, 10, 12$ της δέσμης και στο επίπεδο yz στο $x=0$ για δύο τιμές του συντελεστή $C_s=0.1, 0.15$.



Σχήμα 3.20 (β): Λόγος μέσου χωρικού ιξώδους προς μοριακό σε κατάντη αποστάσεις $x/D=0, 10, 12$ της δέσμης και στο επίπεδο yz στο $x=0$ για μία τιμή του συντελεστή $C_s=0.2$.

3.8 Επίδραση του δυναμικού συντελεστή C_s του μοντέλου Smagorinsky

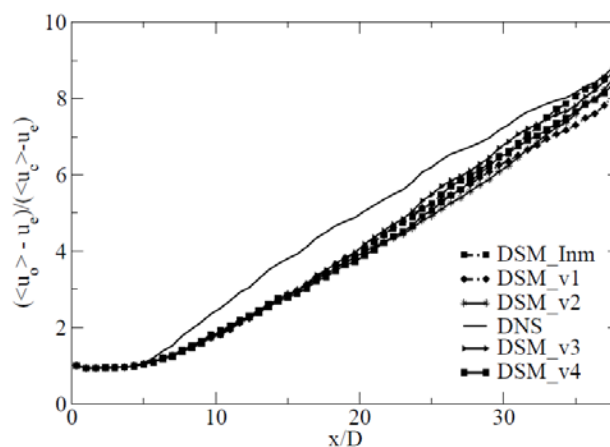
Για την περαιτέρω βελτίωση των αποτελεσμάτων χρησιμοποιήθηκε ο δυναμικός υπολογισμός του συντελεστή C_d του μοντέλου Smagorinsky (Dynamic Smagorinsky Model - DSM). Πρέπει να τονιστεί ότι για τον υπολογισμό του τυρβώδους ιξώδους στην περίπτωση του δυναμικού μοντέλου DSM, σε αντιδιαστολή με το μοντέλο CSM, είναι απαραίτητος ο ακριβής ορισμός του χωρικού φίλτρου στον πολυωνυμικό χώρο και η αντίστοιχη συνάρτηση μεταφοράς του, όπως και στην περίπτωση του μοντέλου προσεγγιστικής ανέλιξης ADM. Στη συνέχεια παρουσιάζονται τα τελικά αποτελέσματα που προέκυψαν από τη χρησιμοποίηση του δυναμικού μοντέλου και μελετάται η επίδραση του φίλτρου σε αυτά. Όπως αναφέρθηκε στην ενότητα 2.7.2 χρησιμοποιήθηκαν πέντε διαφορετικές μορφές της συνάρτησης μεταφοράς, κάθε μία από τις οποίες θα αναφέρεται εν συνεχεία ως DSM_v1, DSM_v2, DSM_v3 και DSM_v4. Η περίπτωση δημιουργίας της συνάρτησης μεταφοράς μέσω των πολυωνύμων Lagrange θα αναφέρεται σαν DSM_Inm. Στο σχήμα 3.21 απεικονίζεται η μορφή της μονοδιάστατης συνάρτησης του φίλτρου για τις περιπτώσεις DSM_v1, DSM_v2, DSM_v3 και DSM_v4.



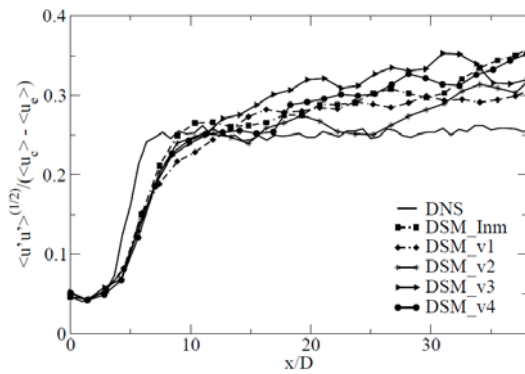
Σχήμα 3.21: Μονοδιάστατη συνάρτηση φίλτρου για τις περιπτώσεις DSM_v1, DSM_v2, DSM_v3 και DSM_v4.

Αρχικά χρησιμοποιήθηκε η μορφή DSM_v1, η οποία αντιστοιχεί και προσομοιάζει στη μορφή της συνάρτησης μεταφοράς του μοντέλου προσεγγιστικής ανέλιξης. Οι περιπτώσεις DSM_v2 και DSM_v3 αντιστοιχούν σε περιπτώσεις κατά τις οποίες αποκόπτεται λιγότερη και περισσότερη ενέργεια, αντίστοιχα. Η τελευταία περίπτωση, DSM_v4, αποκόπτε τα 2 τελευταία modes της προσεγγιστικής σειράς της αναλυτικής λύσεως και είναι κατά ένα μεγάλο ποσοστό αντίστοιχη της περίπτωσης DSM_Inm, όπως αναλύθηκε και στο κεφάλαιο 2.

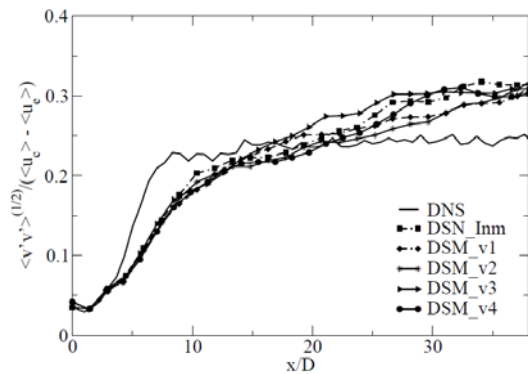
Στο σχήμα 3.22 (α) απεικονίζεται η αξονική μέση ταχύτητα κατά μήκος της δέσμης σε σχέση με την κατάντη απόσταση.



Σχήμα 3.22 (α): Αξονική μέση ταχύτητα κατά μήκος της δέσμης (jet) σε σχέση την κατάντη απόσταση.



Σχήμα 3.22 (β): Αξονική ένταση τύρβης κατά μήκος του άξονα του της δέσμης (jet).



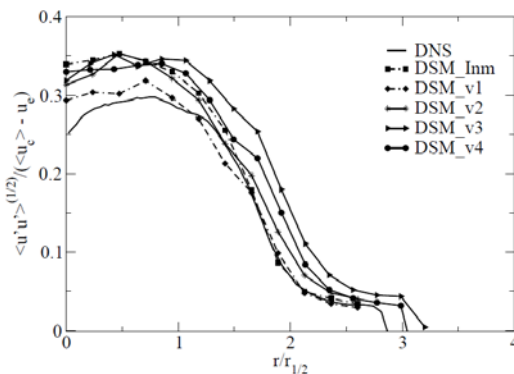
Σχήμα 3.22 (γ): Ακτινική ένταση τύρβης κατά μήκος του άξονα της δέσμης (jet).

Οι χρονικές μονάδες προσομοίωσης, όπως και στα διαγράμματα των προηγούμενων ενοτήτων, ανέρχονται στις 400 με 600. Η έναρξη της μεταβατικής περιοχής, όπως αυτή προκύπτει από την πρόβλεψη των μοντέλων οριοθετείται στην ίδια κατάντη απόσταση για όλα τα μοντέλα, ενώ η καθυστέρηση στην εμφάνιση της μετάβασης εξακολουθεί να παραμένει, όπως και στην περίπτωση του μοντέλου Smagorinsky με σταθερό συντελεστή C_s . Καλύτερη συμπεριφορά σε σχέση πάντα με τα αποτελέσματα της άμεσης προσομοίωσης παρουσιάζει η περίπτωση DSM_v3. Τα αποτελέσματα της αξονικής και ακτινικής συνιστώσας της εντάσεως τύρβης, όπως αυτά προέκυψαν απεικονίζονται στο σχήμα 3.22 (β) και (γ) αντίστοιχα.

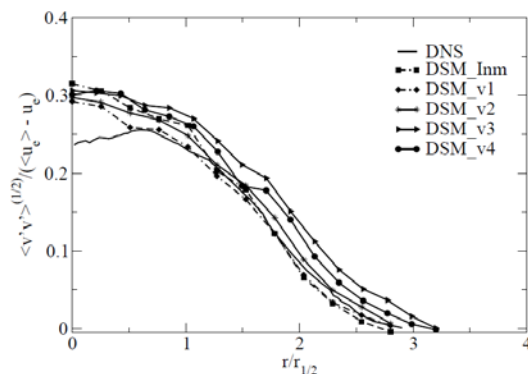
Παρόλο που στην κύρια περιοχή ενδιαφέροντος (μεταβατική περιοχή) η τιμή της εντάσεως της τύρβης στην αξονική κατεύθυνση δεν παρουσιάζει τις αυξημένες τιμές του μοντέλου προσεγγιστικής ανέλιξης ADM, ωστόσο δεν συμφωνεί και με τα αποτελέσματα της άμεσης προσομοίωσης στο βαθμό που συμφωνεί το μοντέλο Smagorinsky με $C_s=0.1$. Επιπλέον στην ακτινική κατεύθυνση όλα τα μοντέλα παρουσίασαν την ίδια συμπεριφορά, η οποία όμως δεν κρίνεται ικανοποιητική σε σχέση με τη συμφωνία που παρουσιάζει το μοντέλο με σταθερό συντελεστή $C_s=0.1$. Στην περιοχή ομοιότητας, κοντά στην έξοδο της δέσμης, τόσο στην ακτινική όσο και στην αξονική διεύθυνση κανένα φίλτρο του μοντέλου DSM δεν μπόρεσε να προσεγγίσει σε ικανοποιητικό βαθμό τις προβλέψεις της άμεσης προσομοίωσης. Σε όλες τις περιπτώσεις οι τιμές της έντασης της τύρβης είναι υψηλότερες από τις αναμενόμενες. Συνολικά, η περίπτωση του φίλτρου DSM_v2 παρουσίασε την καλύτερη συμφωνία με τα αποτελέσματα της άμεσης προσομοίωσης. Μία βασική αιτία αποτελεί το γεγονός ότι το φίλτρο στην περίπτωση αυτή αποκόπτει μικρότερο μέρος της ενέργειας που μοντελοποιείται με αποτέλεσμα ο τανυστής υποπλεγματικών

κλιμάκων να προσεγγίζεται σε καλύτερο βαθμό από το μοντέλο. Η χρησιμοποίηση φίλτρων, στα οποία αποκόπτεται μεγαλύτερο μέρος της ενέργειας, οδηγεί στον υπολογισμό ενός συντελεστή C_d , ο οποίος θα πρέπει να σκεδάσει μεγαλύτερο μέρος της ενέργειας αυτής. Επιπλέον η αποκοπή αρνητικών τιμών κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης, η ύπαρξη μεγάλων διακυμάνσεων του συντελεστή C_d καθώς και η μη εύρεση μέσης τιμής κατά μήκος διευθύνσεων ομοιογένειας της ροής αποτελούν επιπλέον λόγους για την απόκλιση των αποτελεσμάτων της δυναμικής διαδικασίας σε σχέση με την άμεση προσομοίωση.

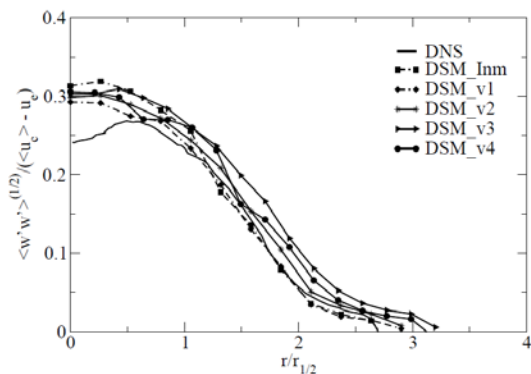
Εν συνεχεία στο σχήμα 3.23 παρουσιάζονται οι ορθές τάσεις Reynolds στην αξονική (α), ακτινική (β) και αζιμουθιακή (γ) κατεύθυνση για κατάντη απόσταση $x/D=35$ της δέσμης. Όπως προκύπτει για όλες τις συνιστώσες των ορθών τάσεων Reynolds στη θέση $x/D=35$ - περιοχή ομοιότητας - τα αποτελέσματα όλων των μοντέλων συμφωνούν μεταξύ τους. Ωστόσο όμως η συμφωνία αυτή, σε σύγκριση με τα αποτελέσματα της άμεση προσομοίωσης δεν είναι τόσο καλή, όσο αυτή του μοντέλου με $C_s=0.1$.



Σχήμα 3.23 (α): Ορθές τάσεις στην αξονική διεύθυνση για κατάντη απόσταση $x/D=35$.



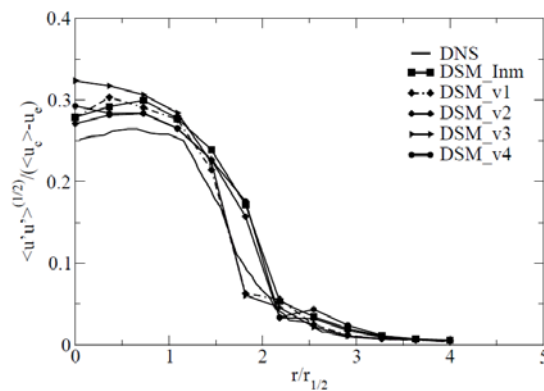
Σχήμα 3.23 (β): Ορθές τάσεις στην ακτινική διεύθυνση για κατάντη απόσταση $x/D=35$.



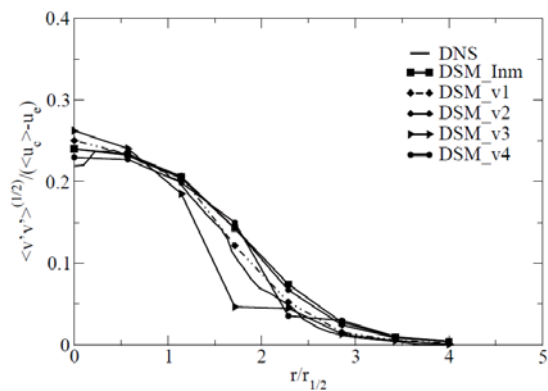
Σχήμα 3.23 (γ): Ορθές τάσεις στην αζιμουθιακή διεύθυνση για κατάντη απόσταση $x/D=35$.

Οι μόνες περιπτώσεις οι οποίες έδωσαν ικανοποιητικά αποτελέσματα είναι αυτές των DSM_v2 και DSM_Inm, με εξαίρεση την περιοχή κοντά στον πυρήνα της δέσμης ($0 < r/r_{1/2} < 0.5$), στην οποία παρατηρείται μία μικρή υπερεκτίμηση των τιμών που προβλέπουν τα ίδια μοντέλα. Για τα υπόλοιπα μοντέλα η υπερεκτίμηση αυτών των τιμών διατηρείται σε όλο το πλάτος της δέσμης ($0 < r/r_{1/2} < 3.5$).

Στην μεταβατική περιοχή της δέσμης και σε κατάντη απόσταση $x/D = 15$, οι τιμές της εντάσεως της τύρβης στον πυρήνα αυτής, είναι υπερεκτιμημένες κατά 30% - 40% για όλα σχεδόν τα μοντέλα (σχήμα 3.24(α) και (β)). Εξαίρεση παρουσιάζει το μοντέλο DSM_v2 και DSM_Inm, τα αποτελέσματα των οποίων έχουν τη μικρότερη απόκλιση από αυτά της άμεσης προσομοίωσης (DNS). Συμπεριφορά η οποία παρουσιάστηκε και στην περιοχή ομοιότητας της δέσμης.



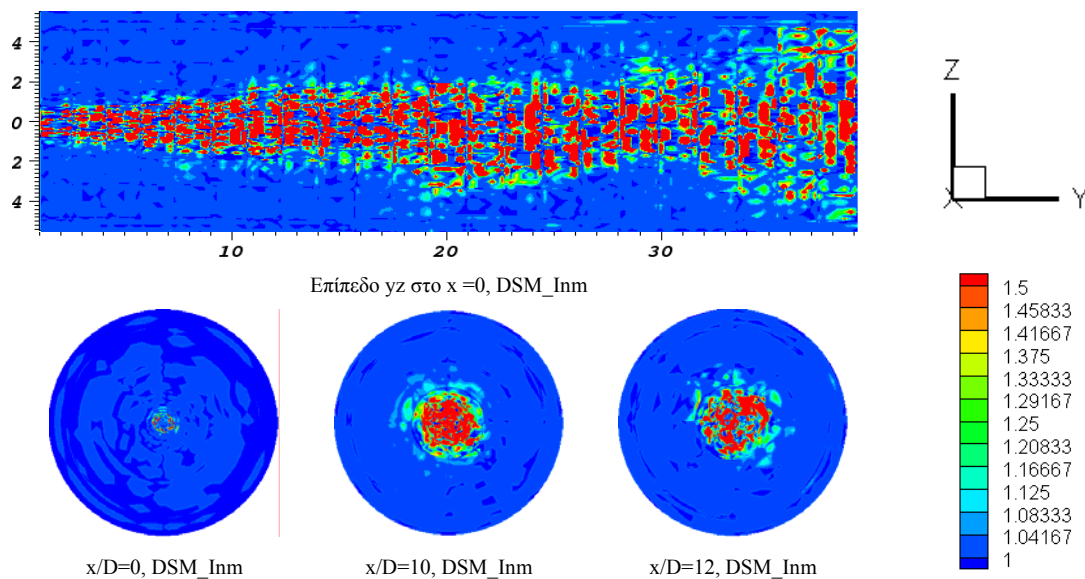
Σχήμα 3.24 (α): Ορθές τάσεις στην αξονική διεύθυνση για κατάντη απόσταση $x/D=15$.



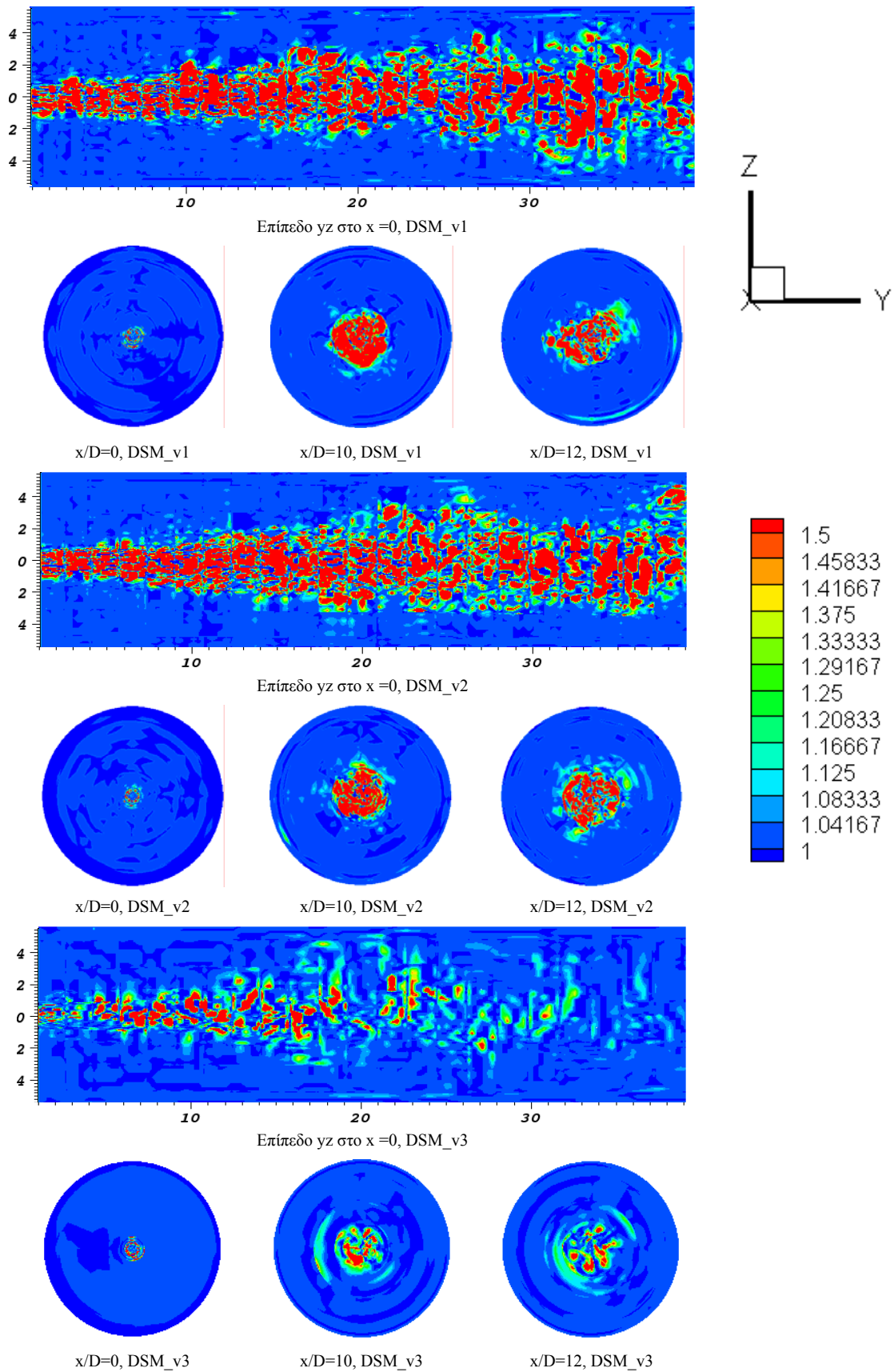
Σχήμα 3.24 (β): Ορθές τάσεις στην ακτινική διεύθυνση για κατάντη απόσταση $x/D=15$.

Όπως και στην περίπτωση του μοντέλου Smagorinsky με σταθερό συντελεστή C_s , έτσι και στην περίπτωση του δυναμικού υπολογισμού του, ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει και η στιγμιαία κατανομή του τυρβώδους ιξώδους σε σχέση με το μοριακό. Πρέπει να αναφερθεί ότι αρχικά το εύρος των τιμών του συντελεστή C_d αφέθηκε ελεύθερο, ώστε να μπορεί να παραλάβει και αρνητικές τιμές. Η ύπαρξη όμως πολλών αρνητικών τιμών είχε σαν αποτέλεσμα την αποσταθεροποίηση της υπολογιστικής διεργασίας, η οποία οδηγούσε σε τελική κατάρρευση της. Για το λόγο αυτό αρνητικές τιμές του συντελεστή τέθηκαν ίσες με το 0, κάτι που εφαρμόζεται συχνά στη βιβλιογραφία και αναφέρεται ως clipping [Y.Zang – 1993]. Όπως φαίνεται και από τα γραφήματα του σχήματος 3.25 (α), (β) και (γ), στα οποία παρουσιάζονται οι στιγμιαίες ισοϋψείς του λόγου του τυρβώδους ιξώδους προς το μοριακό, για όλες

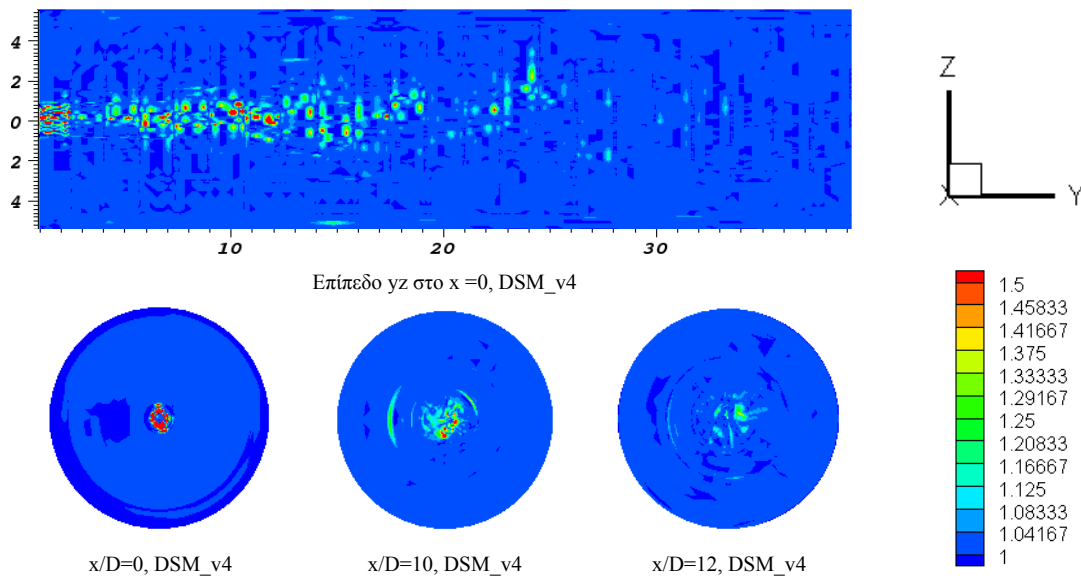
τις περιπτώσεις φίλτρων στο επίπεδο yz στο $x=0$ και για 3 τομές κατάντη του μήκους της δέσμης (είσοδος δέσμης, $x/D = 10$ και $x/D = 12$), η δομή αυτού είναι παρόμοια για τις περιπτώσεις DSM_v2 και DSM_Inm. Όσο αφορά στην περίπτωση DSM_v1 οι τιμές του αντίστοιχου λόγου είναι λίγο υψηλότερες, ενώ στην περίπτωση όπου το φίλτρο αποκόπτει μεγαλύτερο μέρος της ενέργειας (DSM_v3 και DSM_v4), παρατηρούνται τιμές αρκετά μικρότερες από τις προηγούμενες. Ο λόγος έγκειται στο γεγονός, ότι με την αποκοπή περισσότερων υψηλότερων συχνοτήτων το ροϊκό πεδίο είναι πιο ομαλό, με αποτέλεσμα η μεταφορά ενέργειας από τις μεγάλες κλίμακες τύρβης στις μικρότερες να ελαττώνεται. Καθόσον όμως, όπως προαναφέρθηκε ο συντελεστής εξαρτάται και από τις περιοχές διατμητικών τάσεων, μέσω της κλίσης ταχύτητας που υπεισέρχεται στον υπολογισμό του τυρβώδους ιξώδους, η τελική πρόβλεψη των αναμενόμενων τάσεων Reynolds και της έντασης τύρβης δεν βρίσκεται σε τόσο καλή συμφωνία με τα αποτελέσματα της άμεσης προσομοίωσης, ιδιαίτερα στην περιοχή στην έξοδο της δέσμης, όπου το πλέγμα είναι αραιό σε σχέση με αυτό της άμεσης προσομοίωσης.



Σχήμα 3.25 (α): Λόγος μέσου χωρικού ιξώδους προς μοριακό σε κατάντη αποστάσεις $x/D=0, 10, 12$ της δέσμης και στο επίπεδο yz στο $x=0$ για την περίπτωση DSM_Inm.



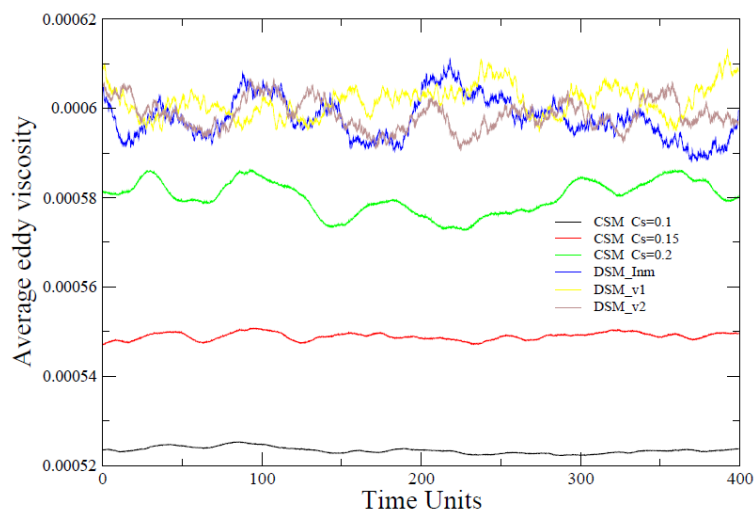
Σχήμα 3.25 (β): Λόγος μέσου χωρικού ιξώδους προς μοριακό σε κατάντη αποστάσεις $x/D=0, 10, 12$ της δέσμης και στο επίπεδο yz στο $x=0$ για τις περιπτώσεις DSM_v1, DSM_v2 και DSM_v3.



Σχήμα 3.25 (γ): Λόγος μέσου χωρικού ιξώδους προς μοριακό σε κατάντη αποστάσεις $x/D=0, 10, 12$ της δέσμης και στο επίπεδο yz στο $x=0$ για την περίπτωση DSM_v4 .

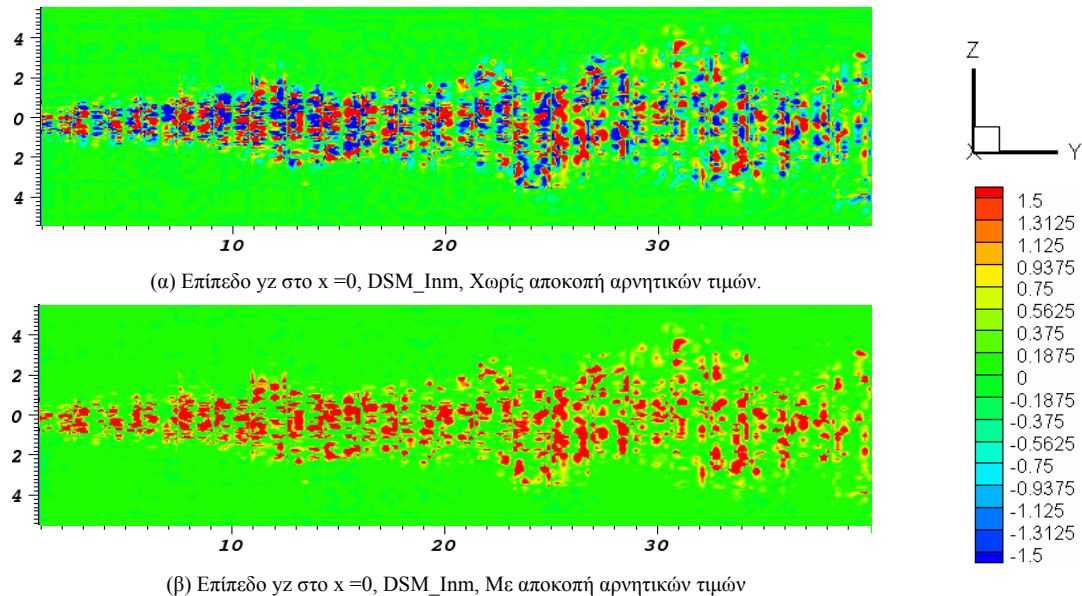
3.8.1 Μοντέλο εύρεσης μέσης τιμής του συντελεστή C_d ακολουθώντας τροχιές σωματιδίων στο χρόνο (Lagrangian type averaging model)

Όπως παρατηρήθηκε εκ των υστέρων ο δυναμικός συντελεστής C_d του μοντέλου Smagorinsky παρουσιάζει μεγάλες διακυμάνσεις κατά μήκος της δέσμης (σχήμα 3.26) και μεγάλο ποσοστό αρνητικών τιμών (σχήμα 3.27).



Σχήμα 3.26: Μεταβολή του μέσου τυρβώδους ιξώδους σε σύνολο 400 χρονικών υπολογιστικών μονάδων.

Στις περισσότερες εφαρμογές για την επίλυση του προβλήματος της αστάθειας που προκαλεί η ύπαρξη αρνητικών τιμών και για ομαλοποίηση του συντελεστή χρησιμοποιούνται διάφορες μέθοδοι, όπως αποκοπή, η οποία χρησιμοποιήθηκε στην παρούσα μελέτη, ή η εύρεση μίας μέσης τιμής του συντελεστή σε διευθύνσεις ομοιογένειας της ροής.



Σχήμα 3.27: Λόγος τυρβώδους ιξώδους προς μοριακό στο επίπεδο yz στο x=0 για την περίπτωση DSM_Inm (α) χωρίς και (β) με αποκοπή των αρνητικών τιμών.

Παρόλα αυτά υπάρχουν περιπτώσεις ροών στις οποίες δεν υπάρχουν διευθύνσεις ομοιογένειας ή η εύρεση ενός μέσου όρου σε αυτές είναι μαθηματικά δύσκολη. Για τους λόγους αυτούς οι Meneveau, Lund και Cabot - 1996 πρότειναν ένα διαφορετικό τρόπο υπολογισμού της μέσης τιμής του συντελεστή C_d που βασίζεται στην εύρεση ενός χρονικού μέσου όρου του συντελεστή ακολουθώντας τροχιές σωματιδίων στο χρόνο (Lagrangian type averaging). Στην περίπτωση αυτή ο συντελεστής υπολογίζεται έτσι ώστε να ελαχιστοποιείται το λάθος που προκύπτει από τη χρησιμοποίηση του μοντέλου Smagorinsky με βάση την ισότητα Germano κατά μήκος των χρονικών τροχιών των σωματιδίων. Ο συντελεστής C_d του δυναμικού μοντέλου Smagorinsky, όπως διατυπώθηκε στην ενότητα 2.5.2 δίνεται από τη σχέση (2.86). Με βάση λοιπόν τη νέα θεωρία υπολογίζονται εκ νέου οι χρονικοί μέσοι όροι του αριθμητή $\ell_{LM} = \underline{\underline{L}} : \underline{\underline{M}}$ και παρονομαστή $\ell_{MM} = \underline{\underline{M}} : \underline{\underline{M}}$ της σχέσεως (2.86) με την επίλυση δύο πρόσθετων εξισώσεων:

$$\frac{D\ell_{LM}}{Dt} = \frac{\partial \ell_{LM}}{\partial t} + \underline{u} \cdot \nabla \ell_{LM} = \frac{1}{T} (\underline{L} : \underline{M} - \ell_{LM}) \quad (3.1)$$

$$\frac{D\ell_{MM}}{Dt} = \frac{\partial \ell_{MM}}{\partial t} + \underline{u} \cdot \nabla \ell_{MM} = \frac{1}{T} (\underline{M} : \underline{M} - \ell_{MM}) \quad (3.2)$$

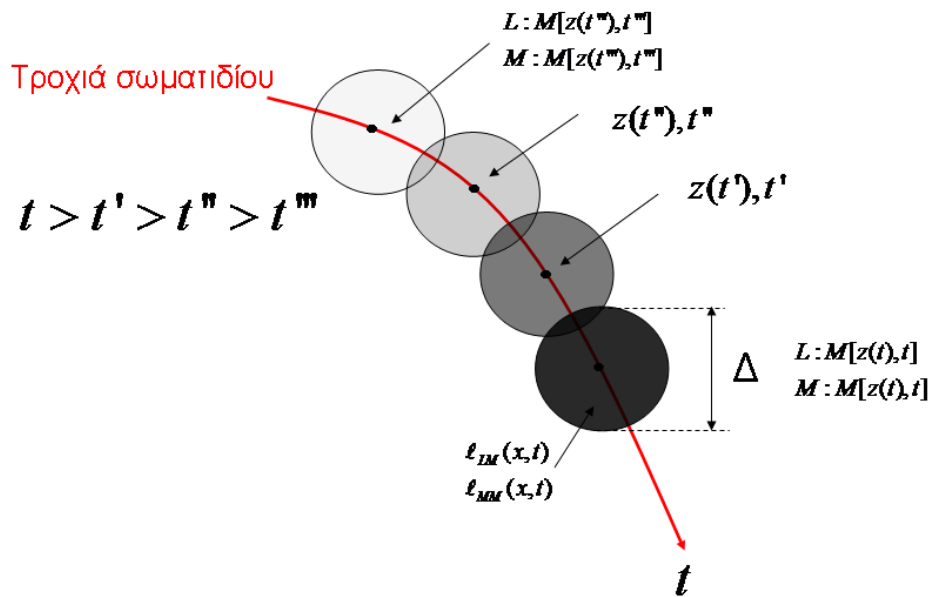
όπου T είναι ο χρόνος χαλάρωσης.

Για λόγους υπολογιστικού κόστους αποφασίστηκε να γίνει διακριτοποίηση στο χρόνο των παραπάνω εξισώσεων με γνώση μόνο προηγούμενων τιμών (explicit). Η τελική μορφή των εξισώσεων που προκύπτει είναι:

$$\ell_{LM}^{n+1} = \frac{\frac{\ell_{LM}^n}{\Delta t} + \frac{1}{T} (\underline{L} : \underline{M})^n - (\underline{u} \cdot \nabla \ell_{LM})^n}{\left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{1}{T} \right)} \quad (3.3)$$

$$\ell_{MM}^{n+1} = \frac{\frac{\ell_{MM}^n}{\Delta t} + \frac{1}{T} (\underline{M} : \underline{M})^n - (\underline{u} \cdot \nabla \ell_{MM})^n}{\left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{1}{T} \right)} \quad (3.4)$$

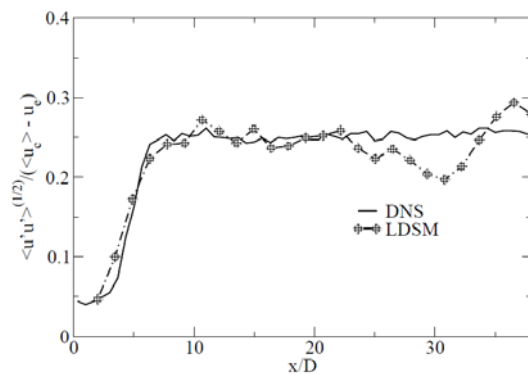
Ο χρόνος χαλάρωσης είναι η παράμετρος του μοντέλου, η οποία ελέγχει το μήκος του χρονικού διαστήματος στο οποίο υπολογίζεται ο χρονικός μέσος όρος. Στην παρούσα προσομοίωση ο χρόνος χαλάρωσης T λήφθηκε ίσος με $T = \theta \Delta (\ell_{LM} \ell_{MM})^{-1/8}$; $\theta = 1.5$, σύμφωνα με τους Meneveau Charles, Thomas S. Lund, William H. Cabot - 1999 και Δ το μήκος του φίλτρου με βάση το 2^ο ορισμό της ενότητας 2.5.1. Σχηματικά η μέθοδος απεικονίζεται στο σχήμα 3.28.



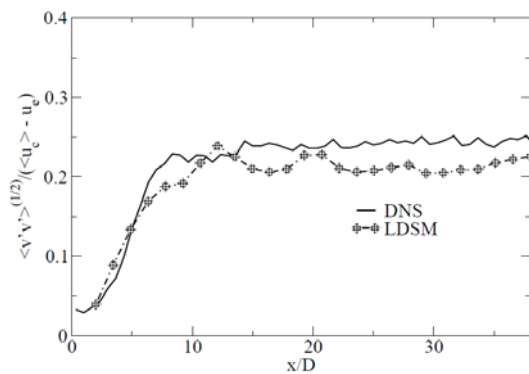
Σχήμα 3.28: Σχηματική αναπαράσταση της μεθόδου Lagrangian type averaging.

Ακολουθώντας μία χρονική τροχιά, οι τιμές των μεγεθών τη χρονική στιγμή t υπολογίζονται με τη βοήθεια προηγούμενων τιμών πολλαπλασιασμένων με συντελεστές βαρύτητας μίας εκθετικά μειούμενης συνάρτησης. Το χρώμα των κύκλων στο σχήμα 3.28 απεικονίζει τη βαρύτητα του κάθε χρονικού βήματος.

Η συγκεκριμένη προσομοίωση οδήγησε σε αστάθεια της υπολογιστικής διεργασίας με αποτέλεσμα την τελική της κατάρρευση μετά από 180 αδιάστατες χρονικές μονάδες περίπου. Στο σχήμα 3.29 (α) και (β) παρουσιάζεται η αξονική (α) και η ακτινική (β) συνιστώσα της έντασης τύρβης σε σχέση με την κατάντη απόσταση της δέσμης για 150 χρονικές μονάδες του μοντέλου Lagrangian type averaging (LDSM) σε σύγκριση με την πρόβλεψη της άμεσης προσομοίωσης. Στις επόμενες χρονικές μονάδες όπως αναφέρθηκε η υπολογιστική διαδικασία παρουσίασε αστάθεια.



Σχήμα 3.29 (α): Αξονική ένταση τύρβης κατά μήκος του άξονα του της δέσμης (jet).



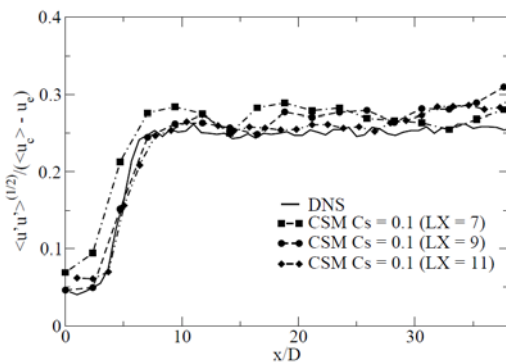
Σχήμα 3.29 (β): Ακτινική ένταση τύρβης κατά μήκος του άξονα της δέσμης (jet).

Λόγος αποτελεί πιθανόν η επιλογή του χρόνου χαλάρωσης, καθώς επίσης και η διακριτοποίηση στο χρόνο με τη χρήση μόνο προηγούμενων τιμών (explicit). Περαιτέρω βελτίωση του μοντέλου επιδιώχθηκε σε μικρό βαθμό μέσω του συντελεστή του χρόνου χαλάρωσης, ο οποίος όμως δεν επηρέασε σε μεγάλο βαθμό τα τελικά αποτελέσματα, παρά μόνο τη συνολική διάρκεια σταθερότητας του υπολογιστικού κώδικα. Λόγω της καλύτερης συμφωνίας του με τα αποτελέσματα της άμεσης προσομοίωσης και της σταθερότητας στους υπολογισμούς, τελικά επιλέχθηκε το μοντέλο Smagorinsky με σταθερό C_s και ίσο με 0.1 για την επίλυση του ροϊκού πεδίου.

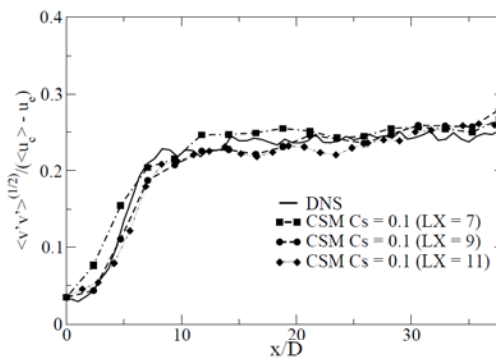
3.9 Έλεγχος ανεξαρτησίας αποτελεσμάτων από το πλέγμα

Όπως αναφέρθηκε στην ενότητα 3.3 ο βαθμός πολυωνυμικής διακριτοποίησης στην περίπτωση της μεθόδου άμεσης προσομοίωσης που χρησιμοποιήθηκε κατά τη διάρκεια των προσομοιώσεων λήφθηκε ίσος με $N = 12$. Προσπάθεια μείωσης αυτού σε $N = 10$ είχε σαν αποτελέσματα την αποσταθεροποίηση της υπολογιστικής διεργασίας και την τελική κατάρρευση αυτής.

Όσο αφορά στο μοντέλο προσεγγιστικής ανέλιξης (ADM) η ανάλυση ευαισθησίας για την ανεξαρτησία της λύσης από το πλέγμα που πραγματοποιήθηκε από τον Kueng - 2007, έδειξε ότι ο χαμηλότερος βαθμός πολυωνυμικής προσέγγισης που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να δώσει ποιοτικά αποτελέσματα είναι $N = 8$. Για το μοντέλο Smagorinsky ωστόσο χρησιμοποιήθηκαν 3 διαφορετικοί πολυωνυμικοί βαθμοί $N = 6, 8$ και 10 για τον έλεγχο της ανεξαρτησίας της τελικής λύσης από το υπολογιστικό πλέγμα, έτσι ώστε να διαπιστωθεί ο βαθμός πολυωνυμικής προσέγγισης που δίνει ικανοποιητικά αποτελέσματα σε σχέση πάντα με αυτά της άμεσης προσομοίωσης. Ο έλεγχος ανεξαρτησίας της λύσης έγινε μόνο στην περίπτωση του σταθερού μοντέλου Smagorinsky με $C_s = 0.1$, καθόσον στις υπόλοιπες περιπτώσεις η επίδραση του πλέγματος θα ήταν η ίδια.



Σχήμα 3.30 (α): Αξονική ένταση τύρβης κατά μήκος του άξονα του της δέσμης (jet).



Σχήμα 3.30 (β): Ακτινική ένταση τύρβης κατά μήκος του άξονα της δέσμης (jet).

Στο σχήμα 3.30 παρουσιάζεται η αξονική (α) και ακτινική (β) συνιστώσα της έντασης της τύρβης κατά μήκος του άξονα της δέσμης 3 διαφορετικούς βαθμούς πολυωνύμων παρεμβολής $N = 6$ ($LX = 7$ κόμβοι), $N = 8$ ($LX = 9$ κόμβοι), $N = 10$ ($LX = 11$ κόμβοι). Όπως προκύπτει για πολυώνυμα παρεμβολής βαθμού μεγαλύτερου του 8 τα αποτελέσματα παρουσιάζουν ανεξαρτησία σε σχέση με το πλέγμα και δίνουν τα ίδια

αποτελέσματα, ενώ επιλογή πολυωνυμικού βαθμού μικρότερου του 8 οδηγεί σε τελικά αποτελέσματα, που αποκλίνουν σε μικρό βέβαια βαθμό από αυτά της άμεσης προσομοίωσης (DNS). Αποτελέσματα που αφορούν την ένταση της τύρβης σε διάφορες τομές κατάντη του άξονα συμμετρίας της δέσμης παρουσίασαν την ίδια συμπεριφορά και δεν παρουσιάζονται.

3.10 Συμπεράσματα

Στην παρούσα ενότητα αναφέρονται συνοπτικά τα συμπεράσματα που προέκυψαν από τη μελέτη και την επεξεργασία των αποτελεσμάτων. Αρχικά προσομοιώθηκαν τα χαρακτηριστικά ροής τύπου δέσμης (jet) με τη βοήθεια της άμεσης προσομοίωσης και της προσομοίωσης μεγάλων δινών με τη χρήση δύο διαφορετικών μοντέλων, του μοντέλου προσεγγιστικής ανέλιξης και του μοντέλου Smagorinsky (κλασσικό και δυναμικό). Ο βαθμός των πολυωνύμων παρεμβολής στην περίπτωση της άμεσης προσομοίωσης ορίστηκε ίσος με 12, ενώ στην περίπτωση αυτής των μεγάλων δινών ίσος με 8. Όσο αφορά στο μοντέλο προσεγγιστικής ανέλιξης (ADM), χρησιμοποιήθηκαν τρεις διαφορετικές τιμές του συντελεστή του όρου χαλάρωσης ($\chi_u = 100, 500$ και 900), ενώ για το μοντέλο Smagorinsky με σταθερό συντελεστή C_s χρησιμοποιήθηκαν επίσης τρεις διαφορετικές τιμές αυτού ($C_s = 0.1, 0.15$ και 0.2). Τα στατιστικά αποτελέσματα της έντασης της τύρβης στην ακτινική και αξονική συνιστώσα για το μοντέλο προσεγγιστικής ανέλιξης, συμφωνούν με αυτά της άμεσης προσομοίωσης μόνο μετά την μεταβατική περιοχή ($x/D > 20$), στην οποία η διαφορά που παρατηρείται μεταξύ των αποτελεσμάτων της άμεσης προσομοίωσης και της προσομοίωσης μεγάλων δινών, είναι της τάξης του 30%. Με το κλασσικό μοντέλο Smagorinsky με συντελεστή $C_s = 0.2$ τα αποτελέσματα παρουσιάζονται αυξημένα κατά 20% περίπου σε όλο το μήκος της δέσμης (jet). Η χρήση τριών διαφορετικών τιμών του όρου χαλάρωσης για το μοντέλο ADM δεν βελτίωσαν τα αποτελέσματα, ενώ για το μοντέλο Smagorinsky η πρόβλεψη με τους δύο διαφορετικούς συντελεστές $C_s = 0.1$ και 0.15 βελτιώθηκε αισθητά, με τον πρώτο να δίνει ικανοποιητικά αποτελέσματα, τα οποία συμφωνούν αρκετά καλά με αυτά της άμεσης προσομοίωσης. Επιπλέον επιδιώχθηκε περαιτέρω βελτίωση του μοντέλου Smagorinsky μέσω της χρησιμοποίησης δυναμικού υπολογισμού του συντελεστή C_s . Τα στατιστικά αποτελέσματα στην περίπτωση αυτή μείωσαν την υπερεκτίμηση της

έντασης της τύρβης στη μεταβατική περιοχή της δέσμης, κάτι το οποίο δεν ήταν εφικτό με τη χρησιμοποίηση του μοντέλου προσεγγιστικής ανέλιξης. Παρόλα αυτά η τελική συμφωνία των αποτελεσμάτων του δυναμικού μοντέλου Smagorinsky με αυτά της άμεσης προσομοίωσης κρίνεται ανεπαρκής σε σχέση με αυτή του μοντέλου Smagorinsky με σταθερό συντελεστή $C_s = 0.1$. Τα αποτελέσματα του δυναμικού χαρακτήρα του μοντέλου βελτιώθηκαν σε μικρό βαθμό με τη χρήση πέντε διαφορετικών μονοδιάστατων συναρτήσεων μεταφοράς, χωρίς όμως η τελική πρόβλεψη των αποτελεσμάτων να είναι ιδιαίτερα ικανοποιητική. Επιπρόσθετα η εύρεση ενός μέσου χρονικού όρου του δυναμικού συντελεστή C_d μέσω της ανάπτυξης του μοντέλου LDSM οδήγησε σε τελική κατάρρευση της υπολογιστικής διαδικασίας, παρόλο που τα αποτελέσματα στις 150 αρχικές χρονικές μονάδες παρουσιάζουν ικανοποιητική συμφωνία με αυτά της άμεσης προσομοίωσης. Στον πίνακα που παρουσιάζεται στη συνέχεια εμφανίζεται συνοπτικά μία ποιοτική βαθμολογία των μοντέλων που χρησιμοποιήθηκαν στην περίπτωση της πρότυπης γεωμετρίας δέσμης (jet), όσο αφορά στην πρόβλεψη και συμφωνία των αποτελεσμάτων, σε σχέση με την άμεση προσομοίωση, για τις δύο περιοχές ενδιαφέροντος. Η βαθμολογία κυμαίνεται από 1 μέχρι 5 μαύρους κύκλους, με 5 να είναι η καλύτερη συμφωνία.

Γεωμετρία: Πρότυπη δέσμη ομοροής (Coflow Jet)		
Μοντέλο	Κύρια περιοχή ενδιαφέροντος (μεταβατική περιοχή της δέσμης - $8 < x/D < 15$)	Δευτερεύουσα περιοχή ενδιαφέροντος (περιοχή ομοιότητας της δέσμης - $x/D > 30$)
ADM_ $\chi_u = 100$	•	•••••
ADM_ $\chi_u = 500$	•	•••••
ADM_ $\chi_u = 900$	•	•••••
CSM_ $C_s = 0.1$	•••••	•••••
CSM_ $C_s = 0.15$	•••••	•••
CSM_ $C_s = 0.2$	•	••
DSM_v1	•••	•
DSM_v2	•••	••
DSM_v3	•••	•
DSM_v4	•••	•
DSM_Inm	•••	••

Κεφάλαιο 4^ο

Μαθηματική περιγραφή και επίλυση της εξίσωσης μεταφοράς του κλάσματος ανάμιξης Z

Εισαγωγή

Το παρόν κεφάλαιο αφορά στην υπολογιστική επίλυση της εξίσωσης μεταφοράς του κλάσματος ανάμιξης Z και στη μαθηματική διερεύνηση της συμπεριφοράς του με τη μέθοδο προσομοίωσης μεγάλων δινών και τη χρήση του μοντέλου Smagorinsky (κλασσικό και δυναμικό), καθώς επίσης και τη χρησιμοποίηση μίας διαφορετικής διαδικασίας φιλτραρίσματος, η οποία μπορεί να χαρακτηριστεί ως εναλλακτική μέθοδος προσομοίωσης μεγάλων δινών.

Στη συνέχεια του κεφαλαίου και συγκεκριμένα στην ενότητα 4.1 περιγράφονται εν συντομία οι γενικές μέθοδοι προσομοίωσης μεγάλων δινών που χρησιμοποιούνται για τη μοντελοποίηση τυρβωδών φλογών διάχυσης. Εν συνεχεία στην ενότητα 4.2 γίνεται μία εισαγωγή στη μέθοδο των φλογιδίων και διαμορφώνεται η γενική εξίσωση του κλάσματος ανάμιξης Z. Στην επόμενη ενότητα 4.3 αναλύεται η φιλτραρισμένη μορφή αυτής, ενώ παράλληλα περιγράφεται το μοντέλο που χρησιμοποιήθηκε για το κλείσιμο της και δίνεται η τελική της διακριτοποιημένη μορφή, όπως αυτή διαμορφώθηκε στον υπάρχοντα κώδικα των φασματικών πεπερασμένων στοιχείων. Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης παρουσιάζονται και αναλύονται στην παράγραφο 4.4, ενώ στην προτελευταία παράγραφο 4.5 διερευνάται η δυνατότητα βελτίωσης πρόβλεψης του πεδίου του κλάσματος ανάμιξης, με μία εναλλακτική μέθοδο προσομοίωσης μεγάλων δινών και τη χρησιμοποίηση πλέγματος υψηλότερης διακριτοποίησης και ακρίβειας. Η τελευταία παράγραφος 4.6 του κεφαλαίου συνοψίζει τα τελικά συμπεράσματα και παρατηρήσεις που προέκυψαν από την υπολογιστική μελέτη και διερεύνηση της επίλυσης της εξίσωσης του κλάσματος ανάμιξης Z.

4.1 Μέθοδοι προσομοίωσης μεγάλων δινών τυρβωδών φλογών διάχυσης

Στην περίπτωση φλογών διάχυσης, το καύσιμο και το οξειδωτικό εισέρχονται στο θάλαμο καύσης από ξεχωριστά ρεύματα. Οι χημικές αντιδράσεις προκαλούνται από τη μοριακή διάχυση των συστατικών του καύσιμου μίγματος. Εάν η χημεία λαμβάνει χώρα αρκετά γρήγορα, τότε δημιουργείται ένα στρώμα αντίδρασης σε περίπου στοιχειομετρικές συνθήκες, μέσα στο οποίο το καύσιμο και το οξειδωτικό καταναλώνονται, με ταυτόχρονη έκλυση καυσαερίων και / ή προϊόντων καύσης. Στις περισσότερες πρακτικές μηχανολογικές εγκαταστάσεις με καύσιμο υδρογονάνθρακες ή υδρογόνο, η καύση σταθεροποιείται και ελέγχεται με βάση το ρυθμό της μοριακής ανάμιξης. Ωστόσο η χημεία αυτής είναι σημαντική και χρίζει ιδιαίτερης σημασίας, στην περίπτωση που οι χημικές κλίμακες είναι συγκρίσιμες και της ίδιας τάξης μεγέθους με τις χρονικές κλίμακες της τύρβης. Στην περίπτωση αυτή μπορεί να παρατηρηθεί τοπικό σβήσιμο της φλόγας, ικανό να προκαλέσει αστάθεια στη λειτουργία συσκευών και παράλληλη βλάβη αυτών, γεγονός που είναι ανεπιθύμητο και πρέπει να αποφεύγεται. Παράλληλα με τα παραπάνω σημαντικό γεγονός που προβάλλει ως ανάγκη μελέτης και προσομοίωσης τυρβωδών φλογών διάχυσης αποτελεί το γεγονός, ότι ο σχηματισμός ρυπογόνων συστατικών και προϊόντων καύσης καθορίζεται από τις πιο αργές χημικές αντιδράσεις. Καθοριστικό ρόλο αποτελεί η δυνατότητα προσομοίωσης και σωστής πρόβλεψης του μηχανισμού της καύσης, καθώς επίσης και των μεγεθών που την επηρεάζουν, με τελικό σκοπό τη δυνατότητα μείωσης των εκπεμπόμενων ρύπων, την αποφυγή ασταθειών και προβλημάτων κατά τη διάρκεια αυτής και βελτίωσης του υπάρχοντος μηχανολογικού εξοπλισμού.

Το κυριότερο “εμπόδιο” στην προσομοίωση διεργασιών καύσης αποτελεί ο άγνωστος χημικός όρος πηγής που εμφανίζεται στις εξισώσεις διατήρησης μάζας των χημικών ειδών (chemical species). Στη μέθοδο άμεσου υπολογισμού της στατιστικής μέσης τιμής της προσεγγιστικής λύσης (RANS) έχει διαπιστωθεί ότι το άμεσο κλείσιμο του συγκεκριμένου όρου στις εξισώσεις στατιστικού μέσου δεν είναι εφικτό, καθόσον είναι γνωστές μόνο μέσες τιμές των αντίστοιχων μεγεθών που απαιτούνται για την προσομοίωσή του. Για το λόγο αυτό η χρησιμοποίηση μεθόδων διατήρησης βαθμωτών μεγεθών (conserved scalar methods) είναι ιδιαίτερα διαδεδομένη σε αυτή

την περίπτωση. Με τη χρησιμοποίηση πεπλεγμένων συναρτήσεων (coupling functions), ο ρυθμός ανάμιξης καυσίμου και οξειδωτικού μπορεί να περιγραφεί με το κλάσμα ανάμιξης (mixture fraction), μία μεταβλητή στην εξίσωση της οποίας δεν υπάρχει ο όρος χημικής πηγής, καθόσον αυτή είναι αδρανής και δεν αντιδρά. Έχουν κατά καιρούς προταθεί διάφοροι ορισμοί του κλάσματος ανάμιξης [Bilger - 1976, Pitsch - 1998], αλλά γενικά αυτό αποτελεί ένα μέτρο του τοπικού βαθμού ανάμιξης μεταξύ των συστατικών του καυσίμου μίγματος, γεγονός που το καθιστά μία μεταβλητή ανεξάρτητη της χημείας.

Μία άλλη παράμετρος για τη μοντελοποίηση τυρβωδών φλογών διάχυσης αποτελεί ο βαθμωτός ρυθμός σκέδασης (scalar dissipation rate), ο οποίος ελέγχει την ανάμιξη καυσίμου και οξειδωτικού, καθόσον αποτελεί συνάρτηση της κλίσης του κλάσματος ανάμιξης. Στην ουσία είναι εκείνος ο οποίος αποτελεί ένα μέτρο των μεταβολών του κλάσματος ανάμιξης και της μοριακής διάχυσης των χημικών στοιχείων στη φλόγα. Λόγω του φιλτραρίσματος των εξισώσεων που εφαρμόζεται στην περίπτωση της προσομοίωσης μεγάλων δινών προκύπτουν επιπλέον όροι, ένας εκ των οποίων είναι και η μεταβλητότητα του κλάσματος ανάμιξης (mixture fraction variance).

Τα βασικά μοντέλα που χρησιμοποιούνται στην περίπτωση προσομοίωσης μεγάλων δινών και αναλύονται στη συνέχεια, στηρίζονται στην πρόβλεψη των τριών κύριων παραμέτρων που προαναφέρθηκαν (κλάσμα ανάμιξης - mixture fraction -, βαθμωτός ρυθμός σκέδασης - scalar dissipation rate -, μεταβλητότητα κλάσματος ανάμιξης - scalar dissipation variance -). Στις επόμενες υποενότητες αναφέρονται τα κυριότερα μοντέλα που χρησιμοποιούνται στην περίπτωση τυρβωδών φλογών διάχυσης και αναλύονται τα κυριότερα χαρακτηριστικά τους εν συντομία.

4.1.1 Σταθερό και χρονικά μεταβαλλόμενο μοντέλο φλογιδίων (steady - unsteady flamelet model)

Τα μοντέλα φλογιδίων για την προσομοίωση των φλογών διάχυσης εισήχθησαν από τον ερευνητή Peters - 1983,1984. Η βασική υπόθεση στηρίζεται στο γεγονός ότι οι χημικές χρονικές κλίμακες είναι σχετικά μικρές σε τέτοιο βαθμό, ώστε οι αντιδράσεις να λαμβάνουν χώρα σε ένα λεπτό στρώμα σε στοιχειομετρικές συνθήκες, η κλίμακα του οποίου είναι μικρότερη από τις μικρότερες κλίμακες τύρβης. Αυτό έχει δύο συνέπειες: 1) Η δομή της φλόγας να παραμένει στρωτή και 2) η μεταφορά λόγω διάχυσης να συμβαίνει κατά κύριο λόγο σε κάθετη κατεύθυνση στην επιφάνεια του

στοιχειομετρικού καύσιμου μίγματος. Στην περίπτωση αυτή οι εξισώσεις μεταφοράς των ειδών μπορούν μέσω μετασχηματισμού συντεταγμένων να μετατραπούν σε ένα σύστημα εξισώσεων, στο οποίο η ανεξάρτητη μεταβλητή είναι το κλάσμα ανάμιξης. Το τελικό σύστημα των εξισώσεων που προκύπτει αποτελεί τις εξισώσεις των φλογιδίων:

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} - \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} - \dot{m}_i = 0 \quad (4.1)$$

όπου t είναι ο χρόνος, ρ η πυκνότητα, Y_i το κλάσμα μάζας του χημικού στοιχείου i , Z το κλάσμα ανάμιξης, χ ο βαθμωτός ρυθμός σκέδασης και \dot{m}_i ο χημικός όρος πηγής του χημικού στοιχείου i .

Το σταθερά χρονικό μοντέλο φλογιδίων προκύπτει εάν στην εξίσωση (4.1) αγνοηθεί ο χρονικός όρος ($1^{ος}$ όρος του αριστερού μέρους της εξίσωσης) και υποθέτει ότι η δομή της φλόγας είναι σε ισορροπία (steady state). Στην περίπτωση αυτή η λύση είναι συνάρτηση μόνο του βαθμωτού ρυθμού σκέδασης χ και των οριακών συνθηκών, κάτι το οποίο επιτρέπει τον εκ των προτέρων υπολογισμό της συγκεντρώσεως των ειδών και της θερμοκρασίας σε συνάρτηση αυτών. Αρχικές μελέτες και έρευνες στις οποίες χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο είναι αυτή των Cook & Riley - 1998, De Bruyn Korpes - 1998, ενώ το αντίστοιχο μοντέλο εφαρμόστηκε με επιτυχία και για προσομοιώσεις τυπικών πειραματικών διατάξεων [Kemp - 2003, Raman & Pitsch - 2005a].

Παρόλη τη χρησιμότητα του, το μοντέλο παρουσιάζει μειονέκτημα όσο αφορά στην περίπτωση που η χημεία και οι φυσικές διεργασίες πρέπει να ληφθούν υπόψη, γεγονός που καθιστά την υπόθεση πάνω στην οποία στηρίζεται αυτό αναξιόπιστη. Στην περίπτωση αυτή στις εξισώσεις των φλογιδίων πρέπει να ληφθεί υπόψη και ο όρος της χρονικής μεταβολής των ειδών. Οι ερευνητές Pitsch & Steiner - 2000a, b χρησιμοποίησαν το λαγκρασιανό μοντέλο φλογιδίων (Lagrangian Flamelet Model) για τη μοντελοποίηση της καύσης με τη μέθοδο προσομοίωσης μεγάλων δινών στην περίπτωση πιλοτικής διάταξης φλόγας διάχυσης CH_4 / αέρα [Barlow & Frank - 1998], χρησιμοποιώντας ένα χημικό μηχανισμό 20 βημάτων βασισμένο στον μηχανισμό GRI 2.11 [Bowman - 1995]. Στη μελέτη αυτή επιλύθηκαν οι χρονικά μεταβαλλόμενες εξισώσεις φλογιδίων και συνδέθηκαν με την επίλυση του ροϊκού πεδίου με τελικό αποτέλεσμα την πρόβλεψη του βαθμωτού ρυθμού σκέδασης και της συγκέντρωσης των χημικών ειδών σε ικανοποιητικό βαθμό, κυρίως για την περίπτωση του NO .

Ωστόσο τοπικές διαταραχές του βαθμωτού ρυθμού σκέδασης, λόγω του τρόπου εύρεσης μέσων τιμών αυτού, αγνοήθηκαν με αποτέλεσμα να μην γίνει πλήρως αντιληπτή η δυναμικότητα του μοντέλου.

Βελτίωση του προηγούμενου μοντέλου αποτελεί το Eulerian μοντέλο των φλογιδίων (Eulerian Flamelet Model) το οποίο χρησιμοποιήθηκε σε μία πιο πρόσφατη έρευνα του Pitsch το 2002. Στην περίπτωση αυτή οι εξισώσεις μετασχηματίστηκαν και γράφτηκαν στην Eulerian μορφή, ενώ ταυτόχρονα έγινε πλήρης σύζευξη του μοντέλου με τον επιλυτή του ροϊκού πεδίου, με τελικό αποτέλεσμα να είναι δυνατή η εισαγωγή των διακυμάνσεων του βαθμωτού ρυθμού σκέδασης στο μοντέλο της καύσης. Η βελτίωση αυτή είχε μεγάλη επίδραση στα αποτελέσματα όσο αφορά στη σωστή πρόβλεψη του CO και NO, όπως απείδειξε η σύγκριση με τα πειραματικά δεδομένα.

Το μοντέλο των σταθερών φλογιδίων είναι θεωρητικά εύκολο στη χρήση του, δεν αυξάνει το υπολογιστικό κόστος ιδιαίτερα, κατά τη χρησιμοποίησή του, ενώ παράλληλα δίνει αρκετά καλά αποτελέσματα, στην περίπτωση που η βασική του υπόθεση δεν παραβιάζεται. Ένα κύριο μειονέκτημα του όμως αποτελεί το γεγονός ότι από μόνο του δεν είναι ικανό να προβλέψει ή να προσομοιώσει σωστά φυσικά φαινόμενα, όπως ανύψωση της φλόγας (lift off), σβήσιμο (extinction) ή επανάφλεξη (re-ignition) αυτής. Ο κύριος λόγος είναι το περιορισμένο πεδίο λύσεων των εξισώσεων των φλογιδίων. Για την αποφυγή των προαναφερθέντων προβλημάτων αναπτύχθηκε από τους Pierce και Moin το μοντέλο φλογιδίων με την επίλυση μίας επιπλέον μεταβλητής προόδου (Flamelet / Progress variable model). Το συγκεκριμένο μοντέλο χρησιμοποιεί και αυτό μία βιβλιοθήκη τιμών προερχόμενων από το χρονικά σταθερό μοντέλο φλογιδίων, αλλά διαφέρει από αυτό που χρησιμοποιήθηκε από τους Branley & Jones - 2001, Cook & Riley - 1998, De Bruyn Kops - 1998, Kempf - 2003, που αναφέρθηκε προηγουμένως. Η βασική διαφορά έγκειται στο γεγονός της αντικατάστασης του βαθμωτού ρυθμού σκέδασης ως παραμέτρου στη βιβλιοθήκη τιμών, με μία άλλη μεταβλητή προόδου (progress variable), όπως για παράδειγμα το άθροισμα των κλασμάτων μάζας του CO₂, H₂O, CO και H₂. Για την πρόβλεψη της συγκεκριμένης μεταβλητής προόδου απαιτείται η επίλυση μίας επιπλέον εξίσωσης μεταφοράς, στην οποία ο άγνωστος χημικός όρος, μοντελοποιείται με τη βοήθεια της βιβλιοθήκης που παρέχεται μέσω της επίλυσης των εξισώσεων των φλογιδίων και μίας προεπιλεγμένης συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας του κλάσματος ανάμιξης και της μεταβλητής προόδου. Η αλλαγή της παραμετροποίησης της βιβλιοθήκης των

φλογιδίων αφορά στη βελτίωση πρόβλεψης φαινομένων, τα οποία δεν είναι δυνατό να προσομοιωθούν με το μοντέλο σταθερών φλογιδίων, όπως αυτά της ανύψωσης της φλόγας (lift off), τοπικού σβησίματος (extinction) ή επανάφλεξης (re-ignition) αυτής. Η επιλογή της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας είναι καθοριστικής σημασίας στην πρόβλεψη του μοντέλου. Οι ερευνητές Pierce & Moïn – 2001, 2004, χρησιμοποίησαν τη συνάρτηση δέλτα (delta function) ως τη μορφή της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας και διαπίστωσαν σημαντικές βελτιώσεις στην πρόβλεψη του μοντέλου σε σχέση με το μοντέλο σταθερών φλογιδίων, με συγκρίσεις με πειραματικά δεδομένα. Σε δοκιμές που έγιναν εκ των υστέρων με τη χρησιμοποίηση αποτελεσμάτων και δεδομένων άμεσης προσομοίωσης, που αφορούσαν φλόγα διάχυσης σε ισότροπη τύρβη [Sripakagorn et al. 2004], οι Ihme et al. - 2004 μελέτησαν πιθανές περιοχές βελτίωσης του μοντέλου φλογιδίων με την επίλυση μίας μεταβλητής προόδου. Κατέληξαν στο συμπέρασμα ότι η χρησιμοποίηση της β-συνάρτησης (beta-function), ως συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας του κλάσματος ανάμιξης, θα βελτιώνει τα αποτελέσματα, ενώ παράλληλα πρότειναν και έναν εναλλακτικό τρόπο κλεισίματος του αγνώστου όρου της μεταβλητότητας της μεταβλητής προόδου. Επιπλέον βελτιώσεις αφορούν στην υιοθέτηση στατιστικών μεθόδων και κατανομών για την πρόβλεψη της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας [Ihme & Pitsch - 2005] και την επέκταση του μοντέλου με τη χρησιμοποίηση των χρονικά μεταβαλλόμενων εξισώσεων φλογιδίων αντί των σταθερών [Pitsch & Ihme - 2005].

4.1.2 Μοντέλα κλεισίματος με χρησιμοποίηση ροπών υπό συνθήκη (Conditional Moment Closure – CMC)

Μία άλλη μεγάλη κατηγορία μοντέλων που χρησιμοποιούνται στην περίπτωση τυρβωδών φλογών διάχυσης προτάθηκε αρχικά από τους Klimenko - 1990 και Bilger - 1993 και ονομάζεται κλείσιμο ροπών υπό συνθήκη (Conditional Moment Closure - CMC). Η κύρια διαφορά τους είναι η χρησιμοποίηση και η εύρεση μέσων τιμών των μεταβλητών υπό συνθήκη, σε αντίθεση με τη συμβατική μέθοδο εύρεσης μέσης τιμής. Ο ερευνητής Klimenko ισχυρίστηκε ότι η τυρβώδης διάχυση στο χώρο του κλάσματος ανάμιξης μπορεί να μοντελοποιηθεί με πιο αυστηρούς και σαφείς όρους από ότι στο φυσικό χώρο. Ο Bilger - 1993 συνηγόρησε σε αυτό με την παρατήρηση που έκανε ότι οι περισσότερες διαταραχές των αντιδρώντων βαθμωτών μεγεθών

σχετίζονται με τις διαταραχές του κλάσματος ανάμιξης. Η περίπτωση αυτών των μοντέλων στηρίζεται στις ροπές υπό συνθήκη με κάποια μεταβλητή, σε μία συγκεκριμένη χωρική θέση x τη χρονική στιγμή t μέσα στο ροϊκό πεδίο, με τη χρησιμοποίηση της υπό συνθήκης συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας. Οι εξισώσεις που τελικά προκύπτουν εξαρτώνται από το χρόνο, τις τρεις χωρικές διαστάσεις και το κλάσμα ανάμιξης, το οποίο αποτελεί και την υπό συνθήκη μεταβλητή. Με βάση την υπό συνθήκη μεταβλητή για την μοντελοποίηση του αγνώστου όρου χημικής αντίδρασης οι ροπές μεγαλύτερης τάξης είναι αμελητέες σε σχέση με αυτή της πρώτης τάξης και παραλείπονται, κάνοντας έτσι τη μοντελοποίηση αυτού ευκολότερη. Ωστόσο η επίλυση του τελικού συστήματος εξισώσεων που προκύπτει είναι ιδιαίτερα απαιτητική ακόμα και στην περίπτωση της μεθόδου προσομοίωσης μεγάλων δινών, ενώ πολλά είναι τα προβλήματα που προκύπτουν λόγω οριακών συνθηκών και αυξημένου υπολογιστικού κόστους. Οι ερευνητές Kim & Pitsch - 2005 πρότειναν μία φόρμα εισαγωγής του μοντέλου CMC στη μέθοδο προσομοίωσης μεγάλων δινών δίνοντας παράλληλα και όλα τα μοντέλα που χρησιμοποιήθηκαν για το κλείσιμο των εξισώσεων, τα οποία και σύγκριναν με τα αποτελέσματα της άμεσης προσομοίωσης.

Επιπλέον ένα άλλο μοντέλο CMC το οποίο χρησιμοποιήθηκε από τους Bushe & Steiner - 1999 είναι αυτό της προσέγγισης του χημικού όρου πηγής υπό συνθήκη (conditional source term estimation model). Στην περίπτωση αυτή επιλύονται οι εξισώσεις για όλες τις βαθμωτές μεταβλητές που εμφανίζονται στο χημικό μηχανισμό. Για το κλείσιμο του χημικού όρου πηγής κάθε μεταβλητής χρησιμοποιούνται οι υπό συνθήκη μέσες βαθμωτές τιμές και η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας του κλάσματος ανάμιξης. Γενικά, η λογική των μοντέλων CMC στηρίζεται στην πρόβλεψη των υπό συνθήκη φιλτραρισμένων μεταβλητών σε σχέση με το κλάσμα ανάμιξης, από την επίλυση των εξισώσεων μεταφοράς μεταβλητών, οι οποίες δεν υπόκεινται σε καμία συνθήκη.

4.1.3 Μοντέλα επίλυσης συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας με βάση την πυκνότητα (transported Filtered Density Function Models - FDFM)

Μία τρίτη μεγάλη κατηγορία μοντέλων που χρησιμοποιούνται στην προσομοίωση τυρβωδών φλογών διάχυσης αποτελούν τα μοντέλα επίλυσης συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας με βάση την πυκνότητα (transported Filtered Density

Function Models - FDFM). Τα συγκεκριμένα μοντέλα αποτελούν επέκταση των αντίστοιχων μοντέλων που χρησιμοποιούνται στη μέθοδο υπολογισμού της στατιστικής μέσης τιμής της προσεγγιστικής λύσης (RANS) [Chen et al. - 1989, Pope - 1985, Xu & Pope - 2000]. Η διαφορά έγκειται στον υπολογισμό της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας, η οποία στην περίπτωση της μεθόδου προσομοίωσης μεγάλων δινών γίνεται με βάση την πυκνότητα [Colucci et al. - 1998, Sheikhi et al. - 2003]. Η εξίσωση η οποία επιλύεται στην περίπτωση αυτή αφορά στη μεταφορά της φιλτραρισμένης με βάση την πυκνότητα συνάρτησης πιθανότητας όλων των βαθμωτών αντιδρώντων μεταβλητών και της θερμοκρασίας ή ενθαλπίας. Στην περίπτωση αυτή ο χημικός όρος πηγής είναι πλέον γνωστός, ενώ αντίθετα ο όρος της μοριακής διάχυσης απαιτεί μοντελοποίηση.

Εφόσον στις φλόγες διάχυσης η ανάμιξη που οφείλεται στη μοριακή διάχυση αποτελεί το μηχανισμό σταθεροποίησης αυτών και χρίζει ιδιαίτερης σημασίας σε σχέση με τη φυσική της χημείας, η μοντελοποίηση του όρου αυτού είναι το βασικό εμπόδιο και περιορισμός εφαρμογής της μεθόδου σε πρακτικές εφαρμογές. Επιπλέον η φιλτραρισμένη συνάρτηση πιθανότητας εξαρτάται από το χώρο, το χρόνο και όλες τις ανεξάρτητες βαθμωτές μεταβλητές με αποτέλεσμα να μην είναι δυνατή η χωρική διακριτοποίηση αυτής με τις συμβατικές μεθόδους των πεπερασμένων όγκων και των πεπερασμένων διαφορών. Η διακριτοποίηση λαμβάνει χώρα μέσω ισοδύναμου συστήματος ιδεατών σωματιδίων. Για κάθε ένα από τα σωματίδια επιλύεται ένα σύστημα ολικών διαφορικών εξισώσεων με τελικό σκοπό την εύρεση της τροχιάς του σωματιδίου, της θερμοκρασίας ή της ενθαλπίας και τα κλάσματα μάζας των χημικών στοιχείων [Pope - 1985]. Για την εξαγωγή αξιόπιστων αποτελεσμάτων και ελαχιστοποίησης του σφάλματος της προσεγγιστικής λύσης που επιτυγχάνεται, είναι απαραίτητη η επιλογή ενός μεγάλου αριθμού ιδεατών σωματιδίων, κάτι το οποίο δυσχεραίνει ακόμη περισσότερο και καθιστά πολύ δύσκολη την εφαρμογή της μεθόδου σε πρακτικές πιλοτικές ή μη εφαρμογές. Για το λόγο τα μοντέλα αυτής της κατηγορίας εφαρμόζονται σε συνδυασμό με τα αντίστοιχα των φλογιδίων [Raman et al. - 2005, Sheiki et al. - 2005]. Επιλύεται αρχικά μόνο η φιλτραρισμένη με βάση την πυκνότητα συνάρτηση πιθανότητας του κλάσματος ανάμιξης και εν συνεχεία χρησιμοποιείται η βιβλιοθήκη τιμών που παράγεται από το μοντέλο των στρωτών φλογιδίων για την τελική πρόβλεψη της θερμοκρασίας και των κλασμάτων μάζας των διαφόρων συστατικών. Παρόλο την μεγάλη απαίτηση σε υπολογιστική ισχύ, η δυνατότητα εφαρμογής της μεθόδου πιστοποιήθηκε από την έρευνα των Raman &

Pitsch - 2005b, οι οποίοι προσομοίωσαν τις πιλοτικές φλόγες Sandia D και E χρησιμοποιώντας τον μηχανισμό χημικών αντιδράσεων GRI-2.11. Η σύγκριση των αποτελεσμάτων με τα πειραματικά δεδομένα όσο αφορά στα κλάσματα μάζας των συστατικών ήταν ικανοποιητική, εκτός από το κλάσμα μάζας του CO, οι τιμές του οποίου βρέθηκαν υπερεκτιμημένες ιδιαίτερα σε περιπτώσεις πλούσιου καυσίμου μίγματος.

4.2 Εισαγωγή στη μέθοδο των φλογιδίων - Εξίσωση μεταφοράς κλάσματος ανάμιξης Z - Αδιαστατοποίηση

Για την εισαγωγή της χημείας της αέριας φάσης στον υπάρχοντα κώδικα επιλέχθηκαν αρχικά δύο μέθοδοι, μία εκ των οποίων είναι η μέθοδος των σταθερών φλογιδίων και η άλλη της αναλυτικής πινακοποιημένης χημείας [Peters - 1983, Kempf et al. - 1998, Branley & Jones - 2001].

Με τη χρησιμοποίηση της μεθόδου των σταθερών φλογιδίων, η εισαγωγή του κλάσματος ανάμιξης Z απλοποιεί τη μαθηματική περιγραφή των φλογών διάχυσης γιατί μειώνει τον αριθμό των συνολικών μεταβλητών του προβλήματος μέσω της υπόθεσης ότι όλες οι συγκεντρώσεις Y_i των διαφόρων χημικών στοιχείων (chemical species) εκφράζονται ως συνάρτηση του κλάσματος ανάμιξης Z (mixture fraction) και της θερμοκρασίας T, $Y_i = f(Z, T)$ για $i = 1, N$ χημικά στοιχεία. Η βασική υπόθεση που γίνεται στην περίπτωση αυτή, είναι ότι η δομή της φλόγας εξαρτάται από το κλάσμα ανάμιξης Z και το χρόνο t. Η θερμοκρασία και οι συγκεντρώσεις των χημικών στοιχείων της καύσης εκφράζονται σε συνάρτηση αυτών των δύο ανεξάρτητων μεταβλητών. Η απόδειξη της παραπάνω διαπίστωσης έγινε από τους Williams και Peters οι οποίοι μετασχημάτισαν την εξίσωση των χημικών στοιχείων της καύσης από το φυσικό χώρο (x_1, x_2, x_3, t) στο χώρο του κλάσματος ανάμιξης (Z, y_2, y_3, t), όπου οι μεταβλητές y_2 και y_3 αποτελούν τις χωρικές μεταβλητές σε επίπεδα τα οποία είναι παράλληλα σε ισοεπιφάνειες του κλάσματος ανάμιξης. Στην τελική εξίσωση που προκύπτει, οι μεταβολές κατά μήκος του μετώπου της φλόγας (gradients along y_2 και y_3) θεωρούνται αμελητέες σε σχέση με τις αντίστοιχες που συμβαίνουν σε επίπεδα κάθετα σε αυτή (gradients along Z). Η φυσική όλων αυτών των παρατηρήσεων υπαγορεύει ότι η δομή της φλόγας είναι τοπικά μονοδιάστατη και

εξαρτάται μόνο από το χρόνο t και την κάθετη στο μέτωπο της φλόγας χωρική συνιστώσα (συνιστώσα Z). Σε ένα πολυδιάστατο χώρο, η προαναφερθείσα υπόθεση ισχύει μόνο στην περίπτωση που το μέτωπο της φλόγας είναι μικρό σε σχέση με όλες τις άλλες ροϊκές κλίμακες. Στην περίπτωση αυτή κάθε στοιχείο της φλόγας μπορεί να θεωρηθεί σαν μία μικρή στρωτή φλόγα που ονομάζεται φλογίδιο.

Στο χώρο του κλάσματος ανάμιξης η εξίσωση μεταφοράς των χημικών στοιχείων που λαμβάνουν μέρος σε μία χημική αντίδραση είναι:

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} = \dot{\omega}_i + \rho D \left(\frac{\partial Z}{\partial x_i} \frac{\partial Z}{\partial x_i} \right) \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} \quad (4.2)$$

όπου ρ η πυκνότητα, Y_i το κλάσμα μάζας του χημικού στοιχείου i , Z το κλάσμα ανάμιξης, D ο μοριακός συντελεστής διάχυσης του κλάσματος ανάμιξης Z , $\dot{\omega}_i$ ο όρος χημικής πηγής του χημικού στοιχείου i και $\chi = 2D \left(\frac{\partial Z}{\partial x_i} \frac{\partial Z}{\partial x_i} \right)$ ο βαθμωτός ρυθμός σκέδασης.

Αντίστοιχα η εξίσωση του θερμοκρασιακού πεδίου διαμορφώνεται στην:

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \dot{\omega}_T + \rho D \left(\frac{\partial Z}{\partial x_i} \frac{\partial Z}{\partial x_i} \right) \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} \quad (4.3)$$

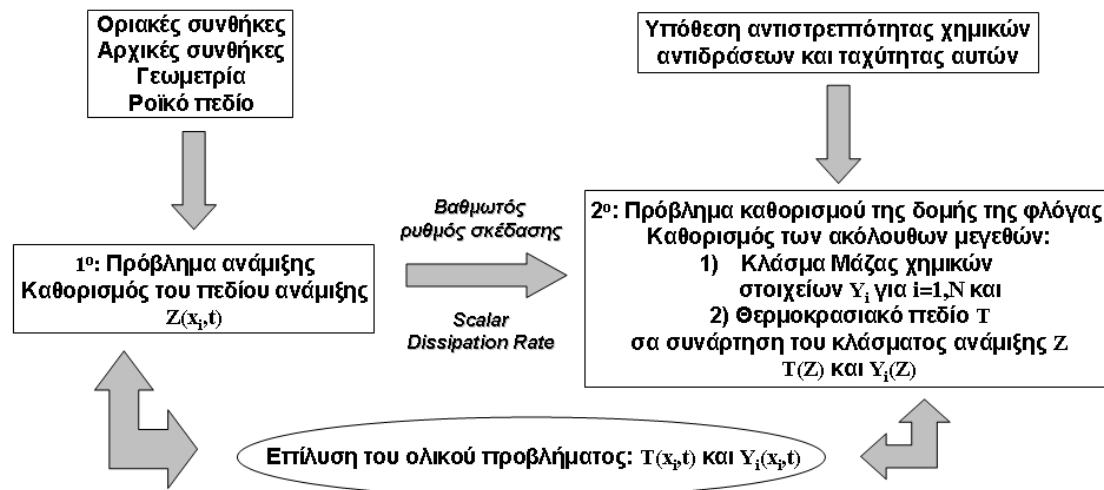
όπου $\dot{\omega}_T$ ο όρος χημικής πηγής της θερμοκρασίας T .

Οι εξισώσεις (4.2) και (4.3) αποτελούν τις εξισώσεις των φλογιδίων, οι οποίες χρησιμοποιούνται για τη μοντελοποίηση τυρβωδών φλογών διάχυσης. Στις παραπάνω εξισώσεις ο μόνος όρος ο οποίος εξαρτάται από τις χωρικές συντεταγμένες είναι ο βαθμωτός ρυθμός σκέδασης, ο οποίος ελέγχει την ανάμιξη μεταξύ των διαφόρων στοιχείων. Εάν αυτός είναι γνωστός τότε είναι δυνατή η επίλυση των παραπάνω εξισώσεων για την τελική εύρεση του θερμοκρασιακού πεδίου και των συγκεντρώσεων των στοιχείων σε συνάρτηση του κλάσματος ανάμιξης Z και του χρόνου t .

Συμπερασματικά θα μπορούσαμε να πούμε ότι η εισαγωγή του κλάσματος ανάμιξης στην περίπτωση επίλυσης των τυρβωδών φλογών διάχυσης (εύρεση $T(x_i, t)$ και $Y_i(x_i, t)$) μπορεί να διαχωριστεί σε 2 προβλήματα (σχήμα 4.1):

1^ο) Ένα πρόβλημα ανάμιξης, στο οποίο πρέπει να επιλυθεί η εξίσωση μεταφοράς του κλάσματος ανάμιξης έτσι ώστε να προσδιοριστεί το πεδίο του κλάσματος ανάμιξης στο χώρο και στο χρόνο ($Z(x_i, t)$).

2^ο) Ένα πρόβλημα καθορισμού της δομής της φλόγας, όπου η επίλυση των εξισώσεων των φλογιδίων (εύρεση του $T(Z,t)$ και $Y_i(Z,t)$) σε συνδυασμό με το κλάσμα ανάμιξης Z να οδηγήσει στην τελική λύση του συνολικού προβλήματος (εύρεση του $T(x_i,t)$ και $Y_i(x_i,t)$).



Σχήμα 4.1: Διαχωρισμός προβλήματος στην περίπτωση τυρβωδών φλογών διάχυσης με την εισαγωγή του κλάσματος ανάμιξης Z και του βαθμωτού ρυθμού σκέδασης χ (scalar dissipation rate).

Με βάση όλα τα παραπάνω προκύπτει ότι το κλάσμα ανάμιξης αποτελεί μία παράμετρο, η σωστή πρόβλεψη της οποίας είναι μείζονος σημασίας για την αξιοπιστία του τελικού μοντέλου, το οποίο θα χρησιμοποιηθεί για τη μοντελοποίηση τυρβωδών φλογών χωρίς προανάμειξη. Για το λόγο αυτό πριν από την εφαρμογή του συνολικού μοντέλου κρίθηκε σκόπιμο να επιλυθεί με τη μέθοδο προσομοίωσης μεγάλων δινών μόνο η εξίσωση μεταφοράς του κλάσματος ανάμιξης (1^ο πρόβλημα), χωρίς να ληφθούν υπόψη μεταβολές πυκνότητας και θερμοκρασίας, με σκοπό να μελετηθεί ποιοτικά το εύρος των τιμών μέσα στο οποίο κυμαίνεται αυτό.

Η γενική βασική εξίσωση μεταφοράς του κλάσματος ανάμιξης είναι η ακόλουθη:

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} Z) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Z) + \dot{\omega}_z \quad (4.4)$$

Το κλάσμα ανάμιξης όμως είναι μία μεταβλητή η οποία μεταβάλλεται μόνο λόγω φαινομένων διάχυσης και συναγωγής, ενώ παράλληλα δεν μεταβάλλεται λόγω φαινομένων καύσης (conserved scalar). Επομένως στην παραπάνω εξίσωση ο όρος $\dot{\omega}_z$ είναι ίσος με το 0 και η τελική μορφή της είναι:

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} Z) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Z) \quad (4.5)$$

$$\rho \left[\frac{\partial Z}{\partial t} + (\underline{u} \cdot \nabla) \underline{u} \right] = \nabla \cdot (\rho D \nabla Z) \quad (4.6)$$

Ο πρώτος όρος στις εξισώσεις (4.5) και (4.6) αφορά στη χρονική μεταβολή της μεταβλητής Z , ο δεύτερος όρος στη μεταβολή λόγω συναγωγής, ενώ το δεξί σκέλος της εξίσωσης αναφέρεται στον όρο διάχυσης. Ο συντελεστής D είναι ο μοριακός συντελεστής διάχυσης του κλάσματος ανάμιξης Z .

Για την αδιαστατοποίηση της εξίσωσης (4.5) χρησιμοποιήθηκαν τα αντίστοιχα μεγέθη που χρησιμοποιήθηκαν στην ενότητα 2.2. Τα μεγέθη αυτά είναι: L_∞ μήκος, u_∞ ταχύτητα, $t_\infty = L_\infty / u_\infty$ χρόνος, ρ_∞ πυκνότητα και D_∞ ο συντελεστής διάχυσης του κλάσματος ανάμιξης. Ο δείκτης ∞ αναφέρεται στην περιοχή της αδιατάρακτης ροής (far field region).

I. Αδιαστατοποίηση της εξίσωσης μεταφοράς του κλάσματος ανάμιξης

$$\frac{\partial \hat{\rho} \rho_\infty Z}{\partial \hat{t}} + \frac{1}{L_\infty} \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \rho_\infty \hat{u} u_\infty Z) = \frac{1}{L_\infty^2} \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \rho_\infty \hat{D} D_\infty \hat{\nabla} Z) \quad (4.7)$$

$$\frac{\rho_\infty}{t_\infty} \frac{\partial \hat{\rho} Z}{\partial \hat{t}} + \frac{\rho_\infty u_\infty}{L_\infty} \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{u} Z) = \frac{\rho_\infty D_\infty}{L_\infty^2} \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{D} \hat{\nabla} Z) \quad (4.8)$$

$$\frac{\rho_\infty u_\infty}{L_\infty} \frac{\partial \hat{\rho} Z}{\partial \hat{t}} + \frac{\rho_\infty u_\infty}{L_\infty} \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{u} Z) = \frac{\rho_\infty D_\infty}{L_\infty^2} \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{D} \hat{\nabla} Z) \quad (4.9)$$

$$\frac{\rho_\infty u_\infty}{L_\infty} \frac{\partial \hat{\rho} Z}{\partial \hat{t}} + \frac{\rho_\infty u_\infty}{L_\infty} \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{u} Z) = \frac{\rho_\infty D_\infty}{L_\infty^2} \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{D} \hat{\nabla} Z) \quad (4.10)$$

$$\frac{L_\infty}{\rho_\infty u_\infty} \cdot \frac{\rho_\infty u_\infty}{L_\infty} \frac{\partial \hat{\rho} Z}{\partial \hat{t}} + \frac{L_\infty}{\rho_\infty u_\infty} \cdot \frac{\rho_\infty u_\infty}{L_\infty} \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{u} Z) = \frac{L_\infty}{\rho_\infty u_\infty} \cdot \frac{\rho_\infty D_\infty}{L_\infty^2} \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{D} \hat{\nabla} Z) \quad (4.11)$$

$$\frac{\partial \hat{\rho} Z}{\partial \hat{t}} + \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{u} Z) = \frac{D_\infty}{u_\infty L_\infty} \cdot \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{D} \hat{\nabla} Z) \quad (4.12)$$

$$\frac{\partial \hat{\rho} Z}{\partial \hat{t}} + \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{u} Z) = \frac{1}{\frac{u_\infty L_\infty}{D_\infty}} \cdot \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{D} \hat{\nabla} Z) \quad (4.13)$$

Δεδομένου ότι οι αδιάστατοι αριθμοί Reynolds και Schmidt ορίζονται ως:

$$\text{Re} = \frac{\rho_\infty u_\infty L_\infty}{\mu_\infty} \quad \text{και} \quad \text{Sc} = \frac{\mu_\infty}{\rho_\infty D_\infty} \quad \text{η σχέση (4.13) διαμορφώνεται στην:}$$

$$\frac{\partial \hat{\rho}Z}{\partial \hat{t}} + \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{\underline{u}}Z) = \frac{1}{\text{Re} Sc} \cdot \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{D} \hat{\nabla} Z) \quad (4.14)$$

Επομένως η τελική μορφή της εξίσωσης που προκύπτει στην αδιαστοποιημένη της μορφή είναι η παρακάτω στην οποία έχει παραληφθεί το σύμβολο $\hat{\cdot}$ για ευκολία στην ανάγνωση. Όλα τα μεγέθη που εμφανίζονται σε αυτή είναι αδιάστατα:

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial \hat{t}} + \nabla \cdot (\rho \underline{u}Z) = \frac{1}{\text{Re} Sc} \cdot \nabla \cdot (\rho D \nabla Z) \quad (4.15)$$

$$\rho \left[\frac{\partial Z}{\partial \hat{t}} + (\underline{u} \cdot \nabla) Z \right] = \frac{1}{\text{Re} Sc} \cdot \nabla \cdot (\rho D \nabla Z) \quad (4.16)$$

Στην επόμενη ενότητα 4.3 αναλύεται η επίλυση του 1^{ου} προβλήματος (πρόβλημα ανάμιξης) με τη μέθοδο της προσομοίωσης μεγάλων δινών, στο οποίο όπως αναφέρθηκε πρέπει να επιλυθεί η εξίσωση μεταφοράς του κλάσματος ανάμιξης με τον κώδικα των φασματικών πεπερασμένων στοιχείων, ώστε να προσδιοριστεί το πεδίο αυτού στο χώρο και στο χρόνο ($Z(x_i, t)$).

4.3 Favre Filtered μορφή της εξίσωσης του κλάσματος ανάμιξης – Πρόβλημα κλεισίματος - Διακριτοποίηση

Η εξίσωση μεταφοράς του κλάσματος ανάμιξης Z επιλύθηκε με τη μέθοδο προσομοίωσης μεγάλων δινών για όλες τις εκδοχές του μοντέλου Smagorinsky που μελετήθηκαν στο 3^ο κεφάλαιο. Με την εφαρμογή του φίλτρου στην εξίσωση (4.15) για ασυμπίεστη ροή και με την υπόθεση ότι η φιλτραρισμένη τιμή της παραγώγου μίας μεταβλητής f και η παράγωγος της φιλτραρισμένης τιμής δεν διαφέρουν

σημαντικά (the filter commutes), δηλαδή: $\left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial x} \right) = \frac{\partial (\tilde{f})}{\partial x}$, τότε καταλήγουμε στη

φιλτραρισμένη μορφή αυτής:

$$\overline{\frac{\partial \rho Z}{\partial \hat{t}} + \nabla \cdot (\rho \underline{u}Z)} = \overline{\rho \left[\frac{\partial Z}{\partial \hat{t}} + (\underline{u} \cdot \nabla) Z \right]} = \frac{1}{\text{Re} Sc} \overline{\nabla \cdot (\rho D \nabla Z)} \quad (4.17)$$

$$\frac{\partial \overline{\rho Z}}{\partial \hat{t}} + \nabla \cdot (\overline{\rho \underline{u}Z}) = \overline{\rho \left[\frac{\partial Z}{\partial \hat{t}} + (\underline{u} \cdot \nabla) Z \right]} = \frac{1}{\text{Re} Sc} \nabla \cdot (\overline{\rho D \nabla Z}) \quad (4.18)$$

$$\frac{\partial \overline{\rho} \tilde{Z}}{\partial \hat{t}} + \nabla \cdot (\overline{\rho} \tilde{\underline{u}}Z) = \frac{1}{\text{Re} Sc} \nabla \cdot (\overline{\rho} D \nabla \tilde{Z}) \quad (4.19)$$

$$\bar{\rho} \left[\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial t} + \overline{(\underline{u} \cdot \nabla) Z} \right] = \frac{1}{\text{Re} Sc} \nabla \cdot (\bar{\rho} D \nabla \tilde{Z}) \quad (4.20)$$

Στις εξισώσεις (4.19) και (4.20) ο όρος μεταφοράς (convective term, $\nabla \cdot (\bar{\rho} \underline{\tilde{u}} \tilde{Z})$ ή $(\bar{\rho} \cdot \overline{(\underline{u} \cdot \nabla) Z})$) είναι άγνωστος και δημιουργεί το πρόβλημα κλεισίματος (closure problem), που αναφέρθηκε στην ενότητα (1.3). Εάν προσθέσουμε και στα 2 μέλη της εξίσωσης (4.19) τον όρο $\nabla \cdot (\bar{\rho} \underline{\tilde{u}} \tilde{Z})$ προκύπτει ότι:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \underline{\tilde{u}} \tilde{Z}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \underline{\tilde{u}} \tilde{Z}) = \frac{1}{\text{Re} Sc} \nabla \cdot (\bar{\rho} D \nabla \tilde{Z}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \underline{\tilde{u}} \tilde{Z}) \quad (4.21)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \underline{\tilde{u}} \tilde{Z}) = \frac{1}{\text{Re} Sc} \nabla \cdot (\bar{\rho} D \nabla \tilde{Z}) - \nabla \cdot (\bar{\rho} (\underline{\tilde{u}} \tilde{Z} - \underline{\tilde{u}} \tilde{Z})) \quad (4.22)$$

Για το κλείσιμο του αγνώστου όρου $\bar{\rho} (\underline{\tilde{u}} \tilde{Z} - \underline{\tilde{u}} \tilde{Z})$ της εξίσωσης (4.22) χρησιμοποιήθηκε η υπόθεση της κλίσης διάχυσης (gradient diffusion hypothesis), με βάση την οποία ο άγνωστος όρος των υποπλεγματικών κλιμάκων (subgrid scale stresses - SGS) μοντελοποιείται μέσω ενός συντελεστή διάχυσης πολλαπλασιασμένο με την κλίση της αντίστοιχης μεταβλητής που επιλύεται, η οποία στη συγκεκριμένη περίπτωση είναι το κλάσμα ανάμιξης. Η τελική σχέση κλεισίματος για τον άγνωστο όρο είναι η ακόλουθη: $\bar{\rho} (\underline{\tilde{u}} \tilde{Z} - \underline{\tilde{u}} \tilde{Z}) = -\bar{\rho} D_i (\nabla \tilde{Z})$, όπου ο συντελεστής D_i αποτελεί το συντελεστή τυρβώδης διάχυσης του μοντέλου, σε αντίθεση με το συντελεστή D , ο οποίος όπως αναφέρθηκε αποτελεί τον αντίστοιχο μοριακό. Τόσο η παράμετρος D , όσο και η D_i , σχετίζονται με το μοριακό ιξώδες, το ιξώδες τύρβης και τον αριθμό Schmidt μέσω των σχέσεων:

$$D = \frac{\nu}{Sc} \quad (4.23)$$

$$D_i = \frac{\nu_t}{Sc_i} \quad (4.24)$$

όπου ν , ν_t , Sc και Sc_i είναι το μοριακό κινηματικό ιξώδες, το κινηματικό ιξώδες τύρβης, ο μοριακός αριθμός Schmidt και ο τυρβώδης αριθμός Schmidt αντίστοιχα. Με βάση την υπόθεση κλίσης διάχυσης η εξίσωση (4.22) διαμορφώνεται στην τελική της μορφή:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \underline{\tilde{u}} \tilde{Z}) = \frac{1}{\text{Re} Sc} \nabla \cdot (\bar{\rho} D \nabla \tilde{Z}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} D_i (\nabla \tilde{Z})) \quad (4.25)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{Z}) = \frac{1}{\text{Re} Sc} \nabla \cdot (\bar{\rho} (D + D_t) \nabla \tilde{Z}) \quad (4.26)$$

Η χωρική και χρονική διακριτοποίηση της εξίσωσης (4.26) με βάση τον υπάρχοντα κώδικα των φασματικών πεπερασμένων στοιχείων είναι ίδια με αυτή που παρουσιάστηκε στην ενότητα 2.6 και στην παρούσα διδακτορική διατριβή επεκτάθηκε ώστε να παραλάβει το πρόβλημα κλεισίματος των εξισώσεων. Μαθηματικά περιγράφεται από τη σχέση:

$$\frac{1}{\Delta t} \left(\sum_{q=0}^J \alpha_q \tilde{Z}^{n+1-q} \right) = - \left(\sum_{q=0}^J \beta_q \tilde{u}^{n-q} \right) \cdot \nabla \tilde{Z}^{n+1} + \frac{(D + D_t)}{\text{Re Pr}} \nabla^2 \tilde{Z}^{n+1} \quad (4.27)$$

Όπου Δt το χρονικό βήμα της μεθόδου, α_q και β_q οι συντελεστές του explicit και implicit μέρους του J βαθμού του σχήματος που χρησιμοποιείται [Orszag - 1986, Karniadakis - 1991].

Το ολικό σύστημα των εξισώσεων αποτελείται από την εξίσωση επίλυσης του ροϊκού πεδίου και από την εξίσωση μεταφοράς του κλάσματος ανάμιξης. Για την επίλυση του ροϊκού πεδίου χρησιμοποιήθηκαν οι εξισώσεις που αναπτύχθηκαν στο κεφάλαιο 2. Επομένως το τελικό διακριτοποιημένο σύστημα εξισώσεων που προκύπτει στην περίπτωση ασυμπίεστης ροής είναι:

$$\frac{1}{\Delta t} \sum_{q=0}^J \alpha_q \tilde{u}^{n+1-q} = - \sum_{q=0}^{J-1} \beta_q \left[(\tilde{u} \cdot \nabla \tilde{u}) + \frac{2\nu_{\text{exp}}}{\text{Re}} \nabla \tilde{\underline{\underline{S}}}_\parallel \right]^{n-q} - \frac{1}{\bar{\rho}} \nabla \bar{p}_2^{n+1} + \frac{\nu_{\text{impl}}}{\text{Re}} \nabla \tilde{\underline{\underline{S}}}_\parallel^{n+1} \quad (4.28)$$

$$Q^{n+1} = 0 \quad (4.29)$$

$$\frac{1}{\Delta t} \left(\sum_{q=0}^J \alpha_q \tilde{Z}^{n+1-q} \right) = - \left(\sum_{q=0}^J \beta_q \tilde{u}^{n-q} \right) \cdot \nabla \tilde{Z}^{n+1} + \frac{(D + D_t)}{\text{Re Pr}} \nabla^2 \tilde{Z}^{n+1} \quad (4.30)$$

4.4 Αποτελέσματα προσομοίωσης

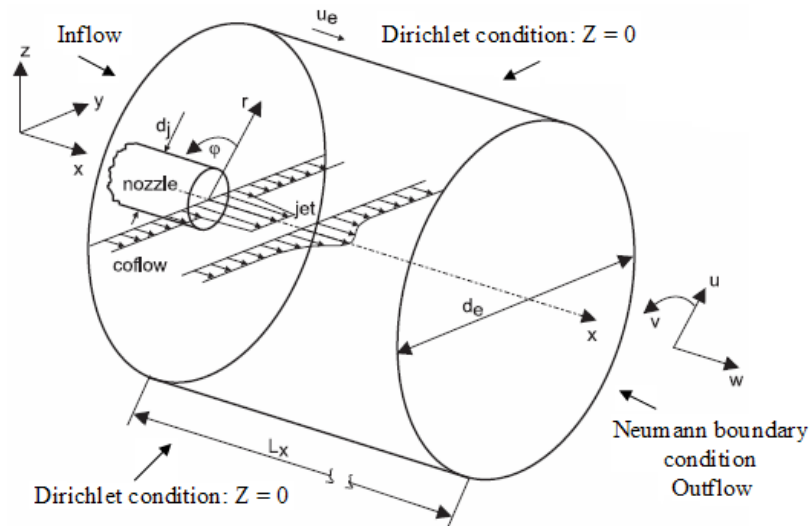
Το υπολογιστικό πλέγμα που χρησιμοποιήθηκε στις προσομοιώσεις είναι το ίδιο με αυτό που χρησιμοποιήθηκε και στο 3^ο κεφάλαιο για την υπολογιστική προσομοίωση του ροϊκού πεδίου της ισόθερμης δέσμης. Η μόνη διαφορά έγκειται στην εισαγωγή μίας επιπλέον διαφορικής εξίσωσης, αυτής της μεταφοράς του κλάσματος ανάμιξης Z (σχέση 4.30).

Το πλέγμα αποτελείται 1144 πεπερασμένα στοιχεία, ενώ ο βαθμός χωρικής διακριτοποίησης των πολυωνύμων παρεμβολής Legendre που χρησιμοποιήθηκε στη

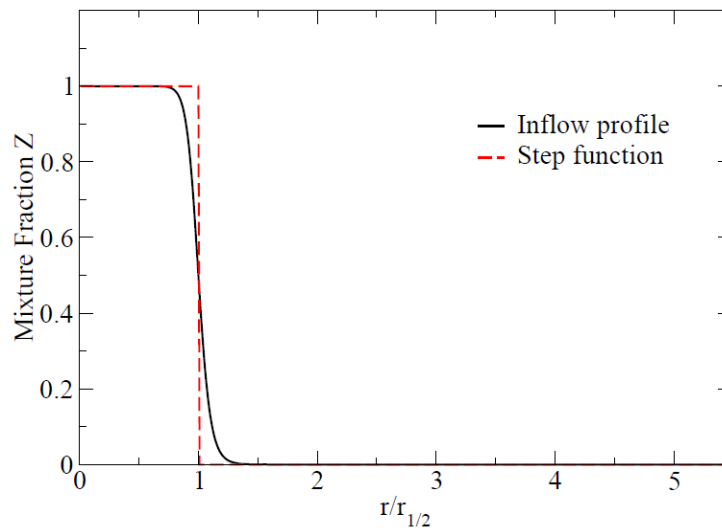
διάρκεια των προσομοιώσεων ανέρχεται σε 8 (9 σημεία). Το χρονικό βήμα που χρησιμοποιήθηκε είναι ίσο με $dt=0.001$. Οι προσομοιώσεις αφορούσαν στην πρόβλεψη του ροϊκού πεδίου και του πεδίου του κλάσματος ανάμιξης με τη μέθοδο προσομοίωσης μεγάλων δινών και τη χρησιμοποίηση του μοντέλου Smagorinsky (κλασσικό και δυναμικό). Παρόλο που η συμπεριφορά του κλασσικού μοντέλου Smagorinsky με συντελεστή $C_s=0.1$, ήταν η καλύτερη, όσο αφορά στη σύγκριση των τελικών αποτελεσμάτων με τα αντίστοιχα της άμεσης προσομοίωσης, χρησιμοποιήθηκαν όλα τα μοντέλα με σκοπό τη διερεύνηση της επίδρασης αυτών στην πρόβλεψη του πεδίου του κλάσματος ανάμιξης.

Με βάση τη βιβλιογραφία ο μοριακός αριθμός Schmidt επιλέχθηκε ίσος με 0.7 [Pitsch - 2000a], ενώ ο τυρβώδης ίσος με 0.4 [Pitsch - 2000a]. Το μοριακό κινηματικό ιξώδες ν , είναι αυτό που χρησιμοποιήθηκε και για την περίπτωση της προσομοίωσης του ροϊκού πεδίου της δέσμης (η αδιάστατη τιμή του ίση με 0.0005), ενώ το ιξώδες της τύρβης ν_t , είναι αυτό που προκύπτει και υπολογίζεται κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης και σχετίζεται κάθε φορά με το χρησιμοποιούμενο μοντέλο (μοντέλο Smagorinsky με σταθερό συντελεστή C_s ή μοντέλο Smagorinsky με δυναμικό υπολογισμό του συντελεστή C_d). Ο συντελεστής τυρβώδους διάχυσης D_t μπορεί να υπολογιστεί δυναμικά [Moïn - 1991]. Ωστόσο λόγω του γεγονότος ότι ο σκοπός της συγκεκριμένης προσομοίωσης αφορά σε μία αρχική ποιοτική εκτίμηση του πεδίου του κλάσματος ανάμιξης και επιπλέον ότι ο δυναμικός χαρακτήρας του μοντέλου υπεισέρχεται μέσω του δυναμικού υπολογισμού του τυρβώδους ιξώδους ν_t , επιλέχθηκε η σταθερή τιμή 0.4 για τον αριθμό Sc_t . Εν συνεχεία ο μοριακός και τυρβώδης συντελεστής διάχυσης του κλάσματος ανάμιξης υπολογίζεται μέσω των σχέσεων (4.23) και (4.24).

Όσο αφορά στις οριακές συνθήκες, για το ροϊκό πεδίο χρησιμοποιήθηκαν οι οριακές συνθήκες που αναφέρθηκαν στην ενότητα 3.3, ενώ για το κλάσμα ανάμιξης χρησιμοποιήθηκαν οριακές συνθήκες Neumann στην έξοδο της γεωμετρίας και συνθήκες Dirichlet τόσο στην είσοδο όσο και στην εξωτερική πλευρά αυτής ($Z=0$). Η τιμή του κλάσματος ανάμιξης στο εξωτερικό περίβλημα της δέσμης τέθηκε ίση με το 0 (σχήμα 4.3), ενώ για το προφίλ στην είσοδο της γεωμετρίας χρησιμοποιήθηκε η υπερβολική συνάρτηση \tanh για την ομαλοποίηση της μεταβολής μεταξύ των τιμών 0 και 1 και την αποφυγή απότομων μεταβολών (σχήμα 4.3).

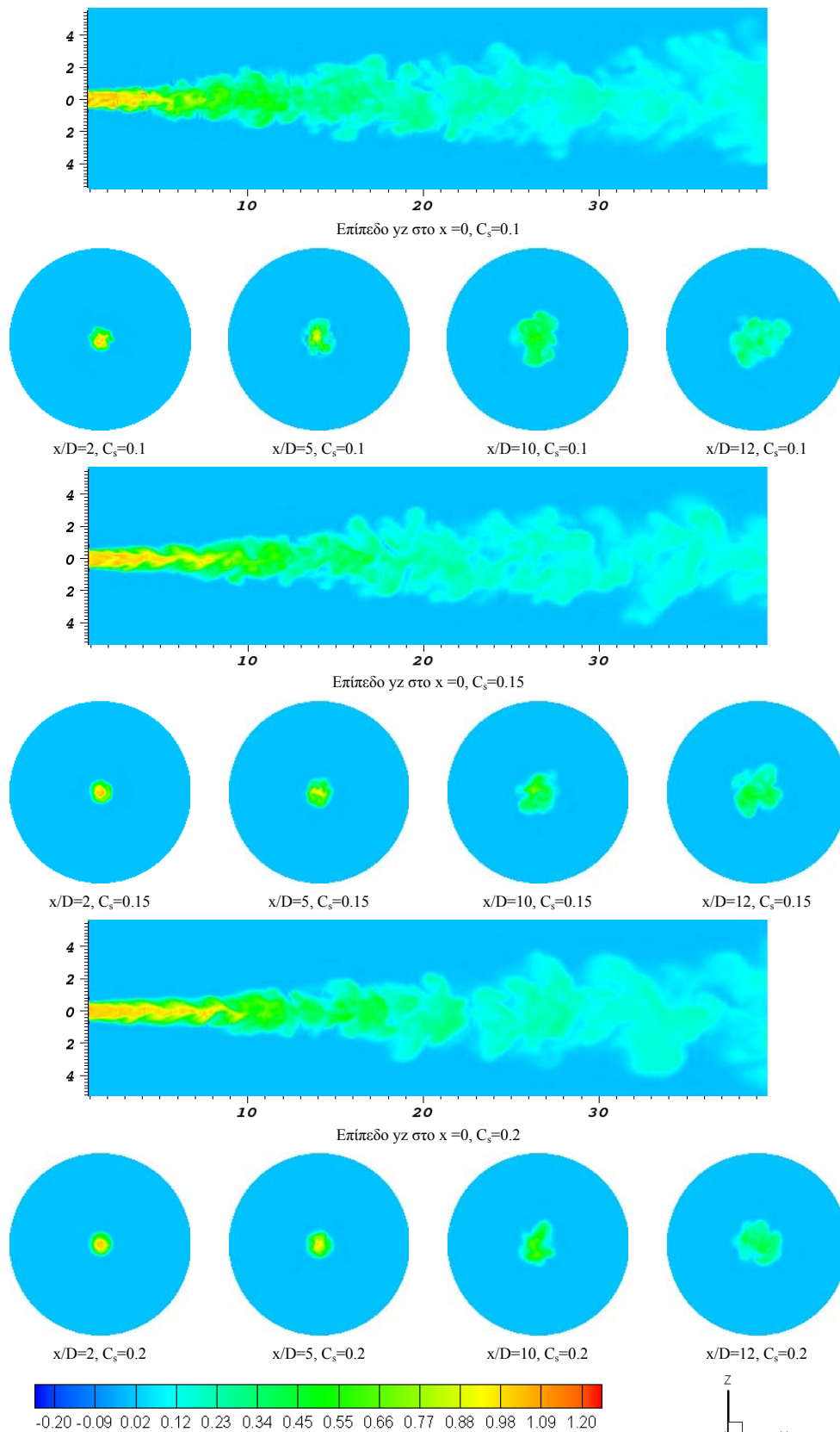


Σχήμα 4.2: Διάταξη της γεωμετρίας της δέσμης και οριακές συνθήκες του κλάσματος ανάμιξης Z.

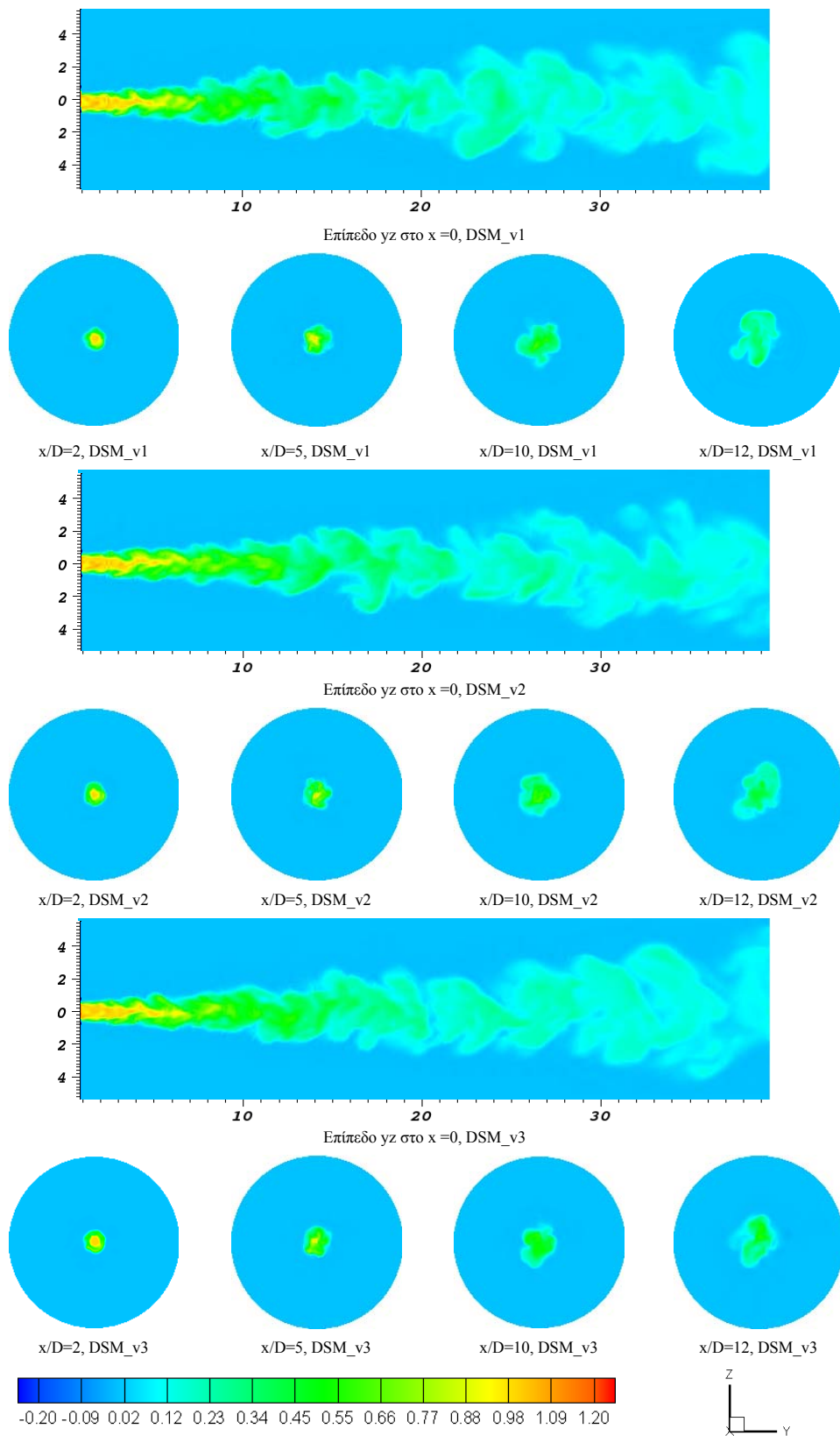


Σχήμα 4.3: Προφίλ του κλάσματος ανάμιξης Z στην είσοδο της δέσμης.

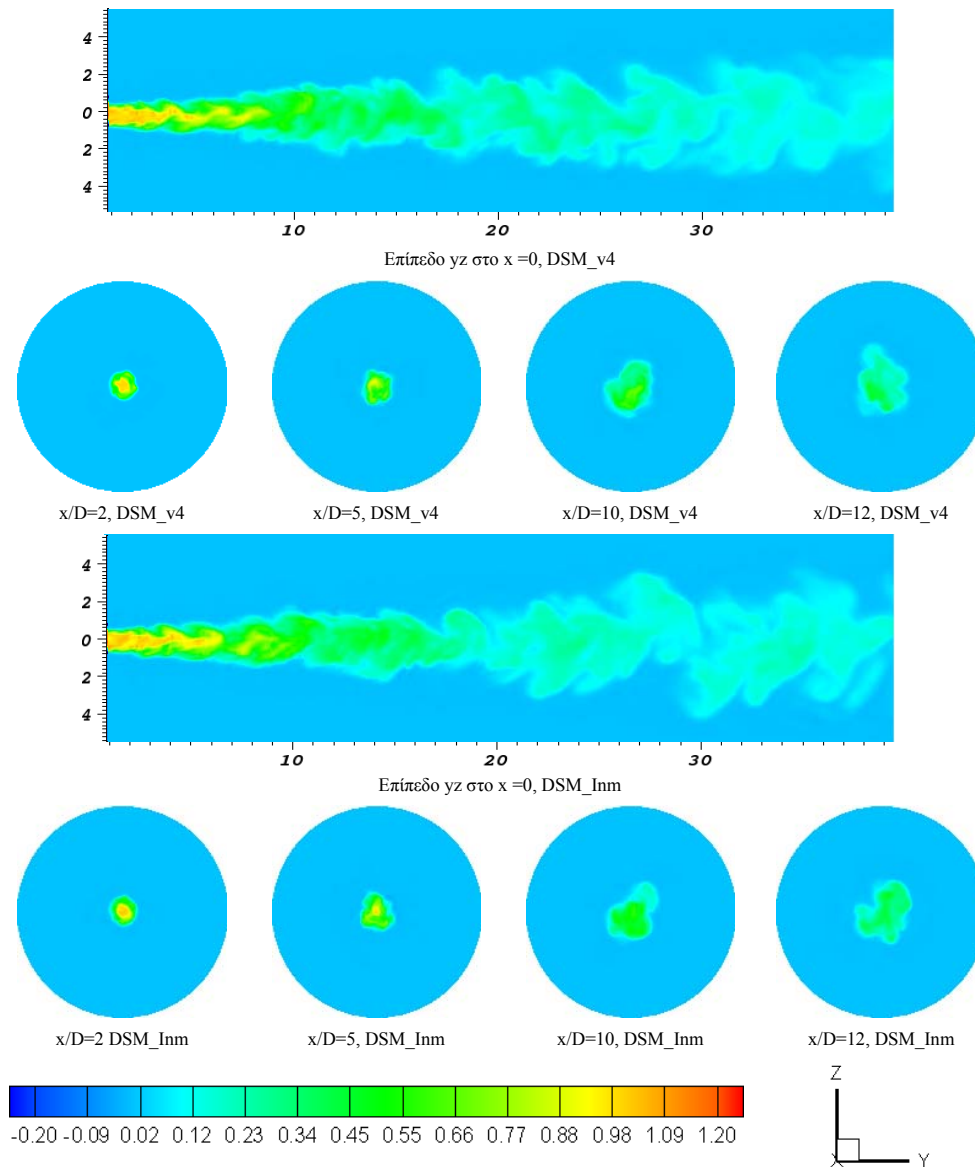
Στα σχήματα 4.4, 4.5 και 4.6 απεικονίζεται η στιγμιαία (μετά από πάροδο 40 αδιάστατων χρονικών μονάδων) κατανομή του κλάσματος ανάμιξης στο επίπεδο yz στη θέση $x=0$, σε 4 τομές κατάντη του άξονα της δέσμης ($x/D=2, 5, 10, 12$) για όλες τις περιπτώσεις του μοντέλου Smagorinsky, κλασσικό στο οποίο ο συντελεστής C_s παίρνει τις τιμές 0.1, 0.15 και 0.2 και δυναμικό (5 διαφορετικά φίλτρα).



Σχήμα 4.4: Στιγμαία κατανομή του κλάσματος ανάμιξης Z στο επίπεδο yz στην θέση $x=0$ και για 4 τομές κατάντη του άξονα της δέσμης ($x/D=2, 5, 10, 12$) για όλες τις περιπτώσεις του κλασσικού μοντέλου Smagorinsky ($C_s = 0.1, 0.15$ και 0.2).



Σχήμα 4.5: Στιγμαία κατανομή του κλάσματος ανάμιξης Z στο επίπεδο yz στην θέση $x=0$ και για 4 τομές κατάντη του άξονα της δέσμης ($x/D=2, 5, 10, 12$) για 3 διαφορετικές περιπτώσεις του μοντέλου Smagorinsky (DSM_v1, DSM_v2 και DSM_v3).



Σχήμα 4.6: Στιγμαία κατανομή του κλάσματος ανάμιξης Z στο επίπεδο yz στην θέση $x=0$ και για 4 τομές κατόντη του άξονα της δέσμης ($x/D=2, 5, 10, 12$) για 2 διαφορετικές περιπτώσεις του μοντέλου Smagorinsky (DSM_v4 και DSM_Inm).

Όπως προκύπτει από την παρατήρηση των σχημάτων 4.4, 4.5 και 4.6 σε ορισμένες περιοχές (κιτρινοκόκκινα τμήματα) οι τιμές του κλάσματος μάζας ξεπερνάνε την τιμή 1. Επιπρόσθετα σε άλλες περιοχές μέσα στο υπολογιστικό πλέγμα παρατηρούνται τιμές του κλάσματος ανάμιξης οι οποίες είναι μικρότερες του 0 (σκούρο μπλε στις ισουψείς των σχημάτων 4.4, 4.5 και 4.6).

Όπως είναι γνωστό από τη θεωρία οι τιμές του κλάσματος μάζας είναι φραγμένες στο 0 (περιοχή οξειδωτικού) και στο 1 (περιοχή καυσίμου) ($0 < Z < 1$). Τιμές μικρότερες του μηδενός ή μεγαλύτερες της μονάδος αποτελούν αφύσικη συμπεριφορά και οφείλονται κυρίως σε αριθμητικά σφάλματα λόγω της μη μονοτονικής συμπεριφοράς

των μεθόδων υψηλής τάξης (όπως τα φασματικά πεπερασμένα στοιχεία), σε περιοχές με απότομες μεταβολές στα φυσικά μεγέθη όπως το κλάσμα ανάμιξης Z . Συνάγεται λοιπόν το συμπέρασμα ότι η διακύμανση που παρουσιάζει το κλάσμα ανάμιξης Z , με τιμές μεγαλύτερες του 1 και μικρότερες του 0 πρέπει να οφείλεται κυρίως σε αριθμητικά σφάλματα της υπολογιστικής διεργασίας, καθόσον η μέγιστη και ελάχιστη δυνατή φυσική τιμή που μπορεί αυτό να πάρει είναι 1 και 0 αντίστοιχα.

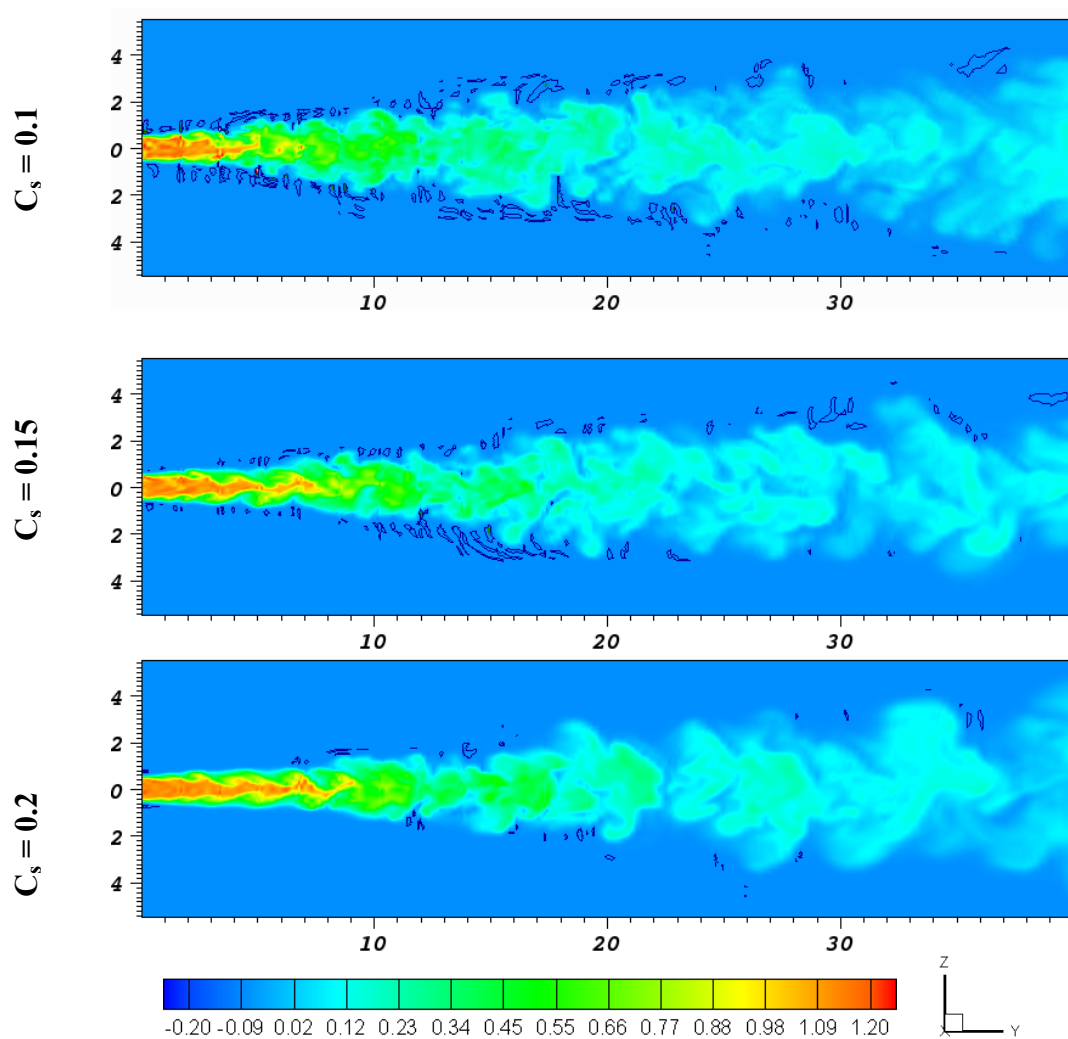
Η συγκεκριμένη μέθοδος υπολογιστικής διακριτοποίησης που χρησιμοποιήθηκε κατά τη διάρκεια των προσομοιώσεων, σχετίζεται με τα φασματικά πεπερασμένα στοιχεία και κρίνεται ιδιαίτερα ικανοποιητική όσο αφορά στο σφάλμα αριθμητικής διάχυσης, με αποτέλεσμα να μην υπάρχουν σημαντικά περιθώρια βελτίωσης σε αυτό τον τομέα. Από την άλλη πλευρά αποκοπή των τιμών μεγαλύτερων της μονάδος ή μικρότερων του μηδενός κρίνεται ακατάλληλη από τη βιβλιογραφία και δεν δίνει σωστά αποτελέσματα, καθώς αυτή επηρεάζει τη φυσική διεργασία μεταφοράς και διάχυσης του κλάσματος μάζας, δεδομένου ότι η αποκοπή τιμών και η επιβολή της ισότητας αυτών σε κάποια δεδομένη τιμή, επιδρά αρνητικά και αφύσικα στη γενική εξίσωση μεταφοράς του.

Στον πίνακα 4.1 παρουσιάζεται η μέγιστη και η ελάχιστη τιμή του κλάσματος ανάμιξης που παρατηρείται σε ολόκληρη τη γεωμετρία μία τυχαία χρονική στιγμή (μετά την πάροδο 40 χρονικών μονάδων). Το μοντέλο που έδειξε την καλύτερη συμφωνία με τα αποτελέσματα της άμεσης προσομοίωσης στην επίλυση του ροϊκού, πεδίου όπως αποδείχθηκε στο 3^ο κεφάλαιο, είναι το μοντέλο Smagorinsky με σταθερό συντελεστή $C_s = 0.1$, το οποίο παρουσιάζει όμως αρκετά μεγάλη τιμή όσο αφορά στην πρόβλεψη του κλάσματος ανάμιξης Z ($Z=1.355$).

Πίνακας 4.1: Μέγιστη και η ελάχιστη τιμή του κλάσματος ανάμιξης σε ολόκληρη τη γεωμετρία

<i>Μοντέλο</i>	<i>Μέγιστη τιμή του κλάσματος ανάμιξης Z</i>	<i>Ελάχιστη τιμή του κλάσματος ανάμιξης Z</i>
<i>CSM_</i> $C_s = 0.1$	1.355	-0.315
<i>CSM_</i> $C_s = 0.15$	1.325	-0.345
<i>CSM_</i> $C_s = 0.2$	1.208	-0.275
<i>DSM_</i> $v1$	1.175	-0.458
<i>DSM_</i> $v2$	1.205	-0.107
<i>DSM_</i> $v3$	1.223	-0.163
<i>DSM_</i> $v4$	1.198	-0.245
<i>DSM_</i> Inm	1.162	-0.125

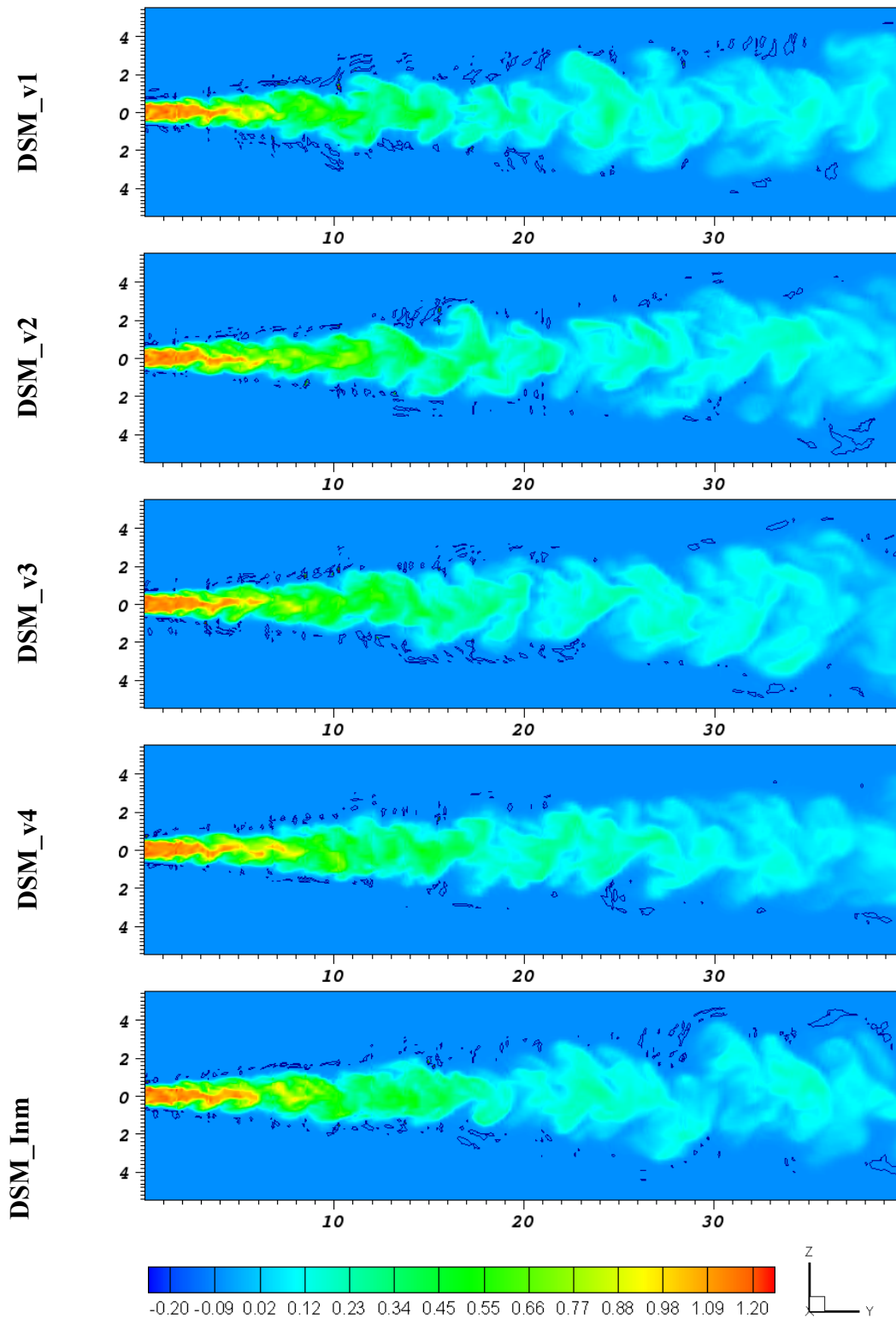
Ο λόγος που εξηγεί το φαινόμενο είναι ο μικρότερος χαρακτήρας σκέδασης του συγκεκριμένου μοντέλου σε σχέση με το μοντέλο μεγαλύτερο συντελεστή C_s . Όπως παρατηρείται και από τα σχήματα 4.4, 4.5 και 4.6 οι τιμές του κλάσματος ανάμιξης είναι μεγαλύτερες στην περίπτωση του μοντέλου Smagorinsky με σταθερό συντελεστή $C_s = 0.1$ από τις αντίστοιχες του μοντέλου με $C_s = 0.15$ ή 0.2 . Τα δυναμικά μοντέλα παρουσιάζουν σε γενικές γραμμές ίδιες τιμές όσο αφορά στις μέγιστες τιμές του κλάσματος ανάμιξης Z , με αποκλίσεις οι οποίες οφείλονται στην μονοδιάστατη συνάρτηση μεταφοράς του φίλτρου, με βάση την οποία αποκόπτεται μικρότερο ή μεγαλύτερο μέρος της ενέργειας του φάσματος, η οποία μοντελοποιείται.



Σχήμα 4.7: Στιγμαία κατανομή του κλάσματος ανάμιξης Z στο επίπεδο yz στην θέση $x=0$ και θέσεις των αρνητικών τιμών με εύρος -0.2 έως 0 , για τις περιπτώσεις του μοντέλου Smagorinsky με $C_s = 0.1, 0.15, 0.2$

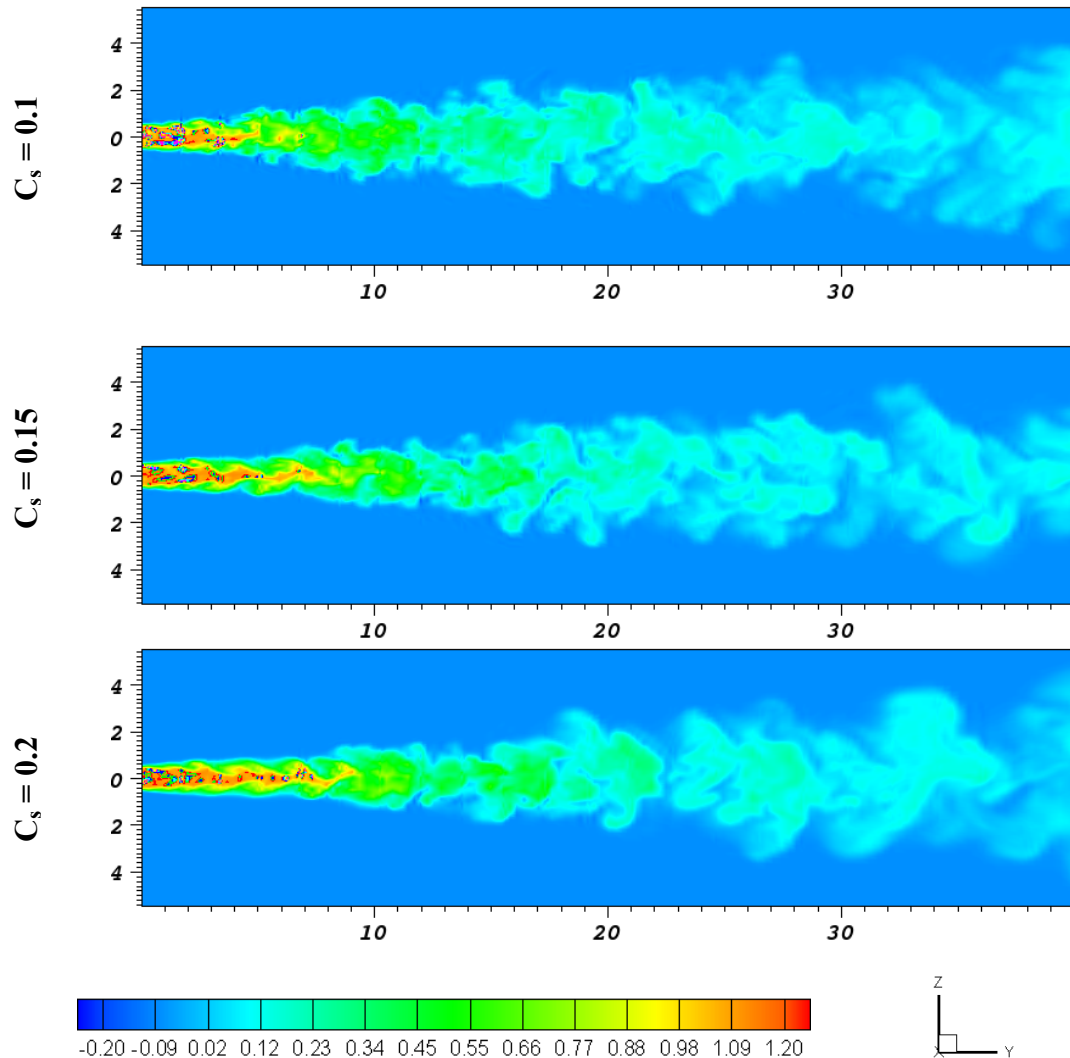
Για την καλύτερη κατανόηση των διακυμάνσεων του κλάσματος ανάμιξης βρέθηκε η θέση στην οποία εμφανίζονται αυτές και παρακολούθηθηκε η πορεία και εξέλιξη

αυτών στο χρόνο. Στα σχήματα 4.7 και 4.8 απεικονίζονται οι θέσεις όπου η μεταβλητή Z λαμβάνει τιμές με εύρος -0.2 έως 0 (μπλε ισοϋψείς).



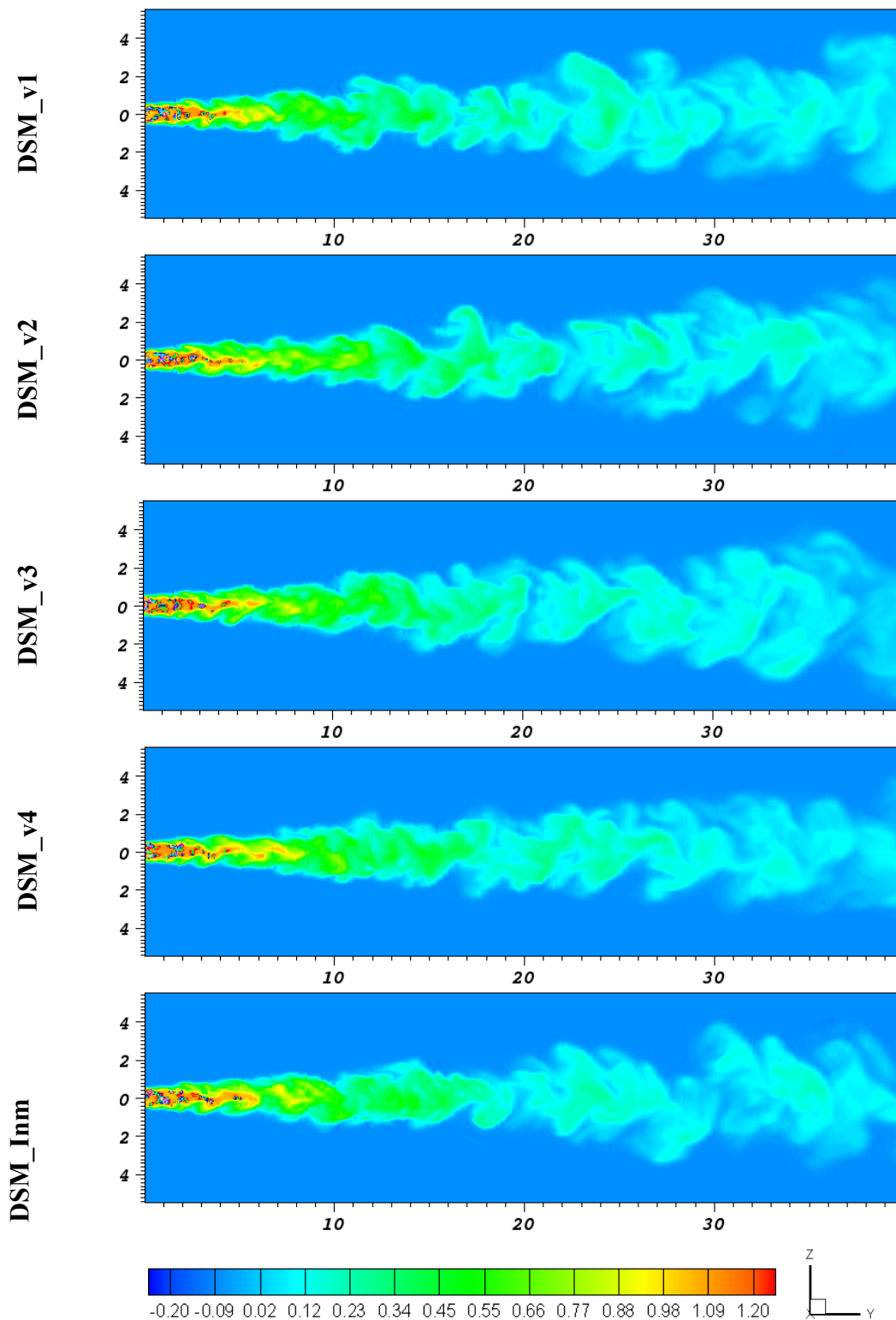
Σχήμα 4.8: Στιγμαία κατανομή του κλάσματος ανάμιξης Z στο επίπεδο yz στην θέση $x=0$ και θέσεις των αρνητικών τιμών με εύρος -0.2 έως 0 , για τις περιπτώσεις του δυναμικού μοντέλου Smagorinsky DSM_v1, DSM_v2, DSM_v3, DSM_v4 και DSM_Inm.

Στα σχήματα 4.9 και 4.10 οι αντίστοιχες, στις οποίες η μεταβλητή Z έχει τιμές με εύρος 1 έως 1.2 (πολύχρωμα στίγματα) για όλες τις περιπτώσεις του μοντέλου Smagorinsky.



Σχήμα 4.9: Στιγμαία κατανομή του κλάσματος ανάμιξης Z στο επίπεδο yz στην θέση $x=0$ και θέσεις όπου η μεταβλητή Z έχει τιμές με εύρος 1 έως 1.2, για τις περιπτώσεις του μοντέλου Smagorinsky με $C_s = 0.1, 0.15, 0.2$.

Η συγκεκριμένη χρονική στιγμή στην οποία έγιναν τα γραφήματα αφορά στις 50 αδιάστατες χρονικές μονάδες. Όπως φαίνεται και από τα γραφήματα οι αρνητικές τιμές εμφανίζονται στην περιοχή υψηλών διατμητικών τάσεων, εκεί όπου το ρευστό που εισέρχεται από το ακροφύσιο της δέσμης με αδιάστατη ταχύτητα 1.25 συναντά το όμορο ρευστό που κινείται με αδιάστατη ταχύτητα 0.25, με αποτέλεσμα τη δημιουργία διατμητικού στρώματος στη ροή.

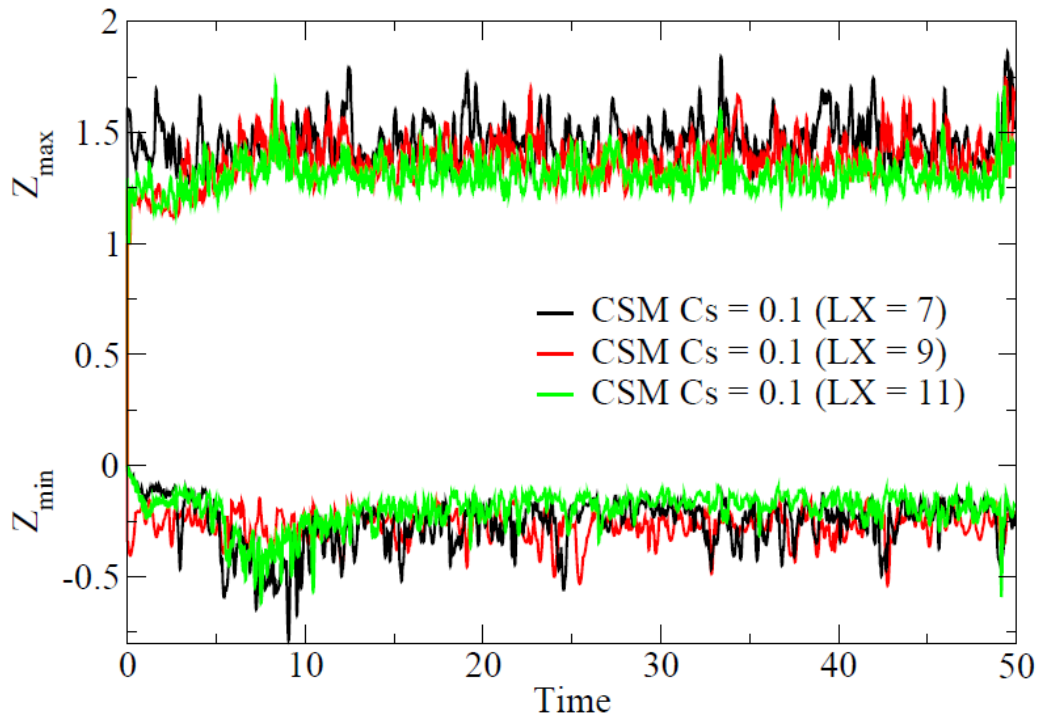


Σχήμα 4.10: Στιγμαία κατανομή του κλάσματος ανάμιξης Z στο επίπεδο yz στην θέση $x=0$ και θέσεις όπου η μεταβλητή Z έχει τιμές με εύρος 1 έως 1.2, για τις περιπτώσεις του δυναμικού μοντέλου Smagorinsky DSM_v1, DSM_v2, DSM_v3, DSM_v4 και DSM_Inm.

Αντίστοιχα οι μεγάλες θετικές τιμές μεγαλύτερες της μονάδας, συναντώνται κοντά στην είσοδο της δέσμης σε κατάντη αποστάσεις με εύρος από $x/D = 2$ έως και $x/D =$

10. Η περιοχή αυτή ουσιαστικά αποτελεί τη μεταβατική περιοχή στην οποία ο διαχωρισμός μεταξύ των κλιμάκων είναι ιδιαίτερα έντονος, λόγω του γεγονότος της ύπαρξης του μηχανισμού της τύρβης. Η διαπίστωση του αυξημένου χαρακτήρα σκέδασης του μοντέλου Smagorinsky με $C_s = 0.2$ είναι εμφανής και σε αυτά τα γραφήματα, δεδομένου του πλήθους των περιοχών στις οποίες εμφανίζονται ανεπιθύμητες τιμές (<0 και >1).

Στο διάγραμμα του σχήματος 4.11 απεικονίζεται η χρονική διακύμανση του κλάσματος ανάμιξης Z για τις 50 πρώτες χρονικές μονάδες υπολογιστικής προσομοίωσης με τη χρήση του μοντέλου Smagorinsky και τρεις διαφορετικούς βαθμούς πολωνύμων παρεμβολής ($N = 6$ με $LX = 7$ κόμβους, $N = 8$ με $LX = 9$ κόμβους, $N = 10$ με $LX = 11$ κόμβους).



Σχήμα 4.11: Χρονική μεταβολή του κλάσματος ανάμιξης Z (μέγιστη και ελάχιστη τιμή) του μοντέλου Smagorinsky με $C_s = 0.1$ για τις 50 πρώτες χρονικές αδιάστατες μονάδες της υπολογιστικής προσομοίωσης.

Όσο αυξάνεται ο βαθμός των πολωνύμων παρεμβολής (από 6 σε 10) παρατηρείται μία μικρή μείωση της διακύμανσης της μεταβλητής. Επιπλέον αύξηση του βαθμού των πολωνύμων παρεμβολής δεν επιδιώχθηκε λόγω της αύξησης του χρόνου της υπολογιστικής προσομοίωσης. Επιπρόσθετα όσο αφορά στην επίλυση του ροϊκού πεδίου αύξηση του πολωνυμικού βαθμού παρεμβολής δεν θα είχε καμία επίδραση,

καθόσον όπως αποδείχθηκε και στην ενότητα 3.9 η ανεξαρτησία της λύσης από το πλέγμα υπαγορεύει ανώτατη τιμή πολυωνύμων παρεμβολής 8^{ου} βαθμού. Αύξηση του τελευταίου οδηγεί στη χρησιμοποίηση της μεθόδου άμεσης προσομοίωσης, χωρίς την ύπαρξη κάποιου μοντέλου και όχι χρήση της μεθόδου των μεγάλων δινών, με συνεπαγόμενο κόστος την απουσία όλων των πλεονεκτημάτων της τελευταίας.

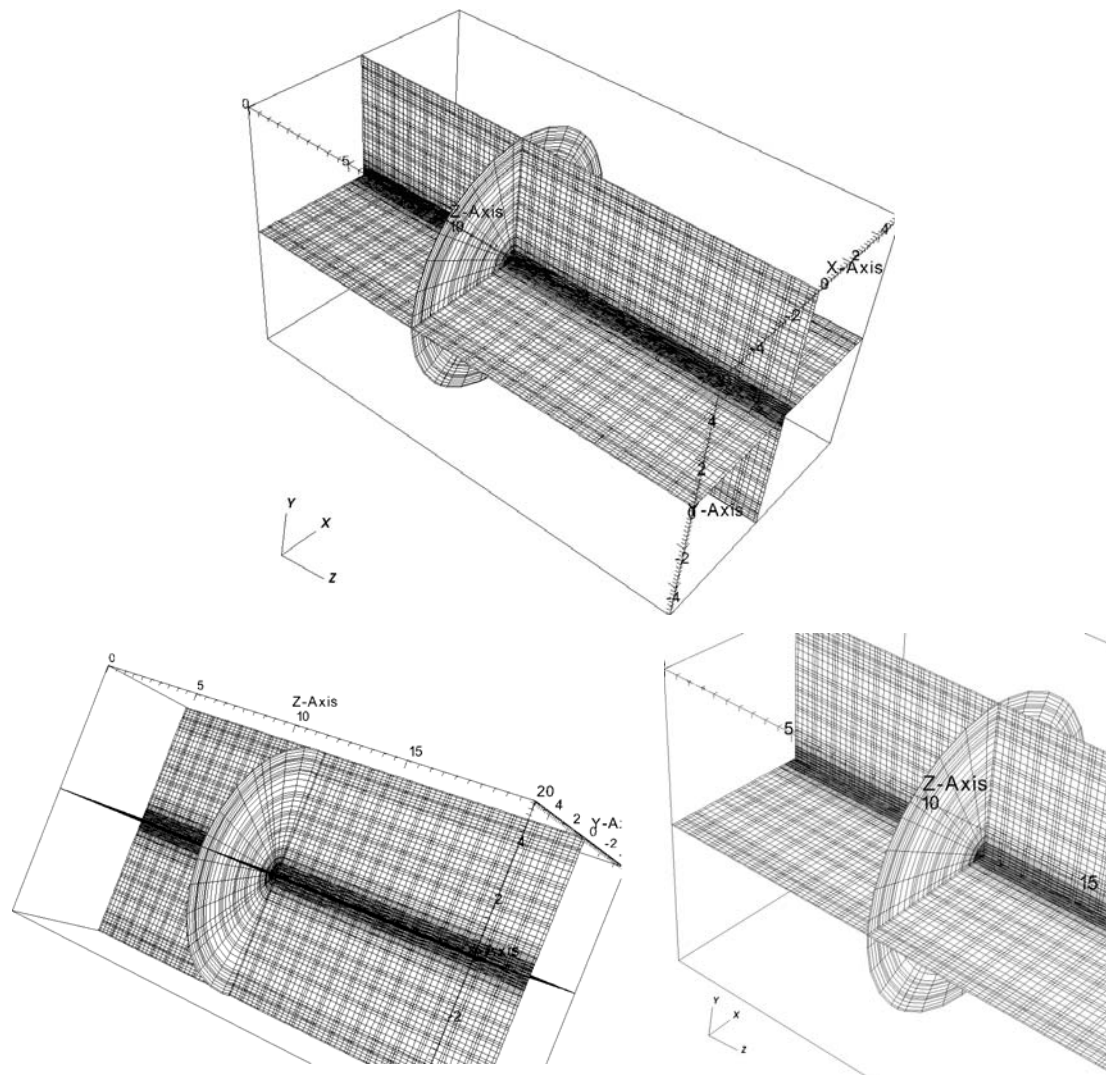
Παράλληλα με τα παραπάνω για να διαπιστωθεί εάν η γενεσιουργός αιτία της ανεπιθύμητης διακύμανσης του κλάσματος ανάμιξης Z είναι προϊόν του μηχανισμού της τύρβης, ο οποίος αυξάνει το διαχωρισμό των κλιμάκων και όλων των κλίσεων των μεγεθών που σχετίζονται με τη μεταφορά ενέργειας, διερευνήθηκε η επίδραση της γεννήτριας τύρβης στην είσοδο της γεωμετρίας. Όπως περιγράφηκε και στην ενότητα 3.1 στο προφίλ εισόδου της ταχύτητας προστίθενται διακυμάνσεις, οι οποίες εισάγονται με τη βοήθεια μίας γεννήτριας τύρβης τεχνητά (inflow generator) [Klein - 2003].

Για την επικύρωση της διαπίστωσης προέλευσης του κλάσματος ανάμιξης Z , χρησιμοποιήθηκε ένα αρχικό πεδίο και η προσομοίωση επαναλήφθηκε για 150 χρονικές μονάδες, χωρίς την προσθήκη διακυμάνσεων στο προφίλ της ταχύτητας εισόδου. Παρατηρήθηκε ότι η ροή, λόγω της μη προσθήκης των διακυμάνσεων μετά από 150 χρονικές μονάδες έγινε στρωτή, ενώ παράλληλα οι αποκλίσεις του κλάσματος ανάμιξης από το 0 και το 1 ήταν της τάξεως του $O(10^{-3})$. Συμπερασματικά λοιπόν θα μπορούσαμε να πούμε ότι η γενεσιουργός αιτία για την αφύσικη συμπεριφορά του κλάσματος ανάμιξης Z , είναι η τύρβη, γεγονός το οποίο ενισχύεται ακόμη περισσότερο από τη χρησιμοποίηση των φασματικών πεπερασμένων στοιχείων, μέθοδος η οποία αποτελεί μία από τις μεθόδους διακριτοποίησης με πάρα πολύ μικρό αριθμητικό σφάλμα.

4.5 Εναλλακτική μέθοδος προσομοίωσης μεγάλων δινών – Νέο πλέγμα

Για να διερευνηθεί περαιτέρω η διακύμανση του κλάσματος ανάμιξης Z , κατασκευάστηκε ένα διαφορετικό πλέγμα αποτελούμενο από 2024 πεπερασμένα στοιχεία (σχήμα 4.12) και χρησιμοποιήθηκαν τέσσερις διαφορετικοί βαθμοί των πολυωνύμων παρεμβολής (5, 7, 9 και 11). Η πύκνωση αφορούσε στις περιοχές υψηλών διατμητικών τάσεων καθώς επίσης και σε αυτές της εμφάνισης τιμών

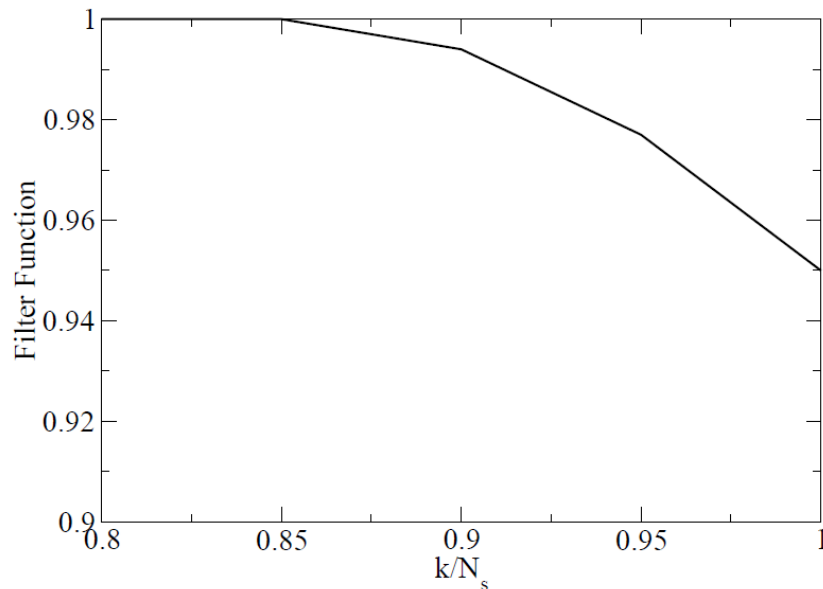
κλάσματος ανάμιξης, μεγαλύτερων του 1 και μικρότερων του 0. Οι διαστάσεις της γεωμετρίας διατηρήθηκαν σταθερές, εκτός από το μήκος της δέσμης το οποίο μειώθηκε σε $L = 20d_j$ για λόγους υπολογιστικού κόστους και ταχύτητας, καθόσον η κύρια περιοχή ενδιαφέροντος και διερεύνησης είναι η μεταβατική περιοχή ($5 < x/D < 15$), ενώ παράλληλα οι οριακές συνθήκες είναι όμοιες με αυτές που αναφέρθηκαν στην ενότητα 4.4 (σχήμα 4.2).



Σχήμα 4.12: Νέο υπολογιστικό πλέγμα αποτελούμενο από 2024 πεπερασμένα στοιχεία με τη χρήση πολυωνύμων παραβολής 5^{ου} βαθμού και λεπτομέρειες αυτού.

Επιπλέον με τα παραπάνω για τη βελτίωση της συμπεριφοράς του κλάσματος ανάμιξης χρησιμοποιήθηκε μία εναλλακτική μέθοδος προσομοίωσης μεγάλων δινών, που είναι ενσωματωμένη στον κώδικα και ήδη πιστοποιημένη [Fischer - 2001]. Η συγκεκριμένη μέθοδος φιλτραρίσματος χρησιμοποιεί μία μονοδιάστατη συνάρτηση

μεταφοράς, η οποία δρα σαν ένα φίλτρο χαμηλών συχνοτήτων σε κάθε πεδίο για να εξαλείψει τις υψηλές πολυωνυμικές συχνότητες. Η συνάρτηση μεταφοράς του πυρήνα του φίλτρου στον πολυωνυμικό χώρο παρουσιάζεται στο διάγραμμα του σχήματος 4.13.

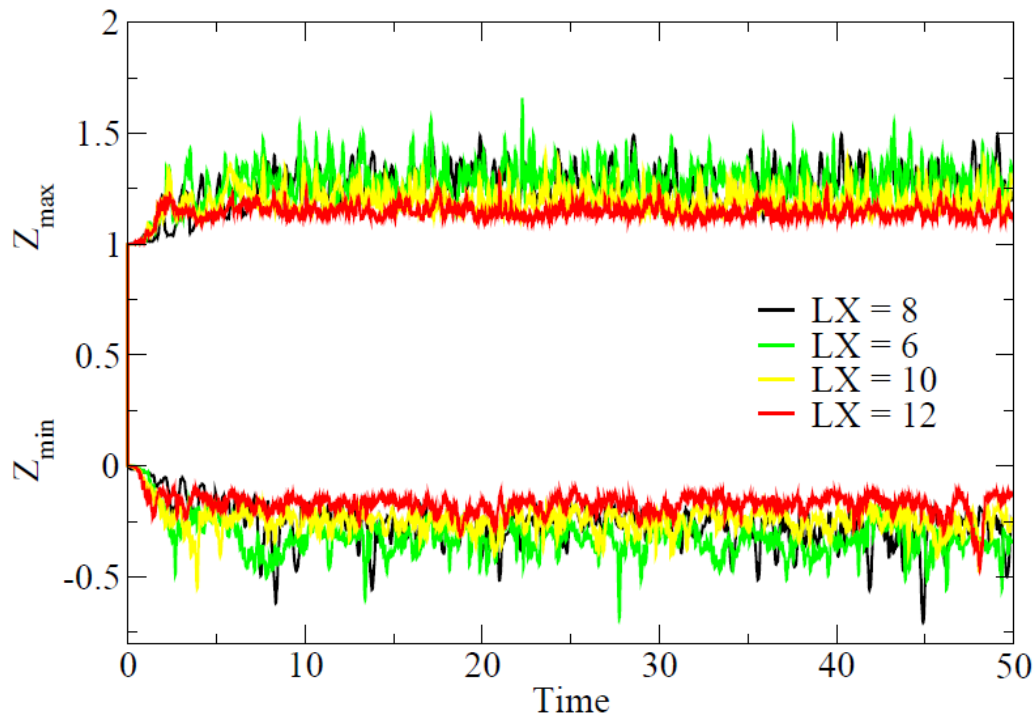


Σχήμα 4.13: Μονοδιάστατη συνάρτηση του πυρήνα του φίλτρου για την εναλλακτική μέθοδο προσομοίωσης μεγάλων δινών.

Η συγκεκριμένη συνάρτηση μεταφοράς φιλτράρει μόνο κατά 5% τον τελευταίο όρο του αναπτύγματος της πολυωνυμικής σειράς προσέγγισης της λύσης. Ωστόσο λόγω του γεγονότος ότι η εφαρμογή του συγκεκριμένου φίλτρου γίνεται σε κάθε χρονικό βήμα της υπολογιστικής διεργασίας, με την πάροδο του χρόνου αποκόπτονται όλες οι μικρές κλίμακες, οι οποίες αποτελούν τις υψηλές συχνότητες, με αποτέλεσμα το τελικό ροϊκό πεδίο να είναι απαλλαγμένο από αυτές και η δομή του να είναι αρκετά ομαλή. Λόγω του τρόπου εφαρμογής του συγκεκριμένου φίλτρου στη διάρκεια του χρόνου, δεν είναι απαραίτητη η χρησιμοποίηση μοντέλου καθόσον δεν εμφανίζεται ο όρος υποπλεγματικών κενών στο τελικό σύστημα των εξισώσεων. Θα μπορούσαμε να πούμε ότι η συγκεκριμένη μέθοδος φιλτραρίσματος αποτελεί το κάτω όριο της μεθόδου άμεσης προσομοίωσης.

Κατά τη διάρκεια των προσομοιώσεων παρατηρήθηκε η συμπεριφορά του κλάσματος μάζας, με βάση τη μέγιστη και ελάχιστη τιμή που αυτό λαμβάνει σε ολόκληρο το υπολογιστικό πλέγμα. Στο σχήμα 4.14 παρουσιάζεται η μέγιστη και ελάχιστη τιμή

του κλάσματος ανάμιξης για τις 50 πρώτες υπολογιστικές χρονικές μονάδες, για 4 διαφορετικές τιμές του βαθμού πολυωνυμικής προσέγγισης (5, 7, 9 και 11).

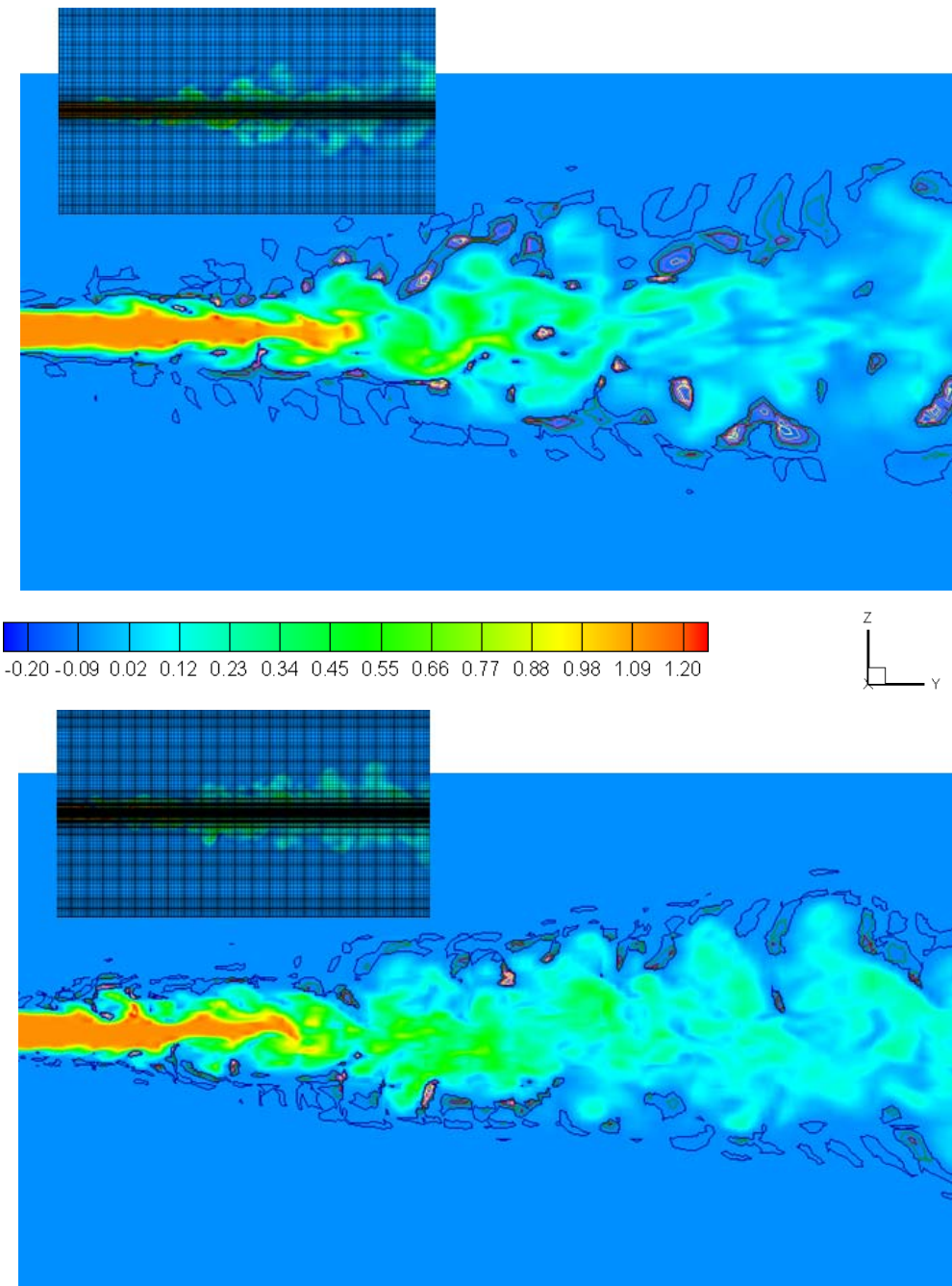


Σχήμα 4.14: Μέγιστη και ελάχιστη τιμή του κλάσματος ανάμιξης σε ολόκληρο το υπολογιστικό πλέγμα για τις 50 πρώτες υπολογιστικές χρονικές μονάδες και για 4 διαφορετικές τιμές του βαθμού πολυωνυμικής προσέγγισης (5^ο βαθμού → LX=6 σημεία, 7^ο βαθμού → LX=8 σημεία, 9^ο βαθμού → LX=10 σημεία 9 και 11^ο βαθμού → LX=12 σημεία).

Η συμπεριφορά που παρουσιάζει το κλάσμα ανάμιξης είναι όμοια με αυτή που παρατηρήθηκε με το υπολογιστικό πλέγμα των 1144 πεπερασμένων στοιχείων με τιμές μεγαλύτερες της μονάδος και μικρότερες του μηδενός, μόνο που στην περίπτωση χρησιμοποίησης των 2024 φασματικών πεπερασμένων κελιών η διακύμανση του είναι πολύ μικρότερη, λόγω της ύπαρξης περισσότερων στοιχείων και πυκνότερης διακριτοποίησης. Επιπρόσθετα αύξηση του πολυωνυμικού βαθμού των πολυωνύμων παρεμβολής μειώνει ακόμη περισσότερο την απόκλιση του κλάσματος ανάμιξης Z από τη θεωρητική μέγιστη και ελάχιστη τιμή του 1 και 0 αντίστοιχα.

Στα σχήματα 4.15 και 4.16 απεικονίζονται οι θέσεις των αρνητικών τιμών με εύρος από -0.2 έως 0 για την περίπτωση των πολυωνυμικών βαθμών 5, 7, 9 και 11 αντίστοιχα, στο επίπεδο xy στη θέση $z = 0$. Η συγκεκριμένη χρονική στιγμή αφορά στις 50 αδιάστατες χρονικές μονάδες μετά την έναρξη της υπολογιστικής

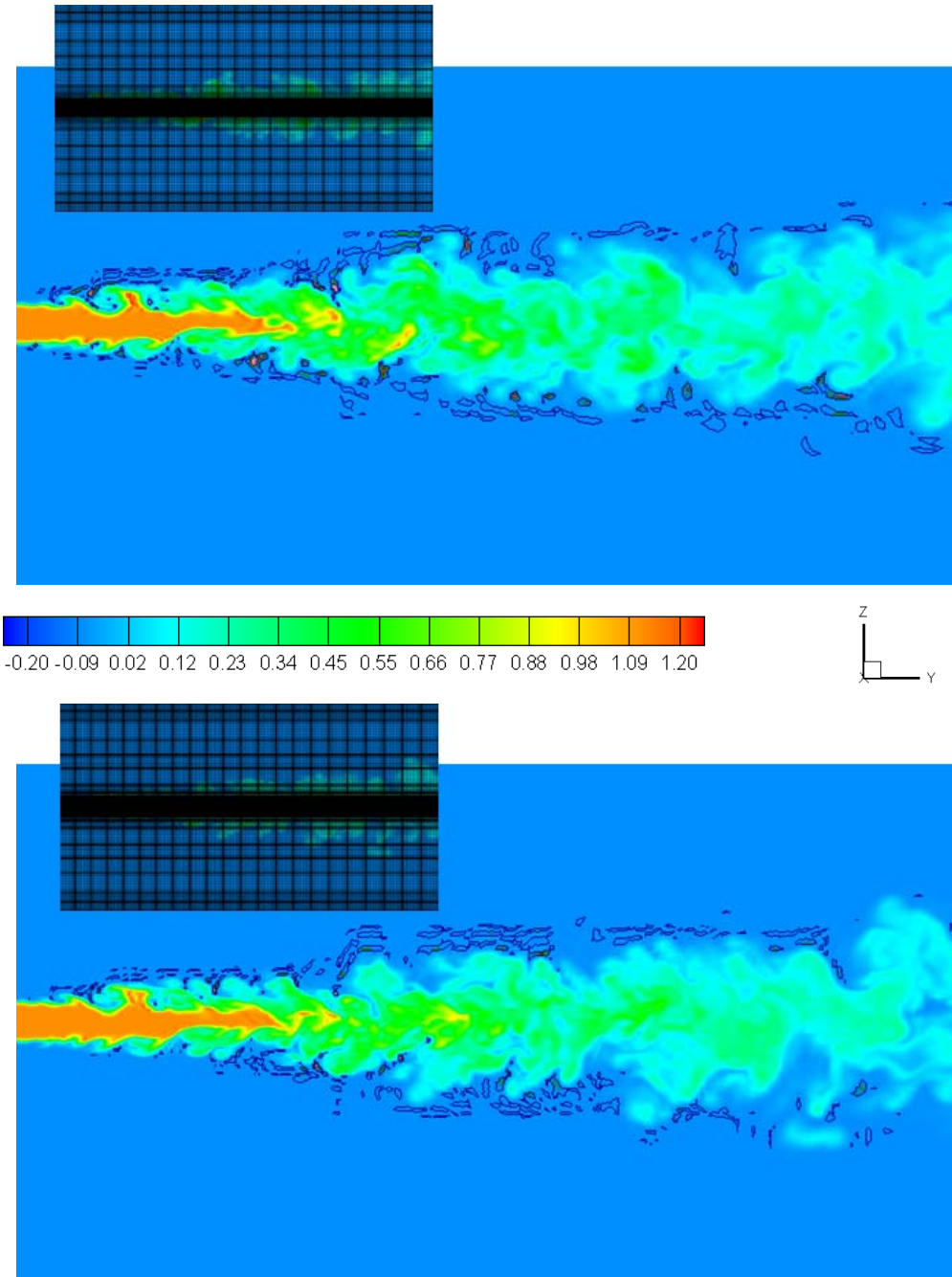
διαδικασίας. Στο πάνω αριστερό μέρος όλων των σχημάτων απεικονίζεται η ίδια τομή στην οποία έχει σχεδιαστεί επιπλέον το υπολογιστικό πλέγμα. Είναι εμφανής η πύκνωση του τελευταίου στην περιοχή κύριας ανάπτυξης της δέσμης.



Σχήμα 4.15: Θέσεις εμφάνισης αρνητικών τιμών του κλάσματος ανάμιξης Z , με εύρος από -0.2 έως 0 στο επίπεδο xy και στη θέση $z=0$ για 2 διαφορετικούς βαθμούς των πολωνύμων παρεμβολής ($5^{\text{ου}}$ βαθμού \rightarrow επάνω σχήμα, $7^{\text{ου}}$ βαθμού \rightarrow κάτω σχήμα).

Οι θέσεις αρνητικών τιμών (μπλε ισοϋψείς γραμμές) εμφανίζονται σε περιοχές υψηλής διάτμησης εκεί όπου το ρευστό που εισέρχεται από τη δέσμη συναντά το

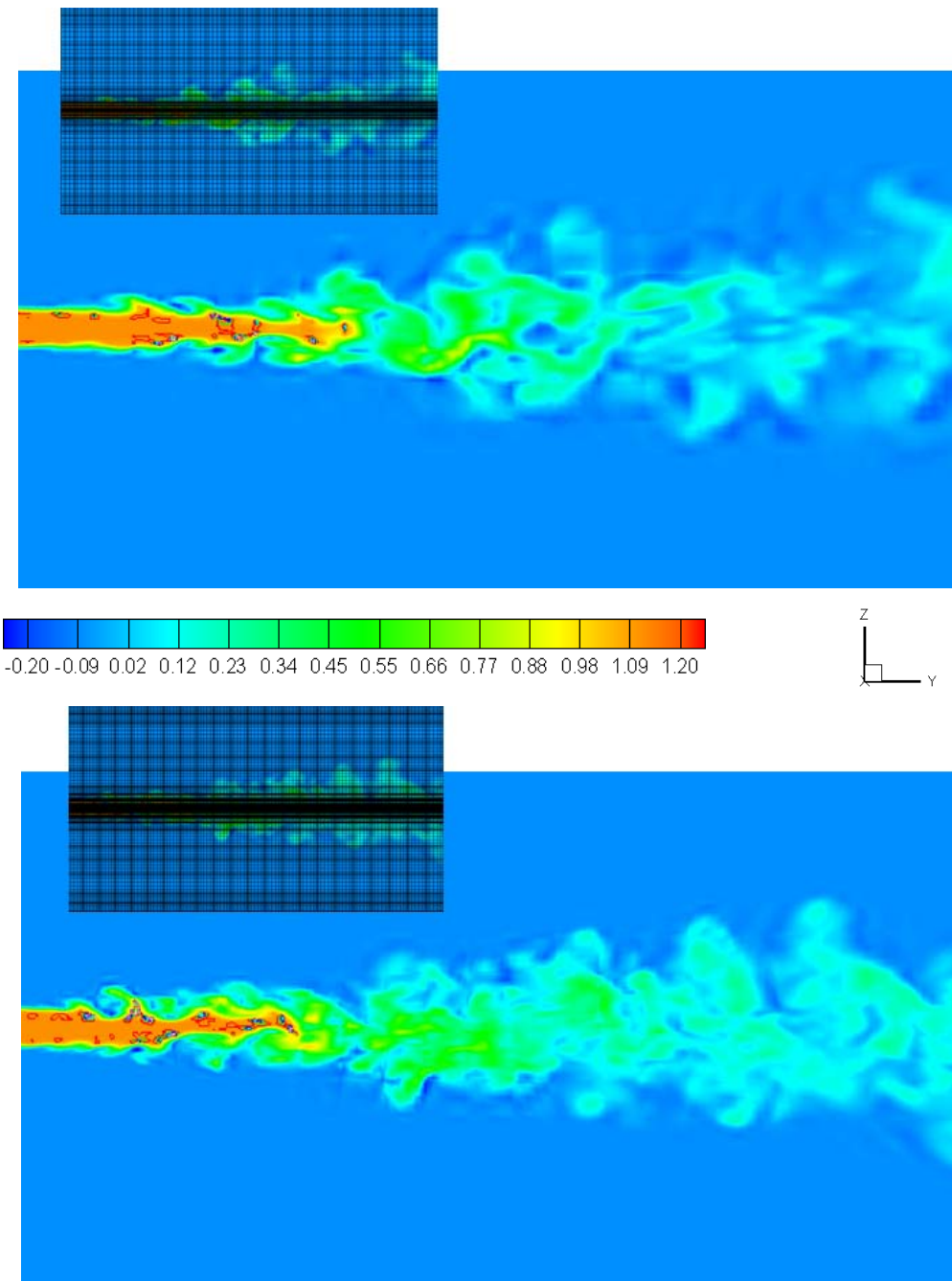
όμορο ρευστό. Με αύξηση του πολωνυμικού βαθμού από 5 σε 7, 9 και τέλος σε 11 (σχήμα 4.15 και 4.16) παρατηρείται μία χαρακτηριστική μείωση των σημείων εμφάνισης των αρνητικών τιμών.



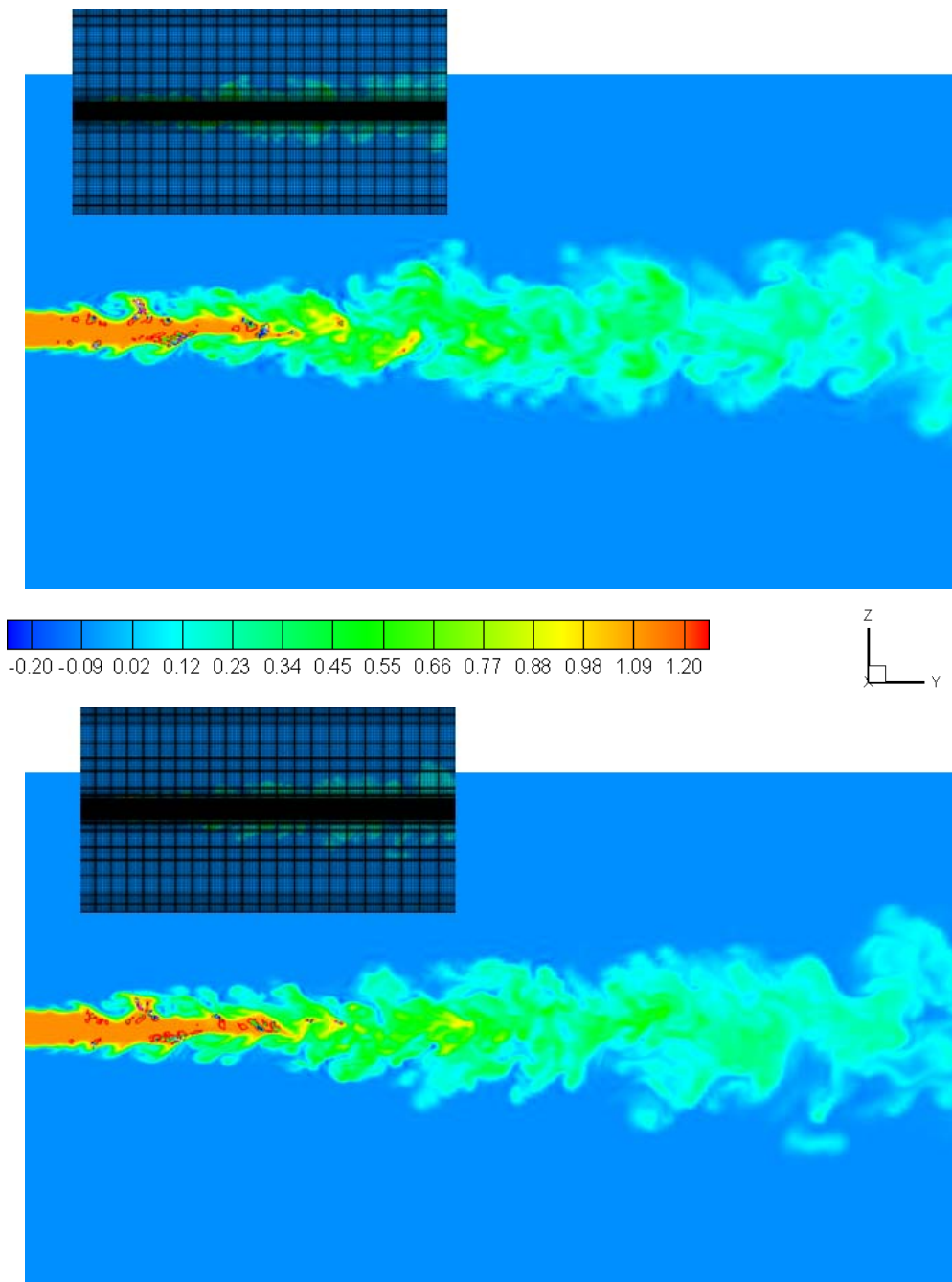
Σχήμα 4.16: Θέσεις εμφάνισης αρνητικών τιμών του κλάσματος ανάμιξης Z , με εύρος από -0.2 έως 0 στο επίπεδο xy και στη θέση $z=0$ για 2 διαφορετικούς βαθμούς των πολωνύμων παρεμβολής ($9^{\text{ου}}$ βαθμού \rightarrow επάνω σχήμα, $11^{\text{ου}}$ βαθμού \rightarrow κάτω σχήμα).

Παρόμοια είναι και η συμπεριφορά του κλάσματος ανάμιξης Z όσο αφορά στις τιμές που είναι μεγαλύτερες από τη μονάδα με εύρος 1 έως 1.2 (σχήμα 4.17 και 4.18). Το

πλήθος αυτών μειώνεται με ταυτόχρονη αύξηση της διακριτοποίησης, ενώ στην περίπτωση του 9^{ου} και 11^{ου} βαθμού πολυωνύμων παρεμβολής (σχήμα 4.18) το πλήθος των θέσεων παραμένει σταθερό.



Σχήμα 4.17: Θέσεις εμφάνισης θετικών τιμών του κλάσματος ανάμιξης Z , με εύρος από 1 έως 1.2 στο επίπεδο xy και στη θέση $z=0$ για 2 διαφορετικούς βαθμούς των πολυωνύμων παρεμβολής (5^{ου} βαθμού \rightarrow επάνω σχήμα, 7^{ου} βαθμού \rightarrow κάτω σχήμα).



Σχήμα 4.18: Θέσεις εμφάνισης θετικών τιμών του κλάσματος ανάμιξης Z , με εύρος από 1 έως 1.2 στο επίπεδο xy και στη θέση $z=0$ για 2 διαφορετικούς βαθμούς των πολυωνύμων παρεμβολής (9^ο βαθμού → επάνω σχήμα , 11^ο βαθμού → κάτω σχήμα).

4.6 Συμπεράσματα

Όπως αναφέρθηκε στην ενότητα 4.2 η εισαγωγή του κλάσματος ανάμιξης στην περίπτωση επίλυσης των τυρβωδών φλογών διάχυσης (εύρεση $T(x_i, t)$ και $Y_i(x_i, t)$) μπορεί να διαχωριστεί σε 2 προβλήματα (σχήμα 4.1):

1^ο) Ένα πρόβλημα ανάμιξης, στο οποίο πρέπει να επιλυθεί η εξίσωση μεταφοράς του κλάματος ανάμιξης έτσι ώστε να προσδιοριστεί το πεδίο του κλάματος ανάμιξης στο χώρο και στο χρόνο ($Z(x_i, t)$).

2^ο) Ένα πρόβλημα καθορισμού της δομής της φλόγας, όπου η επίλυση των εξισώσεων των φλογιδίων (εύρεση του $T(Z, t)$ και $Y_i(Z, t)$), σε συνδυασμό με το κλάσμα ανάμιξης Z να οδηγήσει στην τελική λύση του συνολικού προβλήματος (εύρεση του $T(x_i, t)$ και $Y_i(x_i, t)$).

Στο παρόν κεφάλαιο μελετήθηκε η δυνατότητα επίλυσης του 1^{ου} προβλήματος με τον υπάρχοντα κώδικα. Κατόπιν αδιαστατοποίησης της εξίσωσης του κλάματος ανάμιξης Z , της χρησιμοποίησης κατάλληλου μοντέλου για την επίλυση του προβλήματος κλεισίματος αυτής μελετήθηκε η συμπεριφορά του σε σχέση με τις τιμές που λαμβάνει. Διαπιστώθηκε ότι με τη χρησιμοποίηση της μεθόδου προσομοίωσης μεγάλων δινών όλα τα μοντέλα, τόσο το μοντέλο Smagorinsky με σταθερό συντελεστή C_s , όσο και αυτό με δυναμικό υπολογισμό του συντελεστή C_d υπερεκτιμούσαν και / ή υποεκτιμούσαν τις τιμές του κλάματος ανάμιξης, προβλέποντας για αυτό τιμές μεγαλύτερες της μονάδος και μικρότερες του μηδενός. Το μοντέλο Smagorinsky με σταθερό συντελεστή $C_s = 0.2$ παρουσίασε καλύτερη συμπεριφορά όσο αφορά στην πρόβλεψη των μέγιστων και ελάχιστων τιμών του κλάματος ανάμιξης, δίνοντας τη μικρότερη απόκλιση από της αντίστοιχες θεωρητικές 1 και 0. Αντίστοιχα το μοντέλο Smagorinsky με $C_s = 0.1$ που έδωσε τα καλύτερα αποτελέσματα στην επίλυση του ροϊκού πεδίου παρουσίασε μεγαλύτερες αποκλίσεις από το 0 και το 1, γεγονός το οποίο οφείλεται στο μικρότερο χαρακτήρα σκέδασης του συγκεκριμένου μοντέλου. Τα δυναμικά μοντέλα που χρησιμοποιήθηκαν παρουσίασαν όμοια συμπεριφορά, ενώ οι αποκλίσεις από τη μέγιστη και ελάχιστη θεωρητική τιμή του κλάματος ανάμιξης Z παρουσίασαν το ίδιο εύρος τιμών, το οποίο εξαρτάται από το μέγεθος της ενέργειας που αποκόπτει η χρησιμοποιούμενη κάθε φορά συνάρτηση πυρήνα του φίλτρου.

Για την εκτενέστερη μελέτη της συμπεριφοράς και των διακυμάνσεων του κλάματος ανάμιξης χρησιμοποιήθηκαν δύο επιπλέον διαφορετικές τιμές του βαθμού των πολυωνύμων παρεμβολής, 6 και 10. Στην περίπτωση χρησιμοποίησης του μικρότερου πολυωνυμικού βαθμού (6) οι αποκλίσεις και οι περιοχές εμφάνισης τιμών μικρότερων του μηδενός και μεγαλύτερων της μονάδος ήταν περισσότερες σε σχέση με τις

αντίστοιχες που προκύπτουν από τη χρησιμοποίηση του μεγαλύτερου πολυωνυμικού βαθμού (10).

Παράλληλα με τα παραπάνω για να διαπιστωθεί εάν η γενεσιουργός αιτία της ανεπιθύμητης διακύμανσης του κλάσματος ανάμιξης Z είναι προϊόν του μηχανισμού της τύρβης, ο οποίος αυξάνει το διαχωρισμό των κλιμάκων και όλων των κλίσεων των μεγεθών που σχετίζονται με τη μεταφορά ενέργειας, διερευνήθηκε η επίδραση της γεννήτριας τύρβης στην είσοδο της γεωμετρίας. Για την επικύρωση της διαπίστωσης προέλευσης των διακυμάνσεων του κλάσματος ανάμιξης Z , χρησιμοποιήθηκε ένα αρχικό πεδίο και η προσομοίωση επαναλήφθηκε για 150 χρονικές μονάδες, χωρίς την προσθήκη διακυμάνσεων στο προφίλ της ταχύτητας εισόδου. Παρατηρήθηκε ότι η ροή, λόγω της μη προσθήκης των διακυμάνσεων μετά από 150 χρονικές μονάδες έγινε στρωτή, ενώ παράλληλα οι αποκλίσεις του κλάσματος ανάμιξης από το 0 και το 1 ήταν της τάξεως του $O(10^{-3})$. Συμπερασματικά λοιπόν θα μπορούσαμε να πούμε ότι η γενεσιουργός αιτία για την αφύσικες τιμές του κλάσματος ανάμιξης είναι η τύρβη, γεγονός το οποίο ενισχύεται ακόμη περισσότερο από τη χρησιμοποίηση των φασματικών πεπερασμένων στοιχείων, μέθοδος η οποία αποτελεί μία από τις μεθόδους διακριτοποίησης με πάρα πολύ μικρό αριθμητικό σφάλμα.

Επιπλέον προσπάθειες μείωσης των μεγάλων θετικών και αρνητικών τιμών του κλάσματος ανάμιξης Z έγιναν με τη χρησιμοποίηση μιας διαφορετικής διαδικασίας φιλτραρίσματος, η οποία χρησιμοποιεί μία μονοδιάστατη συνάρτηση μεταφοράς, που δρα σαν ένα φίλτρο χαμηλών συχνοτήτων σε κάθε πεδίο, για να εξαλείψει τις υψηλές πολυωνυμικές συχνότητες. Παράλληλα κατασκευάστηκε και χρησιμοποιήθηκε ένα νέο πλέγμα το οποίο αποτελούνταν από 2024 φασματικά πεπερασμένα στοιχεία με 4 διαφορετικούς βαθμούς πολυωνύμων παρεμβολής (5, 7, 9 και 11) και με μικρότερο μήκος $L = 20d_j$, για λόγους υπολογιστικού χρόνου και ισχύος.

Η χρησιμοποίηση της εναλλακτικής μεθόδου προσομοίωσης μεγάλων δινών, καθώς επίσης και της πύκνωσης του πλέγματος σε σημεία υψηλών διατμητικών τάσεων και κλίσεων ταχύτητας, εάν και προκάλεσε μείωση της εμφάνισης σημείων στα οποία παρουσιάζονται τιμές του κλάσματος ανάμιξης αρνητικές ή μεγαλύτερες της μονάδος, δεν βελτίωσε πολύ τα αποτελέσματα. Υψηλές τιμές του κλάσματος ανάμιξης παρέμειναν στην μεταβατική κυρίως περιοχή της δέσμης, στην οποία ο μηχανισμός της τύρβης - ο οποίος αυξάνει το διαχωρισμό των κλιμάκων και όλων των κλίσεων των μεγεθών που σχετίζονται με τη μεταφορά ενέργειας - είναι ιδιαίτερα

ενεργός και όπως αποδείχθηκε αποτελεί τη γενεσιουργό αιτία της ανεπιθύμητης διακύμανσης του κλάσματος ανάμιξης Z .

Κεφάλαιο 5^ο

Μοντέλο σταθερών φλογιδίων - Υπολογιστική προσομοίωση αντικριστής δέσμης (Opposed Jet)

Εισαγωγή

Όπως αναφέρθηκε στην ενότητα 4.2 του 2^{ου} κεφαλαίου, η εισαγωγή του κλάσματος ανάμιξης Z στην περίπτωση επίλυσης των τυρβωδών φλογών διάχυσης (εύρεση $T(x_i, t)$ και $Y_i(x_i, t)$) μπορεί να διαχωριστεί σε 2 προβλήματα:

1^ο) Ένα πρόβλημα ανάμιξης, στο οποίο πρέπει να επιλυθεί η εξίσωση μεταφοράς του κλάσματος ανάμιξης, έτσι ώστε να προσδιοριστεί το πεδίο του κλάσματος ανάμιξης στο χώρο και στο χρόνο ($Z(x_i, t)$).

2^ο) Ένα πρόβλημα καθορισμού της δομής της φλόγας, όπου η επίλυση των εξισώσεων των φλογιδίων (εύρεση του $T(Z, t)$ και $Y_i(Z, t)$) σε συνδυασμό με το κλάσμα ανάμιξης Z να οδηγήσει στην τελική λύση του συνολικού προβλήματος (εύρεση του $T(x_i, t)$ και $Y_i(x_i, t)$).

Το 1^ο πρόβλημα αποτέλεσε αντικείμενο μελέτης του 4^{ου} κεφαλαίου. Στο παρόν κεφάλαιο μελετάται η δυνατότητα επίλυσης του 2^{ου} προβλήματος, που αφορά στον καθορισμό της δομής της φλόγας. Συγκεκριμένα στην ενότητα 5.1 περιγράφεται το μαθηματικό υπόβαθρο των εξισώσεων των σταθερών φλογιδίων και αναλύονται οι βασικοί παράμετροι του υπολογιστικού εργαλείου FlameMaster, που χρησιμοποιήθηκε για την επίλυση αυτών στο χώρο του κλάσματος ανάμιξης Z . Στην επόμενη ενότητα 5.2, παρουσιάζεται εν συντομία η διαμόρφωση της εξίσωσης μεταφοράς ενός χημικού στοιχείου i και το τελικό σύστημα εξισώσεων που προκύπτει στην περίπτωση χρησιμοποίησης της μεθόδου άμεσης προσομοίωσης, σε συνδυασμό με πινακοποιημένη χημεία, με βάση των κώδικα των φασματικών πεπερασμένων στοιχείων. Η περιγραφή της πρότυπης γεωμετρίας αντικριστής δέσμης (Opposed Jet), που χρησιμοποιήθηκε για την επικύρωση των αποτελεσμάτων του υπολογιστικού εργαλείου FlameMaster, οι οριακές συνθήκες καθώς και το υπολογιστικό πλέγμα που

χρησιμοποιήθηκε στις προσομοιώσεις αποτελούν αντικείμενο της παραγράφου 5.3. Εν συνεχεία στις ενότητες 5.4 και 5.5 παρουσιάζονται και αναλύονται εκτενώς τα αποτελέσματα που προέκυψαν από την άμεση προσομοίωση και τον κώδικα FlameMaster αντίστοιχα, ενώ η τελευταία παράγραφος του κεφαλαίου, η παράγραφος 5.6, αφορά στα τελικά συμπεράσματα που προέκυψαν από τη συνολική μελέτη της προσομοίωσης της γεωμετρίας της πρότυπης αντικριστής δέσμης (Opposed Jet).

5.1 Κώδικας επίλυσης εξισώσεων σταθερών φλογιδίων (FlameMaster)

Τα μοντέλα φλογιδίων που χρησιμοποιούνται στην περίπτωση των φλογών διάχυσης έχουν αναπτυχθεί από τους [Peters - 1983, Peters - 1984]. Η βασική υπόθεση πάνω στην οποία στηρίζονται τα συγκεκριμένα μοντέλα είναι η εξής: Οι χημικές χρονικές κλίμακες, στις οποίες λαμβάνουν χώρα οι διάφορες χημικές αντιδράσεις είναι σχετικά μικρές, έτσι ώστε οι αντιδράσεις να πραγματοποιούνται σε λεπτά στρώματα, τα οποία έχουν μέγεθος μικρότερο από τις μικρότερες κλίμακες τύρβης και στα οποία επικρατούν στοιχειομετρικές συνθήκες. Η παραπάνω διαπίστωση έχει 2 συνέπειες:

- 1) Η δομή της ζώνης αντίδρασης (reaction zone) παραμένει στρωτή και
- 2) Η μεταφορά ενέργειας λόγω διάχυσης λαμβάνει χώρα σε διεύθυνση, η οποία είναι κάθετη στην επιφάνεια στοιχειομετρικού μίγματος.

Με βάση την υπόθεση αυτή, όπως αναφέρθηκε και στο 4^ο κεφάλαιο οι εξισώσεις μεταφοράς των χημικών στοιχείων μπορούν να μετασχηματιστούν στο χώρο του κλάσματος ανάμιξης Z , με το τελευταίο να αποτελεί τη μόνη ανεξάρτητη μεταβλητή. Το τελικό σύστημα που προκύπτει αποτελεί ένα μονοδιάστατο σύστημα εξισώσεων, η επίλυση του οποίου καθορίζει τη δομή της φλόγας, καθόσον παρέχει το θερμοκρασιακό προφίλ και τις συγκεντρώσεις των χημικών στοιχείων σε συνάρτηση του χρόνου t και του κλάσματος ανάμιξης Z (εύρεση του $T(Z,t)$ και $Y_i(Z,t)$). Η γενική εξίσωση του συστήματος των εξισώσεων των φλογιδίων είναι:

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} = \dot{\omega}_i + \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} \quad (5.1)$$

όπου ρ η πυκνότητα, Y_i το κλάσμα μάζας του χημικού στοιχείου i , Z το κλάσμα ανάμιξης, $\dot{\omega}_i$ ο όρος χημικής πηγής του χημικού στοιχείου i και

$$\chi = 2D \left(\frac{\partial Z}{\partial x_i} \frac{\partial Z}{\partial x_i} \right) \quad (5.2)$$

ο βαθμωτός ρυθμός σκέδασης. Στην εξίσωση (5.2) το σύμβολο D , αποτελεί το συντελεστή διάχυσης του κλάσματος ανάμιξης Z .

Η εξίσωση (5.1) αποτελεί το σύστημα των εξισώσεων των φλογιδίων, οι οποίες χρησιμοποιούνται για τη μοντελοποίηση τυρβωδών φλογών διάχυσης. Στην παραπάνω εξίσωση ο μόνος όρος ο οποίος εξαρτάται από τις χωρικές συντεταγμένες είναι ο βαθμωτός ρυθμός σκέδασης χ , ο οποίος ελέγχει την ανάμιξη μεταξύ των διαφόρων στοιχείων. Εάν αυτός είναι γνωστός τότε είναι δυνατή η επίλυση των παραπάνω εξισώσεων για την τελική εύρεση του θερμοκρασιακού πεδίου και των συγκεντρώσεων των στοιχείων, σα συνάρτηση του κλάσματος ανάμιξης Z και του χρόνου t . Εάν στην εξίσωση (5.1) θεωρηθεί ότι η δομή της φλόγας είναι σε μόνιμη κατάσταση (steady state), τότε είναι δυνατό να αγνοηθεί ο όρος του αριστερού μέλους αυτής, με το τελικό σύστημα που προκύπτει να αποτελεί το μοντέλο των σταθερών φλογιδίων:

$$\dot{\omega}_i + \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} = 0 \quad (5.3)$$

Στην παρούσα διδακτορική διατριβή χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο σταθερών φλογιδίων. Κύριος λόγος αποτέλεσε το μικρότερο υπολογιστικό κόστος, καθώς επίσης και το γεγονός ότι δεν μελετήθηκαν φαινόμενα ανύψωσης φλόγας (lift-off), σβησίματος (extinction) ή επανάφλεξης (re-ignition), τα οποία είναι άρρηκτα συνδεδεμένα με τη χρονική κατάσταση της φλόγας και δεν είναι δυνατό να προσομοιωθούν με το μοντέλο των σταθερών φλογιδίων.

Ο κώδικας που χρησιμοποιήθηκε για την επίλυση της εξίσωσης (5.3) ονομάζεται FlameMaster και αναπτύχθηκε από τον ερευνητή Heinz Pitsch. Λόγος επιλογής του αποτέλεσε κυρίως η εμπορική του διαθεσιμότητα και η ευκολία στη χρήση του. Με βάση την εξίσωση (5.3) προκύπτει ότι η τελική λύση αυτής στο χώρο του κλάσματος ανάμιξης Z , αποτελεί συνάρτηση του βαθμωτού ρυθμού σκέδασης (scalar dissipation rate) χ και των οριακών συνθηκών. Με βάση τα παραπάνω, εάν για μία δεδομένη γεωμετρία καθοριστούν οι οριακές συνθήκες και ο βαθμωτός ρυθμός σκέδασης, ο οποίος εξαρτάται από την κλίση του κλάσματος ανάμιξης (σχέση (5.2)), τότε είναι δυνατός ο εκ των υστέρων υπολογισμός διαφόρων λύσεων της εξίσωσης (5.3) και η δημιουργία προϋπολογισμένων μεγεθών παραμετροποιημένα με το βαθμωτό ρυθμό

σκέδασης χ . Το τελικό αποτέλεσμα που προκύπτει είναι της μορφής $\Phi(Z, \chi_{st})$, όπου η μεταβλητή Φ , αντικατοπτρίζει οποιοδήποτε βαθμωτό μέγεθος από τις λύσεις των εξισώσεων των σταθερών φλογιδίων.

Για την πιστοποίηση των αποτελεσμάτων του κώδικα FlameMaster επιλέχθηκε η πρότυπη γεωμετρία της αντικριστής δέσμης (opposed jet) με καύσιμο H_2 και οξειδωτικό αέρα, καθόσον οι λύσεις της συγκεκριμένης γεωμετρίας έχουν χρησιμοποιηθεί στο παρελθόν [Ihme - 2005, Sheikhi - 2005], για τη μοντελοποίηση τυρβωδών φλογών διάχυσης. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν, συγκρίθηκαν με αυτά άμεσων προσομοιώσεων (DNS) με βάση τον υπάρχοντα κώδικα. Αναλυτική περιγραφή του υπολογιστικού πλέγματος και των οριακών συνθηκών που χρησιμοποιήθηκαν αναφέρονται στην ενότητα (5.3).

5.2 Διαμόρφωση της εξίσωσης μεταφοράς χημικού στοιχείου i - Αδιαστατοποίηση - Διακριτοποίηση - Τελικό σύστημα εξισώσεων

Για την επίλυση της χημείας της αέριας φάσης με τον υπάρχοντα κώδικα και τη χρησιμοποίηση της μεθόδου άμεσης προσομοίωσης, πέραν της επίλυσης του ροϊκού πεδίου (εξισώσεις Navier-Stokes (2.2)) είναι επιπλέον απαραίτητη η επίλυση της εξίσωσης ενέργειας (2.3), καθώς επίσης και μία εξίσωση μεταφοράς για το κάθε χημικό στοιχείο i , το οποίο συμμετέχει στο χημικό μηχανισμό της καύσης. Η γενική εξίσωση μεταφοράς του κλάσματος μάζας Y_i ενός χημικού στοιχείου i , μπορεί να γραφεί ως εξής:

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} Y_i) = \nabla \cdot (\rho \underline{V}_i Y_i) + \dot{\omega}_i \quad (5.4)$$

όπου t είναι ο χρόνος, ρ η πυκνότητα, Y_i το κλάσμα μάζας του χημικού στοιχείου i , \underline{u} το διάνυσμα της ταχύτητας, \underline{V}_i το διάνυσμα της ταχύτητας διάχυσης (diffusion velocity) του χημικού στοιχείου i και $\dot{\omega}_i$ ο χημικός όρος πηγής του χημικού στοιχείου i . Εάν για το διάνυσμα της ταχύτητας διάχυσης του χημικού στοιχείου i , χρησιμοποιηθεί ο νόμος του Fick ισχύει ότι:

$$\underline{V}_i = D_i \frac{\nabla Y_i}{Y_i} \quad (5.5)$$

όπου D_i και Y_i ο συντελεστής διάχυσης και το κλάσμα μάζας του χημικού στοιχείου i αντίστοιχα.

Επομένως η εξίσωση (5.4) με τη βοήθεια της (5.5) διαμορφώνεται στην:

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} Y_i) = \nabla \cdot \left(\rho D_i \frac{\nabla Y_i}{Y_i} Y_i \right) + \dot{\omega}_i \quad (5.6)$$

$$\rho \frac{\partial(Y_i)}{\partial t} + Y_i \frac{\partial(\rho)}{\partial t} + \rho \underline{u} \nabla \cdot (Y_i) + Y_i \nabla \cdot \rho \underline{u} = \nabla \cdot (\rho D_i \nabla Y_i) + \dot{\omega}_i \quad (5.7)$$

$$\rho \left(\frac{\partial Y_i}{\partial t} + \underline{u} \nabla \cdot (Y_i) \right) + Y_i \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \underline{u} \right) = \nabla \cdot (\rho D_i \nabla Y_i) + \dot{\omega}_i \quad (5.8)$$

$$\rho \left(\frac{\partial Y_i}{\partial t} + \underline{u} \nabla \cdot (Y_i) \right) = \nabla \cdot (\rho D_i \nabla Y_i) + \dot{\omega}_i \quad (5.9)$$

I. Αδιαστατοποίηση της εξίσωσης μεταφοράς χημικού στοιχείου i

Για την αδιαστατοποίηση της εξίσωσης μεταφοράς του χημικού στοιχείου i είναι απαραίτητη η χρησιμοποίηση αδιάστατων μεγεθών και αριθμών. Τα μεγέθη που χρησιμοποιήθηκαν για την αδιαστατοποίηση είναι: L_∞ μήκος, u_∞ ταχύτητα, $t_\infty = L_\infty / u_\infty$ χρόνος, ρ_∞ πυκνότητα, D_∞ συντελεστής διάχυσης. Ο δείκτης ∞ αναφέρεται στην περιοχή της αδιατάρακτης ροής (far field region), ενώ το σύμβολο $\hat{\cdot}$, όπου αναφέρεται στη συνέχεια συμβολίζει αδιάστατο μέγεθος.

Με τη χρησιμοποίηση της εξίσωσης (5.1) και των προαναφερθέντων αδιάστατων μεγεθών προκύπτει ότι:

$$\hat{\rho} \rho_\infty \left(\frac{\partial Y_i}{\partial \hat{t}} + u_\infty \hat{u} \frac{1}{L_\infty} \hat{\nabla} \cdot (Y_i) \right) = \frac{1}{L_\infty} \hat{\nabla} \cdot \left(\hat{\rho} \rho_\infty D_\infty \hat{D}_i \frac{1}{L_\infty} \hat{\nabla} Y_i \right) + \dot{\omega}_i \quad (5.10)$$

$$\frac{u_\infty \rho_\infty}{L_\infty} \hat{\rho} \left(\frac{\partial Y_i}{\partial \hat{t}} + \hat{u} \hat{\nabla} \cdot (Y_i) \right) = \frac{1}{L_\infty^2} \rho_\infty D_\infty \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{D}_i \hat{\nabla} Y_i) + \dot{\omega}_i \quad (5.11)$$

$$\hat{\rho} \left(\frac{\partial Y_i}{\partial \hat{t}} + \hat{u} \hat{\nabla} \cdot (Y_i) \right) = \frac{D_\infty}{L_\infty u_\infty} \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{D}_i \hat{\nabla} Y_i) + \frac{L_\infty}{u_\infty \rho_\infty} \dot{\omega}_i \quad (5.12)$$

$$\hat{\rho} \left(\frac{\partial Y_i}{\partial \hat{t}} + \hat{u} \hat{\nabla} \cdot (Y_i) \right) = \frac{1}{\frac{u_\infty L_\infty}{v_\infty} \frac{v_\infty}{D_\infty}} \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{D}_i \hat{\nabla} Y_i) + \frac{L_\infty}{u_\infty \rho_\infty} \dot{\omega}_i \quad (5.13)$$

$$\hat{\rho} \left(\frac{\partial Y_i}{\partial t} + \hat{u} \hat{\nabla} \cdot (Y_i) \right) = \frac{1}{\text{Re} Sc} \hat{\nabla} \cdot (\hat{\rho} \hat{D}_i \hat{\nabla} Y_i) + \frac{L_\infty}{u_\infty \rho_\infty} \dot{\omega}_i \quad (5.14)$$

Οι αδιαστατοποιημένοι αριθμοί Re και Sc είναι αντίστοιχα οι αριθμοί Reynolds και Schmidt: $\text{Re} = \frac{u_\infty L_\infty \rho_\infty}{\mu_\infty} = \frac{u_\infty L_\infty}{\nu_\infty}$ και $Sc = \frac{\nu_\infty}{D_\infty}$

Για την περαιτέρω ανάλυση του χημικού όρου πηγής $\dot{\omega}_i$, απαιτείται η γνώση του χημικού μηχανισμού της καύσης του καυσίμου που επιλέγεται. Ο χημικός μηχανισμός που χρησιμοποιήθηκε στη συγκεκριμένη διδακτορική διατριβή αναλύεται στην επόμενη παράγραφο (5.3).

II. Χρονική διακριτοποίηση της εξίσωσης μεταφοράς χημικού στοιχείου i

Η χωρική και χρονική διακριτοποίηση της εξίσωσης (5.14) με βάση τον υπάρχοντα κώδικα των φασματικών πεπερασμένων στοιχείων είναι όμοια με αυτή που παρουσιάστηκε στην ενότητα 2.6 και η τελική της μορφή περιγράφεται μαθηματικά από τη σχέση:

$$\frac{\rho^n}{\Delta t} \left(\sum_{q=0}^J \alpha_q Y^{n+1-q} \right) = -\rho^n \left(\sum_{q=0}^J \beta_q \tilde{u}^{n-q} \right) \cdot \nabla Y^{n+1} + \frac{1}{\text{Re Pr}} \nabla^2 D_i Y^{n+1} + \frac{L_\infty}{u_\infty \rho_\infty} \dot{\omega}_i \quad (5.15)$$

όπου Δt το χρονικό βήμα της μεθόδου, α_q και β_q οι συντελεστές του explicit και implicit μέρους του J βαθμού του σχήματος που χρησιμοποιείται. Στην παραπάνω εξίσωση έχει παραληφθεί ο δείκτης \wedge για ευκολία στην ανάγνωση. Τονίζεται ότι όλα τα μεγέθη είναι αδιάστατα.

Επομένως το ολικό σύστημα των εξισώσεων που πρέπει να επιλυθεί στην περίπτωση συμπιεστής ροής, στην οποία λαμβάνονται υπόψη φαινόμενα καύσης, αποτελείται από την εξίσωση της ενέργειας, η οποία αποτελείται μόνο από τη θερμική (λανθάνουσα - sensible) ενθαλπία ή τη θερμοκρασία (5.16), την καταστατική εξίσωση (5.17), την εξίσωση μεταφοράς των χημικών στοιχείων (5.18), την εξίσωση επίλυσης του ροϊκού πεδίου (5.19), και τέλος την εξίσωση της κλίσης του ροϊκού πεδίου λόγω συμπίεστικότητας (5.20). Η γενική μορφή αυτού είναι:

$$\frac{\rho^n}{\Delta t} \left(\sum_{q=0}^J \alpha_q T^{n+1-q} \right) = -\rho^n \left(\sum_{q=0}^J \beta_q \underline{u}^{n-q} \right) \cdot \nabla T^{n+1} + \frac{a}{\text{Re Pr}} \nabla^2 T^{n+1} + \frac{L_\infty}{u_\infty \rho_\infty} \cdot \sum_{i=1}^N h_i^o \dot{\omega}_i \quad (5.16)$$

$$\rho^{n+1} T^{n+1} = 1 \quad (5.17)$$

$$\frac{\rho^{n+1}}{\Delta t} \left(\sum_{q=0}^J \alpha_q Y^{n+1-q} \right) = -\rho^n \left(\sum_{q=0}^J \beta_q \underline{u}^{n-q} \right) \cdot \nabla Y^{n+1} + \frac{1}{\text{Re Pr}} \nabla^2 D_i Y^{n+1} + \frac{L_\infty}{u_\infty \rho_\infty} \dot{\omega}_i \quad (5.18)$$

$$\frac{\rho^{n+1}}{\Delta t} \sum_{q=0}^J \alpha_q \underline{u}^{n+1-q} = -\rho^n \sum_{q=0}^{J-1} \beta_q (\underline{u} \cdot \nabla \underline{u})^{n-q} - \nabla p_2^{n+1} + \frac{\mu}{\text{Re}} \nabla \underline{S}^{n+1} \quad (5.19)$$

$$Q^{n+1} = \frac{1}{(\rho T)^{n+1}} \left\{ \frac{1}{\text{Re Pr}} \nabla^2 T^{n+1} + \frac{L_\infty}{u_\infty \rho_\infty} \cdot \sum_{i=1}^N h_i^o \dot{\omega}_i \right\} \quad (5.20)$$

Όπου Δt το χρονικό βήμα της μεθόδου, α_q και β_q οι συντελεστές του explicit και implicit μέρους του J βαθμού του σχήματος που χρησιμοποιείται, h_i^o η ενθαλπία σχηματισμού και Q^{n+1} ή “θερμική” κλίση (thermal divergence) του πεδίου ταχύτητας [Tomboulides - 1999]. Η πυκνότητα στο χρονικό βήμα n+1 υπολογίζεται από τη θερμοκρασία μέσω της καταστατικής εξίσωσης (5.17). Εν συνεχεία, με τη γνωστή πυκνότητα υπολογίζεται το κλάσμα μάζας του κάθε χημικού στοιχείου i από τη σχέση (5.18). Τέλος υπολογίζεται το πεδίο ταχυτήτων στο χρονικό βήμα n+1 μέσω της επίλυσης του συστήματος των εξισώσεων (5.19) και (5.20). Η επίλυση επιτυγχάνεται με τη χρησιμοποίηση ενός μικτού σχήματος explicit - implicit υψηλού βαθμού χρονικής διακριτοποίησης, το οποίο αποδεδειγμένα τη θερμοχημεία από το πεδίο ταχυτήτων με τέτοιο τρόπο ώστε να απλοποιείται η αριθμητική επίλυση αυτού, ενώ παράλληλα ελαχιστοποιεί τα σφάλματα όσο αφορά στη διατήρηση της μάζας [Tomboulides - 1999].

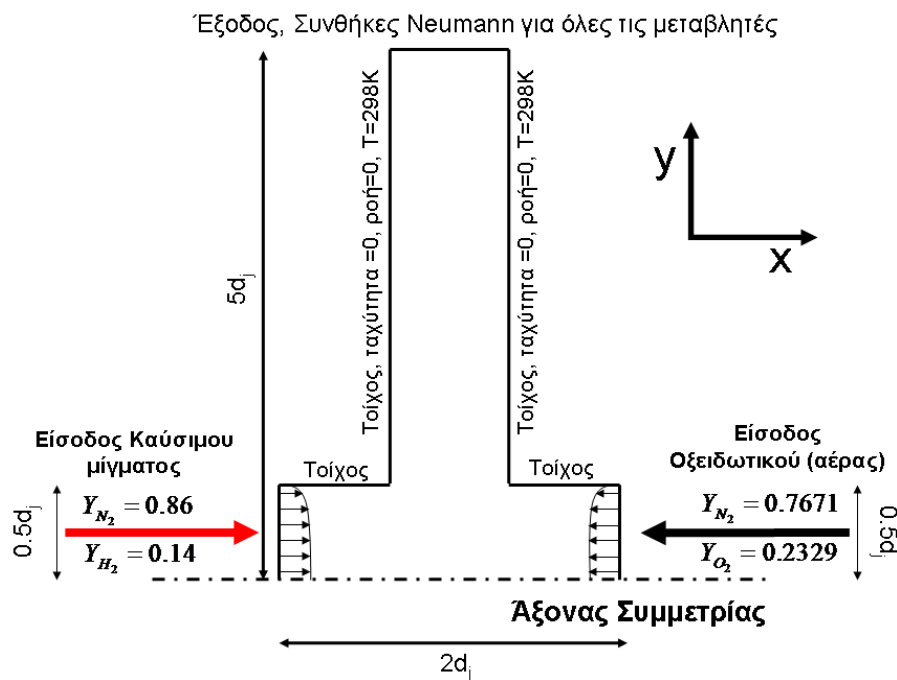
5.3 Περιγραφή γεωμετρίας αντικριστής δέσμης (Opposed Jet) – Οριακές συνθήκες – Υπολογιστικό πλέγμα

5.3.1 Περιγραφή γεωμετρίας αντικριστής δέσμης (Opposed Jet)

Η αναλυτική γεωμετρία της αντικριστής δέσμης (Opposed Jet) απεικονίζεται στο σχήμα 5.1. Πρόκειται για μία δισδιάστατη γεωμετρία από την αριστερή πλευρά της

οποίας εισέρχεται διαμέσου κυλινδρικής διατομής διαμέτρου d_j το καύσιμο, το οποίο είναι μίγμα H_2 , διαλυμένο με N_2 . Το μήκος της γεωμετρίας κατά μήκος του άξονα y ορίστηκε ίσο με $5d_j$, με σκοπό την αποφυγή οποιασδήποτε επίδρασης των οριακών συνθηκών εξόδου, στην υπολογιστική διαδικασία. Από τη δεξιά πλευρά της γεωμετρίας εισέρχεται μέσω ίδιας κυλινδρικής διατομής d_j αέρας ως οξειδωτικό μέσο. Τα κλάσματα μάζας των συστατικών του καύσιμου μίγματος είναι $Y_{N_2} = 0.86$ και $Y_{H_2} = 0.14$, ενώ τα αντίστοιχα του οξειδωτικού είναι $Y_{N_2} = 0.7671$ και $Y_{O_2} = 0.2329$.

Τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της συνολικής διάταξης έχουν αδιαστατοποιηθεί με μήκος αναφοράς τη διάμετρο εισόδου του οξειδωτικού και του καύσιμου μίγματος $d_j = 0.27\text{cm}$, ταχύτητα αναφοράς u_j ανάλογα με τον επιθυμητό αριθμό Re , πίεση αναφοράς $p_{ref} = 1\text{atm}$ και θερμοκρασία αναφοράς $T_{ref} = 298\text{K}$.



Σχήμα 5.1: Διάταξη της γεωμετρίας της προς μελέτη αντικριστής δέσμης (Opposed Jet) και συνοριακές συνθήκες.

Η σύσταση αναφοράς είναι η σύσταση εισόδου του αέρα στην δεξιά πλευρά της γεωμετρίας και είναι ίση με $Y_{O_2} = 0.2329$ και $Y_{N_2} = 0.7671$ κατά μάζα. Στον πίνακα 5.1 παρουσιάζονται οι περιπτώσεις που μελετήθηκαν με βάση τον αριθμό

$Re = u_{air} d_j / \nu_{air}$, όπου u_{air} η ταχύτητα του οξειδωτικού μίγματος, d_j η διάμετρος της δέσμης του οξειδωτικού μίγματος και ν_{air} το κινηματικό ιξώδες του αέρα στη θερμοκρασία των 298K. Οι περιπτώσεις που προσομοιώθηκαν με βάση τον αριθμό Re που υπολογίστηκε αφορούν στρωτές ροές.

Πίνακας 5.1: Ταχύτητα αναφοράς με βάση τον αντίστοιχο επιθυμητό αριθμό Reynolds.

<i>Αριθμός Reynolds</i>	<i>Ταχύτητα αναφοράς u_{air} (cm/sec)</i>
<i>100</i>	<i>58.283</i>
<i>200</i>	<i>116.567</i>
<i>300</i>	<i>174.851</i>
<i>400</i>	<i>233.135</i>
<i>500</i>	<i>291.419</i>

5.3.2 Οριακές συνθήκες - Παράμετροι

Όσο αφορά στις οριακές συνθήκες, το προφίλ ταχύτητας εισόδου είναι παραβολικό τόσο για το μίγμα καυσίμου όσο και για το οξειδωτικό με μέγιστη ταχύτητα στο κέντρο της διαμέτρου εισόδου της ροής, ίση με 1 (αδιάστατη), ενώ στα τοιχώματα της γεωμετρίας η ταχύτητα τέθηκε ίση με το μηδέν. Στο κάτω μέρος της γεωμετρίας χρησιμοποιήθηκαν για όλες τις μεταβλητές συνθήκες αξονικής συμμετρίας, ενώ στην έξοδο (επάνω μέρος της γεωμετρίας), συνθήκες εξόδου Neumann. Η θερμοκρασία εισόδου του οξειδωτικού, του καυσίμου μίγματος, καθώς και αυτή των τοιχωμάτων τέθηκε ίση με τη θερμοκρασία αναφοράς 298K. Όσο αφορά στις συγκεντρώσεις των στοιχείων χρησιμοποιήθηκαν οριακές συνθήκες ροής (flux), στην είσοδο του καυσίμου μίγματος και του οξειδωτικού και οριακές συνθήκες μηδενικής ροής, στα τοιχώματα της γεωμετρίας. Ο λόγος που δεν χρησιμοποιήθηκαν συνθήκες Dirichlet για τα κλάσματα μάζας του καυσίμου μίγματος και του οξειδωτικού, αλλά συνθήκες ροής, οφείλεται στην προσπάθεια αποφυγής σφαλμάτων στις συγκεντρώσεις των χημικών στοιχείων στην είσοδο της γεωμετρίας, λόγω των διαφορετικών συντελεστών διάχυσης αυτών.

Ο μηχανισμός αναλυτικής καύσης που χρησιμοποιήθηκε για το H₂ βασίζεται στους Li, J., Zhao Z., Kazkov A. and Dryer F.L. - 2004 και αποτελείται από 9 χημικά είδη (species). Μία διαγραμματική αναπαράσταση, στην οποία αναφέρονται οι επιμέρους

αντιδράσεις οι οποίες πραγματοποιούνται κατά τη διάρκεια καύσης του H_2 απεικονίζεται στον πίνακα 5.2.

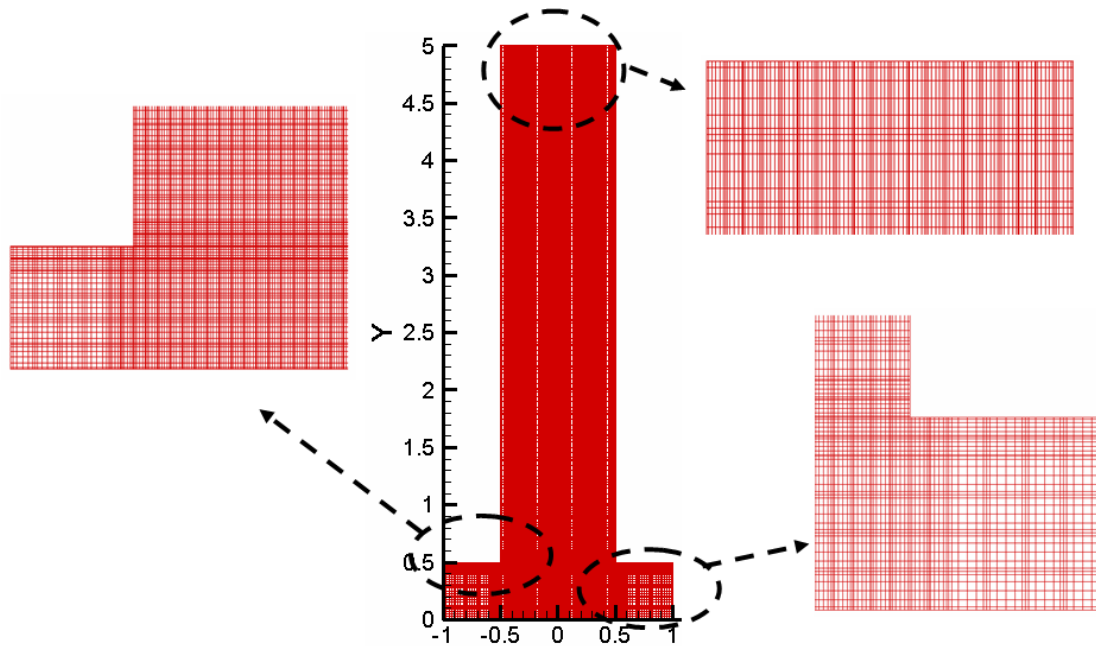
Πίνακας 5.2: Αναλυτικός μηχανισμός καύσης H_2 με βάση τους Li, J., Zhao, Z., Kazakov, A., and Dryer, F.L (2004).

Αλυσιδωτές αντιδράσεις H_2 και O_2	Αντιδράσεις αποσύνθεσης – διαχωρισμού H_2 και O_2	Αντιδράσεις σχηματισμού και καταστροφής HO_2
$H+O_2=O+OH$ $O+H_2=H+OH$ $H_2+OH=H_2O+H$ $O+H_2O=OH+OH$	$H_2+M=H+H+M$ $O+O+M=O_2+M$ $O+H+M=OH+M$ $H+OH+M=H_2O+M$	$HO_2+H=H_2+O_2$ $HO_2+H=OH+OH$ $HO_2+O=O_2+OH$ $HO_2+OH=H_2O+O_2$ $HO_2+HO_2=H_2O_2+O_2$ $HO_2+HO_2=H_2O_2+O_2$ $H_2O_2(+M)=OH+OH(+M)$ $H_2O_2+H=H_2O+OH$ $H_2O_2+H=HO_2+H_2$ $H_2O_2+O=OH+HO_2$ $H_2O_2+OH=HO_2+H_2O$

Το χρονικό βήμα της μεθόδου τέθηκε ίσο με $dt = 10^{-4}$ (αδιάστατο), λόγω της δυσκολίας που εισάγεται από την πολυπλοκότητα των φαινομένων κατά τη διάρκεια της καύσης και της ακαμψίας (stiffness) που προκύπτει στο τελικό σύστημα, εξαιτίας της ύπαρξης του χημικού όρου πηγής. Το τελικό ολικό σύστημα των εξισώσεων που επιλύεται στην περίπτωση αυτή αποτελείται από τις εξισώσεις (5.16) έως (5.20) που αναλύθηκαν στην ενότητα 5.2. Τα 9 βασικά στοιχεία, τα οποία επιλύονται με τη χρησιμοποίηση της εξίσωσης (5.18) είναι τα ακόλουθα: H_2 , H , O , OH , O_2 , H_2O , HO_2 , H_2O_2 και το αδρανές N_2 .

5.3.3 Υπολογιστικό πλέγμα

Το υπολογιστικό πλέγμα που χρησιμοποιήθηκε για την εφαρμογή της μεθόδου άμεσης προσομοίωσης αποτελείται από 712 πεπερασμένα στοιχεία με βαθμό πολωνύμων παρεμβολής $N=7$ (σχήμα 5.3).



Σχήμα 5.3: Υπολογιστικό πλέγμα που χρησιμοποιήθηκε στην προσομοίωση της πρότυπης γεωμετρίας δισδιάστατης αντικριστής δέσμης και λεπτομέρειες αυτού σε σημεία τοπικής πύκνωσης. Ο πολυωνυμικός βαθμός παρεμβολής είναι ίσος με $N = 7$.

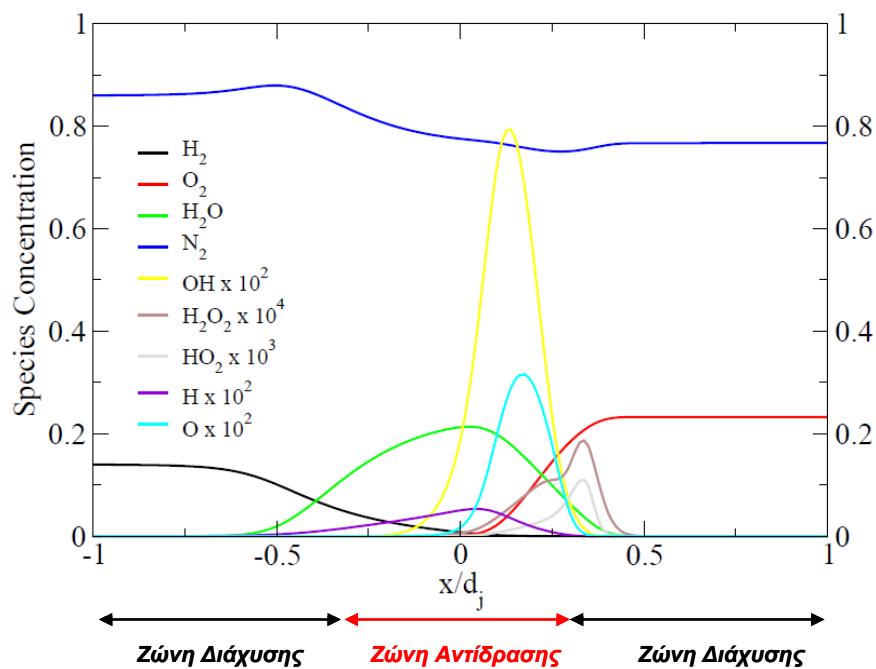
Όπως φαίνεται και στο σχήμα 5.3 η τοπική πύκνωση αφορούσε στις περιοχές κοντά στα τοιχώματα και στα σημεία παρουσίας της φλόγας και έγινε με βάση την ταυτόχρονη ικανοποίηση υπολογιστικού κόστους, ακρίβειας και ταχύτητας των υπολογισμών. Για την ανάλυση ευαισθησίας της ανεξαρτησίας της τελικής λύσεως από το υπολογιστικό πλέγμα πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις με βαθμό πολυωνύμων παρεμβολής ίσο με $N = 7$ έως 12.

5.4 Αποτελέσματα άμεσης προσομοίωσης (Direct Numerical Simulation - DNS)

Για την έναρξη της διεργασίας της καύσης έγιναν αρχικοί υπολογισμοί με $Re = 100$, στους οποίους οι μεταβολές της θερμοκρασίας αγνοήθηκαν. Ο λόγος για τον οποίο έγινε κάτι τέτοιο αφορούσε στο γεγονός, ότι για την έναρξη της καύσης η ανάμιξη μεταξύ του καύσιμου μίγματος και του οξειδωτικού θα πρέπει να βρίσκεται σε ικανοποιητικό επίπεδο, έτσι ώστε το μίγμα να είναι σε θέση να αναφλεγεί σε περίπτωση που οι συνθήκες πίεσης και θερμοκρασίας το επιτρέπουν (στοιχειομετρικές συνθήκες). Εν συνεχεία το τελικό ροϊκό πεδίο της συγκεκριμένης

προσομοίωσης, καθώς και εκείνο των 9 χημικών στοιχείων και / ή ειδών (species), χρησιμοποιήθηκε σαν αρχικό πεδίο μέσα στο οποίο τοποθετήθηκε ένα σημείο έναυσης (hot spot) κοντά στην περιοχή ανάμιξης του καύσιμου μίγματος και του οξειδωτικού, το οποίο και αποτέλεσε την απαρχή για δημιουργία της φλόγας. Ως αρχική θερμοκρασία έναυσης χρησιμοποιήθηκε η θερμοκρασία των 2000 K, η οποία είναι λίγο χαμηλότερη από την αδιαβατική θερμοκρασία καύσης του H₂. Περίπου 30 με 50 αδιάστατες χρονικές μονάδες μετά από την έναυση της φλόγας, η ροή σταματάει να μεταβάλλεται στο χρόνο και φτάνει σε μόνιμη κατάσταση. Για όλες τις υπόλοιπες προσομοιώσεις καύσης, που αφορούσαν διαφορετικούς αριθμούς Re, σαν αρχική συνθήκη για την υπολογιστική επίλυση χρησιμοποιήθηκε το τελικό πεδίο από την προσομοίωση με Re = 100.

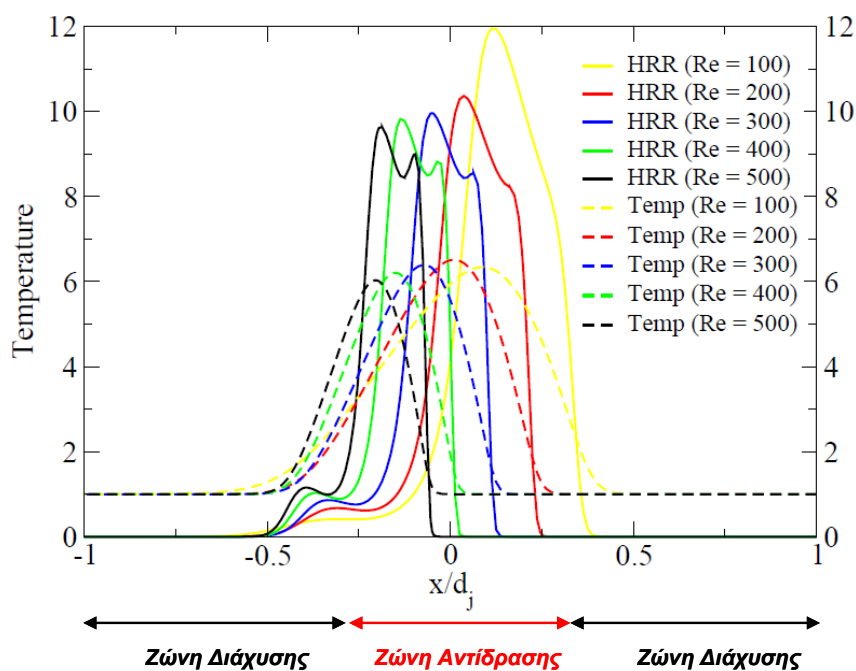
Τα τελικά αποτελέσματα αφορούσαν στην κατανομή των διαφόρων μεταβλητών κατά μήκος του άξονα της αντικριστής δέσμης. Στο σχήμα 5.4 παρουσιάζεται η κατανομή όλων των χημικών στοιχείων που μετέχουν στο μηχανισμό της χημικής εξίσωσης καύσης του H₂ για την περίπτωση του αριθμού Re = 100, αφού η φλόγα φτάσει σε μόνιμη κατάσταση.



Σχήμα 5.4: Μεταβολή του κλάσματος μάζας των αντιδρώντων και προϊόντων της καύσης του H₂ σε σχέση με την κατά μήκος απόσταση του άξονα συμμετρίας της δέσμης για Re = 100.

Από την αριστερή πλευρά της δέσμης $x/d_j = -1$ εισέρχεται καύσιμο μίγμα, το οποίο αποτελείται από 14% σε H_2 και 86% σε N_2 . Καθώς η απόσταση x/d_j αυξάνεται το H_2 έρχεται σε επαφή με το οξειδωτικό και μόλις επιτευχθούν κατάλληλες στοιχειομετρικές συνθήκες ξεκινά η καύση. Στη ζώνη αντίδρασης ($-0.25 < x/d_j < 0$), που απεικονίζεται στο σχήμα 5.4 η συγκέντρωση των προϊόντων της καύσης (H_2O , OH , H_2O_2 , HO_2 , H , O) αρχίζει να αυξάνει, ενώ η αντίστοιχη του H_2 και του O_2 μειώνεται καθώς τα συγκεκριμένα στοιχεία καταναλώνονται για την παραγωγή των προϊόντων.

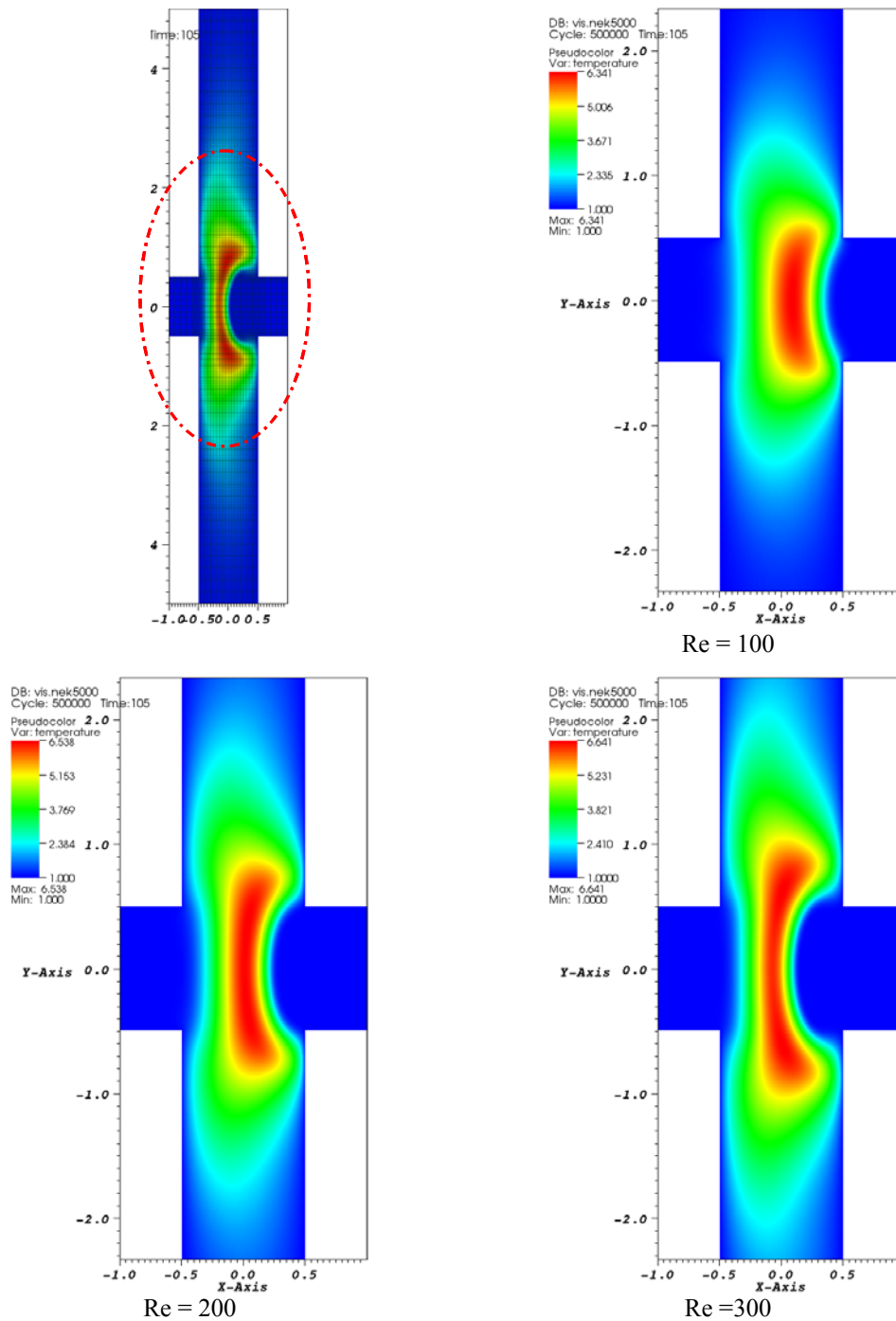
Το μήκος της ζώνης αντίδρασης (reaction zone) που απεικονίζεται στο σχήμα 5.4 καθορίστηκε με βάση το θερμικό ρυθμό απαγωγής θερμότητας (Heat Release Rate – HRR), σε σχέση με την κατάντη απόσταση του άξονα συμμετρίας της δέσμης x/d_j (σχήμα 5.5 – συνεχής κίτρινη καμπύλη).



Σχήμα 5.5: Θερμικός ρυθμός απαγωγής θερμότητας (Heat Release Rate – HRR) και θερμοκρασιακό προφίλ σε σχέση με την κατά μήκος απόσταση του άξονα συμμετρίας της δέσμης για διάφορους αριθμούς Re.

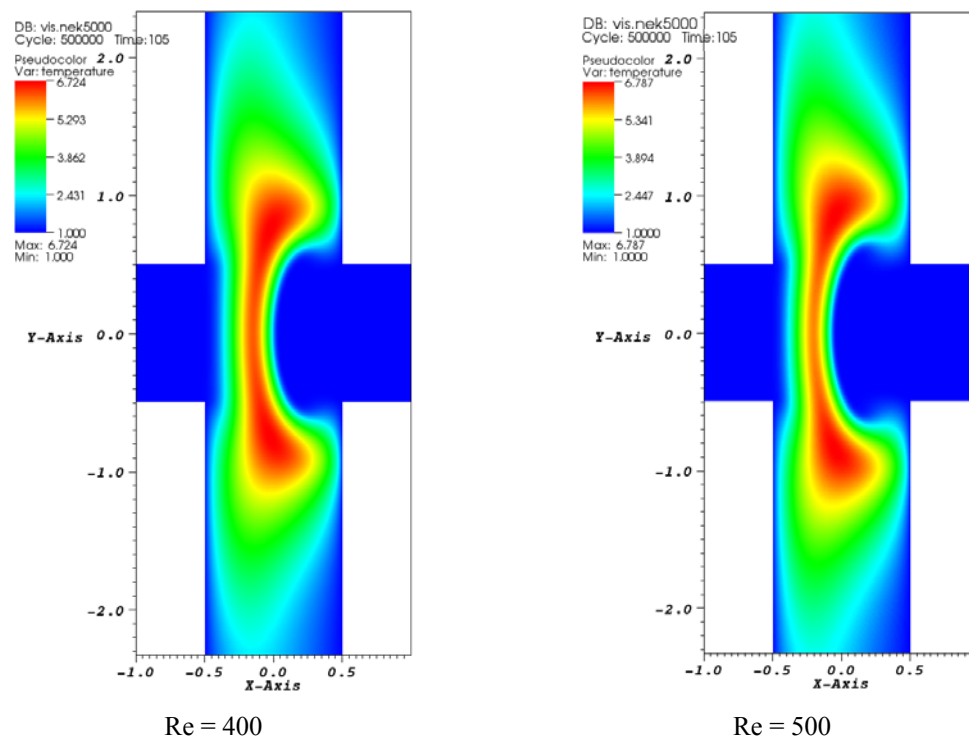
Επιπλέον στο ίδιο σχήμα (5.5) απεικονίζεται η κατανομή της θερμοκρασίας και του θερμικού ρυθμού απαγωγής θερμότητας κατά μήκος του άξονα της δέσμης για διάφορους αριθμούς Re. Με αύξηση του αριθμού Re παρατηρείται μία μετατόπιση της ζώνης αντίδρασης προς τα αριστερά (περιοχή καυσίμου), κάτι το οποίο οφείλεται

στην αυξημένη διάταση (strain) της φλόγας, λόγω του μεγαλύτερου αριθμού Re . Αυξημένος αριθμός Re συνεπάγεται μεγαλύτερη παροχή μάζας και αντίστοιχα ορμής από τα ακροφύσια εισαγωγής καυσίμου και οξειδωτικού μίγματος με τελικό αποτέλεσμα τη μετατόπιση της ζώνης αντίδρασης προς την πλευρά του οξειδωτικού και τη στένωση αυτής.



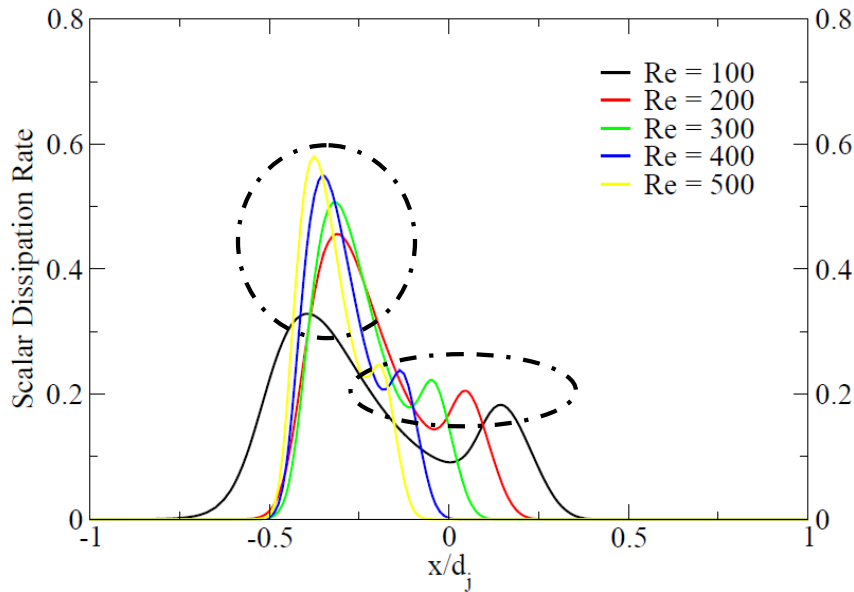
Σχήμα 5.6 (α): Μεγέθυνση ισοϋψών καμπυλών του θερμοκρασιακού πεδίου αφού η φλόγα έχει φτάσει σε μόνιμη κατάσταση για αριθμούς $Re = 100, 200, 300$. Αρχική ολική γεωμετρία (πάνω αριστερά) και σημείο στο οποίο γίνεται η μεγέθυνση (διακεκομμένη κόκκινη γραμμή).

Μεγαλύτερη στένωση της φλόγας παρατηρείται για αριθμό $Re = 500$, ενώ η μικρότερη για $Re = 100$ (σχήμα 5.6 (α) και (β)). Επιπλέον ο μεγαλύτερος ρυθμός διάχυσης του O_2 σε σχέση με αυτό του H_2 συνηγορεί και εντείνει περισσότερο το φαινόμενο της μετατόπισης της ζώνης αντίδρασης προς την πλευρά του καυσίμου. Όσο αφορά στη μεταβολή της θερμοκρασίας κατά μήκος του άξονα της αντικριστής δέσμης x/d_j (διακεκομμένες καμπύλες στο σχήμα 5.5), η συμπεριφορά που παρατηρείται είναι όμοια με την αναμενόμενη από τη θεωρία. Αύξηση του αριθμού Re προκαλεί μετατόπιση του θερμοκρασιακού προφίλ προς τα αριστερά (περιοχή καυσίμου), ενώ η μέγιστη θερμοκρασία που παρατηρείται σε κάθε περίπτωση μειώνεται.



Σχήμα 5.6 (β): Μεγέθυνση ισοϋψών καμπυλών του θερμοκρασιακού πεδίου αφού η φλόγα έχει φτάσει σε μόνιμη κατάσταση για αριθμούς $Re = 400, 500$.

Για την καλύτερη κατανόηση της συγκεκριμένης συμπεριφοράς της φλόγας στο σχήμα 5.7 (α) απεικονίζεται ο βαθμωτός ρυθμός σκέδασης σε σχέση με την κατάντη απόσταση του άξονα συμμετρίας της δέσμης για διάφορους αριθμούς Re .



Σχήμα 5.7 (α): βαθμωτός ρυθμός σκέδασης σε σχέση με την κατάντη απόσταση του άξονα συμμετρίας της δέσμης για διάφορους αριθμούς Re.

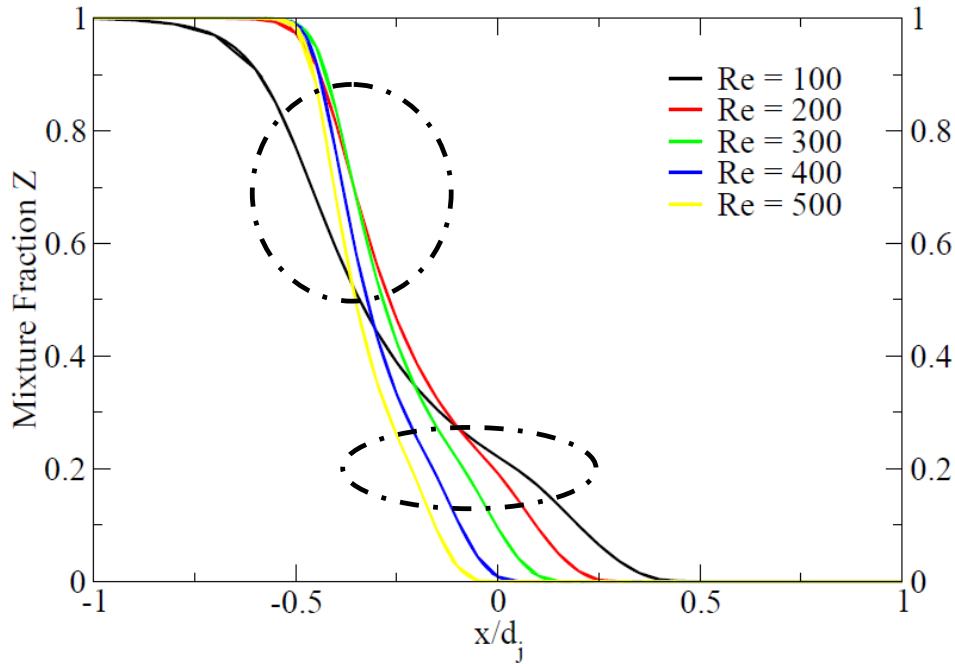
Το κλάσμα ανάμιξης Z υπολογίστηκε κατά τη διάρκεια της υπολογιστικής διεργασία με βάση τον ορισμό του κατά Bilger από τη σχέση:

$$Z = \frac{\frac{1}{2} \left(\frac{2 \cdot Y_{H_2}}{MB_{H_2}} - \frac{4 \cdot Y_{O_2}}{MB_{O_2}} + \frac{Y_H}{MB_H} - \frac{2 \cdot Y_O}{MB_O} - \frac{Y_{OH}}{MB_{OH}} - \frac{3 \cdot Y_{HO_2}}{MB_{HO_2}} - \frac{2 \cdot Y_{H_2O_2}}{MB_{H_2O_2}} \right) + \frac{2 \cdot Y_{O_{air}}}{MB_{O_2}}}{\frac{Y_{H_2}}{MB_{H_2}} + \frac{2 \cdot Y_{O_{air}}}{MB_{O_2}}} \quad (5.21)$$

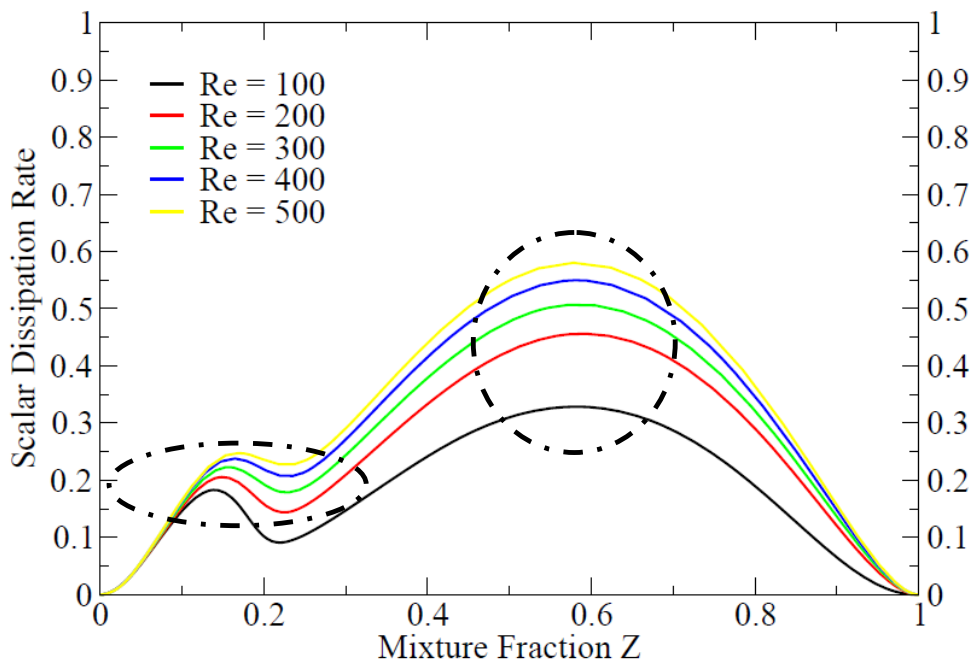
Όπου Z το κλάσμα ανάμιξης, Y_i το κλάσμα μάζας του χημικού στοιχείου i και MB το αντίστοιχο μοριακό βάρος αυτού. Ο βαθμωτός ρυθμός σκέδασης υπολογίστηκε με βάση τον ορισμό του από τον τύπο:

$$\chi = 2D \left(\frac{\partial Z}{\partial x} \cdot \frac{\partial Z}{\partial x} \right) \quad (5.22)$$

όπου χ ο βαθμωτός ρυθμός σκέδασης, $D = \lambda / \rho C_p$ ο συντελεστής διάχυσης, Z το κλάσμα ανάμιξης και $\partial Z / \partial x$ η κλίση του κλάσματος ανάμιξης σε σχέση με τις χωρικές συντεταγμένες. Επιπρόσθετα στα σχήματα 5.7 (β) και 5.7 (γ) απεικονίζεται η μεταβολή του κλάσματος ανάμιξης, κατά μήκος του άξονα συμμετρίας της αντικριστής δέσμης, καθώς επίσης και η μεταβολή του βαθμωτού ρυθμού σκέδασης, σε σχέση με το κλάσμα ανάμιξης Z για διάφορους αριθμούς Re.



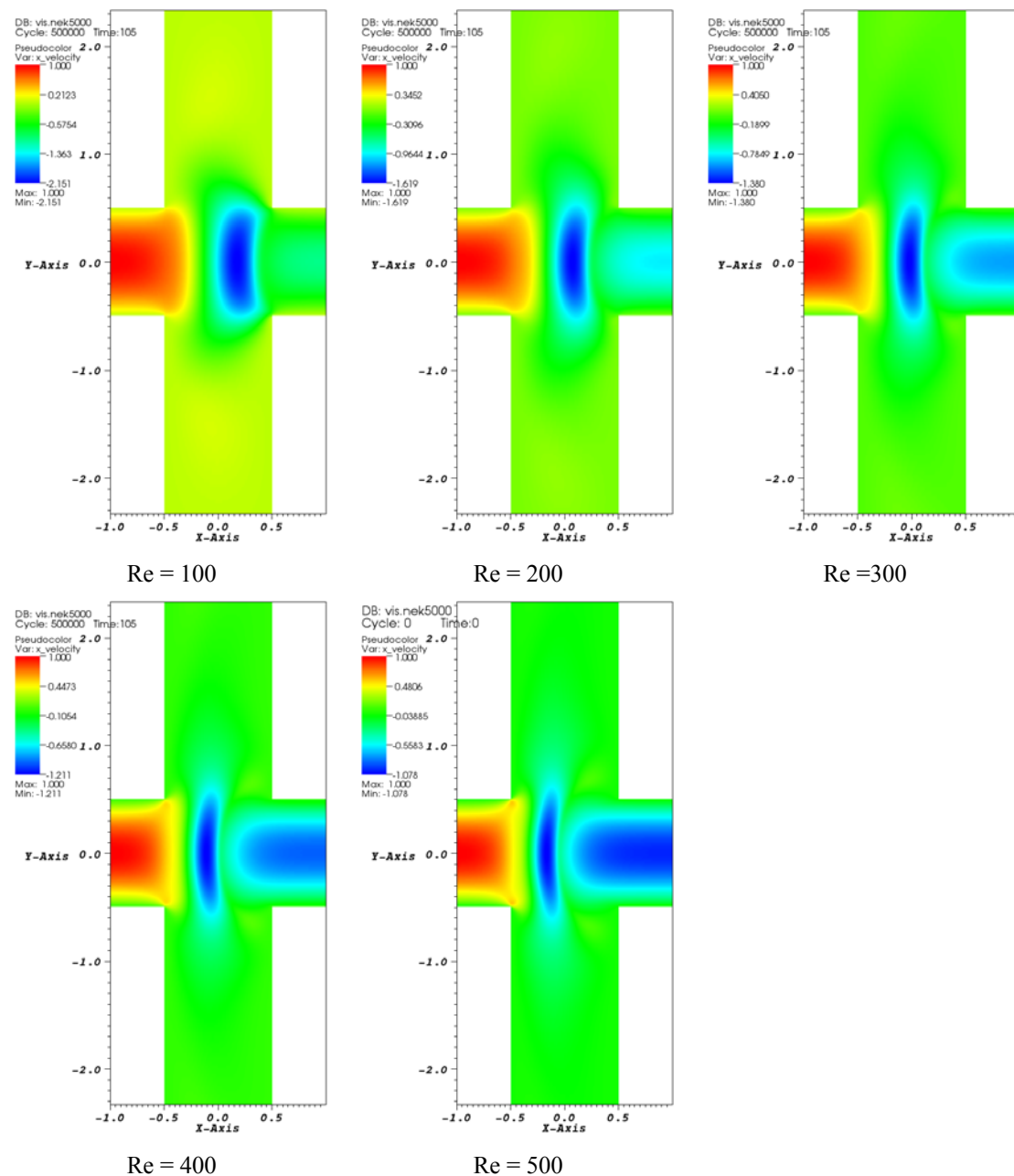
Σχήμα 5.7 (β): Μεταβολή του κλάσματος ανάμιξης κατά μήκος του άξονα συμμετρίας για διάφορους αριθμούς Re.



Σχήμα 5.7 (γ): Μεταβολή του βαθμωτού ρυθμού σκέδασης σε σχέση με το κλάσμα ανάμιξης Z κατά μήκος του άξονα συμμετρίας για διάφορους αριθμούς Re.

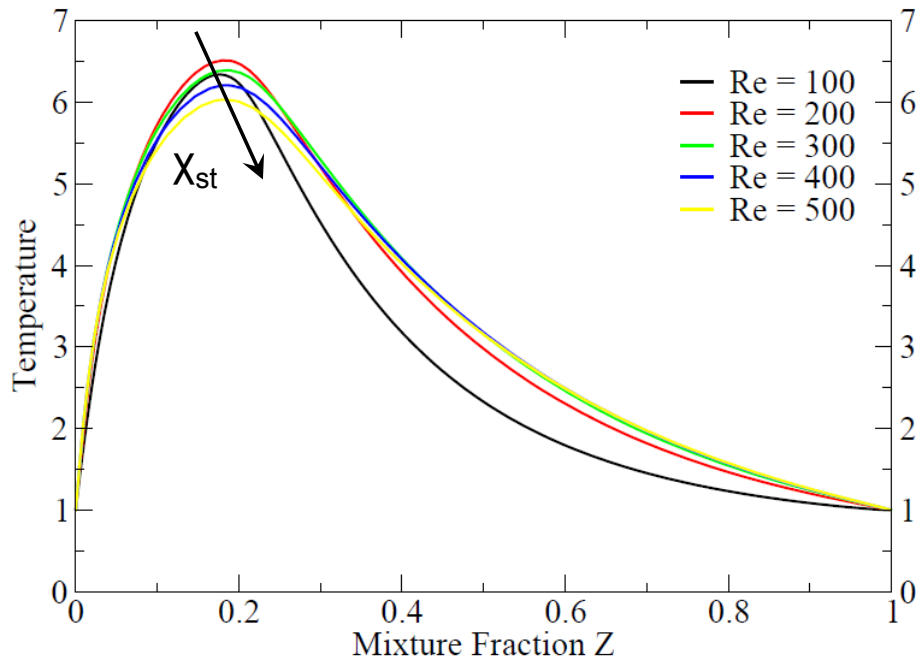
Αύξηση του αριθμού Re προκαλεί αύξηση της διάτασης της φλόγας (strain). Δεδομένου ότι ο βαθμωτός ρυθμός σκέδασης (scalar dissipation rate) χ , έχει διαστάσεις αντίστροφου χρόνου (sec^{-1}), όπως και η διάταση (strain) της φλόγας, η αύξηση αυτή του αριθμού Re, θα αντιστοιχεί σε αύξηση του βαθμωτού ρυθμού

σκέδασης (σχήμα 5.7 (α) και (γ)). Οι δύο κορυφές που παρουσιάζονται στο γράφημα του σχήματος 5.7 (α) και (γ) οφείλονται στη διαφορετική κλίση που παρουσιάζει το κλάσμα ανάμιξης Z κατά μήκος του άξονα της δέσμης (σχήμα 5.7 (β)). Με βάση την εξίσωση ορισμού του βαθμωτού ρυθμού σκέδασης, η κλίση του κλάσματος ανάμιξης Z αποτελεί μέτρο του μεγέθους του βαθμωτού ρυθμού σκέδασης. Όπως φαίνεται και στο σχήμα 5.7 (β), το κλάσμα ανάμιξης παρουσιάζει απότομες μεταβολές και / ή κλίσεις σε δύο σημεία (διακεκομμένοι μαύροι κύκλοι), στα οποία η ταχύτητα κατά τον άξονα x , έχει παρόμοια συμπεριφορά.



Σχήμα 5.8: Μεγέθυνση ισοϋψών καμπυλών της συνιστώσας x του ροϊκού πεδίου, αφού η φλόγα έχει φτάσει σε μόνιμη κατάσταση για αριθμούς $Re = 100, 200, 300, 400$ και 500 .

Η συμπεριφορά αυτή της μείωσης της μέγιστης θερμοκρασίας κατά μήκος του άξονα της γεωμετρίας της αντικριστής δέσμης με αύξηση του βαθμωτού ρυθμού σκέδασης απεικονίζεται και στο χώρο του κλάσματος ανάμιξης Z , όπου το τελευταίο αποτελεί τη μόνη ανεξάρτητη μεταβλητή (σχήμα 5.9).

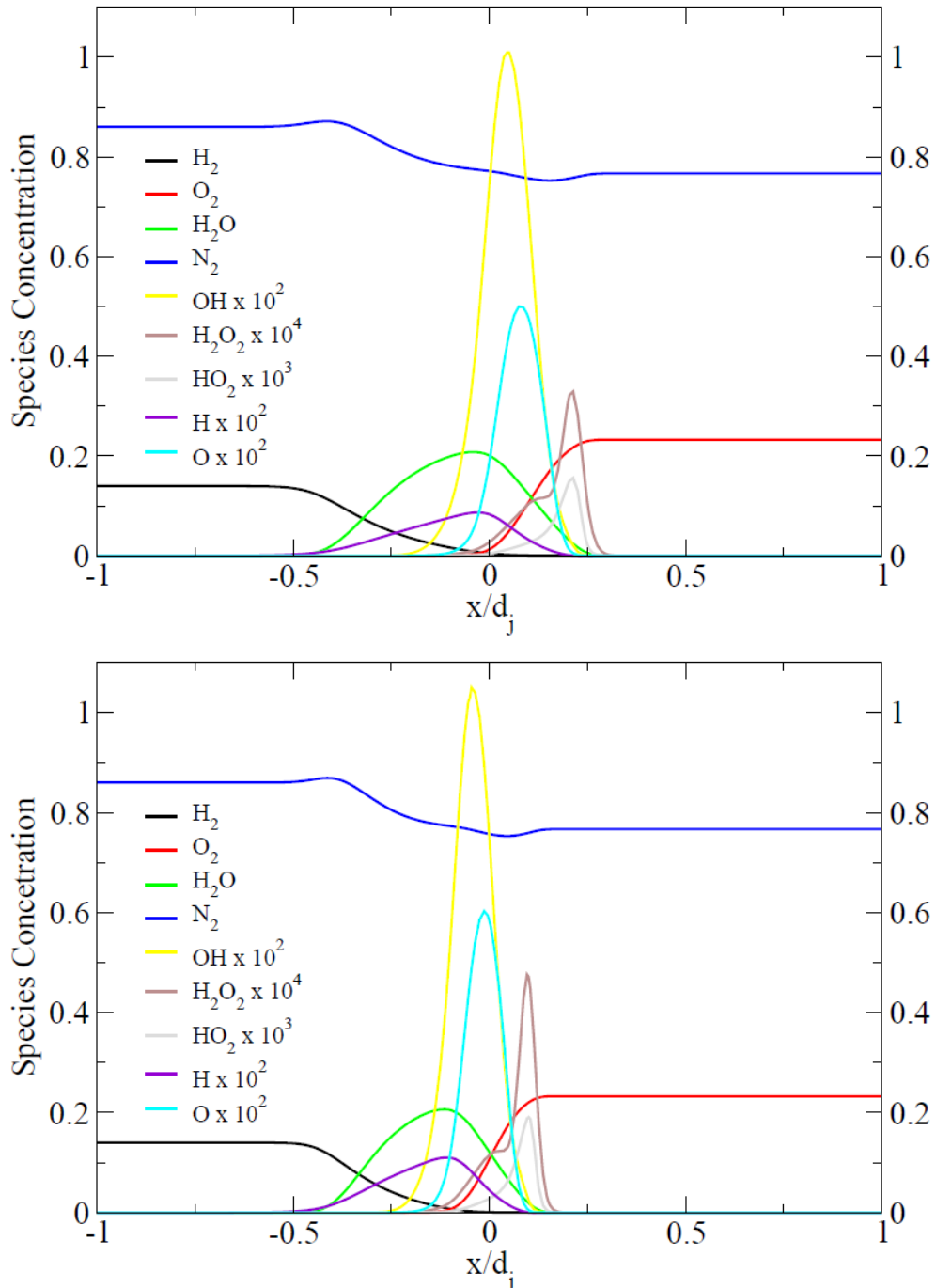


Σχήμα 5.9: Θερμοκρασιακή μεταβολή κατά μήκος του άξονα συμμετρίας της αντικριστής δέσμης σε σχέση με το κλάσμα ανάμιξης Z με βάση τον ορισμό κατά Bilger.

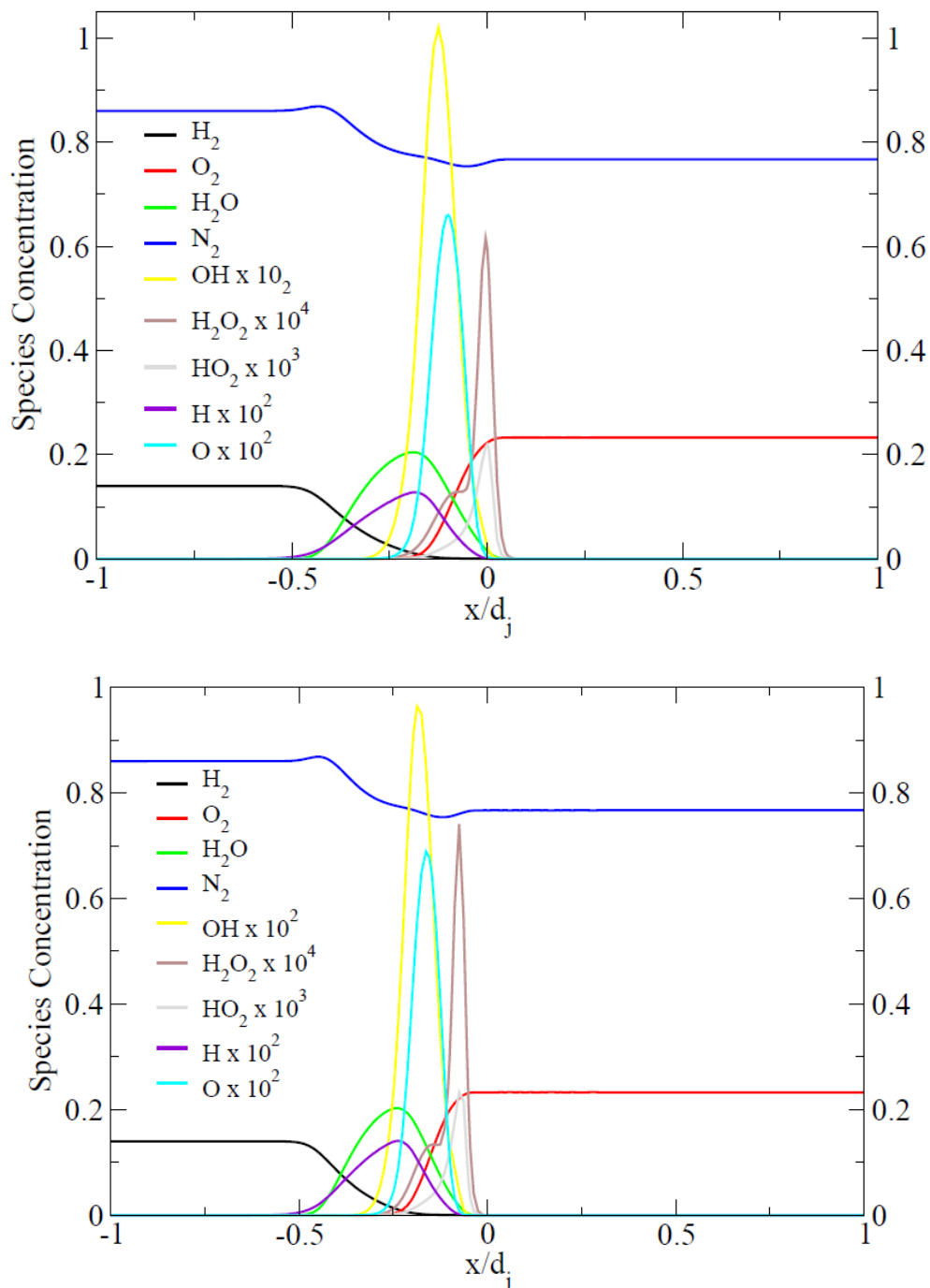
Παρέκκλιση από την προαναφερθείσα συμπεριφορά παρουσιάζεται στην περίπτωση στην οποία η καύση διεξάγεται με αριθμό $Re = 100$ (συνεχόμενη μαύρη καμπύλη στο σχήμα 5.9 και διακεκομμένη κίτρινη καμπύλη στο σχήμα 5.5). Για τόσο χαμηλούς αριθμούς Re , πέρα του βαθμωτού ρυθμού σκέδασης χ , ο οποίος αποτελεί μία από τις βασικότερες παραμέτρους, η φλόγα δέχεται και άλλες επιδράσεις εξαιτίας της μορφής της. Όπως προκύπτει από το σχήμα 5.6 (β) παρατηρείται ότι η φλόγα που δημιουργείται για $Re = 100$ έχει μεγάλο πάχος και βρίσκεται αρκετά κοντά στην περιοχή του κρύου ακροφυσίου και γενικότερα των τοιχωμάτων της γεωμετρίας, με τελικό αποτέλεσμα, οι απώλειες θερμότητας λόγω συναγωγής να είναι πολύ υψηλότερες (σχήμα 5.5 - κίτρινη συνεχόμενη καμπύλη), εξαιτίας της μεγαλύτερης θερμοκρασιακής διαφοράς, σε σχέση με αυτές που παρατηρούνται σε δομές φλογών με υψηλότερους αριθμούς Re (σχήμα 5.6 (β) και (γ) και καμπύλες σχήματος 5.5). Τελικό αποτέλεσμα των παραπάνω αποτελεί η μικρότερη τιμή της μέγιστης

θερμοκρασίας στην περίπτωση του $Re = 100$, σε σχέση με αυτή που παρουσιάζεται για $Re = 200$ (διακεκομμένη κόκκινη καμπύλη).

Στα σχήματα 5.10 (α) και (β) αναπαριστάται η μεταβολή του κλάσματος μάζας των αντιδρώντων και προϊόντων του χημικού μηχανισμού καύσης του H_2 σε σχέση με την κατά μήκος απόσταση του άξονα συμμετρίας της δέσμης για $Re = 200, 300, 400, 500$.



Σχήμα 5.10 (α): Μεταβολή του κλάσματος μάζας των αντιδρώντων και προϊόντων του χημικού μηχανισμού καύσης του H_2 σε σχέση με την κατά μήκος απόσταση του άξονα συμμετρίας της δέσμης για $Re = 200$ και 300 .

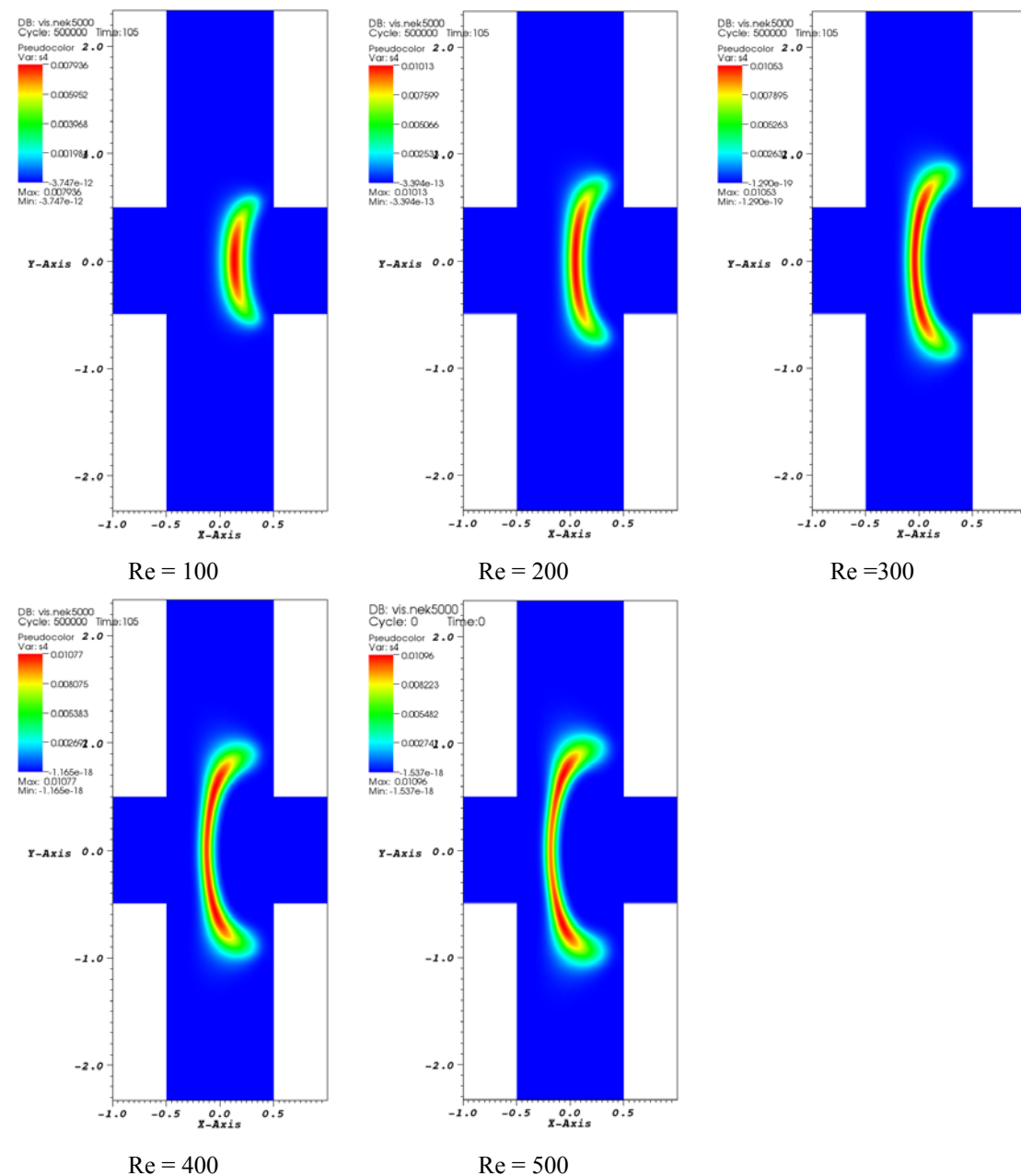


Σχήμα 5.10 (β): Μεταβολή του κλάσματος μάζας των αντιδρώντων και προϊόντων του χημικού μηχανισμού καύσης του H_2 σε σχέση με την κατά μήκος απόσταση του άξονα συμμετρίας της δέσμης για $Re = 400$ και 500 .

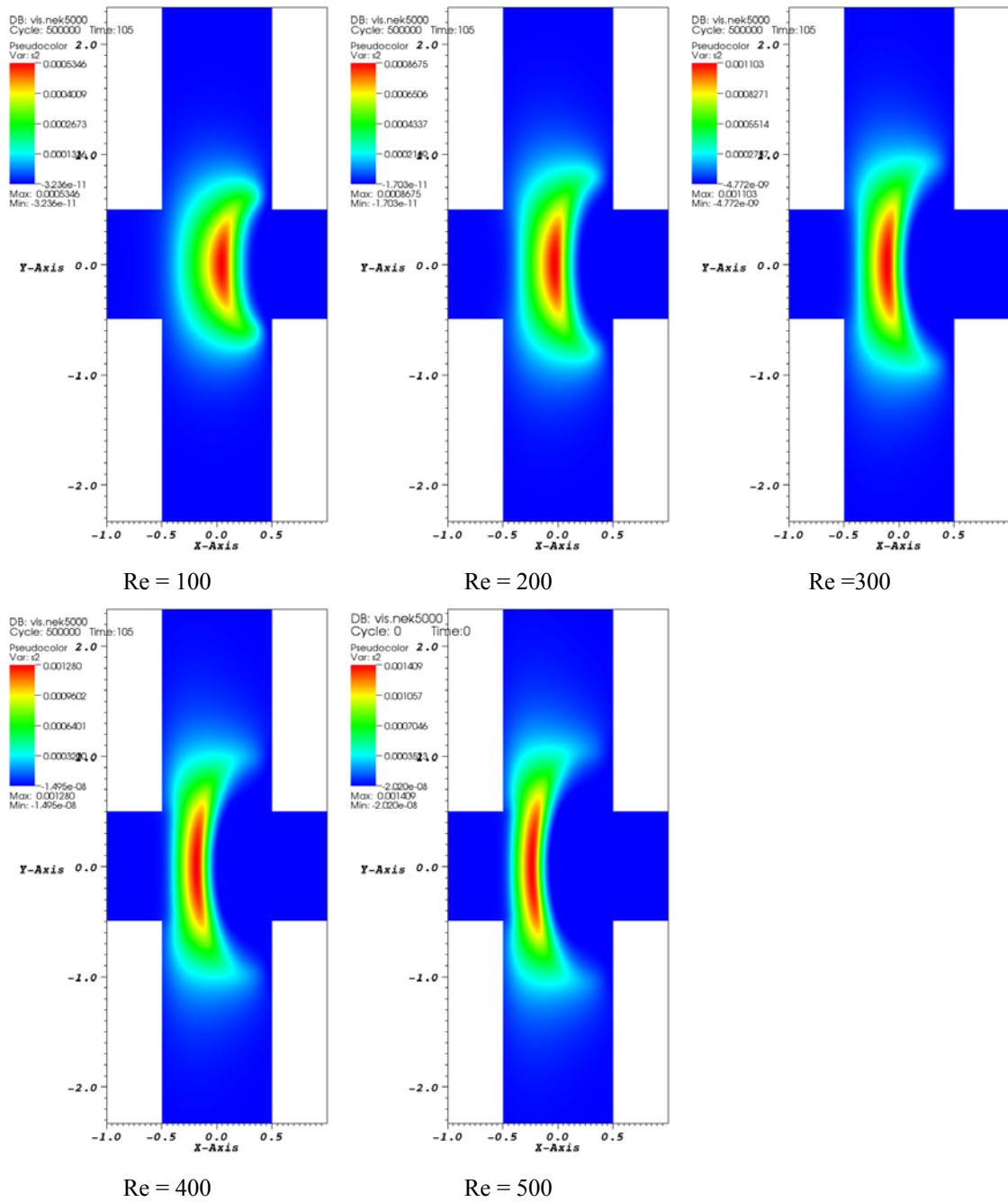
Το αντίστοιχο διάγραμμα για αριθμό $Re = 100$ παρουσιάστηκε προηγουμένως στο σχήμα 5.4. Από την παρατήρηση των σχημάτων προκύπτει η μείωση της ζώνης αντίδρασης και η αύξηση των αντίστοιχων διάχυσης των αντιδρώντων συστατικών, τα οποία αποτελούν το καύσιμο μίγμα του H_2 και N_2 (αριστερό ακροφύσιο της

γεωμετρικής διάταξης) και το οξειδωτικό μίγμα του αέρα (δεξιό ακροφύσιο της γεωμετρικής διάταξης).

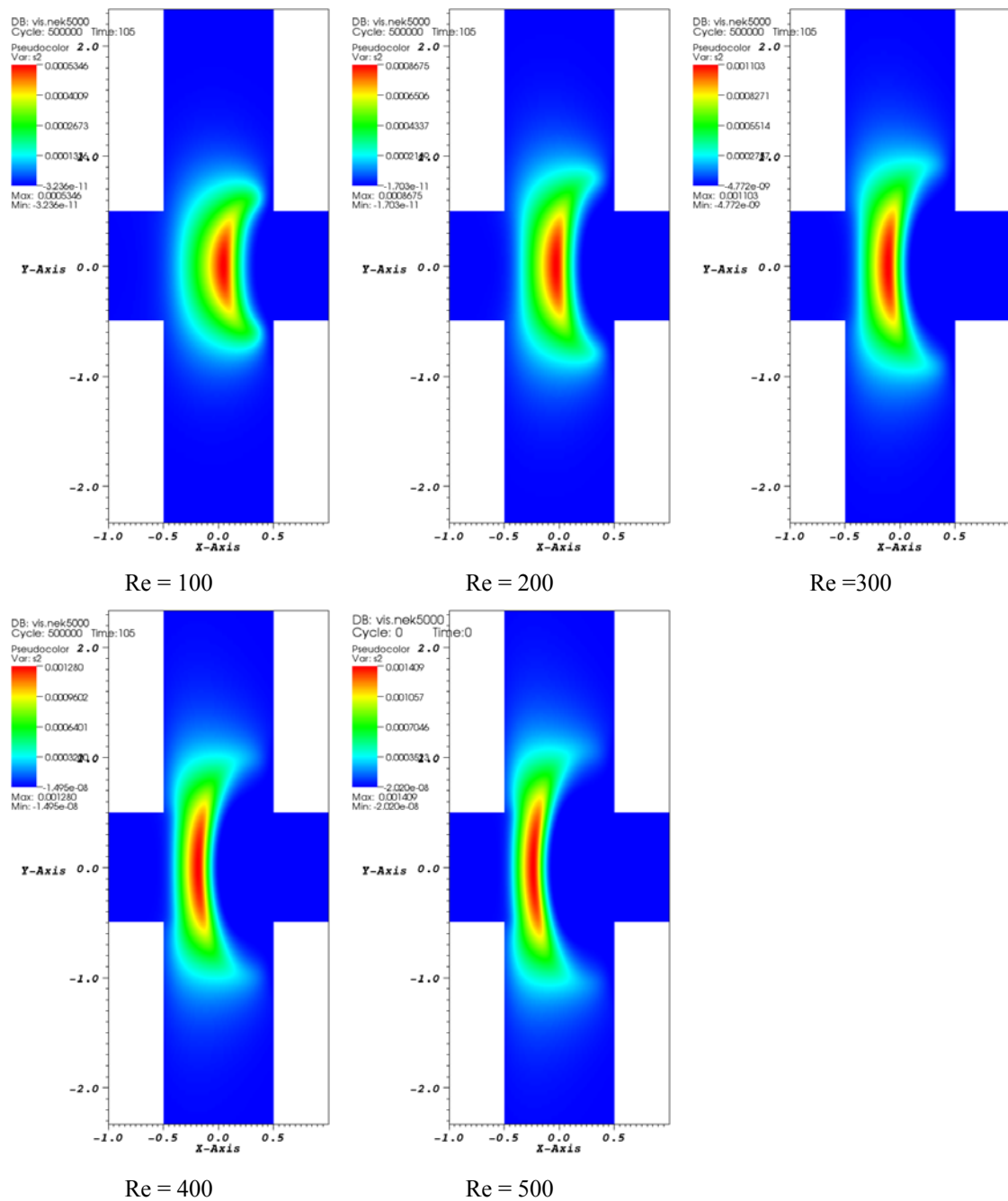
Στη συνέχεια της ενότητας 5.4 παρουσιάζονται ποιοτικά διαγράμματα ορισμένων προϊόντων της χημικής αντίδρασης καύσης, στα οποία παρατηρείται η μείωση της ζώνης αντίδρασης με αύξηση του αριθμού Re, συμπεριφορά η οποία παρατηρήθηκε και αναλύθηκε προηγουμένως. Στο σχήμα 5.11 παρουσιάζεται το πεδίο του κλάσματος μάζας του OH για διάφορους αριθμούς Re, ενώ στα σχήματα 5.12 και 5.13 το αντίστοιχο του χημικού στοιχείου O και H.



Σχήμα 5.11: Μεγέθυνση ισοϋψών καμπυλών του πεδίου του κλάσματος μάζας του χημικού στοιχείου OH, αφού η φλόγα έχει φτάσει σε μόνιμη κατάσταση για αριθμούς $Re = 100, 200, 300, 400$ και 500 .



Σχήμα 5.12: Μεγέθυνση ισοϋψών καμπυλών του πεδίου του κλάσματος μάζας του χημικού στοιχείου H, αφού η φλόγα έχει φτάσει σε μόνιμη κατάσταση για αριθμούς $Re = 100, 200, 300, 400$ και 500 .



Σχήμα 5.13: Μεγέθυνση ισοϋψών καμπυλών του πεδίου του κλάσματος μάζας του χημικού στοιχείου O, αφού η φλόγα έχει φτάσει σε μόνιμη κατάσταση για αριθμούς $Re = 100, 200, 300, 400$ και 500 .

Όπως προκύπτει από την παρατήρηση των σχημάτων, με αύξηση του αριθμού Re , η οποία μεταφράζεται σε αύξηση της διάτασης (strain) της φλόγας και του βαθμωτού ρυθμού σκέδασης, παρατηρείται μετατόπιση της δομής της φλόγας προς τα αριστερά (περιοχή καυσίμου) με ταυτόχρονη στένωση αυτής.

5.5 Σύγκριση αποτελεσμάτων άμεσης προσομοίωσης με τα αντίστοιχα του κώδικα FlameMaster στο χώρο του κλάσματος ανάμιξης Z

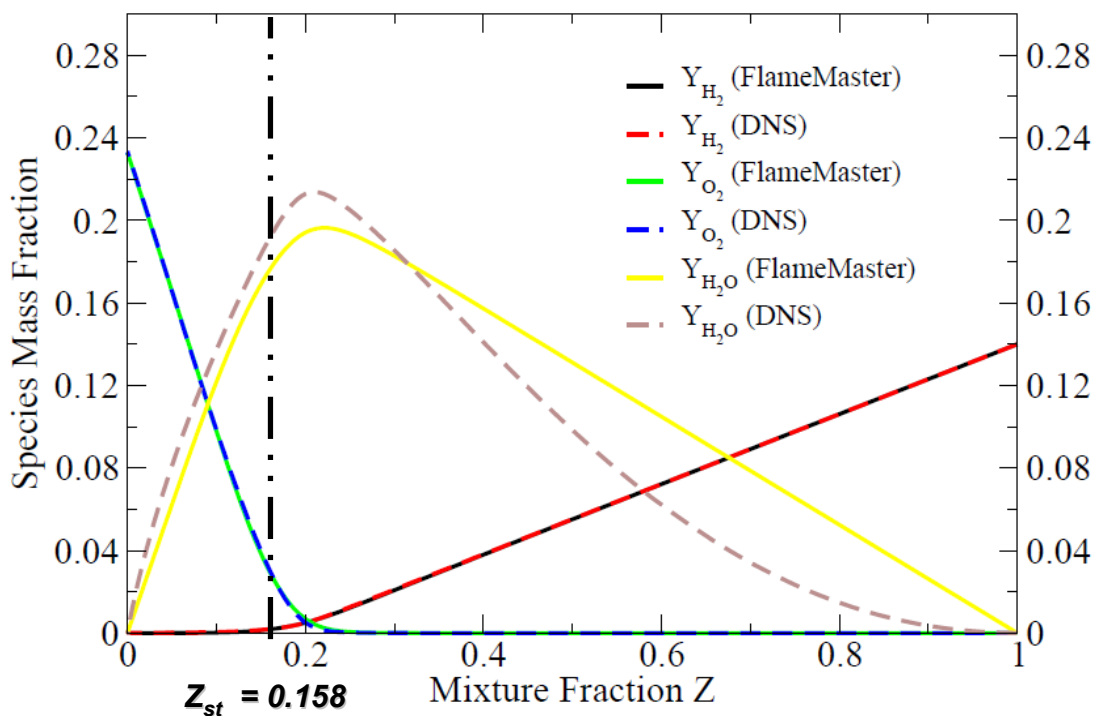
Η επίλυση των εξισώσεων των σταθερών φλογιδίων (εξίσωση 5.3) έγινε με τη χρησιμοποίηση του υπολογιστικού κώδικα FlameMaster. Όπως αναφέρθηκε και στην ενότητα 5.1 η τελική λύση αυτής στο χώρο του κλάσματος ανάμιξης αποτελεί συνάρτηση του βαθμωτού ρυθμού σκέδασης (scalar dissipation rate) χ και των οριακών συνθηκών. Με βάση τα παραπάνω, εάν για μία δεδομένη γεωμετρία καθοριστούν οι οριακές συνθήκες και ο βαθμωτός ρυθμός σκέδασης, ο οποίος εξαρτάται από την κλίση του κλάσματος ανάμιξης (σχέση (5.2)), τότε είναι δυνατός ο εκ των υστέρων υπολογισμός διαφόρων λύσεων της εξίσωσης (5.3) και η δημιουργία προϋπολογισμένων μεγεθών παραμετροποιημένα με το βαθμωτό ρυθμό σκέδασης χ . Το τελικό αποτέλεσμα που προκύπτει είναι της μορφής $\Phi(Z, \chi_{st})$, όπου η μεταβλητή Φ αντικατοπτρίζει οποιοδήποτε βαθμωτό μέγεθος από τις λύσεις των εξισώσεων σταθερών φλογιδίων στο χώρο του κλάσματος ανάμιξης.

Η επίλυση των εξισώσεων των σταθερών φλογιδίων αφορούσε στην πρότυπη γεωμετρία αντικριστής δέσμης (Opposed Jet), στο χώρο του κλάσματος ανάμιξης Z. Κύριες μεταβλητές που χρησιμοποιήθηκαν ως μεταβλητές σύγκρισης των αποτελεσμάτων με τα αντίστοιχα της άμεσης προσομοίωσης αποτέλεσαν τα κλάσματα μάζας του καυσίμου H_2 , του οξειδωτικού O_2 , του παραγόμενου H_2O και κυρίως της θερμοκρασίας.

Όσο αφορά στις οριακές συνθήκες των εξισώσεων των σταθερών φλογιδίων, χρησιμοποιήθηκαν οι αντίστοιχες της άμεσης προσομοίωσης. Συγκεκριμένα τα κλάσματα μάζας του μίγματος καυσίμου λήφθηκαν ίσα με $Y_{H_2} = 0.14$ και $Y_{N_2} = 0.86$, ενώ τα αντίστοιχα του οξειδωτικού με $Y_{O_2} = 0.2329$ και $Y_{N_2} = 0.7671$. Τόσο το ρεύμα του καυσίμου, όσο και αυτό του αέρα εισέρχονται στη γεωμετρία με σταθερή θερμοκρασία 298K, ενώ ο χημικός μηχανισμός καύσης του H_2 είναι όμοιος με αυτόν που χρησιμοποιήθηκε στην άμεση προσομοίωση. Επιπλέον, παράμετρος εισόδου για την επίλυση των εξισώσεων των σταθερών φλογιδίων αποτελεί ο βαθμωτός ρυθμός σκέδασης χ . Η τιμή του επιλέχθηκε με βάση την απαίτηση της ίδιας μέγιστης

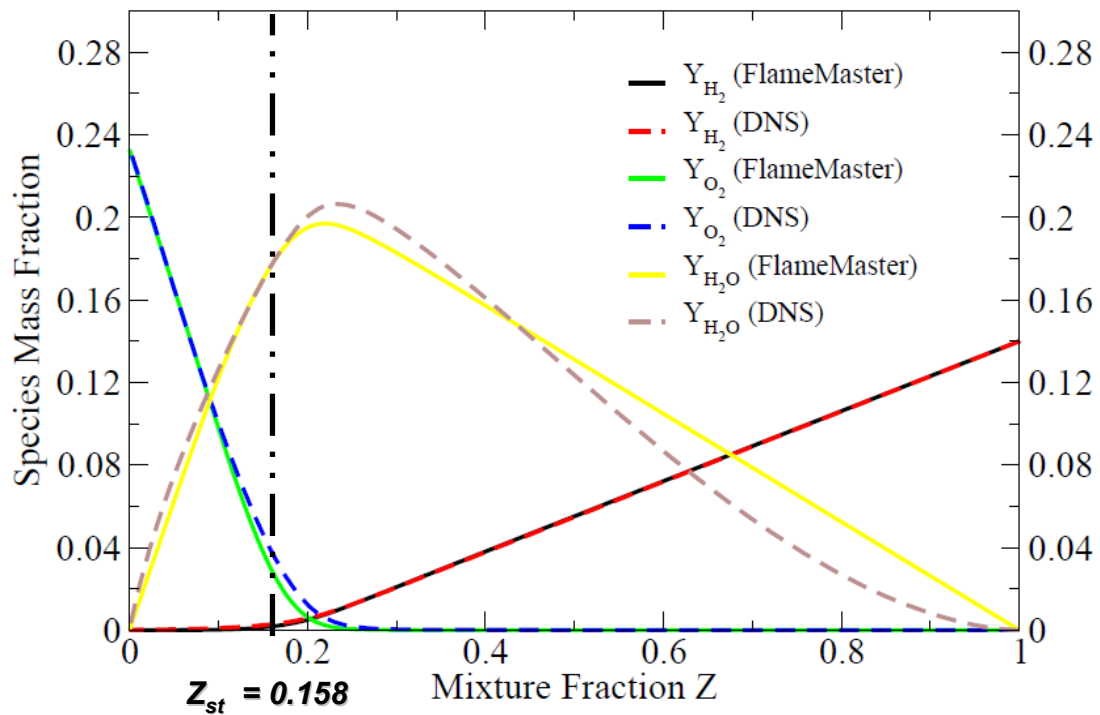
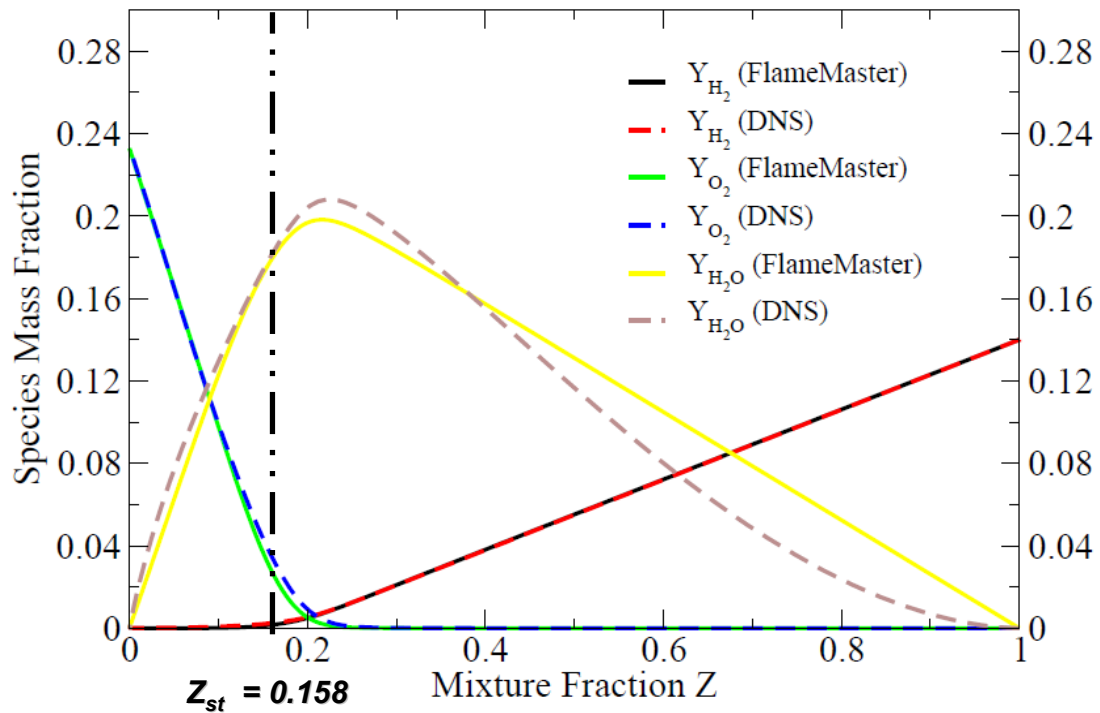
θερμοκρασίας μεταξύ των δύο διαφορετικών προσομοιώσεων (άμεσης προσομοίωσης και επίλυση με τον κώδικα FlameMaster). Στο σημείο αυτό πρέπει να τονιστεί ότι οι αριθμοί Lewis για τα χημικά στοιχεία του χημικού μηχανισμού στην περίπτωση χρησιμοποίησης του κώδικα FlameMaster είναι ίσοι με τη μονάδα. Διαφορετικοί αριθμοί Lewis για τα διάφορα χημικά στοιχεία είναι δυνατό να οριστούν στην περίπτωση επίλυσης των μεταβατικών εξισώσεων των φλογιδίων, κάτι το οποίο δεν μελετήθηκε στην παρούσα διδακτορική διατριβή, καθόσον όπως αναφέρθηκε δε μελετήθηκαν μεταβατικά φαινόμενα όπως, ανύψωση της φλόγας (lift-off), σβήσιμο (extinction) ή επανάφλεξης (re-ignition) αυτής.

Στο σχήμα 5.14 παρουσιάζεται η σύγκριση μεταξύ των αποτελεσμάτων του κλάσματος μάζας του H_2 , του O_2 και του H_2O σε συνάρτηση με το κλάσμα ανάμιξης Z της μεθόδου άμεσης προσομοίωσης (διακεκομμένες καμπύλες) και των αντίστοιχων του κώδικα FlameMaster (συνεχής καμπύλες) για αριθμό $Re = 100$.

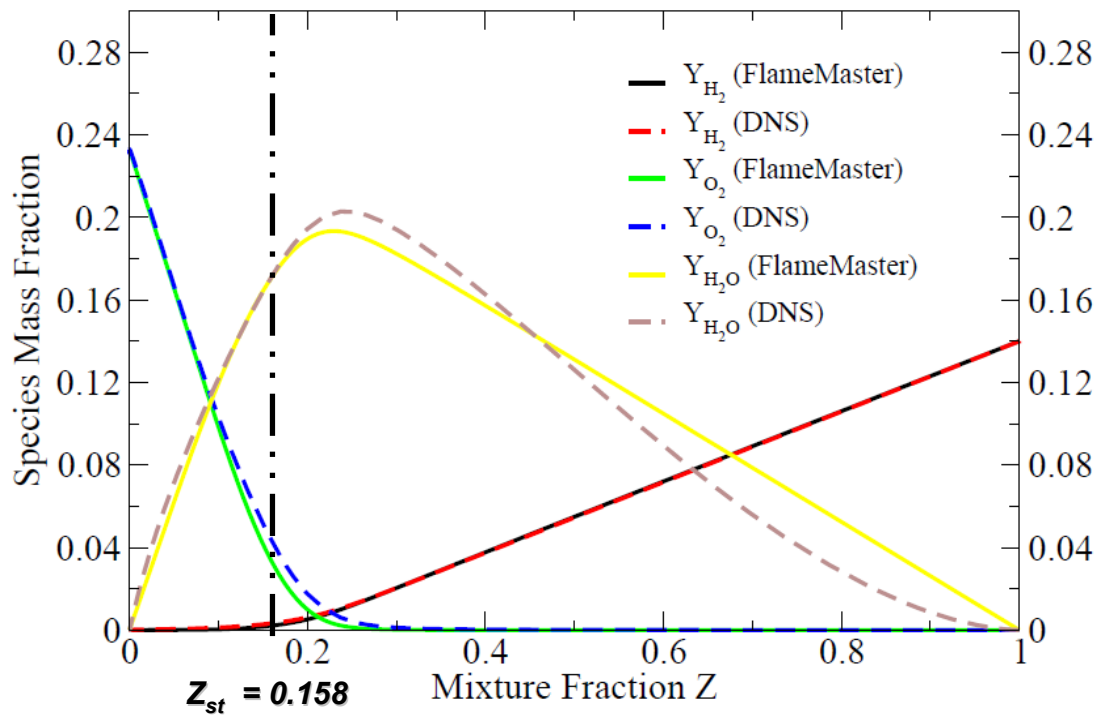
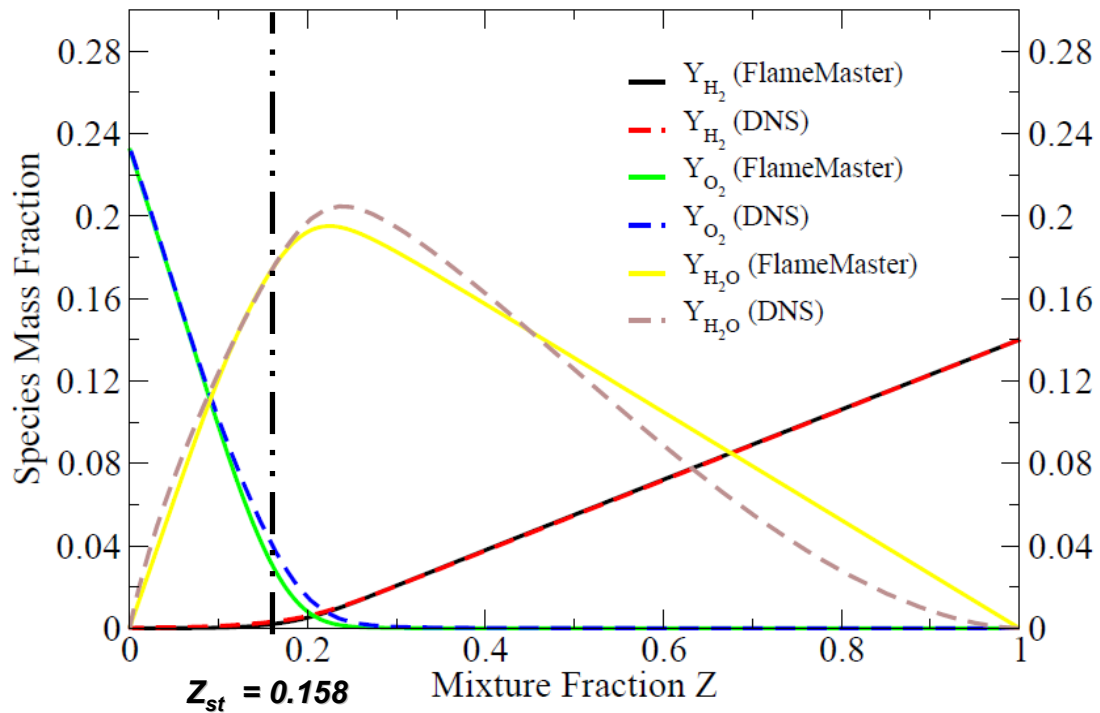


Σχήμα 5.14: Κλάσμα μάζας H_2 , O_2 και H_2O σε σχέση με το κλάσμα ανάμιξης Z για αριθμό $Re = 100$ με βάση την άμεση προσομοίωση (διακεκομμένες καμπύλες) και τα αποτελέσματα του υπολογιστικού κώδικα FlameMaster (συνεχείς καμπύλες).

Στα σχήματα 5.15 και 5.16 παρουσιάζεται η αντίστοιχη σύγκριση που απεικονίζεται στο διάγραμμα του σχήματος 5.14 για αριθμούς $Re = 200, 300, 400$ και 500 .



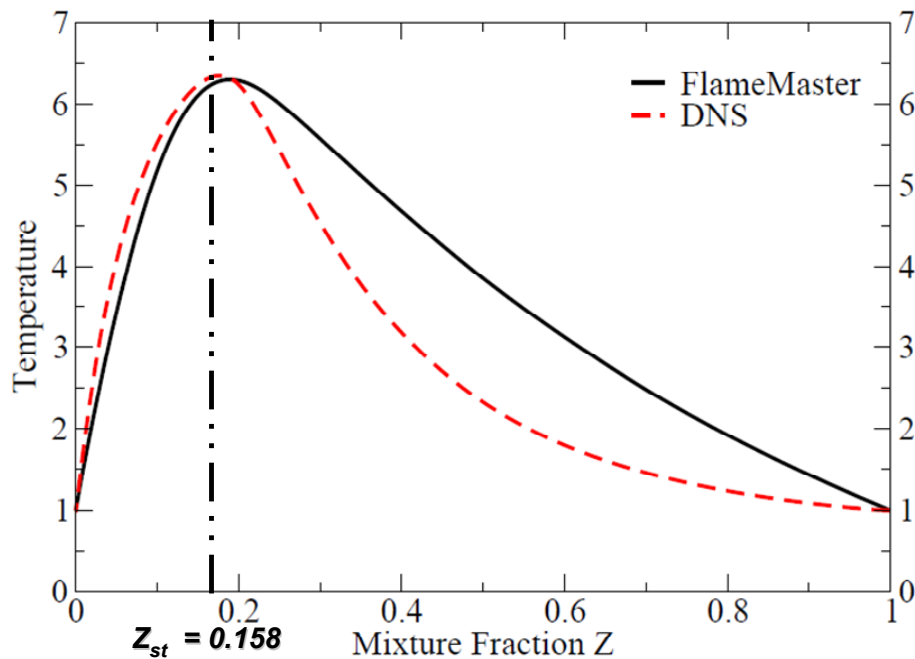
Σχήμα 5.15: Κλάσμα μάζας H_2 , O_2 και H_2O σε σχέση με το κλάσμα ανάμιξης Z για αριθμό $Re = 200$ (επάνω διάγραμμα) και για $Re = 300$ (κάτω διάγραμμα) με βάση την άμεση προσομοίωση (διακεκομμένες καμπύλες) και τα αποτελέσματα του υπολογιστικού κώδικα FlameMaster (συνεχείς καμπύλες).



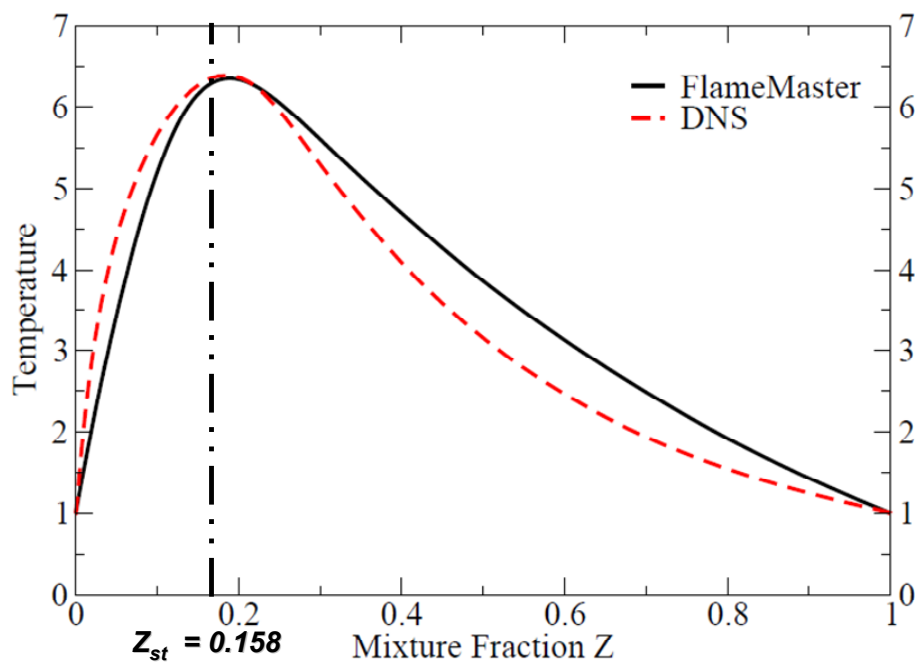
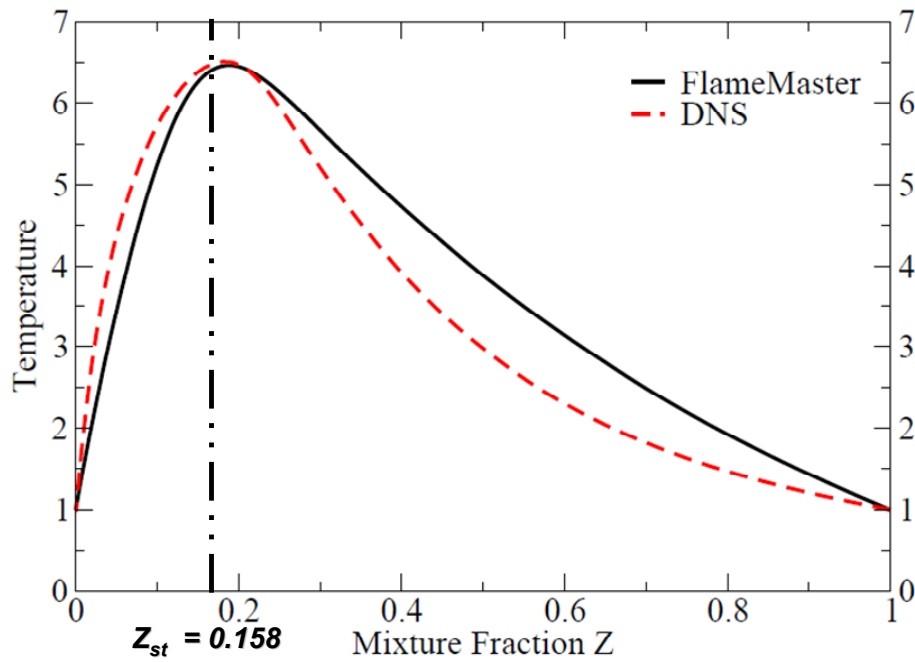
Σχήμα 5.16: Κλάσμα μάζας H_2 , O_2 και H_2O σε σχέση με το κλάσμα ανάμιξης Z για αριθμό $Re = 400$ (επάνω διάγραμμα) και για $Re = 500$ (κάτω διάγραμμα) με βάση την άμεση προσομοίωση (διακεκομμένες καμπύλες) και τα αποτελέσματα του υπολογιστικού κώδικα FlameMaster (συνεχείς καμπύλες).

Η πρόβλεψη των κλασμάτων μάζας κρίνεται ικανοποιητική για τους διάφορους αριθμούς Re , οι οποίοι αντιστοιχούν στην ουσία σε διαφορετικούς βαθμωτούς

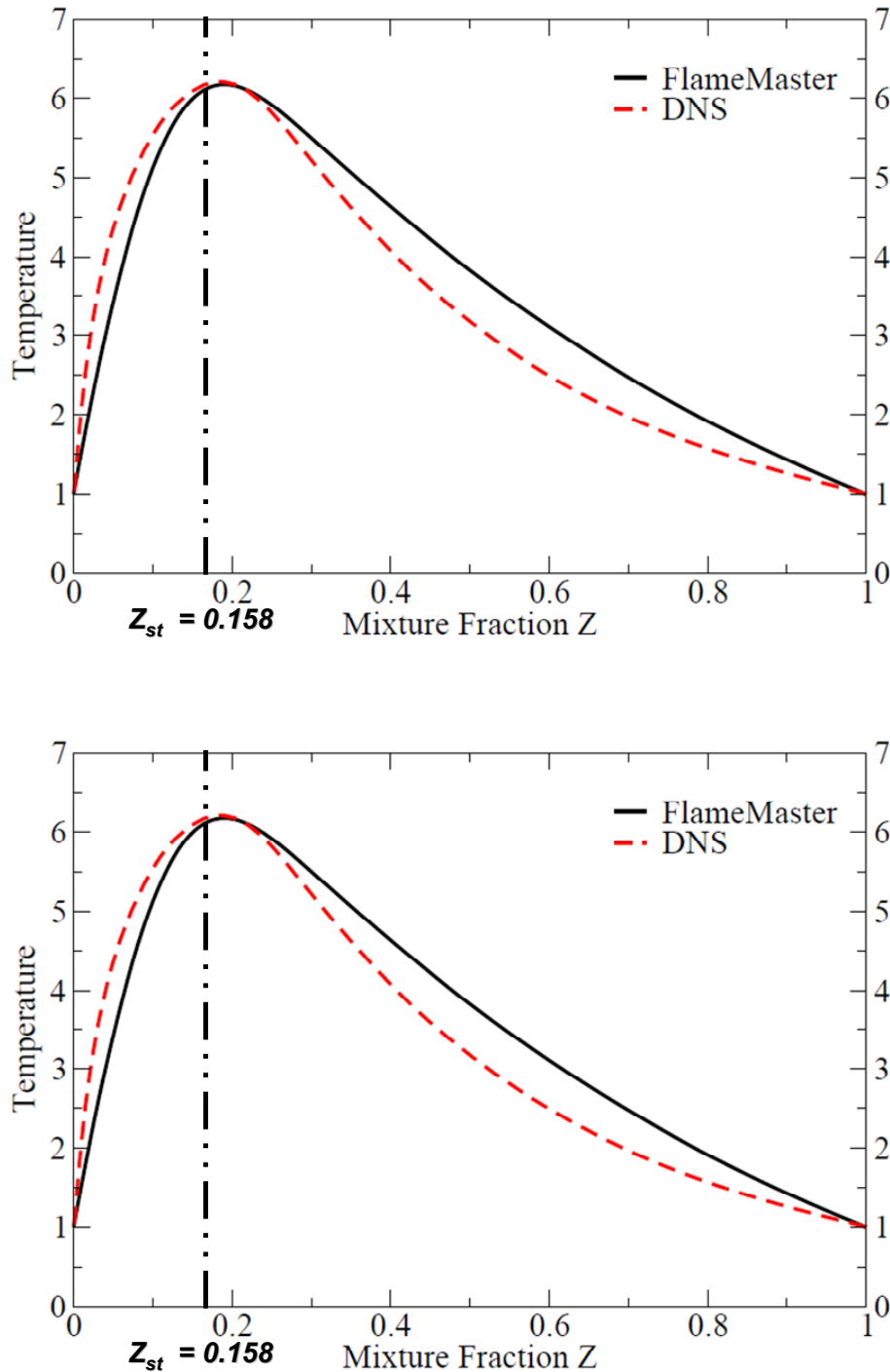
ανάμιξης χ , ιδιαίτερα για τα χημικά στοιχεία του H_2 και του O_2 . Όσο αφορά στην πρόβλεψη του κλάσματος μάζας του H_2O η διαφορά μεταξύ της πρόβλεψης της άμεσης προσομοίωσης και του αποτελέσματος του υπολογιστικού εργαλείου FlameMaster, για τιμές του κλάσματος ανάμιξης Z μεγαλύτερες του 0.4 αποκλίνουν, χωρίς όμως ιδιαίτερα μεγάλες διαφορές τιμών. Ο λόγος αυτής της απόκλισης και της κυρτότητας που εμφανίζεται στην καμπύλη του κλάσματος μάζας του H_2O οφείλεται κυρίως στο γεγονός της χρησιμοποίησης σταθερών αριθμών $Le = 1$ στην περίπτωση χρησιμοποίησης του κώδικα FlameMaster και στην έλλειψη επιδράσεων της διαφορικής διάχυσης μεταφοράς (differential diffusion effects). Παρόμοια συμπεριφορά παρατηρείται και στην πρόβλεψη του θερμοκρασιακού προφίλ, το οποίο απεικονίζεται στα σχήματα 5.16, 5.17 και 5.18.



Σχήμα 5.16: Αδιάστατη θερμοκρασία σε σχέση με το κλάσμα ανάμιξης Z για αριθμό $Re = 100$ με βάση την άμεση προσομοίωση (διακεκομμένη κόκκινη καμπύλη) και τα αποτελέσματα του υπολογιστικού κώδικα FlameMaster (συνεχής μαύρη καμπύλη).



Σχήμα 5.17: Αδιάστατη θερμοκρασία σε σχέση με το κλάσμα ανάμιξης Z για αριθμό $Re = 200$ (επάνω διάγραμμα) και για $Re = 300$ (κάτω διάγραμμα) με βάση την άμεση προσομοίωση (διακεκομμένη κόκκινη καμπύλη) και τα αποτελέσματα του υπολογιστικού κώδικα FlameMaster (συνεχής μαύρη καμπύλη).



Σχήμα 5.18: Αδιάστατη θερμοκρασία σε σχέση με το κλάσμα ανάμιξης Z για αριθμό $Re = 400$ (επάνω διάγραμμα) και για $Re = 500$ (κάτω διάγραμμα) με βάση την άμεση προσομοίωση (διακεκομμένη κόκκινη καμπύλη) και τα αποτελέσματα του υπολογιστικού κώδικα FlameMaster (συνεχής μαύρη καμπύλη).

Η μέγιστη τιμή της θερμοκρασίας προσεγγίζεται ικανοποιητικά από την επίλυση των εξισώσεων των σταθερών φλογιδίων, ενώ παράλληλα δεν είναι δυνατή η πρόβλεψη της κυρτότητας της καμπύλης που παρουσιάζεται στην περίπτωση της άμεσης

προσομοίωσης λόγω της θεώρησης αριθμών Le ίσων με τη μονάδα και επιπρόσθετα της αμελητέας διαφορικής διάχυσης μεταφοράς. Η αδυναμία που παρουσιάζει το μοντέλο όσο αφορά στην πρόβλεψη της τιμής του κλάσματος μάζας των μεταβλητών και της θερμοκρασίας, επιδέχεται διόρθωσης στα τελικά αποτελέσματα σύζευξης του μοντέλου φλογιδίων με τον κώδικα των φασματικών πεπερασμένων στοιχείων και τη μέθοδο προσομοίωσης μεγάλων δινών, μέσω της χρησιμοποίησης μίας συνάρτησης πιθανότητας [Steven van der Hoeven - 2007, Pitsch – 2005, Law - 2006], με βάση την οποία καθορίζεται η τελική τιμή της φιλτραρισμένης με βάση την πυκνότητα, μεταβλητής. Για το λόγο αυτό η μικρή απόκλιση μεταξύ των αποτελεσμάτων της άμεσης προσομοίωσης και των αντίστοιχων που προέκυψαν με τη χρησιμοποίηση του κώδικα FlameMaster δεν αποτελεί εμπόδιο στην περαιτέρω εφαρμογή και / ή σύζευξη του τελευταίου με τον κώδικα των φασματικών πεπερασμένων στοιχείων.

5.6 Συμπεράσματα

Στο παρόν κεφάλαιο μελετήθηκε η δυνατότητα επίλυσης του 2^{ου} προβλήματος το οποίο προκύπτει με την εισαγωγή του κλάσματος ανάμιξης στην περίπτωση επίλυσης τυρβωδών φλογών διάχυσης και αφορά στον καθορισμό της δομής της φλόγας μέσω της επίλυσης των εξισώσεων των φλογιδίων. Για την αριθμητική λύση των τελευταίων στο χώρο του κλάσματος ανάμιξης, χρησιμοποιήθηκε ο υπολογιστικός κώδικας FlameMaster, κύριο λόγο επιλογής του οποίου αποτέλεσε το γεγονός της εμπορικής του διαθεσιμότητας και της μικρής του απαίτησης σε υπολογιστική ισχύ.

Επιπρόσθετα χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο σταθερών φλογιδίων και όχι το γενικό μοντέλο των μεταβατικών φλογιδίων. Βασική αιτία είναι το μικρότερο υπολογιστικό κόστος του πρώτου, καθώς επίσης και το γεγονός ότι δεν μελετήθηκαν φαινόμενα ανύψωσης φλόγας (lift-off), σβησίματος (extinction) ή επανάφλεξης (re-ignition), τα οποία είναι άρρηκτα συνδεδεμένα με τη χρονική κατάσταση της φλόγας και δεν είναι δυνατό να προσομοιωθούν με το μοντέλο των σταθερών φλογιδίων

Για την πιστοποίηση των αποτελεσμάτων του υπολογιστικού κώδικα FlameMaster, επιλέχθηκε η πρότυπη γεωμετρία της αντικριστής δέσμης (Opposed Jet) με καύσιμο H₂ διαλυμένο με N₂ και οξειδωτικό αέρα, καθόσον οι λύσεις της συγκεκριμένης γεωμετρίας έχουν χρησιμοποιηθεί στο παρελθόν [Ihme - 2005, Sheikhi - 2005] για τη μοντελοποίηση τυρβωδών φλογών διάχυσης. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν

συγκρίθηκαν με αυτά άμεσων προσομοιώσεων (Direct Numerical Simulation - DNS) με τη χρησιμοποίηση αναλυτικής πινακοποιημένης χημείας που πραγματοποιήθηκαν με βάση τον υπάρχοντα διαθέσιμο κώδικα των φασματικών πεπερασμένων στοιχείων. Η παραμετρική μελέτη έγινε με τη χρησιμοποίηση 5 διαφορετικών αριθμών $Re = 100, 200, 300, 400$ και 500 , που αφορούν στη στρωτή ροή. Οι διαφορετικοί αριθμοί Re οδηγούν σε διαφορετικό βαθμωτό ρυθμό σκέδασης (scalar dissipation rate), ο οποίος αλλάζει τη δομή της φλόγα και συγκεκριμένα προκαλεί στένωση αυτής. Ο αυξημένος αριθμός Re έχει σαν αποτέλεσμα μεγαλύτερη παροχή μάζας και αντίστοιχα ορμής από τα ακροφύσια εισαγωγής καυσίμου και οξειδωτικού μίγματος με τελικό αποτέλεσμα τη μετατόπιση της ζώνης αντίδρασης προς την πλευρά του οξειδωτικού και τη στένωση αυτής. Μεγαλύτερη στένωση της φλόγας παρατηρείται για αριθμό $Re = 500$, ο οποίος αντιστοιχεί και στο μεγαλύτερο βαθμωτό ρυθμό σκέδασης, ενώ η μικρότερη για $Re = 100$.

Επιπρόσθετα παρατηρήθηκε μείωση της μέγιστης θερμοκρασίας κατά μήκος του άξονα συμμετρίας της αντικριστής δέσμης, με ταυτόχρονη αύξηση του αριθμού Re .

Ο λόγος αυτής της συμπεριφοράς οφείλεται στο γεγονός ότι η μετάδοση θερμότητας λόγω συναγωγής από τις δύο πλευρές της φλόγας είναι μεγαλύτερη από το ρυθμό με τον οποίο παράγεται θερμότητα μέσω της διεργασίας της καύσης, με αποτέλεσμα η τελική θερμοκρασία να είναι μικρότερη. Περαιτέρω αύξηση του βαθμωτού ρυθμού σκέδασης χ , η οποία αντιστοιχεί σε μεγαλύτερους αριθμούς Re θα έχει σαν αποτέλεσμα την αδυναμία εξισορρόπησης μεταξύ του ρυθμού μετάδοσης θερμότητας λόγω συναγωγής και του αντίστοιχου λόγω της διεργασίας της καύσης, με τελικό αποτέλεσμα το σβήσιμο της φλόγας. Παρέκκλιση από την προαναφερθείσα συμπεριφορά παρουσιάζεται στην περίπτωση στην οποία η καύση διεξάγεται με αριθμό $Re = 100$. Με βάση τις προηγούμενες παρατηρήσεις θα ανέμενε κανείς η μέγιστη θερμοκρασία κατά μήκος του άξονα συμμετρίας της αντικριστής δέσμης για $Re = 100$ να είναι υψηλότερη σε σχέση την αντίστοιχη που προκύπτει για $Re = 200$. Ωστόσο η συμπεριφορά είναι τελείως αντίστροφη. Για τόσο χαμηλούς αριθμούς Re , πέρα του βαθμωτού ρυθμού σκέδασης χ , ο οποίος αποτελεί μία από τις βασικότερες παραμέτρους, η φλόγα δέχεται και άλλες επιδράσεις εξαιτίας της μορφής της. Όπως προέκυψε από τις προσομοιώσεις η δομή της φλόγα που προκύπτει για $Re = 100$ έχει μεγάλο πάχος και βρίσκεται αρκετά κοντά στην περιοχή του κρού ακροφυσίου και γενικότερα των τοιχωμάτων της γεωμετρίας, με τελικό αποτέλεσμα οι απώλειες θερμότητας λόγω συναγωγής να είναι πολύ υψηλότερες λόγω της μεγαλύτερης

θερμοκρασιακής διαφοράς, σε σχέση με αυτές που παρατηρούνται σε δομές φλογών με υψηλότερους αριθμούς Re . Τελικό αποτέλεσμα των παραπάνω αποτελεί η μικρότερη τιμή της μέγιστης θερμοκρασίας στην περίπτωση του $Re = 100$, σε σχέση με αυτή που παρουσιάζεται για $Re = 200$.

Τα αποτελέσματα της άμεσης προσομοίωσης διαμορφώθηκαν στο χώρο του κλάσματος μάζας και συγκρίθηκαν με αυτά του υπολογιστικού εργαλείου FlameMaster. Κύριες μεταβλητές που χρησιμοποιήθηκαν ως μεταβλητές σύγκρισης αποτέλεσαν τα κλάσματα μάζας του καυσίμου H_2 , του οξειδωτικού O_2 , του παραγόμενου H_2O και κυρίως της θερμοκρασίας. Η πρόβλεψη των κλασμάτων μάζας κρίνεται ικανοποιητική για τους διάφορους αριθμούς Re , οι οποίοι αντιστοιχούν στην ουσία σε διαφορετικούς βαθμωτούς ανάμιξης χ , ιδιαίτερα για τα χημικά στοιχεία του H_2 και του O_2 . Όσο αφορά στην πρόβλεψη του κλάσματος μάζας του H_2O η διαφορά μεταξύ της πρόβλεψης της άμεσης προσομοίωσης και του αποτελέσματος του υπολογιστικού εργαλείου FlameMaster για τιμές του κλάσματος ανάμιξης Z μεγαλύτερες του 0.4 αποκλίνουν, χωρίς όμως ιδιαίτερα μεγάλες διαφορές τιμών. Ο λόγος αυτής της απόκλισης και της κυρτότητας που εμφανίζεται στην καμπύλη του κλάσματος μάζας του H_2O οφείλεται κυρίως στο γεγονός της χρησιμοποίησης σταθερών αριθμών $Le = 1$ στην περίπτωση χρησιμοποίησης του κώδικα FlameMaster και στην έλλειψη επιδράσεων της διαφορικής διάχυσης μεταφοράς (differential diffusion effects). Επιπλέον η μέγιστη τιμή της θερμοκρασίας προσεγγίζεται ικανοποιητικά από την επίλυση των εξισώσεων των σταθερών φλογιδίων, χωρίς όμως και σε αυτή την περίπτωση να είναι δυνατή η πρόβλεψη της κυρτότητας της καμπύλης που παρουσιάζεται στα αποτελέσματα της άμεσης προσομοίωσης για τον ίδιο λόγο που αναφέρθηκε παραπάνω.

Η αδυναμία που παρουσιάζει το μοντέλο όσο αφορά στην πρόβλεψη της τιμής του κλάσματος μάζας των μεταβλητών και της θερμοκρασίας, επιδέχεται διόρθωσης στα τελικά αποτελέσματα σύζευξης του μοντέλου φλογιδίων με τον κώδικα των φασματικών πεπερασμένων στοιχείων και τη μέθοδο προσομοίωσης μεγάλων δινών, μέσω της χρησιμοποίησης μίας συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας [Steven -der Hoeven - 2007, Pitsch - 2005, Law - 2006], με βάση την οποία καθορίζεται η τελική τιμή της φιλτραρισμένης με βάση την πυκνότητα, μεταβλητής. Για το λόγο αυτό η μικρή απόκλιση μεταξύ των αποτελεσμάτων της άμεσης προσομοίωσης και των αντίστοιχων που προέκυψαν με τη χρησιμοποίηση του κώδικα FlameMaster δεν

αποτελεί εμπόδιο στην περαιτέρω εφαρμογή και / ή σύζευξη του τελευταίου με τον κώδικα των φασματικών πεπερασμένων στοιχείων.

Κεφάλαιο 6^ο

Γενικά Συμπεράσματα

Εισαγωγή

Στο κεφάλαιο αυτό επιδιώκεται μία γενική περίληψη όλων των αποτελεσμάτων που επιτεύχθηκαν κατά τη διεξαγωγή της παρούσας διδακτορικής διατριβής. Συγκεκριμένα στην παράγραφο 6.1 αναλύονται περιληπτικά τα πιο ουσιώδη συμπεράσματα που προέκυψαν από την έρευνα που πραγματοποιήθηκε, καθώς επίσης και τα προβλήματα που παρουσιάστηκαν κατά την εφαρμογή των διαφόρων μοντέλων και μεθόδων που χρησιμοποιήθηκαν. Στην ενότητα 6.2 αναφέρεται ο βαθμός ολοκλήρωσης και επίτευξης των αρχικών στόχων, ενώ παράλληλα δίνονται πιθανές κατευθύνσεις για μελλοντική έρευνα και περαιτέρω ανάλυση.

6.1 Γενικά συμπεράσματα

Στην παρούσα διδακτορική διατριβή προσομοιώθηκαν τα χαρακτηριστικά ροής τύπου δέσμης (jet) με τη βοήθεια της άμεσης προσομοίωσης και της προσομοίωσης μεγάλων δινών με τη χρήση δύο διαφορετικών μοντέλων, του μοντέλου προσεγγιστικής ανέλιξης και του μοντέλου Smagorinsky (κλασικό και δυναμικό). Ο βαθμός των πολυωνύμων παρεμβολής στην περίπτωση της άμεσης προσομοίωσης ορίστηκε ίσος με 12, ενώ στην περίπτωση των μεγάλων δινών ίσος με 8. Όσο αφορά στο μοντέλο προσεγγιστικής ανέλιξης ADM χρησιμοποιήθηκαν τρεις διαφορετικές τιμές του συντελεστή του όρου χαλάρωσης ($\chi_u = 100, 500, 900$), ενώ για το μοντέλο Smagorinsky με σταθερό συντελεστή C_s χρησιμοποιήθηκαν επίσης τρεις διαφορετικές τιμές αυτού ($C_s = 0.1, 0.15$ και 0.2). Τα στατιστικά αποτελέσματα της έντασης της τύρβης στην ακτινική και αξονική συνιστώσα για το μοντέλο προσεγγιστικής ανέλιξης ADM συμφωνούν με αυτά της άμεσης προσομοίωσης μόνο μετά την μεταβατική περιοχή ($x/D > 20$), ενώ στη μεταβατική περιοχή η διαφορά είναι της τάξης του 30%. Με το κλασικό μοντέλο Smagorinsky με συντελεστή $C_s = 0.2$ τα αποτελέσματα παρουσιάζονται αυξημένα κατά 20% περίπου, σε όλο το μήκος της

δέσμης (jet). Η χρήση τριών διαφορετικών τιμών του όρου χαλάρωσης για το μοντέλο ADM δεν βελτίωσαν τα αποτελέσματα, ενώ για το μοντέλο Smagorinsky η πρόβλεψη με τους δύο διαφορετικούς συντελεστές $C_s = 0.1$ και 0.15 βελτιώθηκε αισθητά, με τον πρώτο να δίνει ικανοποιητικά αποτελέσματα, τα οποία συμφωνούν αρκετά καλά με αυτά της άμεσης προσομοίωσης. Επιπλέον επιδιώχθηκε περαιτέρω βελτίωση του μοντέλου Smagorinsky μέσω της χρησιμοποίησης δυναμικού υπολογισμού του συντελεστή C_s . Τα στατιστικά αποτελέσματα στην περίπτωση αυτή μείωσαν την υπερεκτίμηση της έντασης της τύρβης στη μεταβατική περιοχή της δέσμης, κάτι το οποίο δεν ήταν εφικτό με τη χρησιμοποίηση του μοντέλου προσεγγιστικής ανέλιξης. Παρόλα αυτά η τελική συμφωνία των αποτελεσμάτων του δυναμικού μοντέλου Smagorinsky με αυτά της άμεσης προσομοίωσης κρίνεται ανεπαρκής σε σχέση με αυτή του μοντέλου Smagorinsky με σταθερό συντελεστή $C_s = 0.1$. Τα αποτελέσματα του δυναμικού χαρακτήρα του μοντέλου βελτιώθηκαν σε μικρό βαθμό με τη χρήση πέντε διαφορετικών μονοδιάστατων συναρτήσεων μεταφοράς, χωρίς όμως η τελική πρόβλεψη των αποτελεσμάτων να είναι ιδιαίτερα ικανοποιητική. Επιπρόσθετα η εύρεση ενός μέσου χρονικού όρου του δυναμικού συντελεστή C_d μέσω της ανάπτυξης του μοντέλου LDSM οδήγησε σε τελική κατάρρευση της υπολογιστικής διαδικασίας, παρόλο που τα αποτελέσματα στις αρχικές 150 χρονικές μονάδες παρουσιάζουν ικανοποιητική συμφωνία με αυτά της άμεσης προσομοίωσης. Στον πίνακα που παρουσιάζεται στη συνέχεια εμφανίζεται συνοπτικά μία ποιοτική βαθμολογία των μοντέλων που χρησιμοποιήθηκαν στην περίπτωση της πρότυπης γεωμετρίας δέσμης (jet), όσο αφορά στην πρόβλεψη και συμφωνία των αποτελεσμάτων σε σχέση με την άμεση προσομοίωση για τις δύο περιοχές ενδιαφέροντος. Η βαθμολογία κυμαίνεται από 1 μέχρι 5 μαύρους κύκλους, με 5 να είναι η καλύτερη συμφωνία.

Γεωμετρία: Πρότυπη δέσμη ομοροής (Coflow Jet)		
Μοντέλο	Κύρια περιοχή ενδιαφέροντος (μεταβατική περιοχή της δέσμης - $8 < x/D < 15$)	Δευτερεύουσα περιοχή ενδιαφέροντος (περιοχή ομοιότητας της δέσμης - $x/D > 30$)
ADM_χ _u = 100	•	•••••
ADM_χ _u = 500	•	•••••
ADM_χ _u = 900	•	•••••
CSM_C _s = 0.1	•••••	•••••
CSM_C _s = 0.15	•••••	•••
CSM_C _s = 0.2	•	••
DSM_v1	•••	•
DSM_v2	•••	••
DSM_v3	•••	•
DSM_v4	•••	•
DSM_Inm	•••	••

Όσο αφορά στην υπολογιστική επίλυση της εξίσωσης μεταφορά του κλάσματος ανάμιξης Z , διαπιστώθηκε ότι με τη χρησιμοποίηση της μεθόδου προσομοίωσης μεγάλων δινών όλα τα μοντέλα, τόσο το μοντέλο Smagorinsky με σταθερό συντελεστή C_s , όσο και αυτό με δυναμικό υπολογισμό του συντελεστή C_d υπερεκτιμούσαν και / ή υποεκτιμούσαν τις τιμές του κλάσματος ανάμιξης, προβλέποντας γι αυτό τιμές μεγαλύτερες της μονάδος και μικρότερες του μηδενός. Το μοντέλο Smagorinsky με σταθερό συντελεστή $C_s = 0.2$ παρουσίασε καλύτερη συμπεριφορά όσο αφορά στην πρόβλεψη των μέγιστων και ελάχιστων τιμών του κλάσματος ανάμιξης, δίνοντας τη μικρότερη απόκλιση από της αντίστοιχες θεωρητικές 1 και 0. Αντίστοιχα το μοντέλο Smagorinsky με $C_s = 0.1$, το οποίο έδωσε τα καλύτερα αποτελέσματα στην επίλυση του ροϊκού πεδίου, παρουσίασε μεγαλύτερες αποκλίσεις από το 0 και το 1, γεγονός το οποίο οφείλεται στο μικρότερο χαρακτήρα σκέδασης του συγκεκριμένου μοντέλου. Τα δυναμικά μοντέλα που χρησιμοποιήθηκαν παρουσίασαν όμοια συμπεριφορά, ενώ οι αποκλίσεις από τη μέγιστη και ελάχιστη θεωρητική τιμή του κλάσματος ανάμιξης Z παρουσίασαν το ίδιο εύρος τιμών, το οποίο εξαρτάται από το μέγεθος της ενέργειας που αποκόπτει η χρησιμοποιούμενη κάθε φορά συνάρτηση πυρήνα του φίλτρου.

Για την εκτενέστερη μελέτη της συμπεριφοράς και των διακυμάνσεων του κλάσματος ανάμιξης χρησιμοποιήθηκαν δύο επιπλέον διαφορετικές τιμές του βαθμού των πολυωνύμων παρεμβολής, 6 και 10. Στην περίπτωση χρησιμοποίησης του μικρότερου πολυωνυμικού βαθμού (6) οι αποκλίσεις και οι περιοχές εμφάνισης τιμών μικρότερων του μηδενός και μεγαλύτερων της μονάδος ήταν περισσότερες, σε σχέση με τις αντίστοιχες που προκύπτουν από τη χρησιμοποίηση του μεγαλύτερου πολυωνυμικού βαθμού (10).

Παράλληλα με τα παραπάνω για να διαπιστωθεί εάν η γενεσιουργός αιτία της ανεπιθύμητης διακύμανσης του κλάσματος ανάμιξης Z είναι προϊόν του μηχανισμού της τύρβης, ο οποίος αυξάνει το διαχωρισμό των κλιμάκων και όλων των κλίσεων των μεγεθών, που σχετίζονται με τη μεταφορά ενέργειας, διερευνήθηκε η επίδραση της γεννήτριας τύρβης στην είσοδο της γεωμετρίας. Για την επικύρωση της διαπίστωσης προέλευσης των διακυμάνσεων του κλάσματος ανάμιξης Z , χρησιμοποιήθηκε ένα αρχικό πεδίο και η προσομοίωση επαναλήφθηκε για 150 χρονικές μονάδες, χωρίς την προσθήκη διακυμάνσεων στο προφίλ της ταχύτητας εισόδου. Παρατηρήθηκε ότι η ροή, λόγω της μη προσθήκης των διακυμάνσεων μετά από 150 χρονικές μονάδες έγινε στρωτή, ενώ παράλληλα οι αποκλίσεις του κλάσματος ανάμιξης από το 0 και το 1 ήταν της τάξεως του $O(10^{-3})$. Συμπερασματικά λοιπόν θα μπορούσαμε να πούμε, ότι η γενεσιουργός αιτία για την αφύσικες τιμές του κλάσματος ανάμιξης είναι η τύρβη, γεγονός το οποίο ενισχύεται ακόμη περισσότερο από τη χρησιμοποίηση των φασματικών πεπερασμένων στοιχείων, μέθοδος η οποία αποτελεί μία από τις μεθόδους διακριτοποίησης με πάρα πολύ μικρό αριθμητικό σφάλμα.

Επιπλέον προσπάθειες μείωσης των μεγάλων θετικών και αρνητικών τιμών του κλάσματος ανάμιξης Z έγιναν με τη χρησιμοποίηση μιας διαφορετικής διαδικασίας φιλτραρίσματος, η οποία χρησιμοποιεί μία μονοδιάστατη συνάρτηση μεταφοράς, που δρα σαν ένα φίλτρο χαμηλών συχνοτήτων σε κάθε πεδίο για να εξαλείψει τις υψηλές πολυωνυμικές συχνότητες. Παράλληλα, κατασκευάστηκε και χρησιμοποιήθηκε ένα νέο πλέγμα το οποίο αποτελούνταν από 2024 φασματικά πεπερασμένα στοιχεία με 4 διαφορετικούς βαθμούς πολυωνύμων παρεμβολής (5, 7, 9 και 11) και με μικρότερο μήκος $L = 20d_j$, για λόγους υπολογιστικού χρόνου και ισχύος.

Η χρησιμοποίηση της εναλλακτικής μεθόδου προσομοίωσης μεγάλων δινών, καθώς επίσης και της πύκνωσης του πλέγματος σε σημεία υψηλών διατμητικών τάσεων και

κλίσεων ταχύτητας, εάν και προκάλεσε μείωση της εμφάνισης σημείων στα οποία παρουσιάζονται τιμές του κλάσματος ανάμιξης αρνητικές ή μεγαλύτερες της μονάδος, δεν βελτίωσε πολύ τα αποτελέσματα. Υψηλές τιμές του κλάσματος ανάμιξης παρέμειναν, στην μεταβατική κυρίως περιοχή της δέσμης, στην οποία ο μηχανισμός της τύρβης - ο οποίος αυξάνει το διαχωρισμό των κλιμάκων και όλων των κλίσεων των μεγεθών που σχετίζονται με τη μεταφορά ενέργειας - είναι ιδιαίτερα ενεργός και όπως αποδείχθηκε αποτελεί τη γενεσιουργό αιτία της ανεπιθύμητης διακύμανσης του κλάσματος ανάμιξης Z .

Για τη δυνατότητα επίλυσης του 2^{ου} προβλήματος (κεφάλαιο 5), το οποίο προκύπτει με την εισαγωγή του κλάσματος ανάμιξης στην περίπτωση επίλυσης τυρβωδών φλογών διάχυσης και αφορά στον καθορισμό της δομής της φλόγας μέσω της επίλυσης των εξισώσεων των φλογιδίων, χρησιμοποιήθηκε ο υπολογιστικός κώδικας FlameMaster, κύριο λόγο επιλογής του οποίου αποτέλεσε το γεγονός της εμπορικής του διαθεσιμότητας και της μικρής του απαίτησης σε υπολογιστική ισχύ.

Επιπρόσθετα χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο σταθερών φλογιδίων και όχι το γενικό μοντέλο των μεταβατικών φλογιδίων. Βασική αιτία είναι το μικρότερο υπολογιστικό κόστος του πρώτου, καθώς επίσης και το γεγονός ότι δεν μελετήθηκαν φαινόμενα ανύψωσης φλόγας (lift-off), σβησίματος (extinction) ή επανάφλεξης (re-ignition), τα οποία είναι άρρηκτα συνδεδεμένα με τη χρονική κατάσταση της φλόγας και δεν είναι δυνατό να προσομοιωθούν με το μοντέλο των σταθερών φλογιδίων

Για την πιστοποίηση και στάθμιση των αποτελεσμάτων του υπολογιστικού κώδικα FlameMaster, επιλέχθηκε η πρότυπη γεωμετρία της αντικριστής δέσμης (Opposed Jet) με καύσιμο H_2 διαλυμένο με N_2 και οξειδωτικό αέρα, καθόσον οι λύσεις της συγκεκριμένης γεωμετρίας έχουν χρησιμοποιηθεί στο παρελθόν για τη μοντελοποίηση τυρβωδών φλογών διάχυσης [Ihme - 2005, Sheikhi - 2005]. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν συγκρίθηκαν με αυτά άμεσων προσομοιώσεων (Direct Numerical Simulation - DNS) με τη χρησιμοποίηση αναλυτικής πινακοποιημένης χημείας που πραγματοποιήθηκαν με βάση τον υπάρχοντα διαθέσιμο κώδικα των φασματικών πεπερασμένων στοιχείων. Η παραμετρική μελέτη έγινε με τη χρησιμοποίηση πέντε διαφορετικών αριθμών $Re = 100, 200, 300, 400$ και 500 , που αφορούν στη στρωτή ροή. Οι διαφορετικοί αριθμοί Re οδηγούν σε διαφορετικό βαθμωτό ρυθμό σκέδασης (scalar dissipation rate), ο οποίος αλλάζει τη δομή της φλόγας και συγκεκριμένα προκαλεί στένωση αυτής. Ο αυξημένος αριθμός Re έχει σαν αποτέλεσμα μεγαλύτερη παροχή μάζας και αντίστοιχα ορμής από τα ακροφύσια

εισαγωγής καυσίμου και οξειδωτικού μίγματος, με τελικό αποτέλεσμα τη μετατόπιση της ζώνης αντίδρασης προς την πλευρά του οξειδωτικού και τη στένωση αυτής. Μεγαλύτερη στένωση της φλόγας παρατηρείται για αριθμό $Re = 500$, ο οποίος αντιστοιχεί και στο μεγαλύτερο βαθμωτό ρυθμό σκέδασης, ενώ η μικρότερη για $Re = 100$.

Επιπρόσθετα παρατηρήθηκε μείωση της μέγιστης θερμοκρασίας κατά μήκος του άξονα συμμετρίας της αντικριστής δέσμης, με ταυτόχρονη αύξηση του αριθμού Re .

Ο λόγος αυτής της συμπεριφοράς οφείλεται στο γεγονός, ότι η μετάδοση θερμότητας λόγω συναγωγής από τις δύο πλευρές της φλόγας, είναι μεγαλύτερη από το ρυθμό, με τον οποίο παράγεται θερμότητα μέσω της διεργασίας της καύσης, με αποτέλεσμα η τελική θερμοκρασία να είναι μικρότερη. Περαιτέρω αύξηση του βαθμωτού ρυθμού σκέδασης χ , η οποία αντιστοιχεί σε μεγαλύτερους αριθμούς Re θα έχει σαν αποτέλεσμα την αδυναμία εξισορρόπησης μεταξύ του ρυθμού μετάδοσης θερμότητας λόγω συναγωγής και του αντίστοιχου, λόγω της διεργασίας της καύσης, με τελικό αποτέλεσμα το τελικό σβήσιμο της φλόγας. Παρέκκλιση από την προαναφερθείσα συμπεριφορά παρουσιάζεται στην περίπτωση στην οποία η καύση διεξάγεται με αριθμό $Re = 100$. Με βάση τις προηγούμενες παρατηρήσεις θα ανέμενε κανείς η μέγιστη θερμοκρασία κατά μήκος του άξονα συμμετρίας της αντικριστής δέσμης για $Re = 100$ να είναι υψηλότερη σε σχέση την αντίστοιχη που προκύπτει για $Re = 200$. Ωστόσο η συμπεριφορά είναι τελείως αντίστροφη. Για τόσο χαμηλούς αριθμούς Re , πέρα του βαθμωτού ρυθμού σκέδασης χ , ο οποίος αποτελεί μία από τις βασικότερες παραμέτρους, η φλόγα δέχεται και άλλες επιδράσεις εξαιτίας της μορφής της. Όπως προέκυψε από τις προσομοιώσεις η δομή της φλόγας που προκύπτει για $Re = 100$ έχει μεγάλο πάχος και βρίσκεται αρκετά κοντά στην περιοχή του κρούου ακροφυσίου και γενικότερα των τοιχωμάτων της γεωμετρίας, με τελικό αποτέλεσμα οι απώλειες θερμότητας λόγω συναγωγής να είναι πολύ υψηλότερες λόγω της μεγαλύτερης θερμοκρασιακής διαφοράς, σε σχέση με αυτές που παρατηρούνται σε δομές φλογών με υψηλότερους αριθμούς Re . Τελικό αποτέλεσμα των παραπάνω αποτελεί η μικρότερη τιμή της μέγιστης θερμοκρασίας στην περίπτωση του $Re = 100$, σε σχέση με αυτή που παρουσιάζεται για $Re = 200$.

Τα αποτελέσματα της άμεσης προσομοίωσης διαμορφώθηκαν στο χώρο του κλάσματος μάζας και συγκρίθηκαν με αυτά του υπολογιστικού εργαλείου FlameMaster. Κύριες μεταβλητές που χρησιμοποιήθηκαν ως μεταβλητές σύγκρισης

αποτελέσαν τα κλάσματα μάζας του καυσίμου H_2 , του οξειδωτικού O_2 , του παραγόμενου H_2O και κυρίως της θερμοκρασίας. Η πρόβλεψη των κλασμάτων μάζας κρίνεται ικανοποιητική για τους διάφορους αριθμούς Re , οι οποίοι αντιστοιχούν στην ουσία σε διαφορετικούς βαθμωτούς ανάμιξης χ , ιδιαίτερα για τα χημικά στοιχεία του H_2 και του O_2 . Όσο αφορά στην πρόβλεψη του κλάσματος μάζας του H_2O η διαφορά μεταξύ της πρόβλεψης της άμεσης προσομοίωσης και του αποτελέσματος του υπολογιστικού εργαλείου FlameMaster για τιμές του κλάσματος ανάμιξης Z μεγαλύτερες του 0.4 αποκλίνουν, χωρίς όμως ιδιαίτερα μεγάλες διαφορές τιμών. Ο λόγος αυτής της απόκλισης και της κυρτότητας που εμφανίζεται στην καμπύλη του κλάσματος μάζας του H_2O οφείλεται κυρίως στο γεγονός της χρησιμοποίησης σταθερών αριθμών $Le = 1$ στην περίπτωση χρησιμοποίησης του κώδικα FlameMaster και στην έλλειψη επιδράσεων της διαφορικής διάχυσης μεταφοράς (differential diffusion effects). Επιπλέον η μέγιστη τιμή της θερμοκρασίας προσεγγίζεται ικανοποιητικά από την επίλυση των εξισώσεων των σταθερών φλογιδίων, χωρίς όμως και σε αυτή την περίπτωση να είναι δυνατή η πρόβλεψη της κυρτότητας της καμπύλης που παρουσιάζεται στα αποτελέσματα της άμεσης προσομοίωσης για τον ίδιο λόγο που αναφέρθηκε παραπάνω.

Η αδυναμία που παρουσιάζει το μοντέλο όσο αφορά στην πρόβλεψη της τιμής του κλάσματος μάζας, των μεταβλητών και της θερμοκρασίας, επιδέχεται διόρθωσης στα τελικά αποτελέσματα σύζευξης του μοντέλου φλογιδίων με τον κώδικα των φασματικών πεπερασμένων στοιχείων και τη μέθοδο προσομοίωσης μεγάλων δινών, μέσω της χρησιμοποίησης μίας συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας, με βάση την οποία καθορίζεται η τελική τιμή της φιλτραρισμένης με βάση την πυκνότητα μεταβλητής. Για το λόγο αυτό η μικρή απόκλιση μεταξύ των αποτελεσμάτων της άμεσης προσομοίωσης και των αντίστοιχων που προέκυψαν με τη χρησιμοποίηση του κώδικα FlameMaster δεν αποτελεί εμπόδιο στην περαιτέρω εφαρμογή και / ή σύζευξη του τελευταίου με τον κώδικα των φασματικών πεπερασμένων στοιχείων.

6.2 Στόχοι που επιτεύχθηκαν - Μελλοντική έρευνα

Οι 3 αρχικοί στόχοι της διατριβής, οι οποίοι αναφέρθηκαν και στην ενότητα κίνητρο - στόχος - συνεισφορά στις σελίδες V και VI είναι:

- **Στόχος 1:** Ανάπτυξη λογισμικού για να επεκταθεί ο ήδη υπάρχων κώδικας με την εφαρμογή της μεθόδου «Προσομοίωσης των Μεγάλων δινών»

(Large Eddy Simulation - LES) βασισμένη στη μέθοδο «Προσεγγιστικής Ανέλιξης» (Approximate Deconvolution Model - ADM) και αυτή του μοντέλου Smagorinsky (κλασσικό και δυναμικό).

- **Στόχος 2:** Λεπτομερή μελέτη και κατανόηση της φυσικής και αριθμητικής συμπεριφοράς του κλάσματος ανάμιξης Z (mixture fraction) με τη μέθοδο προσομοίωσης μεγάλων δινών και αυτή της άμεσης προσομοίωσης.
- **Στόχος 3:** Μελέτη της δυνατότητας σύζευξης του τελικού κώδικα που προέκυψε, με ένα μοντέλο σταθερών φλογιδίων, το οποίο θα πιστοποιηθεί με αποτελέσματα άμεσης προσομοίωσης, για τη μελέτη της χημείας της αέριας φάσης.

Όσο αφορά στον 1^ο στόχο, η επέκταση του ήδη υπάρχον κώδικα με την εφαρμογή της μεθόδου προσομοίωσης των μεγάλων δινών βασισμένη στη μέθοδο προσεγγιστικής ανέλιξης, επιτεύχθηκε, χωρίς ωστόσο να δώσει ικανοποιητικά αποτελέσματα σε σχέση με αυτά της άμεσης προσομοίωσης. Για το λόγο αυτό το μοντέλο προσεγγιστικής ανέλιξης αντικαταστάθηκε από το μοντέλο Smagorinsky (κλασσικό και δυναμικό). Ο κώδικας επεκτάθηκε έτσι ώστε να είναι σε θέση να επιλύει της εξισώσεις του ροϊκού πεδίου με τη χρησιμοποίηση της μεθόδου προσομοίωσης μεγάλων δινών, βασισμένη όμως στο μοντέλο Smagorinsky. Ο 2^{ος} στόχος επιτεύχθηκε σε πλήρη βαθμό, καθώς επιλύθηκε η εξίσωση μεταφοράς του κλάσματος ανάμιξης, ενώ παράλληλα διερευνήθηκε και η συμπεριφορά του τελευταίου ανάλογα με τη συνάρτηση μεταφοράς του πυρήνα του φίλτρου, στην περίπτωση του δυναμικού μοντέλου Smagorinsky, ή το συντελεστή C_s στην περίπτωση του κλασσικού μοντέλου Smagorinsky. Τέλος όσο αφορά στον 3^ο στόχο, με βάση τα συμπεράσματα που προέκυψαν, η τελική σύζευξη του μοντέλου Smagorinsky και του μοντέλου των σταθερών φλογιδίων που επιλέχθηκε είναι εφικτή, εφόσον όμως εξαλείφουν οι διακυμάνσεις του κλάσματος ανάμιξης Z , που έχουν τιμή μεγαλύτερη του 1 και μικρότερη του 0. Όπως διαπιστώθηκε, ενώ τα αποτελέσματα της άμεσης προσομοίωσης στρωτής φλόγας, όσο αφορά στη γεωμετρία της αντικριστής δέσμης βρίσκονται σε αρκετά καλή συμφωνία με αυτά του μοντέλου των σταθερών φλογιδίων, ωστόσο οι μεγαλύτερες της μονάδος και οι μικρότερες του μηδενός τιμές που παρουσιάστηκαν για το κλάσμα ανάμιξης, αποτελούν αφύσικη συμπεριφορά και ταυτόχρονα δεν επιτρέπουν την άμεση σύζευξη

των μοντέλων. Οι διακυμάνσεις αυτές όπως διαπιστώθηκε από τη λεπτομερή μελέτη που πραγματοποιήθηκε στα πλαίσια του διδακτορικού, οφείλονται κυρίως σε αριθμητικά σφάλματα λόγω της μη μονοτονικής συμπεριφοράς των μεθόδων υψηλής τάξης (όπως τα φασματικά πεπερασμένα στοιχεία) σε περιοχές με απότομες μεταβολές στα φυσικά μεγέθη όπως το κλάσμα ανάμιξης. Ωστόσο, η συγκεκριμένη μέθοδος υπολογιστικής διακριτοποίησης, που χρησιμοποιήθηκε κατά τη διάρκεια των προσομοιώσεων, σχετίζεται με τα φασματικά πεπερασμένα στοιχεία και κρίνεται ιδιαίτερα ικανοποιητική όσο αφορά στο σφάλμα αριθμητικής διάχυσης, με αποτέλεσμα να μην υπάρχουν σημαντικά περιθώρια βελτίωσης σε αυτό τον τομέα. Από την άλλη πλευρά, αποκοπή των τιμών, μεγαλύτερων της μονάδος ή μικρότερων του μηδενός κρίνεται ακατάλληλη από τη βιβλιογραφία και δεν δίνει σωστά αποτελέσματα, καθώς αυτή επηρεάζει τη φυσική διεργασία μεταφοράς και διάχυσης του κλάσματος μάζας, δεδομένου ότι η αποκοπή τιμών και η επιβολή της ισότητας αυτών σε κάποια δεδομένη τιμή, επιδρά αρνητικά και αφύσικα στη γενική εξίσωση μεταφοράς του. Χρησιμοποίηση της άμεσης προσομοίωσης, χωρίς τη χρησιμοποίηση κάποιου μοντέλου έδωσε καλύτερα αποτελέσματα με τιμές, οι οποίες παρουσίασαν μικρότερες αποκλίσεις από τη μονάδα και το μηδέν. Όπως αποδείχθηκε από εκτεταμένες προσομοιώσεις, η γενεσιουργός αιτία για την αφύσικη συμπεριφορά είναι η τύρβη, γεγονός το οποίο ενισχύεται ακόμη περισσότερο από τη χρησιμοποίηση των φασματικών πεπερασμένων στοιχείων, μέθοδος η οποία αποτελεί μία από τις μεθόδους διακριτοποίησης με πάρα πολύ μικρό αριθμητικό σφάλμα. Για τους λόγους που προαναφέρθηκαν και αναλύθηκαν διεξοδικά στο 4^ο και 5^ο κεφάλαιο της διατριβής, καθώς επίσης και για το γεγονός ότι η σύζευξη του μοντέλου των σταθερών φλογιδίων με τον υπάρχοντα κώδικα, όσο αφορά στις μεταβολές πυκνότητας δεν είναι τόσο απλή λόγω του αριθμητικού θορύβου που προκύπτει από την πινακοποίηση της χημείας και την επίδρασή της στη διατήρηση μάζας (divergence), δεν επιτεύχθηκε η τελική σύζευξη μεταξύ του μοντέλου φλογιδίων και του μοντέλου Smagorinsky.

Μελλοντική έρευνα μπορεί να γίνει προς την κατεύθυνση μείωσης των διακυμάνσεων των τιμών του κλάσματος ανάμιξης Z , με τη χρησιμοποίηση μεθόδων διατήρησης μάζας (flux corrections techniques - FCT). Αποτέλεσμα τέτοιων μεθόδων, αποτελεί η φυσική αποφυγή ανεπιθύμητων τιμών, μεγαλύτερων της μονάδας και μικρότερων του μηδενός και όχι η αφύσικη αποκοπή αυτών, η οποία προξενεί εκτεταμένα αριθμητικά και υπολογιστικά προβλήματα.

Βιβλιογραφία - Αναφορές

- Adams N.A.**, Stolz S., 2001, “Deconvolution methods for subgrid scale approximation in LES”, Edwards, pp. 21 – 44
- Akselvoll K.**, Moin P., 1996, “Large – eddy simulation of turbulent confined coannular jets”, J. Fluid Mech., (315), pp. 387 – 411
- Amielh M.**, T. Djeridane, F. Anselmet, “Velocity near-field of variable density turbulent jets”, Int.J.Heat Mass, 39, (10), pp. 2149 - 2164
- Anderson D. John**, JR, 1995, “Computational Fluid Dynamics”, McGraw – Hill International Editions, ISBN: 0 -07 – 113210 - 4
- Bardina J.**, Ferziger J.H., Reynolds W.C., 1983, “Improved turbulence models based on large-eddy simulation of homogeneous, incompressible, turbulent flows”, Report TF-19, Stanford University
- Bardina J.**, Ferziger, J.H., Reynolds, W.C., 1980, “Improved subgrid scale models for large eddy simulation”, AIAA Paper, pp. 80 – 1357.
- Barlow R. S.**, Frank J. H., 1998, “Effect of turbulence on species mass fractions in methane / air jet flames”, Proc. Combust. Inst., (27), pp. 1087 -1095
- Barlow Robert**, Jonathan Frank, 2007, “Piloted CH₄ / Air Flames C, D, E and F – Release 2.1”, Sandia Piloted CH₄ / Air Flames
- Bastin F.**, Lafon, P., Candel, S., 1997, “Computations of jet mixing noise due to coherent structures: the plane jet case”, J. Fluid Mech., 335, pp. 261 – 304.
- Batchelor G. K.**, 1998, “An Introduction to Fluid Dynamics”, Cambridge University Press, ISBN: 0 – 521 – 66396 – 2
- Bertoglio J. P.**, Mathieu J., 1984b, “A stochastic subgrid model for large eddy simulation: generation of a stochastic process”, C. R. Acad. Sc. Paris 299, (13), pp. 835 – 838
- Bertoglio, J. P.**, Mathieu, J., 1984a, “A stochastic subgrid model for large eddy simulation: general formulation”, C. R. Acad. Sc. Paris 299, (13), pp. 751 – 754
- Bilger R. W.**, 1993, “Conditional moment closure for turbulent reactive flow”, Phys. Fluids A, (5), pp. 436 – 444
- Bilger R. W.**, 1976, “The structure of diffusion flames”, Combust. Sci. Technol., (13), pp. 155

- Blackburn H. M.**, S. Schmidt, 2003, “Spectral element filtering techniques for large eddy simulation with dynamic estimation”, *Journal of Comp. Phys.*, (186), pp. 610 – 629
- Bodey C.**, Bailly C., Juve D., 2003, “Noise investigation of a high subsonic, moderate Reynolds number jet using a compressible large eddy simulation”, *Theoret. Comput. Fluids Dynamics*, (16), pp. 273-297
- Boersma B. J.**, G. Brethouwer and F.T.M. Nieuwstadt, 1998 “A numerical investigation on the effect of the inflow conditions on the self-similar region of a round jet”, *Phys. Fluids*, 10 (4), pp. 899-909
- Bogey Christophe**, Christophe Bailly, 2006, “Large eddy simulations of round free jets using explicit filtering with/without dynamic Smagorinsky model”, *Heat and Flow*, (27), pp. 603 – 610
- Bouffanais R.**, Michel O. Deville, Paul F. Fischer, Emmanuel Leriche, Daniel Weill, 2006, “Large Eddy Simulation of the Lid – Driven Cubic Cavity Flow by the Spectral Element Method”, *Journal of Scientific Computing*, (27), pp. 151 – 162
- Bowman C. T.**, Hanson R. K., Davidson D. F., Gardiner W. C., Lissianski V., 1995, *Gri mech 2.11*, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
- Boyd J. B.**, 1998, “Note: Two comments on filtering (artificial viscosity) for chebyshev and legendre spectral and spectral element methods: Preserving boundary conditions and interpretation of the filter as a diffusion”, *J. Comput. Phys.*, (143), pp. 283 – 288
- Branley N.**, Jones W, 2001, “Large – eddy simulation of a turbulent non – premixed flame”, *Combustion and Flame*, (127), pp. 1914 – 1934
- Brigham E. Oran**, 1974, “The Fast Fourier Transform”, Prentice – Hall, Inc., ISBN: 0 – 13 – 307496 – X
- Bushe W. K.**, Steiner H., 1999, “Conditional moment closure for large eddy simulation of non – premixed turbulent reactive flows”, *Phys. Fluids*, (11), pp 1896 – 1906
- Canuto C.**, M. Y. Hussaini, A. Quateroni, and T. A. Zang, 1988, “Spectral methods in fluid dynamics”, Springer-Verlag
- Chasnov J. R.**, 1991, “Simulation of the Kolmogorov inertial subrange using an improved subgrid model”, *Phys. Fluids A*, (3), pp. 188 – 200

- Chen J. Y.**, Kollman W., Dibble R. W., 1989, “PDF modeling of turbulent methane – air non – premixed jet flames”, *Combust. Sci. Technol.*, (64), pp. 315 – 346
- Chen M.**, Herrmann M., Peters N., 2000, “Flamelet modelling of lifted turbulent methane / air and propane / air jet diffusion flames”, *Proceedings of the Combustion Institute*, (28), pp. 167 – 174
- Chollet J. P.**, Lesieur M., 1981, “Parametrization of small scales of three dimensional isotropic turbulence utilizing spectral closures”, *J. Atmos. Sci.*, (38), pp. 2747 – 2757
- Chollet, J. P.**, 1983a, “Spectral closures to derive a subgrid scale modeling for large eddy simulation”
- Chollet, J. P.**, 1983b, “Two point closure as a subgrid modeling for large eddy simulations”, *Symposium on Turbulent Shear Flows, Proceedings (A85-14326 04-34)*, pp. 913 - 917
- Chung T. J.**, 2002, “*Computational Fluid Dynamics*”, Cambridge University Press, ISBN: 0 – 521 – 59416 – 2
- Clifton Wall**, Bendiks Jan Boersma, Parviz Moin, 2000, “An evaluation of the assumed beta probability density function subgrid – scale model for large eddy simulation of nonpremixed turbulent combustion with heat release”, *Phys. of Fluids*, 12, (10), pp. 2522 – 2529
- Colucci P. J.**, Jaber F.A., Givi P., Pope S. B., 1998, “Filtered density function for large eddy simulation of turbulent reactive flows”, *Phys. Fluids*, (10), pp. 499 – 515
- Cook A. W.**, Riley J. J., 1998, “Subgrid – scale modelling for turbulent reactive flows”, *Combustion and Flame*, (112), pp.593 -606
- Davis R. W.**, E. F. Moore, W. M. Roquemore, L. D. Chen, V. Vilimpoc, L. P. Goss, 1991, “Preliminary Results of a Numerical-Experimental Study of the Dynamic Structure of a Buoyant Jet Diffusion Flame”, *Combustion and Flame*, (83), pp. 263 – 270
- De Bruyn Kops S. M.**, Riley J. J., Kosaly G., Cook A. W., 1998, “Flow Turbul. Combust.”, (60), pp. 105 – 122
- Deardorff J. W.**, 1970, “A numerical study of three - dimensional turbulent channel flow at larger Reynolds numbers”, *J. Fluid Mech.*, (41), pp. 453 – 480

- Deardorff J. W.**, 1974, “Three dimensional numerical study of the height and mean structure of a heated planetary boundary layer”, *Boundary – Layer Meteorol.*, (7), pp. 81 – 106
- Desjardin E. Paul**, Steven H. Frankel, 1999, “Two-Dimensional Large Eddy Simulation of Soot Formation in the Near-Field of a Strongly Radiating Nonpremixed Acetylene-Air Turbulent Jet Flame”, *Combustion and Flame*, (119), pp. 121 – 132
- Deville M. O.**, P.F. Fischer, E. H. Mund, 2002, “High – Order Methods for Incompressible Fluid Flow”, *Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics*, ISBN 0 – 521 – 45309 – 7
- Dowling D.R.** and P.E. Dimotakis, 1990, “Similarity of the concentration field of gas-phase turbulent jets”, *J. Fluid Mech*, (217), pp. 109-141
- Ferziger J. H.**, M. Peric, 2002, “Computational Methods for Fluid Dynamics” (3rd Edition), Springer, ISBN: 3 – 540 – 42074 – 6
- Ferziger, J. H.**, 1977, “Large Eddy Simulation of turbulent Flows”, *AIAA Journal.*, (9), pp. 1261 – 1267
- Fischer P.**, J. Mullen, 2001 “Filter-based stabilization of spectral element methods”, *C. R. Acad. Sci. Paris*, (332), Serie 1, pp. 265 – 270
- Fischer P. F.** and H. M. Tufo, 2000, “High-performance Spectral Element Algorithms and Implementations” in *Parallel Computational Fluid Dynamics: towards Teraflops, Optimization and Novel Formulations*, D. Keyes, A. Ecer, N. Satofuka, P. Fox, and J. Periaux, eds. North-Holland, pp. 17 – 26
- Frouzakis E. Christos**, Tomboulides G. Ananias, Jerry Lee, Konstantinos Boulouchos, 2002, “Transient phenomena during diffusion / edge flame transitions in an opposed – jet hydrogen / air burner”, *Proceedings of the Combustion Institute*, (29), pp. 1581 – 1587
- Galperin B.**, Orszag S. A., 1993, “Large Eddy Simulation of Complex Engineering and Geophysical Flows”, *Cambridge: Cambridge University Press*
- Gamet L.** and J.L Estivalezes, 1998, “Application of large-eddy simulations and Kirchhoff method to jet noise prediction”, *AIAA J.*, 36 (12): 2170-2178
- Germano M.**, Piomelli U., Moin P., Cabot W.H., 1991, “A dynamic subgrid scale eddy viscosity model”, *Phys. Fluids A* 3 (7), pp. 1760 – 1765
- Grinstein F. F.**, K. Kailasanath, 1995, “Tree – Dimensional Numerical Simulations of Unsteady Reactive Square Jets”, *Combustion and Flame* 100, pp. 2 – 10

- Guerts B.**, 2007, “Inverse modeling for large-eddy simulation”, *Phys. Fluids* 9 (12), pp. 3585-3587
- Habisreutinger M. A.**, R. Bouffanais, E. Leriche, M. O. Deville, 2007, “A coupled approximate deconvolution and dynamic mixed scale model for large-eddy simulation”, *Journal of Computational Physics*, 224, (1), pp. 241 - 266
- Haworth D. C.**, Jansen K., 2000, “Large – eddy simulation on unstructured deforming meshes: towards reciprocating IC engines”, *Computers and Fluids* 29, pp. 493 – 524
- Heath T. Michael**, 2002, “Scientific Computing” (An Introduction Survey , 2nd Edition), McGraw – Hill Higher Education, ISBN : 0 – 07 – 239910 – 4
- Hong Yan, Mingde SU**, 1999, “Application and Comparison of Two SGS Models in Large Eddy Simulation of Free Turbulent Jet Flow”, *Communications in Nonlinear Science & Numerical Simulation* 4, pp.12 – 19
- Horiuti K.**, 1985, “Large eddy simulation of turbulent channel flow by one equation modelling”, *J. Phys. Soc. Japan* 54 (8), pp. 2855 – 2865
- Ihme M.**, Cha C. M., Pitsch H., 2005, “Prediction of local extinction and re – ignition effects in non – premixed turbulent combustion by a flamelet / progress variable approach”, *Proc. Combust. Inst.*, (30), pp. 793 – 800
- Ihme M.**, Heinz Pitsch, 2005, “LES of a Non – Premixed Flame Using an Extended Flamelet / Progress Variable Model, 43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit
- James S.**, F.A. Jaber, 2000, “Large Scale Simulations of Two-Dimensional Nonpremixed Methane Jet Flames”, *Combustion and Flame*, (123), pp. 465 – 487
- Jean Mathieu**, Julian Scott, 2000. “An Introduction to Turbulent Flow”, Cambridge University Press, ISBN: 0 – 521 – 77538 – 8
- Jerry C. Lee**, Christos E. Frouzakis, Konstantinos Boulouchos, 2000, “Numerical Study of Opposed – Jet H₂ / Air Diffusion Flame – Vortex Interactions”, *Combust. Sci. and Tech.*, (158), pp 365 – 388
- Jiang X.**, K. H. Luo, 2003, “Dynamics and structure of transitional buoyant jet diffusion flames with side-wall effects”, *Combustion and Flame*, (133), pp. 29 – 45

- Kang Y.**, J.X. Ewn, 2001, “The use of a laminar flamelet approach in the large eddy simulation of flame structure at the base of a pool fire”, Interscience Communications Ltd., London, England, pp. 743 – 754
- Karniadakis G. E.**, Spencer J. Sherwin, 1999, “Spectral / hp Element Methods for CFD”, Numerical Mathematics and Scientific Computation, ISBN 0 – 19 – 510226 – 6
- Karniadakis G. E.**, M. Israeli, S. A. Orszag, 1991, “High-order splitting methods for the incompressible navier-stokes equations”, J. Comp. Phys., (97), pp. 414
- Kempf A.**, F. Flemming, J. Janicka, 2004, “Investigation of lengthscales, scalar dissipation, and flame orientation in a piloted diffusion flame by LES”, Proceedings of the Combustion Institute, (30), pp. 557 – 565
- Kempf A.**, Sadiki A., Janicka J., 2003, “Prediction of finite chemistry effects using large eddy simulation”, Proc. Combust. Inst., (29), pp 2179 – 2185
- Kim S. H.**, Pitsch., 2005, “Conditional filtering method for large eddy simulation of turbulent non – premixed combustion”, Phys. Fluids, (17)
- Kim W.**, Menon S., 1999, “An unsteady incompressible Navier – Stokes solver for large – eddy simulation of turbulent flows”, International Journal of Numerical Methods in Fluids, 31 (6), pp. 983-1017
- Klein M.**, A. Sadiki, J. Janicka, 2003, “A digital filter based generation of inflow data for spatially developing direct numerical or large eddy simulation”, Journal of Computational Physics 186, (2), pp. 652 – 665
- Klimenko A. Y.**, Bilger R. W., 1999, “Conditional moment closure for turbulent combustion”, Prog. Energy Combust. Sci., (25), 595 – 687
- Kraichnan R.H.**, 1971, “Inertial – range: Eddy viscosity in two and three dimensions”, J. Atmos. Sci. 33, pp. 1521 – 1536
- Kueng Marco**, 2007, “LES of turbulent channel and jet flows using ADM”, Phd thesis, Diss. ETH No 12345
- Launder B.E.**, Spalding, D.B., 1972, “Mathematical models of turbulence”, Academic Press, Londres
- Law K. Chung**, 2006, “Combustion Physics”, Cambridge University Press ISBN – 10: 0 – 521 – 87052 - 6
- Le Ribault C.**, S. Sarkar, S.A. Stanley, 1999, “Large eddy simulation of a plane jet”, Phys.Fluids 11 (10), pp. 3069 – 3083

- LES Summer School of Reacting Flows**, Sept 5-11, 2004, Aristotle University of Thessaloniki.
- Lesieur M.**, Metais O., 1996, “New trends in large-eddy simulations of turbulence”, *Ann. Rev. Fluid Mech.*, (28), pp. 45 – 82
- Lesieur M.**, Rogallo R.S., 1989 “Large-eddy simulation of passive scalar diffusion in isotropic turbulence”, *Phys. Fluids A* 1(4), pp. 718 – 722
- Lilly D. K.**, 1967, “The representation of small - scale turbulence in numerical simulation experiments”, *Proc. IBM Scientific Computing Symp. on Environmental Sciences*, pp. 195 - 210
- Lubbers C. L.**, G. Brethouwer, B. J. Boersma, 2001, “Simulation of the mixing of a passive scalar in a round turbulent jet”, *Fluid Dyn. Res.*, 28, pp. 189 - 208
- Mankabadi R. R.**, M. E. Hayder and L. A. Povinelli, 1994, “Structure of supersonic jet flow and its radiated sound”, *AIAA J.*, 32 (5), pp 897-906
- Manuel Garcia-Villalbla**, Jochen Frohlich, 2006, “LES of a free annular swirling jet – Dependence of coherent structures on a pilot jet and the level of swirl”, *Heat and Fluid Flow*, (27), pp, 911 – 923
- Marcel Lesieur**, 2008, “Turbulence in Fluids” (Third Revised and Enlarged Edition), Kluwer Academic Publishers, ISBN: 0 – 7923 – 4416 – 2
- Mason P. J.**, 1994, “Large Eddy Simulation: A critical Review of the technique. Q. J. R.”, *Meteorol. Soc.*, (120), pp. 1 – 26
- Meneveau C.**, Lund T.S., Gabot W.H., 1999, “A Lagrangian dynamic subgrid – scale model of turbulence”, *J. Fluid Mech.*, (319), pp. 353 – 385
- Metais O.**, Lesieur M., 1992, “Spectral large eddy simulation of isotropic and stably stratified turbulence”, *J. Fluid Mech.*, (256), pp. 157-194
- Moeng C. H.**, 1984 “A large-eddy situation model for the study of planetary boundary – layer turbulence”, *J. Atmos. Sci.* 41 (13), pp. 2052 – 2062
- Moin P.**, K. Squires, W. Cabot and S. Lee, 1991, “A dynamic subgrid – scale model for compressible turbulence and scalar transport”, *Phys. Fluids A*, 3, (11), pp. 2746 – 2757
- Moin P.**, Kim J., 1982, “Numerical investigation of turbulent channel flow”, *J. Fluid Mech.*, (118), pp. 341 – 377
- Moin P.**, Squires K., Cabot W., Lee S., 1991, “A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport”, *Phys. Fluids A* 3, (11), pp. 2746 – 2757

- Mustata Radu**, Luis Valino, Carmen Jimenez, W.P. Jones, S. Bondi, 2006, “A probability density function Eulerian Monte Carlo field method for large eddy simulations: Application to a turbulent piloted methane/air diffusion flame (Sandia D)”, *Combustion and Flame*, (145), pp. 88 – 104
- Norbert Peters**, 2002, “Turbulent Combustion”, Cambridge Monographs on Mechanics, ISBN: 0 -521 – 66082 – 3
- Olsson M.** and L.Fucks, 1996, “Large eddy-simulation of the proximal region of a spatially developing circular jet”, *Phys. Fluid*, 8 (8), pp. 2125-2137
- Orszag S. A.**, M. Israeli, M.O. Deville, 1986, “Boundary conditions for incompressible flows”, *J. Sc. Comp.*, (1), pp. 75
- Pellett G. L.**, Isaac K. M., W. M. Humphreys, Gartrell L. R., Roberts W. L., Dancey C. L., Northam G. B., 1998, “Velocity and Thermal Structure, and Strain – Induced Extinction of 14% to 100% Hydrogen – Air Counterflow Diffusion Flames”, *Combustion and Flame*, (112), pp. 575 – 592
- Peters N.**, 1983, “Local quenching due to flame stretch and non – premixed turbulent combustion”, *Combust. Sci. Technol.*, (30), pp. 1 – 17
- Peters N.**, 1983, “Local quenching due to flame stretch and non – premixed turbulent combustion”, *Combust. Sci. Technol.*, (30), pp. 1 – 17
- Peters N.**, 1984, “Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion”, *Prog. Energy Combust. Sci.*, (10), pp. 319 – 339
- Petersen R.A.**, 1978, “The influence of wave dispersion on vortex rings”, *J. Fluid Mech*, 89, pp. 469-496
- Pierce C. D.**, Moin P., 2001, “Progress variable approach for large eddy simulation of turbulent combustion”, Rep. TF80, Flow Physics and Computation Division, Dept. Mech. Eng., Stanford Univ.
- Pierce C. D.**, Moin P., 2004, “Progress variable approach for large eddy simulation of turbulent non – premixed combustion”, *Journal of Fluids Mech.*, (504), pp.73 – 97
- Pierce D. Charles**, 1998, “A dynamic model for subgrid – scale variance and dissipation rate of a conserved scalar”, 10, (12), pp. 3041 – 3044
- Pierre Sagaut**, 2004, “Large Eddy Simulation for Incompressible Flows” (An Introduction – 2nd Edition with a Foreword by Massimo Germano), Springer

- Pino M. Martin**, Ugo Piomelli, Graham V. Candler, 2000, “Subgrid – Scale Models for Compressible Large-Eddy Simulations”, *Theoret. Comput. Fluid Dynamics*, (13), pp. 361 – 376
- Piomelli U.**, 1993, “High Reynolds number calculations using the dynamic subgrid scale stress model”, *Phys. Fluids A*,(5), pp. 1484 – 1490
- Pitsch H.**, 2002, “Improved pollutant predictions in large – eddy simulations of turbulent non – premixed combustion by considering scalar dissipation rate fluctuations”, *Proc. Combust. Inst.*, (29), 1971 – 1978
- Pitsch H.**, Chen M., Peters N., 1998, “Unsteady flamelet modeling of turbulent hydrogen – air diffusion flames”, *27th Symposium (International) on Combustion / The Combustion Institute*, pp. 1057 – 1064
- Pitsch H.**, Ihme M., 2005, “An unsteady flamelet / progress variable method for LES of non – premixed turbulent combustion”, *AIAA Pap.* 2004 – 557
- Pitsch H.**, Peters N., 1998, “A consistent Flamelet Formulation for Non – Premixed Combustion Considering Differential Diffusion Effects”, *Combustion and Flame*, (114), pp. 26 – 40
- Pitsch H.**, Peters N., 1998, “A consistent flamelet formulation for non – premixed combustion considering differential diffusion effects”, *Combustion and Flame*, 114, pp. 26 – 40
- Pitsch H.**, Steiner H., 2000a, “Large – eddy simulation of a turbulent piloted methane / air diffusion flame (Sandia flame D)”, *12*, (10), pp. 2541 – 2554
- Pitsch H.**, Steiner H., 2000b, “Scalar mixing and dissipation rate in large – eddy simulation of non – premixed turbulent combustion”, *Proc. Combust. Inst.* 28
- Pope Stephen. B.**, 1985, “PDF methods for turbulent reactive flows”, *Prog. Energy Combust. Sci.*, (11), pp. 119
- Pope Stephen B.**, 2003, “Turbulent Flows”, Cambridge University Press, ISBN : 0-521 – 59886 – 9
- Raman V.**, Pitsch H., Fox R. O., 2005, “Hybrid large – eddy simulation / Lagrangian filtered density function approach for simulating turbulent combustion”, *Combustion and Flame*, (143), pp. 56 - 78
- Raman V.**, Pitsch H., 2005, “Large eddy simulation of a bluff body stabilized non – premixed flame using a recursive – refinement procedure”, *Combustion and Flame*, (142), pp. 329 – 347

- Randy McDermott**, 2004. “Variable density formulation of the dynamic Smagorinsky model”
- Rehm G. R.**, Baum H. R., 1978, “The equation of motion for thermally driven flows”, J. Res. National Bureau of Standards, 83, (3), pp. 297 – 308
- Rembold B.**, 2003, “Direct and Large-Eddy Simulation of Compressible Rectangular Jet Flow”, Diss. ETH No. 15081, PhD thesis, Swiss Federal Institute of Technology (ETH)
- Rogallo R. S.**, Moin, P., 1984, “Numerical simulation of turbulent flows”, Ann. Rev. Fluid Mech., (16), pp. 99 – 137
- Sagaut P.**, 1996, “Numerical simulations of separated flows with subgrid models”, Rech. Aero. (1), pp. 51 – 63
- Sagaut P.**, Comte, P., Ducros, F., 2000 “Filtered subgrid – scale”, Phys. Fluids 12 (1), pp. 233 – 236
- Sagaut P.**, Garnier E., Terracol M., 2000, “A general algebraic formulation for multi-parameter dynamic subgrid-scale modeling”, International Journal of Computational Fluid Dynamics, (13), pp. 251 – 257
- Schlatter Philipp**, Steffen Stolz, Leonhard Kleiser, 2004, “LES of transitional flows using the approximate deconvolution model”, Heat and fluid Flow, (25), pp. 549 – 558
- Schmidt S.**, Blackburn H. M., 2001, “Spectral Element Based Dynamic Large Eddy Simulation of Turbulent Channel Flow”, 14th Australasian Fluid Mechanics Conference, Adelaide University, Adelaide, Australia
- Schumann U.**, 1975, “Subgrid scale model for finite difference simulations of turbulent flows in plane channels and annuli”, J. Comput. Phys., (18), pp. 376 – 404
- Selle L.**, G. Lartigue, T. Poinso, R. Koch, K.-U. Schildmacher, W. Krebs, B. Prade, P. Kaufmann, and D. Veynante, 2004, “Compressible large eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes”, Combustion and Flame, (137), pp. 489 – 505
- Shao L.**, Sarkar S., Pantano C., 1999, “On the relationship between the mean flow and subgrid stresses in large-eddy simulation of turbulent shear flows”, Phys. Fluids, 11 (5), pp. 1229 – 1248

- Sheikhi M. R. H.**, Drozda T. G., Givi P., Pope S. B., 2003, “Velocity – scalar filtered density function for large eddy simulation of turbulent flows”, *Phys. Fluids*, (15), 8, pp. 2321 – 2337
- Sheikhi M.R.H.**, T.G. Drozda, P. Givi, F.A. Jaber, S.B. Pope, 2005, “Large eddy simulation of a turbulent nonpremixed piloted methane jet flame (Sandia Flame D)”, *Proceedings of the Combustion Institute*, (30), pp. 549 – 556
- Siniša Krajnović**, Lars Danidson, 2002, “A mixed one-equation subgrid model for large-eddy simulation. *International Journal of Heat and Fluid Flow*”, 23, (4), pp. 413-425
- Smagorinsky J.**, 1963, “General circulation experiments with the primitive equations I: The basic experiment”, *Month. Weath. Rev.* 91 (30), pp. 99 – 165
- Sripakagorn P.**, Mitarai S., Kosaly G., Pitsch H., 2004, “Extinction and reignition in a diffusion flame (a direct numerical simulation study)”, *Journal Fluid Mech.*, 518, pp. 231 – 259
- Stephen R. Turns**, 2000, “An Introduction to Combustion” (Concepts and Applications - 2nd), McGRAW – HILL INTERNATIONAL EDITIONS, Mechanical Engineering Series, ISBN: 007 – 116910 – 5
- Steven van der Hoeven**, Bendiks Jan Boersma, Harm Jonker, Dirk Roekaerts, 2007, “Compressible large eddy simulation of turbulent non-premixed jet flames”, 2nd ECCOMAS Thematic Conference on Computational Combustion
- Stevens B. Moeng**, C. H. Sullivan, P., 1999, “Large – eddy simulations of radiatively driven convection: sensitivities to the representation of small scale”, *J. Atmos. Sci.*, (56), pp. 3963 – 3984
- Stolz S.**, Adams N., 1999a, “An approximate deconvolution procedure for large-eddy simulation”, *Phys. Fluids*, 11 (7), pp. 1699 – 1701
- Stolz S.**, Adams N., Kleiser L., 1999b, “The approximate deconvolution model applied to LES of turbulent channel flow”, *Kluwer*, pp. 163 – 174
- Stolz S.**, Adams N., Kleiser L., 2001a, “The approximate deconvolution model for large-eddy simulations of compressible flows and its applications to shock-turbulent-boundary-layer interaction”, *Phys. Fluids*, 13 (10), pp. 2985 – 3001
- Stolz S.**, Adams N., Kleiser L., 2001b, “An approximate deconvolution model for large-eddy simulations with application to incompressible wall bounded flows”, *Phys. Fluids*, 13 (4), pp. 997 – 1015

- Stolz S**, 2000, “Large-Eddy Simulation Of Complex Shear Flows Using An Approximate Deconvolution Model”, Phd thesis , Diss. ETH No.13861.
- Tennekes H.** and J.L Lumley, 2001, “A First Course in Turbulence”, Massachusetts Institute of Technology Cambridge, Massachusetts 02142.
- Thierry Poinsot**, Denis Veynante, 2001, “Theoretical and Numerical Combustion”, Edwards, ISBN: 1 – 930217 -05 – 6
- Tomboulides A. G.**, Jerry Lee, and S. A.Orszag, 1997, “Numerical simulation of low Mach number reactive flow”, J. Sc. Comp., 12 (2), pp. 139-167
- Tomboulides A. G.**, Jerry Lee, Konstantinos Boulouchos, 2002, “From Diffusion to Premixed Flames in an H₂ / Air Opposed Jet Burner: The role of Edge Flames”, Combustion and Flame, (130), pp. 171 – 184
- Uzun A.**, G.A. Blaisdell, and A.S. Lyrintzis, 2004, “3-d large eddy simulation for jet aeroacoustics”, AIAA J., pp. 3303-3322
- Van der Ven H.**, 1995, “A family of Large Eddy Simulation (LES) filters with nonuniform filter widths”, Phys. Fluids 7 (5), pp. 1171 – 1172
- Xu J.**, Pope S. B., 2000, “PDF calculations of turbulent non - premixed flames with local extinction”, Combustion and Flame, (123), pp. 281 – 307
- Yoshizawa A.**, 1991, “A statistically-derived subgrid model for large eddy simulation of turbulence”, Phys. Fluids A, 3 (8), pp. 2007 – 2009
- Yoshizawa A.**, Horiuti, K., 1985, “A statistically – derived subgrid – scale kinetic energy model for the large eddy simulation of turbulent flows”, J. Phys. Soc. Japan 54 (8), pp. 2834 – 2839
- Zang Y., R.L. Street**, and J.R. Koseff, 1993, “A dynamic mixed subgrid – scale model and it’s application to turbulent recirculating flows”, Phys. Fluid, 5 (12), pp. 3186 – 3196