

Πάτρα, . . ./. . ./ . . .

Αρ. Πρωτ.: . . . . . .

## Προς: Επιτροπή Ερευνών του Ειδικού Λογαριασμού του Τ.Ε.Ι. Πάτρας

**Παραδοτέα Έργου**

|  |  |
| --- | --- |
| Επιστημονικός υπεύθυνος:  | **ΚΑΜΒΥΣΑΣ ΓΡΗΓΟΡΙΟΣ** |
| Τίτλος έργου:  | **ΑΡΧΙΜΗΔΗΣ ΙΙΙ: ΕΝΙΣΧΥΣΗ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΩΝ ΟΜΑΔΩΝ ΣΤΑ ΤΕΙ - ΥΠΟΕΡΓΟ 8 «ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΚΑΙ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΔΙΕΡΕΥΝΗΣΗ ΡΟΪΚΟΥ ΠΕΔΙΟΥ ΒΙΟΛΟΓΙΚΩΝ ΥΓΡΩΝ ΓΙΑ ΘΕΡΑΠΕΥΤΙΚΟ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟ ΣΕ ΚΛΙΝΙΚΑ ΣΗΜΑΝΤΙΚΕΣ ΣΥΝΘΗΚΕΣ»** |
| Κωδικός έργου: | 10.74.11.02 - 061 |

*Παραδοτέο Π.Ε.3*

*Μεθοδολογία δημιουργίας του τρισδιάστατου πλέγματος (3D meshing method)*

Στα πλαίσια του πακέτου,ολοκληρώθηκαν η ανάπτυξη μεθόδων διακριτοποίησης όγκου (meshing) για μεθόδους FEM, η τυχαία ή στοιχισμένη διακριτοποίηση για απλεγματικές μεθόδους, και η διακριτοποίηση για μεθόδους δικτύου Boltzmann.

## Περίληψη

Σε αυτό το Πακέτο Εργασίας μελετώνται η δυνατότητα εφαρμογής, η ακρίβεια και η ταχύτητα σύγκλισης καινοτόμων απλεγματικών μεθόδων Meshless Local Petrov-Galerkin (MLPG) και μεθόδων Δικτύου-Boltzmann (LB), όπως και μεθόδων πεπερασμένων στοιχείων (FEM), ως λύτες σε προβλήματα ροής, αγωγής και συναγωγής θερμότητας. Τα παραπάνω φαινόμενα επιλύονται σε πεπλεγμένες γεωμετρίες πορωδών μέσων στις δύο διαστάσεις. Όσον αφορά τα προβλήματα αγωγής, μελετήθηκαν καταστάσεις μόνιμης κατάστασης και χρονο­μεταβαλλόμενες, όπως επίσης και περιπτώσεις όπου η θερμική αγωγιμότητα των μέσων μεταβάλλεται με την θερμοκρασία. Οι αριθμητικές λύσεις των προβλημάτων αυτών επιτυγχάνεται με τη χρήση της MLPG μεθόδου καθώς έχει δειχθεί ότι είναι πιο αποτελεσματική. Η προσέγγιση των μεταβλητών πραγματοποιείται με συναρτήσεις βάσης, οι οποίες προκύπτουν από τη μέθοδο παρεμβολής Κυλιόμενων Ελαχίστων Τετραγώνων (MLS). Η ακρίβεια και η αποτελεσματικότητα της μεθόδου διερευνάται με μεταβολή i) της διακριτοποίησης του χώρου , ii) της τάξης της συνάρτησης βάσης, iii) του σχήματος του χώρου ολοκλήρωσης γύρω από κάθε κόμβο, iv) του εύρους του λόγου των θερμικών αγωγιμοτήτων των μέσων, και v) του εύρους του λόγου των θερμοχωρητικοτήτων των μέσων. Σε όλες τις περιπτώσεις οι συνοριακές συνθήκες είναι σταθερές. Στα προβλήματα ροής, η οδηγούσα δύναμη είναι εξωτερικά επιβαλλόμενη, και το αντιπροσωπευτικό πεδίο περιοδικό, όπως και η ροή. Η ροή θεωρείται ασυμπίεστη και γίνεται διερεύνηση των αποτελεσμάτων σε ένα εύρος των αριθμών Reynolds και Prandtl. Η μέθοδος Lattice-Boltzmann τετραγωνικού πλέγματος 9 ταχυτήτων (D2Q9) προτύπου BGK μονής χαλάρωσης εφαρμόστηκε για τον υπολογισμό του πεδίου ροής. Αποδεικνύεται ότι αυτή η μέθοδος Lattice-Boltzmann είναι προτιμητέα σε αυτά τα προβλήματα καθώς συγκλίνει ταχύτερα. Επιπλέον προτείνεται ένα υβριδικό μοντέλο για τα προβλήματα συναγωγής, όπου χρησιμοποιείται η μέθοδος Δικτύου-Boltzmann για το ροϊκό πρόβλημα, και η MLPG μέθοδος για τo πρόβλημα μεταφοράς θερμότητας.

## Οι εξισώσεις του προβλήματος

Η ασυμπίεστη ροή με ταυτόχρονη μεταφορά θερμότητας περιγράφονται από ένα σύνολο μερικών διαφορικών εξισώσεων. Συγκεκριμένα αυτές είναι η εξίσωση συνέχειας, η εξίσωση Navier-Stokes, και η εξίσωση διατήρησης της ενέργειας. Συγκεκριμένα:

 

 

 

Όπου , η ταχύτητα του ρευστού στους πόρους του πορώδους μέσου. ,,,,εκφράζουν αντίστοιχα την πυκνότητα, το δυναμικό ιξώδες, την θερμοχωρητικότητα, την θερμική αγωγιμότητα και την θερμοκρασία τοπικά στο πορώδες μέσο.είναι η οδηγούσα, εξωτερική δύναμη της ροής, που εφαρμόζεται στην χ-διεύθυνση.

Στο πρώτο μέρος επιλύεται η εξίσωση της ενέργειας χωρίς την παρουσία ταχυτήτων, όπου σταθερές θερμοκρασίες (*T*in και *T*out) επιβάλλονται στα δύο απέναντι τοιχώματα του χωρίου, ενώ τα άλλα δύο θεωρούνται θερμικά μονωμένα.

Στο δεύτερο μέρος επιλύονται οι εξισώσεις Navier-Stokes, θεωρώντας περιοδικότητα στην ροή κατά την χ-διεύθυνση, και θέτοντας τα άνω και κάτω όρια του πεδίου τοιχώματα μηδενικής ταχύτητας. Οι ταχύτητες που υπολογίζονται, χρησιμοποιούνται στη συνέχεια για την εύρεση του θερμοκρασιακού προφίλ από την εξίσωση της ενέργειας, με τις παραπάνω συνοριακές συνθήκες.

## Η μέθοδος MLPG

### 3.1 Γενικά στοιχεία

Η απλεγματική μέθοδος Meshless Local Petrov-Galerkin (MLPG) βασίζεται στην έκφραση των μερικών διαφορικών εξισώσεων στην τοπική ασθενή μορφή, δηλαδή στην ολοκλήρωσή των πάνω σε δευτερογενείς τομείς. Η προσέγγιση των μεταβλητών πραγματοποιείται με συναρτήσεις βάσης, οι οποίες προκύπτουν από τη μέθοδο παρεμβολής Κυλιόμενων Ελαχίστων Τετραγώνων (MLS). Όλα τα ολοκληρώματα μπορούν να υπολογιστούν εύκολα πάνω σε συνηθισμένα σχήματα ή στα όριά τους. Καθώς χρησιμοποιείται παρεμβολή Κυλιόμενων Ελαχίστων Τετραγώνων, η λύση είναι επαρκώς ομαλή, και δεν απαιτείται καμία τεχνική εξομάλυνσης για τον υπολογισμό των παραγώγων της. Στην παρούσα εργασία παρουσιάζονται πολλά παραδείγματα εφαρμογής της μεθόδου, η οποία βρίσκεται να είναι απλή και αποτελεσματική σε μεγάλο φάσμα προβλημάτων μηχανικής.

Ακολουθεί η περιγραφή της μεθόδου παρεμβολής Κυλιόμενων Ελαχίστων Τετραγώνων (MLS) [16, 18], για την προσέγγιση της λύσης, *Th*(***x***), όπου είναι το εσωτερικό γινόμενο ενός διανύσματος πολυωνυμικής βάσης, ***p***(***x***), και ενός διανύσματος συντελεστών, ***a***(***x***).

 

όπου , και *q* ο αριθμός των μονωνύμων που συγκροτούν την πολυωνυμική βάση (3 ή 6). Ο τοπικός χαρακτήρας της MLS προσέγγισης μπορεί να καθοριστεί γενικεύοντας την κλασσική προσέγγιση ελαχίστων τετραγώνων, όπου οι συντελεστές ***a*** είναι ανεξάρτητοι της θέσης, ***x***.

Η Εξ.(1) αναφέρεται στην προσέγγιση των ελαχίστων τετραγώνων σε ολόκληρο το πεδίο λύσης. Παρόλα αυτά ίδια είναι και η τοπική προσέγγιση, όπου σχετίζεται με τον κάθε κόμβο του πεδίου λύσης ξεχωριστά. Με σκοπό τον καθορισμό των συντελεστών ***a***(***x***), κατασκευάζεται και ελαχιστοποιείται η σταθμισμένη Ευκλείδια νόρμα:

 

Η συνάρτηση *wI(****x****)*, είναι η συνάρτηση βάρους *wI*(***x***)≡*wI*(***x–x****I*), όπου αναφέρεται στον κάθε κόμβο *I*. Η ποσότητα στην παρένθεση είναι η διαφορά μεταξύ της τοπικής προσέγγισης της στον κόμβο *I*, και της τιμής της συνάρτησης στον ίδιο κόμβο *TI*, *n* είναι ο αριθμός των κόμβων στο πεδίο επιρροής του σημείου ,για τους οποίους η σταθμισμένη συνάρτηση έχει τιμή διάφορη του μηδενός. Η ελαχιστοποίηση της ποσότητας *J* ως προς τους συντελεστές ***a*** του διανύσματος οδηγεί στο ακόλουθο γραμμικό σύστημα:

 

Όπου  είναι το διάνυσμα της τιμής της συνάρτησης πάνω στους κόμβους, και  είναι συναρτησιακοί πίνακες των *wI*(***x***) και *p*(***x****I*). Αντικαθιστώντας την λύση Εξ. στην γενική μορφή της προσέγγισης, Εξ.**Error! Reference source not found.**, έχουμε την τελική μορφή της προσέγγισης των κυλιόμενων ελαχίστων τετραγώνων.

 

Όπου**είναι η συνάρτηση βάσης των Κυλιόμενων Ελάχιστων Τετραγώνων του χώρου του προβλήματος . Οι παράγωγοι της συνάρτησης βάσης μπορούν να υπολογισθούν εφαρμόζοντας τον κανόνα της αλυσίδας.

Κρίσιμης σημασίας για την MLPG μέθοδο είναι η επιλογή του χωρίου, στο οποίο θα τελεσθεί η τοπική ολοκλήρωση. Στις περισσότερες εφαρμογές της μεθόδου [12], ως τέτοια χωρία χρησομοποιούνται κυκλικοί τομείς, με ακτίνα ένα κλάσμα της μέσης τοπικής απόστασης των κόμβων (συνήθως 60%) γύρο από κάθε κόμβο. Με αυτή την προσέγγιση, αν και έχει επιτυχίες, είτε δεν καλύπτεται όλο το προς επίλυση χωρίο είτε οδηγεί σε σημαντικές αλληλεπικαλύψεις των τοπικών ολοκληρωμάτων. Αυτό μπορεί να οδηγήσει σε σημαντικά σφάλματα σταθερότητας της μεθόδου, τα οποία συσσωρεύονται σε χρονικά μεταβαλλόμενα προβλήματα. Στην παρούσα εργασία, χρησιμοποιούνται ορθογώνιες περιοχές γύρο από κάθε κόμβο για τον υπολογισμό τον ολοκληρωμάτων, για πρώτη φορά στην MLPG μέθοδο. Αυτές οι ορθογώνιες περιοχές που τελούνται οι ολοκληρώσεις επιλέγονται έτσι ώστε να μην υπάρχουν αλληλεπικαλύψεις και ταυτόχρονα να καλύπτεται όλο το χωρίο του προβλήματος, Εικ. **3.1**(α). Αυτό οδηγεί σε σημαντική αύξηση της σταθερότητας και αντοχής της μεθόδου, ειδικά σε περιπτώσεις υψηλών λόγων *k*r. Κατά την πύκνωση του πλέγματος, στις περιοχές κοντά στις διεπιφάνειες Σχ. 3.(β), δεν μπορεί να αποφευχθεί η αλληλοεπικάλυψη στην περιοχή όπου προσθέτονται οι νέοι κόμβοι χωρίς την σημαντική αύξηση του υπολογιστικού χρόνου. Συνεπώς, ολοκλήρωση σε ορθογώνιους τομείς χρησιμοποιείται σε όλους τους κόμβους, εκτός των περιοχών που βρίσκονται στα όρια της πύκνωσης, όπου τα ολοκληρώματα υπολογίζονται σε κυκλικούς τομείς, όπως φαίνεται στο Σχ. 3.(α). Αυτό περιορίζεται σε μια μικρή περιοχή, έτσι η ολική σταθερότητα της μεθόδου κρατάτε σε υψηλά επίπεδα.

(α) (β)

**Σχήμα** **3.1.** (α) Σύστημα ολοκλήρωσης με Ορθογώνια MLPG με τα σημεία Gauss της ολοκλήρωσης γύρω από χαρακτηριστικούς κόμβους. (β) Τοπική εκλέπτυνση στη διακριτοποίηση MLPG. Μπλε σημεία: Βασικοί κόμβοι (σε 100px) με εφαρμογή ορθογώνιων χωρίων ολοκλήρωσης. Πράσινα σημεία: Μαζική εκλέπτυνση σε κόμβους (σε 200px) κοντά διεπαφές αγωγιμότητας με ορθογώνια ένταξης που εφαρμόζονται. Κόκκινα σημεία: τοπικά εκλεπτυσμένοι κόμβοι (σε 200px) γύρω από άκρα με μαζική εκλέπτυνση με εφαρμογή κυκλικών χωρίων ολοκλήρωσης. Αστεροειδή σημεία: όρια (σημεία Gauss) της ολοκλήρωσης γύρω από τους αντίστοιχους κόμβους.

*3.2 Εφαρμογή της MLPG μεθόδου για προσομοίωση αγωγής θερμότητας*

Η σταθμισμένη ολοκληρωτική μορφή της εξίσωσης αγωγής θερμότητας στο χωρίο Ωx γύρο από τον κόμβο *x* δίδεται από τη σχέση:

 

Όπου η συνάρτηση βάρους της ολοκλήρωσης *w*=1 όπου *x*∈Ω*x*, και 0 αλλού. Ο δεύτερος όρος (όρος αγωγής) της Εξ. 8 μπορεί να μετασχηματισθεί μέσω του θεωρήματος της απόκλισης του Gauss, ώστε να προκύψει η ακόλουθη ασθενής συμμετρική μορφή:

 

όπου ∂Ω*x* είναι το σύνορο του χωρίου Ω*x*. Με την δεδομένη συνάρτηση βάρους ο τελευταίος όρος Εξ. 9 είναι ταυτοτικά μηδέν. Η χρονική παράγωγος (1ος όρος της Εξ.) διακριτοποιήται με την μέθοδο Crank-Nicholson. Η αξιοπιστία της μεθόδου μπορεί να αυξηθεί σημαντικά εάν οι μη γραμμικοί όροι που προκύπτουν περιγραφούν με μία ημί-άμεση μορφή (στο χρονικό βήμα *m* ) ως ακολούθως :

 

Η θερμική αγωγιμότητα, **, η οποία εξαρτάται από την θερμοκρασία (πρώτης τάξης εξάρτηση σε αυτήν την εργασία, ωστόσο μπορεί να γενικευθεί σε πιο σύνθετες περιγραφές ), και το γινόμενο της πυκνότητας με την θερμοχωρητικότητα, **, ορίζονται ως:

 ,

 .

Οι αδιαστατοποιημένες ποσότητες προσδιορίζονται με βάση τη γεωμετρία του χωρίου και τις συνοριακές συνθήκες:

 , , ,

Όπως επίσης και τις φυσικές ιδιότητες του υλικού στους πόρους:

 .

 ,

 ,

Οι αδιάστατες σταθερές του προβλήματος ορίζονται ως:

 , , , .

Ενώ έχουμε και διαστατές σταθερές (1/Κ), ώστε να είναι αδιάστατη η θερμική αγωγιμότητα των μέσων:

 , 

*k*r είναι ο λόγος των ανεξάρτητων από τη θερμοκρασία όρων της θερμικής αγωγιμότητας, ενώ *b*r είναι ο λόγος των εξαρτημένων. Ω1 και Ω2 είναι τα χωρία του μέσου 1 (πόροι) και 2 (στερεός όγκος). Ορίζοντας Φ μια συνάρτηση βήματος, που ορίζεται στην περιοχή του στερεού όγκου (μονάδα εκεί, μηδέν αλλού), οι αδιάστατες ποσότητες μπορούν να γραφούν:

 ,

 .

Εφαρμόζοντας όλα τα παραπάνω στην Εξ. παίρνουμε την τελική (αδιάστατη) επαναληπτική μορφή, χρονικού βήματος . Κρατώντας τους όρους που αναφέρονται στο *m* χρονικό βήμα στο αριστερό μέλος της εξίσωσης, ενώ σταθερές και μεταβλητές προηγούμενου βήματος στο άλλο, έχουμε το προς επίλυση σύστημα:

 

Αυτό το γραμμικοποιημένο σύστημα της μορφής **A(*T***(m-1)**) *T***(m)= **B(*T***(m-1)**)** χρησιμοποιείται για τον προσδιορισμό του θερμοκρασιακού προφίλ στον χρόνο.

Το μέγεθος των ορθογώνιων τομέων ολοκλήρωσης θέτεται ίσο με την τοπική απόσταση των κόμβων (*d*), ώστε να καλύπτεται όλο το χωρίο χωρίς αλληλοεπικαλύψεις, ενώ η ακτίνα των κυκλικών περιοχών ορίζεται συνήθως στα 0.6 *d*. Για την ολοκλήρωση σε όλους τους δευτερογενείς τομείς χρησιμοποιείται η μέθοδος Gauss. Η τιμή της ακτίνας, των προς ολοκλήρωση τομέων, στα όρια της πύκνωσης του πλέγματος λαμβάνεται ίση με 0.1*d*. Αν και είναι αρκετά μικρότερη από την συνηθισμένη τιμή, είναι αποτελεσματική για να ελαχιστοποιηθούν τα φαινόμενα της αλληλοεπικάλυψης. Περαιτέρω λεπτομέρειες σχετικά με την διαδικασία και τις συνοριακές συνθήκες μπορούν να βρεθούν στα [18-20]. Οι ουσιαστικές συνοριακές συνθήκες (Dirichlet) επιβάλλονται ρητά με πρώτης τάξης MLS παρεμβολή [19].

## Διακριτοποίηση FEM

Σαν αναφορά, χρησιμοποιούνται τα αποτελέσματα της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων. Χρησιμοποιείται η τυπική ασθενής μορφή, σύμφωνα με την προσέγγιση κατά Galerkin, με μη δομημένο (τριγωνικό) πλέγμα στοιχείων στις δύο περιοχές του μέσου, και οριακά στρώματα στα όρια των διεπιφανειών.

Όσον αφορά την χρονική εξέλιξη χρησιμοποιήθηκε ένας προσαρμοστικός αλγόριθμος, όπου προσαρμόζει το χρονικό βήμα σε κάθε επανάληψη, έτσι ώστε το σφάλμα να φράσσεται σε κάποια προκαθορισμένα όρια. Συγκεκριμένα, το αρχικό χρονικό βήμα θέτεται ίσο με 10-6 s, και ελέγχεται η L2 (Ευκλείδεια) νόρμα της διαφοράς των θερμοκρασιών μεταξύ δύο επαναλήψεων. Εάν αυτό είναι μεγαλύτερο από μία συγκεκριμένη μέγιστη τιμή (5), το βήμα μειώνεται στο μισό, ενώ ο υπολογισμός για τον συγκεκριμένο χρόνο επαναλαμβάνεται. Αντίθετα εάν αυτό είναι μικρότερο από μια ελάχιστη τιμή (1), το χρονικό βήμα για την επόμενη επανάληψη διπλασιάζεται.

## Εφαρμογή των μεθόδων MLPG και FEM για προσομοίωση ροής και συναγωγής θερμότητας σε βιολογικά συστήματα

Οι μεταβλητές του προβλήματος αδιαστατοποιούνται ως εξής:

 

Εφαρμόζοντας τις παραπάνω εκφράσεις στις διαστατές εξισώσεις του προβλήματος, και παίρνοντας τον στροβιλισμό των εξισώσεων, έχουμε τις αδιάστατες εξισώσεις στην μορφή ταχύτητας-στροβιλότητας. Συγκεκριμένα:

 

 

 

 

Όπου , ,,. Με τις εξισώσεις σε αυτήν την μορφή, μηδενίζεται ο όρος της εξωτερικής δύναμης. Το πρόβλημα αυτό παρακάμπτεται με την επιβολή μιας παροχής σαν συνοριακή συνθήκη εισόδου, η οποία θα οδηγεί σε ίδιο αριθμό Reynolds (), με αυτόν που προκύπτει από την επιβολή της δύναμης. Με βάση αυτό γίνονται οι συγκρίσεις.

Παίρνοντας την σταθμισμένη ολοκληρωτική μορφή των παραπάνω εξισώσεων στο χωρίο Ωx και επιλέγοντας όπως παραπάνω τη συνάρτηση βάρους της ολοκλήρωσης *w*=1 όπου *x*∈Ω*x*, και 0 αλλού και εφαρμόζοντας το θεώρημα της απόκλισης του Gauss, οι εξισώσεις που χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό της ροής και επιλύονται μόνο στους πόρους του μέσου παίρνουν την μορφή:

 

 

 

Μια επαναληπτική μέθοδος χρησιμοποιείται για την λύση των παραπάνω εξισώσεων. Η μέθοδος αυτή έχει ήδη πολλές επιτυχίες σε προβλήματα ροής. Ο λόγος που οι εξισώσεις επιλύονται στην μορφή ταχύτητας-στροβιλότητας, είναι η αποφυγή του εναλλασσόμενου πλέγματος, που χρησιμοποιείται για την λύση των εξισώσεων στην μορφή ταχύτητας-πίεσης. Η στροβιλότητα στα σύνορα, υπολογίζεται από τον ορισμό της . Η διαδικασία ξεκινά με μια αρχική εκτίμηση του πεδίου ταχυτήτων , η οποία πρέπει να ικανοποιεί την εξίσωση της συνέχειας , και υπολογίζεται η στροβιλότητα από τον ορισμό της. Εν συνεχεία, επιλύονται οι εξισώσεις (27-28), θεωρώντας γνωστή τη στροβιλότητα για τον υπολογισμό των ταχυτήτων . Αυτό το πεδίο ταχυτήτων που προκύπτει, εν γένει δεν ικανοποιεί την εξίσωση της συνέχειας . Προς τούτο, θα πρέπει η ταχύτητα  να διορθώνεται κατά έναν παράγοντα , έτσι ώστε  . Υποθέτοντας το πεδίο διόρθωσης ταχυτήτων αστρόβιλο , ορίζεται ένα δυναμικό διόρθωσης (δυναμικό Helmholtz) , ως . Συνδυάζοντας τα παραπάνω, καταλήγουμε στην εξίσωση για αυτό το δυναμικό:

 

Η σταθμισμένη ολοκληρωτική μορφή της εξίσωσης αυτής στο χωρίο Ωx γύρο από τον κόμβο *x* δίδεται από τη σχέση:

 

όταν η εξίσωση για το δυναμικό έχει λυθεί, και το πεδίο ταχυτήτων είναι ενημερωμένο, ικανοποιείται η εξίσωση της συνέχειας. Από τις νέες αυτές τιμές της ταχύτητας , υπολογίζεται η στροβιλότητα από την εξίσωση (29). Η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται, έως ότου η μέγιστη διαφορά των ταχυτήτων είναι μεγαλύτερη από κάποια συγκεκριμένη τιμή (10-5).

Μετά την λύση του ροϊκού προβλήματος, οι ταχύτητες χρησιμοποιούνται για την εύρεση του θερμοκρασιακού προφίλ.

## Διακριτοποίηση μεθόδου LB

Η μέθοδος δικτύου- Boltzmann είναι μια εναλλακτική αριθμητική μέθοδος προσομοίωσης ροών ρευστών και επίλυσης φυσικών προβλημάτων μεταφοράς θερμότητας και μάζας. Η βασική ιδέα της μεθόδου είναι η διακριτοποίηση των φυσικών μεταβλητών που περιγράφουν το πρόβλημα και η χρήση απλών εξισώσεων κίνησης, που προέρχονται από την κινητική θεωρία, για να περιγραφεί η χρονική τους εξέλιξη. Πρόκειται ουσιαστικά για ένα «μεσοσκοπικό» πρότυπο, το οποίο υπό φυσικούς περιορισμούς είναι ικανό να αναπαραγάγει την μακροσκοπική συμπεριφορά των περιγραφόμενων φυσικών μεταβλητών. Η αναπαραγωγή των μακροσκοπικών εξισώσεων προϋποθέτει την μικροσκοπική περιγραφή των εξισώσεων σ διακριτό χώρο ικανό να αναπαράγει τις φυσικές συμμετρίες του χώρου. Συνεπώς η διακριτοποίηση του χώρου θα πρέπει να πραγματοποιηθεί με κατάλληλο δίκτυο. Το δίκτυο που θα επιλεγεί θα πρέπει να μπορεί να διατηρήσει τις ιδιότητες του χώρου και να είναι ικανό να αναπαράγει σωστά τις μακροσκοπικές εξισώσεις. Θα πρέπει συνεπώς να διατηρεί τις συμμετρίες του χώρου (αναστροφή, περιστροφή περί άξονα, μεταφορά) και να είναι το ίδιο συμμετρικό και ισότροπο προς όλες τις κατευθύνσεις. Οι παραπάνω προϋποθέσεις ικανοποιούνται από το πλέγμα Bravais. Ένα πλέγμα Bravais ορίζεται ως μια άπειρη σειρά διακριτών σημείων σε διάταξη και προσανατολισμό, ο οποίος είναι ισότροπος προς όλες τις κατευθύνσεις. Κάθε σημείο του δικτύου μπορεί να προσδιοριστεί από το άνυσμα R,

 R = n1a1 + n2a2,

όπου n1, n2 ακέραιοι και a1, a2 γραμμικώς ανεξάρτητα ανύσματα, που καλούνται θεμελιώδη. Τα θεμελιώδη ανύσματα ορίζουν την θεμελιώδη μοναδιαία κυψελίδα, ένα στοιχειώδη όγκο δηλαδή, με την ιδιότητα, αν μετατοπιστεί μέσω όλων των ανυσμάτων σε ένα πλέγμα Bravais, γεμίζει ακριβώς τον χώρο, χωρίς να αφήνει κενά ή να τον υπερκαλύπτει. Ένα πλέγμα Bravais παραμένει αναλλοίωτο στην ομάδα συμμετριών του χώρου, που συνίσταται από τις συμμετρίες μεταφοράς και στροφής. Υπάρχουν πέντε διδιάστατα δίκτυα Bravais (πλάγιο, ορθογώνιο, ορθογώνιο κεντρωμένο, τετραγωνικό και εξαγωνικό). Από τα παραπάνω δίκτυα προτιμούνται συνήθως εκείνα με τον μικρότερο αριθμό σύνταξης, για λόγους υπολογιστικής ευκολίας. Τα δίκτυα που χρησιμοποιούνται ευρύτερα είναι το εξαγωνικό για την ανάπτυξη του προτύπου των *7* ανυσματικών ταχυτήτων (*D2Q7*) και το τετραγωνικό για το πρότυπο των *9* ανυσματικών ταχυτήτων (*D2Q9*). Η συντομογραφία των προτύπων *DpQr*, φανερώνει την διάσταση του δικτύου (δείκτης *p*) και τον αριθμό των ανυσματικών ταχυτήτων (δείκτης *r*). Στα επόμενα σχήματα φαίνονται οι θεμελιώδεις κυψελίδες των δύο δικτύων [21].

Εξαγωνικό:

**0**

**1**

**4**

**2**

**3**

**5**

**6**

**Σχήμα 6.1:** Θεμελιώδης κυψελίδα του εξαγωνικού δικτύου

Τα ανύσματα που συνδέουν τον κεντρικό κόμβο της θεμελιώδους κυψελίδας με τους γειτονικούς κόμβους στο εξαγωνικό δίκτυο δίνονται από την ακόλουθη σχέση:

 

Το D2Q7 όπως φαίνεται από τα παραπάνω είναι πρότυπο δύο μέτρων ταχυτήτων, μηδενικού μέτρου (*i=0*) και αδιάστατου μέτρου *1* (*i=1…6*).

Τετραγωνικό:

**0**

**1**

**2**

**3**

**4**

**5**

**6**

**7**

**8**

**Σχήμα 6.2:** Θεμελιώδης κυψελίδα του τετραγωνικού δικτύου

Τα ανύσματα που συνδέουν τον κεντρικό (*0*) με τους γείτονες κόμβους (*1…8*), ορίζονται από τις εκφράσεις:

 

 

Είναι προφανές πως το *D2Q9*, είναι πρότυπο με τρία διαφορετικά μέτρα ταχυτήτων (*cσ, σ=0,I,II*),

 *c0=0* (*i=0*), *cI=1* (*i=1…4*) και *cII=* (*i=5…8*).

Σε τρεις διαστάσεις όπως και στις δύο διαστάσεις, το δίκτυο που θα επιλεγεί θα πρέπει να είναι αναλλοίωτο κάτω από τους μετασχηματισμούς της ομάδας των συμμετριών (μεταφορών-στροφών) του χώρου. Έτσι θα πρέπει το πλέγμα να είναι Bravais, όπου σε αναλογία με τις δύο διαστάσεις, κάθε σημείο του δικτύου μπορεί να προσδιοριστεί από το τρισδιάστατο άνυσμα *R*,

 *R = n1a1 + n2a2 +n3a3*,

όπου *n1*, *n2*, *n3* ακέραιοι και *a1*, *a2*, *a3* τα γραμμικώς ανεξάρτητα θεμελιώδη ανύσματα. Υπάρχουν δεκατέσσερα πλέγματα Bravais στις τρεις διαστάσεις, που ομαδοποιούνται σε επτά κρυσταλλικά συστήματα (τρικλινές, μονοκλινές ορθορομβικό, τετραγωνικό, τριγωνικό, εξαγωνικό και κυβικό). Τα δεκατέσσερα πλέγματα προκύπτουν με εκφυλισμό των κρυσταλλικών συστημάτων σε απλά, εδροκεντρωμένα και χωροκεντρωμένα.

Τα πλέγματα που χρησιμοποιούνται ευρύτερα στην ανάπτυξη των προτύπων, είναι το κυβικό χωροκεντρωμένο (*BCC*) για την ανάπτυξη των προτύπων των 15 ταχυτήτων (*D3Q15*), και το κυβικό εδροκεντρωμένο (*FCC*) για τα πρότυπα των 19 ταχυτήτων (*D3Q19*). Στα επόμενα Σχήματα (6.2-**Error! Reference source not found.**6.5) φαίνονται οι κυψελίδες Winger – Seitz, που καταλαμβάνουν ίδιο όγκο με τις θεμελιώδεις, αλλά περιέχουν μόνο ένα πλεγματικό σημείο [22].

Κυβικό χωροκεντρωμένο *D3Q15(α)*:

**Σχήμα 6.3:** Θεμελιώδης κυψελίδα του κυβικού χωροκεντρωμένου δικτύου

x

y

z

*D3Q15(β)*:

x

y

z

**Σχήμα 6.4:** Θεμελιώδης κυψελίδα της εναλλακτικής μορφής του κυβικού χωροκεντρωμένου δικτύου που χρησιμοποιείται στα πρότυπα

Κυβικό εδροκεντρωμένο *D3Q19*:

 **Σχήμα 6.5:** Θεμελιώδης κυψελίδα του κυβικού εδροκεντρωμένου δικτύου

x

y

z

Είναι προφανές πως τα *D3Q15(α)*, *D3Q15(β)*και *D3Q19*,είναι πρότυπα με τρία διαφορετικά μέτρα ταχυτήτων (*cσ, σ=0,I,II*). Αναλυτικά τα μέτρα των ταχυτήτων στα τρία πρότυπα είναι:

*c0=0 (i=0), cI=2 (i=1…6), cII= (i=7…14)*, για το *D3Q15(α)*

*c0=0 (i=0), cI=1 (i=1…6), cII= (i=7…14)*, για το *D3Q15(β)*

*c0=0 (i=0), cI=1 (i=1…6), cII= (i=7…14), γ*ια το *D3Q19*

Όπου με τον δείκτη *β* (*D3Q15(β)*) έχει θεωρηθεί η εναλλακτική έκφραση του κυβικού χωροκενρωμένου. Τα παραπάνω πρότυπα μπορεί να τροποποιηθούν αφαιρώντας τα ακίνητα σωματίδια και συνεπώς τα μηδενικά μέτρα ταχυτήτων, σε *D3Q14(α)*, *D3Q14(β)*, *D3Q18* αντίστοιχα. Το πρότυπο που έχει επιλεγεί στην παρούσα εργασία είναι το *D3Q15(β)*, για λόγους ευκολίας, τόσο υπολογιστικής (σε σύγκριση με το *D3Q19*, όσο και εύρεσης των διαφόρων συντελεστών (σε σύγκριση με το *D3Q15(α)*).

## ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

[1] A. Bejan, Heat Transfer, John Wiley & Sons, NY, 1993.

[2] S. Mahjoob, K. Vafai, Analytical characterization of heat transport through biological media incorporating hyperthermia treatment, Int. J. Heat Mass Transf., 52 (2009) 1608-1618.

[3] T.C. Chiam, Heat transfer with variable conductivity in a stagnation-point flow towards a stretching sheet, Int. Commun. Heat Mass Transf., 23 (1996) 239-248.

[4] M. Arunachalam, N.R. Rajappa, Thermal-Boundary Layer in Liquid-Metals with Variable Thermal-Conductivity, Appl. Sci. Res., 34 (1978) 179-187.

[5] G.E. Wnek, J.C.W. Chien, F.E. Karasz, M.A. Druy, Y.W. Park, A.G. MacDiarmid, A.J. Heeger, Variable-density conducting polymers: Conductivity and thermopower studies of a new form of polyacetylene: (CH)x, Journal of Polymer Science: Polymer Letters Edition, 17 (1979) 779-786.

[6] B. Nayroles, G. Touzot, P. Villon, Generalizing the finite element method: Diffuse approximation and diffuse elements, Comput. Mech., 10 (1992) 307-318.

[7] T. Belytschko, Y.Y. Lu, L. Gu, Element-Free Galerkin Methods, Int. J. Numer. Methods Eng., 37 (1994) 229-256.

[8] D. Organ, M. Fleming, T. Terry, T. Belytschko, Continuous meshless approximations for nonconvex bodies by diffraction and transparency, Comput. Mech., 18 (1996) 225-235.

[9] T. Zhu, S.N. Atluri, A modified collocation method and a penalty formulation for enforcing the essential boundary conditions in the element free Galerkin method, Comput. Mech., 21 (1998) 211-222.

[10] W.K. Liu, Y. Chen, C.T. Chang, T. Belytschko, Advances in multiple scale kernel particle methods, Comput. Mech., 18 (1996) 73-111.

[11] G.C. Bourantas, E.D. Skouras, V.C. Loukopoulos, G.C. Nikiforidis, An accurate, stable and efficient domain-type meshless method for the solution of MHD flow problems, J. Comput. Phys., 228 (2009) 8135-8160.

[12] S.N. Atluri, T. Zhu, A new meshless local Petrov-Galerkin (MLPG) approach in computational mechanics, Comput. Mech., 22 (1998) 117-127.

[13] G.C. Bourantas, E.D. Skouras, G.C. Nikiforidis, Adaptive support domain implementation on the moving least squares approximation for mfree methods applied on elliptic and parabolic pde problems using strong-form description, CMES - Computer Modeling in Engineering and Sciences, 43 (2009) 1-25.

[14] A.N. Kalarakis, G.C. Bourantas, E.D. Skouras, V.C. Loukopoulos, V.N. Burganos, Lattice-Boltzmann and meshless point collocation solvers for fluid flow and conjugate heat transfer, Int. J. Numer. Methods Fluids, 70 (2012) 1428-1442.

[15] G.C. Bourantas, A.J. Petsi, E.D. Skouras, V.N. Burganos, Meshless point collocation for the numerical solution of Navier-Stokes flow equations inside an evaporating sessile droplet, Eng. Anal. Bound. Elem., 36 (2012) 240-247.

[16] G.C. Bourantas, E.D. Skouras, V.C. Loukopoulos, V.N. Burganos, Heat transfer and natural convection of nanofluids in porous media, Eur J Mech B Fluids, 43 (2014) 45-56.

[17] E.D. Skouras, G.C. Bourantas, V.C. Loukopoulos, G.C. Nikiforidis, Truly meshless localized type techniques for the steady-state heat conduction problems for isotropic and functionally graded materials, Eng. Anal. Bound. Elem., 35 (2011) 452-464.

[18] N. Karagiannakis, G.C. Bourantas, A.N. Kalarakis, E.D. Skouras, V.N. Burganos, Efficiency of the Meshless Local Petrov-Galerkin Method with Moving Least Squares Approximation for Thermal Conduction Applications, in: T. Simos (Ed.) ICNAAM 2013, Rhodos, Greece, 2013.

[19] S.N. Atluri, Z.D. Han, A.M. Rajendran, A new implementation of the meshless finite volume method, through the MLPG "Mixed" approach, CMES-Comp. Model. Eng. Sci., 6 (2004) 491-513.

[20] X.H. Wu, W.Q. Tao, Meshless method based on the local weak-forms for steady-state heat conduction problems, Int. J. Heat Mass Transf., 51 (2008) 3103-3112.

[21] A.N. Kalarakis, V.N. Burganos and A.C. Payatakes, Galilean-invariant lattice-Boltzmann simulation of liquid-vapor interface dynamics, Phys. Rev. E, 65 (2002) 056702

[22] A.N. Kalarakis, V.N. Burganos and A.C. Payatakes, Three-dimensional lattice-Boltzmann model of van der Waals fluids, Phys. Rev. E, 67 (2003) 016702