Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών

Υπολογιστική Ρευστοδυναμική με Πεπερασμένα Στοιχεία

2η Εργασία

«Μεταφορά μάζας μέσα σε μικροσυσκευή σε μόνιμες & μεταβατικές συνθήκες»

Ανάθεση: 26/04/2021-Παράδοση: 16/05/2021

ΜΕΡΟΣ Α

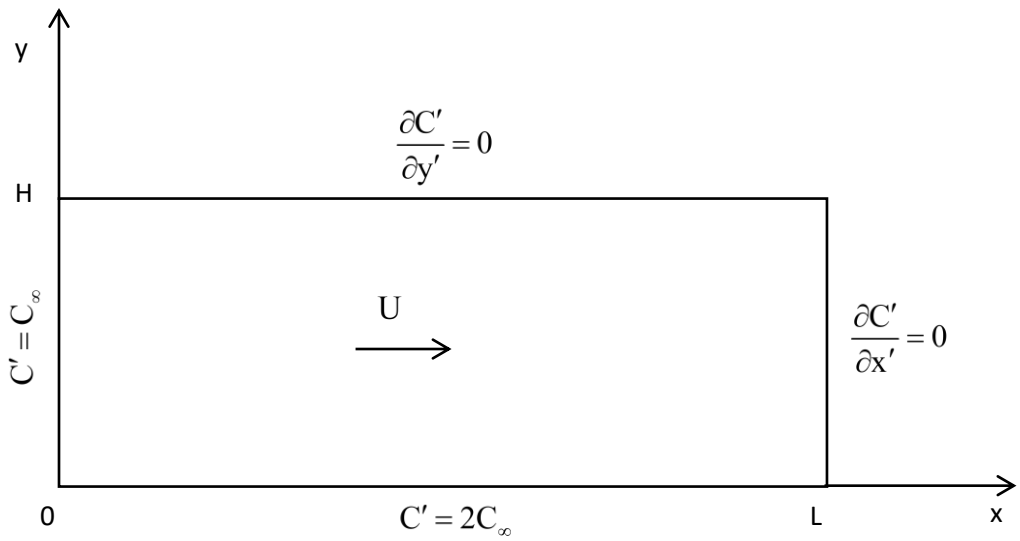
Η συγκέντρωση ενός συστατικού σε μια μικροσυσκευή περιγράφεται σε μόνιμες συνθήκες από την παρακάτω μερική διαφορική εξίσωση:

$$U\frac{\partial C'}{\partial x'} = D\left(\frac{\partial^2 C'}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 C'}{\partial y'^2}\right) \tag{1}$$

με ΣΣ:

$$\begin{aligned} &C\left(x'=0, y'\right) = C_\infty \\ &C\left(x', y'=0\right) = 2C_\infty \\ &\left.\frac{\partial C'}{\partial y'}\right|_{x',y'=H} = 0 \\ &\left.\frac{\partial C'}{\partial x'}\right|_{x'=L,y'} = 0 \end{aligned} \tag{2α-δ}$$

όπου U είναι η μέση ταχύτητα της ροής, D είναι ο συντελεστής διάχυσης του συστατικού και C_∞ η χαρακτηριστική συγκέντρωση. Στην είσοδο υπάρχει σταθερή παροχή συστατικού με ομοιόμορφη κατανομή C_∞, ενώ το κάτω τοίχωμα της συσκευής είναι σε επαφή με μεμβράνη, όπου το συστατικό έχει συγκέντρωση $2C_\infty$. Το άνω τοίχωμα είναι αδιαπέραστο από το συστατικό, ενώ στην έξοδο έχουν επιτευχθεί συνθήκες πλήρους ανεπτυγμένης ροής. Οι τονούμενες μεταβλητές εκφράζουν ποσότητες με διαστάσεις.



Εικόνα 1: Σχηματική των συνθηκών του φυσικού προβλήματος.

I. Να γραφεί το πρόβλημα σε αδιάσταση μορφή εισάγοντας την συγκέντρωση εισόδου C_∞ και το μήκος L της συσκευής ως χαρακτηριστικά μεγέθη, όπου θα προκύψει ο αδιάστατος αριθμός Péclet, $Pe = UL/D$.

II. Να διαμορφωθεί το μοντέλο πεπερασμένων στοιχείων για το θεμελιώδες στοιχείο με δι-γραμμικές συναρτήσεις βάσης και να δοθεί η μορφή των τοπικών μητρώων.

III. Έστω ένα πλέγμα με δύο στοιχεία σε κάθε κατεύθυνση.
   a. Να δοθεί ένα σκαρίφημα του πλέγματος και της αρίθμησης κόμβων/στοιχείων που θα επιλέξετε. Πόσοι είναι οι άγνωστοι του προβλήματος?
   b. Να δώσετε τον πίνακα συνεκτικότητας έχοντας περιγράψει την τοπική αρίθμηση.
   c. Να δοθεί ο συνολικός πίνακας των συντελεστών σε μορφή πλήρους πίνακα. Πόσο είναι το εύρος ζώνης του πίνακα?
   d. Να περιγραφεί η υλοποίηση των συνοριακών συνθηκών και πως αλλάζουν οι αντίστοιχες γραμμές του παραπάνω πίνακα και του δεξιού μέλους.

IV. Να αναπτυχθεί κώδικας πεπερασμένων στοιχείων για την επίλυση του προβλήματος σε μόνιμες συνθήκες με δι-γραμμικές συναρτήσεις βάσης και Gauss-Legendre ολοκλήρωση τριών σημείων σε κάθε κατεύθυνση.
   a. Να γίνει έλεγχος πύκνωσης πλέγματος με 10×10, 20×20, 40×40 και 80×80 στοιχεία. Για το σκοπό αυτό να δώσετε ισοϋψείς της συγκέντρωσης και να σχολιάσετε την σύγκλιση της λύσης καθώς πυκνώνουμε. Ποιο πλέγμα κρίνετε καταλληλότερο για την αναπαράσταση της λύσης?
   b. Να αναπαραστήσετε γραφικά την κατανομή της συγκέντρωσης για Pe=5, 10, 20, 40 και 80 αυξάνοντας ανάλογα την μέση ταχύτητα, με όποιο πλέγμα κρίνετε καταλληλότερο. Πως επιδρά η αύξηση του αριθμού Péclet?

V. Να δημιουργηθεί υπορουτίνα που υπολογίζει τη μάζα του συστατικού στην άνω πλευρά της συσκευής μέσω του ολοκληρώματος: $M = \int_0^1 C(x, y = 0.5)\,dx$ και

αναπαρασταθεί σε διάγραμμα η μάζα συναρτήσει του αριθμού Pe, για Pe=5, 10, 20, 40 και 80. Η ολοκλήρωση να γίνει με τρία σημεία Gauss στην οριζόντια διεύθυνση. Πως εξηγείτε τη μεταβολή της μάζας με αύξηση του αριθμού Pe?

VI. Να τροποποιηθεί κατάλληλα ο παραπάνω κώδικας ώστε να υλοποιούνται οι παρακάτω ΣΣ στην άνω επιφάνεια της συσκευής που βρίσκεται η μεμβράνη.

a. Σταθερή κλίση του συστατικού: $-\left.\frac{\partial C}{\partial y}\right|_{x,y=0.5} = Q_H$

b. Απορρόφηση-εκρόφηση συστατικού: $-\left.\frac{\partial C}{\partial y}\right|_{x,y=0.5} = k_a\left(1-C\right)-k_d C$

Για το σκοπό αυτό στην υπορουτίνα των συνοριακών συνθηκών να χρησιμοποιηθεί μια ακέραια μεταβλητή iop με χρήση flag, ώστε για iop=0, 1 ή 2 να υλοποιούνται οι ΣΣ μη διείσδυσης ή του τρέχοντος ερωτήματος, αντίστοιχα. Να αναπαρασταθεί και να σχολιασθεί η κατανομή της συγκέντρωσης για πλέγμα 80×80 με Pe=10, a) Q_h=1 και Q_h=2 και b) k_a=k_d=1 και k_a=k_d=10 για κάθε μία από τις δύο παραπάνω περιπτώσεις.

ΜΕΡΟΣ Β

Θεωρούμε το ίδιο πρόβλημα με παραπάνω, αλλά σε μεταβατικές συνθήκες:

$$\frac{\partial C'}{\partial t'} + U\frac{\partial C'}{\partial x'} = D\left(\frac{\partial^2 C'}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 C'}{\partial y'^2}\right) \tag{3}$$

με ΑΣ και ΣΣ:

$$\begin{aligned}
&\forall x', y', \quad t' = 0 \ : \ C' = C_\infty \\
&C\left(x' = 0, y', t' > 0\right) = C_\infty \\
&C\left(x', y' = 0, t' > 0\right) = 2C_\infty \\
&\left.\frac{\partial C'}{\partial y'}\right|_{x', y'=H, t'>0} = 0 \\
&\left.\frac{\partial C'}{\partial x'}\right|_{x'=L, y', t'>0} = 0
\end{aligned} \tag{4α-ε}$$

I. Να γραφεί το πρόβλημα σε αδιάστατη μορφή, όπως παραπάνω.
II. Να διαμορφωθεί το μοντέλο πεπερασμένων στοιχείων με δι-γραμμικές συναρτήσεις βάσης. Η διακριτοποίηση της χρονικής παραγώγου να γίνει με πλήρως άρρητο σχήμα.
III. Να αναπτυχθεί κώδικας πεπερασμένων στοιχείων που θα επιλύει το αδιάστατο πρόβλημα χρησιμοποιώντας δι-γραμμικές συναρτήσεις βάσης και αριθμητική ολοκλήρωση κατά Gauss-Legendre τριών σημείων σε κάθε κατεύθυνση.
IV. Να γίνει χρονική και χωρική πύκνωση του μοντέλου. Για το σκοπό αυτό να γίνουν διαγράμματα της κατανομής της συγκέντρωσης κατά μήκος της γραμμής x=1 τις χρονικές στιγμές 0.1 και 1.5 με Pe=5 για τα πλέγματα 40×40, 80×80 και χρονικό βήμα $dt=10^{-1},10^{-2},10^{-3}$ και 10^{-4}. Πως αποκρίνεται η λύση πυκνώνοντας?
V. Να αναπαρασταθούν οι ισοϋψείς της συγκέντρωσης για Pe=5 τις χρονικές στιγμές t=0.1, t=0.5, t=1, t=1.5 και t=2 για όποιο πλέγμα και χρονικό βήμα κρίνετε κατάλληλο.
VI. Να αναπαρασταθεί γραφικά η χρονική εξέλιξη της συνολικής μάζας στην άνω πλευρά της συσκευής για όποιο πλέγμα και χρονικό βήμα κρίνετε κατάλληλο και Pe=5. Μετά από πόσο χρόνο (σε minutes) επιτυγχάνονται μόνιμες συνθήκες και πως συγκρίνεται η μάζα σε αυτή τη χρονική στιγμή με τη μάζα που υπολογίστηκε στο μέρος Α?

Παράμετροι:

Γεωμετρία: $L = 5\times10^{-2}\ \mathrm{m}, H = 2.5\cdot10^{-2}\ \mathrm{m}$

Φυσικές ιδιότητες: $D = 10^{-5}\ \mathrm{m^2/s}$

Συνθήκες: $U = 10^{-3}\ \mathrm{m/s}$

Υλικό για μελέτη:

1) Σημειώσεις μαθήματος
2) Reddy J.N, 1993. An introduction to the finite element method. Chapter 4.
3) Brodkey R.S. & Hershey H.C., 1990. Φαινόμενα Μεταφοράς. Κεφ. 4-5

Σχόλια:

- Η εργασία είναι αυστηρά ατομική. Η συνεργασία για συζήτηση ενθαρρύνεται, αλλά τυχόν φαινόμενα αντιγραφής θα οδηγήσουν σε μηδενισμό της εργασίας σας.
- Τα αποτελέσματα σας να δοθούν υπό μορφή τεχνικής αναφοράς ακολουθώντας την παραπάνω αρίθμηση. Η σύνταξη μπορεί να γίνει είτε με κειμενογράφο, είτε με καλής ποιότητας σαρωμένα χειρόγραφα. Ο προσανατολισμός του κειμένου να είναι σταθερός.
- Η κατάθεση θα γίνει μέσω eclass στο σχετικό φάκελο. Παρακαλείσθε να αναρτήσετε ένα συμπιεσμένο φάκελο στον οποίο θα περιέχονται (α) οι δύο κώδικες για κάθε μέρος της εργασίας, (β) δύο input αρχεία με κατάλληλο όνομα, που θα είναι το ίδιο με αυτό που διαβάζει ο αντίστοιχος κώδικας και (γ) ένα αρχείο μορφής .pdf της αναφοράς σας. Στα input αρχεία πρέπει να περιέχονται χαρακτηριστικές τιμές της αναφοράς σας. Οι κώδικες θα είναι σε αρχεία της μορφής .f90 και όχι ως παράρτημα σε pdf αρχείο. Οι κώδικες θα πρέπει να συνοδεύονται από κατάλληλο σχολιασμό στους επιμέρους υπολογισμούς. Δεν χρειάζεται να ανεβάσετε την υπορουτίνα ARROW, δεν χρειάζεται να ανεβάσετε όλο το projcet.
- Τα γραφήματα θα πρέπει να έχουν κατάλληλα διαμορφωμένους άξονες και επεξηγηματικές λεζάντες. Όταν δίνετε κάποιο γράφημα ή ομάδα γραφημάτων, προσπαθήστε να αναπτύξετε την σκέψη σας γύρω από το αριθμητικό σχήμα ή/και τη φυσική του προβλήματος με κάποιο σχολιασμό και όχι μόνο αποτελέσματα.

Καλή επιτυχία!