

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ

ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ

ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΑΣ

Μεταπτυχιακή Εργασία

Η ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΩΝ ΟΛΟΚΛΗΡΩΤΙΚΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ ΣΕ
ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ ΡΟΗΣ ΕΚΤΟΣ ΘΕΡΜΟΔΥΝΑΜΙΚΗΣ ΙΣΟΡΡΟΠΙΑΣ

υπό

ΒΑΡΟΥΤΗ Β. ΣΤΥΛΙΑΝΟ

Διπλωματούχου Μηχανολόγου Μηχανικού Βιομηχανίας, Π.Θ., 2004

Υπεβλήθη για την εκπλήρωση μέρους των

απαιτήσεων για την απόκτηση του

Μεταπτυχιακού Διπλώματος Ειδίκευσης

2006



**ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ & ΚΕΝΤΡΟ ΠΛΗΡΟΦΟΡΗΣΗΣ
ΕΙΔΙΚΗ ΣΥΛΛΟΓΗ «ΓΚΡΙΖΑ ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ»**

Αριθ. Εισ.: 5483/1
Ημερ. Εισ.: 06-07-2007
Δωρεά: Συγγραφέα
Ταξιθετικός Κωδικός: Δ
620.106 011 3
ΒΑΡ

© Βαρούτης Β. Στυλιανός, 2006

Η έγκριση της μεταπτυχιακής εργασίας από το Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών Βιομηχανίας της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας δεν υποδηλώνει αποδοχή των απόψεων του συγγραφέα (Ν. 5343/32 αρ. 202 παρ. 2).

Εγκρίθηκε από τα Μέλη της Πενταμελούς Εξεταστικής Επιτροπής:

Πρώτος Εξεταστής Δρ. Βαλουγεώργης Δημήτριος
(Επιβλέπων) Αναπληρωτής Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών
Βιομηχανίας, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Δεύτερος Εξεταστής Δρ. Βλάχος Νικόλαος
Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών Βιομηχανίας
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας.

Τρίτος Εξεταστής Δρ. Μποντόζογλου Βασίλειος
Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών Βιομηχανίας,
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Τέταρτος Εξεταστής Δρ. Ανδρίτσος Νικόλαος
Επίκουρος Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών
Βιομηχανίας, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Πέμπτος Εξεταστής Δρ. Λιακόπουλος Αντώνιος
Καθηγητής, Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών, Πανεπιστήμιο
Θεσσαλίας.

Ευχαριστίες

Με αφορμή την παρούσα διατριβή, θα ήθελα να εκφράσω τον σεβασμό μου και τις ευχαριστίες μου στον επιβλέποντα Αναπληρωτή Καθηγητή κ. Δημήτριο Βαλουγεώργη. Η εμπιστοσύνη που μου έδειξε στο συγκεκριμένο θέμα έρευνας καθώς και η σημαντική βοήθεια που μου προσέφερε καθ' όλη την διάρκεια της συνεργασίας μας είναι δύο θεμελιώδεις παράγοντες που συντέλεσαν στην ολοκλήρωση του εγχειρήματος αυτού. Ο τρόπος σκέψης που μου ενέπνευσε, ο οποίος συνίσταται στην κριτική αντιμετώπιση των επιστημονικών θεμάτων, αποτελεί ένα εξαιρετο εφόδιο για την επιστημονική μου πορεία. Επίσης, είμαι ευγνώμων στα υπόλοιπα μέλη της εξεταστικής επιτροπής της μεταπτυχιακής εργασίας μου, Δρ. Βλάχο Νικόλαο, Δρ. Μποντόζογλου Βασίλειο, Δρ. Ανδρίτσο Νικόλαο και Δρ. Λιακόπουλο Αντώνιο, για την προσεκτική ανάγνωσή της και για τις πολύτιμες υποδείξεις τους. Ένα μεγάλο ευχαριστώ στους Δρ. Νάρη Στέργιο, Δρ. Μπρέγιαννη Γιώργο και Μισδανίτη Σεραφείμ για την πολύτιμη συμπαράσταση και βοήθεια τους για την εκπόνηση της μεταπτυχιακής εργασίας.

Τέλος θα ήθελα να ευχαριστήσω την Μιχαλάκη Μαλαματή για την κατανόησή της, ιδιαίτερα κατά τη διάρκεια των τελευταίων μηνών της προσπάθειάς μου. Πάνω απ' όλα όμως, είμαι ευγνώμων στους γονείς μου, Βίκτωρα και Ευαγγελία Βαρούτη για την αγάπη τους και την υλική και ψυχολογική υποστήριξή τους όλα αυτά τα χρόνια.

Η ολοκλήρωση της παρούσας εργασίας οφείλεται σε σημαντικό βαθμό στην οικονομική υποστήριξη που προσφέρθηκε από το Εθνικό Πρόγραμμα Ελεγχόμενης Θερμοπυρηνικής Σύντηξης: Association EURATOM – Hellenic Republic.

Ιούλιος 2006

Βαρούτης Β. Στυλιανός

Η ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΩΝ ΟΛΟΚΛΗΡΩΤΙΚΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ ΣΕ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ ΡΟΗΣ ΕΚΤΟΣ ΘΕΡΜΟΔΥΝΑΜΙΚΗΣ ΙΣΟΡΡΟΠΙΑΣ

ΒΑΡΟΥΤΗΣ Β. ΣΤΥΛΙΑΝΟΣ

Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών Βιομηχανίας, 2006

Επιβλέπων Καθηγητής: Δρ. Βαλουγεώργης Δημήτριος, Αναπληρωτής Καθηγητής

Περίληψη

Η μέθοδος των ολοκληρωτικών εξισώσεων αποτελεί ένα αξιόπιστο υπολογιστικό σχήμα για την επίλυση κινητικών εξισώσεων που περιγράφουν μονοδιάστατα προβλήματα ροής και φαινομένων μεταφοράς εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας, δηλαδή σε προβλήματα όπου ο αριθμός Knudsen είναι μεγαλύτερος του μηδενός. Η επέκταση της μεθόδου σε πολυδιάστατα προβλήματα δεν είναι τετριμμένη και προφανής και αποτελεί το αντικείμενο της παρούσας εργασίας. Συγκεκριμένα, διατυπώνεται με σαφή και συστηματικό τρόπο η μαθηματική μεθοδολογία επέκτασης της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων σε πολυδιάστατα προβλήματα. Αυτό επιτυγχάνεται με την επίλυση των κλασικών προβλημάτων της πλήρους ανεπτυγμένης ροής σε αγωγό και της ροής σε κοιλότητα για όλο το εύρος του αριθμού Knudsen. Τα αριθμητικά αποτελέσματα συγκρίνονται λεπτομερώς με τα αντίστοιχα της μεθόδου των διακριτών ταχυτήτων, όσον αφορά την ακρίβεια, την ταχύτητα σύγκλισης και τον απαιτούμενο υπολογιστικό χρόνο. Εξάγονται χρήσιμα συμπεράσματα σχετικά με τα υπολογιστικά πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων.

Στην μέθοδο των ολοκληρωτικών εξισώσεων διατυπώνεται μια έκφραση κλειστής μορφής για την συνάρτηση κατανομής, ολοκληρώνοντας την κινητική εξίσωση κατά

μήκος των χαρακτηριστικών. Στην συνέχεια, η έκφραση της συνάρτησης κατανομής αντικαθίστανται στην αντίστοιχη ροπή που εκφράζει το μακροσκοπικό μέγεθος. Έτσι, προκύπτουν μια ή περισσότερες ολοκληρωτικές εξισώσεις κλειστής μορφής, οι οποίες εκφράζουν τις αντίστοιχες άγνωστες μακροσκοπικές ποσότητες του προβλήματος. Οι ολοκληρωτικές εξισώσεις δεν περιέχουν την άγνωστη συνάρτηση κατανομής και για τον λόγο αυτό απαραίτητη είναι μονό η διακριτοποίηση του προβλήματος στον φυσικό χώρο και όχι στο χώρο των μοριακών ταχυτήτων. Είναι προφανές, ότι η μέθοδος των ολοκληρωτικών εξισώσεων προσεγγίζει την επίλυση οποιουδήποτε προβλήματος με διαφορετικό τρόπο απ' ότι η μέθοδος των διακριτών ταχυτήτων. Στην μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων επιλύεται ένα σύστημα εξισώσεων, οι οποίες περιέχουν την άγνωστη συνάρτηση κατανομής και για τον λόγο αυτό είναι απαραίτητη η διακριτοποίηση τους στον φασικό χώρο (φυσικό χώρο και χώρο μοριακών ταχυτήτων).

Η διακριτοποίηση της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων πραγματοποιείται με ποικίλες τεχνικές. Αποδεικνύεται ότι όταν η διακριτοποίηση γίνεται στο γεωμετρικό μέσο (και όχι στις κορυφές) των κελιών του χωρικού πλέγματος, υποθέτοντας παράλληλα ότι οι άγνωστες μακροσκοπικές ποσότητες σε κάθε κελί παραμένουν σταθερές, τότε η μαθηματική – υπολογιστική επεξεργασία απλοποιείται και η μέθοδος των ολοκληρωτικών εξισώσεων παρουσιάζει περισσότερο ενδιαφέρον. Η σύγκριση των αριθμητικών αποτελεσμάτων πραγματοποιείται με βάση τις μακροσκοπικές ποσότητες της ροής, όπως ροή μάζας και συντελεστής οπισθέλκουσας. Με την ενδελεχή και συστηματική εξέταση των αριθμητικών αποτελεσμάτων προκύπτουν τα θετικά και αρνητικά στοιχεία της μεθόδου. Αποδεικνύεται ότι στην μέθοδο των ολοκληρωτικών εξισώσεων εξαλείφονται οι ταλαντωτικές συμπεριφορές των μακροσκοπικών ποσοτήτων που οφείλονται κυρίως σε ασυνέχειες των οριακών συνθηκών. Αυτό είναι ένα σημαντικό πλεονέκτημα της μεθόδου, σε σχέση με τη μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων. Επίσης,

αποδεικνύεται ότι η μέθοδος των ολοκληρωτικών εξισώσεων υπερτερεί της μεθόδου των διακριτών ταχυτήτων σε αποτελεσματικότητα όταν η ροή είναι κοντά στην ελεύθερη μοριακή περιοχή, δηλαδή όταν ο αριθμός Knudsen είναι μεγάλος. Αντίθετα, υστερεί υπολογιστικά όταν η ροή βρίσκεται κοντά στην συνεχή περιοχή, δηλαδή όταν ο αριθμός Knudsen είναι μικρός.

Συνολικά, τονίζεται ότι με βάση την προτεινόμενη διατύπωση η μέθοδος των ολοκληρωτικών εξισώσεων αποτελεί μία εναλλακτική αξιόπιστη μέθοδο επίλυσης κινητικών εξισώσεων σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen. Το συμπέρασμα αυτό είναι ιδιαίτερα σημαντικό στην περίπτωση σύνθετων προβλημάτων ροών και φαινομένων μεταφοράς εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας, όπου η επίλυση τους θα πρέπει να επιτυγχάνεται με περισσότερες από μία μεθοδολογίες ώστε τα αριθμητικά αποτελέσματα να τεκμηριώνονται με τον καλύτερο δυνατόν τρόπο.

Αφιερώνεται στους γονείς μου
Βίκτωρα και Ευαγγελία Βαρούτη

Περιεχόμενα

Περίληψη.....	iv
Κεφάλαιο 1:.....	3
1.1 Νέες τάσεις σε ρευστομηχανική και φαινόμενα μεταφοράς	3
1.2 Χαρακτηρισμός περιοχών ροής με βάση τον αριθμό <i>Knudsen</i>	5
1.3 Δομή μεταπτυχιακής εργασίας.....	7
1.4 Βιομηχανικές εφαρμογές.....	9
1.4.1 Συστήματα κενού στον αντιδραστήρα ITER.....	9
1.4.2 Μικροροές σε MEMS.....	11
Κεφάλαιο 2: Κινητική Θεωρία.....	14
2.1 Εισαγωγή.....	14
2.2 Χαρακτηριστικά μοριακά μεγέθη.....	16
2.3 Βασικές έννοιες - συνάρτηση κατανομής.....	16
2.4 Συχνότητα συγκρούσεων και μέση ελεύθερη διαδρομή.....	20
2.5 Εξίσωση εξέλιξης της συνάρτησης κατανομής.....	22
2.6 Δυαδικές συγκρούσεις	25
2.7 Βασικές ιδιότητες της Εξίσωσης Boltzmann	28
2.7.1 Αναλλοίωτες των συγκρούσεων.....	28
2.7.2 Μακροσκοπικές εξισώσεις.....	29
2.7.3 Θεώρημα H.....	30
2.7.4 Κατανομή Maxwell.....	33
2.7.5 Ενδομοριακό δυναμικό	35
2.8 Οριακές συνθήκες	41
2.9 Κινητικά μοντέλα	43
2.10 Γραμμικοποιημένη εξίσωση Boltzmann	45
2.11 Γραμμικοποίηση κινητικών μοντέλων	47
Κεφάλαιο 3: Κλασσικά προβλήματα ροής.....	49
3.1 Εισαγωγή	49

3.2 Ροή Poiseuille.....	49
3.3 Ροή Couette.....	56
3.4 Διακριτοποίηση.....	59
3.4.1 Ομοιόμορφο πλέγμα.....	60
3.4.2 Μη ομοιόμορφο πλέγμα	63
3.5 Αριθμητικά αποτελέσματα	64
3.6 Σύγκριση αποτελεσμάτων και συμπεράσματα.....	75
 Κεφάλαιο 4: Ροή σε ορθογώνιο αγωγό.....	 78
4.1 Εισαγωγή.....	78
4.2 Μαθηματική επεξεργασία.....	83
4.3 Διακριτοποίηση.....	87
4.3.1 Μεθοδολογία Ι.....	88
4.3.2 Μεθοδολογία ΙΙ.....	91
4.4 Αριθμητικά αποτελέσματα.....	96
4.5 Σύγκριση αποτελεσμάτων και συμπεράσματα.....	105
 Κεφάλαιο 5: Ροή σε κοιλότητα.....	 108
5.1 Εισαγωγή	108
5.2 Μαθηματική επεξεργασία.....	112
5.3 Οριακές συνθήκες.....	116
5.4 Διακριτοποίηση.....	118
5.5 Αριθμητικά αποτελέσματα.....	130
5.6 Σύγκριση μεθόδου IMM με DVM.....	137
 Κεφάλαιο 6: Ανακεφαλαίωση - Συμπεράσματα.....	 138
 Βιβλιογραφικές Αναφορές.....	 140
 Παράρτημα Α: Υπολογισμός των ολοκληρωμάτων Abramowitz.....	 143
Παράρτημα Β: Μέθοδος διακριτών ταχυτήτων.....	149
Παράρτημα Γ: Υπολογισμός αποστάσεων.....	151
Παράρτημα Δ: Πηγαίοι κώδικες Κεφαλαίων 3, 4 και 5.....	154

Κεφάλαιο 1

1.1 Νέες τάσεις σε ρευστομηχανική και φαινόμενα μεταφοράς

Η μελέτη προβλημάτων ροής εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας όπως π.χ στην περιοχή της μικρορευστοδυναμικής [Gad-el-Hak, 2002], της τεχνολογίας κενού [Sharipov, 1997] και της αεροδιαστημικής μεγάλων υψομέτρων [Gallis, 2003], αποτελεί ένα νέο αλλά ταχύτατα αναπτυσσόμενο κλάδο. Ροές τέτοιου τύπου παρατηρούνται σε πολλές τεχνολογικές εφαρμογές όπως σε συσκευές κενού, σε μικρο-ηλεκτρο-μηχανολογικά συστήματα (MEMS) καθώς και σε συσκευές που χρησιμοποιούνται στη διαστημική τεχνολογία μεγάλων υψομέτρων (>50 Km).

Η ραγδαία ανάπτυξη στην παραγωγή και την χρήση των παραπάνω εφαρμογών τα τελευταία χρόνια δεν συνοδεύεται από την πλήρη κατανόηση των φυσικών φαινομένων, που διέπουν αυτές τις ροές. Η προσπάθεια, η οποία γίνεται την τελευταία δεκαετία για την κατανόηση των φαινομένων αυτών στοχεύει στην βελτίωση και στον εκσυγχρονισμό του σχεδιασμού, της παραγωγής και της χρήσης των συγκεκριμένων συσκευών τόσο σε επιστημονικό επίπεδο όσο και σε επίπεδο καθημερινής ζωής [Gad-el-Hak, 2002].

Η μελέτη των ρευστών και των φαινομένων μεταφοράς στις παραπάνω συσκευές δεν αποτελεί εύκολο εγχείρημα, γεγονός που οφείλεται στην εμφάνιση φαινομένων, τα οποία δεν παρουσιάζονται στις γνωστές έως τώρα ροές. Τα συγκεκριμένα φαινόμενα δεν αντιμετωπίζονται με τις γνωστές συμβατικές μεθόδους επίλυσης των εξισώσεων Euler και Navier-Stokes [White, 2002], αλλά χρησιμοποιώντας άλλες προσεγγίσεις ανάλογα πάντα της εφαρμογής που μελετάται.

Η απαίτηση για εναλλακτικές μεθοδολογίες για την αντιμετώπιση τέτοιων προβλημάτων προέρχεται από το γεγονός ότι, η θεωρία του συνεχούς μέσου σε αυτές τις περιπτώσεις καταρρέει. Για το λόγο αυτό, εξακολουθεί να υπάρχει έντονη προσπάθεια εξέλιξης της θεωρίας του συνεχούς μέσου, είτε εφαρμόζοντας οριακές συνθήκες ολίσθησης [Karniadakis και Beskok, 2002] στις γνωστές εξισώσεις Navier-Stokes, είτε κάνοντας χρήση εξελιγμένων εξισώσεων όπως οι εξισώσεις Burnett, super Burnett και άλλες γενικευμένες υδροδυναμικές εξισώσεις. Η προσπάθεια αυτή δεν αποδίδει σε όλες τις περιπτώσεις τα επιθυμητά αποτελέσματα έχοντας ως

συνέπεια να ανοίξει ο δρόμος για την χρήση της μοριακής δυναμικής σε μικροσκοπική κλίμακα. Η μέθοδος αυτή χαρακτηρίζεται για την ικανότητα επίλυσης προβλημάτων στην ελεύθερη μοριακή περιοχή. Κύριο μειονέκτημα της μεθόδου αυτής, είναι η απαίτηση μεγάλης υπολογιστικής ισχύος για την επίλυση απλών ακόμα περιπτώσεων, γεγονός που την καθιστά δύσχρηστη ακόμα και σε απλές εφαρμογές. Η αδυναμία της συγκεκριμένης μεθόδου να αντιμετωπίσει σύνθετα προβλήματα οδήγησε στην παράλληλη ανάπτυξη και εφαρμογή νέων μεθοδολογιών στην μεσοσκοπική κλίμακα.

Η μεσοσκοπική προσέγγιση βασίζεται στη στατιστική μελέτη της συμπεριφοράς των σωματιδίων που αποτελούν το ρευστό. Η προσπάθεια επικεντρώνεται στον προσδιορισμό της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας, η οποία υπακούει στην εξίσωση Boltzmann [Ferziger και Karer, 1972] και μέσω της οποίας μπορούν να υπολογιστούν όλα τα μακροσκοπικά μεγέθη. Η εξίσωση Boltzmann βασίζεται στην κινητική θεωρία των αερίων, κλάδου της στατιστικής μηχανικής και χρησιμοποιείται για την περιγραφή φαινομένων μεταφοράς, με έμφαση σε αέρια συστήματα χαμηλής πυκνότητας ή πίεσης. Η επίλυση της συγκεκριμένης εξίσωσης λόγω της απαίτησης μεγάλης υπολογιστικής ισχύος ήταν αρκετά δύσκολη. Τα τελευταία χρόνια όμως με την ραγδαία ανάπτυξη των ηλεκτρονικών υπολογιστών και της συνεχόμενης αύξησης της ισχύος τους, η επίλυση της παραπάνω εξίσωσης, παραμένει επίπονη, αλλά είναι πλέον εφικτή και μπορεί να αντιμετωπίσει πλειάδα προβλημάτων με μεγάλη επιτυχία.

Η μέθοδος των διακριτών ταχυτήτων μαζί με την μέθοδο Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) αποτελούν τα πιο διαδεδομένα αριθμητικά σχήματα, τα οποία έχουν εφαρμοστεί έως τώρα για την επίλυση αραιοποιημένων ροών αερίων ή δυαδικού μίγματος. Κύρια μειονεκτήματα της μεθόδου DSMC είναι πρώτον η διάδοση των ασυνεχειών των οριακών συνθηκών στο πεδίο ροής με αποτέλεσμα την αφύσικη ταλαντωτική συμπεριφορά των μακροσκοπικών ποσοτήτων (ray effect) και δεύτερον η αργή σύγκλιση της μεθόδου καθώς προσεγγίζεται η υδροδυναμική περιοχή. Όσον αφορά την μέθοδο DSMC, αυτή παύει να δίνει αξιόπιστα αποτελέσματα σε πολύ αργές ροές λόγω μεγάλου στατιστικού θορύβου και απαιτείται μεγάλος υπολογιστικός χρόνος σε ροές που βρίσκονται στην υδροδυναμική περιοχή.

1.2 Χαρακτηρισμός περιοχών ροής με βάση τον αριθμό Kn

Ροές αραιών αερίων συναντώνται κυρίως σε συσκευές μικρών διαστάσεων καθώς και σε εφαρμογές χαμηλής πίεσης. Ο χαρακτηριστικός αριθμός που καθορίζει τον βαθμό αραίωσης και το όριο ισχύος του μοντέλου συνέχειας είναι ο αριθμός Knudsen (Kn), ο οποίος ορίζεται από τη σχέση [Gad-el-Hak, 2002]

$$Kn = \frac{\lambda}{L} = \sqrt{\frac{\gamma\pi}{2}} \frac{Ma}{Re} \quad (1.2-1)$$

όπου με L συμβολίζεται κάποια χαρακτηριστική διάσταση του προβλήματος, λ είναι η μέση ελεύθερη διαδρομή των σωματιδίων, γ ο λόγος των ειδικών θερμοτήτων, Ma ο αριθμός Mach και Re ο αριθμός Reynolds. Η μέση ελεύθερη διαδρομή ορίζεται ως η απόσταση που διανύει ένα σωματίδιο μεταξύ δύο διαδοχικών συγκρούσεων και μαθηματικά μπορεί να διατυπωθεί ως το γινόμενο της μέσης μοριακής ταχύτητας $\bar{\xi}$ με τον μέσο ελεύθερο χρόνο τ , δηλαδή

$$\lambda = \bar{\xi} \tau \quad (1.2-2)$$

Η μέση μοριακή ταχύτητα δίνεται από την σχέση [Ferziger και Karer, 1972]

$$\bar{\xi} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m}} = \sqrt{3RT} \quad (1.2-3)$$

Αν ν είναι η συχνότητα συγκρούσεων, η οποία δίνεται από το πηλίκο του αριθμού των συγκρούσεων N που συμβαίνουν στην μονάδα του χρόνου προς τον συνολικό αριθμό των μορίων n που βρίσκονται στον όγκο αυτό,

$$\nu = \frac{N}{n} \quad (1.2-4)$$

τότε ο μέσος ελεύθερος χρόνος μεταξύ των συγκρούσεων ισούται με

$$\tau = \frac{1}{\nu} = \frac{n}{N}. \quad (1.2-5)$$

Αποδεικνύεται ότι η μέση ελεύθερη διαδρομή είναι δυνατόν να υπολογιστεί συναρτήσει των μακροσκοπικών ιδιοτήτων σύμφωνα με την σχέση [Sharipov, 1998]

$$\lambda = \frac{\sqrt{\pi} \mu}{2P} v_0 \quad (1.2-6)$$

όπου P η τοπική πίεση και μ το δυναμικό ιξώδες στην τοπική θερμοκρασία T , k_B είναι η σταθερά Boltzmann ($k_B = 1.3805 \times 10^{-23} J/K$), m η μοριακή μάζα και v_0 η πλέον πιθανή μοριακή ταχύτητα, η οποία ισούται με

$$v_0 = \sqrt{\frac{2k_B T_0}{m}} = \sqrt{2RT_0}. \quad (1.2-7)$$

όπου $R = \frac{k_B}{m}$ η ειδική σταθερά του αερίου και T_0 η θερμοκρασία αναφοράς. Οι ποσότητες $\bar{\xi}$ και v_0 συχνά χρησιμοποιούνται στην αδιαστατοποίηση των κινητικών εξισώσεων.

Επίσης, συχνά χρησιμοποιείται και η παράμετρος αραιοποίησης δ (rarefaction parameter), η οποία συνδέεται με τον αριθμό Knudsen ως εξής [Sharipov, 1998]:

$$\delta \equiv \frac{\sqrt{\pi} L}{2 \lambda} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{Kn} = \frac{LP}{\mu} \sqrt{\frac{m}{2k_B T}} = \frac{LP}{\mu v_0} \quad (1.2-8)$$

Ο αριθμός Kn (ή η παράμετρος αραιοποίησης δ) είναι χαρακτηριστικός για κάθε πρόβλημα και η τιμή του χαρακτηρίζει τη ροή του αερίου. Έχοντας ως κατώτατο όριο την τιμή μηδέν, δημιουργούνται αντίστοιχες περιοχές χαρακτηρισμού της ροής, ανάλογα με την τοπική τιμή του. Έτσι η κατάταξη των περιοχών ροής διαμορφώνεται ως εξής [Gad-el-Hak, 2002]:

- i.* $Kn \approx 0, (\delta \rightarrow \infty)$: **Υδροδυναμική Περιοχή**, στην οποία ισχύουν οι εξισώσεις **Euler**.
- ii.* $Kn < 10^{-3} (\delta > 10^3)$: **Υδροδυναμική Περιοχή**, στην οποία ισχύουν οι εξισώσεις **Navier Stokes** με την βοήθεια οριακών συνθηκών μη ολίσθησης.
- iii.* $10^{-3} \leq Kn \leq 10^{-1} (10^3 \leq \delta \leq 10)$: **Περιοχή Ολίσθησης**, στην οποία ισχύουν οι εξισώσεις **Navier-Stokes** με την βοήθεια οριακών συνθηκών ολίσθησης.
- iv.* $10^{-1} < Kn < 10 (10 < \delta < 10^{-1})$: **Μεταβατική περιοχή**, στην οποία ισχύει η εξίσωση Boltzmann¹.

- v. $Kn \geq 10$ ($\delta \leq 10^{-1}$): **Ελεύθερη μοριακή περιοχή**, περιοχή στην οποία δεν υπάρχουν συγκρούσεις μεταξύ των μορίων και η κίνηση τους περιγράφεται μόνο από τον όρο μεταφοράς των σωματιδίων στο αριστερό μέλος της εξίσωσης Boltzmann.

Για την αντιμετώπιση προβλημάτων στην μεταβατική περιοχή χρησιμοποιείται η κινητική θεωρία (Εξ. Boltzmann), η οποία αποτελεί το υπόβαθρο για την δημιουργία μιας ενοποιημένης προσέγγισης πληθώρας προβλημάτων σε όλο το εύρος του αριθμού Kn .

1.3 Δομή μεταπτυχιακής εργασίας

Έχοντας υπόψη τα πλεονεκτήματα και τα μειονεκτήματα των δύο αριθμητικών μεθοδολογιών που αναφερθήκαν στην §1.1 θα γίνει προσπάθεια ανάπτυξης μιας τρίτης εναλλακτικής αριθμητικής μεθοδολογίας επίλυσης ροών εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας και για όλο το εύρος του αριθμού Knudsen. Η μέθοδος αυτή ονομάζεται μέθοδος των ολοκληρωτικών εξισώσεων (Integro Moment Method) και θα αποτελέσει το βασικό αντικείμενο της παρούσας διατριβής.

Τονίζεται ότι η μέθοδος των ολοκληρωτικών εξισώσεων έχει εφαρμοσθεί παλαιότερα σε μονοδιάστατα προβλήματα ροών αλλά είναι η πρώτη φορά, όπου η συγκεκριμένη μεθοδολογία αναπτύσσεται και εφαρμόζεται σε διδιάστατα προβλήματα ροών. Η επέκταση της μεθόδου σε δύο διαστάσεις δεν είναι τετριμμένη, αλλά απαιτεί εξειδικευμένη μαθηματική επεξεργασία και αριθμητική επίλυση. Πιο συγκεκριμένα, ο στόχος της παρούσας εργασίας είναι διπλός:

- Η ανάπτυξη της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων και η εφαρμογή της σε μονοδιάστατα και διδιάστατα προβλήματα ροών εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας. Πιο συγκεκριμένα θα επιλυθούν τα μονοδιάστατα προβλήματα ροών Poiseuille και Couette και τα διδιάστατα προβλήματα ροής σε ορθογωνικό αγωγό και σε κοιλότητα. Όλα τα προβλήματα περιγράφονται από την γραμμικοποιημένη εξίσωση BGK και επιλύονται για όλο το εύρος του αριθμού Knudsen.
- Αναλυτική σύγκριση της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων σε σχέση με την μέθοδο DVM όσον αφορά την ακρίβεια των αποτελεσμάτων, την

ταχύτητα σύγκλιση του επαναληπτικού σχήματος και τον απαιτούμενο υπολογιστικό χρόνο.

Η παρούσα μεταπτυχιακή εργασία αποτελείται από τρεις βασικές ενότητες. Η πρώτη ενότητα αποτελείται από τα Κεφάλαια 1 και 2. Στο παρών Κεφάλαιο 1 δίνονται ορισμένα γενικά στοιχεία που αφορούν την περιγραφή της υπάρχουσας κατάστασης στη διεθνή βιβλιογραφία και έρευνα, καθώς και ορισμένα προβλήματα στα οποία βρίσκουν εφαρμογή οι συγκεκριμένες αριθμητικές τεχνικές. Στο Κεφάλαιο 2 αναφέρονται αναλυτικά, βασικά στοιχεία της κινητικής θεωρίας. Η δεύτερη ενότητα αποτελείται από τα Κεφάλαια 3, 4 και 5 και αναφέρεται στην εφαρμογή της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων και την επίλυση πρότυπων ροών. Στο Κεφάλαιο 3 παρουσιάζονται και επιλύονται τα μονοδιάστατα προβλήματα Poiseuille και Couette, στο Κεφάλαιο 4 επιλύεται το πρόβλημα ροής σε αγωγό ορθογωνικής διατομής, ενώ στο Κεφάλαιο 5 επιλύεται το πρόβλημα ροής σε κοιλότητα. Τα αποτελέσματα κάθε ροής αναφέρονται και σχολάζονται στα αντίστοιχα κεφάλαια. Τέλος στην τρίτη ενότητα, που αποτελείται από το Κεφάλαιο 6, γίνεται μια ανακεφαλαίωση και μια σύνοψη των κυριότερων σημείων της μεθοδολογίας επίλυσης καθώς και σύγκρισή της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων με την μέθοδο DVM. Ταυτόχρονα γίνονται και ορισμένες προτάσεις που αφορούν το πως μπορεί η παρούσα εργασία να επεκταθεί, αλλά και νέα ερευνητικά αντικείμενα που μπορούν να διερευνηθούν και να αναπτυχθούν στο ίδιο πάντα επιστημονικό πεδίο.

1.4 Βιομηχανικές εφαρμογές

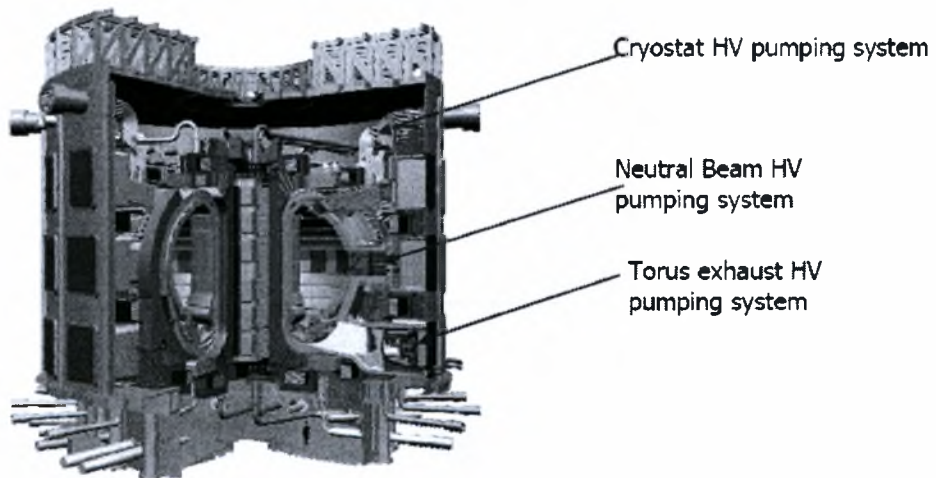
1.4.1 Συστήματα κενού στον αντιδραστήρα ITER

Μία από τις εφαρμογές όπου είναι δυνατή η χρήση της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων είναι η μελέτη ροών στο σύστημα υψηλού, μέτριου και χαμηλού κενού του αντιδραστήρα θερμοπυρηνικής σύντηξης ITER. Ο αντιδραστήρας χρησιμοποιεί τρία επιμέρους συστήματα υψηλού κενού. Το πρώτο αφορά την χρήση κρυογονικών αντλιών για την εκκένωση και διατήρηση της πίεσης στον τόρο (torus) όγκου 1350 m^3 . Το δεύτερο σύστημα αφορά την άντληση διαφόρων αερίων από τον μανδύα (cryostat) που περικλείει τον τόρο και το τρίτο αφορά την διατήρηση

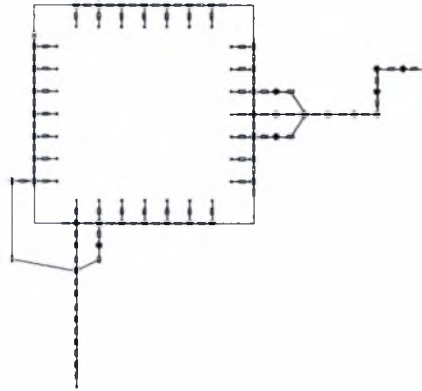
συνθηκών κενού στο σύστημα εκπομπής ουδέτερων σωματιδίων (neutral beam injectors).

Το κύριο σύστημα κενού, έχει σχεδιαστεί για την άντληση των αερίων από τον τόρο που δημιουργούνται στο πλάσμα καθώς και για το έλεγχο διαρροών σε αυτόν. Αυτό συνεπάγεται ότι τα ποικίλα αέρια (πχ ισότοπα υδρογόνου, υδρατμοί, υδρογονάνθρακες) που προκύπτουν θα πρέπει να αντλούνται με μικρές ή μεγάλες παροχές. Ο έλεγχος της παροχής άντλησης των αερίων αποτελεί έναν από τους σημαντικότερους παράγοντες που επηρεάζουν την απόδοση του αντιδραστήρα.

Το σύστημα κενού αποτελεί ένα δίκτυο αγωγών (Σχήμα 1.2), οι οποίοι συνδέονται με τον τόρο για την απομάκρυνση των επικαθήσεων από τον εσωτερικό του και την εκκένωση του σε πίεση 10^{-4} Pa και σε χρόνο 1400 sec. Έτσι εξασφαλίζεται η καθαρότητα του πλάσματος από σωματίδια που προέρχονται από την εξάχνωση των τοιχωμάτων του μανδύα. Στο δίκτυο αυτό (Σχήμα 1.3) είναι εγκατεστημένες 8 κρυογονικές αντλίες, 4 βρίσκονται εν λειτουργία και οι υπόλοιπες είναι εφεδρικές. Οι αντλίες αυτές (Σχήμα 1.4), λειτουργούν υπό κενό και έχουν δυνατότητα άντλησης $100 \text{ m}^3/\text{s}$ η κάθε μια. Η ροή σε αυτές τις αντλίες καλύπτει όλες τις περιοχές ροής και στόχος είναι ο υπολογισμός των παροχών και των πιέσεων στο συγκεκριμένο δίκτυο.



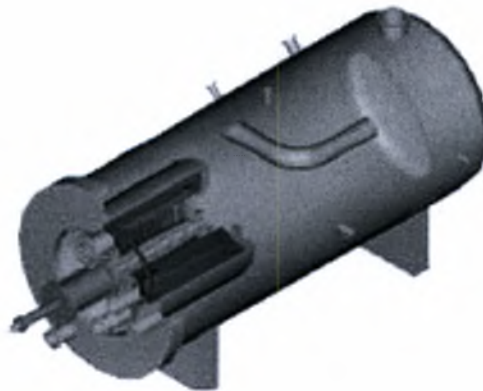
Σχήμα 1.1: Τα τρία κύρια συστήματα κενού στον αντιδραστήρα σύντηξης



Σχήμα 1.2: Δίκτυο κενού του θερμοπυρηνικού αντιδραστήρα σύντηξης.



Σχήμα 1.3: Σύστημα οκτώ αντλιών κενού (exhaust pumping system).



Σχήμα 1.4: Κρυογονική αντλία.

1.4.2 Μικρορροές σε MEMS

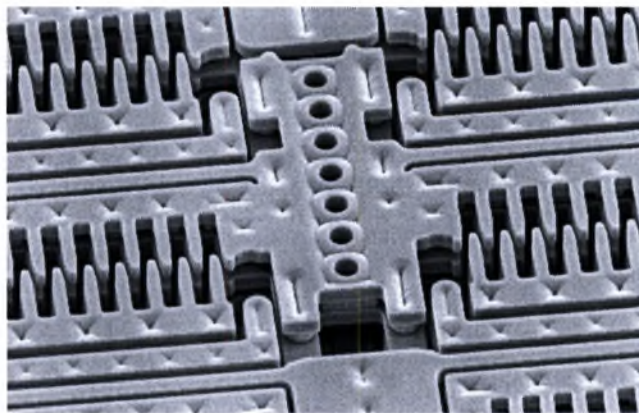
Η κατασκευή συσκευών με διαστάσεις μικροκλίμακας αποτέλεσε όραμα αλλά και πρόκληση για την τεχνολογική ικανότητα του ανθρώπου εδώ και πολλά χρόνια. Το όραμα αυτό υποστήριξε σε μια από τις διαλέξεις του, ο διάσημος φυσικός Richard Feynman, τονίζοντας ότι: “*There’s plenty of room at the bottom*” [Feynman, 1959]. Με την φράση αυτή υπονοείται το ενδιαφέρον του ανθρώπου σε συσκευές μικρών διαστάσεων και την μελέτη των φυσικών φαινομένων σε αυτές.

Η στροφή στις μικρές διαστάσεις άρχισε να πραγματώνεται από τις αρχές της δεκαετίας του 1990 και σήμερα αποτελεί πλέον κοινή πρακτική. Εξαρτήματα όπως επιταχυνσιόμετρα που χρησιμοποιούνται για την ενεργοποίηση των αερόσακων στα οχήματα, μικροσκοπικοί αισθητήρες πίεσης και ιατρικά εργαλεία για επεμβάσεις σε επίπεδο κυττάρου, παράγονται πλέον σε μαζική παραγωγή. Αυτό κατέστη δυνατό, χάρη στη ραγδαία τεχνολογική εξέλιξη των τελευταίων ετών και την εφαρμογή νέων κατασκευαστικών τεχνικών, όπως για παράδειγμα η επιφανειακή μικρο-επεξεργασία σιλικόνης, η δημιουργία τρισδιάστατων δομών μέσω λιθογραφίας ακτινών X και οι διατάξεις ηλεκτρονικής εκκένωσης, μέσω των οποίων επιτεύχθηκε η ελάττωση του κόστους, στοιχείο απαραίτητο για τη διεύρυνση των εφαρμογών και τη μαζικοποίηση της παραγωγής [Gad-el-Hak, 2002].

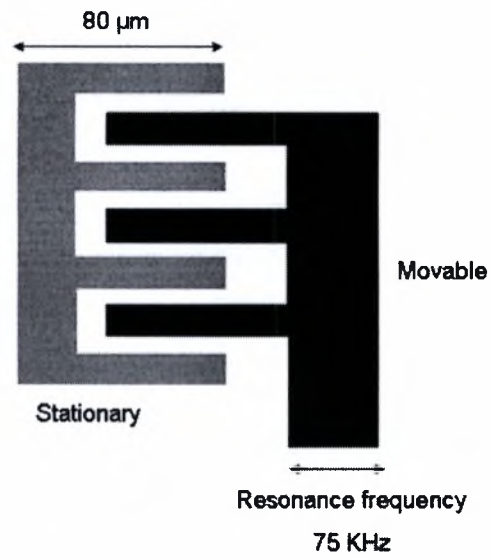
Πολλές από τις συσκευές αυτές είτε έρχονται σε επαφή με ρευστά στο περιβάλλον λειτουργίας τους, είτε περιλαμβάνουν εξαρτήματα (μικρο-αγωγούς, μικρο-κοιλότητες) που είναι άμεσα συνδεδεμένα με ρευστά [Ho και Tai, 1998]. Το γεγονός αυτό, καθιστά αναγκαίο τον βέλτιστο προσδιορισμό της συμπεριφοράς των ρευστών σε αυτές τις κλίμακες και της επίδρασης που έχουν στα εξαρτήματα με τα οποία έρχονται σε επαφή. Επιπρόσθετα, πολλές φορές οι συσκευές έχουν ως στόχο αποτελέσματα που αφορούν αποκλειστικά ρευστοδυναμικά μεγέθη (αντλίες, ροόμετρα, συστήματα κυκλωμάτων ψύξης κλπ), όπου πλέον η ανάγκη για τον προσδιορισμό των φαινομένων που λαμβάνουν χώρα στο ρευστό είναι προφανής. Η ανάπτυξη μεθόδων για τη μελέτη ρευστοδυναμικών φαινομένων και την βέλτιστη προσομοίωση τους σε επίπεδο μικροκλίμακας αποτελεί το γνωστικό αντικείμενο της μικρορευστοδυναμικής. Ο τομέας αυτός εξελίσσεται ταυτόχρονα με την κατασκευαστική τεχνολογία και την τεχνολογία υλικών στη μικροκλίμακα. Τα τρία αυτά πεδία έρευνας αποτελούν τις τρεις συνιστώσες της επιστημονικής περιοχής που ονομάζεται μικρομηχανική.

Μια πιο εξεζητημένη περιοχή έρευνας για την οποία το τελευταίο διάστημα έχει αρχίσει να αναπτύσσεται το ενδιαφέρον είναι αυτή της νανοκλίμακας [Bhushan, 2004]. Βέβαια οι κατασκευαστικές δυνατότητες είναι ακόμα περιορισμένες, αλλά η θεμελίωση αρχών και η θεωρητική μελέτη των φαινομένων είναι κάτι εφικτό και ταυτόχρονα ζητούμενο για την προοδευτική ανάπτυξη της συγκεκριμένης ερευνητικής περιοχής.

Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα συσκευής μικρών διατάξεων (MEMS), η οποία έρχεται σε επαφή με ροή αερίου είναι αυτή που απεικονίζεται στο Σχήμα 1.5 και αποτελεί ένα μικρό ηλεκτροστατικό οδηγό με μορφή “χτένας” (electrostatic comb drive). Η συγκεκριμένη συσκευή αποτελεί έναν ηχητικό αισθητήρα, ο οποίος κινείται με την εφαρμογή μικρής τάσης ρεύματος. Για τυπικές συνθήκες λειτουργίας η ηχητική συχνότητα του κινούμενου μέρους είναι της τάξης των 75 KHz ενώ οι τυπικές διαστάσεις της συσκευής απεικονίζονται στο Σχήμα 1.6. Το κενό μεταξύ του κινούμενου και του σταθερού μέρους είναι της τάξης του 1 μm ενώ ο αριθμός Reynolds και ο αριθμός Mach που εμφανίζονται είναι $Re=0.74$ και $Ma=0.014$ αντίστοιχα. Από μακροσκοπική οπτική είναι δυνατόν η εμφάνιση έρπουσας ροής, η οποία συνεπάγεται μικρό αριθμό Re και Ma . Αντίθετα από μικροσκοπική οπτική η μικρή τιμή του αριθμού Re οφείλεται στις μικρές διαστάσεις της συσκευής και όχι στις χαμηλές ταχύτητες που αναπτύσσονται. Οι ροές που αναπτύσσονται στις συσκευές αυτές μπορούν να προσομοιωθούν με την βοήθεια των διατμητικών ροών (shear driven flows). Το μοντέλο που χρησιμοποιήθηκε για την μελέτη του μικρο ηλεκτροστατικού οδηγού ήταν η πρότυπη ροή Couette.



Σχήμα 1.5: Μικρο ηλεκτροστατικός οδηγός με μορφή “χτένας”.



Σχήμα 1.6: Τυπικές διαστάσεις μικρο ηλεκτροστατικού οδηγού.

Κεφάλαιο 2

Στοιχεία κινητικής θεωρίας

2.1 Εισαγωγή

Η στατιστική μηχανική είναι δυνατόν να διαχωριστεί σε δύο κατηγορίες. Η πρώτη περιγράφει συστήματα σε θερμοδυναμική ισορροπία ενώ η δεύτερη αφορά συστήματα, τα οποία δεν βρίσκονται σε θερμοδυναμική ισορροπία. Η συνήθης και πιο διαδεδομένη ονομασία της δεύτερης περιοχής είναι «Κινητική Θεωρία» [Ferziger, 1972]. Σκοπός της κινητικής θεωρίας είναι η περιγραφή μακροσκοπικών φαινομένων ενός αερίου, το οποίο βρίσκεται σε θερμοδυναμική ισορροπία ή κοντά σε αυτήν, με όρους μοριακών ιδιοτήτων (πχ. ενδομοριακό δυναμικό).

Κατά την κινητική θεωρία το αέριο περιγράφεται από την χρονικά μεταβαλλόμενη συνάρτηση κατανομής, η οποία περιέχει πληροφορίες τόσο για την ταχύτητα των μορίων όσο και για την θέση τους μέσα στο αέριο. Εάν θεωρηθεί ότι τα μόρια του αερίου μπορούν να θεωρηθούν ως κλασσικές σημειακές μάζες, οι οποίες βρίσκονται σε πεδίο δυνάμεων, μπορεί να εξαχθεί μια μη γραμμική ολοκληροδιαφορική εξίσωση, της οποίας άγνωστος είναι η παραπάνω συνάρτηση κατανομής. Η εξίσωση αυτή διατυπώθηκε από τον Ludwig Boltzmann το 1872, φέρει το όνομά του και αποτελεί ένα από τα πιο σημαντικά θεωρητικά επιτεύγματα του 19^{ου} αιώνα [Boltzmann, 1995].

2.2 Χαρακτηριστικά μοριακά μεγέθη

Στην ενότητα αυτή θα παρουσιαστούν τα χαρακτηριστικά μεγέθη της αριθμητικής πυκνότητας των μορίων n , της μοριακής διαμέτρου d , της μέσης ελεύθερης διαδρομής λ , του μέσου ελευθέρου χρόνου τ , της μέσης μοριακής ταχύτητας $\bar{\xi}$ και της μέσης μοριακής απόστασης l_0 [Karniadakis, 2002]. Από τα μεγέθη αυτά προκύπτουν πληροφορίες για το είδος του αερίου και των ιδιοτήτων του σε διάφορες συνθήκες.

Ο αριθμός των μορίων σε ένα γραμμομόριο (1 mole) αερίου είναι σταθερός

και ονομάζεται αριθμός Avogadro $N_A = 6.02252 \times 10^{23} / mole$. Ο όγκος που καταλαμβάνει ένα γραμμομόριο αερίου είναι σταθερός σε δεδομένη πίεση και θερμοκρασία (σε $P=1 \text{ atm}$ και $T=273 \text{ K}$, $V=22,4 \text{ lt/mole}$). Η αριθμητική πυκνότητα ενός αραιού αερίου για δεδομένη πίεση και θερμοκρασία μπορεί να υπολογιστεί από την καταστατική εξίσωση που σε διάφορες μορφές μπορεί να γραφεί ως

$$P = nk_B T = \frac{N}{V} k_B T = \frac{b}{V} R^* T = \frac{\rho}{m} R^* T \quad (2.2-1)$$

με N τον αριθμό των μορίων του αερίου, b τον αριθμό των γραμμομορίων του αερίου και $R^* = (MB)_{gas} R$ η παγκόσμια σταθερά. Επίσης ισχύει ότι

$$b = \frac{N}{N_A} \text{ και } n = \frac{N}{V} = \frac{\rho}{m} \quad (2.2-2)$$

Σε ατμοσφαιρικές συνθήκες ($P=1 \text{ atm}$) και για θερμοκρασία $T = 273 \text{ K}$ η αριθμητική πυκνότητα ενός απλού αερίου ισούται περίπου με $n \cong 2.69 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}$. Επίσης η μέση ελεύθερη μοριακή απόσταση l_0 , είναι αντιστρόφως ανάλογη της αριθμητικής πυκνότητας σύμφωνα με την σχέση

$$l_0 \propto n^{-1/3} \quad (2.2-3)$$

και για απλό αέριο σε κανονικές συνθήκες είναι περίπου $l_0 \cong 3.3 \times 10^{-9} \text{ m}$. Η μέση μοριακή διάμετρος d για ένα τυπικό αέριο είναι της τάξης του 10^{-10} m και χαρακτηριστικά για τον αέρα $d = 3.7 \times 10^{-10} \text{ m}$. Συγκρίνοντας την μέση μοριακή απόσταση l_0 και την μέση τυπική μοριακή διάμετρο d παρατηρούμε ότι διαφέρουν κατά μια τάξη μεγέθους. Το συμπέρασμα αυτό οδηγεί στον ορισμό του αραιού αερίου (dilute gas) όπου ισχύει ότι $l_0 / d \gg 1$. Όσον αφορά την μέση ελεύθερη διαδρομή λ , για τον αέρα σε κανονικές συνθήκες ισχύει $\lambda \cong 6.5 \times 10^{-8} \text{ m}$. Τέλος χαρακτηριστικές τιμές της μέσης μοριακής ταχύτητας και χρόνου για τον αέρα σε κανονικές συνθήκες είναι αντίστοιχα από την Εξ. (1.3-3) $\bar{\xi} \cong 486 \text{ m/s}$ και από την Εξ. (1.3-5) $\tau \cong 10^{-10} \text{ s}$. Οι τιμές διάφορων θερμοφυσικών ιδιοτήτων για τυπικά αέρια παρουσιάζονται στον Πίνακα 1.

Αέριο	Πυκνότητα ρ [Kg/m ³]	Θερμική αγωγιμότητα k [W/(mK)]	Θερμική διαχυτότητα α [m ² /s]	Μοριακή μάζα m [Kg]	Μέση μοριακή διάμετρος d [m]	Μέση ελεύθερη διαδρομή λ [m]
Αέρας	1.293	0.0261	2.01E-5	4.8E-26	-	6.111E-8
N ₂	1.251	0.0260	2.00E-5	4.6E-26	3.7E-10	6.044E-8
CO ₂	1.965	0.0166	1.00E-5	7.3E-26	4.1E-10	4.019E-8
O ₂	1.429	0.0267	2.04E-5	2.6E-26	3.6E-10	6.503E-8
He	0.179	0.150	1.60E-5	6.6E-27	2.5E-10	17.65E-8
Ar	1.783	0.0177	1.93E-5	6.6E-26	3.4E-10	6.441E-8

Πίνακας 1: Χαρακτηριστικές τιμές ιδιοτήτων διαφόρων αερίων σε κανονικές συνθήκες (273 K και 1 atm).

Από τον Πίνακα 1 παρατηρείται ότι το μονατομικό αέριο He αποτελεί το αέριο με την μικρότερη μοριακή μάζα, γεγονός που το καθιστά ελαφρύτερο από τα υπόλοιπα αέρια. Επίσης παρουσιάζει την μεγαλύτερη μέση ελεύθερη διαδρομή γεγονός που το εντάσσει στην κατηγορία των αραιοποιημένων αερίων. Αντίθετα το διοξείδιο του άνθρακα είναι το βαρύτερο και πιο πυκνό (dense) αέριο σε σύγκριση με τα υπόλοιπα αέρια που παρουσιάζονται στον Πίνακα 1.

2.3 Βασικές έννοιες - Συνάρτηση κατανομής

Τα μόρια ενός μονατομικού αερίου μπορούν να περιγραφούν από το διάνυσμα θέσης \mathbf{r} στο χώρο και της ταχύτητας τους ξ . Εάν θεωρήσουμε έναν στοιχειώδη όγκο $d^3\mathbf{r}$ στο φυσικό χώρο τότε σε καρτεσιανές συντεταγμένες θα ισχύει ότι $d^3\mathbf{r} = dx dy dz$. Ο συγκεκριμένος όγκος έχει επιλεγεί ώστε να εμπεριέχει το σημείο \mathbf{r} . Παρόμοια ένας στοιχειώδης όγκος στο χώρο των μοριακών ταχυτήτων θα συμβολίζεται με $d^3\xi = d\xi_x d\xi_y d\xi_z$ και θα βρίσκεται γύρω από την ταχύτητα ξ . Κατά συνέπεια η ολοκλήρωση στον φυσικό χώρο και στον χώρο των μικροσκοπικών ταχυτήτων θα συμβολίζεται αντίστοιχα με [Ferziger, 1972]

$$\int(\cdot)d^3\mathbf{r} \text{ και } \int(\cdot)d^3\xi. \quad (2.3-1)$$

Ας θεωρήσουμε ένα απλό αέριο, το οποίο αποτελείται από μόρια ίδιας μάζας m .

Δεδομένου ότι ο αριθμός των μορίων ανά μονάδα όγκου είναι αισθητά μεγάλος (περίπου 3×10^{25} μόρια/ m^3 σε κανονικές συνθήκες), είναι δυνατόν να εφαρμοστεί μια στατιστική περιγραφή, η οποία θα βασίζεται στην κατά μέσο όρο συμπεριφορά ενός μεγάλου αριθμού μορίων. Μια τέτοια περιγραφή αποτελεί σαφώς πιο απλή διαδικασία απ' ό,τι η μεμονωμένη περιγραφή κάθε μορίου ξεχωριστά. Η υπόθεση αυτή μας οδηγεί στον συμπέρασμα ότι χρησιμοποιούμε ένα στοιχειώδη όγκο ελέγχου d^3r , του οποίου οι διαστάσεις είναι αρκετά μικρές (πχ. περίπου $10^{-15} m^3$) σε σχέση με τις διαστάσεις του φυσικού χώρου αλλά αρκετά μεγάλες ώστε να περιέχουν ένα επαρκή αριθμό μορίων (πχ. περίπου 3×10^{10} μόρια), που να επιτρέπει την στατιστική περιγραφή τους [Ferziger, 1972].

Οι μακροσκοπικές ποσότητες στην ρευστοδυναμική εκφράζονται ως ροπές της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας $f(\mathbf{r}, \xi, t)$, η οποία εμπεριέχει όλη την πληροφορία τόσο για την θέση των μορίων όσο και για την ταχύτητά τους. Η συνάρτηση κατανομής ορίζεται έτσι ώστε η ποσότητα $f(\mathbf{r}, \xi, t) d^3\xi d^3r$ να αντιπροσωπεύει τον αναμενόμενο αριθμό των μορίων στον στοιχειώδη όγκο d^3r , τα οποία στην χρονική στιγμή t , βρίσκονται στο στοιχειώδη όγκο d^3r γύρω από την θέση \mathbf{r} .

Γνωρίζοντας την συνάρτηση κατανομής εύκολα μπορούν να προκύψουν οι μακροσκοπικές ποσότητες του αερίου. Η πιο απλή μακροσκοπική ιδιότητα είναι η αριθμητική πυκνότητα $n(\mathbf{r}, t)$, η οποία ορίζεται ως ο αριθμός των μορίων ανά μονάδα όγκου που βρίσκεται στην θέση \mathbf{r} την χρονική στιγμή t . Επομένως η ποσότητα $n(\mathbf{r}, t) d^3r$ είναι ο συνολικός όγκος των σωματιδίων στο d^3r , δηλαδή

$$n(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{r}, \xi, t) d^3\xi \quad (2.3-2)$$

Η μαζική πυκνότητα του αερίου, του οποίου τα μόρια έχουν μάζα m , θα δίνεται από την σχέση

$$\rho(\mathbf{r}, t) = mn(\mathbf{r}, t). \quad (2.3-3)$$

Ένα μόριο με ταχύτητα ξ έχει ορμή $m\xi$. Αφού ο αριθμός των σωματιδίων στον όγκο d^3r με ταχύτητες στο $d^3\xi$ γύρω από το ξ είναι $f(\mathbf{r}, \xi, t) d^3\xi d^3r$ την χρονική στιγμή t , η ολική ορμή των σωματιδίων θα δίνεται από την σχέση $m\xi f(\mathbf{r}, \xi, t) d^3\xi d^3r$.

Επομένως η καθαρή ορμή στο d^3r θα είναι

$$d^3r \int m \xi f(\mathbf{r}, \xi, t) d^3 \xi. \quad (2.3-4)$$

Χρησιμοποιώντας ότι η συνολική μάζα στον όγκο d^3r είναι $\rho(\mathbf{r}, t) d^3r$ τότε η υδροδυναμική ταχύτητα δίνεται από την σχέση

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\rho(\mathbf{r}, t)} \int m \xi f(\mathbf{r}, \xi, t) d^3 \xi = \frac{1}{n(\mathbf{r}, t)} \int \xi f(\mathbf{r}, \xi, t) d^3 \xi. \quad (2.3-5)$$

Ορίζουμε $\zeta = \xi - \mathbf{u}$ την σχετική ταχύτητα (peculiar velocity) του αερίου ως προς την υδροδυναμική ταχύτητα του. Τότε η κινητική ενέργεια ενός σωματιδίου γράφεται

$$\frac{1}{2} m \xi^2 = \frac{1}{2} m (\zeta + \mathbf{u})^2 = \frac{1}{2} m \zeta^2 + m \zeta \cdot \mathbf{u} + \frac{1}{2} m u^2 \quad (2.3-6)$$

Από την παραπάνω σχέση ο όρος $\frac{1}{2} m u^2$ σχετίζεται με την κινητική ενέργεια του αερίου ενώ ο όρος $\frac{1}{2} m \zeta^2$ σχετίζεται με την εσωτερική ενέργεια του, για την οποία εύκολα προκύπτει ότι η ολική ενέργεια ισούται με

$$e(\mathbf{r}, t) \rho(\mathbf{r}, t) d^3r = \frac{1}{2} m \zeta^2 f(\mathbf{r}, \xi, t) d^3r$$

και ολοκληρώνοντας προκύπτει

$$e(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\rho(\mathbf{r}, t)} \int \frac{1}{2} m \zeta^2 f(\mathbf{r}, \xi, t) d^3 \xi. \quad (2.3-7)$$

Ο μεσαίος όρος στην Εξ. (2.3-6) δεν έχει κάποια συνεισφορά διότι η μέση σχετική ταχύτητα είναι μηδέν.

Στην κινητική θεωρία η θερμοκρασία του αερίου εκφράζεται συναρτήσει της εσωτερικής ενέργεια σύμφωνα με την σχέση

$$\rho e = \frac{3}{2} n k_B T = \frac{1}{2} m \int \zeta^2 f(\mathbf{r}, \xi, t) d^3 \xi \quad (2.3-8\alpha)$$

ή

$$T = \frac{m}{3n k_B} \int \zeta^2 f(\mathbf{r}, \xi, t) d^3 \xi. \quad (2.3-8\beta)$$

Εκτός από τις μακροσκοπικές ποσότητες υπάρχουν και ποσότητες που εκφράζονται ανυσματικά όπως πχ η ροή μάζας, η ροή ορμής και η ροή θερμότητας. Όλες αυτές οι ανυσματικές ποσότητες συνδέονται με την συνάρτηση κατανομής σύμφωνα με την σχέση,

$$\Phi = \int \varphi \zeta f(\mathbf{r}, \zeta, t) d^3 \zeta \quad (2.3-9)$$

η οποία εκφράζει το τυχαίο άνυσμα ροής Φ της αντίστοιχης ποσότητας φ . Συγκεκριμένα τα ανύσματα ροής της μάζας, της ορμής και της κινητικής ενέργειας προκύπτουν εάν θέσουμε την κατάλληλη ποσότητα φ στην Εξ. (2.3-9). Δηλαδή,

- i. Αν $\varphi(\zeta) = m$ τότε

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = m \int \zeta f(\mathbf{r}, \zeta, t) d^3 \zeta = 0 \quad (2.3-10)$$

Δηλαδή το διάνυσμα της ροής μάζας για ένα απλό αέριο είναι μηδέν.

- ii. Αν $\varphi(\zeta) = m \zeta_a$ τότε

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = m \int \zeta_a \cdot \zeta f(\mathbf{r}, \zeta, t) d^3 \zeta \quad (2.3-11)$$

Η σχέση αυτή μας δίνει το διάνυσμα της ροής που σχετίζεται με την μεταφορά ορμής σε κάθε μία από τις τρεις διευθύνσεις. Ο ταυυστής της ροής ορμής, ο οποίος είναι συμμετρικός και 2^{ης} τάξης αποτελείται από 9 συνιστώσες δίνεται από την σχέση

$$P_{ij}(\mathbf{r}, t) = m \int \zeta_i \cdot \zeta_j f(\mathbf{r}, \zeta, t) d^3 \zeta \quad (2.3-12)$$

Τα μη διαγώνια στοιχεία του συγκεκριμένου ταυυστή είναι οι διατμητικές τάσεις, ενώ τα διαγώνια οι ορθές τάσεις. Η υδροστατική πίεση ορίζεται ως ο μέσος όρος του ίχνους του ταυυστή ορμής, δηλαδή

$$P = \frac{1}{2} (P_{xx} + P_{yy} + P_{zz}) = \frac{1}{3} nm \int (\zeta_x^2 + \zeta_y^2 + \zeta_z^2) f(\mathbf{r}, \zeta, t) d^3 \zeta = nk_B T$$

Από τα παραπάνω έχουμε την γνωστή καταστατική εξίσωση των τέλειων αερίων

$$P(\mathbf{r}, t) = n(\mathbf{r}, t) k_B T(\mathbf{r}, t) = \frac{N}{V} k_B T = \frac{b}{V} RT. \quad (2.3-13)$$

όπου R η παγκόσμια σταθερά, N ο αριθμός των μορίων και b ο αριθμός των γραμμομορίων. Η καταστατική εξίσωση δεν ισχύει για αέρια σε υψηλή πίεση

iii. Τέλος αν $\varphi(\zeta) = \frac{1}{2} m \zeta^2$ τότε

$$q(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} m \int \zeta^2 \zeta f(\mathbf{r}, \zeta, t) d^3 \zeta \quad (2.3-14)$$

Η σχέση αυτή μας δίνει το άνυσμα της ροή θερμότητας.

2.4 Συχνότητα συγκρούσεων και μέση ελεύθερη διαδρομή

Θεωρούμε ότι τα μόρια, τα οποία εμπλέκονται στις συγκρούσεις, είναι λείες και άκαμπτες σφαίρες. Τότε ο μέσος όρος των συγκρούσεων που υφίσταται ένα μόριο στη μονάδα του χρόνου ονομάζεται συχνότητα σύγκρουσης ν [Ferziger, 1972]. Δηλαδή,

$$\nu = \frac{N^*}{n} \quad (2.4-1)$$

όπου N^* αριθμός των συγκρούσεων ανά μονάδα όγκου και χρόνου ανάμεσα στα μόρια. Ο μέσος ελεύθερος χρόνος ανάμεσα στις επιτυχημένες συγκρούσεις είναι

$$\tau = \nu^{-1}. \quad (2.4-2)$$

Η μέση απόσταση λ που διανύει ένα μόριο ανάμεσα στις επιτυχημένες συγκρούσεις ονομάζεται μέση ελεύθερη διαδρομή. Στο χρονικό διάστημα Δt ένα μόριο διανύει κατά μέσο όρο απόσταση $\bar{\xi} \Delta t$, όπου $\bar{\xi}$ η μέση διανυσματική ταχύτητα των μορίων.

Η συνολική απόσταση που διανύουν όλα τα στη μονάδα του όγκου σε χρόνο Δt είναι $n \bar{\xi} \Delta t$. Άρα η μέση ελεύθερη διαδρομή προκύπτει με διαίρεση αυτής της συνολικής απόστασης με το συνολικό αριθμό των συγκρούσεων στο χρονικό διάστημα Δt , δηλαδή $N^* \Delta t = n \nu \Delta t$. Επομένως όπως έχει προαναφερθεί από την Εξ. (1.3-2)

$$\lambda = \frac{n \bar{\xi} \Delta t}{n \nu \Delta t} = \frac{\bar{\xi}}{\nu} = \bar{\xi} \tau \quad (2.4-3)$$

Για τον υπολογισμό των μεγεθών ν και λ είναι απαραίτητος ο υπολογισμός του N^* . Για το λόγο αυτό ορίζουμε αντίστοιχα ως d_1 και d_2 , τις διαμέτρους των δύο μορίων τα

οποία συγκρούονται. Η απόσταση μεταξύ των δύο μορίων κατά την σύγκρουση ισούται με

$$d_{12} = \frac{1}{2}(d_1 + d_2). \quad (2.4-4)$$

Όταν τα μόρια είναι όμοια, όπως στην περίπτωση μονατομικών αερίων που εξετάζουμε τότε $d_{12} = d_1 = d_2 = d$. Η σχετική ταχύτητα των δύο μορίων είναι $\zeta = \xi_2 - \xi_1$. Χρησιμοποιώντας κυλινδρικό σύστημα συντεταγμένων με αρχή των αξόνων το κέντρο του μορίου 1 και τον πολικό άξονα παράλληλο στο $-\zeta$, εύκολα αποδεικνύεται ότι για συνάντηση των δυο μορίων στο χρονικό διάστημα dt , στην αρχή του διαστήματος, το κέντρο του μορίου 2 πρέπει να βρίσκεται σε ένα κύλινδρο με βάση πd^2 και ύψος ζdt . Άρα ο όγκος του κυλίνδρου είναι $\pi d^2 \zeta dt$. Ο αναμενόμενος αριθμός των μορίων 2 είναι $f_2 d^3 \xi_1 \pi d^2 \zeta dt$. Αυτή είναι επίσης η πιθανότητα για το μόριο 1 με ταχύτητα ξ_1 να συναντήσει ένα μόριο 2 με ταχύτητα $d^3 \xi_2$ σε χρόνο dt . Αφού ο αριθμός των μορίων 1 με ταχύτητες στο $d^3 \xi_1$ είναι $f_1 d^3 \xi_1$, έχουμε ότι ο αναμενόμενος αριθμός των συναντήσεων στη μονάδα του όγκου σε χρόνο dt , των μορίων με ταχύτητες στο $d^3 \xi_1$ και $d^3 \xi_2$ είναι

$$f_1 f_2 \zeta \pi d^2 d^3 \xi_1 d^3 \xi_2 dt \quad (2.4-5)$$

Ολοκληρώνοντας την παραπάνω σχέση ως προς ξ_1 και ξ_2 και διαιρώντας με dt προκύπτει ο αριθμός των συγκρούσεων

$$N^* = \pi d^2 \iint f_1 f_2 \zeta d^3 \xi_1 d^3 \xi_2 \quad (2.4-6)$$

και από την Εξ. (2.4-1) προκύπτει ότι η συχνότητα των συγκρούσεων είναι

$$\nu = \frac{\pi}{n} d^2 \iint f(\xi_1) f(\xi_2) \zeta d^3 \xi_1 d^3 \xi_2 \quad (2.4-7)$$

Θεωρώντας στη φάση αυτή ότι οι κατανομές είναι τύπου Maxwell της μορφής

$$f = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\frac{m\xi^2}{2k_B T}} \quad (2.4-8)$$

όπου η μακροσκοπική ταχύτητα του αερίου είναι μηδέν ($\mathbf{u} = 0 \Rightarrow \zeta = \xi$) και αντικαθιστούμε την Εξ. (2.4-8) στην Εξ. (2.4-7) προκύπτει η αλγεβρική έκφραση

$$v = 4nd^2 \left(\frac{\pi k_B T}{m} \right)^{1/2} = \sqrt{2} nd^2 \pi \bar{c} \quad (2.4-9)$$

Συμπερασματικά, για ένα αέριο σε κατάσταση ισορροπίας η μέση ελεύθερη διαδρομή δίνεται από τη σχέση

$$\lambda = (\sqrt{2} n \pi d^2)^{-1} \quad (2.4-10)$$

στην οποία παρατηρείται ότι η μέση ελεύθερη διαδρομή είναι αντιστρόφως ανάλογη της αριθμητικής πυκνότητας και του τετραγώνου της μοριακής διαμέτρου.

2.5 Εξίσωση εξέλιξης της συνάρτησης κατανομής

Θεωρούμε ένα αέριο, του οποίου τα μόρια δέχονται μια εξωτερική δύναμη \mathbf{F} ανά μονάδα μάζας. Η δύναμη αυτή είναι συνάρτηση της θέσης \mathbf{r} και του χρόνου t αλλά ανεξάρτητη από την μοριακή ταχύτητα ξ . Σε στοιχειώδες χρονικό διάστημα dt η ταχύτητα ξ ενός μορίου, το οποίο δεν συγκρούεται με άλλο μόριο, θα μεταβληθεί κατά $\mathbf{F}dt$ και η θέση του \mathbf{r} θα μεταβληθεί κατά ξdt . Εάν ο αριθμός των μορίων, τα οποία την χρονική στιγμή t βρίσκονται στον όγκο $d^3\mathbf{r}$ γύρω από την θέση \mathbf{r} και έχουν ταχύτητες γύρω από το ξ στον χώρο $d^3\xi$, είναι $f(\mathbf{r}, \xi, t) d^3\xi d^3\mathbf{r}$, τότε μετά από χρονικό διάστημα dt , εάν δεν υπάρχουν συγκρούσεις, τα ίδια μόρια θα βρίσκονται στον στοιχειώδη όγκο $d^3\mathbf{r}'$ γύρω από την θέση $\mathbf{r} + \xi dt$. Όμοια θα ισχύει για τις ταχύτητες, οι οποίες θα κυμαίνονται στον χώρο $d^3\xi'$ γύρω από την ταχύτητα $\xi + \mathbf{F}dt$. Τότε ο αριθμός των μορίων στον νέο όγκο $d^3\xi' d^3\mathbf{r}'$ είναι $f(\mathbf{r} + \xi dt, \xi + \mathbf{F}dt, t + dt) d^3\xi' d^3\mathbf{r}'$. Έχουμε υποθέσει όμως ότι η δύναμη \mathbf{F} είναι ανεξάρτητη από την ταχύτητα ξ οπότε θα ισχύει ότι $d^3\xi d^3\mathbf{r} = d^3\xi' d^3\mathbf{r}' + O(dt^2)$. Εξισώνοντας τον αριθμό των μορίων πριν και μετά το διάστημα dt έχουμε

$$f(\mathbf{r} + \xi dt, \xi + \mathbf{F}dt, t + dt) d^3\xi' d^3\mathbf{r}' = f(\mathbf{r} + \xi dt, \xi + \mathbf{F}dt, t + dt) d^3\xi d^3\mathbf{r} \quad (2.5-1\alpha)$$

ή

$$f(\mathbf{r} + \xi dt, \xi + \mathbf{F}dt, t + dt) = f(\mathbf{r}, \xi, t) \quad (2.5-1\beta)$$

ή

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \xi \cdot \nabla_r + \mathbf{F} \cdot \nabla_\xi \right) f(\mathbf{r}, \xi, t) = 0. \quad (2.5-1\gamma)$$

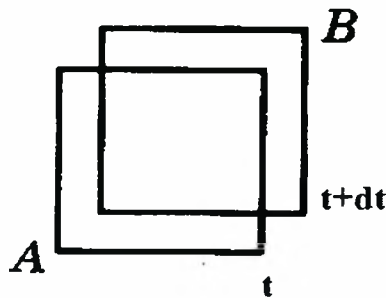
Στην περίπτωση που έχουμε συγκρούσεις η Εξ. (2.5-1β) τροποποιείται ως εξής

$$f(\mathbf{r} + \xi dt, \xi + \mathbf{F}dt, t + dt) = f(\mathbf{r}, \xi, t) + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} dt \quad (2.5-2)$$

Διαιρώντας με dt και αναπτύσσοντας σε ανάπτυγμα Taylor το πρώτο μέλος γύρω από δεύτερο μέλος κρατώντας μόνο όρους πρώτης τάξης προκύπτει η παρακάτω εξίσωση

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \xi \cdot \nabla_r + \mathbf{F} \cdot \nabla_\xi \right) f(\mathbf{r}, \xi, t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}. \quad (2.5-3)$$

Η εξίσωση αυτή για να είναι πλήρως ορισμένη θα πρέπει να προσδιοριστεί ο όρος $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$, ο οποίος εκφράζει την χρονική μεταβολή της συνάρτησης κατανομής, συναρτήσει των μοριακών συγκρούσεων.



Σχήμα 2.1: Στοιχειώδης όγκος την χρονική στιγμή t και $t+dt$.

Ας θεωρήσουμε στο **Σχήμα 2.1** ότι το τετράγωνο A αντιπροσωπεύει τον στοιχειώδη φασικό όγκο την στιγμή $\{\mathbf{r}, \xi, t\}$, ενώ το τετράγωνο B την στιγμή $\{\mathbf{r} + \xi dt, \xi + \mathbf{F}dt, t + dt\}$ όπου το dt τείνει στο μηδέν. Κατά την χρονική διάρκεια dt ορισμένα μόρια που βρίσκονται στο A θα μετακινηθούν από αυτό λόγω συγκρούσεων (το A είναι τόσο μικρό ώστε τα μόρια μετά την σύγκρουσή το εγκαταλείπουν) και δεν θα φτάσουν ποτέ στο B . Αντίθετα υπάρχουν μόρια έξω από το A , τα οποία μετά την σύγκρουση θα εισέλθουν στο A κατά την χρονική διάρκεια dt και τα μόρια αυτά θα φτάσουν στο B . Έτσι ο αριθμός των μορίων που υπάρχει στο B την χρονική στιγμή $t+dt$ καθώς το $dt \rightarrow 0$, ισούται με τον αρχικό αριθμό των μορίων στο A την χρονική στιγμή t συν τον αριθμό των μορίων που εισήλθαν στο A την χρονική διάρκεια dt .

Αυτό μπορεί μαθηματικά να διατυπωθεί ως εξής [Huang, 1977]

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} dt = (R^+ - R^-) dt \quad (2.5-4)$$

όπου

$R^+ dt d^3rd^3\xi$: Ο αναμενόμενος αριθμός των συγκρούσεων κατά την χρονική διάρκεια dt , εντός της οποίας η τελική κατάσταση ενός από τα δύο συγκρουόμενα σωματίδια είναι στο φασικό χώρο $d^3rd^3\xi$ γύρω από το (\mathbf{r}, ξ) .

$R^- dt d^3rd^3\xi$: Ο αριθμός των συγκρούσεων κατά την χρονική διάρκεια dt , εντός της οποίας η αρχική κατάσταση ενός από τα δύο συγκρουόμενα σωματίδια είναι στο φασικό χώρο $d^3rd^3\xi$ γύρω από το (\mathbf{r}, ξ) .

Ο όγκος $d^3\xi$ είναι αρκετά μικρός ώστε η πιθανότητα και τα δύο σωματίδια που εμπλέκονται στη σύγκρουση να είναι στο $d^3\xi$ γύρω από το ξ είναι πολύ μικρή και αγνοείται. Επίσης πρέπει να τονιστεί ότι οι πιθανές συγκρούσεις είναι μόνο δυαδικές ενώ η πιθανότητα να συμβούν συγκρούσεις μεταξύ τριών και περισσότερων μορίων είναι πολύ μικρή και να αγνοηθεί. Τότε οι ποσότητες R^+ και R^- μπορούν να εκφραστούν αναλυτικά συναρτήσει της συνάρτησης κατανομής f .

Ας θεωρήσουμε ότι οι ταχύτητες πριν και μετά την σύγκρουση είναι αντίστοιχα ξ_1, ξ_2 (πριν) και ξ'_1, ξ'_2 (μετά). Τότε οι εξισώσεις διατήρησης της ορμής και της ενέργειας για σωματίδια ίδια μάζας είναι [Ferziger, 1972]

$$\xi_1 + \xi_2 = \xi'_1 + \xi'_2 \quad (2.5-5)$$

και

$$\frac{1}{2}\xi_1^2 + \frac{1}{2}\xi_2^2 = \frac{1}{2}\xi_1'^2 + \frac{1}{2}\xi_2'^2 \quad (2.5-6)$$

αντίστοιχα. Η ταχύτητα του κέντρου μάζας, η οποία παραμένει σταθερή, δίνεται από την σχέση

$$\mathbf{G} = \xi_1 + \xi_2 = \xi'_1 + \xi'_2 \quad (2.5-7)$$

Οι σχετικές ταχύτητες πριν και μετά την σύγκρουση είναι $\mathbf{g} = \xi_2 - \xi_1$ και

$\mathbf{g}' = \xi_2' - \xi_1'$. Μπορεί να αποδειχθεί ότι

$$\mathbf{g} = \mathbf{g}' \quad (2.5-8)$$

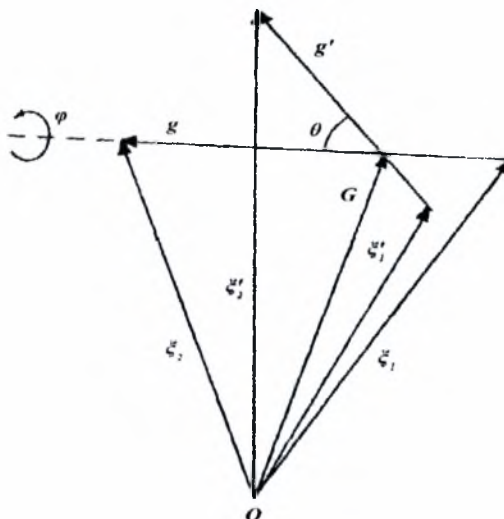
Δηλαδή η σύγκρουση απλά περιστρέφει το διάνυσμα \mathbf{g} σε \mathbf{g}' χωρίς να αλλάξει το μέτρο του (Σχήμα 2.2). Επίσης ισχύει ότι

$$\xi_1' = \xi_1 + \xi_2 - \mathbf{g}' \quad \text{και} \quad \xi_2' = \xi_1 + \xi_2 + \mathbf{g}' \quad (2.5-9)$$

Τέλος για την περίπτωση των ελαστικών συγκρούσεων ισχύει ότι

$$d^3 \xi_1 d^3 \xi_2 d^3 \mathbf{g}' = d^3 \xi_1' d^3 \xi_2' d^3 \mathbf{g} \quad (2.5-10)$$

Η Εξ. (2.5-10) είναι γνωστή ως ο νόμος του Liouville για ελαστικές συγκρούσεις.



Σχήμα 2.2: Γεωμετρία δυαδικής σύγκρουσης.

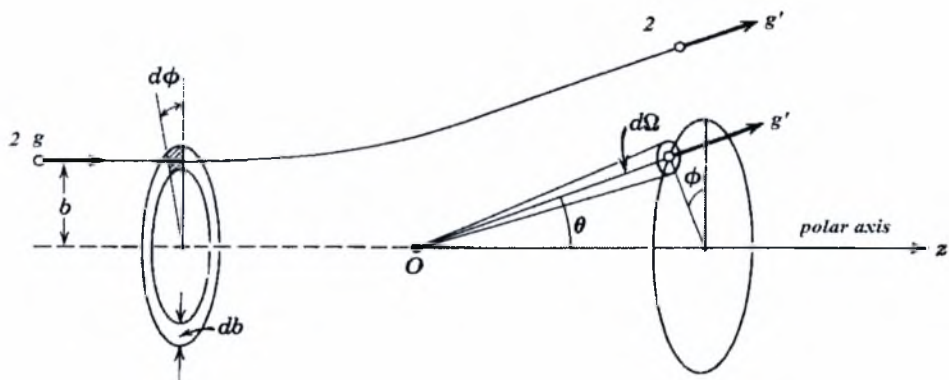
2.6 Δυαδικές συγκρούσεις

Θεωρούμε την διαδικασία σύγκρουσης σε ένα σύστημα αναφοράς, όπου το μόριο 1 βρίσκεται ακίνητο στο σημείο O . Το κέντρο του μορίου 2 περιγράφει την τροχιά στο επίπεδο του σχήματος, όπως χαρακτηριστικά απεικονίζεται στο Σχήμα 2.3. Οι σχετικές ταχύτητες πριν και μετά την σύγκρουση είναι \mathbf{g} και \mathbf{g}' αντίστοιχα. Η απόσταση του μορίου 2 από το σημείο O ονομάζεται παράμετρος πρόσκρουσης b (impact factor). Αφού ισχύει ότι $g = g'$, η τελική κατάσταση μετά την σύγκρουση περιγράφεται πλήρως από δύο γωνίες σκέδασης (scattering angles) θ και ϕ . Η πρώτη

εμφανίζεται μεταξύ του διανύσματος \mathbf{g}' και του πολικού άξονα z , ενώ η δεύτερη είναι η αζιμουθιακή γωνία που καθορίζει την θέση του επιπέδου στο χώρο. Είναι σαφές ότι η γωνία θ εξαρτάται από το διάνυσμα της ταχύτητας \mathbf{g} και της παραμέτρου πρόσκρουσης b και καθορίζονται πλήρως από το είδος της αλληλεπίδρασης των μορίων.

Για την εξαγωγή ρητών εκφράσεων για τις ποσότητες R^+ και R^- γίνονται οι εξής παραδοχές:

- i. πραγματοποιούνται μόνο δυαδικές συγκρούσεις,
- ii. η επίδραση των εξωτερικών δυνάμεων στο αποτέλεσμα της σύγκρουσης αγνοείται,
- iii. ο αναμενόμενος αριθμός συγκρούσεων σε δεδομένο στοιχειώδη όγκο μεταξύ μορίων με διαφορετικές ταχύτητες μπορεί να προσδιοριστεί στατιστικά (Stosszahlansatz). Η συγκεκριμένη υπόθεση εισάγει την μη αντιστρεψιμότητα στην κινητική θεωρία και είναι γνωστή ως μοριακό χάος (molecular chaos).



Σχήμα 2.3: Γεωμετρία δυαδικής σύγκρουσης.

Επιστρέφοντας στο Σχήμα 2.3, εάν πρόκειται να υπάρξει σύγκρουση μεταξύ των μορίων 1 και 2, τότε το μόριο 2 θα πρέπει να βρίσκεται εντός κυλίνδρου με βάση την ποσότητα $bdbd\phi$ και ακμή ίση με $-gdt$. Ο κύλινδρος αυτός ονομάζεται κύλινδρος σύγκρουσης (collision cylinder) και έχει όγκο $gbdbd\phi dt$. Σύμφωνα με τον ορισμό της συνάρτησης κατανομής, ο συνολικός αριθμός των μορίων 2, τα οποία έχουν ταχύτητες στο $d^3\xi$, γύρω από το ξ_2 και βρίσκονται μέσα στον κύλινδρο σύγκρουσης είναι $f_2(\mathbf{r}, \xi, t)gbdbd\phi^3\xi_2 dt$. Ο αριθμός των μορίων 1 που σχετίζονται μέσω

συγκρούσεων με τα μόρια 2 είναι $f_1(\mathbf{r}, \xi, t)d^3\xi d^3\mathbf{r}$. Ο αναμενόμενος αριθμός συγκρούσεων ανάμεσα στα δύο είδη μορίων είναι το γινόμενο

$$f_2(\mathbf{r}, \xi_2, t)f_1(\mathbf{r}, \xi_1, t)gbdbd\phi d^3\xi_1 d^3\xi_2 d^3\mathbf{r} dt \quad (2.6-1)$$

Επομένως ο αριθμός των μορίων τύπου 1 που χάνονται στην διάρκεια dt λόγω συγκρούσεων με τα μόρια τύπου 2 δίδεται από την Εξ. (2.6-1). Ο ρυθμός των απωλειών $R^- d^3\mathbf{r} d^3\xi_1 dt$ προκύπτει ολοκληρώνοντας ως προς ξ_2 , b και ϕ , δηλαδή

$$R^- = \iiint f_1(\mathbf{r}, \xi_1, t)f_2(\mathbf{r}, \xi_2, t)gbdbd\phi d^3\xi_2 \quad (2.6-2)$$

Αντίστοιχα μπορούμε να υπολογίσουμε την ποσότητα R^+ , θεωρώντας τις συγκρούσεις που έχουν σαν αποτέλεσμα μόρια τύπου 1 στο $d^3\xi_1$ γύρω από το ξ_1 . Κάνοντας χρήση της ιδιότητας της αντίστροφης σύγκρουσης ισχύει ότι ο αριθμός των συγκρούσεων μεταξύ των μορίων τύπου 1 στο $d^3\xi_1'$ και των μορίων τύπου 2 στο $d^3\xi_2'$ είναι

$$f_2(\mathbf{r}, \xi_2', t)f_1(\mathbf{r}, \xi_1', t)gbdbd\phi d^3\xi_1' d^3\xi_2' d^3\mathbf{r} dt \quad (2.6-3)$$

Επομένως ο ρυθμός κέρδους $R^+ d^3\mathbf{r} d^3\xi_1 dt$ είναι

$$R^+ = \iiint f_1(\mathbf{r}, \xi_1', t)f_2(\mathbf{r}, \xi_2', t)gbdbd\phi d^3\xi_2' \quad (2.6-4)$$

Συνδυάζοντας τις παραπάνω Εξς. (2.6-2) και (2.6-4) προκύπτει ότι ο ρυθμός, με τον οποίο η συνάρτηση κατανομής των μορίων τύπου 1 μεταβάλλεται λόγω των συγκρούσεων με τα μόρια 2 δίνεται από την σχέση

$$\left(\frac{\partial f_1}{\partial t}\right)_{2, coll} = (R^+ - R^-) = \iiint (f_1' f_2' - f_1 f_2)gbdbd\phi d^3\xi_2 \quad (2.6-5)$$

Τότε η εξίσωση εξέλιξης της συνάρτησης κατανομής για την περίπτωση ενός αερίου γράφεται στη μορφή

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \xi \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\xi}\right) f(\mathbf{r}, \xi, t) = \iiint (f_1' f_2' - f_1 f_2)gbdbd\phi d^3\xi_2 \quad (2.6-6)$$

Η εξίσωση αυτή ονομάζεται Εξίσωση Boltzmann [Ferziger, 1972]. Μια άλλη μορφή της εξίσωσης Boltzmann είναι η

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} \right) f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t) = \iint (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) g \sigma(\mathbf{g}, \theta) d^2 \Omega d^3 \boldsymbol{\xi}_2 \quad (2.6-7)$$

όπου $\sigma(\mathbf{g}, \theta)$ ονομάζεται διαφορική επιφάνεια σκέδασης (Differential Cross Section). Η ποσότητα αυτή ορίζεται έτσι ώστε όταν δέσμη των μορίων 1 με ταχύτητα στην περιοχή $d^3 \boldsymbol{\xi}_1$ γύρω από το $\boldsymbol{\xi}_1$ συγκρουστεί με δέσμη μορίων 2 με ταχύτητα στην περιοχή $d^3 \boldsymbol{\xi}_2$ γύρω από το $\boldsymbol{\xi}_2$, ο πιθανός αριθμός των συγκρούσεων ανά μονάδα όγκου και χρόνου δίνεται από την σχέση

$$f_1 f_2 g \sigma_{12}(\mathbf{g}, \theta) d^2 \Omega d^3 \boldsymbol{\xi}_1 d^3 \boldsymbol{\xi}_2. \quad (2.6-8)$$

Αντίστοιχα προκύπτει σχέση και για την ποσότητα $f'_1 f'_2$ που αναφέρεται στο κέρδος των σωματιδίων μετά την σύγκρουση.

Η ποσότητα $d^2 \Omega = \sin \theta d\theta d\phi$ αποτελεί μια στερεά γωνία, η οποία περιέχει την διεύθυνση της σχετικής ταχύτητας \mathbf{g}' μετά την σύγκρουση. Στις Εξς. (2.6-6) και (2.6-7) ο όρος των συγκρούσεων αποτελεί ένα πενταπλό ολοκλήρωμα. Μια τρίτη μορφή της εξίσωσης Boltzmann είναι η

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} \right) f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t) = \iiint (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) w(\boldsymbol{\xi}'_1, \boldsymbol{\xi}'_2; \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2) d\xi_1 d\xi_2 d^3 \boldsymbol{\xi}'_2 \quad (2.6-9)$$

όπου $w(\boldsymbol{\xi}'_1, \boldsymbol{\xi}'_2; \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2)$ είναι η πιθανότητα δύο μόρια τύπου 1 και 2 αντίστοιχα με αρχικές ταχύτητες $\boldsymbol{\xi}_1$ και $\boldsymbol{\xi}_2$ μετά την σύγκρουσή τους, να έχουν ταχύτητες $\boldsymbol{\xi}'_1$ και $\boldsymbol{\xi}'_2$.

Ανάλογα με την εμπειρία και τις διαθέσιμες πληροφορίες επιλέγεται και η πλέον κατάλληλη μορφή της εξίσωσης Boltzmann.

2.7 Βασικές ιδιότητες της εξίσωση Boltzmann

2.7.1 Οι αναλλοίωτες του όρου συγκρούσεων

Η εξίσωση Boltzmann στην γενική της μορφή γράφεται ως

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} f \right) = \iiint (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) g b d b d \phi d^3 \boldsymbol{\xi}_2 = J(f_1, f_2) \quad (2.7.1-1)$$

Ο μέσος ρυθμός αλλαγής μιας οποιαδήποτε μοριακής ιδιότητας $\Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t)$ λόγω των

συγκρούσεων δίνεται από την σχέση [Ferziger, 1972]

$$\left(\frac{\partial \Psi}{\partial t}\right)_{coll} = \frac{1}{n} \int J(f_1, f_2) \Psi(\xi_1) d^3 \xi_1. \quad (2.7.1-2)$$

Αποδεικνύεται σχετικά εύκολα ότι

$$\left(\frac{\partial \Psi}{\partial t}\right)_{coll} = \frac{1}{4n} \int (\Psi_1 + \Psi_2 - \Psi_1' - \Psi_2') (f_1' f_2' - f_1 f_2) g b d b d \phi d^3 \xi_1 d^3 \xi_2 \quad (2.7.1-3)$$

Εάν η συνάρτηση $\Psi(\mathbf{r}, \xi, t)$, η οποία δρα στον όρο των συγκρούσεων, ισούται με συγκεκριμένες συναρτήσεις τότε ο όρος $\left(\frac{\partial \Psi}{\partial t}\right)_{coll}$ μηδενίζεται. Οι συναρτήσεις αυτές ονομάζονται αναλλοίωτες των συγκρούσεων και αποτελούν σημαντική ιδιότητα της εξίσωσης Boltzmann. Έτσι όταν

$$\Psi_1 = m \quad \text{ή} \quad \Psi_{2,3,4} = m\xi \quad \text{ή} \quad \Psi_5 = \frac{1}{2} m\xi^2 \quad (2.7.1-4)$$

τότε ισχύει

$$\left(\frac{\partial \Psi}{\partial t}\right)_{coll} = 0. \quad (2.7.1-5)$$

Κάθε δυνατός γραμμικός συνδυασμός των παραπάνω αναλλοίωτων αποτελεί και αυτός αναλλοίωτη της εξίσωσης Boltzmann.

2.7.2 Μακροσκοπικές εξισώσεις

Είναι γνωστό ότι εάν δράσουμε με κάθε μία από τις παραπάνω αναλλοίωτες ξεχωριστά και ολοκληρώσουμε ως προς την μοριακή ταχύτητα ξ την γενική εξίσωση Boltzmann, θα προκύψουν οι γνωστές εξισώσεις διατήρησης της μάζας ορμής και ενέργειας. Η γενική εξίσωση ενός οπουδήποτε ισοζυγίου είναι της μορφής

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \Psi f(\xi_1) d^3 \xi_1 + \nabla_r \cdot \int \Psi \xi_1 f(\xi_1) d^3 \xi_1 = \mathbf{F} \cdot \int f(\xi_1) \nabla_{\xi_1} \Psi d^3 \xi_1 \quad (2.7.2-1)$$

Εάν θέσουμε όπου $\Psi = m$ στην Εξ. (2.7.2-1) τότε αποδεικνύεται ότι προκύπτει η εξίσωση διατήρησης της μάζας

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \quad (2.7.2-2)$$

Εάν θέσουμε όπου $\Psi = m\xi$ τότε προκύπτουν οι εξισώσεις διατήρησης ορμής

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_i} (P_{ij} + \rho u_j u_i) = \rho \frac{F_i}{m} \delta_{ij} \quad (2.7.2-3)$$

Τέλος εάν θέσουμε όπου $\Psi = \frac{1}{2} m\xi^2$ προκύπτει η εξίσωση διατήρησης της ενέργειας

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{1}{2} u^2 \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[q_i + u_j P_{ij} + \rho u_i \left(e + \frac{1}{2} u^2 \right) \right] = \rho \frac{F_i}{m} u_i \quad (2.7.2-4)$$

Οι τρεις παραπάνω εξισώσεις είναι δυνατόν να μας δώσουν τις γνωστές εξισώσεις Navier-Stokes εάν αντικαταστήσουμε το τανυστή των τάσεων με τον νόμο του Newton

$$P_{ij} = P \delta_{ij} - \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \lambda \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (2.7.2-5)$$

και την ροή θερμότητας με τον νόμο του Fourier

$$q_i = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (2.7.2-6)$$

Οι συντελεστές μ και λ αποτελούν τους συντελεστές ιξώδους και ο συντελεστής κ με τον συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας. Οι θεωρητικοί συντελεστές κ και μ υπολογίζονται μέσω της κινητικής θεωρίας και οι σχέσεις από τις οποίες υπολογίζονται οι ποσότητες αυτές δίνονται στην Παράγραφο 2.7.5.

Τέλος σημειώνεται ότι εφαρμόζοντας την ανάλυση Chapman-Enskog πετυχαίνουμε την αναλυτική λύση της εξίσωσης Boltzmann στο μακροσκοπικό όριο. Κατά την διαδικασία αυτή προκύπτουν θεωρητικά οι συντελεστές κ και μ και οι τιμές τους συμφωνούν με πειραματικά δεδομένα.

2.7.3 Το θεώρημα H

Έκτος από τις μακροσκοπικές εξισώσεις ισοζυγίου μάζας και ορμής από την εξίσωση Boltzmann είναι δυνατόν να εξαχθεί μια ακόμα σχέση, η οποία αναφέρεται

σαν θεώρημα Η [Boltzmann, 1995]. Το θεώρημα αυτό αφορά μια ποσοτική διατύπωση του γεγονότος ότι η κινητική θεωρία περιγράφει διαδικασίες μη αντιστρέψιμες στο χρόνο. Αυτό γίνεται κατανοητό εάν αντιστρέψουμε το χρόνο στην εξίσωση Boltzmann. Έτσι ας θεωρήσουμε ότι η συνάρτηση κατανομής f_0 περιγράφει την κατάσταση ενός αερίου την χρονική στιγμή t_0 και η συνάρτηση κατανομής f περιγράφει την κατάσταση σε μια οποιαδήποτε χρονική στιγμή $t > t_0$ τότε μπορούμε να γράψουμε την εξίσωση Boltzmann ως

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \cdot \nabla_r f + \mathbf{F} \cdot \nabla_\xi f \right) = \iiint (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) g b d b d \phi d^3 \xi_2 \quad (2.7.3-1)$$

Έστω ότι την χρονική στιγμή $t_1 (t_1 > t_0, t_1 - t_0 \gg t_{coll})$ σταματήσουμε το σύστημά μας και προσπαθήσουμε να αντιστρέψουμε την διαδικασία στο χρόνο θέτοντας στην εξίσωση Boltzmann όπου $\tilde{t} = -t$, $\tilde{\xi} = -\xi$ και $\tilde{f}(\mathbf{r}, \tilde{\xi}, \tilde{t}) \equiv f(\mathbf{r}, -\xi, -t)$ τότε προκύπτει

$$-\left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} + \xi \cdot \nabla_r \tilde{f} + \mathbf{F} \cdot \nabla_\xi \tilde{f} \right) = \iiint (\tilde{f}'_1 \tilde{f}'_2 - \tilde{f}_1 \tilde{f}_2) g b d b d \phi d^3 \tilde{\xi}_2 \quad (2.7.3-2)$$

Συγκρίνοντας τις δύο παραπάνω εξισώσεις παρατηρούμε ότι κατά την αντιστροφή στον χρόνο δεν γυρίσαμε στην αρχική κατάσταση f_0 , αλλά σε μια διαφορετική. Έτσι οδηγούμαστε στο συμπέρασμα ότι «κάτι» καταστρέφει την αντιστρεψιμότητα του συστήματος κατά την στατιστική μελέτη των σωματιδίων. Αυτό το «κάτι» είναι η υπόθεση του μοριακού χάους (ή Stosszahlansatz) που αναφέρθηκε παραπάνω [Ferziger, 1972].

Έστω η συνάρτηση κατανομής f , ανεξάρτητη της θέσης \mathbf{r} τότε η εξίσωση Boltzmann χωρίς την επίδραση εξωτερικών δυνάμεων είναι

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \iiint (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) g b d b d \phi d^3 \xi_2 = J(f_1 f_2). \quad (2.7.3-3)$$

Ορίζουμε την ποσότητα

$$H = \int f(\xi, t) \log f(\xi, t) d^3 \xi \quad (2.7.3-4)$$

Εάν παραγωγίσουμε ως προς το χρόνο την Εξ. (2.7.3-4) προκύπτει

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \int \frac{\partial f}{\partial t} [\log f + 1] d^3 \xi = \int [\log f + 1] J(f) d^3 \xi \quad (2.7.3-5)$$

Θέτουμε $\Psi = \log f + 1$. Θα πρέπει να ισχύει ότι

$$\int J(f_1 f_2) \Psi d^3 \xi_1 = \frac{1}{4n} \int (\Psi_2 + \Psi_1 - \Psi_2' - \Psi_1') (f_1' f_2' - f_1 f_2) g b d b d \phi d^3 \xi_1 d^3 \xi_2 \quad (2.7.3-6)$$

Εάν αντικαταστήσουμε όπου $\Psi = \log f + 1$ στην Εξ. (2.7.3-7) προκύπτει

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{1}{4} \int (f_2 f_1 - f_2' f_1') (\log f_2' f_1' - \log f_2 f_1) g b d b d \phi d^3 \xi_1 d^3 \xi_2 \quad (2.7.3-7)$$

Ορίζοντας ως $x = f_2' f_1'$ και $y = f_2 f_1$ τότε το γινόμενο εντός παρενθέσεως είναι πάντα μεγαλύτερο του μηδενός, δηλαδή

$$(x - y)(\log x - \log y) > 0, \quad (2.7.3-8)$$

ενώ την περίπτωση που $x = y$ ο όρος μηδενίζεται. Έτσι ισχύει πάντα

$$\frac{dH}{dt} \leq 0. \quad (2.7.3-9)$$

Όλα αυτά βέβαια δεν θα σήμαιναν και πολλά αν δεν υπήρχε άμεση σχέση μεταξύ της ποσότητας H και της εντροπίας S ενός ιδανικού αερίου. Η εντροπία S ισούται με [Ferziger, 1972]

$$S = -n \left[k_B \log \left(\frac{n}{T^{3/2}} \right) + const. \right], \quad (2.7.3-10)$$

ενώ η ποσότητα H ενός απλού αερίου σε ομοιόμορφη σταθερή κατάσταση προκύπτει εάν αντικαταστήσουμε την συνάρτηση κατανομής Maxwell στην Εξ. (2.7.3-4). Τότε προκύπτει

$$H_M = n \left[\log \left(\frac{n}{T^{3/2}} \right) + \frac{3}{2} \left\{ \log \left(\frac{m}{2\pi k_B} \right) - 1 \right\} \right] \quad (2.7.3-11)$$

Συγκρίνοντας τις Εξς (2.7.3-10) και (2.7.3-11) προκύπτει

$$S = -k_B H_M + constant \quad (2.7.3-12)$$

Το θεώρημα H είναι πιο γενικό από τον 2^ο θερμοδυναμικό νόμο και αυτό διότι ο 2^{ος} θερμοδυναμικός νόμος ισχύει μόνο σε κατάσταση ισορροπίας σε αντίθεση με το

θεώρημα Η που ισχύει και μακριά από αυτήν. Από την άλλη πλευρά το θεώρημα Η ισχύει μόνο για αέρια σε συγκεκριμένες συνθήκες (πχ αραιά, δυαδικά) ενώ ο 2^{ος} θερμοδυναμικός νόμος ισχύει σε γενικότερες περιπτώσεις [Ferziger, 1972].

2.7.4 Κατανομή Maxwell

Στην περίπτωση όπου ο όρος των συγκρούσεων θεωρηθεί ίσος με το μηδέν, τότε θεωρώντας ότι δεν υπάρχει πεδίο εξωτερικών δυνάμεων, μια δυνατή λύση είναι η

$$f_0(\xi) = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\frac{m(\xi-u_0)^2}{2k_B T}} \quad (2.7.4-1)$$

Μαθηματικά η Εξ. (2.7.4-1) αποδεικνύεται ως εξής: Ορίζουμε την κατανομή ισορροπίας σαν λύση της μόνιμης εξίσωσης Boltzmann χωρίς την παρουσία εξωτερικών δυνάμεων. Τότε η $f_0(r, \xi, t)$ θα ικανοποιεί την Εξ. (2.7.3-3)

$$\iiint (f_0(\xi_2')f_0(\xi_1') - f_0(\xi_2)f_0(\xi_1)) g b d b d \phi d^3 \xi_1 = 0 \quad (2.7.4-2)$$

Η εξίσωση αυτή έχει τουλάχιστον μία λύση ενώ η γενική λύση της θα είναι γραμμικός συνδυασμός των επιμέρους λύσεων. Μία ικανή συνθήκη είναι ότι

$$f_0(\xi_2')f_0(\xi_1') - f_0(\xi_2)f_0(\xi_1) = 0 \quad (2.7.4-3)$$

ή

$$\log f_0(\xi_2) + \log f_0(\xi_1) = \log f_0(\xi_2') + \log f_0(\xi_1') \quad (2.7.4-4)$$

Είναι προφανές ότι οι λύσεις της Εξ. (2.7.4-4) είναι όλες οι αναλλοίωτες συναρτήσεις $\Psi_i(\xi)$ με $i = 1, \dots, 5$ και βέβαια ο γραμμικός συνδυασμός τους, δηλαδή

$$\log f_0(\xi) = \Psi_i(\xi) \quad (2.7.4-5)$$

ή γενικότερα

$$\log f_0(\xi) = \alpha_1 \Psi_1(\xi) + \alpha_2 \Psi_2(\xi) + \alpha_3 \Psi_3(\xi) + \alpha_4 \Psi_4(\xi) + \alpha_5 \Psi_5(\xi) \quad (2.7.4-6)$$

η οποία ικανοποιεί την διατήρηση μάζας, ορμής και ενέργειας. Τότε οι συναρτήσεις $\Psi_i(\xi)$, οι οποίες ονομάζονται αναλλοίωτες, όπως έχουμε προαναφέρει, έχουν την εξής μορφή

$$\Psi_1(\xi) = m, \Psi_2(\xi) = m\xi_x, \Psi_3(\xi) = m\xi_y, \Psi_4(\xi) = m\xi_z, \Psi_5(\xi) = \frac{1}{2}m\xi^2. \quad (2.7.4-7)$$

Αντικαθιστώντας στην Εξ. (2.7.4-6) προκύπτει ότι

$$\log f_0(\xi) = \alpha_1 m + \alpha_2 m\xi_x + \alpha_3 m\xi_y + \alpha_4 m\xi_z + \alpha_5 \frac{1}{2} m\xi^2 \quad (2.7.4-8)$$

ή

$$f_0(\xi) = C e^{-A(\xi - u_0)^2}. \quad (2.7.4-9)$$

Χρησιμοποιώντας τις ροπές της συνάρτησης κατανομής f μπορούμε να υπολογίσουμε τους άγνωστους συντελεστές C , A και u_0 . Έτσι από την μηδενική ροπή για την πυκνότητα έχουμε

$$n = \int f_0(\xi) d^3 \xi \Rightarrow n = C \int e^{-A(\xi - u_0)^2} d^3 \xi$$

Ορίζοντας $\zeta = \xi - u_0$, προκύπτει

$$n = C \int e^{-A\zeta^2} d^3 \zeta = C \int e^{-A(\zeta_x^2 + \zeta_y^2 + \zeta_z^2)} d^3 \zeta = C \int e^{-A(\zeta_x^2 + \zeta_y^2 + \zeta_z^2)} d^3 \zeta \Rightarrow n = C \left(\frac{\pi}{A} \right)^{3/2} \quad (2.7.4-10)$$

Στην συνέχεια από τις πρώτες ροπές για τις τρεις συνιστώσες της ταχύτητας έχουμε

$$\begin{aligned} u &= \frac{1}{n} \int f_0(\xi) \xi d^3 \xi \Rightarrow u = \frac{C}{n} \int e^{-A\zeta^2} (\zeta + u_0) d^3 \zeta \Rightarrow \\ u &= \underbrace{\frac{C}{n} \int e^{-A\zeta^2} \zeta d^3 \zeta}_0 + \frac{C u_0}{n} \int e^{-A\zeta^2} d^3 \zeta \Rightarrow u = \frac{C u_0}{n} \left(\frac{\pi}{A} \right)^{3/2}. \end{aligned} \quad (2.7.4-11)$$

και κάνοντας χρήση της Εξ. (2.7.4-10) προκύπτει

$$u = u_0. \quad (2.7.4-12)$$

Τέλος από την ροπή για την εσωτερική ενέργεια ισχύει

$$\begin{aligned} e &= \frac{1}{n} \int \frac{1}{2} f_0(\xi) (\xi - u)^2 d^3 \xi \Rightarrow e = \frac{C}{2n} \int (\xi - u)^2 e^{-A(\xi - u_0)^2} d^3 \xi \Rightarrow \\ e &= \frac{C}{2n} \int (\zeta + u_0 - u)^2 e^{-A\zeta^2} d^3 \zeta \Rightarrow \dots \Rightarrow e = \frac{3}{4A} \end{aligned} \quad (2.7.4-13)$$

Όμως αφού $e = \frac{3}{2} \frac{k_B}{m} T$ προκύπτει ότι

$$A = \frac{m}{2k_B T} \quad (2.7.4-14)$$

και από την Εξ. (2.7.4-10) ότι

$$C = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2}. \quad (2.7.4-15)$$

Τελικά αποδείχτηκε ότι η κατανομή ισορροπίας εκφράζεται από την εξίσωση

$$f_0(\xi) = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\frac{m(\xi-u)^2}{2k_B T}} \quad (2.7.4-16)$$

Η κατανομή αυτή είναι γνωστή ως κατανομή Maxwell. Η κατανομή Maxwell αποτελεί ένα πολύ χρήσιμο εργαλείο μιας και αναπαριστά το όριο προς το οποίο τείνει να συγκλίνει το σύστημα. Αποτελεί δηλαδή το σημείο μέγιστης εντροπίας.

2.7.5 Ενδομοριακό δυναμικό

Η εξίσωση Boltzmann περιγράφει την εξέλιξη της συνάρτησης κατανομής στον φασικό χώρο. Αποτελείται από τον όρο μεταφοράς (streaming term) και τον όρο των συγκρούσεων (collision term). Ο πρώτος περιγράφει την κίνηση των μορίων κατά μήκος της τροχιάς τους στον φασικό χώρο και αποτελεί έναν διαφορικό τελεστή, ενώ ο δεύτερος εκφράζει τις μεταβολές της ταχύτητας λόγω των συγκρούσεων και αποτελεί έναν ολοκληρωτικό τελεστή. Έτσι η εξίσωση Boltzmann είναι μια ολοκληροδιαφορική εξίσωση, η οποία χαρακτηρίζεται για την μη γραμμικότητα του όρου των συγκρούσεων καθώς και το ότι ο όρος αυτός συνδέεται άμεσα με τον μηχανισμό αλληλεπίδρασης των μορίων (ενδομοριακό δυναμικό).

Η προσομοίωση του όρου των συγκρούσεων στην εξίσωση Boltzmann αποτελεί μια επιλογή κρίσιμης σημασίας και καθορίζει σε μεγάλο βαθμό τη δυνατότητα ρεαλιστικής προσομοίωσης. Στην ιδανική περίπτωση η αντικατάσταση περιλαμβάνει όλους τους τύπους των συγκρούσεων αλλά και την πραγματική συμπεριφορά των σωματιδίων κατά την αλληλεπίδρασή τους.

Ο κάθε τύπος συγκρούσεων, αναφέρεται στον συνολικό αριθμό σωματιδίων που αλληλεπιδρούν μεταξύ τους την ίδια χρονική στιγμή. Προφανώς είναι αδύνατο να μπορέσουν να περιληφθούν όλοι οι πιθανοί τύποι των συγκρούσεων, αφού ο αριθμός τους είναι ίσος με τον αριθμό των σωματιδίων στο σύστημα. Από την άλλη βέβαια μεριά, δεν έχουν όλοι την ίδια σημασία αλλά και την ίδια συχνότητα. Ιδιαίτερα για αραιοποιημένες ροές, φαίνεται ότι είναι αρκετός ο προσδιορισμός μόνο των συγκρούσεων στις οποίες εμπλέκονται δύο σωματίδια εφόσον όλες οι άλλες περιπτώσεις είναι πολύ σπάνιες. Όσο βέβαια προσεγγίζεται η υδροδυναμική περιοχή, καθίσταται χρήσιμος και προοδευτικά απαραίτητος ο υπολογισμός και των συγκρούσεων στις οποίες εμπλέκονται τρία σωματίδια αφού πλέον κάτι τέτοιο είναι αρκετά πιθανό.

Το επόμενο βήμα είναι να καθοριστεί η συμπεριφορά των σωματιδίων κατά τις συγκρούσεις τους, ώστε να είναι δυνατός ο προσδιορισμός της μετέπειτα τροχιάς τους. Αυτό είναι εφικτό μέσω του υπολογισμού του δυναμικού αλληλεπίδρασης των σωματιδίων.

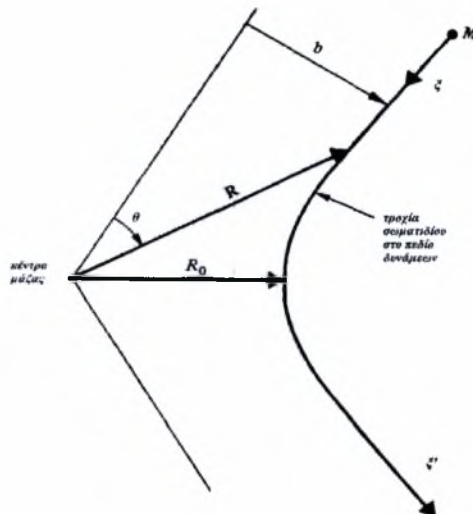
Η ολική ενέργεια των σωματιδίων κατά μήκος της τροχιάς τους αποτελείται από το άθροισμα της κινητικής και δυναμικής ενεργείας κάθε σωματιδίου [Harris, 1971], δηλαδή

$$E_{tot} = \text{Κινητική Ενέργεια} + \text{Δυναμική Ενέργεια} \quad (2.7.5-1)$$

Η δυναμική ενέργεια μπορεί να μοντελοποιηθεί ανάλογα με την επιλογή μοντελοποίησης του ενδομοριακού δυναμικού, ενώ η κινητική ενέργεια μπορεί να εκφραστεί συναρτήσει της παραμέτρου πρόσκρουσης και μεταβλητών όπως η μάζα m και η μοριακή ταχύτητα του ξ . Έτσι αποδεικνύεται ότι ισχύει [Harris, 1971]

$$E_{tot} = \frac{m}{2} \left[\mathbf{R}^2 + \left\{ \frac{\xi b}{\mathbf{R}} \right\}^2 \right] + \varphi(\mathbf{R}) \quad (2.7.5-2)$$

όπου \mathbf{R} το ακτινικό άνυσμα του σωματιδίου κατά μήκος της τροχιάς του (Σχήμα 2.4).



Σχήμα 2.4: Τροχιά του σωματιδίου στο πεδίο δυνάμεων.

Ο όρος $\varphi(\mathbf{R})$ πρέπει να μοντελοποιηθεί επιλέγοντας το κατάλληλο μοντέλο ενδομοριακού δυναμικού.

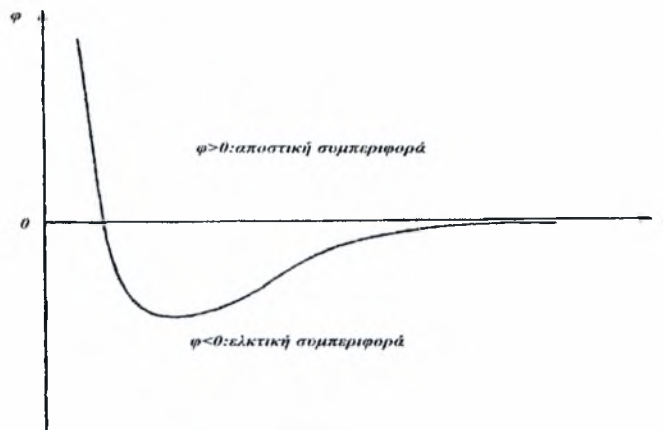
Θεωρώντας δύο άτομα του ίδιου αερίου σε ισορροπία, τα οποία απέχουν μεταξύ τους απόσταση πολλαπλάσια των ατομικών διαμέτρων (long range forces) τους, τότε δεν θα ασκείται μεταξύ τους καμία δύναμη. Όμως κατά την περίπτωση όπου τα δύο άτομα είναι πολωμένα τότε ανάμεσα τους θα δημιουργηθεί ένα πεδίο, το οποίο θα προκαλεί την αλληλεπίδραση των δύο μορίων και την άσκηση ελκτικής δύναμης από το κάθε ένα. Η ένταση του πεδίου που δημιουργείται γύρω από κάθε άτομο είναι ανάλογο αντιστρόφως ανάλογο του κύβου της απόστασης r^{-3} . Έτσι η δυναμική ενέργεια της αλληλεπίδρασης εκφράζεται ως [Ferziger, 1972]

$$\varphi(r) \approx -cr^{-6} \quad (r \rightarrow \infty) \quad (2.7.5-3)$$

όπου η σταθερά c εξαρτάται από την πολικότητα των ατόμων ενώ το αρνητικό πρόσημο δηλώνει ότι το δυναμικό είναι ελκτικό. Η δύναμη που περιγράφεται ονομάζεται δύναμη Van der Waals [Ferziger, 1972] και είναι η κύρια δύναμη ανάμεσα σε άτομα σε μεγάλη απόσταση. Η περιγραφή αυτή είναι αρκετά απλουστευμένη και δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό της σταθεράς c στην Εξ. (2.7.5-3). Η σωστή περιγραφή της παραπάνω δύναμης μπορεί να προκύψει χρησιμοποιώντας κβαντική θεωρία [Ferziger, 1972].

Στην περίπτωση όπου οι αποστάσεις μεταξύ των ατόμων είναι πολύ μικρές

(short range forces), ο υπολογισμός της δύναμης αλληλεπίδρασης είναι πολύ δύσκολο κβαντομηχανικό πρόβλημα και πραγματοποιείται μόνο για απλά αέρια όπως πχ. H_2 , He. Από πειραματικές μετρήσεις διαπιστώθηκε ότι το δυναμικό είναι θετικό δηλαδή παρουσιάζει απωστική συμπεριφορά καθώς η απόσταση των ατόμων ελατώνεται. Μάλιστα απειρίζεται καθώς η απόσταση μηδενίζεται. Από την άλλη πλευρά όταν η απόσταση είναι μεγαλύτερη του $1/10$ της ατομικής διαμέτρου το δυναμικό γίνεται αρνητικό και παρουσιάζει ελκτική συμπεριφορά. Η συμπεριφορά αυτή αναμένεται να παρουσιάζεται σε πολλά μονατομικά αέρια και μια ποιοτική συμπεριφορά του δυναμικού απεικονίζεται στο Σχήμα 2.5.

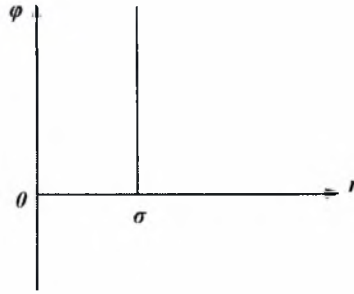


Σχήμα 2.5: Σχηματική αναπαράσταση ενδομοριακού δυναμικού μεταξύ των ατόμων.

Ενδεικτικά παρατίθενται ορισμένα από τα μοντέλα που χρησιμοποιούνται ευρέως για το ενδομοριακό δυναμικό.

Ένα πρώτο μοντέλο είναι αυτό των άκαμπτων σφαιρών (rigid spheres). Οι συγκρούσεις των άκαμπτων μη παραμορφώσιμων σωματιδίων διαμέτρου σ είναι απολύτως ελαστικές (Σχήμα 2.6). Το δυναμικό στην συγκεκριμένη περίπτωση δίνεται από την σχέση [Ferziger, 1972]

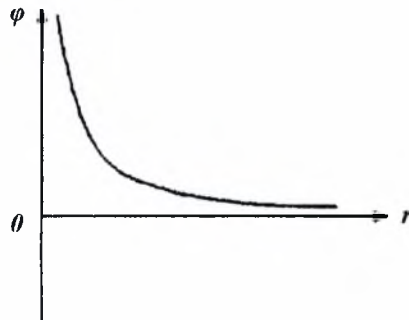
$$\varphi(r) = \begin{cases} \infty, & r < \sigma \\ 0, & r > \sigma \end{cases} \quad (2.7.5-4)$$



Σχήμα 2.6: Μοντέλο συμπαγών σφαιρών.

Κάτι τέτοιο απλοποιεί σημαντικά τα πράγματα και δεν είναι απεικονίζει πλήρως την πραγματικότητα αφού το απωστικό τμήμα του δυναμικού περιγράφεται πολύ απότομα ενώ αγνοούνται από την άλλη πλευρά όλες οι επιδράσεις από το δυναμικό μεγάλου μήκους αφού στην περιοχή αυτή το δυναμικό μηδενίζεται. Για το λόγο αυτό δεν περιγράφεται ικανοποιητικά η επίδραση της θερμοκρασίας στους συντελεστές μεταφοράς. Έτσι έχουν προταθεί και άλλα μοντέλα όπως αυτό του κεντρικού σημείου άπωσης (point center of repulsion) όπου δίνεται από την σχέση [Ferziger, 1972] (Σχήμα 2.7)

$$\varphi(r) = \left(\frac{\sigma}{r}\right)^\nu \quad (2.7.5-5)$$



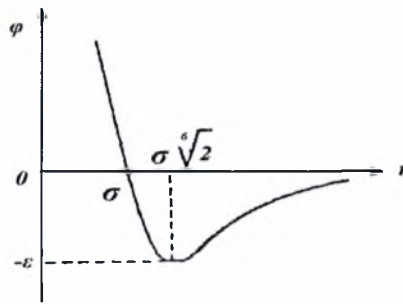
Σχήμα 2.7: Κεντρικό δυναμικό άπωσης.

όπου ν είναι ο δείκτης άπωσης. Το συγκεκριμένο μοντέλο είναι μόνο απωστικό και η τιμή του δείκτη άπωσης καθορίζει την ακρίβεια των διαφορών ιδιοτήτων του αερίου. Κυμαίνεται μεταξύ $9 \leq \nu \leq 15$ και πιο συγκεκριμένα για εύκαμπτα (soft) μόρια ο δείκτης άπωσης παίρνει τιμή $\nu = 9$ ενώ για σκληρά (hard) μόρια $\nu = 15$. Πρέπει να τονιστεί η περίπτωση όπου $\nu = 4$, στην οποία τα μόρια ονομάζονται μόρια Maxwell και στην

συγκεκριμένη περίπτωση πολλοί οι υπολογισμοί απλοποιούνται σχετικά με την διαφορική επιφάνεια σκέδασης και μπορούν να γίνουν αναλυτικά.

Ένα τρίτο μοντέλο ενδομοριακού δυναμικού είναι το μοντέλο Leonard-Jones που εκφράζεται από την σχέση [Ferziger, 1972] (Σχήμα 2.8)

$$\varphi(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]. \quad (2.7.5-6)$$



Σχήμα 2.8: Μοντέλο Leonard-Jones.

Φαίνεται άμεσα ότι όταν $r = \sigma$ το δυναμικό μηδενίζεται ενώ το ελάχιστο δυναμικό είναι ίσο με $-\varepsilon$ στην απόσταση $r = \sigma\sqrt{2}$. Το δυναμικό Leonard-Jones είναι το πλέον διαδεδομένο μοντέλο στην βιβλιογραφία. Μεγάλος αριθμός πειραματικών προσεγγίσεων εύκολα διαμορφώνουν αντίστοιχα τις δύο ελεύθερες παραμέτρους ε και σ .

Τέλος, μια διαφορετική τακτική είναι η χρήση πειραματικών δεδομένων για την εξαγωγή των τιμών του δυναμικού αλληλεπίδρασης. Κάτι τέτοιο δεν είναι βέβαια θεωρητικά θεμελιωμένο, αλλά προφανώς αποτελεί τη πιο αποτελεσματική μεθοδολογία για την σωστή προσομοίωση των πραγματικών φαινομένων. Το δυναμικό που προκύπτει ονομάζεται πραγματικό δυναμικό [Kestin, 1984].

Με τον προσδιορισμό του μοντέλου ενδομοριακού δυναμικού μπορούμε να έχουμε αναλυτικές εκφράσεις για τους συντελεστές μεταφοράς μ και κ . Για παράδειγμα για το μοντέλο συμπαγών σφαιρών προκύπτει ότι [Kestin, 1984]

$$\mu = \frac{5}{16} \frac{\sqrt{\pi m k_B T}}{\pi d^2} \quad \text{και} \quad \kappa = \frac{75 k_B}{64 m} \frac{\sqrt{\pi m k_B T}}{\pi d^2} \quad (2.7.5-7)$$

Πρέπει να τονιστεί ότι από την παραπάνω σχέση το ιξώδες και συντελεστής αγωγιμότητας δεν εξαρτάται από την πυκνότητα αλλά μόνο από την θερμοκρασία.

Τέλος ορίζοντας ως $\langle v \rangle = \left(\frac{8k_B T}{\pi m} \right)^{1/2}$ την μέση θερμική ταχύτητα, οι δύο παραπάνω εξισώσεις των συντελεστών μεταφοράς μπορούν να γραφούν στην μορφή

$$\mu = \frac{5\pi}{32} \langle v \rangle m n \lambda \cong \frac{1}{2} \langle v \rangle m n \lambda \quad \text{και} \quad \kappa = \frac{75\pi k_B}{128} \langle v \rangle n \lambda \approx \frac{15k_B}{8} \langle v \rangle n \lambda \quad (2.7.5-8)$$

Η σχέση που προκύπτει ανάμεσα στο ιξώδες μ και στην θερμική αγωγιμότητα κ είναι

$$\kappa = \frac{15k_B}{4m} \mu \quad (2.7.5-9)$$

όπου παρατηρούμε την αναλογία της θερμικής αγωγιμότητας σε σύγκριση με το ιξώδες.

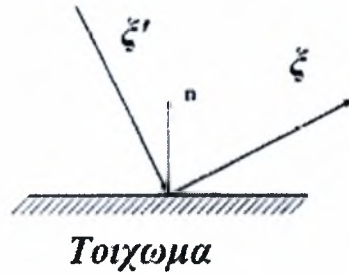
2.8 Οριακές συνθήκες

Οι οριακές συνθήκες αποτελούν βασικό στοιχείο για την περιγραφή ενός οποιουδήποτε προβλήματος ανάλογα την ρεαλιστική προσομοίωση των φαινομένων στα όρια και προσδιορίζουν την ακρίβεια των αποτελεσμάτων.

Ο όρος των συγκρούσεων στην εξίσωση Boltzmann δρα μόνο στις ταχύτητες των μορίων και όχι στις χωρικές και χρονικές μεταβλητές. Επομένως οι αρχικές και οριακές συνθήκες της συνάρτησης κατανομής σχετίζονται με τον όρο μεταφοράς της εξίσωσης. Επομένως οι οριακές συνθήκες παραμένουν ίδιες ανεξάρτητα από εάν η εξίσωση Boltzmann περιλαμβάνει τον όρο των σωματιδιακών συγκρούσεων.

Κατά τον προσδιορισμό των οριακών συνθηκών κύριο μέλημά μας είναι συσχέτιση της συνάρτησης κατανομής των σωματιδίων που εκπέμπονται από το τοίχωμα (f^+) με αυτήν των σωματιδίων που έρχονται στο τοίχωμα (f^-). Γενικότερα η συμπεριφορά αυτή μπορεί να διατυπωθεί μαθηματικά ως [Sharipov, 1998]:

$$f^+ = - \int \frac{\xi' \cdot \mathbf{n}}{\xi \cdot \mathbf{n}} W(\xi, \xi') f^-(\xi') d^3 \xi' \quad (2.8-1)$$



Σχήμα 2.9: Ταχύτητες εισερχόμενων και απερχόμενων μορίων από το τοίχωμα.

Η συνάρτηση $W(\xi, \xi') d^3 \xi'$ είναι μια μη αρνητική πιθανότητα, τέτοια ώστε το επερχόμενο μόριο με ταχύτητα ξ' θα ανακλαστεί στο τοίχωμα και θα αποκτήσει ταχύτητα ξ στο $d^3 \xi$.

Η πρώτη συνθήκη που προτάθηκε ανήκει στον Maxwell και αποτελεί τη συνήθη συνθήκη που εφαρμόζεται ακόμα και σήμερα. Σύμφωνα με αυτή, τα εισερχόμενα προς τη ροή σωματίδια όταν προσπίπτουν στην επιφάνεια χάνουν τη μνήμη τους και φεύγουν από αυτό με ταχύτητες που ακολουθούν την κατανομή Maxwell (Σχήμα 2.9), όπως αυτή ορίζεται από τις μακροσκοπικές ιδιότητες του στερεού τοιχώματος (diffuse scattering) [Sharipov, 1998]. Ο πυρήνας $W(\xi, \xi')$ έχει την μορφή

$$W_d(\xi' \rightarrow \xi) = \frac{m^2 \xi \cdot \mathbf{n}}{2\pi(k_B T_w)^2} e^{-\frac{m\xi^2}{2k_B T_w}} \quad (2.8-2)$$

όπου T_w η θερμοκρασία του τοιχώματος.

Ορισμένες φορές όμως, η εφαρμογή οριακών συνθηκών διάχυσης και ιδιαίτερα σε πολύ αραιά αέρια ή σε τοιχώματα με πολύ μικρή τραχύτητα, δίνουν αποτελέσματα που έρχονται σε αντίθεση με τα πειραματικά δεδομένα. Προκειμένου να ξεπεραστεί αυτό το μειονέκτημα, ο ίδιος ο Maxwell τροποποίησε τις οριακές συνθήκες ώστε να μην υπάρχει ολική απώλεια μνήμης των σωματιδίων. Έτσι, ένα ορισμένο ποσοστό α των σωματιδίων, δεν απορροφάται από το τοίχωμα αλλά ανακλάται πάνω σε αυτό, και συνεχίζει με ταχύτητα ίδια σε μέτρο με την προσπίπτουσα και συμμετρική σε αυτή ως προς επίπεδο κάθετο στο τοίχωμα. Στην περίπτωση αυτή ο πυρήνας $W(\xi, \xi')$ έχει την μορφή

$$W_s(\xi' \rightarrow \xi) = \delta(\xi' - \xi + 2(\xi \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}). \quad (2.8-3)$$

Ο συντελεστής α είναι χαρακτηριστική ιδιότητα του συνδυασμού ρευστού-τοιχώματος και λαμβάνεται από πειραματικά δεδομένα [Cercignani, 1988]. Τότε ο πυρήνας $W(\xi, \xi')$ έχει την μορφή

$$W(\xi' \rightarrow \xi) = (1 - \alpha)\delta(\xi' - \xi + 2\mathbf{n}[\xi' \cdot \mathbf{n}]) + \alpha \frac{m^2 \xi' \cdot \mathbf{n}}{2\pi(k_B T_w)^2} e^{-\frac{m\xi'^2}{2k_B T_w}} \quad (2.8-4)$$

Οι οριακές συνθήκες του Maxwell είναι αυτές που χρησιμοποιούνται στην πλειονότητα των περιπτώσεων, είναι αρκετά εύχρηστες και τα αποτελέσματά που δίνουν είναι αρκετά κοντά σε πειραματικά δεδομένα. Παρόλα αυτά ο τρόπος που αντιμετωπίζεται η αλληλεπίδραση ρευστού-τοιχώματος από φυσική άποψη δεν μπορεί να χαρακτηριστεί ακριβής, κυρίως σε μη ισοθερμοκρασιακές ροές. Στις περιπτώσεις αυτές χρησιμοποιούνται άλλου τύπου οριακές συνθήκες που προσφέρουν μεγαλύτερη ακρίβεια και καλύτερη φυσική συνοχή.

Η επιλογή του συντελεστή ανάκλασης α από πειραματικά δεδομένα δεν είναι κάτι απλό. Ακόμα και για ίδιο συνδυασμό υλικού επιφανείας και ρευστού οι τιμές είναι δυνατόν να διαφέρουν. Οι διαφορές αυτές οφείλονται στο γεγονός ότι δεν είναι δυνατόν μια ελεύθερη μεταβλητή να ορίζει ταυτόχρονα όλους τους συντελεστές μετάδοσης μεταξύ επιφανείας και ρευστού.

Για την αντιμετώπιση του προβλήματος προτάθηκαν εναλλακτικές θεωρήσεις, όπου πλέον οι συντελεστές για τον καθορισμό των οριακών συνθηκών έγιναν δύο, ένας που καθορίζει την μετάδοση ορμής και ένας δεύτερος την μετάδοση θερμότητας. Η εφαρμογή των οριακών συνθηκών Cercignani-Lampis [Sharipov, 2003] όπως ονομάζονται, έχει γίνει με επιτυχία αν και περιορισμένα λόγω της αυξημένης πολυπλοκότητας που παρουσιάζουν [Erstein, 1967].

2.9 Κινητικά μοντέλα

Για την επίλυση της εξίσωσης Boltzmann σε καταστάσεις μη ισοροπίας, συνήθως γίνεται χρήση κάποιων μοντέλων για τον όρο συγκρούσεων. Τα μοντέλα αυτά οφείλουν να διατηρούν τις ιδιότητες που απορρέουν από την διατήρηση των αναλλοίωτων του ολοκληρώματος των συγκρούσεων και σχετίζονται με τους νόμους διατήρησης της μάζας, της ορμής και της ενέργειας. Επίσης θα πρέπει να

ικανοποιούν το θεώρημα Η και τέλος θα πρέπει να δίνουν τους σωστούς συντελεστές μεταφοράς.

Το ευρύτερα χρησιμοποιούμενο μοντέλο και ταυτόχρονα το απλούστερο, είναι το BGK που προτάθηκε από τους Bhatankar, Gross & Krook [Bhatankar, Gross και Krook 1954] και ανεξάρτητα από τον Welander [Welander, 1954]. Σύμφωνα με αυτό, ο όρος των συγκρούσεων περιγράφεται από την σχέση

$$Q_{BGK}(ff_*) = \nu [f_{loc}^M(n, T, \mathbf{u}) - f(\mathbf{r}, \xi, t)] = \nu [f_{loc}^M(n, T, \mathbf{u}) - f(\mathbf{r}, \xi, t)] \quad (2.9-1)$$

όπου f_{loc}^M είναι η τοπική κατανομή ισορροπίας. Η ποσότητα ν είναι η συχνότητα των συγκρούσεων και θεωρείται ανεξάρτητη της ταχύτητας των μορίων, μ είναι το δυναμικό ιξώδες σε θερμοκρασία T και P η τοπική πίεση. Υπάρχουν τρεις επιλογές για την συχνότητα σύγκρουσης, όπου η πρώτη και πιο συνηθισμένη είναι [Sharipov, 1998]

$$\nu(t, \mathbf{r}) = \frac{P(t, \mathbf{r})}{\mu(t, \mathbf{r})} \quad (2.9-2)$$

Μια δεύτερη επιλογή είναι

$$\nu(t, \mathbf{r}) = \frac{5k_B}{2m} \frac{P(t, \mathbf{r})}{\kappa(t, \mathbf{r})} = \frac{2}{3} \frac{P(t, \mathbf{r})}{\mu(t, \mathbf{r})} \quad (2.9-3)$$

και τέλος

$$\nu(t, \mathbf{r}) = \frac{\langle u \rangle}{\lambda} = \frac{4}{\pi} \frac{P(t, \mathbf{r})}{\mu(t, \mathbf{r})}. \quad (2.9-4)$$

Το μοντέλο BGK μειονεκτεί στην περίπτωση των μη ισοθερμοκρασιακών προβλημάτων καθώς δεν υπολογίζει σωστά τους συντελεστές μεταφοράς με αποτέλεσμα να δίνει για μονατομικό αέριο αριθμό Prandtl ίσο με τη μονάδα και όχι 2/3 όπως θα έπρεπε [Sharipov, 1998]. Για την παράκαμψη του προβλήματος αυτού έχουν προταθεί κάποιες τροποποιημένες μορφές του μοντέλου.

Εναλλακτικά μπορούν να ακολουθηθούν άλλα μοντέλα όπως το ελλειψοειδές ή το S μοντέλο. Ειδικότερα το μοντέλο S, που προτάθηκε από τον Shakhov [Shakhov, 1974], αποτελεί μια τροποποίηση του BGK μοντέλου και υπολογίζει τον σωστό αριθμό Prandtl γεγονός που το καθιστά ιδανικό για μελέτη μη ισοθερμοκρασιακών ροών. Εδώ, το ολοκλήρωμα του όρου συγκρούσεων

προσεγγίζεται από την σχέση

$$Q_S(ff_*) = v \left\{ f_{loc}^M(n, T, \mathbf{u}) \left[1 + \frac{2m}{15n(k_B T)^2} \mathbf{q} \cdot (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}) \left(\frac{m(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2}{2k_B T} - \frac{5}{2} \right) \right] - f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t) \right\} \quad (2.9-5)$$

Το μοντέλο S υπολογίζει σωστά τους συντελεστές μεταφοράς σε προβλήματα ισοθερμοκρασιακά και μη ισοθερμοκρασιακά.

Υπάρχουν και άλλα μοντέλα όπως το ελλειψοειδές [Sharipov, 1998], το οποίο δίνει σωστό αριθμό Prandtl. Ο όρος των συγκρούσεων γράφεται

$$Q_{EL}(ff_*) = v \left\{ \frac{n}{\pi^{3/2}} (\det A)^{1/2} \times \exp \left[- \sum_{i,j=1}^3 A_{ij} (\xi_i - u_i)(\xi_j - u_j) \right] - f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t) \right\} \quad (2.9-6)$$

όπου $A = \|A_{ij}\| = \left\| \frac{2k_B T}{m Pr} \delta_{ij} - \frac{2(1-Pr)P_{ij}}{nm Pr} \right\|^{-1}$. Σημειώνεται ότι για $Pr=1$ προκύπτει το μοντέλο BGK.

Σημειώνεται ότι, για το S και για το ελλειψοειδές μοντέλο, δεν είναι δυνατό να αποδειχθεί το αν ικανοποιείται ή όχι το θεώρημα H. Αυτό αποτελεί σημαντική αδυναμία και γι' αυτό δεν χρησιμοποιούνται ευρέως τα μοντέλα αυτά.

2.10 Γραμμικοποιημένη εξίσωση Boltzmann

Ο όρος των συγκρούσεων της εξίσωσης Boltzmann χαρακτηρίζεται για τη μη γραμμικότητα του, γεγονός που οφείλεται στην τετραγωνική εξάρτηση του από την συνάρτηση κατανομής. Η μη γραμμικότητα γίνεται ουσιώδης όταν το αέριο βρίσκεται πολύ μακριά από την θερμοδυναμική ισορροπία, ενώ όταν βρίσκεται «λίγο μακριά» από αυτήν τότε είναι εφικτή η γραμμικοποίηση της εξίσωσης εξέλιξης. Η γραμμικοποιημένη εξίσωση Boltzmann προκύπτει εάν υποθέσουμε ότι η διαταραχή της συνάρτησης κατανομής από την θέση ισορροπίας είναι πολλή μικρή. Με τον τρόπο αυτό είναι δυνατόν να περιγράψουμε με αρκετή ακρίβεια προβλήματα φαινομένων μεταφοράς [Sharipov, 1998].

Ας θεωρήσουμε ότι ισχύει

$$f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t) = f_M [1 + \Phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t)] \quad (2.10-1)$$

όπου $f_M = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\frac{m\xi^2}{2k_B T}}$ η απόλυτη συνάρτηση κατανομής του Maxwell. Η συνάρτηση Φ αντιπροσωπεύει μια διόρθωση της f και ισχύει ότι $|\Phi| \ll 1$. Αντικαθιστώντας την Εξ. (2.10-1) στην εξίσωση Boltzmann και θεωρώντας απουσία εξωτερικών δυνάμεων, προκύπτει

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \xi \cdot \nabla_r \Phi \right) f_{M_2} = \iiint f_{M_2} f_{M_1} (\Phi_2' + \Phi_1' - \Phi_2 - \Phi_1) g b d b d \phi d^3 \xi_1 \quad (2.10-2)$$

Η εξίσωση αυτή αποτελεί την γραμμικοποιημένη εξίσωση Boltzmann. Αν F οποιαδήποτε συνάρτηση κατανομής τότε ορίζουμε ως

$$I(F) = \frac{1}{n^2} \iiint f_{M_2} f_{M_1} (F_2' + F_1' - F_2 - F_1) g b d b d \phi d^3 \xi_1 \quad (2.10-3)$$

τότε η Εξ. (2.10-2) γράφεται ως

$$f_M \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \xi \cdot \nabla_r \Phi \right) = -n^2 I(\Phi) \quad (2.10-4)$$

Ο όρος $I(F)$ αποτελεί έναν ολοκληρωτικό τελεστή με συμμετρικό πυρήνα και μάλιστα μπορεί να γραφεί συναρτήσει τεσσάρων όρων, σύμφωνα με την παρακάτω σχέση

$$n^2 I(F) = K_0(\xi_2) F(\xi_2) + \int K_1(\xi_2, \xi_1) F(\xi_1) d^3 \xi_1 + \int K_2(\xi_2, \xi_2') F(\xi_2') d^3 \xi_2' + \int K_3(\xi_2, \xi_1') F(\xi_1') d^3 \xi_1' \quad (2.10-5)$$

και ισχύει ότι

$$K_0 \xi_2 = \int K_1(\xi_2, \xi_1) d^3 \xi_1 \quad (2.10-6)$$

Οι πυρήνες K_i ($i = 0, 1, 2, 3$) δίνονται παρακάτω [Ferziger, 1972]:

$$K_0(\xi_2) = 2\pi n^2 \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^3 \iint e^{-\frac{m(\xi_2^2 + \xi_1^2)}{2k_B T}} \times \zeta \sigma(\zeta, \theta) \sin \theta d\theta d^3 \xi_1 \quad (2.10-7)$$

$$K_1(\xi_2, \xi_1) = 2\pi n^2 \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^3 e^{-\frac{m(\xi_2^2 + \xi_1^2)}{2k_B T}} \zeta \int \sigma(\zeta, \theta) \sin \theta d\theta \quad (2.10-8)$$

$$K_2(\xi_2, \xi_2') = 2\pi m^2 \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^3 e^{-\frac{m(\xi_2^2 + \xi_2'^2)}{2k_B T}} |\xi_2 - \xi_2'| \times \int_0^\pi \frac{e^{-\frac{m|\xi_2 - \xi_2'|^2 \cot^2 \frac{\theta}{2}}{2k_B T}}}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} I_0 \left(\frac{m|\xi_2 \times \xi_2'| \cot \frac{\theta}{2}}{k_B T} \right) \times \sigma \left(|\xi_2 - \xi_2'| / \sin \frac{\theta}{2}, \theta \right) \sin \theta d\theta \quad (2.10-9)$$

$$K_3(\xi_2, \xi_1') = 2\pi m^2 \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^3 e^{-\frac{m(\xi_2^2 + \xi_1'^2)}{2k_B T}} |\xi_2 - \xi_1'| \times \int_0^\pi \frac{e^{-\frac{m|\xi_2 - \xi_1'|^2 \cot^2 \frac{\theta}{2}}{2k_B T}}}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} I_0 \left(\frac{m|\xi_2 \times \xi_1'| \cot \frac{\theta}{2}}{k_B T} \right) \times \sigma \left(|\xi_2 - \xi_1'| / \sin \frac{\theta}{2}, \pi - \theta \right) \sin \theta d\theta \quad (2.10-10)$$

όπου I_0 είναι η μηδενικής τάξης συνάρτηση Bessel.

2.11 Γραμμικοποίηση κινητικών μοντέλων

Αν θεωρηθεί ότι η απόκλιση από την κατάσταση ισορροπίας είναι μικρή τότε τα κινητικά μοντέλα μπορούν να γραμμικοποιηθούν μέσω την ανάπτυξης της f γύρω από την γενική ή την τοπική συνάρτηση ισορροπίας [Sharipov, 1998], θέτοντας

$$f(\mathbf{r}, \xi, t) = f_0^M [1 + h(\mathbf{r}, \xi, t)] \quad (2.11-1)$$

όπου $h(\mathbf{r}, \xi, t)$, η απόκλιση από την κατάσταση ισορροπίας και f_0^M η τοπική κατανομή ισορροπίας. Εφαρμόζοντας την τακτική αυτή για το μοντέλο BGK προκύπτει η σχέση [Sharipov, 1998]

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \xi \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}} = \nu_0 \left[\rho + \frac{m}{k_B T} \xi \cdot \mathbf{u} + \tau \left(\frac{m u^2}{2k_B T} - \frac{3}{2} \right) - h \right] \quad (2.11-2)$$

όπου $\rho = \frac{n - n_0}{n_0}$ και $\tau = \frac{T - T_0}{T_0}$ είναι τα αδιάστατα μεγέθη της πυκνότητας και της θερμοκρασίας αντίστοιχα.

Εάν εφαρμοσθεί η ίδια μαθηματική διαδικασία και για το μοντέλο S προκύπτει η εξίσωση [Sharipov, 1998]

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \xi \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}} = v_0 \left[\rho + \frac{m}{k_B T} \xi \cdot \mathbf{u} + \tau \left(\frac{m u^2}{2k_B T} - \frac{3}{2} \right) + \frac{2m}{15n_0(k_B T)^2} \mathbf{q} \cdot \xi \left(\frac{m u^2}{2k_B T} - \frac{5}{2} \right) - h \right] \quad (2.11-3)$$

Πρέπει να τονιστεί ότι τα γραμμικοποιημένα κινητικά μοντέλα BGK και S ικανοποιούν το θεώρημα H και χρησιμοποιούνται ευρέως.

Η διαδικασία της γραμμικοποίησης, εκτός από τα κινητικά μοντέλα, εφαρμόζεται και στις αντίστοιχες ροπές της συνάρτησης κατανομής για τον υπολογισμό των μακροσκοπικών ιδιοτήτων έτσι εάν στην Εξ. (2.3-2) αντικαταστήσουμε την Εξ. (2.11-1) προκύπτει

$$\rho = \frac{n - n_0}{n_0} = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} h e^{-\xi^2} d\xi \quad (2.11-4)$$

Όμοια προκύπτουν και οι υπόλοιπες μακροσκοπικές ποσότητες: Η γραμμικοποιημένη ταχύτητα δίδεται από την σχέση

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \xi h e^{-\xi^2} d\xi \quad (2.11-5)$$

η γραμμικοποιημένη θερμοκρασία

$$\tau = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{2}{3} \xi^2 - 1 \right) h e^{-\xi^2} d\xi \quad (2.11-6)$$

ο γραμμικοποιημένος τανυστής των τάσεων

$$\Pi_{ij} = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \xi_i \xi_j^2 h e^{-\xi^2} d\xi \quad (2.11-7)$$

η γραμμικοποιημένη πίεση

$$p = \frac{P - P_0}{P_0} = \frac{2}{3} \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \xi^2 h e^{-\xi^2} d\xi \quad (2.11-8)$$

και τέλος η γραμμικοποιημένη ροή θερμότητας από την σχέση

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_0 + \frac{n_0 k_B T_0 \mathbf{u}_0}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \xi^2 \cdot \xi h e^{-\xi^2} d\xi. \quad (2.11-9)$$

Κεφάλαιο 3

Ροές Poiseuille και Couette

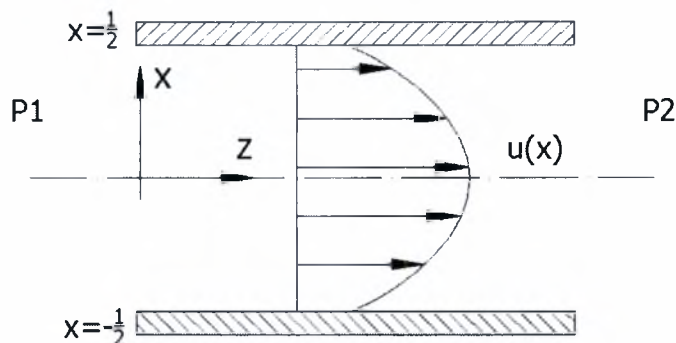
3.1 Εισαγωγή

Στο κεφάλαιο αυτό περιγράφεται η πιλοτική εφαρμογή της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων στην μονοδιάστατη γραμμικοποιημένη εξίσωση BGK. Όπως προαναφέρθηκε στο Κεφάλαιο 1, η μέθοδος των ολοκληρωτικών εξισώσεων έχει εφαρμοσθεί σε μονοδιάστατα προβλήματα ροής. Στόχος του συγκεκριμένου κεφαλαίου είναι η παρουσίαση της μεθόδου και η εξοικείωση με αυτήν σε μονοδιάστατα προβλήματα.

Τα δύο πρότυπα προβλήματα Poiseuille και Couette προκύπτουν από την εφαρμογή κατάλληλων οριακών συνθηκών και εξωτερικών δυνάμεων.

3.2 Ροή Poiseuille

Η ροή Poiseuille αντιπροσωπεύει ροή ρευστού ανάμεσα σε δύο ακίνητες πλάκες λόγω βαθμίδας πίεσης. Η ροή του ρευστού θεωρείται ισοθερμοκρασιακή και πλήρως ανεπτυγμένη ενώ η μόνη συνιστώσα της μακροσκοπικής ταχύτητας, η οποία είναι μη μηδενική, είναι η ταχύτητα στην διεύθυνση z' της ροής (Σχήμα 3.1). Η ταχύτητα στην διεύθυνση z' μεταβάλλεται συναρτήσει της εγκάρσιας στην ροή διεύθυνσης x' μεταξύ των δύο πλακών ενώ οι δύο πλάκες εκτείνονται στο άπειρο κατά τις διευθύνσεις z' και y' . Οι δύο πλάκες είναι τοποθετημένες $x' = \pm \frac{H}{2}$ ενώ η απόσταση μεταξύ των δύο πλακών είναι H .



Σχήμα 3.1: Διάγραμμα ροής Poiseuille.

Η εξίσωση Boltzmann εφαρμόζοντας το μοντέλο BGK για τον όρο των συγκρούσεων είναι

$$\xi \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \frac{P}{\mu} (f^M - f) \quad (3.2-1)$$

όπου $f = f(\mathbf{r}, \xi)$ είναι η άγνωστη συνάρτηση κατανομής, $\mathbf{r} = (x', y', z')$ το διάνυσμα θέσης, $\xi = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$ η μικροσκοπική ταχύτητα, P η πίεση και μ το ιξώδες του ρευστού σε θερμοκρασία T . Επίσης f^M είναι η τοπική κατανομή Maxwell

$$f^M = n \left(\frac{1}{2\pi RT} \right)^{3/2} e^{-\frac{(\xi-v)^2}{2RT}} \quad (3.2-2)$$

όπου R είναι η σταθερά του αερίου η οποία ορίζεται ως το πηλίκο της σταθεράς Boltzmann k_B δια της μοριακής μάζας m ($R = k_B / m$). Το διάνυσμα της μακροσκοπική ταχύτητας $\mathbf{V}(\mathbf{r}) = \{\tilde{u}_x(\mathbf{r}), \tilde{u}_y(\mathbf{r}), \tilde{u}_z(\mathbf{r})\}$ εκφράζεται συναρτήσει της συνάρτησης κατανομής ως

$$\mathbf{V}(\mathbf{r}) = \frac{1}{n} \int_{-\infty}^{\infty} \xi f d\xi \quad (3.2-3)$$

Η Εξ. (3.2-1) σε μια διάσταση απλουστεύεται στην μορφή

$$\xi_x \frac{\partial f}{\partial x'} = \frac{P}{\mu} (f^M - f) \quad (3.2-4)$$

Όμοια, η Εξ. (3.2-3) που εκφράζει την ταχύτητα στην διεύθυνση της ροής είναι

$$\tilde{u}_z(x) = \tilde{u}(x) = \frac{1}{n} \int_{-\infty}^{\infty} \xi_z f d\xi \quad (3.2-5)$$

όπου για λόγους απλότητας ονομάσαμε την ταχύτητα \tilde{u}_z στην διεύθυνση της ροής ως \tilde{u} .

Ορίζοντας τις αδιάστατες ποσότητες

$$x = \frac{x'}{H}, \quad c_x = \frac{\xi_x}{v_\theta}, \quad u = \frac{\tilde{u}}{v_\theta} \quad (3.2-6)$$

όπου $v_\theta = \sqrt{2RT_0}$ η πιο πιθανή μοριακή ταχύτητα και H η απόσταση μεταξύ των δύο πλακών, προκύπτει η αδιάστατη κινητική εξίσωση

$$c_x \frac{\partial f}{\partial x} = \delta (f^M - f) \quad (3.2-7)$$

όπου δ ονομάζεται παράμετρος αραιοποίησης και ισούται με

$$\delta = \frac{PL}{\mu v_\theta} \quad (3.2-8)$$

Αν θεωρηθεί ότι η κλίση της πίεσης κατά την διεύθυνση y είναι πολύ μικρή, τότε μπορεί να εφαρμοσθεί γραμμικοποίηση της συνάρτησης κατανομής ως

$$f = f^0 [1 + X_p h(x, c_x, c_y, c_z) + X_p z] \quad (3.2-9)$$

όπου h η νέα συνάρτηση κατανομής και $X_p = \frac{H}{P} \frac{dP}{dx'} \ll 1$ η αδιάστατη βαθμίδα πίεσης. Η απόλυτη κατανομή ισορροπίας ορίζεται ως

$$f^0 = n_0 \left(\frac{1}{2\pi RT_0} \right)^{3/2} e^{-(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2)} \quad (3.2-10)$$

όπου n_0 η αριθμητική πυκνότητα και T_0 η θερμοκρασία αναφοράς. Αγνοώντας τις μεταβολές της θερμοκρασίας και πυκνότητας και αναπτύσσοντας σε ανάπτυγμα Taylor την τοπική κατανομή ισορροπίας ως προς την απόλυτη κατανομή ισορροπίας f^0 και κρατώντας όρους πρώτης τάξης προκύπτει ότι

$$f^M = f^0 [1 + 2uc_z] \quad (3.2-11)$$

Αντικαθιστώντας τις Εξς. (3.2-9) και (3.2-11) στην Εξ. (3.2-7) προκύπτει η γραμμικοποιημένη εξίσωση BGK σε μια διάσταση

$$c_x \frac{\partial h}{\partial x} + \delta h = 2\delta u c_z - c_z \quad (3.2-12)$$

Το συγκεκριμένο πρόβλημα αποτελεί ένα μονοδιάστατο πρόβλημα, στο οποίο τόσο η συνάρτηση κατανομής όσο και οι μακροσκοπικές ποσότητες θεωρούνται ότι παραμένουν σταθερές κατά μήκος των x και y διευθύνσεων, δηλαδή η συνάρτηση κατανομής είναι συνάρτηση τεσσάρων μεταβλητών $h = h(x, c_x, c_y, c_z)$. Για το λόγο αυτό είναι δυνατόν να απαλειφθούν οι μοριακές ταχύτητες c_y, c_z εφαρμόζοντας την ακόλουθη μαθηματική διαδικασία της προβολής. Πολλαπλασιάζουμε την Εξ. (3.2-12) με τον όρο

$$\frac{1}{\pi} c_z e^{-c_y^2 - c_z^2}$$

και ολοκληρώνουμε ως προς c_y και c_z στο διάστημα $(-\infty, \infty)$. Η εξίσωση που προκύπτει είναι η ακόλουθη

$$c_x \frac{\partial Y}{\partial x} + \delta Y = \delta u - \frac{1}{2} \quad (3.2-13)$$

όπου $Y(x, c_x)$ η νέα συνάρτηση κατανομής που ορίζεται ως

$$Y(x, c_x) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_z h(x, c_x, c_y, c_z) e^{-c_y^2 - c_z^2} dc_y dc_z \quad (3.2-14)$$

Σημειώνεται ότι η ποσότητα $Y(x, c_x) dx dc_y$ αντιπροσωπεύει τον αριθμό των σωματιδίων στον στοιχειώδη “όγκο” $dx dc_y$. Η μακροσκοπική ταχύτητα u εκφράζεται σαν συνάρτηση της νέα συνάρτησης κατανομής Y ως

$$u(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} Y(x, c_x) e^{-c_x^2} dc_x \quad (3.2-15)$$

Οι οριακές συνθήκες τύπου Maxwell, οι οποίες θεωρούν ότι τα μόρια σκεδιάζονται μόνο με διάχυση και συνοδεύουν την Εξ. (3.2-16) είναι:

$$Y\left(-\frac{1}{2}, c_x\right) = 0, \text{ για } c_x > 0 \quad (3.2-16)$$

και

$$Y\left(\frac{1}{2}, c_x\right) = 0, \text{ για } c_x < 0 \quad (3.2-17)$$

Η διατύπωση της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων έχει ως εξής. Θεωρώντας ότι η μοριακή ταχύτητα c_x είναι μια παράμετρος η Εξ. (3.2-13) είναι δυνατόν να αντιμετωπιστεί ως μια συνήθης διαφορική εξίσωση 1^{ου} βαθμού της μορφής

$$y'(x) + ay(x) = b. \quad (3.2-18)$$

Η Εξ. (3.2-13) γράφεται στην μορφή

$$\frac{\partial Y}{\partial x} + \frac{\delta}{c_x} Y(x, c_x) = \frac{\delta}{c_x} u(x) - \frac{1}{2c_x}. \quad (3.2-19)$$

με $a = \frac{\delta}{c_x}$ και $b = \frac{\delta}{c_x} u(x) - \frac{1}{2c_x}$. Εφαρμόζοντας την μέθοδο του ολοκληρωτικού

παράγοντα στην Εξ. (3.2-19) προκύπτει

$$P(x) = \int a(x) dx = \int \frac{\delta}{c_x} dx = \frac{\delta x}{c_x} \text{ και } I = e^{P(x)} = e^{\frac{\delta x}{c_x}}.$$

Πολλαπλασιάζοντας την Εξ. (3.2-19) με τον όρο $I = e^{\frac{\delta x}{c_x}}$ και συνδυάζοντας τους δύο όρους του αριστερού τμήματος προκύπτει ότι

$$\frac{d}{dx} \left[Y(x, c_x) e^{\frac{\delta x}{c_x}} \right] = \frac{\delta}{c_x} e^{\frac{\delta x}{c_x}} u(x) - \frac{1}{2c_x} e^{\frac{\delta x}{c_x}}. \quad (3.2-20)$$

Στην συνέχεια ολοκληρώνουμε την Εξ. (3.2-20) πρώτα στο διάστημα $\left[-\frac{1}{2}, x\right]$ για

$c_x > 0$ και στην συνέχεια στο διάστημα $\left[\frac{1}{2}, x\right]$ για $c_x < 0$:

Για $c_x > 0$ έχουμε

$$\int_{-\frac{1}{2}}^x \frac{d}{ds} \left(e^{\frac{\delta s}{c_x}} Y(s, c_x) \right) ds = \int_{-\frac{1}{2}}^x \left[\frac{\delta}{c_x} e^{\frac{\delta s}{c_x}} u(s) - \frac{1}{2c_x} e^{\frac{\delta s}{c_x}} \right] ds \Rightarrow$$

$$e^{\frac{\delta x}{c_x}} Y(x, c_x) - e^{\frac{\delta}{2c_x}} Y\left(-\frac{1}{2}, c_x\right) = \int_{-1/2}^x \left[\frac{\delta}{c_x} e^{\frac{\delta s}{c_x}} u(s) - \frac{1}{2c_x} e^{\frac{\delta s}{c_x}} \right] ds$$

και εφαρμόζοντας τις συνοριακές συνθήκες (3.2-16) προκύπτει η συνάρτηση κατανομής

$$Y(x, c_x) = \int_{-1/2}^x \left[\frac{\delta}{c_x} e^{\frac{\delta(s-x)}{c_x}} u(s) - \frac{1}{2c_x} e^{\frac{\delta(s-x)}{c_x}} \right] ds, \text{ για } c_x > 0 \quad (3.2-21)$$

Αντίστοιχα για $c_x < 0$ έχουμε

$$\int_{1/2}^x \frac{d}{ds} \left(e^{\frac{\delta s}{c_x}} Y(s, c_x) \right) ds = \int_{1/2}^x \left[\frac{\delta}{c_x} e^{\frac{\delta s}{c_x}} u(s) - \frac{1}{2c_x} e^{\frac{\delta s}{c_x}} \right] ds \Rightarrow$$

$$e^{\frac{\delta x}{c_x}} Y(x, c_x) - e^{\frac{\delta}{2c_x}} Y\left(\frac{1}{2}, c_x\right) = \int_{1/2}^x \left[\frac{\delta}{c_x} e^{\frac{\delta s}{c_x}} u(s) - \frac{1}{2c_x} e^{\frac{\delta s}{c_x}} \right] ds$$

και κάνοντας χρήση των συνοριακών συνθηκών (3.2-17) προκύπτει η συνάρτηση κατανομής

$$Y(x, c_x) = \int_{1/2}^x \left[\frac{\delta}{c_x} e^{\frac{\delta(s-x)}{c_x}} u(s) - \frac{1}{2c_x} e^{\frac{\delta(s-x)}{c_x}} \right] ds, \text{ για } c_x < 0 \quad (3.2-22)$$

Συνεχίζοντας την μαθηματική επεξεργασία, οι Εξς. (3.2-21) και (3.2-22) πολλαπλασιάζονται με τον όρο $\frac{e^{-c_x^2}}{\sqrt{\pi}}$ και ολοκληρώνονται στα διαστήματα $[0, +\infty)$ και $(-\infty, 0]$ αντίστοιχα. Τότε προκύπτει

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty Y(x, c_x) e^{-c_x^2} dc_x = \frac{\delta}{\sqrt{\pi}} \int_{-1/2}^x \int_0^\infty \frac{1}{c_x} e^{\frac{\delta(s-x)}{c_x}} u(s) e^{-c_x^2} dc_x ds + \frac{1}{2\delta\sqrt{\pi}} T_0 \left[\delta \left(x + \frac{1}{2} \right) \right] - \frac{1}{4\delta} \quad (3.2-23)$$

και

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 Y(x, c_x) e^{-c_x^2} dc_x = \frac{\delta}{\sqrt{\pi}} \int_{1/2}^x \int_{-\infty}^0 \frac{1}{c_x} e^{\frac{\delta(s-x)}{c_x}} u(s) e^{-c_x^2} dc_x ds + \frac{1}{2\delta\sqrt{\pi}} T_0 \left[\delta \left(x - \frac{1}{2} \right) \right] - \frac{1}{4\delta} \quad (3.2-24)$$

Οι συναρτήσεις T_n είναι οι συναρτήσεις Abramowitz [Abramowitz, 1972] που ορίζονται ως εξής:

$$T_n(x) = \int_0^\infty \mu^n e^{-\mu^2 - \frac{x}{\mu}} d\mu \text{ για } n = -1, 0, \dots$$

Προσθέτοντας κατά μέλη τις Εξς. (3.2-23) και (3.2-24), το αριστερό μέλος θα ισούται με την μακροσκοπική ταχύτητα $u(x)$ που δίνεται από την σχέση (3.2-15), ενώ τα αντίστοιχα ολοκληρώματα του δεύτερου μέλους της εξίσωσης συνδυάζονται κατάλληλα και προκύπτει η εξίσωση

$$u(x) = \frac{\delta}{\sqrt{\pi}} \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} T_{-1}[\delta|x-s|]u(s)ds + \frac{1}{2\delta\sqrt{\pi}} T_0\left[\delta\left(x + \frac{1}{2}\right)\right] + \frac{1}{2\delta\sqrt{\pi}} T_0\left[\delta\left(x - \frac{1}{2}\right)\right] - \frac{1}{2\delta} \quad (3.2-25)$$

Το ολοκλήρωμα $T_{-1}(0)$ παρουσιάζει ιδιομορφία, που εμφανίζεται και στο ολοκλήρωμα της Εξ. (3.2-25), όταν $x = s$. Για να εξαλειφθεί αυτή η ιδιομορφία

προσθαφαιρείται το ολοκλήρωμα $\int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} T_{-1}[\delta|x-s|]uds$. Τότε η Εξ. (3.2-25) γράφεται

$$u(x) = -\frac{\delta}{\sqrt{\pi}} \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} T_{-1}[\delta|x-s|][u(x) - u(s)]ds + \frac{\delta}{\sqrt{\pi}} u(x) \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} T_{-1}[\delta|x-s|]ds + \\ + \frac{1}{2\delta\sqrt{\pi}} T_0\left[\delta\left(x + \frac{1}{2}\right)\right] + \frac{1}{2\delta\sqrt{\pi}} T_0\left[\delta\left(x - \frac{1}{2}\right)\right] - \frac{1}{2\delta} \quad (3.2-26)$$

Σημειώνεται ότι στην Εξ. (3.2-26) ο όρος $u(x) - u(s)$ πλησιάζει πιο γρήγορα στο μηδέν απ' ό τι πλησιάζει ο όρος $T_{-1}|x-s|$ στο άπειρο και επομένως επιλύεται

υπολογιστικά ακόμα και όταν $x = s$. Επίσης το ολοκλήρωμα $\int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} T_{-1}|x-s|ds$

υπολογίζεται αναλυτικά από την σχέση

$$\int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} T_{-1}[\delta|x-s|]ds = \frac{1}{\delta} \left\{ \sqrt{\pi} - T_0\left[\delta\left(x - \frac{1}{2}\right)\right] - T_0\left[\delta\left(x + \frac{1}{2}\right)\right] \right\} \quad (3.2-27)$$

Τελικά η εξίσωση που προκύπτει μετά την αντικατάσταση της Εξ. (3.2-27) στην Εξ. (3.2-26) είναι η εξής:

$$u(x) = -\frac{\delta}{\sqrt{\pi}} \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} T_{-1}[\delta|x-s|][u(x) - u(s)]ds + u(x) \left\{ 1 - \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_0\left[\delta\left(x - \frac{1}{2}\right)\right] - \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_0\left[\delta\left(x + \frac{1}{2}\right)\right] \right\} + \\ + \frac{1}{2\delta\sqrt{\pi}} T_0\left[\delta\left(x + \frac{1}{2}\right)\right] + \frac{1}{2\delta\sqrt{\pi}} T_0\left[\delta\left(x - \frac{1}{2}\right)\right] - \frac{1}{2\delta} \quad (3.2-28)$$

Μια άλλη μακροσκοπική ποσότητα που υπολογίζεται στην ροή Poiseuille είναι η αδιάστατη ροή μάζας, η οποία ορίζεται ως το ολοκλήρωμα

$$G = 2 \int_{-1/2}^{1/2} u(x) dx \quad (3.2-29)$$

Ο ακριβής υπολογισμός της αδιάστατης ροής μάζας G αποτελεί χαρακτηριστικό στοιχείο σύγκρισης και αξιολόγησης των διαφόρων υπολογιστικών μεθόδων επίλυσης κινητικών εξισώσεων.

3.3 Ροή Couette

Ροή Couette ονομάζεται η ροή ενός ρευστού ανάμεσα σε δύο πλάκες όπου και οι δύο κινούνται με ίση και αντίθετη ταχύτητα U_0 (Σχήμα 3.2). Η ροή του ρευστού θεωρείται ισοθερμοκρασιακή και πλήρως ανεπτυγμένη ενώ η μόνη συνιστώσα της μακροσκοπικής ταχύτητας, η οποία είναι μη μηδενική, είναι η ταχύτητα στην διεύθυνση z' της ροής (Σχήμα 3.2). Η ταχύτητα στην διεύθυνση z' μεταβάλλεται κατά μήκος της εγκάρσιας στη ροή διεύθυνσης x' , ενώ οι δύο πλάκες εκτείνονται στο άπειρο κατά την διεύθυνση z' και y' . Οι δύο πλάκες είναι τοποθετημένες στο $x' = \pm \frac{H}{2}$ ενώ η απόσταση μεταξύ των πλακών είναι H .

Η διαφοροποίηση της ροής Couette, από την ροή Poiseuille, εμφανίζεται αρχικά στην διαδικασία της γραμμικοποίησης όπου τώρα η συνάρτηση κατανομής f αντικαθίστανται από την σχέση

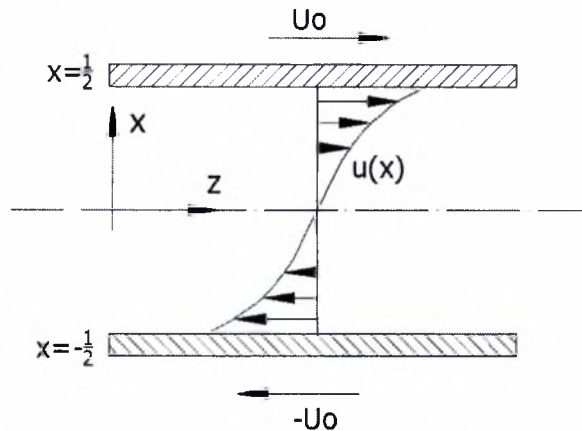
$$f = f^0 \left[1 + h(x, c_x, c_y, c_z) \frac{U_0}{v_0} \right] \quad (3.3-1)$$

όπου U_0 η ταχύτητα του άνω κινούμενου τοιχώματος και v_0 η πιο πιθανή μοριακή ταχύτητα. Η ροή του ρευστού ανάμεσα στις δύο πλάκες δεν προκαλείται από κλίση πίεσης αλλά από τα κινούμενα τοιχώματα του καναλιού. Επίσης, η ροή Couette συνοδεύεται από μη ομογενείς οριακές συνθήκες, οι οποίες περιγράφουν την αντίθετη κίνηση των τοιχωμάτων, σε αντίθεση με τις ομογενείς Εξς. (3.2-16) και (3.2-17). Ακολουθώντας την ίδια ακριβώς διαδικασία αδιαστατοποίησης, γραμμικοποίησης και προβολής η μονοδιάστατη εξίσωση BGK που προκύπτει για τη ροή Couette είναι

$$c_x \frac{\partial Y}{\partial x} + \delta Y = \delta u \quad (3.3-2)$$

όπου

$$u_z(x) = u(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} Y(x, c_x) e^{-c_x^2} dc_x \quad (3.3-3)$$



Σχήμα 3.2: Διάγραμμα ροής Couette.

Ένα δεύτερο σημείο διαφοροποίησης της ροής Couette από την ροή Poiseuille είναι ότι η Εξ. (3.3-3) συνοδεύεται από τις παρακάτω μη ομογενείς γραμμικοποιημένες οριακές συνθήκες

$$Y\left(-\frac{1}{2}, c_x\right) = -1, \text{ για } c_x > 0 \quad (3.3-3\alpha)$$

και

$$Y\left(\frac{1}{2}, c_x\right) = 1, \text{ για } c_x < 0 \quad (3.3-3\beta)$$

Εάν εφαρμοσθεί ακριβώς η ίδια μαθηματική επεξεργασία όπως στην ροή Poiseuille, σύμφωνα με την μέθοδο των ολοκληρωτικών εξισώσεων, η αντίστοιχη εξίσωση της Εξ. (3.2-25) για την αδιάστατη μακροσκοπική ταχύτητα είναι

$$u(x) = \frac{\delta}{\sqrt{\pi}} \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} T_{-1}[\delta|x-s|] u(s) ds + \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_0\left[\delta\left(x - \frac{1}{2}\right)\right] - \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_0\left[\delta\left(x + \frac{1}{2}\right)\right] \quad (3.3-4)$$

ενώ η αντίστοιχη εξίσωση της Εξ. (3.2-28) είναι η

$$u(x) = -\frac{\delta}{\sqrt{\pi}} \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} T_{-1}[\delta|x-s|] [u(x) - u(s)] ds + u(x) \left\{ 1 - \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_0\left[\delta\left(x - \frac{1}{2}\right)\right] - \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_0\left[\delta\left(x + \frac{1}{2}\right)\right] \right\} + \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_0\left[\delta\left(x - \frac{1}{2}\right)\right] - \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_0\left[\delta\left(x + \frac{1}{2}\right)\right]. \quad (3.3-5)$$

Είναι προφανές ότι στην ροή Couette η ροή μάζας ανάμεσα τις δύο πλάκες είναι μηδενική. Μια άλλη ποσότητα που παρουσιάζει ενδιαφέρον και συνηθίζεται να εκτιμάται είναι η διατμητική τάση, οποία προκύπτει από την πρώτη ροπή της συνάρτησης κατανομής, δηλαδή

$$\Pi_{xy} = - \int_{-\infty}^{\infty} c_x Y(x, c_x) e^{-c_x^2} dc_x = - \int_{-\infty}^0 c_x Y(x, c_x) e^{-c_x^2} dc_x - \int_0^{\infty} c_x Y(x, c_x) e^{-c_x^2} dc_x. \quad (3.3-6)$$

Αντικαθιστώντας τις αντίστοιχες εκφράσεις της συνάρτησης κατανομής Y για $c_x < 0$ και $c_x > 0$ και μετά από αλγεβρικές πράξεις προκύπτει ότι

$$\Pi_{xy} = T_1 \left[\delta \left(x - \frac{1}{2} \right) \right] + T_1 \left[\delta \left(x + \frac{1}{2} \right) \right] - \delta \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \text{sign}(x-s) T_0 [\delta |x-s|] \mu(s) ds \quad (3.3-7)$$

Η διατμητική τάση στην ροή Couette προκύπτει να είναι σταθερή κατά μήκος της απόστασης των δύο τοιχωμάτων. Αυτό αποδεικνύεται εάν παραγωγίσουμε την διατμητική τάση ως προς την μεταβλητή x . Πράγματι

$$\frac{d\Pi_{xy}}{dx} = \delta T_1 \left[\delta \left(x - \frac{1}{2} \right) \right] - \delta T_1 \left[\delta \left(x + \frac{1}{2} \right) \right] + \delta^2 \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} [\delta |x-s|] \mu(s) ds - \delta \sqrt{\pi} u(x) \quad (3.3-8)$$

Αντικαθιστώντας την μακροσκοπική ταχύτητα $u(x)$ από την Εξ. (3.3-4) στην Εξ. (3.3-8) προκύπτει ότι

$$\frac{d\Pi_{xy}}{dx} = 0.$$

Άρα η διατμητική τάση Π_{xy} = σταθερή κατά μήκος της απόστασης H των δύο κινούμενων τοιχωμάτων.

3.4 Διακριτοποίηση

Στην προηγούμενη παράγραφο διατυπώθηκαν οι εξισώσεις για δυο διαφορετικά πρότυπα προβλήματα ροής εφαρμόζοντας την μέθοδο των ολοκληρωτικών εξισώσεων. Από την μαθηματική επεξεργασία των δύο προβλημάτων προκύπτει ότι η μέθοδος των ολοκληρωτικών εξισώσεων περιλαμβάνει δύο βασικά βήματα. Στο πρώτο βήμα διατυπώνεται μια έκφραση κλειστής μορφής για την συνάρτηση κατανομής, ολοκληρώνοντας την κινητική εξίσωση κατά μήκος των χαρακτηριστικών, ενώ στο δεύτερο βήμα η έκφραση της συνάρτησης κατανομής

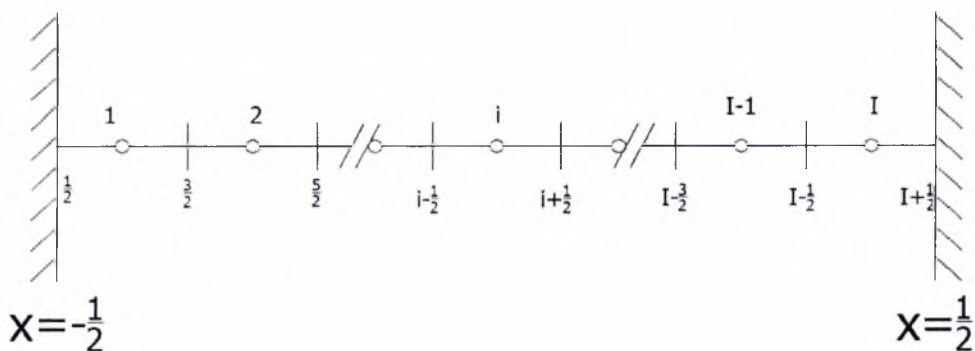
αντικαθίστανται στην αντίστοιχη ροπή που εκφράζει το μακροσκοπικό μέγεθος. Τελικά προκύπτουν μια ή περισσότερες ολοκληρωτικές εξισώσεις, των οποίων ο αριθμός εξαρτάται από τις άγνωστες μακροσκοπικές ποσότητες. Η επίλυση τους πραγματοποιείται με επαναληπτική διαδικασία.

Στόχος της συγκεκριμένης παραγράφου είναι η αριθμητική επίλυση των ολοκληρωτικών εξισώσεων που περιγράφουν το κάθε πρόβλημα. Αυτό συνεπάγεται αρχικά διακριτοποίηση του πεδίου ροής και στην συνέχεια εφαρμογή συγκεκριμένου αριθμητικού σχήματος για τον υπολογισμό των αγνώστων ποσοτήτων. Βασικό πλεονέκτημα της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων είναι ότι η επίλυση του προβλήματος γίνεται σε κόμβους, οι οποίοι δεν ταυτίζονται με τα φυσικά όρια του προβλήματος. Στην παράγραφο αυτή θα παρουσιαστούν δύο διαφορετικές διακριτοποιήσεις, εκ των οποίων η πρώτη χωρίζεται σε δύο υποπεριπτώσεις. Η πρώτη διακριτοποίηση αφορά εφαρμογή ομοιόμορφου πλέγματος στο πεδίο ροής. Η δεύτερη διακριτοποίηση αφορά μη ομογενές πλέγμα και υπολογισμό των αγνώστων ποσοτήτων πάνω στους κόμβους του πλέγματος.

3.4.1 Ομοιόμορφο πλέγμα

Η απόσταση ανάμεσα στις δύο πλάκες χωρίζεται σε ίσα διαστήματα όπως ενδεικτικά παρουσιάζεται στο Σχήμα 3.3. Αν N είναι ο συνολικός αριθμός των κόμβων τότε το μήκος κάθε διαστήματος θα είναι

$$\Delta x = \frac{1}{N-1} = \frac{1}{I}.$$



Σχήμα 3.3: Διακριτοποίηση του πεδίου ροής με ομοιόμορφο πλέγμα.

Στο σημείο αυτό υπάρχουν δύο διαφορετικές διακριτοποιήσεις που αφορούν την χρήση των Εξ. (3.2-25) και (3.3-4) ή εναλλακτικά των Εξ. (3.2-28) και (3.3-5) για την ροή Poiseuille και Couette αντίστοιχα.

Ξεκινώντας από τις Εξς (3.2-25) και (3.3-4), υποθέτουμε ότι οι άγνωστες ποσότητες $u(x)$ παραμένουν σταθερές και αμετάβλητες σε κάθε διάστημα Δx . Με την υπόθεση αυτή η ποσότητα $u(x)$ εξάγεται από τα αντίστοιχα ολοκληρώματα θεωρώντας την ως σταθερή. Τότε οι αρχικές εξισώσεις γράφονται σε πολύ απλούστερη διακριτοποιημένη μορφή. Έτσι η Εξ. (3.2-25) γράφεται

$$u(x_i)^{(n+1)} = \frac{\delta}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=1}^I u(x_k)^{(n)} \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} T_{-1} |x_i - s| ds + \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_0 \left[\delta \left(x_i + \frac{1}{2} \right) \right] + \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_0 \left[\delta \left(x_i - \frac{1}{2} \right) \right] - \frac{1}{2\delta} \quad (3.4-1)$$

όπου $i, k = 1, \dots, I$ ο αριθμός του κάθε διαστήματος. Όμοια η Εξ. (3.3-4) γράφεται

$$u(x_i)^{(n+1)} = \frac{\delta}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=1}^I u(x_k)^{(n)} \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} T_{-1} |x_i - s| ds - \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_0 \left[\delta \left(x_i + \frac{1}{2} \right) \right] + \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_0 \left[\delta \left(x_i - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (3.4-2)$$

όπου επίσης $i, k = 1, \dots, I$ ο αριθμός του κάθε διαστήματος. Τα σημεία x_i αφορούν τα ενδιάμεσα σημεία του πλέγματος, στο οποίο δεν περιλαμβάνονται οι κόμβοι ακριβώς πάνω στο τοίχωμα.

Από τις Εξς (3.4-1) και (3.4-2) παρατηρείται ότι ο υπολογισμός των μακροσκοπικών ταχυτήτων $u(x_i)$ σε κάποιο σημείο x_i του πλέγματος απαιτεί τον υπολογισμό του αθροίσματος, το οποίο περιλαμβάνει τις άγνωστες τιμές $u(x_k)$. Η επίλυση των συγκεκριμένων εξισώσεων θα πραγματοποιηθεί με επαναληπτική διαδικασία. Υποθέτοντας ένα αρχικό πεδίο ταχυτήτων, υπολογίζονται οι νέες τιμές $u(x_i)$ που αντικαθίστανται στον όρο του αθροίσματος και ακολουθώντας τον επαναληπτικό αλγόριθμο η διαδικασία συγκλίνει στα επιθυμητά αποτελέσματα. Σημειώνεται ότι με n συμβολίζεται ο δείκτης επανάληψης.

Η βασική δυσκολία κατά την αριθμητική επίλυση των εξισώσεων (3.4-1) και

(3.4-2) είναι ο υπολογισμός των ολοκληρωμάτων $\int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} T_{-1}|x_i - s| ds$ που βρίσκονται στο

άθροισμα της κάθε εξίσωσης. Τα ολοκληρώματα αυτά εκφράζουν την συνεισφορά του κάθε διαστήματος ολοκλήρωσης $[x_{k-1/2}, x_{k+1/2}]$ στην μακροσκοπική ποσότητα $u(x_i)$. Ανάλογα με την θέση του σημείου υπολογισμού x_i σε σχέση με το εκάστοτε διάστημα ολοκλήρωσης $[x_{k-1/2}, x_{k+1/2}]$, το παραπάνω ολοκλήρωμα δίνεται αναλυτικά συναρτήσει των ολοκληρωμάτων Abramowitz.

Συγκεκριμένα για τον υπολογισμό του ολοκληρώματος $\int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} T_{-1}|x_i - s| ds$ πρέπει

να εξετάζεται κάθε φορά η θέση του σημείου x_i σε σχέση με το διάστημα ολοκλήρωσης $[x_{k-1/2}, x_{k+1/2}]$, ώστε να διαπιστώνεται εάν η ποσότητα $x_i - s$ στο εσωτερικό του απολύτου είναι μεγαλύτερη, μικρότερη ή ίση με του μηδενός. Και για τις τρεις περιπτώσεις ο υπολογισμός του εν λόγω ολοκληρώματος γίνεται αναλυτικά, συναρτήσει ολοκληρωμάτων Abramowitz μηδενικής τάξης. Έτσι διακρίνονται οι τρεις παρακάτω περιπτώσεις,

i. εάν το σημείο x_i βρίσκεται στο μέσο του διαστήματος $[x_{k-1/2}, x_{k+1/2}]$,

τότε το ολοκλήρωμα ισούται με

$$\begin{aligned} \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} T_{-1}|x_i - s| ds &= \int_{x_{k-1/2}}^{x_i} T_{-1}(x_i - s) ds + \int_{x_i}^{x_{k+1/2}} T_{-1}(s - x_i) ds = \\ &= \sqrt{\pi} - T_0(x_i - x_{k-1/2}) - T_0(x_{k+1/2} - x_i) \end{aligned} \quad (3.4-3)$$

ii. εάν το σημείο x_i βρίσκεται αριστερά του διαστήματος $[x_{k-1/2}, x_{k+1/2}]$,

τότε το ολοκλήρωμα ισούται με

$$\int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} T_{-1}|x_i - s| ds = \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} T_{-1}(s - x_i) ds = T_0(x_{k-1/2} - x_i) - T_0(x_{k+1/2} - x_i) \quad (3.4-4)$$

iii. εάν το σημείο x_i βρίσκεται δεξιά του διαστήματος $[x_{k-1/2}, x_{k+1/2}]$, τότε το

ολοκλήρωμα γίνεται

$$\int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} T_{-1}|x_i - s| ds = \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} T_{-1}(x_i - s) ds = T_0(x_i - x_{k+1/2}) - T_0(x_i - x_{k-1/2}) \quad (3.5-5)$$

Η δεύτερη εναλλακτική επιλογή διακριτοποίησης εμφανίζεται, κάνοντας χρήση των εξισώσεων (3.2-28) και (3.3-5) για την ροή Poiseuille και Couette αντίστοιχα. Στην περίπτωση αυτή οι μακροσκοπικές ποσότητες $u(x_i)$ μεταβάλλονται κατά μήκος των διαστημάτων Δx ενώ αυτές υπολογίζονται πάνω στους κόμβους του πλέγματος (Σχήμα 3.3). Η συγκεκριμένη διακριτοποίηση επιτρέπει τον υπολογισμό των ταχυτήτων επάνω στα τοιχώματα του καναλιού και αναμένεται να είναι περισσότερο ακριβής σε σχέση με την πρώτη επιλογή διακριτοποίησης. Η Εξ (3.2-28) σε διακριτοποιημένη μορφή γράφεται

$$\begin{aligned}
 u(x_i)^{(n+1)} = & -\frac{\delta}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=1}^N T_{-1} |x_i - s_k| [u(x_i)^{(n)} - u(s_k)^{(n)}] \Delta s + \\
 & + u(x_i)^{(n)} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_0 \left(\frac{1}{2} - x_i \right) - \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_0 \left(\frac{1}{2} + x_i \right) \right] + \\
 & + \frac{1}{2\delta\sqrt{\pi}} T_0 \left[\delta \left(x_i + \frac{1}{2} \right) \right] + \frac{1}{2\delta\sqrt{\pi}} T_0 \left[\delta \left(x_i - \frac{1}{2} \right) \right] - \frac{1}{2\delta}
 \end{aligned} \tag{3.4-6}$$

όπου $1 \leq i, k \leq N$ ο αριθμός του κάθε κόμβου του πλέγματος. Ο συνολικός αριθμός των κόμβων ισούται με N . Όμοια η Εξ. (3.3-5) σε διακριτοποιημένη μορφή γράφεται

$$\begin{aligned}
 u(x_i)^{(n+1)} = & -\frac{\delta}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=1}^N T_{-1} |x_i - s_k| [u(x_i)^{(n)} - u(s_k)^{(n)}] \Delta s + \\
 & + u(x_i)^{(n)} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_0 \left(\frac{1}{2} - x_i \right) - \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_0 \left(\frac{1}{2} + x_i \right) \right] - \\
 & - \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_0 \left[\delta \left(x_i + \frac{1}{2} \right) \right] + \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_0 \left[\delta \left(x_i - \frac{1}{2} \right) \right]
 \end{aligned} \tag{3.4-7}$$

Όμοια με προηγουμένως οι συγκεκριμένες εξισώσεις επιλύονται αριθμητικά με επαναληπτική διαδικασία υποθέτοντας ένα αρχικό πεδίο ταχυτήτων.

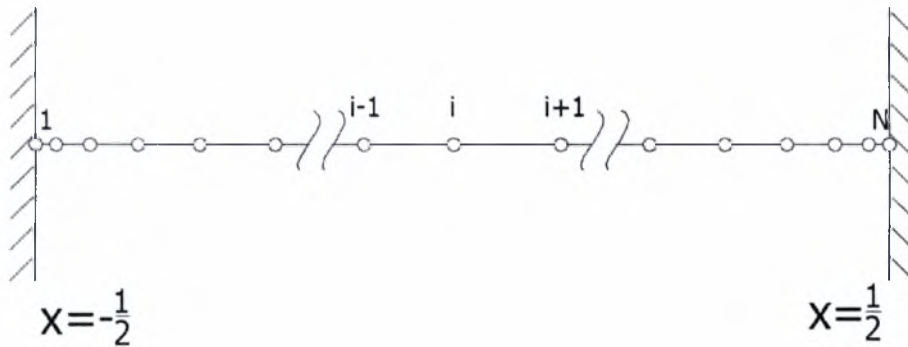
3.4.2 Μη ομοιόμορφο πλέγμα

Στην παράγραφο αυτή περιγράφεται η χρήση μη ομογενούς πλέγματος, το οποίο είναι πιο πυκνό κοντά στα τοιχώματα του καναλιού και αραιώνει καθώς πλησιάζει στο κέντρο του πεδίου ροής (Σχήμα 3.4). Η απόσταση μεταξύ των κόμβων

δεν είναι σταθερή και ισούται με $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$. Οι μακροσκοπικές ποσότητες δεν μεταβάλλονται κατά μήκος των μεταβλητών διαστημάτων Δx_i και αναμένεται μεγαλύτερη ακρίβεια στην στοιβάδα Kn κοντά στα τοιχώματα των αγωγών σε σχέση με τις δύο προηγούμενες διακριτοποιήσεις. Στην συγκεκριμένη διακριτοποίηση γίνεται χρήση των Εξ. (3.2-28) και (3.3-5) για την ροή Poiseuille και Couette αντίστοιχα. Η επιλογή των κόμβων x_i για την πύκνωση του πλέγματος πραγματοποιείται με την χρήση των ριζών των πολωνύμων Legendre όπου

$$x_i = \frac{x_i^L}{2},$$

όπου x_i^L οι ρίζες των πολωνύμων Legendre.



Σχήμα 3.4: Διακριτοποίηση του πεδίου ροής με ανομοιογενές πλέγμα.

Η Εξ. (3.2-28) σε διακριτοποιημένη μορφή γράφεται ως

$$u(x_i)^{(n+1)} = -\frac{\delta}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=1}^N T_{-1}|x_i - s_k| [u(x_i)^{(n)} - u(s_k)^{(n)}] \Delta s_k + u(x_i)^{(n)} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_0 \left(\frac{1}{2} - x_i \right) - \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_0 \left(\frac{1}{2} + x_i \right) \right] + \frac{1}{2\delta\sqrt{\pi}} T_0 \left[\delta \left(x_i + \frac{1}{2} \right) \right] + \frac{1}{2\delta\sqrt{\pi}} T_0 \left[\delta \left(x_i - \frac{1}{2} \right) \right] - \frac{1}{2\delta} \quad (3.4-8)$$

Όμοια η Εξ. (3.3-5) σε διακριτοποιημένη μορφή γράφεται

$$u(x_i)^{(n+1)} = -\frac{\delta}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=1}^N T_{-1}|x_i - s_k| [u(x_i)^{(n)} - u(s_k)^{(n)}] \Delta s_k + u(x_i)^{(n)} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_0 \left(\frac{1}{2} - x_i \right) - \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_0 \left(\frac{1}{2} + x_i \right) \right] - \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_0 \left[\delta \left(x_i + \frac{1}{2} \right) \right] + \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_0 \left[\delta \left(x_i - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (3.4-9)$$

Η αριθμητική επίλυση των ολοκληρωτικών εξισώσεων σε όλες τις

περιπτώσεις απαιτεί τον ακριβή υπολογισμό των συναρτήσεων Abramowitz που περιγράφεται αναλυτικά στο Παράρτημα Α.

3.5 Αριθμητικά Αποτελέσματα

Τα αριθμητικά αποτελέσματα που ακολουθούν αφορούν την επίλυση των δυο κλασσικών μονοδιάστατων προβλημάτων της ροής Poiseuille και Couette τόσο με την μέθοδο των ολοκληρωτικών εξισώσεων (IMM) όσο και με την μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων (DVM). Στόχος είναι η συστηματική αξιολόγηση και πιστοποίηση των διαφόρων διακριτοποιήσεων στην μέθοδο των ολοκληρωτικών εξισώσεων και επίσης η σύγκριση της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων με την μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων.

Η μέθοδος των διακριτών ταχυτήτων έχει αποδειχθεί ότι αποτελεί μια αξιόπιστη μεθοδολογία επίλυσης κινητικών εξισώσεων τόσο για μονατομικά αέρια όσο και για μίγματα αερίων [Naris et al, 2004; 2005]. Το γεγονός αυτό επιτρέπει την αξιολόγηση της IMM όσον αφορά την ακρίβεια, την ταχύτητα σύγκλισης και τον απαιτούμενο υπολογιστικό χρόνο.

Οι Πίνακες 3.1 ÷ 3.8 περιέχουν αποτελέσματα με τις μεθόδους IMM και DVM για την διατμητική τάση που προκύπτει στην ροή Couette καθώς και για την παροχή της ροής Poiseuille, για διαφορετικό αριθμό κόμβων N καθώς και για διαφορετικές τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ . Οι τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης επιλέχθηκαν έτσι ώστε να καλύπτονται όλες οι περιοχές ροής, από την ελεύθερη μοριακή περιοχή έως την υδροδυναμική περιοχή. Πρέπει να τονιστεί ότι τα αποτελέσματα για την μέθοδο IMM αφορούν όλες τις περιπτώσεις διακριτοποίησης που περιγράφηκαν αναλυτικά στις Παραγράφους 3.4.1 και 3.4.2

Σε όλες τις μεθοδολογίες χρησιμοποιήθηκε ως κριτήριο τερματισμού το σχετικό σφάλμα όλων των μακροσκοπικών ταχυτήτων να είναι μικρότερο ή ίσο με 10^{-7} . Επίσης για την μέθοδο DVM ο απαιτούμενος αριθμός των μοριακών ταχυτήτων για την διακριτοποίηση στον φασικό χώρο μεταβάλλεται ανάλογα της τιμής της παραμέτρου αραιοποίησης δ . Έτσι για $10^{-3} \leq \delta \leq 1.0$ επιλέχθηκαν οι 64 ρίζες ολοκλήρωσης Gauss-Legendre, ενώ για $2 \leq \delta \leq 100$ χρησιμοποιήθηκαν 16 ρίζες ολοκλήρωσης Gauss. Η συγκεκριμένη επιλογή βασίστηκε με κριτήριο την ακρίβεια

των αποτελεσμάτων και την διατήρηση των επιθυμητών σημαντικών ψηφίων για όλο το εύρος της παραμέτρου αραιοποίησης δ . Η ίδια ακριβώς επιλογή εφαρμόστηκε και στην μέθοδο των ολοκληρωτικών εξισώσεων όχι όμως για την διακριτοποίηση στον χώρο των μικροσκοπικών ταχυτήτων αλλά για την αριθμητική ολοκλήρωση των συναρτήσεων Abramowitz. Τέλος και στις δύο μεθοδολογίες που παρουσιάζονται επιλέχθηκαν τρία χωρικά πλέγματα των 100, 500 και 1000 κόμβων αντίστοιχα, με μόνη εξαίρεση την υποπερίπτωση διακριτοποίησης της μεθόδου IMM με μη ομοιόμορφο πλέγμα, όπου στην συγκεκριμένη περίπτωση επιλέχθηκαν δύο χωρικά πλέγματα των 96 και 300 κόμβων αντίστοιχα.

Τόσο ο υπολογισμός των ολοκληρωμάτων Abramowitz όσο και η μέθοδος DVM περιγράφονται αναλυτικά στα Παραρτήματα Α και Β αντίστοιχα. Επίσης στο Παράρτημα Δ επισυνάπτονται όλοι οι κώδικες που χρησιμοποιήθηκαν για την εξαγωγή των αριθμητικών αποτελεσμάτων του παρόντος Κεφαλαίου 3. Οι κώδικες είναι σε γλώσσα προγραμματισμού Fortran 90 και συνοδεύονται από έναν φάκελο, ο οποίος θα περιέχει τις ρίζες και τους συντελεστές βαρύτητας αριθμητικής ολοκλήρωσης Gauss-Legendre και Gauss.

<i>Αριθμός κόμβων</i>	δ	<i>Αριθμός επαναλήψεων</i>	<i>CPU time(sec)</i>	<i>G</i>
100	10^{-3}	4	1.5(-2)	4.277495
	10^{-2}	6	1.5(-2)	3.049660
	10^{-1}	10	1.5(-2)	2.032702
	1	32	3.1(-2)	1.538652
	2	57	5.0(-2)	1.594820
	5	153	7.8(-2)	1.990681
	10	393	1.4(-1)	2.768471
	50	5395	1.3	9.368629
	100	17842	4	17.687899
500	10^{-3}	4	1.5(-2)	4.277505
	10^{-2}	6	1.5(-2)	3.049670
	10^{-1}	10	3.1(-2)	2.032714
	1	32	1.1(-1)	1.538677
	2	57	1.2(-1)	1.594858
	5	153	1.7(-1)	1.990763
	10	393	3.6(-1)	2.768631
	50	5395	5.3	9.369429
	100	17842	17.7	17.689497
1000	10^{-3}	4	3.1(-2)	4.277505
	10^{-2}	6	4.7(-2)	3.049670
	10^{-1}	10	7.8(-2)	2.032714
	1	32	2.3(-1)	1.538678
	2	57	2.7(-1)	1.594860
	5	153	3.1(-1)	1.990766
	10	393	8.7(-1)	2.768636
	50	5396	11	9.369454
	100	17844	35	17.689547

Πίνακας 3.1: Ροή Poiseuille – Αδιάστατη ροή μάζας με DVM.

<i>Αριθμός κόμβων</i>	δ	<i>Αριθμός επαναλήψεων</i>	<i>CPU time(sec)</i>	Π
100	10^{-3}	3	1.1(-2)	0.999117
	10^{-2}	4	1.1(-2)	0.991397
	10^{-1}	6	1.1(-2)	0.925796
	1	15	1.4(-2)	0.600728
	2	23	1.6(-2)	0.443646
	5	54	3.1(-2)	0.252246
	10	128	4.6(-2)	0.147312
	50	1652	4.2(-1)	0.034064
	100	5578	1.2	0.017372
500	10^{-3}	3	1.5(-2)	0.999117
	10^{-2}	4	1.5(-2)	0.991397
	10^{-1}	6	3.1(-2)	0.925796
	1	15	4.6(-2)	0.600729
	2	23	6.2(-2)	0.443646
	5	54	9.3(-2)	0.252246
	10	128	1.2(-1)	0.147312
	50	1653	1.7	0.034064
	100	5581	5.65	0.017372
1000	10^{-3}	3	7.8(-2)	0.999117
	10^{-2}	4	9.3(-2)	0.991397
	10^{-1}	6	4.6(-2)	0.925796
	1	15	1.1(-1)	0.600729
	2	23	1.2(-1)	0.443646
	5	54	1.5(-1)	0.252246
	10	128	2.5(-1)	0.147312
	50	1653	3.3	0.034064
	100	5581	10.7	0.017372

Πίνακας 3.2: Ροή Couette - Αδιάστατη διατμητική τάση με DVM.

<i>Αριθμός κόμβων</i>	δ	<i>Αριθμός επαναλήψεων</i>	<i>CPU time(sec)</i>	<i>G</i>
100	10^{-3}	4	1.2(-1)	4.237027
	10^{-2}	6	1.1(-1)	3.021710
	10^{-1}	11	1.4(-1)	2.015359
	1	32	1.7(-2)	1.528282
	2	57	4.7(-2)	1.585683
	5	155	6.2(-2)	1.982631
	10	399	2.5(-1)	2.761090
	50	5470	1.2	9.366574
	100	17760	4	17.701821
500	10^{-3}	4	2.91	4.269481
	10^{-2}	6	2.93	3.044135
	10^{-1}	11	2.96	2.029287
	1	32	3.14	1.536637
	2	57	1.15	1.593062
	5	155	1.73	1.989174
	10	399	3.35	2.767144
	50	5470	37	9.368924
	100	17760	125	17.692871
1000	10^{-3}	4	11.8	4.273497
	10^{-2}	6	1.84	3.046906
	10^{-1}	11	12.1	2.031003
	1	32	12.7	1.537660
	2	57	5	1.593963
	5	155	8	1.989973
	10	399	16	2.767893
	50	5470	190	9.369355
	100	17760	627	17.692906

Πίνακας 3.3: Ροή Poiseuille – Αδιάστατη ροή μάζας με IMM, Εξ. (3.4-1).

<i>Αριθμός κόμβων</i>	δ	<i>Αριθμός επαναλήψεων</i>	<i>CPU time(sec)</i>	<i>G</i>
100	10^{-3}	4	7.81(-2)	4.277474
	10^{-2}	6	6.25(-2)	3.049616
	10^{-1}	10	6.25(-2)	2.032686
	1	32	4.68(-2)	1.538441
	2	57	6.25(-2)	1.594516
	5	153	1.25(-1)	1.989834
	10	394	2.0(-1)	2.766587
	50	5435	2.75	9.390757
	100	18288	9	18.066703
500	10^{-3}	4	1.81	4.277503
	10^{-2}	6	1.82	3.049668
	10^{-1}	10	1.84	2.032710
	1	32	2.1	1.538665
	2	57	1.3	1.594846
	5	153	2.5	1.990727
	10	394	5.7	2.768539
	50	5421	72.6	9.368724
	100	17944	238	17.690872
1000	10^{-3}	4	7.3	4.277504
	10^{-2}	6	7.2	3.049669
	10^{-1}	10	7.6	2.032713
	1	32	9	1.538674
	2	57	5.1	1.594856
	5	153	11	1.990756
	10	394	24.5	2.768613
	50	5421	308	9.369211
	100	17942	1018	17.68943

Πίνακας 3.4: Ροή Poiseuille - Αδιάστατη ροή μάζας με IMM, Εξ. (3.4-6).

<i>Αριθμός κόμβων</i>	δ	<i>Αριθμός επαναλήψεων</i>	<i>CPU time(sec)</i>	<i>G</i>
96	10^{-3}	4	1.5(-2)	4.275086
	10^{-2}	5	1.5(-2)	3.049649
	10^{-1}	8	1.6(-2)	2.032714
	1	21	1.7(-2)	1.538678
	2	35	1.8(-2)	1.594857
	5	96	3.1(-2)	1.990768
	10	261	8.0(-2)	2.768649
	50	4591	1.5	9.370055
	100	17200	5.3	17.693482
300	10^{-3}	4	3.1(-2)	4.273608
	10^{-2}	5	3.1(-2)	3.049649
	10^{-1}	8	4.6(-2)	2.032714
	1	20	6.2(-2)	1.538678
	2	34	1.0(-1)	1.594856
	5	89	3.0(-1)	1.990766
	10	234	7.0(-1)	2.768643
	50	3842	12	9.369954
	100	14245	46	17.693202

Πίνακας 3.5: Ροή Poiseuille - Αδιάστατη ροή μάζας με IMM, Εξ. (3.4-8).

<i>Αριθμός κόμβων</i>	δ	<i>Αριθμός επαναλήψεων</i>	<i>CPU time(sec)</i>	Π
100	10^{-3}	7	1.7(-1)	0.999117
	10^{-2}	10	1.7(-1)	0.991397
	10^{-1}	14	1.7(-1)	0.925757
	1	34	1.8(-1)	0.600849
	2	56	6.2(-2)	0.443620
	5	127	7.8(-2)	0.252240
	10	307	1.1(-1)	0.147373
	50	4037	1	0.032841
	100	6286	1.5	0.015358
500	10^{-3}	8	4.4	0.999117
	10^{-2}	9	4.4	0.991397
	10^{-1}	15	4.4	0.925796
	1	38	4.6	0.600792
	2	56	1.5	0.443646
	5	129	2.2	0.252245
	10	295	3.4	0.147312
	50	4132	33	0.0340077
	100	5790	50	0.0172626
1000	10^{-3}	8	18	0.999117
	10^{-2}	10	17.7	0.991397
	10^{-1}	15	17.9	0.925794
	1	37	19	0.600779
	2	56	6.5	0.443664
	5	130	9.4	0.252245
	10	297	16	0.147312
	50	4153	166	0.034049
	100	6314	250	0.017343

Πίνακας 3.6: Ροή Couette – Αδιάστατη διατμητική τάση με IMM, Εξ. (3.4-2).

<i>Αριθμός κόμβων</i>	δ	<i>Αριθμός επαναλήψεων</i>	<i>CPU time(sec)</i>	Π
100	10^{-3}	4	1.2(-1)	0.999117
	10^{-2}	6	1.2(-1)	0.991397
	10^{-1}	11	1.3(-1)	0.925787
	1	36	1.5(-1)	0.600333
	2	65	7.8(-2)	0.443691
	5	168	1.8(-1)	0.253490
	10	434	2.3(-1)	0.147254
	50	6601	3.2	0.032146
	100	25102	12.3	0.014900
500	10^{-3}	4	3.1	0.999117
	10^{-2}	6	3.2	0.991398
	10^{-1}	11	3.3	0.925794
	1	36	3.8	0.600549
	2	65	1.7	0.443647
	5	167	3	0.252243
	10	468	6.7	0.147311
	50	6013	85	0.033889
	100	20062	277	0.017371
1000	10^{-3}	4	13.3	0.999117
	10^{-2}	6	13.9	0.991398
	10^{-1}	11	14	0.925795
	1	36	15.6	0.600727
	2	65	7	0.443646
	5	166	13.5	0.252246
	10	427	30	0.147312
	50	6009	367	0.033991
	100	20112	1251	0.017372

Πίνακας 3.7: Ροή Couette - Αδιάστατη διατμητική τάση με IMM, Εξ. (3.4-7).

<i>Αριθμός κόμβων</i>	δ	<i>Αριθμός επαναλήψεων</i>	<i>CPU time(sec)</i>	Π
96	10^{-3}	5	4.6(-1)	0.999117
	10^{-2}	6	4.6(-1)	0.991398
	10^{-1}	9	4.7(-1)	0.925796
	1	21	4.9(-1)	0.600729
	2	36	5.2(-1)	0.443646
	5	105	5.3(-1)	0.252444
	10	284	5.7(-1)	0.147302
	50	4492	1.6	0.033818
	100	14914	4.3	0.016639
300	10^{-3}	5	11	0.999117
	10^{-2}	6	11	0.991398
	10^{-1}	9	12	0.925796
	1	22	12.3	0.600729
	2	37	12.5	0.443646
	5	105	12.8	0.252246
	10	277	13.6	0.147312
	50	4291	26	0.034053
	100	14941	61	0.017332

Πίνακας 3.8: Ροή Couette - Αδιάστατη διατμητική τάση με IMM, Εξ. (3.4-9).

3.6 Σύγκριση αποτελεσμάτων και συμπεράσματα

3.6.1 Εισαγωγή

Η συγκεκριμένη ενότητα αποτελείται από δύο σκέλη. Το πρώτο περιέχει την σύγκριση των αποτελεσμάτων, μεταξύ των διαφόρων διακριτοποιήσεων της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων, που περιγράφηκαν στις Παραγράφους 3.4.1 και 3.4.2. Το δεύτερο σκέλος περιλαμβάνει την σύγκριση της μεθόδου IMM με την μέθοδο DVM καθώς και την περιγραφή των βασικών πλεονεκτημάτων και μειονεκτημάτων για κάθε μια.

3.6.2 Σύγκριση των εναλλακτικών διακριτοποιήσεων στη μέθοδο IMM

Μελετώντας τους Πίνακες 3.3, 3.4 και 3.5 για την ροή Poiseuille καθώς και τους Πίνακες 3.6, 3.7 και 3.8 για την ροή Couette, προκύπτουν τα παρακάτω συμπεράσματα για την βέλτιστη επιλογή της διακριτοποίησης στην μέθοδο IMM.

Τα αποτελέσματα των Πινάκων 3.3 και 3.6 δείχνουν να υστερούν των αποτελεσμάτων των Πινάκων 3.4 και 3.7 ή των Πινάκων 3.5 και 3.8, όσον αφορά την ακρίβεια κυρίως σε αραιά πλέγματα. Η διαφορά αυτή οφείλεται στην παραδοχή της σταθερής μακροσκοπικής ποσότητας κατά μήκος κάθε διαστήματος Δx . Η διαφορά αυτή τείνει να εξαλειφθεί καθώς πυκνώνει το χωρικό πλέγμα έχοντας ως συνέπεια βέβαια την επίτευξη ακρίβειας ίδιων σημαντικών ψηφίων με τις άλλες διακριτοποιήσεις, αλλά σε μεγαλύτερο υπολογιστικό χρόνο.

Επίσης παρατηρείται ότι, η διακριτοποίηση με μη ομοιόμορφο χωρικό πλέγμα υπερτερεί όσον αφορά την ακρίβεια σε σημαντικά ψηφία, από τις δύο άλλες διακριτοποιήσεις. Μόλις 96 χωρικοί κόμβοι δίνουν ακρίβεια τριών ή ακόμα και τεσσάρων σημαντικών ψηφίων, σε αντίθεση με τα αποτελέσματα των Πινάκων 3.3 και 3.6 όπου απαιτούνται τουλάχιστον 500 χωρικοί κόμβοι για την επίτευξη της ίδιας ακρίβειας. Η ίδια μεθοδολογία απαιτεί μικρότερο υπολογιστικό χρόνο σε σχέση με τις υπόλοιπες διακριτοποιήσεις.

Σε όλες τις επιλογές διακριτοποίησης ο απαιτούμενος υπολογιστικός χρόνος αυξάνει κατά πολύ καθώς πλησιάζουμε την υδροδυναμική περιοχή και απαιτείται η χρήση πυκνού χωρικού πλέγματος για την επίτευξη ακρίβειας τριών ή τεσσάρων σημαντικών ψηφίων. Ο αριθμός των επαναλήψεων για όλες τις διακριτοποιήσεις παραμένει ίδιας τάξης μεγέθους.

Όπως προκύπτει από την παραπάνω ανάλυση η διακριτοποίηση με μη ομοιόμορφο πλέγμα δείχνει να υπερτερεί των δύο άλλων τόσο σε ακρίβεια όσο και σε απαιτούμενο υπολογιστικό χρόνο. Στα επόμενα Κεφάλαια 4 και 5 χρησιμοποιήθηκε η διακριτοποίηση στα ενδιάμεσα σημεία και όχι η διακριτοποίηση με μη ομογενές πλέγμα όπως θα αναμενόταν. Περισσότερες λεπτομέρειες θα παρουσιασθούν στα επόμενα κεφάλαια.

3.6.3 Σύγκριση των μεθόδων των ολοκληρωτικών εξισώσεων και των διακριτών ταχυτήτων

Από την παραπάνω μαθηματική επεξεργασία όπως αυτή περιγράφηκε στις Παραγράφους 3.5.1 και 3.5.2 καθώς και από τα αριθμητικά αποτελέσματα της Παραγράφου 3.6 είναι δυνατόν να εξαχθούν τα εξής συμπεράσματα για την μέθοδο των ολοκληρωτικών εξισώσεων σε σύγκριση με την μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων, όσον αφορά την ακρίβεια και τον απαιτούμενο υπολογιστικό χρόνο.

- Η μέθοδος των ολοκληρωτικών εξισώσεων αποτελεί μια μέθοδο, στην οποία δεν απαιτείται η διακριτοποίηση της συνάρτησης κατανομής αλλά μόνο η διακριτοποίηση της άγνωστης ολικής μακροσκοπικής ποσότητας. Αντίθετα η μέθοδος των διακριτών ταχυτήτων εμπεριέχει την διακριτοποίηση της συνάρτησης κατανομής, από την όποια και θα προκύψουν ως δευτερεύοντα μεγέθη οι άγνωστες μακροσκοπικές ποσότητες.
- Στην μέθοδο των ολοκληρωτικών εξισώσεων δεν απαιτείται η διακριτοποίηση στον χώρο των μικροσκοπικών ταχυτήτων, όπως στην μέθοδο DVM. Απαραίτητη είναι μονό η διακριτοποίηση του προβλήματος στον φυσικό χώρο.
- Στην μέθοδο των ολοκληρωτικών εξισώσεων ο αριθμός των εξισώσεων για

την επίλυση και εύρεση των διαφόρων μακροσκοπικών ποσοτήτων (πχ. πυκνότητα, ταχύτητα, θερμοκρασία, πίεση κλπ) ισούται με των αριθμό των μακροσκοπικών ποσοτήτων που υπολογίζονται. Έτσι η δυσκολία του προβλήματος αυξάνει καθώς αυξάνονται και οι μεταβλητές του προβλήματος. Αντίθετα στην μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων υπολογίζεται αριθμητικά μόνο η συνάρτηση κατανομής, ενώ τα μακροσκοπικά μεγέθη προκύπτουν από αντίστοιχες ροπές τις συνάρτησης κατανομής.

- Για μικρές τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ , στην μέθοδο DVM απαιτείται μεγάλος αριθμός μοριακών ταχυτήτων ώστε η ακρίβεια των αποτελεσμάτων να παραμείνει σε αποδεκτό αριθμό σημαντικών ψηφίων. Στην μέθοδο IMM, η ακρίβεια των αποτελεσμάτων εξαρτάται από των υπολογισμό των συναρτήσεων Abramowitz, ο οποίος είναι ανεξάρτητος του σετ των μοριακών ταχυτήτων της μεθόδου DVM. Καθώς προσεγγίζεται η υδροδυναμική περιοχή απαιτείται πύκνωση του χωρικού πλέγματος για την IMM και χρήση μικρότερου αριθμού μοριακών ταχυτήτων απ' ότι στην προηγούμενη περίπτωση για την DVM.
- Ο υπολογιστικός χρόνος που απαιτείται για την μέθοδο των ολοκληρωτικών εξισώσεων είναι της τάξεως

$$t_{IMM} \approx (N_x)^2$$

όπου N_x ο αριθμός των κόμβων του υπολογιστικού πλέγματος. Ο αντίστοιχος υπολογιστικός χρόνος για την μέθοδο DVM είναι της τάξης

$$t_{DVM} \approx N_x \times N_{c_p}$$

όπου N_{c_p} είναι ο αριθμός των μικροσκοπικών ταχυτήτων. Είναι προφανές ότι στην περίπτωση όπου το μέγεθος του χωρικού πλέγματος γίνει μεγαλύτερο από τον αριθμό των μοριακών ταχυτήτων, ο απαιτούμενος υπολογιστικός χρόνος για την IMM είναι μεγαλύτερος από αυτόν στην DVM. Το γεγονός αυτό δικαιολογείται και από τα αριθμητικά αποτελέσματα της Παραγράφου 3.6. Πράγματι συγκρίνοντας τους Πίνακες 3.1 και 3.2 για την DVM και τους Πίνακες 3.3 και 3.6 για την IMM παρατηρείται ότι σε μικρά χωρικά πλέγματα ο απαιτούμενος υπολογιστικός χρόνος είναι της ίδιας τάξης μεγέθους. Καθώς

κινούμαστε όμως προς την υδροδυναμική περιοχή και απαιτείται πύκνωση του χωρικού πλέγματος για την διατήρηση της ακρίβειας των αποτελεσμάτων, τότε η μέθοδος DVM απαιτεί μικρότερο υπολογιστικό χρόνο.

- Εξετάζοντας όπως και προηγουμένως τους Πίνακες 3.1 και 3.2 για την DVM και τους Πίνακες 3.3 και 3.6 για την IMM παρατηρείται ότι η μέθοδος DVM υπερτερεί της μεθόδου IMM όσον αφορά την ακρίβεια κυρίως πλησιάζοντας στην υδροδυναμική περιοχή. Έτσι σε αραιά κυρίως πλέγματα τα αποτελέσματα των δύο μεθοδολογιών ταυτίζονται σε δυο το πολύ σημαντικά ψηφία.

Κλείνοντας το συγκεκριμένο κεφάλαιο το συμπέρασμα το οποίο μπορεί να εξαχθεί είναι ότι η μέθοδος των ολοκληρωτικών εξισώσεων αποτελεί αξιόπιστο εργαλείο για την επίλυση γραμμικών κινητικών εξισώσεων σε μονοδιάστατα προβλήματα. Η μέθοδος των ολοκληρωτικών εξισώσεων εμφανίζεται να υπερτερεί της μεθόδου DVM κυρίως όταν δεν απαιτείται πυκνό χωρικό πλέγμα και όταν πρέπει να αποφευχθεί ο υπολογισμός της συνάρτησης κατανομής.

Κεφάλαιο 4

Ροή σε ορθογώνιο αγωγό

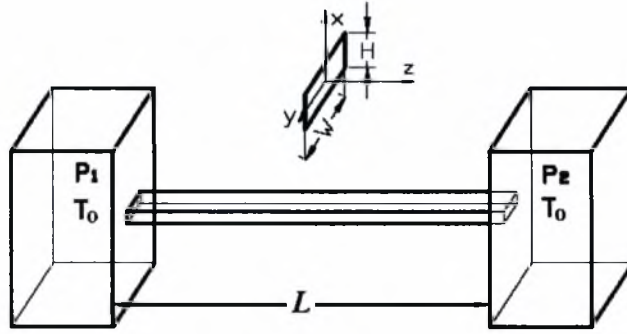
4.1 Εισαγωγή

Στο 4^ο Κεφάλαιο η μέθοδος των ολοκληρωτικών εξισώσεων αναπτύσσεται και εφαρμόζεται για πρώτη φορά σε διδιάστατη γεωμετρία και ειδικότερα στο πρόβλημα της πλήρους ανεπτυγμένης ροής σε ορθογώνιο αγωγό. Η ανάλυση ισχύει για όλο το εύρος του αριθμού Kn . Η επέκταση της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων σε διδιάστατα προβλήματα δεν αποτελεί τετριμμένη διαδικασία. Απαιτείται πολύπλοκη μαθηματική επεξεργασία και εφαρμογή συγκεκριμένων αριθμητικών τεχνικών για την επίλυση των ολοκληρωτικών εξισώσεων.

Η διάταξη του Σχήματος 4.1 περιλαμβάνει έναν αγωγό, ο οποίος συνδέει δύο δοχεία, τα οποία περιέχουν το ίδιο αέριο και βρίσκονται στην ίδια θερμοκρασία αναφοράς T_0 . Οι πιέσεις των δύο δοχείων είναι P_1 και P_2 αντίστοιχα. Στόχος είναι ο υπολογισμός της παροχής \dot{M} , η οποία ορίζεται ως η ποσότητα μάζας που διέρχεται από μία διατομή του αγωγού στη μονάδα του χρόνου.

Το κανάλι αποτελείται από δύο παράλληλες οριζόντιες πλάκες που βρίσκονται στο $y' = \pm \frac{H}{2}$ αντίστοιχα και άλλες δύο παράλληλες κατακόρυφες πλάκες που είναι τοποθετημένες στο $x' = \pm \frac{W}{2}$. Θεωρούμε επίσης ότι $\frac{W}{H} \leq 1$ και η ροή θεωρείται πλήρως ανεπτυγμένη στην κατεύθυνση z' ($\frac{\partial}{\partial z'} = 0$). Η χαρακτηριστική διάσταση του προβλήματος είναι το ύψος H .

Θεωρώντας το μήκος l του αγωγού πολύ μεγαλύτερο από το ύψος H και το πλάτος W είναι δυνατόν να αγνοηθούν τα φαινόμενα των άκρων. Ο λόγος $A = \frac{H}{W}$ του καναλιού μπορεί να πάρει τιμές από 1 (αντιστοιχεί σε τετραγωνικό αγωγό) έως 0 (το πρόβλημα εκφυλίζεται σε μονοδιάστατη ροή). Η τομή ενός τυπικού καναλιού απεικονίζεται στο Σχήμα 4.1.



Σχήμα 4.1: Τομή ορθογωνίου καναλιού

Η αδιάστατη εξίσωση Boltzmann εφαρμόζοντας το μοντέλο BGK για τον όρο των συγκρούσεων είναι

$$\xi \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}'} = \frac{P}{\mu} (f^M - f) \quad (4.1-1)$$

όπου $f = f(\mathbf{r}', \xi)$ είναι η άγνωστη συνάρτηση κατανομής, \mathbf{r} το διάνυσμα θέσης, $\xi = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$ η μικροσκοπική ταχύτητα, P η πίεση και μ το ιξώδες του ρευστού σε θερμοκρασία T . Επίσης f^M είναι η τοπική κατανομή Maxwell

$$f^M = n \left(\frac{1}{2\pi RT} \right)^{3/2} e^{-\frac{(\xi - V)^2}{2RT}} \quad (4.1-2)$$

όπου R είναι η σταθερά του αερίου η οποία ορίζεται ως το πηλίκο της σταθεράς Boltzmann k_B δια της μοριακής μάζας m ($R = k_B / m$). Η τοπική μακροσκοπική ταχύτητα $\mathbf{V}(\mathbf{r}) = \{\tilde{u}_x(\mathbf{r}), \tilde{u}_y(\mathbf{r}), \tilde{u}_z(\mathbf{r})\}$ εκφράζεται συναρτήσει της συνάρτησης κατανομής ως

$$\mathbf{V}(\mathbf{r}) = \frac{1}{n} \int_{-\infty}^{\infty} \xi f d\xi \quad (4.1-3)$$

Η Εξ. (4.1-1) σε δύο διαστάσεις απλουστεύεται στην μορφή

$$\xi_x \frac{\partial f}{\partial x'} + \xi_y \frac{\partial f}{\partial y'} = \frac{P}{\mu} (f^M - f) \quad (4.1-4)$$

Όμοια η Εξ. (4.1-3) που εκφράζει την ταχύτητα στην διεύθυνση της ροής είναι

$$\tilde{u}_z(x', y') = \tilde{u}(x', y') = \frac{1}{n} \int_{-\infty}^{\infty} \xi_z f d\xi \quad (4.1-5)$$

Εισάγονται οι παρακάτω αδιάστατες ποσότητες

$$x = \frac{x'}{H}, \quad y = \frac{y'}{H}, \quad c_x = \frac{\xi_x}{\sqrt{2RT_0}}, \quad c_y = \frac{\xi_y}{\sqrt{2RT_0}}, \quad u = \frac{1}{X_p} \frac{\tilde{u}}{v_0}$$

όπου $v_0 = \sqrt{2RT_0}$ η πιο πιθανή μοριακή ταχύτητα και $X_p = \frac{H}{P} \frac{dP}{dx'}$ η αδιάστατη κλίση πίεσης με $|X_p| \ll 1$. Η αδιάστατη κινητική εξίσωση γράφεται

$$c_x \frac{\partial f}{\partial x} + c_y \frac{\partial f}{\partial y} = \delta (f^M - f) \quad (4.1-6)$$

όπου δ η παραμέτρου αραιοποίησης, η οποία δίνεται από την σχέση

$$\delta = \frac{PH}{\mu v_0} \quad (4.1-7)$$

Για πολύ μικρές μεταβολές της κλίσης πίεσης το αέριο μπορεί να θεωρηθεί σε κατάσταση μη ισορροπίας και να εφαρμοσθεί γραμμικοποίηση της αδιάστατης συνάρτησης κατανομής ως

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{c}) = f^0 \{1 + X_p [h(x, y, \mathbf{c}) + z]\} \quad (4.1-8)$$

όπου $h = h(x, y, \mathbf{c})$ η νέα συνάρτηση κατανομής και

$$f^0 = n_0 \left(\frac{1}{2\pi RT_0} \right)^{3/2} e^{-c^2} \quad (4.1-9)$$

Αγνοώντας τις μεταβολές της θερμοκρασίας και πυκνότητας και αναπτύσσοντας σε ανάπτυγμα Taylor την τοπική κατανομή ισορροπίας f^M ως προς την απόλυτη κατανομή ισορροπίας f^0 και κρατώντας όρους πρώτης τάξης προκύπτει ότι

$$f^M = f^0 [1 + 2u_z c_z] \quad (4.1-10)$$

Αντικαθιστώντας την Εξ. (4.1-10) στην Εξ. (4.1-6) προκύπτει η γραμμικοποιημένη αδιάστατη εξίσωση BGK σε δύο διαστάσεις

$$c_x \frac{\partial h}{\partial x} + c_y \frac{\partial h}{\partial y} + \delta h = 2\delta u c_z - c_z \quad (4.1-11)$$

Το συγκεκριμένο πρόβλημα αποτελεί ένα διδιάστατο πρόβλημα, στο οποίο κατά μήκος της z διεύθυνσης η ροή θεωρείται πλήρως ανεπτυγμένη. Η συνάρτηση κατανομής είναι συνάρτηση πέντε μεταβλητών $h = h(x, y, c_x, c_y, c_z)$ και είναι δυνατόν να απαλειφθεί η μοριακή ταχύτητα c_z εφαρμόζοντας την ακόλουθη μαθηματική διαδικασία της προβολή. Πολλαπλασιάζουμε την Εξ. (4.1-11) με τον όρο

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} c_z e^{-c_z^2}$$

και ολοκληρώνουμε ως προς c_z στο διάστημα $(-\infty, \infty)$. Η εξίσωση που προκύπτει είναι η ακόλουθη

$$c_x \frac{\partial Y}{\partial x} + c_y \frac{\partial Y}{\partial y} + \delta Y = \delta u - \frac{1}{2} \quad (4.1-12)$$

όπου $Y(x, y, c_x, c_y)$ η νέα συνάρτηση κατανομής που ορίζεται ως

$$Y(x, y, c_x, c_y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} c_z h e^{-c_z^2} dc_z \quad (4.1-13)$$

Η κατανομή της ταχύτητας u θα δίνεται από την σχέση

$$u(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} Y(x, y, c_x, c_y) e^{-c_x^2 - c_y^2} dc_x dc_y \quad (4.1-14)$$

Οι συνοριακές συνθήκες που συνοδεύουν την Εξ. (4.1-12) είναι τύπου Maxwell θεωρώντας μόνο διάχυση ($a=1$) και αφορούν τα τοιχώματα του αγωγού. Συγκεκριμένα ισχύει ότι για τα σωματίδια που εγκαταλείπουν το τοίχωμα η συνάρτηση κατανομής Y^+ είναι μηδενική, δηλαδή

$$Y^+ = 0 \quad (4.1-15)$$

Η ροή μάζας που διέρχεται από τον ορθογώνιο αγωγό δίνεται από την σχέση

$$\dot{M} = \int_{-\frac{H}{2}}^{\frac{H}{2}} \int_{-\frac{W}{2}}^{\frac{W}{2}} \rho u' (x', y') dx' dy' \quad (4.1-16)$$

όπου ρ η πυκνότητα του αερίου. Αντικαθιστώντας όπου $\rho = nm$, $k_B = Rm$ και κάνοντας χρήση της παραπάνω αδιαστατοποίησης προκύπτει ότι η αδιάστατη παροχή που διέρχεται από τον αγωγό, δίνεται από την σχέση

$$\dot{M} = nmv_0 H^2 \int_{\frac{H}{2W}}^{\frac{H}{2W}} \int_{\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} u(x, y) dx dy \quad (4.1-17)$$

Η αδιάστατη ροή μάζας που διέρχεται από τον αγωγό ορίζεται από την σχέση

$$G = -\frac{v_\theta}{HWPX_p} \dot{M} \quad (4.1-18)$$

Αντικαθιστώντας την Εξ. (4.1-17) στην Εξ. (4.1-18) και κάνοντας χρήση της καταστατικής εξίσωσης $P = nkT$ προκύπτει

$$G = -2 \frac{H}{W} \int_{\frac{W}{2H}}^{\frac{W}{2H}} \int_{\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} u(x, y) dx dy. \quad (4.1-19)$$

Η Εξ. (4.1-19) αποτελεί την αδιάστατη ροή μάζας που διέρχεται από τον ορθογωνικό αγωγό και θα αποτελέσει μέτρο σύγκρισης της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων με την μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων.

Ένα δεύτερο μακροσκοπικό μέγεθος, το οποίο θα αποτελέσει μέτρο σύγκρισης των δύο μεθόδων είναι ο συντελεστής οπισθέλκουσας που αναπτύσσεται στα τοιχώματα του αγωγού. Για την εύρεση του συντελεστή οπισθέλκουσας απαραίτητος είναι ο ορισμός της διατμητικής τάσης τόσο στο επίπεδο xz όσο και όσο επίπεδο yz του αγωγού. Ολοκληρώνοντας τις δύο διατμητικές τάσεις στα αντίστοιχα τοιχώματα προκύπτει ο συντελεστής οπισθέλκουσας που αναπτύσσεται στα τοιχώματα. Συγκεκριμένα οι διατμητικές τάσεις στα αντίστοιχα δύο επίπεδα ορίζονται ως

$$\Pi_{xz}(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty-\infty}^{\infty} \int_{-\infty-\infty}^{\infty} Y c_x e^{-c_x^2 - c_y^2} dc_x dc_y \quad (4.1-20)$$

και

$$\Pi_{yz}(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty-\infty}^{\infty} \int_{-\infty-\infty}^{\infty} Y c_y e^{-c_x^2 - c_y^2} dc_x dc_y \quad (4.1-21)$$

όπου Y η συνάρτηση κατανομής.

Η δύναμη τριβής σε διαστατή μορφή για τον ορθογώνιο αγωγό δίνεται από την σχέση

$$F_d = 2 \left\{ \int_{-H/W}^{H/W} \Pi'_{xz} dy' + \int_{-W/2}^{-W/2} \Pi'_{yz} dx' \right\} \quad (4.1-22)$$

η οποία προκύπτει απο ολοκλήρωση κατα μήκος των τοιχωμάτων των αντίστοιχων διατμητικών τάσεων. Αν εφαρμοσθεί η παρακάτω αδιαστατοποίηση

$$y = \frac{y'}{H}, \quad x = \frac{x'}{H} \quad \text{και} \quad \Pi = \frac{\Pi'}{2P_0}$$

τότε η Εξ. (4.1-22) γράφεται σε αδιάστατη μορφή ως

$$F_d = 2(2P_0)H \left\{ \int_{-1/2}^{1/2} \Pi_{xz} dy + \int_{-W/2H}^{-W/2H} \Pi_{yz} dx \right\} \quad \eta \quad (4.1-23)$$

$$\frac{F_d}{2(H+W)} = \frac{2(2P_0)H}{2(H+W)} \left\{ \int_{-1/2}^{1/2} \Pi_{xz} dy + \int_{-W/2H}^{-W/2H} \Pi_{yz} dx \right\} \quad \eta$$

$$\frac{F_d}{Perimeter} = \frac{2(2P_0)}{2\left(1 + \frac{W}{H}\right)} \left\{ \int_{-1/2}^{1/2} \Pi_{xz} dy + \int_{-W/2H}^{-W/2H} \Pi_{yz} dx \right\} \quad (4.1-24)$$

Ο συντελεστής οπισθέλκουσας δίνεται από την σχέση

$$C_d = \frac{F_d}{P_0 \times Perimeter} = \frac{2}{\left(1 + \frac{W}{H}\right)} \left\{ \int_{-1/2}^{1/2} \Pi_{xz} dy + \int_{-W/2H}^{-W/2H} \Pi_{yz} dx \right\} \quad (4.1-25)$$

Όπου οι αδιάστατες διατμητικές τάσεις Π_{xz} , Π_{yz} προκύπτουν απο τις Εξς. 4.1-20 και 4.1-21 αντίστοιχα. Τονίζεται ότι ο συντελεστής οπισθέλκουσας εξαρτάται μόνο από την γεωμετρία και είναι ανεξάρτητος της παραμέτρου αραιοποίησης δ .

4.2 Μαθηματική επεξεργασία

Η Εξ. (4.1-10) είναι δυνατόν να εκφραστεί σε πολικό σύστημα αναφοράς συμφωνά με τον παρακάτω μετασχηματισμό

$$(x, y) \rightarrow (s, \varphi) \quad \text{και} \quad (c_x, c_y) \rightarrow (c_p, \varphi), \quad c_p = \sqrt{c_x^2 + c_y^2}, \quad c_x = c_p \cos \varphi, \quad c_y = c_p \sin \varphi \quad (4.2-1)$$

Το γεγονός αυτό απλοποιεί την μαθηματική επεξεργασία και την διαδικασία προγραμματισμού της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων. Παράλληλα η Εξ. (4.1-12) εκφράζεται κατά μήκος των χαρακτηριστικών του προβλήματος και όχι συναρτήσει των χωρικών συντεταγμένων (x, y) (Σχήμα 4.2). Η εξίσωση που προκύπτει είναι η ακόλουθη

$$-c_p \frac{\partial Y(s, c_p, \varphi)}{\partial s} + \delta Y(s, c_p, \varphi) = \delta u - \frac{1}{2} \quad (4.2-2)$$

όπου s η νέα ανεξάρτητη μεταβλητή κατά μήκος της εκάστοτε χαρακτηριστικής του προβλήματος. Η Εξ. (4.1-14) σε πολικό σύστημα αναφοράς, μετασχηματίζεται ως

$$u(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi\infty} \int_0^{\infty} Y(s, c_p, \varphi) c_p e^{-c_p^2} dc_p d\varphi \quad (4.2-3)$$

με την Ιακωβιανή ορίζουσα του μετασχηματισμού να ισούται με c_p . Οι διατμητικές τάσεις που δίνονται από τις Εξς. (4.1-20) και (4.1-21) μετασχηματίζονται αντίστοιχα ως

$$\Pi_{xz}(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi\infty} \int_0^{\infty} Y c_p^2 e^{-c_p^2} \cos \varphi dc_p d\varphi \quad (4.2-4)$$

και

$$\Pi_{yz}(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi\infty} \int_0^{\infty} Y c_p^2 e^{-c_p^2} \sin \varphi dc_p d\varphi \quad (4.2-5)$$

Η διατύπωση της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων ξεκινά γράφοντας την Εξ. (4.2-1) στην μορφή

$$\frac{\partial Y}{\partial s} - \frac{\delta}{c_p} Y(s, c_p, \varphi) = -\frac{\delta}{c_p} u(x, y) + \frac{1}{2c_p} \quad (4.2-6)$$

και επιλύοντας την ως μια διαφορική εξίσωση 1^{ου} βαθμού της μορφής

$$y'(s) + ay(s) = b \quad (4.2-7)$$

με $a = -\frac{\delta}{c_p}$ και $b = -\frac{\delta}{c_p} u + \frac{1}{2c_p}$. Εφαρμόζοντας τον ολοκληρωτικό παράγοντα

στην Εξ. (4.2-6) προκύπτει $P(s) = \int a ds = \int -\frac{\delta}{c_p} ds = -\frac{\delta s}{c_p}$ και $I = e^{P(s)} = e^{-\frac{\delta s}{c_p}}$. Η Εξ.

(4.2-6) πολλαπλασιάζεται με τον όρο $I = e^{-\frac{\delta s}{c_p}}$ και προκύπτει

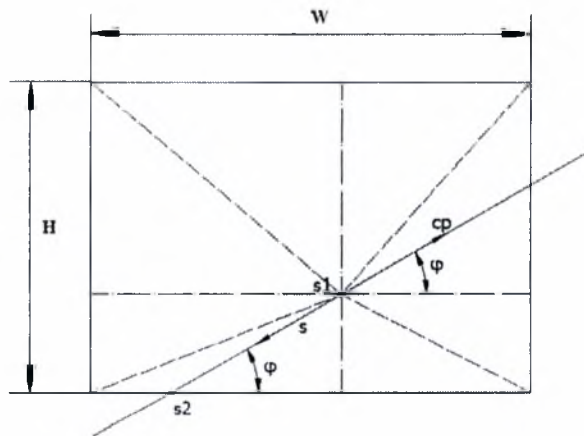
$$e^{-\frac{\delta}{c_p}} \frac{\partial Y}{\partial s} - \frac{\delta}{c_p} e^{-\frac{\delta}{c_p}} Y = -\frac{\delta}{c_p} e^{-\frac{\delta}{c_p}} u + \frac{1}{2c_p} e^{-\frac{\delta}{c_p}} \Rightarrow$$

$$\frac{d}{ds} \left[Y e^{-\frac{\delta}{c_p}} \right] = -\frac{\delta}{c_p} e^{-\frac{\delta}{c_p}} u + \frac{1}{2c_p} e^{-\frac{\delta}{c_p}} \quad (4.2-8)$$

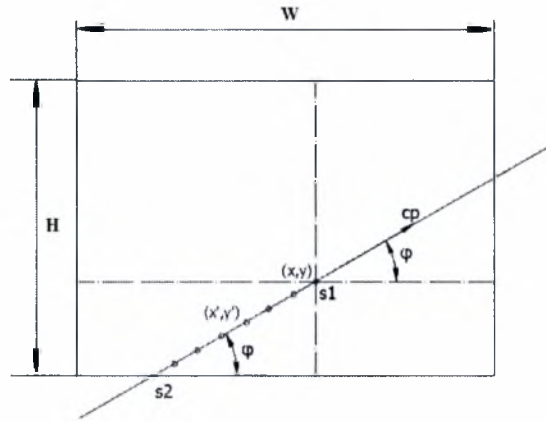
Η Εξ. (4.2-8) ολοκληρώνεται κατά μήκος της χαρακτηριστικής από το σημείο s_1 έως το σημείο s_2 , όπως απεικονίζεται στο Σχήμα 4.2. Το σημείο s_1 αντιστοιχεί στον χωρικό κόμβο και είναι το σημείο εκκίνησης της ολοκλήρωσης κατά μήκος της χαρακτηριστικής. Το σημείο s_2 αντιστοιχεί στο σημείο όπου η χαρακτηριστική τέμνει το τοίχωμα κατά την αντίθετη κατεύθυνση. Τότε προκύπτει

$$\int_{s_1}^{s_2} \frac{d}{ds} \left[Y e^{-\frac{\delta}{c_p}} \right] ds = \int_{s_1}^{s_2} \left(-\frac{\delta}{c_p} e^{-\frac{\delta}{c_p}} u + \frac{1}{2c_p} e^{-\frac{\delta}{c_p}} \right) ds \Rightarrow$$

$$\int_{s_1}^{s_2} \frac{d}{ds} \left[Y e^{-\frac{\delta}{c_p}} \right] ds = -\frac{1}{c_p} \int_{s_1}^{s_2} \left(\delta u - \frac{1}{2} \right) e^{-\frac{\delta}{c_p}} ds \quad (4.2-9)$$



Σχήμα 4.2: Γεωμετρία καναλιού σε πολικό σύστημα αναφοράς.



Σχήμα 4.3: Διακριτοποίηση της χαρακτηριστικής.

Πραγματοποιείται αλλαγή μεταβλητής θέτοντας όπου $s' = s - s_1$. Ορίζεται σαν $s_0 = |s_2 - s_1|$ η απόσταση κάθε κόμβου από το τοίχωμα κατά μήκος της χαρακτηριστικής που αντιστοιχεί σε συγκεκριμένη γωνία φ . Τότε η Εξ. (4.2-9) γράφεται

$$\int_0^{s_0} \frac{d}{ds'} \left[Y e^{-\frac{\delta(s'+s_1)}{c_p}} \right] ds' = -\frac{1}{c_p} \int_0^{s_0} \left(\delta u - \frac{1}{2} \right) e^{-\frac{\delta(s'+s_1)}{c_p}} ds' \Rightarrow$$

$$Y_b e^{-\frac{\delta(s_0+s_1)}{c_p}} - Y e^{-\frac{\delta s_1}{c_p}} = -\frac{1}{c_p} \int_0^{s_0} \left(\delta u - \frac{1}{2} \right) e^{-\frac{\delta(s'+s_1)}{c_p}} ds'$$

Εφαρμόζοντας την συνοριακή συνθήκη που δίνεται από την Εξ. (4.1-15), προκύπτει

$$\underbrace{Y_b e^{-\frac{\delta s_0}{c_p}}}_0 - Y = -\frac{1}{c_p} \int_0^{s_0} \left(\delta u - \frac{1}{2} \right) e^{-\frac{\delta s'}{c_p}} ds' \Rightarrow Y(s, c_p, \varphi) = \frac{1}{c_p} \int_0^{s_0} \left(\delta u - \frac{1}{2} \right) e^{-\frac{\delta s'}{c_p}} ds' \Rightarrow$$

$$Y(s, c_p, \varphi) = \frac{\delta}{c_p} \int_0^{s_0} u(x', y') e^{-\frac{\delta s'}{c_p}} ds' - \frac{1}{2c_p} \int_0^{s_0} e^{-\frac{\delta s'}{c_p}} ds' \quad (4.2-10)$$

Σημειώνεται ότι ο υπολογισμός των αποστάσεων s_0 για κάθε γωνία φ περιγράφεται στο Παράρτημα Γ. Αντικαθιστώντας την Εξ. (4.2-10) στην εξίσωση Εξ. (4.2-3) προκύπτει ότι

$$\begin{aligned}
u(x, y) &= \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi\infty} \int_0^{2\pi\infty} Y c_p e^{-c_p^2} dc_p d\varphi = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi\infty} \int_0^{2\pi\infty} \left\{ \frac{1}{c_p} \int_0^{s_0} \left(\delta u(x', y') - \frac{1}{2} \right) e^{-\frac{\delta s}{c_p}} ds \right\} c_p e^{-c_p^2} dc_p d\varphi = \\
&= \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi s_0} \int_0^{2\pi} \left\{ \delta u(x', y') T_0(\delta s) - \frac{1}{2} T_0(\delta s) \right\} ds d\varphi \Rightarrow \\
u(x, y) &= \frac{\delta}{\pi} \int_0^{2\pi s_0} \int_0^{2\pi} T_0(\delta s) u(x', y') ds d\varphi + \frac{1}{2\pi\delta} \int_0^{2\pi} T_1(\delta s_0) d\varphi - \frac{1}{2\delta} \quad (4.2-11)
\end{aligned}$$

όπου x', y' τα σημεία πάνω στην χαρακτηριστική (Σχήμα 4.3), τα οποία συνδέονται με το χωρικό πλέγμα σύμφωνα με τις παρακάτω σχέσεις

$$x' = x - \cos\varphi ds \quad (4.2-12\alpha)$$

και

$$y' = y - \sin\varphi ds. \quad (4.2-12\beta)$$

Όμοια αντικαθιστώντας την Εξ. (4.2-10) στις Εξ. (4.2-4) και (4.2-5) προκύπτει ότι

$$\Pi_{xz}(x, y) = \frac{\delta}{\pi} \int_0^{2\pi s_0} \int_0^{2\pi} T_1(\delta s) u(x', y') \cos\varphi ds d\varphi + \frac{1}{2\pi\delta} \int_0^{2\pi} T_2(\delta s_0) \cos\varphi d\varphi \quad (4.2-13)$$

και

$$\Pi_{yz}(x, y) = \frac{\delta}{\pi} \int_0^{2\pi s_0} \int_0^{2\pi} T_1(\delta s) u(x', y') \sin\varphi ds d\varphi + \frac{1}{2\pi\delta} \int_0^{2\pi} T_2(\delta s_0) \sin\varphi d\varphi \quad (4.2-14)$$

Οι όροι T_0, T_1, T_2 , είναι οι συναρτήσεις Abramowitz που υπενθυμίζεται ότι ορίζονται γενικά ως

$$T_n(x) = \int_0^{\infty} \mu^n e^{-\mu^2 - \frac{x}{\mu}} d\mu \quad \text{για } n = 0,1,2 \quad (4.2-15)$$

Ο υπολογισμός των συναρτήσεων Abramowitz, όπως προαναφέρθηκε στο Κεφάλαιο 3, περιγράφεται αναλυτικά στο Παράρτημα Α.

Η Εξ. (4.2-11) είναι δυνατόν να διατυπωθεί και στην περίπτωση όπου η παράμετρος αραιοποίησης $\delta \rightarrow 0$ δηλαδή στην πλήρως ελεύθερη μοριακή περιοχή. Καθώς το $\delta \approx 0$ τότε η Εξ. (4.2-11) γράφεται στην μορφή

$$u(x, y) \approx \frac{1}{2\pi\delta} \int_0^{2\pi} T_1(\delta s_0) d\varphi - \frac{1}{2\delta} \quad (4.2-16)$$

Εάν η συνάρτηση Abramowitz T_1 αντικατασταθεί από την ασυμπτωτική έκφραση (A.3), η οποία παρατίθεται στο Παράρτημα Α, κάνοντας χρήση των δύο πρώτων όρων του αναπτύγματος, προκύπτει ότι

$$u(x, y) \approx \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \int_0^{2\pi} s_0 d\varphi \quad (4.2-17)$$

όπου και αποτελεί την εξίσωση της μακροσκοπικής ταχύτητας στην ελεύθερη μοριακή περιοχή. Πρέπει να τονιστεί ότι η Εξ. (4.2-17) είναι ανεξάρτητη της παραμέτρου αραιοποίησης δ ενώ εξαρτάται από τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του προβλήματος.

4.3 Διακριτοποίηση

Στην παράγραφο αυτή θα περιγράψουν δυο διαφορετικές μεθοδολογίες διακριτοποίησης που αφορούν το πρόβλημα ροής σε ορθογώνιο αγωγό. Και στις δύο περιπτώσεις εφαρμόζεται ομοιόμορφο πλέγμα, δηλαδή τα Δx , Δy παραμένουν αμετάβλητα. Η πρώτη μεθοδολογία αφορά την διακριτοποίηση της μακροσκοπικής ταχύτητας κατά μήκος των χαρακτηριστικών του προβλήματος ενώ στην δεύτερη μεθοδολογία η μακροσκοπική ταχύτητα υπολογίζεται στο γεωμετρικό μέσο των κελιών του πλέγματος.

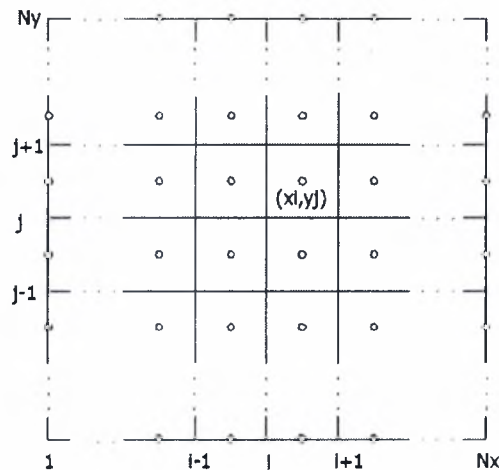
4.3.1 Μεθοδολογία I

Στην συγκεκριμένη μεθοδολογία εισάγονται οι όροι ‘κελί’, ‘κόμβος’ και ‘συνεισφορά’, τρεις έννοιες οι οποίες θα χρησιμοποιηθούν για την περιγραφή της συγκεκριμένης διακριτοποίησης. Συγκεκριμένα, το πεδίο ροής χωρίζεται σε κελιά (Σχήμα 4.4). Στο γεωμετρικό κέντρο κάθε κελιού βρίσκεται και ένας κόμβος (x, y) . Στο εσωτερικό κάθε κελιού θεωρείται ότι παραμένουν σταθερές όλες οι μακροσκοπικές ποσότητες. Ο υπολογισμός των μακροσκοπικών ιδιοτήτων σε έναν συγκεκριμένο κόμβο του πεδίου, εξαρτάται άμεσα από τις μακροσκοπικές ιδιότητες

όλων των άλλων κελιών του χωρικού πλέγματος. Η δημιουργία του χωρικού πλέγματος προκύπτει από τις παρακάτω σχέσεις

$$x_i = \left(i - \frac{1}{2}\right)\Delta x \text{ και } y_j = \left(j - \frac{1}{2}\right)\Delta y, \quad 1 \leq i \leq N_x, \quad 1 \leq j \leq N_y$$

όπου $\Delta x = \frac{A}{N_x}$ και $\Delta y = \frac{1}{N_y}$, και $A = \frac{H}{W}$ ο λόγος των δύο πλευρών του αγωγού. Οι μακροσκοπικές ποσότητες υπολογίζονται στους κόμβους, των οποίων οι συντεταγμένες είναι (x_i, y_j) (Σχήμα 4.4).



Σχήμα 4.4: Πλέγμα διακριτοποίησης Μεθοδολογίας I.

Η Εξ. (4.2-11) γράφεται στην μορφή

$$u(x_i, y_j) = \sum_{n=1}^{N_x} \sum_{m=1}^{N_y} u^{nm} \int_{y_n - \Delta y/2}^{y_n + \Delta y/2} \int_{x_m - \Delta x/2}^{x_m + \Delta x/2} K(x_i, y_j : x', y') dx' dy' + \frac{1}{2\pi\delta} \int_0^{2\pi} T_1(\delta s_0) d\varphi - \frac{1}{2\delta} \quad (4.3.1-1)$$

ή εναλλακτικά

$$u^{ij} = \sum_{n=1}^{N_x} \sum_{m=1}^{N_y} K^{ij, mn} u^{mn} + \frac{1}{2\pi\delta} \sum_{k=1}^M T_1(\delta s_{0,k}) \Delta\varphi - \frac{1}{2\delta} \quad (4.3.1-2)$$

όπου η συνεισφορά κάθε κελιού (m, n) στον χωρικό κόμβο (i, j) εκφράζεται από το ολοκλήρωμα K , το οποίο ισούται με

$$K^{ij, mn} = \int_{y_n - \Delta y/2}^{y_n + \Delta y/2} \int_{x_m - \Delta x/2}^{x_m + \Delta x/2} K(x_i, y_j : x', y') dx' dy' = \frac{\delta}{\pi} \int_0^{s_0^*} \int_0^{2\pi} T_0(\delta s) ds d\varphi = \frac{1}{\pi} \int [T_1(0) - T_1(\delta s_0^*)] d\varphi. \quad (4.3.1-3)$$

Η απόσταση s_0^* εκφράζει την απόσταση του κόμβου (i, j) από την εκάστοτε πλευρά του κελιού (m, n) και μεταβάλλεται συναρτήσει της γωνίας φ . Η Εξ. (4.3.1-2) ισχύει για όλους τους κόμβους του πλέγματος ενώ ο υπολογισμός των μακροσκοπικών ποσοτήτων στα τοιχώματα του αγωγού είναι δυνατόν να πραγματοποιηθεί μετά την επίλυση του πεδίου ροής στους εσωτερικούς κόμβους.

Ανάλογα με την θέση του κελιού ως προς τον ενδιάμεσο κόμβο, διακρίνονται δύο περιπτώσεις:

- Όταν $i = n$ και $j = m$ τότε το ολοκλήρωμα K παίρνει την μορφή

$$K^{ij,ij} = \frac{8}{\pi} \int_0^{\pi/4} [T_1(0) - T_1(\delta s_0^*)] d\varphi = \frac{8}{\pi} \int_0^{\pi/4} \left[\frac{1}{2} - T_1\left(\delta \frac{\Delta x/2}{\cos\varphi}\right) \right] d\varphi = 1 - \frac{8}{\pi} \int_0^{\pi/4} T_1\left(\delta \frac{\Delta x/2}{\cos\varphi}\right) d\varphi \quad (4.3.1-4)$$

και αντιστοιχεί στην συνεισφορά του κελιού (i, j) στον ενδιάμεσο κόμβο (i, j) . Η απόσταση s_0^* δίνεται από την σχέση

$$s_0^* = \frac{\Delta x/2}{\cos\varphi}$$

- Όταν $i \neq n$ και $j \neq m$ τότε το ολοκλήρωμα K παίρνει την μορφή

$$K^{ij,mn} = \frac{1}{\pi} \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} \{T_1(0) - T_1(\delta s_{0,1}^*)\} d\varphi + \frac{1}{\pi} \int_{\varphi_2}^{\varphi_3} \{T_1(0) - T_1(\delta s_{0,2}^*)\} d\varphi + \\ + \frac{1}{\pi} \int_{\varphi_3}^{\varphi_4} \{T_1(0) - T_1(\delta s_{0,3}^*)\} d\varphi + \frac{1}{\pi} \int_{\varphi_4}^{\varphi_1} \{T_1(0) - T_1(\delta s_{0,4}^*)\} d\varphi$$

ή

$$K^{ij,mn} = -\frac{1}{\pi} \left\{ \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} T_1(\delta s_{0,1}^*) d\varphi + \int_{\varphi_2}^{\varphi_3} T_1(\delta s_{0,2}^*) d\varphi + \int_{\varphi_3}^{\varphi_4} T_1(\delta s_{0,3}^*) d\varphi + \int_{\varphi_4}^{\varphi_1} T_1(\delta s_{0,4}^*) d\varphi \right\} \quad (4.3.1-5)$$

όπου οι γωνίες $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4$ απεικονίζονται στο Σχήμα 4.5 και υπολογίζονται από τις παρακάτω σχέσεις

$$\varphi_1 = \text{atan}\left(\frac{y_j - y_m + \Delta y / 2}{x_i - x_n - \Delta x / 2}\right), \varphi_2 = \text{atan}\left(\frac{y_j - y_m - \Delta y / 2}{x_i - x_n - \Delta x / 2}\right) \quad (4.3.1-6)$$

$$\varphi_3 = \text{atan}\left(\frac{y_j - y_m - \Delta y / 2}{x_i - x_n + \Delta x / 2}\right), \varphi_4 = \text{atan}\left(\frac{y_j - y_m + \Delta y / 2}{x_i - x_n + \Delta x / 2}\right) \quad (4.3.1-7)$$

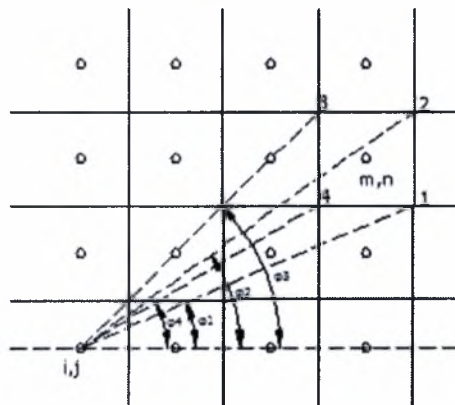
Επίσης οι αποστάσεις $s_{0,1}^*, s_{0,2}^*, s_{0,3}^*, s_{0,4}^*$ απεικονίζονται στο Σχήμα 4.5 και δίνονται από τις σχέσεις

$$s_{0,1}^* = \frac{x_i - x_n - \Delta x / 2}{\cos \varphi}, s_{0,2}^* = \frac{y_j - y_m - \Delta y / 2}{\sin \varphi} \quad (4.3.1-8)$$

$$s_{0,3}^* = \frac{x_i - x_n + \Delta x / 2}{\cos \varphi}, s_{0,4}^* = \frac{y_j - y_m + \Delta y / 2}{\sin \varphi} \quad (4.3.1-9)$$

Στην συγκεκριμένη μεθοδολογία επιλέχθηκε η χρήση τετραγωνικών κελιών όπου ισχύει ότι $\Delta x = \Delta y$. Το ολοκλήρωμα K περιέχει την συνεισφορά κάθε κελιού (m, n) σε ένα τυχαίο κόμβο (i, j) και αποτελεί έναν τετραδιάστατο πίνακα $K^{ij, mn}$. Υπολογιστικά και σε περιπτώσεις μεγάλου αριθμού κόμβων ο πίνακας $K^{ij, mn}$ καταλαμβάνει μεγάλο μέρος μνήμης στον υπολογιστή και καθιστά την επίλυση του προβλήματος ιδιαίτερα χρονοβόρα.

Για την μείωση της χρήσης μνήμης από τον πίνακα $K^{ij, mn}$, εξετάστηκε η συμμετρία του. Παρατηρήθηκε ότι αρκεί μόνο ο υπολογισμός της συνεισφοράς όλων των κελιών (m, n) στον κόμβο $(1, 1)$ και με τον τρόπο αυτό το ολοκλήρωμα K μετατράπηκε σε έναν διδιάστατο πίνακα, ο οποίος είναι συμμετρικός ως προς την διαγώνιο του.



Σχήμα 4.5: Συνεισφορά του κελιού (m, n) στον κόμβο (i, j) .

Κάνοντας χρήση της σχέσης

$$K^{ij,mn} = K^{11,pm} \quad (4.3.1-10)$$

όπου

$$p = |i - m| + 1 \text{ και } q = |j - n| + 1$$

είναι δυνατόν να υπολογιστούν οι συνεισφορές όλων των κελιών (m, n) σε κάθε κόμβο (i, j) .

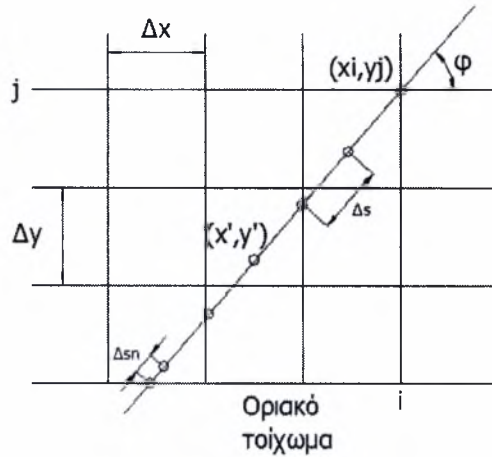
Όμοια διαδικασία ακολουθείται για την διακριτοποίηση των εξισώσεων (4.2-13) και (4.2-14) για τον υπολογισμό των δύο διατμητικών τάσεων στα αντίστοιχα τοιχώματα.

4.3.2 Μεθοδολογία II

Στην μεθοδολογία II οι ποσότητες $u(x', y')$ παραμένουν εντός της ολοκληρωτικής εξίσωσης Εξ. (4.2-11) και επομένως κατά την αριθμητική ολοκλήρωση πρέπει να είναι γνωστές. Αυτό επιτυγχάνεται με παρεμβολή βάσει των αντίστοιχων ποσοτήτων στις τέσσερις γωνίες του κελιού, εντός του οποίου βρίσκεται το σημείο (x', y') . Για την διακριτοποίηση στον φυσικό χώρο ορίζονται τα

$$\Delta x = \frac{A}{N_x} \text{ και } \Delta y = \frac{1}{N_y} \text{ όπου } A = \frac{H}{W} \text{ ο λόγος των δύο πλευρών του αγωγού. Στην}$$

συνέχεια η Εξ. (4.2-11) θα διακριτοποιηθεί στον κόμβο (x_i, y_j) του πλέγματος, όπως απεικονίζεται στο Σχήμα 4.6, ενώ (x'_k, y'_k) είναι οι κόμβοι κατά μήκος της χαρακτηριστικής που αντιστοιχεί σε γωνία φ . Για την διακριτοποίηση των γωνιών, ορίζεται αρχικά ένα $\Delta\varphi$ για τον υπολογισμό των γωνιών που κυμαίνονται από $0 \leq \varphi \leq 2\pi$. Για λόγους ασυνεχειών της συνάρτησης κατανομής επάνω στα τοιχώματα του αγωγού καθώς και για λόγους απλοποίησης του προγραμματισμού της μεθόδου δεν χρησιμοποιούνται οι τέσσερις κύριες γωνίες $0, \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2}$ και 2π . Η σχέση που χρησιμοποιείται παρατίθεται στο Παράρτημα Γ.



Σχήμα 4.6: Τμήμα χωρικού πλέγματος Μεθοδολογίας II.

Όπως προκύπτει από την Εξ. (4.2-11) είναι απαραίτητη η διακριτοποίηση της μακροσκοπικής ταχύτητας κατά μήκος της χαρακτηριστικής. Συγκεκριμένα διακριτοποιείται η απόσταση s_0 (που αντιστοιχεί σε γωνία φ) της χαρακτηριστικής από το τοίχωμα, σε συγκεκριμένο αριθμό κόμβων. Αυτό συνεπάγεται τον υπολογισμό των συναρτήσεων Abramowitz σε κάθε κόμβο (x'_k, y'_k) και σε κάθε επανάληψη, γεγονός το οποίο αυξάνει κατά πολύ τον υπολογιστικό φόρτο.

Για την αποφυγή του προβλήματος αυτού, επιλέγεται εξ αρχής ένα σταθερό διάστημα Δs , το οποίο προκύπτει εάν η κύρια διαγώνιο του αγωγού χωριστεί σε συγκεκριμένο αριθμό κόμβων. Τότε οι συναρτήσεις Abramowitz υπολογίζονται εξαρχής και αποθηκεύονται.

Στην συνέχεια, προσαρμόζοντας το σταθερό διάστημα Δs σε κάθε απόσταση s_0 , είναι αναγκαίο να μην ληφθεί υπόψη ένα μικρό διάστημα Δsn (Σχήμα 4.6), το οποίο προκύπτει από την ατελή διαίρεση της απόστασης s_0 με το σταθερό μήκος Δs . Η επιλογή αυτή εισάγει ένα σφάλμα στην μεθοδολογία, το οποίο τείνει να εξαλειφθεί εάν η διαγώνιος του αγωγού διακριτοποιηθεί σε αρκετά μεγάλο αριθμό κόμβων, το οποίο συνεπάγεται πολύ μικρό Δs και τέλος πολύ μικρό Δsn .

Η Εξ.(4.2-11) σε διακριτοποιημένη μορφή μπορεί να γραφεί ως

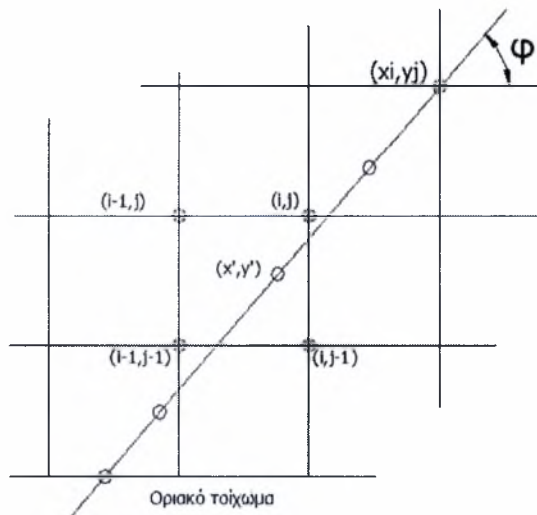
$$u(x, y) = \frac{\delta}{\pi} \sum_{i=1}^M \sum_{k=1}^K T_0(\delta k \Delta s) u(x'_k, y'_k) \Delta s \Delta \varphi + \frac{1}{2\pi\delta} \sum_{i=1}^M T_1(\delta s_{0,i}) \Delta \varphi - \frac{1}{2\delta} \quad (4.3.2-1)$$

όπου M ο αριθμός των γωνιών και K ο αριθμός των κόμβων πάνω στις χαρακτηριστικές. Ο αριθμός των κόμβων K πάνω σε κάθε χαρακτηριστική δεν παραμένει σταθερός αλλά μεταβάλλεται ανάλογα με την γωνία φ καθώς και με την απόσταση s_0 . Ο υπολογισμός των αποστάσεων s_0 παρατίθεται στο Παράρτημα Γ. Οι αριθμητικές ολοκληρώσεις τόσο στις γωνίες όσο και πάνω στις χαρακτηριστικές πραγματοποιούνται με κανόνα του τραπεζιού.

Για την ολοκλήρωση κατά μήκος της χαρακτηριστικής, είναι απαραίτητος ο υπολογισμός των ταχυτήτων u σε κάθε κόμβο (x'_k, y'_k) της απόστασης s_0 . Αυτό πραγματοποιείται κάνοντας κάθε φορά παρεμβολή μεταξύ των τεσσάρων γειτονικών χωρικών κόμβων του πλέγματος, οι οποίοι περιέχουν τον κόμβο (x'_k, y'_k) , όπως φαίνεται και στο Σχήμα 4.7. Βασική προϋπόθεση για κάθε κόμβο (x'_k, y'_k) της χαρακτηριστικής είναι ο υπολογισμός της θέσης του σε σχέση με το χωρικό πλέγμα ώστε να είναι δυνατή η χρήση των τεσσάρων γειτονικών ταχυτήτων. Οι δείκτες (ii, jj) αντιστοιχούν με τις συντεταγμένες των κόμβων (x'_k, y'_k) (Σχήμα 4.7) και συνδέονται με το χωρικό πλέγμα ως εξής

$$ii = \text{Integer} \left(\frac{x'_k}{\Delta x} \right) \text{ και } jj = \text{Integer} \left(\frac{y'_k}{\Delta y} \right)$$

Η διαδικασία *Integer* της Fortran 90 δίνει το ακέραιο μέρος της εκάστοτε διαίρεσης.



Σχήμα 4.7: Παρεμβολή μεταξύ των τεσσάρων γειτονικών σημείων.

Ο τύπος της παρεμβολής που δίνει την ταχύτητα στον κόμβο (x_k', y_k') συναρτήσει των τεσσάρων γειτονικών ταχυτήτων είναι

$$u(ii, jj) = (1 - c_1)(1 - c_2)u(i-1, j-1) + c_1(1 - c_2)u(i-1, j) + (1 - c_1)c_2u(i, j-1) + c_1c_2u(i, j) \quad (4.3.2-2)$$

όπου

$$c_1 = \frac{x_{ii}' - x_{i-1, j-1}}{x_{i, j} - x_{i-1, j-1}} \quad \text{και} \quad c_2 = \frac{y_{jj}' - y_{i-1, j-1}}{y_{i, j} - y_{i-1, j-1}} \quad (4.3.2-3)$$

Πρέπει να τονιστεί ότι η Εξ. (4.3.2-1) ισχύει μόνο για τους εσωτερικούς κόμβους, ενώ στην περίπτωση των τεσσάρων τοιχωμάτων και τεσσάρων γωνιακών κόμβων η Εξ. (4.3.2-1) διαφοροποιείται ως προς την ολοκλήρωση ως προς την γωνία φ .

Πιο συγκεκριμένα σε ένα τυχαίο κόμβο του αριστερού τοιχώματος, δεν έχει νόημα η ολοκλήρωση σε όλο το 2π , αλλά αρκεί η ολοκλήρωση στο διάστημα $\left[\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}\right]$ που αντιστοιχεί σε συνολική γωνία π . Το διάστημα ολοκλήρωσης $\left[\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}\right]$ περιέχει τις χαρακτηριστικές των σωματιδίων που προσπίπτουν στο τοίχωμα, ενώ τα σωματίδια που εκπέμπονται από αυτό, λόγω οριακών συνθηκών, έχουν ταχύτητες με κατανομή Maxwell και θεωρούνται γνωστές. Όμοια η μεθοδολογία αυτή εφαρμόζεται και στα τρία εναπομείναντα τοιχώματα. Αντίστοιχα προκύπτουν εκφράσεις και για τους τέσσερις γωνιακούς κόμβους. Πιο συγκεκριμένα στον κάτω αριστερό κόμβο αρκεί η ολοκλήρωση στο διάστημα $\left[\pi, \frac{3\pi}{2}\right]$ που αντιστοιχεί σε συνολική γωνία $\frac{\pi}{2}$.

Όλες οι εκφράσεις που προκύπτουν για τα τέσσερα τοιχώματα και τους τέσσερις γωνιακούς κόμβους δίνονται παρακάτω:

$$u\left(-\frac{W}{2H}, y\right) = \frac{\delta}{\pi} \int_0^{\frac{3\pi}{2}} \int_{T_0}^{S_0} (\delta s) u(x', y') ds d\varphi + \frac{1}{2\pi\delta} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{3\pi}{2}} T_1(\delta s_0) d\varphi - \frac{1}{4\delta} \quad (4.3.2-4)$$

$$u\left(x, -\frac{1}{2}\right) = \frac{\delta}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_{T_0}^{S_0} (\delta s) u(x', y') ds d\varphi + \frac{1}{2\pi\delta} \int_{\pi}^{2\pi} T_1(\delta s_0) d\varphi - \frac{1}{4\delta} \quad (4.3.2-5)$$

$$u\left(\frac{W}{2H}, y\right) = \frac{\delta}{\pi} \int_{\frac{3\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \int_{T_0}^{S_0} (\delta s) u(x', y') ds d\varphi + \frac{1}{2\pi\delta} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} T_1(\delta s_0) d\varphi - \frac{1}{4\delta} \quad (4.3.2-6)$$

$$u\left(x, \frac{1}{2}\right) = \frac{\delta}{\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{S_0} T_0(\delta s) u(x', y') ds d\varphi + \frac{1}{2\pi\delta} \int_0^{\pi} T_1(\delta s_0) d\varphi - \frac{1}{4\delta} \quad (4.3.2-7)$$

$$u\left(-\frac{W}{2H}, -\frac{1}{2}\right) = \frac{\delta}{\pi} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{3\pi}{2}} \int_0^{S_0} T_0(\delta s) u(x', y') ds d\varphi + \frac{1}{2\pi\delta} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{3\pi}{2}} T_1(\delta s_0) d\varphi - \frac{1}{8\delta} \quad (4.3.2-8)$$

$$u\left(\frac{W}{2H}, -\frac{1}{2}\right) = \frac{\delta}{\pi} \int_{\frac{3\pi}{2}}^{\frac{2\pi}{2}} \int_0^{S_0} T_0(\delta s) u(x', y') ds d\varphi + \frac{1}{2\pi\delta} \int_{\frac{3\pi}{2}}^{\frac{2\pi}{2}} T_1(\delta s_0) d\varphi - \frac{1}{8\delta} \quad (4.3.2-9)$$

$$u\left(\frac{W}{2H}, \frac{1}{2}\right) = \frac{\delta}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{S_0} T_0(\delta s) u(x', y') ds d\varphi + \frac{1}{2\pi\delta} \int_0^{\frac{\pi}{2}} T_1(\delta s_0) d\varphi - \frac{1}{8\delta} \quad (4.3.2-10)$$

$$u\left(-\frac{W}{2H}, \frac{1}{2}\right) = \frac{\delta}{\pi} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} \int_0^{S_0} T_0(\delta s) u(x', y') ds d\varphi + \frac{1}{2\pi\delta} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} T_1(\delta s_0) d\varphi - \frac{1}{8\delta} \quad (4.3.2-11)$$

Τελικά προκύπτει ότι για την επίλυση όλου του πεδίου ταχυτήτων είναι απαραίτητη η επίλυση και των εννέα παραπάνω εξισώσεων (4.2-11, 4.3.2-4 ÷ 11) σε αντίθεση με την Μεθοδολογία Ι όπου είχαμε μια εξίσωση για όλους τους κόμβους του πλέγματος.

Οι εννέα παραπάνω εξισώσεις επιλύονται ταυτόχρονα με επαναληπτική διαδικασία, στην οποίες θεωρούνται συγκεκριμένες αρχικές συνθήκες για την μακροσκοπική ταχύτητα και συγκεκριμένο κριτήριο τερματισμού. Βασικό χαρακτηριστικό της επαναληπτικής διαδικασίας είναι ότι σε κάθε νέα επανάληψη χρησιμοποιούνται οι τιμές των $u(x, y)$ από την προηγούμενη. Σε κάθε νέα επανάληψη εξετάζεται εάν το κριτήριο τερματισμού ικανοποιείται από όλα τα $u(x, y)$ για την συνέχιση της επαναληπτικής διαδικασίας ή την έξοδο από αυτήν και τον υπολογισμό της αδιάστατης ροής μάζας που διέρχεται από τον αγωγό.

4.4 Αριθμητικά Αποτελέσματα

Τα αριθμητικά αποτελέσματα που ακολουθούν αφορούν την επίλυση της ροής σε ορθογωνικό αγωγό τόσο με την μέθοδο των ολοκληρωτικών εξισώσεων (IMM) όσο και με την μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων (DVM). Στόχος είναι η συστηματική αξιολόγηση και πιστοποίηση των διαφόρων διακριτοποιήσεων στην μέθοδο των ολοκληρωτικών εξισώσεων και επίσης η σύγκριση της μεθόδου των

ολοκληρωτικών εξισώσεων με την μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων.

Οι Πίνακες 4.1 ÷ 4.6 περιέχουν αποτελέσματα με τις μεθόδους IMM και DVM για την αδιάστατη ροή μάζας, με διαφορετικά αριθμητικά πλέγματα, διαφορετική τιμή του λόγου A των δύο πλευρών του αγωγού καθώς και με διαφορετικές τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ . Οι Πίνακες 4.7 ÷ 4.8 περιέχουν τον συντελεστή οπισθέλκουσας για τις δύο μεθόδους και για διαφορετική τιμή του λόγου A των δύο πλευρών του αγωγού. Οι τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης επιλέχθηκαν έτσι ώστε να καλύπτονται όλες οι περιοχές ροής, από την ελεύθερη μοριακή περιοχή έως την υδροδυναμική περιοχή. Πρέπει να τονιστεί ότι τα αποτελέσματα για την μέθοδο IMM αφορούν μόνο την πρώτη μεθοδολογία διακριτοποίησης που περιγράφηκε αναλυτικά στην Παράγραφο 4.3.1.

Σε όλα τα αποτελέσματα χρησιμοποιήθηκε κριτήριο τερματισμού ίσο με 1.0(-7). Επίσης για την μέθοδο DVM ο απαιτούμενος αριθμός των μοριακών ταχυτήτων για την διακριτοποίηση στον φασικό χώρο μεταβάλλεται ανάλογα της τιμής της παραμέτρου αραιοποίησης δ . Έτσι για $10^{-3} \leq \delta \leq 1.0$ επιλέχθηκαν οι 64 ρίζες ολοκλήρωσης Gauss-Legendre, ενώ για $2 \leq \delta \leq 50$ χρησιμοποιήθηκαν 16 ρίζες ολοκλήρωσης Gauss. Η συγκεκριμένη επιλογή βασίστηκε με κριτήριο την ακρίβεια των αποτελεσμάτων και την διατήρηση των επιθυμητών σημαντικών ψηφίων για όλο το εύρος της παραμέτρου αραιοποίησης δ . Η ίδια ακριβώς επιλογή εφαρμόστηκε και στην μέθοδο των ολοκληρωτικών εξισώσεων όχι όμως για την διακριτοποίηση στον φασικό χώρο αλλά για την αριθμητική ολοκλήρωση των συναρτήσεων Abramowitz.

Τόσο ο υπολογισμός των ολοκληρωμάτων Abramowitz όσο και η μέθοδος DVM περιγράφονται αναλυτικά στα Παραρτήματα Α και Β αντίστοιχα. Επίσης στο Παράρτημα Δ επισυνάπτονται όλοι οι κώδικες που χρησιμοποιήθηκαν για την εξαγωγή των αριθμητικών αποτελεσμάτων του παρόντος Κεφαλαίου 4. Οι κώδικες είναι σε γλώσσα προγραμματισμού Fortran 90 και συνοδεύονται από έναν φάκελο, ο οποίος θα περιέχει τις ρίζες και τους συντελεστές βαρύτητας αριθμητικής ολοκλήρωσης Gauss-Legendre και Gauss.

$$A = H/W = 1$$

<i>Αριθμός κόμβων</i>	δ	<i>Αριθμός επαναλήψεων</i>	<i>CPU time(sec)</i>	<i>G</i>
21x21	10^{-3}	4	8.9(-1)	8.367412(-1)
	10^{-2}	5	1	8.277603(-1)
	10^{-1}	8	1.6	7.932624(-1)
	1	20	4.1	7.674814(-1)
	2	34	1.8	8.092446(-1)
	5	87	4.4	9.864635(-1)
	10	220	11.3	1.3162426
	50	3268	167	4.0931555
51x51	10^{-3}	4	5.2	8.369041(-1)
	10^{-2}	5	6.3	8.279244(-1)
	10^{-1}	8	10	7.934375(-1)
	1	20	25	7.677445(-1)
	2	34	11	8.095976(-1)
	5	87	27	9.870822(-1)
	10	220	70	1.317301
	50	3277	1010	4.097579
101x101	10^{-3}	4	18	8.369274(-1)
	10^{-2}	5	22	8.279479(-1)
	10^{-1}	8	35	7.934625(-1)
	1	20	88	7.677820(-1)
	2	34	36	8.096482(-1)
	5	87	92	9.871716(-1)
	10	220	233	1.317455
	50	3279	5101	4.098240

Πίνακας 4.1: Αδιάστατη ροή μάζας για τρία διαφορετικά πλέγματα με την DVM.

$$A = H/W = 1$$

<i>Αριθμός κόμβων</i>	δ	<i>Αριθμός επαναλήψεων</i>	<i>CPU time(sec)</i>	<i>G</i>
<i>21x21</i>	10^{-3}	4	5.3(-1)	8.382032(-1)
	10^{-2}	5	5.4(-1)	8.292288(-1)
	10^{-1}	8	5.6(-1)	7.948128(-1)
	1	21	6.4(-1)	7.698616(-1)
	2	35	4.6(-1)	8.125101(-1)
	5	88	7.8(-1)	9.918230(-1)
	10	217	1.7	1.321245
	50	2792	4	4.030109
<i>51x51</i>	10^{-3}	4	4.5	8.370861(-1)
	10^{-2}	5	4.7	8.281100(-1)
	10^{-1}	8	5.6	7.936507(-1)
	1	21	9	7.681586(-1)
	2	35	10	8.101979(-1)
	5	88	25	9.880219(-1)
	10	218	62	1.317404
	50	2795	774	3.920283
<i>101x101</i>	10^{-3}	4	30	8.369360(-1)
	10^{-2}	5	35	8.279583(-1)
	10^{-1}	8	48	7.934850(-1)
	1	21	106	7.678747(-1)
	2	35	136	8.097982(-1)
	5	88	334	9.874046(-1)
	10	218	812	1.317265
	50	2856	10470	3.990809

Πίνακας 4.2: Αδιάστατη ροή μάζας για τρία διαφορετικά πλέγματα με την IMM.

$$A = H/W = 0.5$$

<i>Αριθμός κόμβων</i>	δ	<i>Αριθμός επαναλήψεων</i>	<i>CPU time(sec)</i>	<i>G</i>
21x41	10^{-3}	4	1.4	1.148876
	10^{-2}	5	1.6	1.132392
	10^{-1}	8	2.6	1.073379
	1	25	8	1.042425
	2	45	4	1.117511
	5	124	10	1.415276
	10	328	30	1.958199
	50	5176	450	6.490298
51x101	10^{-3}	4	9	1.149001
	10^{-2}	5	11	1.132518
	10^{-1}	8	18	1.073511
	1	25	56	1.042600
	2	45	25	1.117727
	5	124	70	1.415615
	10	329	183	1.958754
	50	5180	2910	6.491455
101x201	10^{-3}	4	36	1.149019
	10^{-2}	5	45	1.132535
	10^{-1}	8	71	1.073530
	1	25	224	1.042625
	2	45	90	1.117749
	5	124	250	1.415640
	10	329	700	1.958784
	50	5182	11000	6.492626

Πίνακας 4.3: Αδιάστατη ροή μάζας για τρία διαφορετικά πλέγματα με την DVM.

$$A = H/W = 0.5$$

<i>Αριθμός κόμβων</i>	δ	<i>Αριθμός επαναλήψεων</i>	<i>CPU time(sec)</i>	<i>G</i>
21x41	10^{-3}	4	1.1	1.149778
	10^{-2}	5	1.2	1.133315
	10^{-1}	8	1.3	1.074453
	1	26	1.8	1.044517
	2	45	1.6	1.120527
	5	122	3.6	1.419807
	10	315	9	1.957619
	50	4194	120	6.253209
51x101	10^{-3}	4	11	1.149059
	10^{-2}	5	12	1.132582
	10^{-1}	8	16	1.073620
	1	26	35	1.042951
	2	45	50	1.118270
	5	122	140	1.416321
	10	317	277	1.957039
	50	4202	3629	6.129007
101x201	10^{-3}	4	95	1.148955
	10^{-2}	5	112	1.132477
	10^{-1}	8	164	1.073496
	1	26	476	1.042693
	2	45	688	1.117888
	5	122	1850	1.415801
	10	317	4791	1.957855
	50	4300	37576	6.259710

Πίνακας 4.4: Αδιάστατη ροή μάζας για τρία διαφορετικά πλέγματα με την IMM.

$$A = H/W = 0.1$$

<i>Αριθμός κόμβων</i>	δ	<i>Αριθμός επαναλήψεων</i>	<i>CPU time(sec)</i>	<i>G</i>
11x101	10^{-3}	4	2	1.973616
	10^{-2}	6	3	1.902170
	10^{-1}	10	5	1.665849
	1	32	16	1.424682
	2	57	6	1.490832
	5	155	13	1.866300
	10	410	34	2.590759
	50	6382	537	8.721909
31x301	10^{-3}	4	17	1.974343
	10^{-2}	6	25	1.902923
	10^{-1}	10	42	1.666769
	1	32	137	1.426683
	2	57	25	1.493949
	5	156	68	1.872946
	10	413	181	2.603609
	50	6459	2846	8.783791
51x501	10^{-3}	4	52	1.974411
	10^{-2}	6	80	1.902990
	10^{-1}	10	134	1.666845
	1	32	428	1.426845
	2	57	512	1.494202
	5	156	1411	1.873489
	10	414	3745	2.604663
	50	6465	58509	8.788986

Πίνακας 4.5: Αδιάστατη ροή μάζας για τρία διαφορετικά πλέγματα με την DVM.

$$A = H/W = 0.1$$

<i>Αριθμός κόμβων</i>	δ	<i>Αριθμός επαναλήψεων</i>	<i>CPU time(sec)</i>	<i>G</i>
<i>11x101</i>	10^{-3}	4	1.5	1.974153
	10^{-2}	6	1.6	1.903138
	10^{-1}	10	1.7	1.668670
	1	32	3	1.433640
	2	57	3	1.504750
	5	153	10	1.892249
	10	390	26	2.625570
	50	6334	409	11.010290
<i>31x301</i>	10^{-3}	4	25	1.972597
	10^{-2}	6	30	1.901463
	10^{-1}	10	40	1.666316
	1	32	100	1.427774
	2	56	171	1.495725
	5	153	461	1.875499
	10	392	1175	2.600001
	50	5017	12757	8.165196
<i>51x501</i>	10^{-3}	4	196	1.972466
	10^{-2}	6	256	1.901321
	10^{-1}	10	378	1.666111
	1	32	1059	1.427207
	2	56	1290	1.494857
	5	153	3501	1.874313
	10	393	8975	2.601705
	50	5080	116366	8.230226

Πίνακας 4.6: Αδιάστατη ροή μάζας για τρία διαφορετικά πλέγματα με την IMM.

$$C_d, H/W = 1$$

δ	<i>DVM</i>	<i>IMM</i>
0.1	0.24999	0.25001
1	0.24999	0.25003
10	0.24999	0.25057

Πίνακας 4.7: Συντελεστής οπισθέλκουσας.

$$C_d, H/W = 0.5$$

δ	<i>DVM</i>	<i>IMM</i>
0.1	0.33333	0.33333
1	0.33333	0.33347
10	0.33333	0.34042

Πίνακας 4.8: Συντελεστής οπισθέλκουσας.

$$C_d, H/W = 0.1$$

δ	<i>DVM</i>	<i>IMM</i>
0.1	0.45454	0.45478
1	0.45454	0.45650
10	0.45454	0.51129

Πίνακας 4.9: Συντελεστής οπισθέλκουσας.

4.5 Σύγκριση αποτελεσμάτων και συμπεράσματα

4.5.1 Εισαγωγή

Η συγκεκριμένη παράγραφος περιλαμβάνει την σύγκριση των αποτελεσμάτων της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων με αυτά της μεθόδου των διακριτών ταχυτήτων στο πρόβλημα της ροής σε ορθογώνιο αγωγό.

Επιλέχθηκε η παρουσίαση των αποτελεσμάτων της μεθόδου IMM μόνο για την Μεθοδολογία I που περιγράφεται στην Παράγραφο 4.3.1, διότι η συγκεκριμένη μεθοδολογία διακριτοποίησης θα μας απασχολήσει στο πρόβλημα της κοιλότητας που περιγράφεται στο Κεφάλαιο 5. Η σύγκριση των δύο μεθόδων θα πραγματοποιηθεί όσον αφορά την ακρίβεια των αποτελεσμάτων και τον απαιτούμενο υπολογιστικό χρόνο.

Βασικό χαρακτηριστικό όλων των αριθμητικών αποτελεσμάτων και για τις δύο μεθόδους στις δύο διαστάσεις (2-D) είναι ότι αποτελούν προέκταση των αποτελεσμάτων σε μία διάσταση (1-D) όπως αυτά παρουσιάστηκαν στο Κεφάλαιο 3. Το γεγονός αυτό ήταν αναμενόμενο ενώ η επέκταση της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων σε τρεις διαστάσεις (3-D) αναμένεται να εμφανίσει τα ίδια ακριβώς χαρακτηριστικά.

4.5.2 Σύγκριση της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων με την μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων

Από την παραπάνω μαθηματική επεξεργασία όπως αυτή περιγράφηκε στις Παραγράφους 4.3.1 και 4.3.2 καθώς και από τα αριθμητικά αποτελέσματα της Παραγράφου 4.4 είναι δυνατόν να εξαχθούν κάποια συμπεράσματα για την μέθοδο των ολοκληρωτικών εξισώσεων σε σύγκριση με την μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων σε προβλήματα δύο διαστάσεων, όσον αφορά την ακρίβεια και τον απαιτούμενο υπολογιστικό. Έτσι:

- Η μέθοδος των ολοκληρωτικών εξισώσεων όπως και στα μονοδιάστατα

προβλήματα αποτελεί μια μέθοδο, στην οποία διακριτοποιείται μόνο η προς επίλυση μακροσκοπική ποσότητα και όχι η συνάρτηση κατανομής. Η ολοκληρωτική εξίσωση 4.2-9 αποτελεί μια έκφραση κλειστής μορφής, η οποία μπορεί σύμφωνα με την πρώτη μεθοδολογία διακριτοποίησης, να διακριτοποιηθεί στο γεωμετρικό μέσο των κελιών του υπολογιστικού πεδίου.

- Στην μέθοδο των ολοκληρωτικών εξισώσεων ο αριθμός των εξισώσεων για την επίλυση και εύρεση των διαφόρων μακροσκοπικών ποσοτήτων (πχ. πυκνότητα, ταχύτητα, θερμοκρασία, πίεση κλπ) ισούται με των αριθμό των μακροσκοπικών ποσοτήτων που υπολογίζονται. Στην ροή σε ορθογώνιο αγωγό υπολογίστηκε μόνο η ταχύτητα της ροής u , γι' αυτό και χρησιμοποιήθηκε μόνο η ολοκληρωτική εξίσωση 4.2-9.
- Από τα αριθμητικά αποτελέσματα της παραγράφου 4.4 αξίζει να σημειωθεί ότι ο αριθμός των επαναλήψεων τόσο για την μέθοδο IMM όσο και για την μέθοδο DVM εξακολουθεί να είναι της ίδιας τάξης μεγέθους, γεγονός που παρατηρήθηκε και στα μονοδιάστατα προβλήματα.
- Ο υπολογιστικός χρόνος που απαιτείται για την μέθοδο των ολοκληρωτικών εξισώσεων είναι της τάξεως

$$t_{IMM} \approx (N_x \times N_y)^2$$

όπου N_x και N_y ο αριθμός των κόμβων στις δύο διευθύνσεις του υπολογιστικού πλέγματος. Ο αντίστοιχος υπολογιστικός χρόνος για την μέθοδο DVM είναι της τάξης

$$t_{DVM} \approx N_x \times N_y \times N_{c_p} \times N_\theta$$

όπου N_{c_p} είναι ο αριθμός των μοριακών ταχυτήτων ενώ N_θ ο αριθμός των γωνιών που επιλέγονται. Είναι προφανές ότι στην περίπτωση όπως το μέγεθος του χωρικού πλέγματος γίνει μεγαλύτερο από τον αριθμό των μοριακών ταχυτήτων, ο απαιτούμενος υπολογιστικός χρόνος για την IMM είναι μεγαλύτερος από αυτόν στην DVM. Το γεγονός αυτό δικαιολογείται και από τα αριθμητικά αποτελέσματα της Παραγράφου 4.4. Πράγματι συγκρίνοντας τους Πίνακες 4.1, 4.3 και 4.5 για την DVM και τους Πίνακες 4.2, 4.4 και 4.6 για την IMM καθώς και τους πίνακες τις συνολικής τριβής 4.7-4.9

παρατηρείται ότι καθώς πλησιάζουμε προς την ελεύθερη μοριακή περιοχή απαιτείται μεγάλος αριθμός μοριακών ταχυτήτων, γεγονός το οποίο ευνοεί την μέθοδο IMM όσον αφορά τον απαιτούμενο υπολογιστικό χρόνο. Αντίθετα κοντά στην υδροδυναμική περιοχή επαρκεί μικρός αριθμός μοριακών ταχυτήτων με αποτέλεσμα να ευνοείται η μέθοδος DVM.

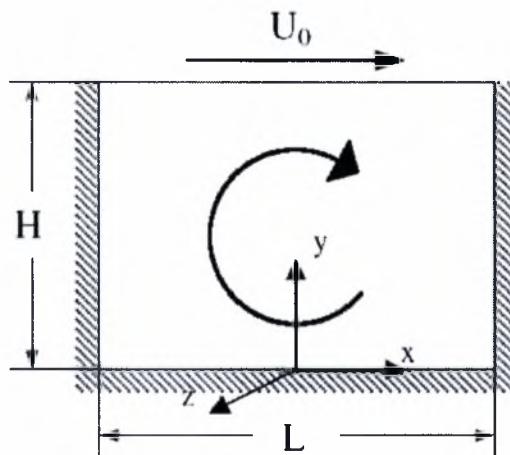
- Εξετάζοντας όπως και προηγουμένως τους Πίνακες 4.1, 4.3 και 4.5 για την DVM και τους Πίνακες 4.2, 4.4 και 4.6 για την IMM καθώς και τους πίνακες 4.7-4.9 παρατηρείται ότι η μέθοδος DVM υπερτερεί της μεθόδου IMM όσον αφορά την ακρίβεια κυρίως πλησιάζοντας στην υδροδυναμική περιοχή. Έτσι σε αραιά κυρίως πλέγματα τα αποτελέσματα των δύο μεθοδολογιών ταυτίζονται σε δυο το πολύ σημαντικά ψηφία ενώ με πυκνωση του πλέγματος επιτυγχάνουμε ταύτιση έως και τρία σημαντικά ψηφία. Γενικότερα η μέθοδος DVM παρουσιάζεται πιο ευσταθής όσον αφορά την ακρίβεια των αποτελεσμάτων και αυτό γίνεται εμφανές πλησιάζοντας το υδροδυναμικό όριο. Αντίθετα η μέθοδος των ολοκληρωτικών εξισώσεων δείχνει να υπερτερεί της μεθόδου DVM κυρίως για μεγάλες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ .
- Από τους Πίνακες 4.7-4.9 για τον συντελεστή οπισθέλκουσας που αναπτύσσεται στον αγωγό παρατηρούμε ότι και οι δύο μεθοδολογίες δίνουν το αναμενόμενο αποτέλεσμα. Μάλιστα καθώς ο λόγος $W/H \rightarrow \infty$, όπου αντιστοιχεί ροή ανάμεσα σε δύο παράλληλες πλάκες, ο συντελεστής οπισθέλκουσας τείνει στην τιμή 0.5. Πρέπει να τονιστεί ότι η μέθοδος των ολοκληρωτικών εξισώσεων χάνει ακρίβεια σε σημαντικά ψηφία καθώς προσεγγίζεται η υδροδυναμική περιοχή ενώ η μέθοδος των διακριτών ταχυτήτων παρατηρείται ότι διατηρεί την ακρίβειά της και σε μεγάλες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης.

Κεφάλαιο 5

Ροή σε κοιλότητα

5.1 Εισαγωγή

Θεωρούμε μονατομικό αέριο το οποίο περιέχεται σε διδιάστατη κοιλότητα ορθογώνιας διατομής. Τα όρια της κοιλότητας που βρίσκονται στο $y = 0$, $x = -L/2$ και $x = L/2$ είναι σταθερά ενώ το πάνω όριο που βρίσκεται στο $y = H$ κινείται με σταθερή οριζόντια ταχύτητα U_0 . Τα τοιχώματα του αγωγού βρίσκονται στην ίδια θερμοκρασία T_0 ενώ θεωρείται ότι στην z διεύθυνση η κοιλότητα είναι απείρως μεγάλη ώστε τα φαινόμενα των άκρων να μπορούν να αγνοηθούν.



Σχήμα 5.1: Γεωμετρία κοιλότητας σε καρτεσιανό σύστημα αναφοράς.

Η αδιάστατη εξίσωση Boltzmann εφαρμόζοντας το μοντέλο BGK για τον όρο των συγκρούσεων είναι

$$\xi \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \frac{P}{\mu} (f^M - f) \quad (5.1-1)$$

όπου $f = f(\mathbf{r}, \xi)$ είναι η άγνωστη συνάρτηση κατανομής, \mathbf{r} το διάνυσμα θέσης, $\xi = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$ η μικροσκοπική ταχύτητα, P η πίεση και μ το ιξώδες του ρευστού σε θερμοκρασία T . Επίσης f^M είναι η τοπική κατανομή Maxwell

$$f^M = n \left(\frac{1}{2\pi RT} \right)^{3/2} e^{-\frac{(\xi-V)^2}{2RT}} \quad (5.1-2)$$

όπου R είναι η σταθερά του αερίου, η οποία ορίζεται ως το πηλίκο της σταθεράς Boltzmann k_B δια της μοριακής μάζας m ($R = k_B / m$). Οι τοπικές μακροσκοπικές ιδιότητες της αριθμητικής πυκνότητας, της ταχύτητας και του τανυστή των τάσεων εκφράζονται συναρτήσει της συνάρτησης κατανομής ως

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} f d\xi, \quad V = \int_{-\infty}^{\infty} \xi f d\xi, \quad \text{και} \quad P_{ij} = m \int_{-\infty}^{\infty} (\xi_i - V_i)(\xi_j - V_j) f d\xi \quad (5.1-3)$$

Θεωρείται ότι η ταχύτητα κίνησης της πάνω πλάκας U_0 είναι πολύ μικρότερης της πιθανής ταχύτητας $v_0 = \sqrt{2RT_0}$ δηλαδή $U_0 \ll v_0$. Τότε το αέριο μπορεί να θεωρηθεί σε κατάσταση μη ισορροπίας και να εφαρμοσθεί γραμμικοποίηση της συνάρτησης κατανομής ως

$$f = f^0 \left(1 + h \frac{U_0}{v_0} \right) \quad (5.1-4)$$

όπου $h = h(\mathbf{r}, \xi)$ η νέα συνάρτηση κατανομής και

$$f^0 = n_0 \left(\frac{1}{2\pi RT_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{\xi^2}{2RT_0}} \quad (5.1-5)$$

η απόλυτη κατανομή ισορροπίας η οποία ορίζεται για αριθμητική πυκνότητα n_0 και θερμοκρασία αναφοράς T_0 . Αναπτύσσοντας με ανάπτυγμα Taylor την τοπική κατανομή ισορροπίας ως προς f^0 και κρατώντας όρους πρώτης τάξης προκύπτει

$$f^M = f^0 \left[1 + \rho + \frac{\xi \cdot V}{RT_0} + \tau \left(\frac{\xi^2}{2RT_0} - \frac{3}{2} \right) \right] \quad (5.1-6)$$

όπου οι αδιάστατες μακροσκοπικές ποσότητες ορίζονται ως

$$\rho = \frac{n - n_0}{n_0} \frac{v_0}{U_0} \quad \text{και} \quad \tau = \frac{T - T_0}{T_0} \frac{v_0}{U_0} \quad (5.1-7)$$

Αντικαθιστώντας της Εξ. (5.1-6) στην Εξ. (5.1-1) προκύπτει η γραμμικοποιημένη εξίσωση Boltzmann

$$\xi \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}} = \frac{P_0}{\mu_0} \left[\rho + \frac{\xi \cdot V}{RT_0} \frac{v_0}{U_0} + \tau \left(\frac{\xi^2}{2RT_0} - \frac{3}{2} \right) - h \right] \quad (5.1-8)$$

όπου P_0 και μ_0 είναι η πίεση και το ιξώδες ισορροπίας του ρευστού σε θερμοκρασία

T_0 αντίστοιχα. Αγνοώντας τις μεταβολές της θερμοκρασίας και ορίζοντας τις αδιάστατες ποσότητες

$$s = \frac{\mathbf{r}}{L}, \quad c = \frac{\xi}{\sqrt{2RT_0}} \quad \text{και} \quad \mathbf{u} = \frac{\mathbf{V}}{U_0} \quad (5.1-9)$$

όπου $s = (x, y, z)$, $c = (c_x, c_y, c_z)$ και $\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)$, προκύπτει η αδιάστατη κινητική εξίσωση

$$\mathbf{c} \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{s}} + \delta h = \delta(\rho + 2\mathbf{c} \cdot \mathbf{u}) \quad (5.1-10)$$

Η παράμετρος δ ονομάζεται παράμετρος αραιοποίησης και ισούται με

$$\delta = \frac{P_0 L}{\mu_0 v_0} \quad (5.1-11)$$

Οι αδιάστατες μακροσκοπικές ποσότητες της αριθμητικής πυκνότητας και του διανύσματος της ταχύτητας δίνονται από τις παρακάτω σχέσεις

$$\rho = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} h e^{-c^2} d\mathbf{c} \quad (5.1-12)$$

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{c} h e^{-c^2} d\mathbf{c} \quad (5.1-13)$$

και

$$\Pi_{ij} = \frac{P_{ij}}{2P_0} \frac{v_0}{U_0} = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} c_i c_j h e^{-c^2} d\mathbf{c} \quad (5.1-14)$$

Το συγκεκριμένο πρόβλημα αποτελεί ένα διδιάστατο πρόβλημα, στο οποίο τόσο η συνάρτηση κατανομής όσο και οι μακροσκοπικές ποσότητες θεωρούνται ότι παραμένουν σταθερές κατά μήκος της z διεύθυνσης, δηλαδή $h(\mathbf{s}, \mathbf{c}) = h(x, y, c_x, c_y, c_z)$. Επίσης είναι δυνατό να απαλειφθεί η μοριακή ταχύτητα c_z εφαρμόζοντας την ακόλουθη προβολή. Πολλαπλασιάζουμε την Εξ. (5.1-10) με τον όρο

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-c_z^2}$$

και ολοκληρώνουμε στο διάστημα $(-\infty, \infty)$. Η εξίσωση που προκύπτει είναι η ακόλουθη

$$c_x \frac{\partial \psi}{\partial x} + c_y \frac{\partial \psi}{\partial y} + \delta \psi = \delta(\rho + 2c_x u_x + 2c_y u_y) \quad (5.1-15)$$

όπου $\psi(x, y, c_x, c_y)$ η νέα συνάρτηση κατανομής που ορίζεται ως

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} h(x, y, c_x, c_y, c_z) e^{-c_z^2} dc_z \quad (5.1-16)$$

Οι μακροσκοπικές ποσότητες εκφράζονται συναρτήσει της νέα συνάρτησης κατανομής ψ από τις ακόλουθες σχέσεις

$$\rho(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi e^{-c_x^2 - c_y^2} dc_x dc_y \quad (5.1-17)$$

$$u_x(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi c_x e^{-c_x^2 - c_y^2} dc_x dc_y \quad (5.1-18)$$

$$u_y(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi c_y e^{-c_x^2 - c_y^2} dc_x dc_y \quad (5.1-19)$$

$$\Pi_{xy}(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi c_x c_y e^{-c_x^2 - c_y^2} dc_x dc_y \quad (5.1-20)$$

Η Εξ. (5.1-15) είναι δυνατό να εκφραστεί σε πολικό σύστημα αναφοράς συμφωνά με τον μετασχηματισμό

$$(x, y) \rightarrow (s, \varphi) \text{ και } (c_x, c_y) \rightarrow (c_p, \varphi) \text{ όπου}$$

$$c_p = \sqrt{c_x^2 + c_y^2}, c_x = c_p \cos \varphi \text{ και } c_y = c_p \sin \varphi$$

Το γεγονός αυτό απλοποιεί την μαθηματική επεξεργασία και την διαδικασία προγραμματισμού της συγκεκριμένης μεθόδου. Παράλληλα η Εξ. (5.1-15) εκφράζεται κατά μήκος των χαρακτηριστικών του προβλήματος και όχι συναρτήσει των χωρικών συντεταγμένων (x, y) (Σχήμα 5.2). Η εξίσωση που προκύπτει είναι η ακόλουθη

$$-c_p \frac{\partial \psi(s, c_p, \varphi)}{\partial s} + \delta \psi(s, c_p, \varphi) = \delta(\rho + 2c_p u_x \cos \varphi + 2c_p u_y \sin \varphi) \quad (5.1-21)$$

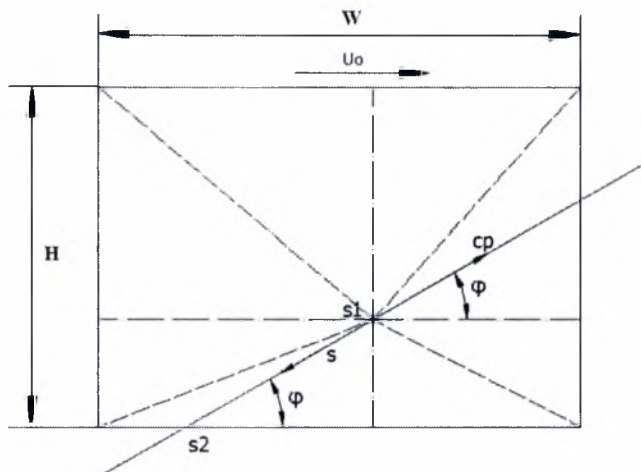
όπου s η νέα ανεξάρτητη μεταβλητή κατά μήκος της εκάστοτε χαρακτηριστικής. Οι μακροσκοπικές ποσότητες θα δίνονται τότε από τις αντίστοιχες ροπές

$$\rho(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \psi c_p e^{-c_p^2} dc_p d\varphi \quad (5.1-22)$$

$$u_x(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \psi c_p^2 e^{-c_p^2} \cos \varphi dc_p d\varphi \quad (5.1-23)$$

$$u_y(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi\omega} \int_0^{c_p^2} \psi c_p^2 e^{-c_p^2} \sin \varphi dc_p d\varphi \quad (5.1-24)$$

$$\Pi_{xy}(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi\omega} \int_0^{c_p^2} \psi c_p^3 e^{-c_p^2} \cos \varphi \sin \varphi dc_p d\varphi \quad (5.1-25)$$



Σχήμα 5.2: Γεωμετρία κοιλότητας σε πολικό σύστημα αναφοράς.

5.2 Μαθηματική Επεξεργασία

Μετασχηματίζουμε την Εξ. (5.1-21) ως εξής

$$\frac{\partial \psi}{\partial s} - \frac{\delta}{c_p} \psi(s, c_p, \varphi) = -\frac{\delta}{c_p} (\rho + 2c_p u_x \cos \varphi + 2c_p u_y \sin \varphi) \quad (5.2-1)$$

Η Εξ. (5.2-1) αντιμετωπίζεται ως μια διαφορική εξίσωση 1^{ου} βαθμού της μορφής

$$y'(s) + ay(s) = b \quad (5.2-2)$$

με $\alpha = -\frac{\delta}{c_p}$ και $b = -\frac{\delta}{c_p} (\rho + 2c_p u_x \cos \varphi + 2c_p u_y \sin \varphi)$. Εφαρμόζοντας τον

ολοκληρωτικό παράγοντα στην Εξ. (5.2-2) έχουμε

$$P(s) = \int a ds = \int -\frac{\delta}{c_p} ds = -\frac{\delta s}{c_p} \text{ και } I = e^{P(s)} = e^{-\frac{\delta s}{c_p}}.$$

Πολλαπλασιάζουμε την Εξ. (5.2-1) με τον όρο $I = e^{-\frac{\delta s}{c_p}}$ και προκύπτει

$$e^{-\frac{\delta s}{c_p}} \frac{\partial \psi}{\partial s} - \frac{\delta}{c_p} e^{-\frac{\delta s}{c_p}} \psi = -\frac{\delta}{c_p} e^{-\frac{\delta s}{c_p}} (\rho + 2c_p u_x \cos \varphi + 2c_p u_y \sin \varphi) \text{ ή}$$

$$\frac{d}{ds} \left[\psi e^{-\frac{\delta s}{c_p}} \right] = -\frac{\delta}{c_p} e^{-\frac{\delta s}{c_p}} (\rho + 2c_p u_x \cos \varphi + 2c_p u_y \sin \varphi) \quad (5.2-3)$$

Ολοκληρώνουμε την Εξ. (5.2-3) πάνω στη χαρακτηριστική από το σημείο s_1 έως το s_2 (Σχήμα 5.2), οπότε προκύπτει

$$\int_{s_1}^{s_2} \frac{d}{ds} \left[\psi e^{-\frac{\delta s}{c_p}} \right] ds = \int_{s_1}^{s_2} \left[-\frac{\delta}{c_p} e^{-\frac{\delta s}{c_p}} (\rho + 2c_p u_x \cos \varphi + 2c_p u_y \sin \varphi) \right] ds \quad (5.2-4)$$

Πραγματοποιούμε αλλαγή μεταβλητής και θέτουμε όπου $s' = s - s_1$, ορίζοντας $s_0 = s_2 - s_1$ την απόσταση κάθε κόμβου (x, y) από το τοίχωμα, στο οποίο καταλήγει η χαρακτηριστική. Τότε η Εξ. (5.2-4) γράφεται

$$\begin{aligned} \int_0^{s_0} \frac{d}{ds'} \left[\psi e^{-\frac{\delta(s'+s_1)}{c_p}} \right] ds' &= -\frac{\delta}{c_p} \int_0^{s_0} (\rho + 2c_p u_x \cos \varphi + 2c_p u_y \sin \varphi) e^{-\frac{\delta(s'+s_1)}{c_p}} ds' \Rightarrow \\ \left[\psi e^{-\frac{\delta(s'+s_1)}{c_p}} \right]_0^{s_0} &= -\frac{\delta}{c_p} \int_0^{s_0} (\rho + 2c_p u_x \cos \varphi + 2c_p u_y \sin \varphi) e^{-\frac{\delta(s'+s_1)}{c_p}} ds' \Rightarrow \\ \psi_b e^{-\frac{\delta(s_0+s_1)}{c_p}} - \psi e^{-\frac{\delta s_1}{c_p}} &= -\frac{\delta}{c_p} \int_0^{s_0} (\rho + 2c_p u_x \cos \varphi + 2c_p u_y \sin \varphi) e^{-\frac{\delta(s'+s_1)}{c_p}} ds' \Rightarrow \\ \psi_b e^{-\frac{\delta s_0}{c_p}} - \psi &= -\frac{\delta}{c_p} \int_0^{s_0} (\rho + 2c_p u_x \cos \varphi + 2c_p u_y \sin \varphi) e^{-\frac{\delta s'}{c_p}} ds' \Rightarrow \\ \psi(s, c_p, \varphi) &= \psi_b e^{-\frac{\delta s_0}{c_p}} + \frac{\delta}{c_p} \int_0^{s_0} [\rho(x', y') + 2c_p u_x(x', y') \cos \varphi + 2c_p u_y(x', y') \sin \varphi] e^{-\frac{\delta s'}{c_p}} ds' \end{aligned} \quad (5.2-5)$$

όπου x', y' τα σημεία πάνω στην χαρακτηριστική (Σχήμα 5.3), τα οποία συνδέονται με το χωρικό πλέγμα σύμφωνα με τις παρακάτω σχέσεις:

$$\begin{aligned} x' &= x - ds \cos \varphi \\ y' &= y - ds \sin \varphi \end{aligned} \quad (5.2-7)$$

Η ποσότητα ψ_b είναι η συνάρτηση κατανομής στο τοίχωμα, στο οποίο καταλήγει η χαρακτηριστική. Αντικαθιστώντας την Εξ. (5.2-5) στην Εξ. (5.1-22) προκύπτει η παρακάτω σχέση για την πυκνότητα.

$$\begin{aligned}
\rho(x, y) &= \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi\infty} \int_0^{\infty} \psi c_p e^{-c_p^2} dc_p d\varphi = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi\infty} \int_0^{\infty} \psi_b c_p e^{-c_p^2 - \frac{\delta s_0}{c_p}} dc_p d\varphi + \\
&+ \frac{\delta}{\pi} \int_0^{2\pi\infty} \int_0^{s_0} \int_0^{\infty} e^{-c_p^2 - \frac{\delta s'}{c_p}} [\rho(x', y') + 2c_p u_x(x', y') \cos \varphi + 2c_p u_y(x', y') \sin \varphi] ds' dc_p d\varphi \Rightarrow \\
\rho(x, y) &= \frac{\delta}{\pi} \int_0^{2\pi s_0} \int_0^{\infty} \{T_0(\delta s') \rho(x', y') + 2T_1(\delta s') [u_x(x', y') \cos \varphi + u_y(x', y') \sin \varphi]\} ds' d\varphi + \\
&+ \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \psi_b T_1(\delta s_0) d\varphi \tag{5.2-6}
\end{aligned}$$

Όμοια κάνοντας χρήση των Εξ. (5.1-23) και (5.2-5) για την εξίσωση της ταχύτητας u_x προκύπτει

$$\begin{aligned}
u_x(x, y) &= \frac{\delta}{\pi} \int_0^{2\pi s_0} \int_0^{\infty} \{T_1(\delta s') \rho(x', y') + 2T_2(\delta s') [u_x(x', y') \cos \varphi + u_y(x', y') \sin \varphi]\} \cos \varphi ds' d\varphi + \\
&+ \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \psi_b T_2(\delta s_0) \cos \varphi d\varphi \tag{5.2-8}
\end{aligned}$$

Κάνοντας χρήση των Εξ. (5.1-24) και (5.2-5) για την ταχύτητα u_y προκύπτει

$$\begin{aligned}
u_y(x, y) &= \frac{\delta}{\pi} \int_0^{2\pi s_0} \int_0^{\infty} \{T_1(\delta s') \rho(x', y') + 2T_2(\delta s') [u_x(x', y') \cos \varphi + u_y(x', y') \sin \varphi]\} \sin \varphi ds' d\varphi + \\
&+ \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \psi_b T_2(\delta s_0) \sin \varphi d\varphi \tag{5.2-9}
\end{aligned}$$

Το πρόβλημα ροής σε κοιλότητα διαφοροποιείται από το πρόβλημα σε ορθογώνιο αγωγό στο ότι προκύπτουν τρεις προς επίλυση ολοκληρωτικές εξισώσεις, οι οποίες και θα επιλυθούν ταυτόχρονα. Επίσης οι ποσότητες ψ_b δεν παραμένουν σταθερές αλλά προκύπτουν από την επίλυση αντίστοιχων ολοκληρωτικών εξισώσεων. Τέλος κάνοντας χρήση των Εξ. (5.1-25) και (5.2-5) για την διατμητική τάση Π_{xy} προκύπτει

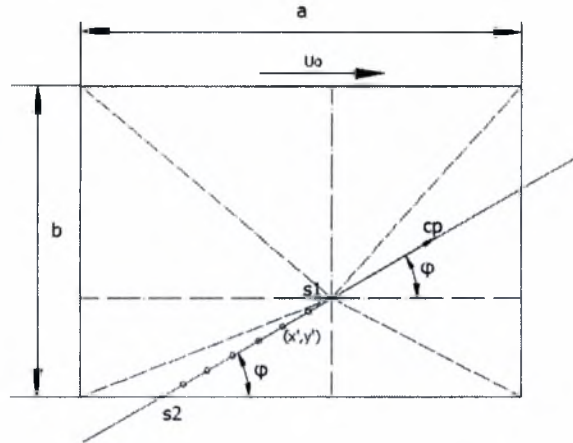
$$\Pi_{xy}(x, y) = \frac{\delta}{\pi} \int_0^{2\pi s_0} \int_0^{\infty} \{T_2(\delta s') \rho(x', y') + 2T_3(\delta s') [u_x(x', y') \cos \varphi + u_y(x', y') \sin \varphi]\} \cos \varphi \sin \varphi ds' d\varphi +$$

$$+ \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \psi_b T_3(\delta s_0) \cos \varphi \sin \varphi d\varphi \quad (5.2-10)$$

Οι όροι T_0 , T_1 , T_2 είναι οι συναρτήσεις Abramowitz που ορίζονται γενικά ως

$$T_n(x) = \int_0^{\infty} \mu^n e^{-\mu^2 - \frac{x}{\mu}} d\mu \quad \text{για } n = 0,1,2,3 \quad (5.2-11)$$

Ο υπολογισμός των συναρτήσεων Abramowitz περιγράφεται στο Παράρτημα Α.



Σχήμα 5.3: Απεικόνιση των σημείων (x', y') κατά μήκος της χαρακτηριστικής.

5.3 Οριακές Συνθήκες

Στα τοιχώματα, η συνάρτηση κατανομής f^+ των σωματιδίων, τα οποία εγκαταλείπουν το τοίχωμα, εκφράζεται από την κατανομή Maxwell (diffuse boundary conditions). Δηλαδή ισχύει ότι

$$f^+ = f_w^{eq} \quad (5.3-1)$$

όπου

$$f_w^{eq} = \frac{n_w}{(2\pi RT_w)^{3/2}} e^{-(\xi - u_w)^2} \quad (5.3-2)$$

είναι η τοπική κατανομή Maxwell στο τοίχωμα με θερμοκρασία T_w . Η ποσότητα n_w αποτελεί παράμετρο που εξασφαλίζει την αδιαπερατότητα των τοιχωμάτων.

Εφαρμόζοντας την διαδικασία της γραμμικοποίησης στην Εξ. (5.3-1)

προκύπτει ότι:

- επάνω κινούμενο τοίχωμα

$$\psi_b = \nu_U + 2c_p \cos \varphi \text{ για } \pi \leq \varphi \leq 2\pi$$

- κάτω τοίχωμα

$$\psi_b = \nu_D \text{ για } 0 \leq \varphi \leq \pi$$

- αριστερό τοίχωμα

$$\psi_b = \nu_L \text{ για } -\frac{\pi}{2} \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2}$$

- δεξί τοίχωμα

$$\psi_b = \nu_R \text{ για } \frac{\pi}{2} \leq \varphi \leq \frac{3\pi}{2}$$

Η συνάρτηση ψ_b είναι η γραμμικοποιημένη συνάρτηση κατανομής που αντιπροσωπεύει τα μόρια που απομακρύνονται από το τοίχωμα και οι ποσότητες $\nu_U, \nu_D, \nu_L, \nu_R$ είναι οι γραμμικοποιημένες συνθήκες μη διείσδυσης. Οι εξισώσεις, από τις οποίες υπολογίζονται οι τέσσερις παράμετροι $\nu_U, \nu_D, \nu_L, \nu_R$ για τα αντίστοιχα τοιχώματα, είναι οι παρακάτω:

$$\begin{aligned} \nu_U(x) = & \frac{2\delta}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\pi} \int_0^{s_0} \{T_1(\delta s') \rho(x', y') + 2T_2(\delta s') [u_x(x', y') \cos \varphi + u_y(x', y') \sin \varphi]\} \sin \varphi ds' d\varphi + \\ & + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\pi} \psi_b T_2(\delta s_0) \sin \varphi d\varphi \end{aligned} \quad (5.3-3)$$

$$\begin{aligned} \nu_D(x) = & -\frac{2\delta}{\sqrt{\pi}} \int_{\pi}^{2\pi} \int_0^{s_0} \{T_1(\delta s') \rho(x', y') + 2T_2(\delta s') [u_x(x', y') \cos \varphi + u_y(x', y') \sin \varphi]\} \sin \varphi ds' d\varphi - \\ & - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\pi}^{2\pi} \psi_b T_2(\delta s_0) \sin \varphi d\varphi \end{aligned} \quad (5.3-4)$$

$$\begin{aligned} \nu_L(y) = & -\frac{2\delta}{\sqrt{\pi}} \int_{\pi/2}^{3\pi/2} \int_0^{s_0} \{T_1(\delta s') \rho(x', y') + 2T_2(\delta s') [u_x(x', y') \cos \varphi + u_y(x', y') \sin \varphi]\} \cos \varphi ds' d\varphi - \\ & - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\pi/2}^{3\pi/2} \psi_b T_2(\delta s_0) \cos \varphi d\varphi \end{aligned} \quad (5.3-5)$$

$$\nu_R(y) = \frac{2\delta}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \int_0^{s_0} \{T_1(\delta s') \rho(x', y') + 2T_2(\delta s') [u_x(x', y') \cos \varphi + u_y(x', y') \sin \varphi]\} \cos \varphi ds' d\varphi +$$

$$+ \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \psi_b T_2(\delta s_0) \cos \varphi d\varphi \quad (5.3-6)$$

Ενδεικτικά παρατίθενται η μαθηματική επεξεργασία για την εξαγωγή της Εξ.(5.3-3). Θεωρούμε ότι η κάθετη συνιστώσα της ταχύτητα σε οποιοδήποτε τοίχωμα είναι $u_n = 0$. Πιο συγκεκριμένα στο επάνω κινούμενο τοίχωμα θέτουμε ότι η ταχύτητα $u_y = 0$, δηλαδή ισχύει ότι

$$u_y \left(x, -\frac{a}{2} \right) = 0 \Rightarrow \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi\infty} \int_0^{\pi} \psi c_p^2 e^{-c_p^2} \sin \varphi dc_p d\varphi = 0 \Rightarrow$$

$$\underbrace{\int_0^{\pi\infty} \int_0^{\pi} \psi c_p^2 e^{-c_p^2} \sin \varphi dc_p d\varphi}_{I_1} + \underbrace{\int_{\pi}^{2\pi\infty} \int_0^{\pi} \psi c_p^2 e^{-c_p^2} \sin \varphi dc_p d\varphi}_{I_2} = 0$$

Το ολοκλήρωμα I_1 εκφράζει τα σωματίδια που έρχονται στο τοίχωμα ενώ το ολοκλήρωμα I_2 τα σωματίδια, τα οποία εγκαταλείπουν το τοίχωμα. Αντικαθιστώντας στο ολοκλήρωμα τη συνάρτηση κατανομής $\psi = \psi_b = v_U + 2c_p \cos \varphi$ προκύπτει ότι

$$\underbrace{\int_0^{\pi\infty} \int_0^{\pi} \psi c_p^2 e^{-c_p^2} \sin \varphi dc_p d\varphi}_{I_1} + \underbrace{\int_{\pi}^{2\pi\infty} \int_0^{\pi} (v_U + 2c_p \cos \varphi) c_p^2 e^{-c_p^2} \sin \varphi dc_p d\varphi}_{I_2} = 0 \Rightarrow$$

$$v_U = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\pi\infty} \int_0^{\pi} \psi c_p^2 e^{-c_p^2} \sin \varphi dc_p d\varphi \quad (5.3-7)$$

Εάν αντικαταστήσουμε την συνάρτηση κατανομής ψ από την Εξ. (5.2-5) τότε προκύπτει η ζητούμενη Εξ. (5.3-3). Όμοια εργαζόμαστε και για την εξαγωγή των υπολοίπων Εξ. (5.3-4 ÷ 5.3-6).

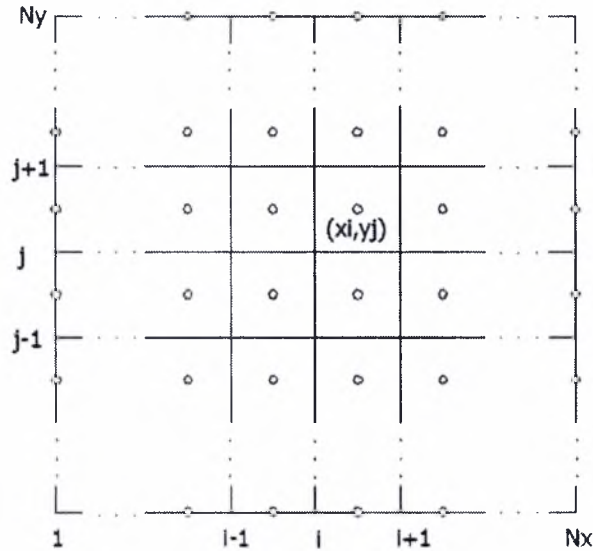
5.4 Διακριτοποίηση

Το χωρικό πλέγμα, το οποίο χρησιμοποιείται προκύπτει από τις σχέσεις

$$x_i = \left(i - \frac{1}{2} \right) \Delta x \quad \text{και} \quad y_j = \left(j - \frac{1}{2} \right) \Delta y, \quad 1 \leq i \leq N_x, \quad 1 \leq j \leq N_y$$

Οι μακροσκοπικές ποσότητες υπολογίζονται στους μεσαίους κόμβους, των οποίων οι

συντεταγμένες είναι (x_i, y_j) , ενώ οι παράμετροι μη διεύθυνσης v_U, v_D, v_L και v_R υπολογίζονται στους ενδιάμεσους κόμβους επάνω στο τοίχωμα (Σχήμα 5.4). Επίσης ισχύει ότι $\Delta x = \frac{a}{N_x}$ και $\Delta y = \frac{1}{N_y}$ όπου $a = \frac{H}{L}$ ο λόγος των δύο πλευρών της κοιλότητας.



Σχήμα 5.4: Πλέγμα διακριτοποίησης.

Η συγκεκριμένη μέθοδος βασίζεται στην παραδοχή ότι οι μακροσκοπικές ποσότητες σε κάθε κελί του πλέγματος παραμένουν σταθερές. Το γεγονός αυτό οδηγεί στην απλοποίηση των Εξ. (5.2-6 ÷ 9), αφού οι ποσότητες $\rho(x', y')$, $u_x(x', y')$ και $u_y(x', y')$ σε κάθε κελί θεωρούνται σταθερές και μπορούν να εξαχθούν έξω από τα διπλά ολοκληρώματα. Τότε η ολοκλήρωση ως προς s μπορεί να γίνει αναλυτικά. Τελικά προκύπτουν ολοκληρώματα μόνο ως προς την γωνία φ , τα οποία εκφράζουν την συνεισφορά συγκεκριμένων κελιών σε έναν εσωτερικό ή οριακό κόμβο. Σύμφωνα με την παραδοχή αυτή οι Εξ. (5.2-6 ÷ 9) σε συνεπτυγμένη μορφή γράφονται ως εξής

$$M_p^{ij} = \sum_{q=1}^3 \sum_{m=1}^{N_x} \sum_{n=1}^{N_y} K_{pq}^{ij, mn} M_q^{mn} + \sum_{q=1}^4 \sum_{m=1}^N S_p^{ij, m} L_q^m + Q_p^{ij} \quad (5.4-1)$$

ενώ οι Εξ. (5.3-3 ÷ 6) γράφονται ως

$$L_p^i = \sum_{q=1}^3 \sum_{m=1}^{N_x} \sum_{n=1}^{N_y} T_{pq}^{i, mn} M_q^{mn} + \sum_{q=1}^4 \sum_{m=1}^N R_p^{i, m} L_q^m + H_p^i \quad (5.4-2)$$

όπου $1 \leq i \leq N_x$ και $1 \leq j \leq N_y$ ενώ

$$M_p^{ij} = \begin{Bmatrix} \rho \\ u_x \\ u_y \end{Bmatrix}^{ij} \quad \text{και} \quad L_p^i = \begin{Bmatrix} v_U \\ v_D \\ v_L \\ v_R \end{Bmatrix}^i$$

Για τα ολοκληρώματα K , S , Q , T , R και H σε κάθε κελί (m, n) ή συνοριακό τμήμα (m) ισχύει ότι

$$K_{pq}^{ij, mn} = \int_{y_n - \Delta y / 2}^{y_n + \Delta y / 2} \int_{x_m - \Delta x / 2}^{x_m + \Delta x / 2} K_{pq}(x_i, y_j : x', y') dx' dy' \quad (5.4-3)$$

$$S_{pq}^{ij, m} = \int_{\xi_m - \Delta \xi / 2}^{\xi_m + \Delta \xi / 2} S_{pq}(x_i, y_j, \xi) d\xi \quad (5.4-4)$$

$$Q_p^{ij} = Q_p(x_i, y_j) \quad (5.4-5)$$

$$T_{pq}^{i, mn} = \int_{y_n - \Delta y / 2}^{y_n + \Delta y / 2} \int_{x_m - \Delta x / 2}^{x_m + \Delta x / 2} T_{pq}(\xi_i : x', y') dx' dy' \quad (5.4-6)$$

$$R_{pq}^{i, m} = \int_{\xi_m - \Delta \xi / 2}^{\xi_m + \Delta \xi / 2} S_{pq}(\xi_i, \xi) d\xi \quad (5.4-7)$$

$$H_p^i = H_p(\xi_i) \quad (5.4-8)$$

όπου $\xi = x$ για το πάνω και κάτω τοίχωμα, ενώ $\xi = y$ για το δεξί και αριστερό τοίχωμα. Πρέπει να τονιστεί ότι ο υπολογισμός των παραμέτρων L_p^i γίνεται στους ενδιάμεσους κόμβους του τοιχώματος, ενώ οι μακροσκοπικές ποσότητες M_p^{ij} υπολογίζονται στους εσωτερικούς ενδιάμεσους κόμβους (x_i, y_j) .

Από τις Εξ. (5.2-6 ÷ 9) και (5.3-3 ÷ 6) μπορούν να εξαχθούν οι εκφράσεις των ολοκληρωμάτων που ισχύουν για τα εσωτερικά κελιά και τα συνοριακά τμήματα. Στην συνέχεια ακολουθούν όλα τα ολοκληρώματα που χρησιμοποιήθηκαν.

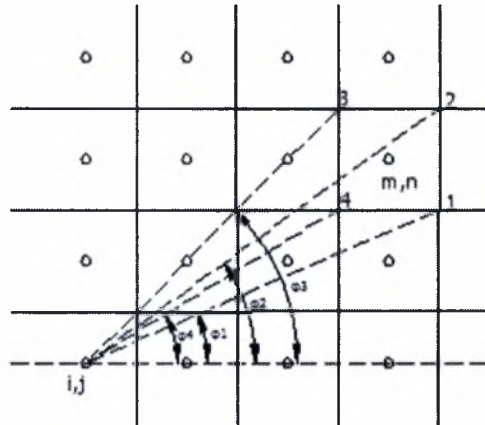
Ολοκλήρωμα K

Το ολοκλήρωμα K περιέχει την συνεισφορά κάθε κελιού (m, n) σε ένα τυχαίο κόμβο (i, j) (Σχήμα 5.5). Ο υπολογισμός του ολοκληρώματος K βασίζεται στην

ολοκλήρωση κατά μήκος των πλευρών του εκάστοτε κελιού. Ενδεικτικά θα περιγράψει η διαδικασία υπολογισμού του ολοκληρώματος

$$K_{11}^{ij,mn} = \int_{y_n - \Delta y / 2, x_m - \Delta x / 2}^{y_n + \Delta y / 2, x_m + \Delta x / 2} \int K_{11}(x_i, y_j : x', y') dx' dy' = \int_0^{s_0^*} T_1(\delta s) ds d\varphi = \frac{1}{\pi} \int [T_1(0) - T_1(\delta s_0^*)] d\varphi.$$

όπου η απόσταση s_0^* εκφράζει την απόσταση του κόμβου (i, j) από την εκάστοτε πλευρά του κελιού (m, n) και μεταβάλλεται συναρτήσει της γωνίας φ . Η ίδια διαδικασία ακολουθείται και για τον υπολογισμό των υπόλοιπων ολοκληρωμάτων K .



Σχήμα 5.5: Επίδραση του κελιού (m, n) στον κόμβο (i, j) .

Για τον υπολογισμό του παραπάνω ολοκληρώματος θα διακρίνουμε δύο περιπτώσεις:

- i. Όταν το $i = n$ και $j = m$ τότε το ολοκλήρωμα K_{11} απλοποιείται ως εξής

$$K_{11}^{ij,ij} = \frac{8}{\pi} \int_0^{\pi/4} [T_1(0) - T_1(\delta s_0^*)] d\varphi = \frac{8}{\pi} \int_0^{\pi/4} \left[\frac{1}{2} - T_1\left(\delta \frac{\Delta x / 2}{\cos \varphi}\right) \right] d\varphi = 1 - \frac{8}{\pi} \int_0^{\pi/4} T_1\left(\delta \frac{\Delta x / 2}{\cos \varphi}\right) d\varphi \quad (5.4-9)$$

και αντιστοιχεί στην συνεισφορά του κελιού (i, j) στον κόμβο (i, j) . Η απόσταση s_0^* δίνεται από την σχέση

$$s_0^* = \frac{\Delta x / 2}{\cos \varphi}$$

- ii. Όταν το $i \neq n$ και $j \neq m$ τότε αναλύουμε το αρχικό ολοκλήρωμα σε τέσσερα ολοκληρώματα που αντιστοιχούν στις τέσσερις πλευρές του κελιού (m, n) (Σχήμα 5.5). Πιο συγκεκριμένα το ολοκλήρωμα K_{11} γράφεται

$$K_{11}^{ij,mn} = \frac{1}{\pi} \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} \{T_1(0) - T_1(\delta s_{0,1}^*)\} d\varphi + \frac{1}{\pi} \int_{\varphi_2}^{\varphi_3} \{T_1(0) - T_1(\delta s_{0,2}^*)\} d\varphi + \frac{1}{\pi} \int_{\varphi_3}^{\varphi_4} \{T_1(0) - T_1(\delta s_{0,3}^*)\} d\varphi + \frac{1}{\pi} \int_{\varphi_4}^{\varphi_1} \{T_1(0) - T_1(\delta s_{0,4}^*)\} d\varphi \quad (5.4-10)$$

όπου οι γωνίες $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4$ απεικονίζονται στο Σχήμα 5.5 και υπολογίζονται από τις παρακάτω σχέσεις:

$$\varphi_1 = \text{atan}\left(\frac{y_j - y_m + \Delta y / 2}{x_i - x_n - \Delta x / 2}\right), \varphi_2 = \text{atan}\left(\frac{y_j - y_m - \Delta y / 2}{x_i - x_n - \Delta x / 2}\right) \quad (5.4-11)$$

$$\varphi_3 = \text{atan}\left(\frac{y_j - y_m - \Delta y / 2}{x_i - x_n + \Delta x / 2}\right), \varphi_4 = \text{atan}\left(\frac{y_j - y_m + \Delta y / 2}{x_i - x_n + \Delta x / 2}\right) \quad (5.4-12)$$

Οι αποστάσεις $s_{0,1}^*, s_{0,2}^*, s_{0,3}^*, s_{0,4}^*$ δίνονται από τις σχέσεις

$$s_{0,1}^* = \frac{x_i - x_n - \Delta x / 2}{\cos \varphi}, s_{0,2}^* = \frac{y_j - y_m - \Delta y / 2}{\sin \varphi} \quad (5.4-13)$$

$$s_{0,3}^* = \frac{x_i - x_n + \Delta x / 2}{\cos \varphi}, s_{0,4}^* = \frac{y_j - y_m + \Delta y / 2}{\sin \varphi} \quad (5.4-14)$$

Στην συγκεκριμένη μεθοδολογία επιλεγούμε την χρήση τετραγωνικών κελιών δηλαδή ισχύει ότι $\Delta x = \Delta y$ γεγονός που δεν αποκλείει και την χρήση μη τετραγωνικών κελιών. Όλα τα ολοκληρώματα K που προκύπτουν παρατίθενται παρακάτω:

$$K_{11}^{ij,mn} = \frac{\delta}{\pi} \int_0^{s_0^*} T_0(\delta s) ds d\varphi = \frac{1}{\pi} \int [T_1(0) - T_1(\delta s_0^*)] d\varphi = \frac{1}{\pi} \int \left[\frac{1}{2} - T_1(\delta s_0^*) \right] d\varphi$$

$$K_{12}^{ij,mn} = \frac{2\delta}{\pi} \int_0^{s_0^*} T_1(\delta s) \cos \varphi ds d\varphi = \frac{2}{\pi} \int [T_2(0) - T_2(\delta s_0^*)] \cos \varphi d\varphi = \frac{2}{\pi} \int \left[\frac{\sqrt{\pi}}{4} - T_2(\delta s_0^*) \right] \cos \varphi d\varphi$$

$$K_{13}^{ij,mn} = \frac{2\delta}{\pi} \int_0^{s_0^*} T_1(\delta s) \sin \varphi ds d\varphi = \frac{2}{\pi} \int [T_2(0) - T_2(\delta s_0^*)] \sin \varphi d\varphi = \frac{2}{\pi} \int \left[\frac{\sqrt{\pi}}{4} - T_2(\delta s_0^*) \right] \sin \varphi d\varphi$$

$$K_{21}^{ij,mn} = \frac{\delta}{\pi} \int_0^{s_0^*} T_1(\delta s) \cos \varphi ds d\varphi = \frac{1}{\pi} \int [T_2(0) - T_2(\delta s_0^*)] \cos \varphi d\varphi = \frac{1}{\pi} \int \left[\frac{\sqrt{\pi}}{4} - T_2(\delta s_0^*) \right] \cos \varphi d\varphi$$

$$K_{22}^{ij,mn} = \frac{2\delta}{\pi} \int_0^{s_0^*} T_2(\delta s) \cos^2 \varphi ds d\varphi = \frac{2}{\pi} \int [T_3(0) - T_3(\delta s_0^*)] \cos^2 \varphi d\varphi = \frac{2}{\pi} \int \left[\frac{1}{2} - T_3(\delta s_0^*) \right] \cos^2 \varphi d\varphi$$

$$K_{23}^{ij,mn} = \frac{2\delta}{\pi} \int_0^{s_0^*} T_2(\delta s) \cos \varphi \sin \varphi ds d\varphi = \frac{2}{\pi} \int [T_3(0) - T_3(\delta s_0^*)] \cos \varphi \sin \varphi d\varphi = \frac{2}{\pi} \int \left[\frac{1}{2} - T_3(\delta s_0^*) \right] \cos \varphi \sin \varphi d\varphi$$

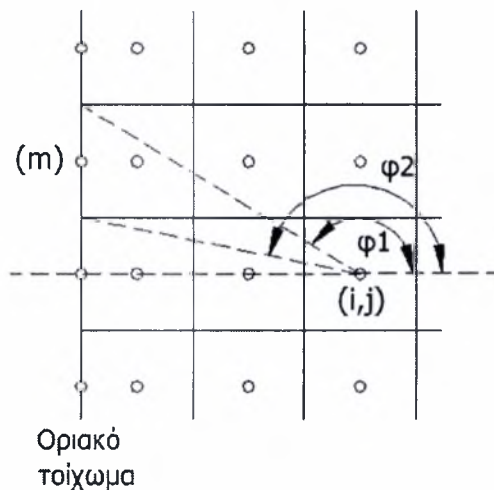
$$K_{31}^{ij,mn} = \frac{\delta}{\pi} \int_0^{\delta_0^*} T_1(\delta s) \sin \varphi ds d\varphi = \frac{1}{\pi} \int [T_2(0) - T_2(\delta s_0^*)] \sin \varphi d\varphi = \frac{1}{\pi} \int \left[\frac{\sqrt{\pi}}{4} - T_2(\delta s_0^*) \right] \sin \varphi d\varphi$$

$$K_{32}^{ij,mn} = \frac{2\delta}{\pi} \int_0^{\delta_0^*} T_2(\delta s) \cos \varphi \sin \varphi ds d\varphi = \frac{2}{\pi} \int [T_3(0) - T_3(\delta s_0^*)] \cos \varphi \sin \varphi d\varphi = \frac{2}{\pi} \int \left[\frac{1}{2} - T_3(\delta s_0^*) \right] \cos \varphi \sin \varphi d\varphi$$

$$K_{33}^{ij,mn} = \frac{2\delta}{\pi} \int_0^{\delta_0^*} T_2(\delta s) \sin^2 \varphi ds d\varphi = \frac{2}{\pi} \int [T_3(0) - T_3(\delta s_0^*)] \sin^2 \varphi d\varphi = \frac{2}{\pi} \int \left[\frac{1}{2} - T_3(\delta s_0^*) \right] \sin^2 \varphi d\varphi.$$

Ολοκληρώματα S και Q

Το ολοκλήρωμα S εκφράζει την συνεισφορά κάθε συνοριακού τμήματος (m) σε έναν τυχαίο κόμβο (i, j) (Σχήμα 5.6). Ο υπολογισμός του ολοκληρώματος S βασίζεται στην ολοκλήρωση κατά μήκος των συνοριακών τμημάτων του εκάστοτε τοιχώματος. Ενδεικτικά θα περιγραφεί η διαδικασία εξαγωγής του ολοκληρώματος $S_1^{ij,m}$.



Σχήμα 5.6: Επίδραση των συνοριακών τμημάτων στον κόμβο (i, j).

Το ολοκλήρωμα

$$\frac{1}{\pi} \int T_1(\delta s_0) \psi_b d\varphi$$

το οποίο συναντάται στο δεύτερο μέλος της Εξ. (5.2-6) αποτελεί ένα ολοκλήρωμα ως προς την γωνία φ και περιέχει την ποσότητα ψ_b , η οποία διαφοροποιείται καθώς η γωνία φ αλλάζει. Η τιμή της ποσότητας ψ_b εξαρτάται από το τοίχωμα, στο οποίο καταλήγει η εκάστοτε χαρακτηριστική. Για τον λόγο αυτό το αρχικό

ολοκλήρωμα χωρίζεται σε τέσσερα ολοκληρώματα, τα οποία αντιστοιχούν σε κάθε ένα από τα τέσσερα τοιχώματα της κοιλότητας. Παράλληλα αντικαθιστούμε την ποσότητα ψ_b με την αντίστοιχη ποσότητα $v_U + 2c_p \cos \varphi, v_D, v_L, v_R$. Έτσι το αρχικό ολοκλήρωμα γράφεται

$$\frac{1}{\pi} \int T_1(\delta s_0) \psi_b d\varphi = \frac{1}{\pi} \int_{\varphi_4}^{\varphi_1} T_1(\delta s_0) v_R d\varphi + \frac{1}{\pi} \int_{\varphi_3}^{\varphi_4} T_1(\delta s_0) v_D d\varphi + \frac{1}{\pi} \int_{\varphi_2}^{\varphi_3} T_1(\delta s_0) v_L d\varphi +$$

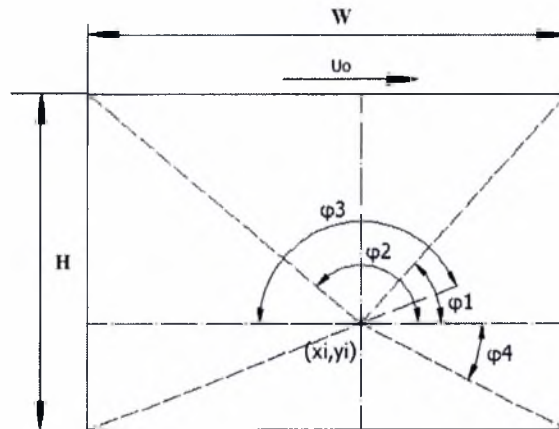
$$+ \frac{1}{\pi} \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} T_1(\delta s_0) (v_U + 2c_p \cos \varphi) d\varphi$$

ή

$$\frac{1}{\pi} \int T_1(\delta s_0) \psi_b d\varphi = \underbrace{\frac{1}{\pi} \int_{\varphi_4}^{\varphi_1} T_1(\delta s_0) v_R d\varphi + \frac{1}{\pi} \int_{\varphi_3}^{\varphi_4} T_1(\delta s_0) v_D d\varphi + \frac{1}{\pi} \int_{\varphi_2}^{\varphi_3} T_1(\delta s_0) v_L d\varphi + \frac{1}{\pi} \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} T_1(\delta s_0) v_U d\varphi}_{S_1^{\psi}}$$

$$+ \underbrace{\frac{2}{\pi} \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} T_2(\delta s_0) \cos \varphi d\varphi}_{Q_1^{\psi}}$$

όπου οι γωνίες $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4$ απεικονίζονται στο Σχήμα 5.7



Σχήμα 5.7: Γωνίες για την ολοκλήρωση.

Ο πέμπτος όρος της προηγούμενης σχέσης αντιστοιχεί στην επίδραση της κινούμενης πλάκας στον κόμβο (i, j) (Σχήμα 5.8). Ο όρος αυτός ονομάζεται ολοκλήρωμα Q . Τα τέσσερα εναπομείναντα ολοκληρώματα απαρτίζουν το ολοκλήρωμα S . Στο σημείο αυτό για το ολοκλήρωμα S , όμοια με το ολοκλήρωμα K , κάνουμε την παραδοχή ότι οι

ποσότητες $\nu_U, \nu_D, \nu_L, \nu_R$ παραμένουν σταθερές κατά μήκος ενός περιφερειακού τμήματος και τότε μπορούν να εξαχθούν έξω από τα αντίστοιχα ολοκληρώματα. Έτσι έχουμε

$$S_1^{ij,m} = \int_{\xi_m - \Delta\xi/2}^{\xi_m + \Delta\xi/2} S_{11}(x_i, y_j, \xi) d\xi = \frac{1}{\pi} \int T_1(\delta s_{\theta,R}^*) d\varphi + \frac{1}{\pi} \int T_1(\delta s_{\theta,L}^*) d\varphi + \frac{1}{\pi} \int T_1(\delta s_{\theta,U}^*) d\varphi + \frac{1}{\pi} \int T_1(\delta s_{\theta,D}^*) d\varphi$$

Αμέσως μετά παρατίθενται όλα τα ολοκληρώματα S και Q .

$$S_1^{ij,m} = \frac{1}{\pi} \int T_1(\delta s_{\theta,R}^*) d\varphi + \frac{1}{\pi} \int T_1(\delta s_{\theta,L}^*) d\varphi + \frac{1}{\pi} \int T_1(\delta s_{\theta,U}^*) d\varphi + \frac{1}{\pi} \int T_1(\delta s_{\theta,D}^*) d\varphi$$

$$S_2^{ij,m} = \frac{1}{\pi} \int T_2(\delta s_{\theta,R}^*) \cos \varphi d\varphi + \frac{1}{\pi} \int T_2(\delta s_{\theta,L}^*) \cos \varphi d\varphi + \frac{1}{\pi} \int T_2(\delta s_{\theta,D}^*) \cos \varphi d\varphi + \frac{1}{\pi} \int T_2(\delta s_{\theta,U}^*) \cos \varphi d\varphi$$

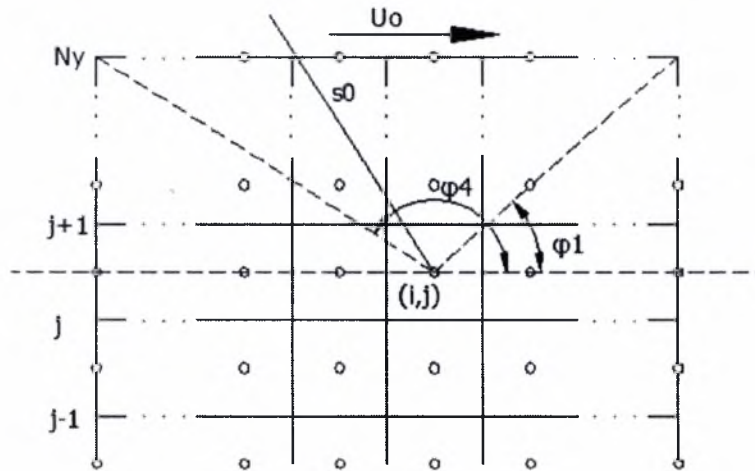
$$S_3^{ij,m} = \frac{1}{\pi} \int T_2(\delta s_{\theta,R}^*) \sin \varphi d\varphi + \frac{1}{\pi} \int T_2(\delta s_{\theta,L}^*) \sin \varphi d\varphi + \frac{1}{\pi} \int T_2(\delta s_{\theta,D}^*) \sin \varphi d\varphi + \frac{1}{\pi} \int T_2(\delta s_{\theta,U}^*) \sin \varphi d\varphi$$

$$Q_1^{ij} = \frac{2}{\pi} \int_{\varphi_4}^{\varphi_1} T_2(\delta s_0) \cos \varphi d\varphi$$

$$Q_2^{ij} = \frac{2}{\pi} \int_{\varphi_4}^{\varphi_1} T_3(\delta s_0) \cos^2 \varphi d\varphi$$

$$Q_3^{ij} = \frac{2}{\pi} \int_{\varphi_4}^{\varphi_1} T_3(\delta s_0) \sin \varphi \cos \varphi d\varphi$$

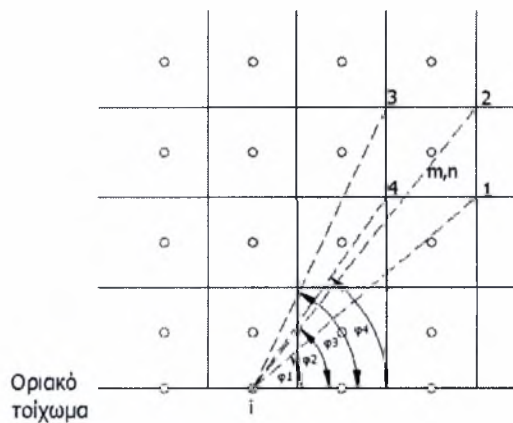
Στα ολοκληρώματα Q δεν εφαρμόζεται η ολοκλήρωση κατά μήκος των περιφερειακών τμημάτων αλλά γίνεται μια απλή ολοκλήρωση των αποστάσεων s_0 των κόμβων (i, j) από το εκάστοτε τοίχωμα κατά μήκος της κινούμενης πλάκας (Σχήμα 5.8). Ο υπολογισμός των αποστάσεων s_0 περιγράφεται στο Παράρτημα Δ.



Σχήμα 5.8: Επίδραση της κινούμενης πλάκας στον κόμβο (i, j) .

Ολοκλήρωμα T

Τα ολοκληρώματα T περιέχουν την συνεισφορά κάθε κελιού (m, n) σε ένα συνοριακό τμήμα (i) (Σχήμα 5.9).



Σχήμα 5.9: Επίδραση του κελιού (m, n) στο συνοριακό τμήμα (i) .

Παρατίθενται όλα τα ολοκληρώματα $T_{pq}^{i,mn}$:

$$T_{11}^{i,mn} = \frac{2\delta}{\sqrt{\pi}} \int_0^{s_0^*} \int T_1(\delta s) \sin \varphi ds d\varphi = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int [T_2(0) - T_2(\delta s_0^*)] \sin \varphi d\varphi = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int \left[\frac{\sqrt{\pi}}{4} - T_2(\delta s_0^*) \right] \sin \varphi d\varphi$$

$$T_{12}^{i,mn} = \frac{4\delta}{\sqrt{\pi}} \int_0^{s_0^*} T_2(\delta s) \cos \varphi \sin \varphi ds d\varphi = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int [T_3(0) - T_3(\delta s_0^*)] \cos \varphi \sin \varphi d\varphi =$$

$$= \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int \left[\frac{1}{2} - T_3(\delta s_0^*) \right] \cos \varphi \sin \varphi d\varphi$$

$$T_{13}^{i,mn} = \frac{4\delta}{\sqrt{\pi}} \int_0^{s_0^*} T_2(\delta s) \sin^2 \varphi ds d\varphi = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int [T_3(0) - T_3(\delta s_0^*)] \sin^2 \varphi d\varphi = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int \left[\frac{1}{2} - T_3(\delta s_0^*) \right] \sin^2 \varphi d\varphi$$

$$T_{21}^{i,mn} = -\frac{2\delta}{\sqrt{\pi}} \int_0^{s_0^*} T_1(\delta s) \sin \varphi ds d\varphi = -\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int [T_2(0) - T_2(\delta s_0^*)] \sin \varphi d\varphi = -\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int \left[\frac{\sqrt{\pi}}{4} - T_2(\delta s_0^*) \right] \sin \varphi d\varphi$$

$$T_{22}^{ij,mn} = -\frac{4\delta}{\sqrt{\pi}} \int_0^{s_0^*} T_2(\delta s) \cos \varphi \sin \varphi ds d\varphi = -\frac{4}{\sqrt{\pi}} \int [T_3(0) - T_3(\delta s_0^*)] \cos \varphi \sin \varphi d\varphi =$$

$$= -\frac{4}{\sqrt{\pi}} \int \left[\frac{1}{2} - T_3(\delta s_0^*) \right] \cos \varphi \sin \varphi d\varphi$$

$$T_{23}^{i,mn} = -\frac{4\delta}{\sqrt{\pi}} \int_0^{s_0^*} T_2(\delta s) \sin^2 \varphi ds d\varphi = -\frac{4}{\sqrt{\pi}} \int [T_3(0) - T_3(\delta s_0^*)] \sin^2 \varphi d\varphi = -\frac{4}{\sqrt{\pi}} \int \left[\frac{1}{2} - T_3(\delta s_0^*) \right] \sin^2 \varphi d\varphi$$

$$T_{31}^{j,mn} = -\frac{2\delta}{\sqrt{\pi}} \int_0^{s_0^*} T_1(\delta s) \cos \varphi ds d\varphi = -\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int [T_2(0) - T_2(\delta s_0^*)] \cos \varphi d\varphi = -\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int \left[\frac{\sqrt{\pi}}{4} - T_2(\delta s_0^*) \right] \cos \varphi d\varphi$$

$$T_{32}^{j,mn} = -\frac{4\delta}{\sqrt{\pi}} \int_0^{s_0^*} T_2(\delta s) \cos^2 \varphi ds d\varphi = -\frac{4}{\sqrt{\pi}} \int [T_3(0) - T_3(\delta s_0^*)] \cos^2 \varphi d\varphi = -\frac{4}{\sqrt{\pi}} \int \left[\frac{1}{2} - T_3(\delta s_0^*) \right] \cos^2 \varphi d\varphi$$

$$T_{33}^{j,mn} = -\frac{4\delta}{\sqrt{\pi}} \int_0^{s_0^*} T_2(\delta s) \cos \varphi \sin \varphi ds d\varphi = -\frac{4}{\sqrt{\pi}} \int [T_3(0) - T_3(\delta s_0^*)] \cos \varphi \sin \varphi d\varphi =$$

$$= -\frac{4}{\sqrt{\pi}} \int \left[\frac{1}{2} - T_3(\delta s_0^*) \right] \cos \varphi \sin \varphi d\varphi$$

$$T_{41}^{j,mn} = \frac{2\delta}{\sqrt{\pi}} \int_0^{s_0^*} T_1(\delta s) \cos \varphi ds d\varphi = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int [T_2(0) - T_2(\delta s_0^*)] \cos \varphi d\varphi = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int \left[\frac{\sqrt{\pi}}{4} - T_2(\delta s_0^*) \right] \cos \varphi d\varphi$$

$$T_{42}^{j,mn} = \frac{4\delta}{\sqrt{\pi}} \int_0^{s_0^*} T_2(\delta s) \cos^2 \varphi ds d\varphi = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int [T_3(0) - T_3(\delta s_0^*)] \cos^2 \varphi d\varphi = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int \left[\frac{1}{2} - T_3(\delta s_0^*) \right] \cos^2 \varphi d\varphi$$

$$T_{43}^{j,mn} = \frac{4\delta}{\sqrt{\pi}} \int_0^{s_0^*} T_2(\delta s) \cos \varphi \sin \varphi ds d\varphi = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int [T_3(0) - T_3(\delta s_0^*)] \cos \varphi \sin \varphi d\varphi =$$

$$= \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int \left[\frac{1}{2} - T_3(\delta s_0^*) \right] \cos \varphi \sin \varphi d\varphi$$

Ολοκληρώματα R και H

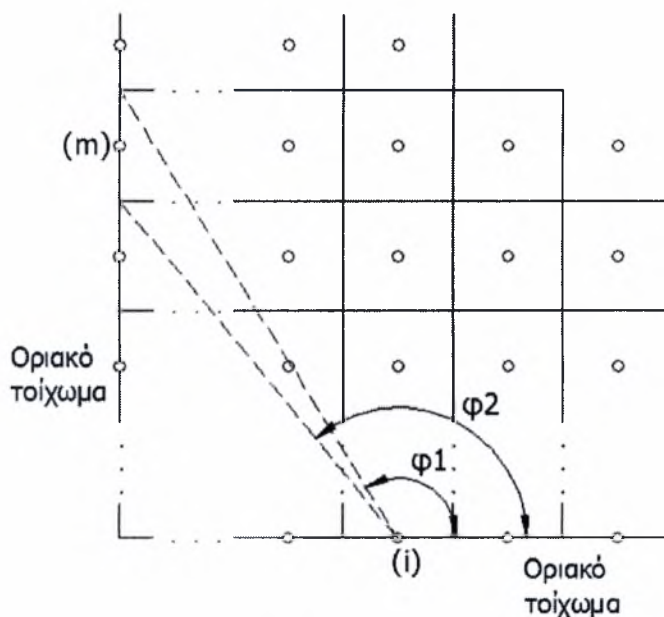
Το ολοκλήρωμα R εκφράζει την συνεισφορά κάθε συνοριακού τμήματος (m) σε έναν συνοριακό τμήμα (i) (Σχήμα 5.10) και αποτελεί έναν διδιάστατο πίνακα, ενώ το ολοκλήρωμα H εκφράζει την συνεισφορά της κινούμενης πλάκας στην αντίστοιχη ποσότητα μη διείδυσης, η οποία υπολογίζεται επάνω στο τοίχωμα (Σχήμα 5.11). Αμέσως μετά παρατίθενται όλα τα ολοκληρώματα $R_p^{i,m}$ και H_p^i

$$R_1^{i,m} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int T_2(\delta s_{0,L}^*) \sin \varphi d\varphi + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int T_2(\delta s_{0,D}^*) \sin \varphi d\varphi + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int T_2(\delta s_{0,R}^*) \sin \varphi d\varphi$$

$$R_2^{i,m} = -\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int T_2(\delta s_{0,R}^*) \sin \varphi d\varphi - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int T_2(\delta s_{0,U}^*) \sin \varphi d\varphi - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int T_2(\delta s_{0,L}^*) \sin \varphi d\varphi$$

$$R_3^{j,n} = -\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int T_2(\delta s_{0,D}^*) \cos \varphi d\varphi - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int T_2(\delta s_{0,R}^*) \cos \varphi d\varphi - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int T_2(\delta s_{0,U}^*) \cos \varphi d\varphi$$

$$R_4^{j,n} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int T_2(\delta s_{0,U}^*) \cos \varphi d\varphi + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int T_2(\delta s_{0,L}^*) \cos \varphi d\varphi + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int T_2(\delta s_{0,D}^*) \cos \varphi d\varphi$$



Σχήμα 5.10: Επίδραση του συνοριακού τμήματος (m) στο συνοριακό τμήμα (i).

Στα ολοκληρώματα H , όμοια με τα ολοκληρώματα Q , δεν εφαρμόζεται η ολοκλήρωση κατά μήκος των περιφερειακών τμημάτων αλλά γίνεται μια απλή

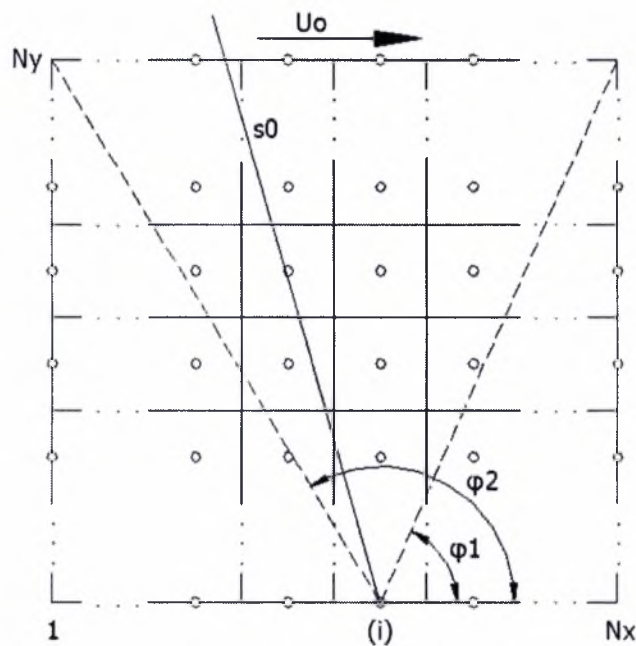
ολοκλήρωση των αποστάσεων s_0 , των περιφερειακών τμημάτων (i), κατά μήκος της κινούμενης πλάκας (Σχήμα 5.11) .

$$H_1^i = 0$$

$$H_2^i = -\frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} T_3(\delta s_0) \cos \varphi \sin \varphi d\varphi$$

$$H_3^j = -\frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_{\varphi_2}^{\frac{3\pi}{2}} T_3(\delta s_0) \cos^2 \varphi d\varphi$$

$$H_4^j = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi/2}^{\varphi_1} T_3(\delta s_0) \cos^2 \varphi d\varphi$$



Σχήμα 5.11: Επίδραση κινούμενης πλάκας στο συνοριακό τμήμα (i).

Για τον υπολογισμό όλων των παραπάνω ολοκληρωμάτων απαιτείται ο υπολογισμός των αντίστοιχων ολοκληρωμάτων Abramowitz. Η αριθμητική επίλυση περιγράφεται αναλυτικά στο Παράρτημα Α.

5.5 Αριθμητικά αποτελέσματα

Στην παράγραφο αυτή θα παρουσιασθούν τα αριθμητικά αποτελέσματα

εφαρμόζοντας την μεθοδολογία επίλυσης που περιγράφηκε στην παράγραφο 5.4 στο πρόβλημα της κοιλότητας. Τα αποτελέσματα αφορούν τις ολοκληρωτικές ποσότητες της ροής μάζας ανάμεσα στο κέντρο της δίνης και της κινούμενης πλάκας καθώς και του συντελεστή οπισθέλκουσας που αναπτύσσεται στο κινούμενο τοίχωμα. Οι δύο αυτές ποσότητες θα συγκριθούν με τις αντίστοιχες που προκύπτουν με την μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων και παράλληλα θα γίνει σύγκριση τόσο στην ακρίβεια των αποτελεσμάτων όσο και στον απαιτούμενο υπολογιστικό χρόνο.

Για τον υπολογισμό των δύο ολοκληρωτικών ποσοτήτων απαραίτητος είναι ο υπολογισμός των ταχυτήτων u_x και u_y , της πυκνότητας ρ και της διατμητικής τάσης Π_{xy} στο κινούμενο τοίχωμα.

Για την διακριτοποίηση των αντίστοιχων εξισώσεων για τον υπολογισμό των μακροσκοπικών ποσοτήτων χρησιμοποιήθηκαν διάφορα χωρικά πλέγματα για την μέθοδο των ολοκληρωτικών εξισώσεων, ενώ για την μέθοδο DVM το σετ των διακριτών ταχυτήτων για $\delta \leq 1$ είναι οι 64 ρίζες Legendre ενώ για $\delta > 1$ επιλέχθηκαν οι 16 ρίζες Gauss. Ο αριθμός των διακριτών γωνιών στην DVM είναι 400 ενώ το κριτήριο τερματισμού και για τις δύο μεθόδους είναι το άθροισμα των απολύτων σφαλμάτων των μακροσκοπικών ποσοτήτων να είναι μικρότερο του 10^{-7} .

Στην μέθοδο των ολοκληρωτικών εξισώσεων ο υπολογισμός των συναρτήσεων Abramowitz περιγράφεται αναλυτικά στο Παράρτημα Α.

$$A = H/W = 0.5$$

<i>Αριθμός κόμβων</i>	δ	<i>Αριθμός επαναλήψεων</i>	<i>CPU time(sec)</i>	<i>G</i>	<i>Cd</i>
41x21	10^{-3}	23	162	0.5487(-1)	0.71972
	10^{-2}	23	168	0.5497(-1)	0.71919
	10^{-1}	22	156	0.5593(-1)	0.71405
	1	23	162	0.6402(-1)	0.66888
	2	33	56	0.7095(-1)	0.62825
	5	67	110	0.8530(-1)	0.53806
	10	133	220	0.9930(-1)	0.44028
	50	1087	1775	0.12814	0.19376
101x51	10^{-3}	24	366	0.5386(-1)	0.72513
	10^{-2}	23	352	0.5396(-1)	0.72461
	10^{-1}	22	338	0.5492(-1)	0.71946
	1	23	352	0.6300(-1)	0.67443
	2	33	338	0.7000(-1)	0.63410
	5	67	680	0.8463(-1)	0.54484
	10	133	1337	0.9910(-1)	0.44817
	50	1048	10938	0.12941	0.29776
201x101	10^{-3}	24	8938	0.5358(-1)	0.72685
	10^{-2}	24	8900	0.5367(-1)	0.72633
	10^{-1}	23	8538	0.5464(-1)	0.72118
	1	23	8538	0.6276(-1)	0.67616
	2	33	1427	0.6979(-1)	0.63590
	5	67	2845	0.8447(-1)	0.54688
	10	133	5618	0.9903(-1)	0.45053
	50	1012	42690	0.12976	0.20615

Πίνακας 5.1: Αδιάστατη ροή μάζας κατά μήκος του κατακόρυφου άξονα συμμετρίας και συντελεστής οπισθέλκουσας στην κινούμενη πλάκα - DVM.

$$A = H/W = 0.5$$

<i>Αριθμός κόμβων</i>	δ	<i>Αριθμός επαναλήψεων</i>	<i>CPU time(sec)</i>	<i>G</i>	<i>Cd</i>
41x21	10 ⁻³	22	37	0.5330(-1)	0.72831
	10 ⁻²	22	36	0.5340(-1)	0.72744
	10 ⁻¹	22	36	0.5436(-1)	0.71906
	1	20	36	0.6244(-1)	0.65490
	2	29	18	0.6941(-1)	0.60813
	5	64	30	0.8387(-1)	0.52327
	10	147	60	0.9798(-1)	0.43964
	50	1532	570	0.12612	0.23695
101x51	10 ⁻³	22	169	0.5331(-1)	0.72843
	10 ⁻²	22	167	0.5341(-1)	0.72757
	10 ⁻¹	22	167	0.5437(-1)	0.71918
	1	20	160	0.6246(-1)	0.65500
	2	29	517	0.6951(-1)	0.60814
	5	64	1023	0.8421(-1)	0.52265
	10	148	2231	0.9882(-1)	0.43716
	50	1571	22703	0.12922	0.21297
201x101	10 ⁻³	23	6183	0.5331(-1)	0.72846
	10 ⁻²	23	6182	0.5341(-1)	0.72760
	10 ⁻¹	23	6180	0.5437(-1)	0.71921
	1	21	5703	0.6249(-1)	0.65503
	2	29	2253	0.6953(-1)	0.60816
	5	64	4850	0.8428(-1)	0.52256
	10	148	11065	0.9892(-1)	0.43673
	50	1574	117677	0.12911	0.21291

Πίνακας 5.2: Αδιάστατη ροή μάζας κατά μήκος του κατακόρυφου άξονα συμμετρίας και συντελεστής οπισθέλκουσας στην κινούμενη πλάκα - IMM.

$$A = H/W = 1$$

<i>Αριθμός κόμβων</i>	δ	<i>Αριθμός επαναλήψεων</i>	<i>CPU time(sec)</i>	<i>G</i>	<i>Cd</i>
21x21	10 ⁻³	27	114	0.9867(-1)	0.66580
	10 ⁻²	26	248	0.9876(-1)	0.66526
	10 ⁻¹	21	206	0.9965(-1)	0.65998
	1	23	216	0.10734	0.61484
	2	34	38	0.11432	0.57501
	5	73	77	0.12976	0.48712
	10	157	165	0.14584	0.39296
	50	1516	1570	0.17936	0.16851
51x51	10 ⁻³	25	527	0.9716(-1)	0.67770
	10 ⁻²	25	526	0.9724(-1)	0.67716
	10 ⁻¹	22	470	0.9806(-1)	0.67189
	1	22	466	0.10544	0.62718
	2	35	187	0.11230	0.58800
	5	75	381	0.12802	0.50182
	10	153	787	0.14479	0.40929
	50	1351	6804	0.18098	0.18143
101x101	10 ⁻³	29	2213	0.9684(-1)	0.68157
	10 ⁻²	29	2247	0.9692(-1)	0.68103
	10 ⁻¹	24	1860	0.9772(-1)	0.67576
	1	25	1937	0.10496	0.63110
	2	35	1153	0.11183	0.59207
	5	75	2444	0.12771	0.50638
	10	154	5012	0.14474	0.41444
	50	1308	42204	0.18144	0.18755

Πίνακας 5.3: Αδιάστατη ροή μάζας κατά μήκος του κατακόρυφου άξονα συμμετρίας και συντελεστής οπισθέλκουσας στην κινούμενη πλάκα - DVM.

$$A = H/W = 1$$

Αριθμός κόμβων	δ	Αριθμός επαναλήψεων	CPU time(sec)	G	Cd
22x22	10 ⁻³	24	17	0.9628(-1)	0.68491
	10 ⁻²	24	17	0.9635(-1)	0.68423
	10 ⁻¹	23	16.9	0.9708(-1)	0.67733
	1	19	16.5	0.10421	0.62481
	2	28	6	0.11104	0.58441
	5	70	10	0.12615	0.50321
	10	175	20	0.14158	0.42139
	50	1916	180	0.16283	0.26935
52x52	10 ⁻³	24	158	0.9647(-1)	0.68517
	10 ⁻²	24	159	0.9655(-1)	0.68446
	10 ⁻¹	23	157	0.9734(-1)	0.67759
	1	20	148	0.10451	0.62499
	2	28	104	0.11137	0.58429
	5	71	204	0.12729	0.50108
	10	175	446	0.14426	0.41378
	50	2019	4759	0.17803	0.21204
102x102	10 ⁻³	24	2169	0.9647(-1)	0.68522
	10 ⁻²	24	2153	0.9655(-1)	0.68451
	10 ⁻¹	24	2143	0.9733(-1)	0.67765
	1	20	1907	0.10455	0.62504
	2	28	1743	0.11147	0.58429
	5	71	5957	0.12747	0.50072
	10	175	11996	0.14462	0.41230
	50	2076	133037	0.18086	0.19750

Πίνακας 5.4: Αδιάστατη ροή μάζας κατά μήκος του κατακόρυφου άξονα συμμετρίας και συντελεστής οπισθέλκουσας στην κινούμενη πλάκα - IMM.

$$A = H/W = 2$$

<i>Αριθμός κόμβων</i>	δ	<i>Αριθμός επαναλήψεων</i>	<i>CPU time(sec)</i>	<i>G</i>	<i>Cd</i>
21x41	10 ⁻³	36	302	0.10591	0.65547
	10 ⁻²	34	285	0.10596	0.65498
	10 ⁻¹	24	206	0.10649	0.65017
	1	20	176	0.11168	0.60843
	2	33	70	0.11775	0.57052
	5	75	155	0.13414	0.48480
	10	162	332	0.15139	0.39167
	50	1763	3594	0.18850	0.16824
51x101	10 ⁻³	35	2211	0.10475	0.66714
	10 ⁻²	34	2156	0.10480	0.66665
	10 ⁻¹	24	1547	0.10533	0.66188
	1	21	1364	0.11052	0.62068
	2	33	672	0.11642	0.58347
	5	74	1490	0.13100	0.49949
	10	158	3162	0.14790	0.40798
	50	1546	30652	0.18505	0.18112
101x201	10 ⁻³	35	23921	0.10437	0.67094
	10 ⁻²	34	23227	0.10442	0.67045
	10 ⁻¹	24	16530	0.10490	0.66568
	1	21	13883	0.11026	0.62457
	2	33	2163	0.11613	0.58752
	5	74	4802	0.13088	0.50403
	10	159	10270	0.14749	0.41312
	50	1458	93881	0.18424	0.18724

Πίνακας 5.5: Αδιάστατη ροή μάζας κατά μήκος του κατακόρυφου άξονα συμμετρίας και συντελεστής οπισθέλκουσας στην κινούμενη πλάκα - DVM.

$$A = H/W = 2$$

<i>Αριθμός κόμβων</i>	δ	<i>Αριθμός επαναλήψεων</i>	<i>CPU time(sec)</i>	<i>G</i>	<i>Cd</i>
21x41	10^{-3}	34	69	0.10402	0.67429
	10^{-2}	34	69	0.10407	0.67373
	10^{-1}	33	68	0.10458	0.66820
	1	19	66	0.10968	0.62210
	2	27	21	0.11531	0.58323
	5	71	33	0.12962	0.50217
	10	184	65	0.14442	0.42036
	50	2097	607	0.16513	0.26872
51x101	10^{-3}	34	2145	0.10409	0.67453
	10^{-2}	34	2163	0.10413	0.67396
	10^{-1}	33	2123	0.10463	0.66843
	1	20	1637	0.11000	0.62227
	2	27	1251	0.11584	0.58311
	5	71	2601	0.13055	0.50006
	10	185	6527	0.14678	0.41278
	50	2362	40762	0.18006	0.21168
101x201	10^{-3}	34	6895	0.10412	0.67458
	10^{-2}	34	6901	0.10417	0.67401
	10^{-1}	33	6990	0.10466	0.66848
	1	20	4060	0.11004	0.62232
	2	27	7640	0.11594	0.58311
	5	71	19487	0.13072	0.49970
	10	185	50326	0.14720	0.41131
	50	2365	163356	0.18012	0.21150

Πίνακας 5.6: Αδιάστατη ροή μάζας κατά μήκος του κατακόρυφου άξονα συμμετρίας και συντελεστής οπισθέλκουσας στην κινούμενη πλάκα - IMM.

5.6 Σύγκριση των μεθόδων ολοκληρωτικών εξισώσεων και διακριτών ταχυτήτων

Από την παραπάνω μαθηματική επεξεργασία καθώς και από τα αριθμητικά αποτελέσματα της Παραγράφου 5.5 είναι δυνατόν να εξαχθούν γενικά συμπεράσματα για την μέθοδο των ολοκληρωτικών εξισώσεων σε σύγκριση με την μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων στο πρόβλημα της κοιλότητας, όσον αφορά την ακρίβεια και τον απαιτούμενο υπολογιστικό. Έτσι:

- Στην μέθοδο των ολοκληρωτικών εξισώσεων ο απαιτούμενος υπολογιστικός χρόνος καθώς προσεγγίζεται η υδροδυναμική περιοχή αυξάνει κατά πολύ σε σχέση με την μέθοδο DVM. Το γεγονός αυτό παρατηρήθηκε και στο πρόβλημα του ορθογωνίου αγωγού. Αντίθετα για μικρές τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ η μέθοδος των ολοκληρωτικών εξισώσεων απαιτεί μικρότερο υπολογιστικό χρόνο σε σχέση με την DVM.
- Η ακρίβεια της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων μειώνεται καθώς προσεγγίζεται η υδροδυναμική περιοχή και διαφέρει από την μέθοδο DVM έως και 2 σημαντικά ψηφία. Η βελτίωση των αποτελεσμάτων επιτυγχάνεται καθώς το χωρικό πλέγμα γίνεται πιο πυκνό.
- Από τα αριθμητικά αποτελέσματα της παραγράφου 5.5 αξίζει να σημειωθεί ότι ο αριθμός των επαναλήψεων τόσο για την μέθοδο IMM όσο και για την μέθοδο DVM εξακολουθεί να είναι της ίδιας τάξης μεγέθους, γεγονός που παρατηρήθηκε τόσο στα μονοδιάστατα προβλήματα όσο και στο πρόβλημα του ορθογωνίου αγωγού.
- Ο υπολογιστικός χρόνος που απαιτείται για την μέθοδο των ολοκληρωτικών εξισώσεων εξακολουθεί να είναι της τάξεως

$$t_{IMM} \approx (N_x \times N_y)^2$$

όπου N_x και N_y ο αριθμός των κόμβων στις δύο διευθύνσεις του υπολογιστικού πλέγματος. Ο αντίστοιχος υπολογιστικός χρόνος για την μέθοδο DVM είναι της τάξης

$$t_{DVM} \approx N_x \times N_y \times N_{c_p} \times N_\theta$$

όπου N_{c_p} είναι ο αριθμός των μοριακών ταχυτήτων ενώ N_θ ο αριθμός των γωνιών που επιλέγονται. Είναι προφανές ότι στην περίπτωση όπως το μέγεθος του χωρικού πλέγματος γίνει μεγαλύτερο από τον αριθμό των μοριακών ταχυτήτων, ο απαιτούμενος υπολογιστικός χρόνος για την IMM είναι μεγαλύτερος από αυτόν στην DVM. Το γεγονός αυτό δικαιολογείται και από τα αριθμητικά αποτελέσματα της Παραγράφου 5.5.

- Εφαρμόζοντας την μέθοδο των ολοκληρωτικών εξισώσεων παρατηρήθηκε ότι δεν παρουσιάζονται ταλαντωτικές συμπεριφορές (ray effects) στα μακροσκοπικά μεγέθη που οφείλονται στις ασυνέχειες των οριακών συνθηκών. Αντίθετα στην μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων παρατηρούνται τέτοιου είδους φαινόμενα, γεγονός που επηρεάζει την ακρίβεια των αποτελεσμάτων.

Κεφάλαιο 6

Ανακεφαλαίωση – συμπεράσματα

Το αντικείμενο της συγκεκριμένης εργασίας είναι η εφαρμογή της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων σε πρότυπα προβλήματα ροής εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας όπως πχ. ροή σε ορθογώνιο αγωγό και ροή σε κοιλότητα. Η συγκεκριμένη μέθοδος όπως προκύπτει από την μαθηματική επεξεργασία δεν είναι τετριμμένη και απαιτείται επίπονη προσπάθεια για την εφαρμογή της.

Τα πλεονεκτήματα και τα μειονεκτήματα της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων παρουσιάστηκαν στα επιμέρους Κεφάλαια 3, 4 και 5 για τα διάφορα προβλήματα ροής. Στο κεφάλαιο αυτό θα συνοψίσουμε όλα τα παραπάνω χαρακτηριστικά της μεθόδου σε σύγκριση με την μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων ώστε να προκύψει μια γενικευμένη εικόνα της συγκεκριμένης μεθοδολογίας.

Το κύριο σημείο διαφοροποίησης της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων σε σχέση με την μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων είναι ότι κατά την μέθοδο αυτή εξάγονται εξισώσεις κλειστής μορφής για όλες τις μακροσκοπικές ποσότητες του προβλήματος δίχως να περιέχουν την άγνωστη συνάρτηση κατανομής. Το χαρακτηριστικό αυτό επιτρέπει την αντιμετώπιση προβλημάτων, όπου η συνάρτηση κατανομής δεν είναι συνεχής, με ένα ολοκληρωτικό χαρακτήρα. Αντίθετα, η μέθοδος των διακριτών ταχυτήτων βασίζεται στον υπολογισμό της άγνωστης συνάρτησης κατανομής, ενώ οι μακροσκοπικές ποσότητες προκύπτουν ως δευτερεύοντα μεγέθη παίρνοντας τις αντίστοιχες ροπές της συνάρτησης κατανομής.

Σημειώνεται ότι η μαθηματική διαδικασία διατύπωσης της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων είναι επίπονη, ενώ ο προγραμματισμός σχετικά απλός. Στην μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων η μαθηματική επεξεργασία είναι σχετικά απλή, ενώ ο προγραμματισμός περισσότερο πολύπλοκος.

Ένα άλλο χαρακτηριστικό της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων είναι η υπόθεση ότι οι μακροσκοπικές ποσότητες σε κάθε κελί του πλέγματος παραμένουν σταθερές σε αυτό. Η παραδοχή αυτή απλοποιεί την μαθηματική επεξεργασία καθώς και την διακριτοποίηση των ολοκληρωτικών εξισώσεων στο χωρικό πλέγμα. Επιπλέον δεν απαιτείται διακριτοποίηση των εξισώσεων στο χώρο των

μικροσκοπικών ταχυτήτων αφού έχει έμμεσα ενσωματωθεί στον υπολογισμό των ολοκληρωμάτων Abramowitz. Οι συναρτήσεις Abramowitz με την σειρά τους δεν εξαρτώνται από το σει των μικροσκοπικών ταχυτήτων αλλά είναι δυνατόν να υπολογισθούν με χρήση ασυμπτωτικών εκφράσεων. Έτσι η μέθοδος των ολοκληρωτικών εξισώσεων αντιμετωπίζει το πρόβλημα από μια άλλη οπτική γωνία σε σχέση με την μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων και είναι ανεξάρτητη του σει των διακριτών μοριακών ταχυτήτων.

Με την μέθοδο των ολοκληρωτικών εξισώσεων αντιμετωπίζονται επιτυχώς ταλαντωτικές συμπεριφορές των μακροσκοπικών ποσοτήτων που οφείλονται σε ασυνέχειες των οριακών συνθηκών. Αντίθετα στην μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων το πρόβλημα των ρυτιδώσεων είναι εμφανές και αντιμετωπίζεται εφαρμόζοντας μια ειδική διάσπαση στο προς επίλυση πρόβλημα.

Όσον αφορά την ακρίβεια των αποτελεσμάτων η μέθοδος των ολοκληρωτικών εξισώσεων εξαρτάται άμεσα από το μέγεθος του χωρικού πλέγματος. Παρατηρείται ότι όσο πιο πυκνό πλέγμα εφαρμόζεται τόσο μεγαλύτερη ακρίβεια επιτυγχάνεται. Η αύξηση της ακρίβειας των αποτελεσμάτων απαιτεί μεγάλο υπολογιστικό χρόνο, γεγονός στο οποίο και μειονεκτεί η συγκεκριμένη μεθοδολογία.

Ανακεφαλαιώνοντας, η μέθοδος των ολοκληρωτικών εξισώσεων αποτελεί μια εναλλακτική μεθοδολογία επίλυσης, η οποία εφαρμόζεται για πρώτη φορά σε προβλήματα δυο διαστάσεων. Η συγκεκριμένη μεθοδολογία συγκρίθηκε με την μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων τόσο σε ακρίβεια όσο και σε υπολογιστικό χρόνο και εξήχθησαν θετικά και αρνητικά συμπεράσματα για την μεθοδολογία.

Μελλοντικά η μέθοδος των ολοκληρωμάτων θα μπορούσε να επεκταθεί σε προβλήματα ρών σε αγωγούς ποικίλων διατομών (π.χ. τριγωνικοί, τραπεζοειδείς) καθώς και στην αντιμετώπιση μη μόνιμων προβλημάτων.

Βιβλιογραφικές Αναφορές

1. M. Abramowitz, I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. 9th ed., New York: Dover, 890, 1972.
2. G. A. Bird. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford University Press, Oxford, 1994.
3. P. L. Bhatnagar, E. P. Gross, M. Krook. *A model for collision processes in gases*. Phys. Rev., 94, 511-515, 1954.
4. B. Bhushan. *Springer Handbook of Nanotechnology*. Springer, 2004.
5. L. Boltzmann. *Lectures on Gas Theory*. New York: Dover Publications, 1995.
6. C. Cercignani. *The Boltzmann equation and its applications*. New York: Springer, 1988.
7. C. Cercignani. *Mathematical Methods in Kinetic Theory*. Plenum, New York, 1969.
8. S. Chapman and T. G. Cowling. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. University Press, Cambridge, 1952.
9. G. D. Doolen and S. Chen. *Lattice Boltzmann method for fluid flows*. Annu. Rev. Fluid Mech., 30:329–364, 1998.
10. R. A. East. *A reusable space-rescue vehicle: Re-entry simulation*. Phil. Trans. R. Soc. Lond. A357, 2177-2195, 1999.
11. M. Epstein. *A model of the wall boundary condition in kinetic theory*. J. AIAA 5(10), 1967, 101-114.
12. J. H. Ferziger, H. G. Kaper. *Mathematical Theory of Transport Processes in Gases*. North-Holland, Amsterdam, 1972.
13. R. P. Feynman. *The Feynman Lectures on Physics*. Addison-Wesley, 1977.
14. M. Gad-el-Hak, *The MEMS Handbook*. CRC Press, 2002.
15. M. A. Gallis, J. M. Reese, D. A. Lockerby. *New directions in fluid dynamics: non-equilibrium aerodynamics and Microsystems flows*. Phil. Trans. R. Soc.

- Lond. A361, 2967-2988, 2003.
16. S. Harris. *An Introduction to the Theory of the Boltzmann Equation*. Dover Publications, 1971.
 17. C. M. Ho and Y. C. Tai. *Micro-electro-mechanical systems (MEMS) and fluid flows*.
 18. Ann. Rev. Fluid. Mech., 30:579–612, 1998.
 19. K. Huang. *Statistical Mechanics*. John Wiley and Sons, 1987.
 20. G. E. Karniadakis, A. Beskok. *Micro flows: fundamentals and simulation*. Springer- Verlag New York, 2002.
 21. J. Kestin, K. Knierim, E. A. Mason, B. Najafi, S. T. Ro, M. Waldman. *Equilibrium and Transport properties of the noble gases and their mixtures at low density*. J. Phys. Chem. Ref. Data, 13(1), 1984.
 22. M. N. Kogan. *Rarefied Gas Dynamics*. Plenum, New York, 1969.
 23. J. McLennan. *Introduction to Non-equilibrium Statistical Mechanics*. Prentice Hall, 1988.
 24. S. Naris, D. Valougeorgis, D. Kalempa and F. Sharipov. *Gaseous mixture flow between two parallel plates in the whole range of the gas rarefaction*. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 336, (3-4), 294-318, 2004.
 25. S. Naris, D. Valougeorgis, F. Sharipov and D. Kalempa. *Discrete velocity modeling of gaseous mixture flows in MEMS*. Supperlattices and Microstructures, 35, 3-6, 629-643, 2004.
 26. S. Naris and D. Valougeorgis. *Rarefaction effects in the driven cavity flow over the whole range of Knudsen number*. Physics of Fluids, 17, 097106, 2005.
 27. E. M. Shakhov. *Method of Investigation of Rarefied Gas Flows*. Nauka Moscow, 1974.
 28. F. Sharipov. *Rarefied gas flow through a long tube at arbitrary pressure and temperature drops*. J. Vac. Sci. Technol. A, 15(4): 2434-2436, 1997.
 29. F. Sharipov. *Application of the Cercignani-Lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows. II. Slip and jump coefficients*. Eur. J. Mech.

- B/Fluids, 22, 133-143, 2003.
30. F. Sharipov, V. Seleznev. *Data on internal rarefied gas flows*. J. Phys. Chem. Ref. Data, 27, 657–706, 1998.
 31. D. Valougeorgis, S. Naris. *Acceleration schemes of the discrete velocity method: Gaseous flows in rectangular microchannels*. SIAM J. Sci. Comput., 25, 534, 2003.
 32. P. Welander. *On the temperature jump in a rarefied gas*, Ark. Fys. 7, 507-553, 1957.
 33. F. White. *Fluid Mechanics*. McGraw-Hill, 2002.
 34. M. M. R. Williams. *Mathematical methods in particle transport theory*. London: Butterworth, 1971.
 35. hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/kinetic/menfre.html
 36. www.iter.org

Παράρτημα Α

Ο υπολογισμός των ολοκληρωμάτων Abramowitz πραγματοποιείται είτε αριθμητικά χρησιμοποιώντας μία από τις τρεις παρακάτω μεθόδους αριθμητικής ολοκλήρωσης:

- i. Ολοκλήρωση *Gauss-Hermitte*
- ii. Ολοκλήρωση *Gauss-Legendre*
- iii. Ολοκλήρωση *Gauss*

είτε κάνοντας χρήση ασυμπτωτικών σειρών ανάλογα με το μέγεθος του ορίσματος x των συναρτήσεων Abramowitz.

Αριθμητική Ολοκλήρωση

i Ολοκλήρωση *Gauss-Hermitte*

Η αριθμητική ολοκλήρωση των

$$T_n(x) = \int_0^{\infty} \mu^n e^{-\mu^2 - \frac{x}{\mu}} d\mu,$$

πραγματοποιείται με την βοήθεια των ριζών των πολυωνύμων Hermitte. Κατά την μαθηματική επεξεργασία παρατηρούμε ότι οι ρίζες των πολυωνύμων Hermitte ισχύουν για το διάστημα ολοκλήρωσης $(-\infty, +\infty)$ ενώ το ολοκλήρωμα Abramowitz ισχύει στο διάστημα ολοκλήρωσης $[0, +\infty)$. Για τον λόγο αυτό πραγματοποιείται ένας μετασχηματισμός των ριζών Hermitte από το διάστημα $(-\infty, +\infty)$ στο διάστημα $[0, +\infty)$.

Πραγματοποιώντας μια αλλαγή μεταβλητής θέτουμε $\mu = e^{\xi}$ και το παραπάνω ολοκλήρωμα γράφεται:

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} \mu^n e^{-\mu^2 - \frac{\alpha_0}{\mu}} d\mu &= \int_0^{\infty} F(\mu) d\mu = \int_{-\infty}^{+\infty} F(e^{\xi}) e^{\xi} d\xi = \int_{-\infty}^{+\infty} F(e^{\xi}) e^{\xi} e^{\xi^2} e^{\xi^{-2}} d\xi = \\ &= \sum_{i=1}^n F(e^{\xi_i}) e^{\xi_i} e^{\xi_i^2} w_i \xrightarrow{s_i = e^{\xi_i}} \sum_{i=1}^n F(s_i) s_i s_i^{\xi_i} w_i = \sum_{i=1}^n s_i^n e^{-\frac{\alpha_0}{s_i}} e^{-s_i^2} s_i s_i^{\xi_i} w_i \end{aligned}$$

όπου ξ_i και w_i είναι οι ρίζες και οι συντελεστές βαρύτητας των πολυωνύμων Hermitte αντίστοιχα.

ii Ολοκλήρωση Gauss-Legendre

Κατά την ολοκλήρωση Gauss-Legendre απαραίτητος είναι ο μετασχηματισμός των ριζών των πολυωνύμων Legendre από το διάστημα $[-1,1]$ στο διάστημα $[0,+\infty)$.

Πραγματοποιώντας αλλαγή μεταβλητής θέτουμε $\mu = \frac{1+\xi}{1-\xi} \rightarrow \xi = \frac{\mu-1}{\mu+1}$. Τότε το παραπάνω ολοκλήρωμα γράφεται:

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 \mu^n e^{-\mu^2 - \frac{x}{\mu}} d\mu &= \int_{-1}^1 F(\mu) d\mu = \int_{+\infty}^0 F\left(\frac{1+\xi}{1-\xi}\right) \frac{2}{(1-\xi)^2} d\xi = \\ &= - \int_0^{+\infty} F\left(\frac{1+\xi}{1-\xi}\right) \frac{2}{(1-\xi)^2} d\xi = \sum_{i=1}^M F\left(\frac{1+\xi_i}{1-\xi_i}\right) \frac{2}{(1-\xi_i)^2} w_i \end{aligned}$$

Στο άθροισμα που προέκυψε από την ολοκλήρωση κατά Gauss-Legendre, ξ_i και w_i είναι οι ρίζες και οι συντελεστές βαρύτητας των πολυωνύμων Legendre αντίστοιχα και επίσης M είναι ο αριθμός των ριζών που θα χρησιμοποιηθούν.

iii Ολοκλήρωση Gauss

Η ολοκλήρωση Gauss γίνεται με την βοήθεια ριζών που προκύπτουν από συγκεκριμένα πολυώνυμα, τα οποία είναι δυνατόν να κατασκευαστούν. Τα πολυώνυμα αυτά πρέπει να ικανοποιούν συγκεκριμένες ιδιότητες (πχ. ορθογωνιότητα) ώστε τελικά να προκύψουν οι ρίζες και οι συντελεστές βαρύτητάς τους για την αριθμητική ολοκλήρωση τύπου Gauss.

Ασυμπτωτικές εκφράσεις

Οι συναρτήσεις Abramowitz είναι δυνατόν να υπολογιστούν κάνοντας χρήση διαφορετικών ασυμπτωτικών εκφράσεων καθώς το $x \rightarrow \infty$ ή καθώς το $x \rightarrow 0$ (Abramowitz, 1972). Συγκεκριμένα στην περίπτωση όπου το $x \rightarrow 0$ ισχύουν οι παρακάτω αναγωγικές σχέσεις

$$\frac{dT_n(x)}{dx} = -T_{n-1}(x) \quad (\text{A.1})$$

$$2T_n(x) = (n-1)T_{n-2}(x) + xT_{n-3}(x) \quad (\text{A.2})$$

ενώ το $T_1(x)$ εκφράζεται από την παρακάτω δυναμοσειρά

$$T_1(x) = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} (a_k \ln x + b_k) x^k \quad (\text{A.3})$$

όπου

$$a_k = \frac{-2a_{k-2}}{k(k-1)(k-2)}, \quad b_k = \frac{-2b_{k-2} - (3k^2 - 6k + 2)a_k}{k(k-1)(k-2)} \quad \text{για } k >$$

ενώ $a_0 = a_1 = 0$, $a_2 = -b_0$, $b_0 = 1$, $b_1 = -\sqrt{\pi}$ και $b_2 = 0.6341754927$. Όλες οι υπόλοιπες συναρτήσεις T_n υπολογίζονται κάνοντας χρήση των παραπάνω αναγωγικών σχέσεων.

Στην περίπτωση όπου το $x \rightarrow \infty$ οποιαδήποτε συνάρτηση Abramowitz υπολογίζεται κάνοντας χρήση της παρακάτω δυναμοσειράς.

$$T_n(x) \approx \sqrt{\frac{\pi}{3}} \left(\frac{t}{3}\right)^{n/2} e^{-t} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a_k}{t^k} \quad (\text{A.4})$$

όπου $t = 3\left(\frac{x}{2}\right)^{2/3}$ ενώ

$$a_0 = 1, \quad a_1 = \frac{1}{12}(3n^2 + 3n - 1)$$

και

$$12(k+2)a_{k+2} = -(12k^2 + 36k - 3n^2 - 3n + 25)a_{k+1} + \frac{1}{2}(n-2k)(2k+3-n)(2k+3+2n)a_k$$

Στην συνέχεια θα παρουσιασθούν τέσσερις πίνακες με αριθμητικά αποτελέσματα του υπολογισμού των συναρτήσεων Abramowitz για διαφορετικά x και για $n = -1, 0, 1, 2, 3$. Οι πίνακες θα αντιστοιχούν σε αποτελέσματα με αριθμητική ολοκλήρωση όσο και με την χρήση των παραπάνω ασυμπτωτικών εκφράσεων.

Στον Πίνακα 4, ο οποίος αντιστοιχεί στα αποτελέσματα με χρήση των ασυμπτωτικών εκφράσεων, για $x < 7$ έχουν χρησιμοποιηθεί οι αναγωγικές σχέσεις (A.1), (A.2) και (A.3) για $x \rightarrow 0$. Ο αριθμός των όρων που χρησιμοποιήθηκαν στο ανάπτυγμα είναι 140. Αντίθετα για $x \geq 7$ χρησιμοποιήθηκε η σχέση (A.4) ενώ ο αριθμός των όρων που χρησιμοποιήθηκε στο ανάπτυγμα είναι 30.

x	$T_{-1}(x)$	$T_0(x)$	$T_1(x)$	$T_2(x)$	$T_3(x)$
0	0.919917+01	0.886226	0.500000	0.443113	0.500000
10^{-2}	0.375642+01	0.838746	0.491399	0.438156	0.495593
10^{-1}	0.159663+01	0.634321	0.426339	0.396992	0.458055
1	0.186928	0.150045	0.146563	0.168487	0.221586
2	0.496005-01	0.498764-01	0.574466-01	0.745387-01	0.107323
5	0.295785-02	0.402247-02	0.592705-02	0.940587-02	0.159832-01
7	0.660760-03	0.100458-02	0.163073-02	0.281495-02	0.514679-02
10	0.918904-04	0.157269-03	0.283718-03	0.538086-03	0.107006-02
20	0.423291-06	0.912297-06	0.203445-05	0.468906-05	0.111574-04
30	0.491590-08	0.121264-07	0.307114-07	0.798017-07	0.212607-06
50	0.253004-11	0.739875-11	0.220505-10	0.669504-10	0.207019-09
100	0.575378-18	0.211981-17	0.790460-17	0.298288-16	0.113895-15

Πίνακας 1: Συναρτήσεις Abramowitz με αριθμητική ολοκλήρωση Gauss-Legendre ($N=64$).

x	$T_{-1}(x)$	$T_0(x)$	$T_1(x)$	$T_2(x)$	$T_3(x)$
0	0.106248+02	0.886209	0.500000	0.443113	0.499998
10^{-2}	0.375678+01	0.838745	0.491400	0.438156	0.495591
10^{-1}	0.159663+01	0.634321	0.426339	0.396992	0.458054
1	0.186928	0.150045	0.146563	0.168487	0.221584
2	0.496005-01	0.498765-01	0.574465-01	0.745385-01	0.107321
5	0.295785-02	0.402247-02	0.592701-02	0.940569-02	0.159827-01
7	0.660761-03	0.100458-02	0.163070-02	0.281484-02	0.514659-02
10	0.918898-04	0.157264-03	0.283701-03	0.538052-03	0.107006-02
20	0.423198-06	0.912302-06	0.203535-05	0.469353-05	0.111718-04
30	0.492635-08	0.121577-07	0.307778-07	0.798585-07	0.212261-06
50	0.249419-11	0.728039-11	0.217206-10	0.662254-10	0.206212-09
100	0.582148-18	0.209199-17	0.759867-17	0.279462-16	0.104263-15

Πίνακας 2: Συναρτήσεις Abramowitz με αριθμητική ολοκλήρωση Gauss-Hermitte ($N=64$).

x	$T_{-1}(x)$	$T_0(x)$	$T_1(x)$	$T_2(x)$	$T_3(x)$
0	0.515592+01	0.886226	0.500000	0.443113	0.500000
10^{-2}	0.399717+01	0.840897	0.491373	0.438156	0.495593
10^{-1}	0.157748+01	0.634473	0.426370	0.396992	0.458055
1	0.186987	0.150046	0.146561	0.168487	0.221586
2	0.496010-01	0.498773-01	0.574467-01	0.745387-01	0.107323
5	0.295787-02	0.402248-02	0.592705-02	0.940587-02	0.159832-01
7	0.660758-03	0.100458-02	0.163073-02	0.281495-02	0.514679-02
10	0.918905-04	0.157269-03	0.283718-03	0.538086-03	0.107006-02
20	0.423291-06	0.912297-06	0.203445-05	0.468906-05	0.111574-04
30	0.491590-08	0.121264-07	0.307114-07	0.798017-07	0.212607-06
50	0.253004-11	0.739875-11	0.220504-10	0.669504-10	0.207019-09
100	0.575378-18	0.211981-17	0.790458-17	0.298288-16	0.113895-15

Πίνακας 3: Συναρτήσεις Abramowitz με αριθμητική ολοκλήρωση Gauss ($N=16$).

x	$T_{-1}(x)$	$T_0(x)$	$T_1(x)$	$T_2(x)$	$T_3(x)$
0	-	-	-	-	-
10^{-2}	0.375678+01	0.838745	0.491399	0.438156	0.495593
10^{-1}	0.159663+01	0.634321	0.426339	0.396992	0.458055
1	0.186928	0.150046	0.146562	0.168487	0.221586
2	0.496012-01	0.498773-01	0.574452	0.745398-01	0.107322
5	0.295958-02	0.401724-02	0.593129-02	0.940758-02	0.159744-01
7	0.656080-03	0.100142-02	0.164554-02	0.279699-02	0.515053-02
10	0.918899-04	0.157268-03	0.283720-03	0.538084-03	0.107006-02
20	0.423291-06	0.912297-06	0.203445-05	0.468906-05	0.111574-04
30	0.491590-08	0.121264-07	0.307114-07	0.798017-07	0.212607-06
50	0.253004-11	0.739875-11	0.220505-10	0.669504-10	0.207019-09
100	0.575378-18	0.211981-17	0.790459-17	0.298288-16	0.113895-15

Πίνακας 4: Συναρτήσεις Abramowitz με ασυμπτωτικές εκφράσεις.

Συγκρίνοντας τους Πίνακες 1, 2, 3 και 4 παρατηρείται ότι τα αποτελέσματα των ασυμπτωτικών σχέσεων παρουσιάζουν ακρίβεια έως και 6 σημαντικά ψηφία σε σχέση με την αριθμητική ολοκλήρωση. Το γεγονός αυτό μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι αντί της αριθμητικής ολοκλήρωσης, οι συναρτήσεις Abramowitz μπορούν να υπολογιστούν σωστά από τις ασύμπτωτες εκφράσεις. Με τον τρόπο αυτό η μέθοδος των ολοκληρωτικών εξισώσεων αποδεδειγμένα εντελώς με την επιλογή του ίδιου σετ ριζών και συντελεστών βαρύτητας που επιλέγονται και στην μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων. Έτσι αποφεύγεται η σχέση της μεθόδου των ολοκληρωτικών εξισώσεων με τον διακριτό αριθμό διακριτών ταχυτήτων και την διακριτοποίηση στον χώρο των μικροσκοπικών ταχυτήτων. Επίσης από τους παραπάνω πίνακες προκύπτει ότι, όλες οι ασυμπτωτικές εκφράσεις δεν λειτουργούν για $x=0$ λόγω της παρουσίας του νεπέριου λογαρίθμου σε όλες τις εκφράσεις. Τέλος η ασυμπτωτική εξίσωση (A.4) δεν δίνει ικανοποιητικά αποτελέσματα για $x < 7$ γι' αυτό και στην περίπτωση αυτή χρησιμοποιούνται οι εξισώσεις (A.1), (A.2) και (A.3).

Παράρτημα Β

Μέθοδος Διακριτών Ταχυτήτων (DVM)

Η μέθοδος των διακριτών ταχυτήτων DVM [Naris και Valougeorgis, 2003, 2004, 2005] αποτελεί την πιο διαδεδομένη υπολογιστική μέθοδο για τη αριθμητική επίλυση της κινητικής εξίσωσης Boltzmann. Η βασική της αρχή είναι η επιλογή ορισμένων διευθύνσεων και τιμών της μικροσκοπικής ταχύτητας, για τις οποίες αν είναι γνωστή η λύση της εξίσωσης Boltzmann, είναι δυνατός ο προσδιορισμός των μακροσκοπικών ιδιοτήτων. Όπως είναι φυσικό, όσο μεγαλύτερο είναι το πλήθος των διευθύνσεων και των ταχυτήτων τόσο πιο ακριβής θα είναι η προσέγγιση των μακροσκοπικών ιδιοτήτων. Για να επιτευχθεί η βέλτιστη επιλογή των ταχυτήτων που συνεπάγεται ακριβή υπολογισμό των μακροσκοπικών ιδιοτήτων, επιλέγονται ταχύτητες, οι οποίες ισούνται με τις ρίζες κάποιου ορθογώνιου πολυωνύμου ώστε στην συνέχεια να εφαρμοστεί μια αριθμητική ολοκλήρωση τύπου Gauss που αποτελεί την πλέον αξιόπιστη αριθμητική ολοκλήρωση. Έτσι πραγματοποιείται η παρακάτω αντιστοιχία μεταξύ συνεχούς και διακριτού χώρου

$$(c_x, c_y, c_z) \rightarrow (\mu_m, \eta_n, \theta_k)$$

ή σε πολικό σύστημα

$$(c_p, \theta) \rightarrow (\lambda_i, \theta_j)$$

$$\text{όπου } c_p = \sqrt{c_x^2 + c_y^2 + c_z^2}.$$

Αυτό συμβαίνει διότι οι μακροσκοπικές ιδιότητες αποτελούν ροπές της λύσης της εξίσωσης Boltzmann ως προς τη μικροσκοπική ταχύτητα και επομένως ολοκληρώματά της. Ουσιαστικά δηλαδή, απαιτείται μια σειρά από αριθμητικές ολοκληρώσεις, το σφάλμα των οποίων ελαχιστοποιείται όταν αυτή γίνεται με την εφαρμογή κάποιας μεθοδολογίας τύπου Gauss. Έτσι απαιτείται η γνώση της ολοκληρώσιμης ποσότητας για τιμές της μεταβλητής ολοκλήρωσης ίσες με τις ρίζες του πολυωνύμου που καθορίζει τη μεθοδολογία. Για παράδειγμα, αν το σχήμα ολοκλήρωσης είναι το Gauss-Legendre τάξης N απαιτείται η γνώση της λύσης της εξίσωσης Boltzmann για τιμές της μικροσκοπικής ταχύτητας ίση με τις ρίζες του πολυωνύμου Legendre τάξης N .

Το σχήμα είναι επαναληπτικό και στη γενική περίπτωση συγκλίνει. Βέβαια η

σύγκλιση αυτή είναι αργή, ιδίως όταν ο αριθμός Knudsen είναι μικρός. Παρόλα αυτά τα αποτελέσματα θεωρούνται αξιόπιστα σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen. Τα πιθανά σφάλματα που μπορεί να προκύψουν είναι συνήθως αριθμητικής φύσης και ειδικότερα σφάλματα στρογγυλοποίησης, κάτι που σημαίνει ότι παρουσιάζονται σε πιο έντονη μορφή όταν αυξάνει πολύ ο αριθμός των επαναλήψεων. Για την αντιμετώπιση του προβλήματος αυτού, έχουν προταθεί ορισμένες βελτιώσεις και σχήματα επιτάχυνσης της σύγκλισης των αλγορίθμων.

Με την συγκεκριμένη αριθμητική μέθοδο οι Νάρης και Βαλουγεώργης έχουν επιλύσει μεγάλο εύρος προβλημάτων και υπάρχει μεγάλη εμπειρία τόσο σε απλά μονοδιάστατα προβλήματα, όσο και σε προβλήματα σε δύο και σε τρεις διαστάσεις. [Naris και Valougeorgis, 2005].

Παράρτημα Γ

Υπολογισμός αποστάσεων

Η διακριτοποίηση των γωνιών σε όλο το 2π γίνεται σύμφωνα με τον παρακάτω τύπο

$$\varphi = 2\pi \left(\frac{m - 1/2}{M} \right), 1 \leq m \leq M \quad (\Gamma-1)$$

όπου M είναι ο αριθμός των γωνιών που έχει αρχικά επιλεχθεί.

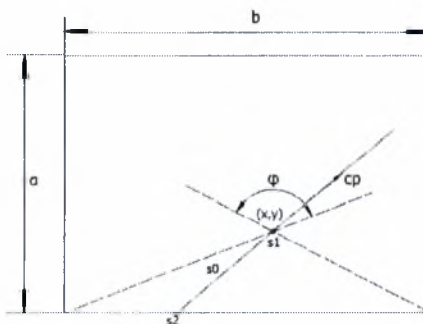
Ο υπολογισμός της απόστασης μεταξύ των σημείων s_1 και s_2 κατά μήκος της εκάστοτε χαρακτηριστικής εξαρτάται από την γωνία φ . Η γωνία φ καθορίζει σε ποιο τοίχωμα καταλήγει η χαρακτηριστική και για τον λόγο αυτό διακρίνονται τέσσερεις περιπτώσεις για κάθε ένα τοίχωμα.

Η χαρακτηριστική συναντάει το κάτω τοίχωμα για το εύρος γωνιών φ (Σχήμα Γ-1)

$$\arctan\left(\frac{y}{x}\right) < \varphi < \frac{\pi}{2} + \arctan\left(\frac{1-x}{y}\right).$$

Σε όλα τα σχήματα που παρατίθενται, με a συμβολίζεται το ύψος του αγωγού ενώ με b το πλάτος του. Ο λόγος των δύο πλευρών ισούται με $A = \frac{a}{b}$. Η απόσταση μεταξύ των δύο σημείων ισούται με

$$s_0 = \frac{y}{\sin \varphi} \quad (\Gamma-2)$$



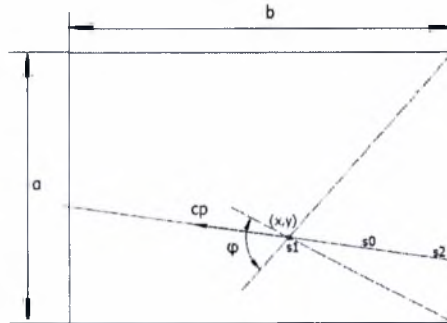
Σχήμα Γ-1. Απεικόνιση χαρακτηριστικής που τέμνει το κάτω τοίχωμα.

Όμοια η χαρακτηριστική συναντάει το δεξί τοίχωμα (Σχήμα Γ-2), όταν η γωνία φ κυμαίνεται από

$$\frac{\pi}{2} + \arctan\left(\frac{1-x}{y}\right) < \varphi < \pi + \arctan\left(\frac{A-y}{1-x}\right)$$

Η απόσταση τότε είναι

$$s_0 = \frac{1-x}{\sin\left(\varphi - \frac{\pi}{2}\right)} = -\frac{1-x}{\cos\varphi} \quad (\Gamma-3)$$



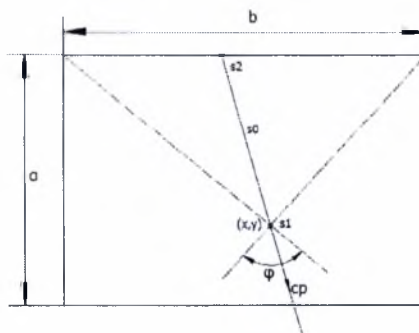
Σχήμα Γ-2. Απεικόνιση χαρακτηριστικής που τέμνει το δεξιό τοίχωμα.

Η χαρακτηριστική συναντάει το πάνω τοίχωμα (Σχήμα Γ-3), όταν η γωνία φ βρίσκεται στο διάστημα

$$\pi + \arctan\left(\frac{A-y}{1-x}\right) < \varphi < \frac{3\pi}{2} + \arctan\left(\frac{x}{1-y}\right)$$

απόσταση τότε είναι

$$s_0 = \frac{A-y}{\sin(\varphi - \pi)} = -\frac{A-y}{\sin\varphi} \quad (\Gamma-4)$$



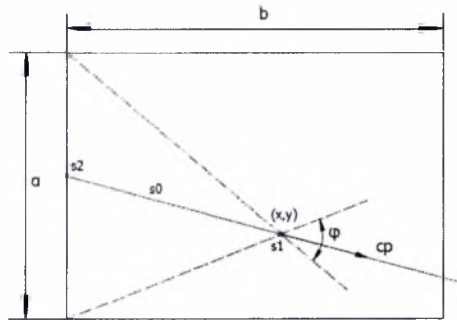
Σχήμα Γ-3. Απεικόνιση χαρακτηριστικής που τέμνει το πάνω τοίχωμα.

Τέλος η χαρακτηριστική συναντάει το αριστερό τοίχωμα (Σχήμα Γ-4), όταν η γωνία φ βρίσκεται στο διάστημα

$$\frac{3\pi}{2} + \arctan\left(\frac{x}{A-y}\right) < \varphi < \arctan\left(\frac{y}{x}\right).$$

Η απόσταση τότε είναι

$$s_0 = \frac{x}{\sin\left(\varphi - \frac{3\pi}{2}\right)} = \frac{x}{\cos\varphi} \quad (\Gamma-5)$$



Σχήμα Γ-4. Απεικόνιση χαρακτηριστικής που τέμνει το αριστερό τοίχωμα.

Παράρτημα Δ

Οι πηγαίοι κώδικες που χρησιμοποιήθηκαν στην συγκεκριμένη εργασία βρίσκονται στο συνοδευόμενο CD-ROM με τα παρακάτω αντίστοιχα ονόματα για κάθε περίπτωση.

Δ.1 ΠΗΓΑΙΟΙ ΚΩΔΙΚΕΣ FORTRAN ΓΙΑ ΡΟΗ COUETTE ΚΑΙ POISEUILLE (ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3).

i. Μέθοδος DVM

- Ροή COUETTE: DVM_C1.f90
- Ροή POISEUILLE: DVM_P1.f90

ii. Μέθοδος IMM

- Ροή POISEUILLE: IMM_P1.f90 [Εξ. (3.4-1)]
- Ροή POISEUILLE: IMM_P2.f90 [Εξ. (3.4-6)]
- Ροή POISEUILLE: IMM_P3.f90 [Εξ. (3.4-8)]
- Ροή COUETTE: IMM_C1.f90 [Εξ. (3.4-2)]
- Ροή COUETTE: IMM_C2.f90 [Εξ. (3.4-7)]
- Ροή COUETTE: IMM_C3.f90 [Εξ. (3.4-9)]

Δ.2 ΠΗΓΑΙΟΙ ΚΩΔΙΚΕΣ FORTRAN ΓΙΑ ΡΟΗ ΣΕ ΟΡΘΟΓΩΝΙΟ ΑΓΩΓΟ (ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4).

- Μέθοδος DVM: DUCT_DVM.f90
- Μέθοδος IMM: DUCT_IMM.f90

Δ.3 ΠΗΓΑΙΟΙ ΚΩΔΙΚΕΣ FORTRAN ΓΙΑ ΡΟΗ ΣΕ ΚΟΙΛΟΤΗΤΑ (ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5).

- Μέθοδος DVM: CAVITY_DVM.f90
- Μέθοδος IMM: CAVITY_IMM.f90

