



ΟΜΙΛΗΤΗΣ: Dr. Ευγένιος Σκούρας

ITE/ΕΙΧΗΜΥΘ & Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Πατρών
Μεταδιδακτορικός Συνεργάτης Dr. Β. Μπουργανού

ΘΕΜΑ: Προσομοίωση της ροής και μεταφοράς ρευστών στο εσωτερικό πορωδών υλικών υψηλής ετερογένειας με κάθετες προσεγγίσεις σε μεσοσκοπικό και μακροσκοπικό επίπεδο

Simulation of flow and transport phenomena in porous materials of increased heterogeneity using vertical approaches at mesoscopic and macroscopic levels

ΤΟΠΟΣ: Αίθουσα Σεμιναρίων ITE/ΕΙΧΗΜΥΘ

ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ: Πέμπτη, 15 Ιανουαρίου 2009

ΩΡΑ: 11:00

ΠΕΡΙΛΗΨΗ:

Το ευρύ φάσμα της κλίμακας μήκους και χρόνου που διέπουν τις ιδιότητες των διεργασιών ροής και διάχυσης ρευστών θέτουν σοβαρές προκλήσεις στη υπολογιστική πρόβλεψη τέτοιων ιδιοτήτων και στον βέλτιστο σχεδιασμό αντίστοιχων υλικών σε διεργασίες όπως ο διαχωρισμός και η ανίχνευση, καθώς και εφαρμογές βιο- και ναυτοτεχνολογίας. Για να ανταπεξέλθει κανείς σε αυτές τις προκλήσεις, πλέον συχνά απαιτείται ιεραρχική ανάλυση και υπολογιστικές μέθοδοι που αποτελούνται από πολλά επίπεδα ανάλυσης, κάθε επίπεδο να αντιμετωπίζει φαινόμενα σε συγκεκριμένο παράθυρο χρονικής και χωρικής κλίμακας.

Η εξαγωγή μεσοσκοπικών και μακροσκοπικών παραμέτρων ροής και μεταφοράς μάζας, όπως η διαπερατότητα, ο συντελεστής διάχυσης, ο συντελεστής διασποράς, ισόθερμες ρόφησης, συντελεστές αντίδρασης και αποσύνθεσης, καθώς και η εκλεκτικότητα, βασισμένη σε ολοκλήρωση ιδιοτήτων σε κλίμακα πόρων και εν γένει μικροδομών υψηλής ετερογένειας είναι ένα ακόμα ανοικτό πρόβλημα. Ελπιδοφόρες προσπάθειες έχουν γίνει για να συσχετιστούν ιδιότητες, όπως η διαπερατότητα και η διασπορά, στις μικροσκοπικές προελεύσεις τους. Τις περισσότερες φορές, αυτό επιτυγχάνεται με την λύση τοπικών ή μέσω εξισώσεων πεδίου στο επίπεδο ανακατασκευασμένων δομών.



ΙΤΕ/ΕΙΧΗΜΥΘ

Αυτές οι γεωμετρικές δομές στοχεύουν στην προσομοίωση σχετικών μικροσκοπικών χαρακτηριστικών (αλληλεπίδραση ρευστού-στερεού) που ελέγχει τις τιμές μεσοσκοπικών και μακροσκοπικών παραμέτρων. Η ροή και η μεταφορά μάζας ελέγχονται συνήθως από τις αλληλεπιδράσεις των υλικών με τα τοιχώματα για μεγέθη πόρων συγκρίσιμα με το μέγεθος του ρευστού που ρέει ή διαχέεται στο εσωτερικό του υλικού. Στις περιπτώσεις αυτές, η παραδοχή του συνεχούς παύει να ισχύει και γίνονται υπολογισμοί τροχιών μορίων και σωματιδίων με ντετερμινιστικές ή στοχαστικές μεθόδους. Η δομή υλικών τυπικών σε ανάλογες εφαρμογές, αφού ανα-κατασκευαστεί είτε σε μικροσκοπικό, είτε σε μακροσκοπικό επίπεδο, γίνεται η βάση για υπολογισμούς ροϊκών και τροχιακών εξισώσεων για την εύρεση θέσεων, διαμορφώσεων και κινήσεων μορίων ρευστού, για τον υπολογισμό σχετικών ιδιοτήτων μεταφοράς και θερμοδυναμικής, και για την εν γένει εξαγωγή χρήσιμων συμπερασμάτων σχετικά με την πραγματική παροχή διαλυμένων, διαχεόμενων και ροφημένων σωματιδίων προς και πάνω σε ενεργές θέσεις των αντίστοιχων υλικών. Στη συγκεκριμένη παρουσίαση θα δειχθούν μεθοδολογίες προσομοίωσης της ροής και των φαινομένων μεταφοράς σε διάφορες φάσεις ετερογενών υλικών, καθώς και φαινομένων στις διεπιφάνειες ρευστών και υλικών με υπολογιστικές μεθόδους.

Έχοντας στο παρελθόν παρουσιάσει εκτενώς τεχνικές Μοριακής Δυναμικής και kinetic Monte Carlo κατά τη ροή και την ενεργοποιημένη διάχυση αραιών αερίων σε ετερογενή υλικά στη περιοχή Knudsen (σε μικροκλίμακα), εδώ θα εστιάσουμε σε νέες μεθόδους έξυπνης στοχαστικής προσομοίωσης (Direct Simulation Monte Carlo) ροής και διάχυσης αραιών πολυσυστατικών αερίων σε ανακατασκευασμένα ετερογενή υλικά στη μεσοσκοπική κλίμακα, με χρήση μικροσκοπικών χαρακτηριστικών. Οι τεχνικές αυτές επιτρέπουν την ανάλυση της ροής και διάχυσης αερίων σε πολύ μεγάλο εύρος συνθηκών, από την περιοχή μοριακής ροής μέχρι περιοχές συνεχούς περιγραφής σε ιδιαίτερα συνεπή τρόπο.

Σε μακροσκοπικό επίπεδο, θα παρουσιαστούν αρχικά αλγόριθμοι επίλυσης μονοφασικών και διφασικών ροών (νερό, αέρας) με μεθόδους υπολογιστικής ρευστομηχανικής. Στο ίδιο επίπεδο θα αναφερθούν μέθοδοι επίλυσης της παλμικής ροής αίματος, δημιουργίας αποθέσεων και έντονων στενώσεων σε ανακατασκευασμένες προβληματικές αρτηρίες υψηλής ετερογένειας που παρουσιάζουν έντονες ανακυκλοφορίες ροής. Σε αυτές τις περιοχές αναλύονται τα χαρακτηριστικά της τοπικής μικροροής (οριακό στρώμα) γύρω από την στένωση που οδηγούν σε υψηλές διατμητικές τάσεις και στιγμιαίες αποκολλήσεις ρευστού. Στην ίδια ανάλυση μελετάται και η επίδραση της τοποθέτησης τεχνικών επιθεμάτων (stent) για θεραπεία.



ΙΤΕ / ΕΙΧΗΜΥΘ

Τέλος, θα παρουσιασθούν σύγχρονες απλεγματικές μέθοδοι επίλυσης των εξισώσεων ροής και διάχυσης, οι οποίες αποφεύγουν πλήρως το δύσκολο και χρονοβόρο στάδιο της δημιουργίας συνεκτικού πλέγματος χώρου, ενώ έχουν ξεπεράσει προβλήματα αστάθειας που είχαν στο παρελθόν. Οι απλεγματικές μέθοδοι πλέον προσφέρουν επίλυση των εξισώσεων σε οιαδήποτε γεωμετρία γρήγορα και με συγκρίσιμη ή και μεγαλύτερη ακρίβεια από αντίστοιχες συνήθεις μεθόδους πεπερασμένων στοιχείων. Βρίσκουν δε εφαρμογή και σε μελέτες ροής και μεταφοράς σε περιοχές έντονης στένωσης ή εν γένει μεγάλων βαθμώσεων, καθώς επιτρέπουν πλέον την ανάλυση διαφορικών δεύτερης τάξης ή ασυνεχειών των ιδιοτήτων πεδίου με αυξημένη σταθερότητα, αποφεύγοντας την ανάγκη ολοκλήρωσης των διαφορικών εξισώσεων («ασθενής» μορφή εξισώσεων). Μπορούν δε να χρησιμοποιηθούν αμιγώς σε υβριδικές προσομοιώσεις ροής και διάχυσης σε πολλαπλά επίπεδα, καθώς οι ιδιότητες κάθε σημείου επίλυσης μπορεί να υπολογίζεται πλέον ανεξάρτητα και αναλυτικά («ισχυρή» μορφή εξισώσεων) με χρήση μεσοσκοπικών ή μικροσκοπικών περιγραφών.