ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ

ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ

ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΑΣ

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΡΟΕΣ ΑΕΡΙΩΝ ΣΕ ΑΓΩΓΟΥΣ ΠΟΙΚΙΛΩΝ ΔΙΑΤΟΜΩΝ ΣΕ ΟΛΟ ΤΟ ΕΥΡΟΣ ΤΟΥ ΑΡΙΘΜΟΥ KNUDSEN ΜΕ ΝΤΕΤΕΡΜΙΝΙΣΤΙΚΕΣ ΚΑΙ ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΕΣ

υπό

ΒΑΡΟΥΤΗ Β. ΣΤΥΛΙΑΝΟΥ

Διπλωματούχου Μηχανολόγου Μηχανικού Βιομηχανίας, ΠΘ, 2004

Υπεβλήθη για την εκπλήρωση μέρους των
απαιτήσεων για την απόκτηση του Διδακτορικού Διπλώματος

ΒΟΛΟΣ, ΔΕΚΕΜΒΡΙΟΣ 2008

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

©2008 Βαρούτης Β. Στυλιανός

Η έγκριση της Διδακτορικής Διατριβής 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). Επίσης, οι απόψεις του συγγραφέα δεν αντανακλούν απαραίτητα αυτές της Ευρωπαϊκής Ένωσης.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Εγκρίθηκε από τα μέλη της επταμελούς εξεταστικής επιτροπής:

Πρώτος εξεταστής (Επιβλέπων)	Καθηγητής Βαλουγεώργης Δημήτριος Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών Βιομηχανίας Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας
Δεύτερος εξεταστής	Καθηγητής Μποντόζογλου Βασίλειος Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών Βιομηχανίας Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας
Τρίτος εξεταστής	Αναπληρωτής Καθηγητής Ανδρίτσος Νικόλαος Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών Βιομηχανίας Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας
Τέταρτος εξεταστής	Καθηγητής Βλάχος Νικόλαος Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών Βιομηχανίας Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας
Πέμπτος εξεταστής	Αναπληρωτής Καθηγητής Μαθιουλάκης Δημήτριος Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών Εθνικό Μετσόβειο Πολυτεχνείο
Έκτος εξεταστής	Αναπληρωτής Καθηγητής Σταπουντζής Ερρίκος Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών Βιομηχανίας Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας
Έβδομος εξεταστής	Καθηγητής Λιακόπουλος Αντώνιος Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Η διδακτορική μου διατριβή αφιερώνεται

στους γονείς μου Ευαγγελία και Βίκτωρα Βαρούτη

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Ευχαριστιες

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 πρόοδο της ερευνητικής μου προσπάθειας για την απόκτηση του Διδακτορικού Διπλώματος. Ο τρόπος σκέψης που μου ενέπνευσε, ο οποίος συνίσταται στην κριτική αντιμετώπιση των επιστημονικών θεμάτων, αποτελεί ένα εξαίρετο εφόδιο για την επιστημονική μου πορεία. Επίσης, είμαι ευγνώμων στα υπόλοιπα μέλη της εξεταστικής επιτροπής, Καθηγητή Βλάχο Νικόλαο, Καθηγητή Μποντόζογλου Βασίλειο, Αναπληρωτή Καθηγητή Ανδρίτσο Νικόλαο, Αναπληρωτή Καθηγητή Μαθιουλάκη Δημήτριο, Αναπληρωτή Καθηγητή Σταπουντζή Ερρίκο και Καθηγητή Λιακόπουλο Αντώνιο για την προσεκτική ανάγνωση της διδακτορικής διατριβής και για τις πολύτιμες υποδείξεις τους.

Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Καθηγητή Sharipov Felix του Τμήματος Φυσικής του Κρατικού Πανεπιστημίου της πολιτείας Παρανά - Βραζιλία, τον Δρ. Day Christian του Ινστιτούτου Τεχνικής Φυσικής του ερευνητικού κέντρου της Καρλσρούης - Γερμανία, καθώς και τον Δρ. Stefan Stefanov της Βουλγαρικής Ακαδημίας Επιστημών - Σόφια, για την εποικοδομητική συνεργασία τους. Ευχαριστίες θα ήθελα να εκφράσω και στον Καθηγητή Άλκη Γρέκο για την επιστημονική υποστήριξη που παρέχει όλα αυτά τα χρόνια προς την ερευνητική ομάδα του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας στο Εθνικό Πρόγραμμα Ελεγχόμενης Θερμοπυρηνικής Σύντηξης.

Ένα μεγάλο ευχαριστώ στους Δρ. Νάρη Στέργιο, Δρ. Μπρέγιαννη Γιώργο, Μισδανίτη Σεραφείμ και Πανταζή Σαράντη για την πολύτιμη συμπαράσταση και βοήθεια τους κατά την εκπόνηση της διατριβής, καθώς επίσης και στην Ράπτη Βάγια για την πολύτιμη βοήθεια της στην διόρθωση του παρόντος κειμένου.

Τέλος είμαι ευγνώμων στους γονείς μου, Βίκτωρα και Ευαγγελία Βαρούτη και τον αδερφό μου Δημήτρη για την αγάπη τους και την υλική και ψυχολογική υποστήριξή τους όλα αυτά τα χρόνια.

Η διδακτορική διατριβή έχει υποστηριχθεί οικονομικά για σειρά ετών από το Εθνικό Πρόγραμμα Ελεγχόμενης Θερμοπυρηνικής Σύντηξης: ASSOCIATION EURATOM - HELLENIC REPUBLIC. Επίσης ο Υποψήφιος Διδάκτορας στα πλαίσια της δράσης mobility του προγράμματος EURATOM είχε την ευκαιρία να επισκεφτεί κατ' επανάληψη το Ερευνητικό Κέντρο της Καρλσρούης και να συνυπάρξει ενεργά στην εκτέλεση πειραμάτων. Συμπληρωματικά, έχει επίσης υποστηριχθεί μερικώς από το πρόγραμμα ΠΥΘΑΓΟΡΑΣ του Υπουργείου Εθνικής Παιδείας καθώς και από το πρόγραμμα ΕΛΛΑΔΑ-ΓΑΛΛΙΑ: Κοινά ερευνητικά και τεχνολογικά προγράμματα της Γενικής Γραμματείας Έρευνας και Τεχνολογίας.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Ροές σε αγωγούς ποικίλων διατομών σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen με ντετερμινιστικές και στοχαστικές μεθοδολογίες

υπό

Στυλιανού Β. Βαρούτη

Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών Βιομηχανίας
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Πεδίον Άρεως, 38334, Βόλος, Ελλάδα
Email: svarouti@mie.uth.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗΣ ΔΙΑΤΡΙΒΗΣ

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Την τελευταία δεκαετία έντονο ερευνητικό ενδιαφέρον έχει εκδηλωθεί στο πεδίο της δυναμικής των αραιοποιημένων αερίων. Η στροφή της επιστημονικής κοινότητας προς την κατεύθυνση αυτή οφείλεται κυρίως στην εμφάνιση νέων τεχνολογιών και εφαρμογών που περιλαμβάνουν μεταξύ άλλων την τεχνολογία χαμηλού, μέσου και υψηλού κενού, την αεροδιαστημική μεγάλων υψομέτρων και τέλος την νανοτεχνολογία.

Η αραιοποίηση ενός αερίου καθορίζεται από τον αριθμό Knudsen (Kn), ο οποίος ορίζεται ως το πηλίκο της μέσης ελεύθερης διαδρομής των μορίων του αερίου προς ένα χαρακτηριστικό μήκος του εκάστοτε προβλήματος. Εν γένει, σε ροές μακριά από την θερμοδυναμική ισορροπία, η θεωρία του συνεχούς μέσου καταρρέει και οι γνωστές υδροδυναμικές και καταστατικές εξισώσεις παύουν να ισχύουν. Στις περιπτώσεις αυτές η αντιμετώπιση του προβλήματος βασίζεται στην Κινητική Θεωρία των αερίων, η οποία περιλαμβάνει δύο βασικές προσεγγίσεις για την επίλυση σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen.

Η πρώτη προσέγγιση βασίζεται στην κινητική θεωρία, όπως αυτή εκφράζεται μέσω της εξίσωσης Boltzmann ή των αντίστοιχων κινητικών μοντέλων. Ο βασικός άγνωστος είναι η συνάρτηση κατανομής, ενώ οι μακροσκοπικές ποσότητες που ενδιαφέρουν προκύπτουν από διάφορες ροπές της συνάρτησης κατανομής. Τονίζεται ότι σε αρκετές εφαρμογές τα κινητικά μοντέλα αποδεικνύονται αρκετά αξιόπιστα και είναι δυνατόν να χρησιμοποιηθούν ως εναλλακτική επιλογή της εξίσωσης Boltzmann, έχοντας ακριβή αποτελέσματα με λιγότερο υπολογιστικό κόστος σε όλο το εύρος του αριθμού Kn. Χαρακτηριστικά παραδείγματα κινητικών μοντέλων είναι το BGK και το Shakhov για ισοθερμοκρασιακές και μη ισοθερμοκρασιακές ροές αντίστοιχα. Η δεύτερη προσέγγιση είναι η μέθοδος Direct Simulation Monte Carlo (DSMC), η οποία παρακάμπτει την επίλυση της εξίσωσης Boltzmann και έχει αποδειχθεί ότι είναι πολύ αποτελεσματική σε περιπτώσεις γρήγορων ροών.

Οι δύο παραπάνω προσεγγίσεις χρησιμοποιούνται για την επίλυση αραιοποιημένων ροών διαμέσου αγωγών. Στην περίπτωση αργών ροών ή όταν το μήκος των αγωγών είναι αρκετά μεγάλο, τότε η ροή είναι πλήρως ανεπτυγμένη και περιγράφεται από τη γραμμική κινητική θεωρία. Στην περίπτωση αγωγών πεπερασμένου μήκους, τα φαινόμενα των άκρων δεν μπορούν να αγνοηθούν και η ροή είναι μη γραμμική. Τότε για την επίλυση τέτοιων ροών η πιο αποδοτική μέθοδος είναι η μέθοδος DSMC.

Στο πλαίσιο αυτό η παρούσα διδακτορική διατριβή εστιάζεται στην μελέτη ροών αραιο-

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

ποιημένων αερίων σε αγωγούς μικρού και μεγάλου μήκους με ποικίλες διατομές (κυλινδρική, δακτυλοειδή, ορθογώνια, τριγωνική και τραπεζοειδή) εφαρμόζοντας ντετερμινιστικές και στοχαστικές μεθοδολογίες αντίστοιχα.

Η πρώτη προσέγγιση βασίζεται στην επίλυση του γραμμικού κινητικού μοντέλου BGK με την χρήση της μεθόδου των διακριτών ταχυτήτων (Discrete Velocity Method - DVM), η οποία έχει εφαρμοστεί με επιτυχία στην επίλυση της εξίσωσης Boltzmann ή των αντίστοιχων κινητικών μοντέλων. Η μέθοδος DVM χαρακτηρίζεται από την ντετερμινιστική διακριτοποίηση των κινητικών εξισώσεων στον φυσικό χώρο και στον χώρο των μοριακών ταχυτήτων.

Στην τελευταία προσέγγιση γίνεται χρήση ενός αναβαθμισμένου αλγορίθμου της μεθόδου DSMC, ο οποίος βασίζεται στο μοντέλο Non Time Counter για την μοντελοποίηση των μοριακών συγκρούσεων. Η μέθοδος DSMC αποτελεί μια στοχαστική μεθοδολογία. Η θεμελιώδης ιδέα της μεθόδου έγκειται στην μοντελοποίηση ενός στατιστικά μεγάλου αριθμού σωματιδίων. Η βασική προσέγγιση της μεθόδου DSMC είναι ο διαχωρισμός της ελεύθερης κίνησης των σωματιδίων και των ενδομοριακών συγκρούσεων σε ένα στοιχειώδες χρονικό βήμα. Η κίνηση των σωματιδίων μοντελοποιείται ντετερμινιστικά, ενώ οι μοριακές συγκρούσεις μοντελοποιούνται στοχαστικά. Ο πυρήνας του αλγορίθμου της μεθόδου DSMC αποτελείται από τέσσερεις βασικές διαδικασίες: α) την ελεύθερη κίνηση των σωματιδίων β) την μετονομασία των σωματιδίων γ) την μοντελοποίηση των μοριακών συγκρούσεων και δ) τον υπολογισμό των μακροσκοπικών ποσοτήτων. Τα τέσσερα παραπάνω βήματα πραγματοποιούνται ανεξάρτητα σε κάθε χρονικό βήμα.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ ΔΙΑΤΡΙΒΗΣ

Τα περιεχόμενα της διδακτορικής διατριβής είναι τα εξής:

Α. Επίλυση ροών σε αγωγούς μεγάλου μήκους με γραμμική κινητική θεωρία

- Ανάπτυξη και εξειδίκευση κινητικών αλγορίθμων αποτελεσματικής επίλυσης γραμμικών κινητικών εξισώσεων σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen.
- Επίλυση ροής σε δακτυλοειδείς αγωγούς απείρου μήκους σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen.
- Υπολογισμός του αριθμού Poiseuille και της ακριβούς υδραυλικής διαμέτρου σε αγωγούς ποικίλων διατομών.
- Συγκρίσεις μεταξύ θεωρητικών και πειραματικών δεδομένων ροής μάζας σε κυλινδρικό, ορθογώνιο, τριγωνικό και τραπεζοειδή αγωγό για όλο το εύρος του αριθμού Knudsen. Στην δραστηριότητα αυτή περιλαμβάνεται:

  α) Η μεθοδολογία διαστατοποίησης για τον υπολογισμό ροής μάζας σε κυκλικούς, δακτυλοειδείς, ορθογώνιους, τριγωνικούς και τραπεζοειδείς αγωγούς,

  β) Η επέκταση της ανάλυσης σε μεγάλες βαθμίδες πίεσης ανάντη και κατάντη της ροής και

  γ) Ο υπολογισμός της κατανομής πίεσης κατά μήκος του αγωγού.

Β. Επίλυση ροών πεπερασμένου μήκους με την μέθοδο DSMC

- Ανάπτυξη, εμβάθυνση και εξειδίκευση του αλγορίθμου Direct Simulation Monte Carlo:

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

α) Εισαγωγή κυλινδρικής γεωμετρίας,

β) Χρήση ειδικών επιφανειών διαχωρισμού του πεδίου ροής με διαφορετικούς συντελεστές βαρύτητας,

γ) Εφαρμογή πλέγματος με περισσότερα από ένα επίπεδα πύκνωσης και

δ) Αντιμετώπιση επιπλέον ειδικών υπολογιστικών θεμάτων

- Επίλυση ροής μονατομικού αερίου μεταξύ παράλληλων πλακών με την χρήση της μεθόδου DSMC και μελέτη της επίδρασης των περιοχών ανάντη και κατάντη της ροής.

- Επίλυση ροής μονατομικού αερίου σε κενό ($P_1/P_0 = 0$) διαμέσου κυλινδρικού αγωγού πεπερασμένου μήκους με την χρήση της μεθόδου DSMC, σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen. Επίσης μελετήθηκε η επίδραση των οριακών συνθηκών και του μοντέλου ενδομοριακού δυναμικού στην αδιάστατη παροχή και πραγματοποιήθηκαν συγκρίσεις με αντίστοιχα πειραματικά δεδομένα.

- Επίλυση ροής μονατομικού αερίου διαμέσου κυλινδρικού αγωγού πεπερασμένου μήκους για $P_1/P_0 \neq 0$.

Τονίζεται ότι το πεδίο ροής καθώς και οι μακροσκοπικές ποσότητες σε ροές σε αγωγούς μεγάλου και πεπερασμένου μήκους διαφέρουν τόσο ποιοτικά όσο και ποσοτικά. Στην πρώτη περίπτωση, η ροή είναι ασυμπίεστη και χαρακτηρίζεται από μικρούς αριθμούς Ma και Re. Στην δεύτερη περίπτωση η ροή είναι συμπιεστή και καλύπτει ένα μεγάλο εύρος του αριθμού Ma. Η ροή είναι δυνατόν να είναι υποηχητική ή υπερηχητική γεγονός που εξαρτάται από τις ροϊκές και γεωμετρικές παραμέτρους που χρησιμοποιούνται.

ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ

Θεωρείται ροή μονατομικού αερίου διαμέσου αγωγού υδραυλικής διαμέτρου D_h και μήκους L. Ο αγωγός συνδέει δύο δοχεία που βρίσκονται σε πίεση P_0 και P_1 ($P_0 > P_1$) αντίστοιχα. Η θερμοκρασία των δοχείων παραμένει σταθερή και ίση με T_0. Η υδραυλική διάμετρος D_h του αγωγού αποτελεί το χαρακτηριστικό μήκος της ροής, ενώ η πλέον πιθανή ταχύτητα $v_0 = \sqrt{2kT_0/m}$, με k την σταθερά Boltzmann και m την μοριακή μάζα, είναι την χαρακτηριστική ταχύτητα.

Στην περίπτωση όπου $L/D_h \gg 1$, τότε η ροή θεωρείται πλήρως ανεπτυγμένη και γραμμική και περιγράφεται από γραμμική κινητική θεωρία. Όταν ο λόγος L/D_h έχει πεπερασμένη τιμή τότε τα φαινόμενα των άκρων δεν μπορούν να αγνοηθούν. Η ροή είναι μη γραμμική και εφαρμόζεται η μέθοδος DSMC. Μια τυπική τιμή του λόγου L/D_h που καθορίζει για το εάν μια ροή θα αντιμετωπιστεί ως γραμμική ή μη είναι $L/D_h = 100$.

Η κύρια παράμετρος της ροής είναι η παράμετρος αραιοποίησης δ, η οποία ορίζεται ως

$$\delta = \frac{P_0 D'_h}{\mu_0 v_0} = \frac{\sqrt{\pi}}{2}\frac{1}{Kn}. \tag{1}$$

Όλα τα αποτελέσματα παρουσιάζονται για όλο το εύρος του δ, από την ελεύθερη μοριακή περιοχή ($\delta = 0$), έως το υδροδυναμικό όριο ($\delta \to \infty$).

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ

Α. Γραμμική κινητική θεωρία

Οι ροές αραιοποιημένων αερίων διαμέσου αγωγών ποικίλων διατομών και απείρου μήκους λόγω βαθμίδας πίεσης, περιγράφονται από το γραμμικό κινητικό μοντέλο BGK, το οποίο έχει αποδειχθεί ότι δίνει αξιόπιστα αποτελέσματα στην περίπτωση ισοθερμοκρασιακών ροών υπό οριακές συνθήκες Maxwell διαχυτικής-κατοπτρικής ανάκλασης.

Η ροή περιγράφεται από το γραμμικοποιημένο κινητικό μοντέλο BGK, το οποίο εκφράζεται ως

$$c_x \frac{\partial \phi}{\partial x} + c_y \frac{\partial \phi}{\partial y} + \delta \phi = 2\delta c_z u - c_z, \tag{2}$$

όπου ϕ είναι η γραμμικοποιημένη συνάρτηση κατανομής, $\boldsymbol{c} = (c_x, c_y, c_z)$ είναι το διάνυσμα της μοριακής ταχύτητας και δ η παράμετρος αραιοποίησης. Η μακροσκοπική ταχύτητα στο δεξί μέλος ορίζεται ως

$$u\left(x, y\right) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_z \phi e^{-c^2} dc_x dc_y dc_z. \tag{3}$$

Η αλληλεπίδραση αερίου-τοιχώματος μοντελοποιείται ως

$$\phi^{(+)} = (1-\alpha)\phi^{(-)}, \qquad \boldsymbol{c} \cdot \boldsymbol{n} > 0. \tag{4}$$

Οι δείκτες $(+)$ και $(-)$ αντιστοιχούν στην συνάρτηση κατανομής των σωματιδίων που φεύγουν και προσπίπτουν στο τοίχωμα αντίστοιχα, ενώ $\boldsymbol{n}$ είναι το μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα στην στερεά επιφάνεια με φορά προς το εσωτερικό της ροής. Ο συντελεστής διαχυτικής ανάκλασης α παίρνει τιμές μεταξύ 0 και 1 και αντιστοιχεί στο ποσοστό των σωματιδίων που πραγματοποιούν διαχυτική ανάκλαση στο τοίχωμα.

Το γραμμικό ολοκληροδιαφορικό πρόβλημα που ορίζεται από τις Εξ.(2) και (3), υπό τις οριακές συνθήκες (4), διακριτοποιούνται με βάση την μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων. Η κινητική εξίσωση διακριτοποιείται κατάλληλα στον φυσικό χώρο και στον χώρο των μοριακών ταχυτήτων και επιλύεται αριθμητικά, εφαρμόζοντας επαναληπτικό χάρτη.

Β. Η μέθοδος DSMC

Η ροή αραιοποιημένων αερίων διαμέσου κυλινδρικών αγωγών πεπερασμένου μήκους λόγω βαθμίδας πίεσης επιλύονται με την μέθοδο Direct Simulation Monte Carlo (DSMC). Η βασική προσέγγιση της μεθόδου DSMC έγκειται στον διαχωρισμό της μοριακής κίνησης από τις μοριακές συγκρούσεις κατά την διάρκεια μικρού χρονικού βήματος Δt. Όλα τα σωματίδια διανύουν συγκεκριμένη απόσταση που αντιστοιχεί στο παραπάνω χρονικό βήμα, ενώ στην συνέχεια ακολουθεί η μοντελοποίηση των μοριακών συγκρούσεων μεταξύ δύο τυχαία επιλεγμένων σωματιδίων του ιδίου κελιού. Το χρονικό βήμα Δt πρέπει να είναι μικρότερο από τον μέσο χρόνο σύγκρουσης. Η μοριακή κίνηση πραγματοποιείται με απλές εξισώσεις κίνησης, ενώ απαραίτητη είναι η ταξινόμηση των σωματιδίων σε κελιά και υποκελιά ώστε οι μοριακές συγκρούσεις να πραγματοποιούνται μεταξύ γειτονικών μορίων. Η στοχαστική διαδικασία επιλογής αντιπροσωπευτικού ζεύγους σωματιδίων για την μοντελοποίηση των μοριακών συγκρούσεων βασίζεται άμεσα σε σχέσεις που πηγάζουν από την κινητική θεωρία. Για τον λόγο αυτό η μέθοδος DSMC εμφανίζει τους ίδιους περιορισμούς με την εξίσωση Boltzmann. Οι περιορισμοί είναι η υπόθεση του μοριακού χάους και η απαίτηση αραιών αερίων.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Για την βελτίωση της αποτελεσματικότητας του αλγορίθμου DSMC εφαρμόστηκαν διάφορες υπολογιστικές τεχνικές. Έτσι, συμπεριλήφθησαν υπολογιστικές περιοχές ανάντη και κατάντη του αγωγού. Έπειτα, χρησιμοποιήθηκαν τρία επίπεδα πύκνωσης του υπολογιστικού πλέγματος, για την βελτίωση της ακρίβειας των αποτελεσμάτων κοντά στα τοιχώματα του αγωγού. Τέλος, για την διατήρηση ομοιόμορφης κατανομής των σωματιδίων στο υπολογιστικό πεδίο χρησιμοποιήθηκαν περιοχές με ειδικό συντελεστή βαρύτητας στην αξονική και ακτινική διεύθυνση. Συγκεκριμένα, χρησιμοποιήθηκαν τρεις περιοχές στην αξονική και επτά στην ακτινική διεύθυνση. Με την συγκεκριμένη τακτική μειώνεται σημαντικά η στατιστική διακύμανση των αποτελεσμάτων, ενώ διατηρείται ο ίδιος αριθμός σωματιδίων κατά μήκος του πεδίου ροής.

ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Α. Αραιοποιημένες ροές σε αγωγούς μεγάλου μήκους και διαφόρων διατομών

Η μέση πίεση ορίζεται ως $\bar{P} = (P_0 + P_1)/2$, το εμβαδόν και η περίμετρος της διατομής ορίζονται ως A' και Γ' αντίστοιχα. Για την επίλυση του συγκεκριμένου προβλήματος εφαρμόζεται η μέθοδος των διακριτών ταχυτήτων (DVM) για την αριθμητική επίλυση του γραμμικού κινητικού μοντέλου BGK και τον υπολογισμό της άγνωστης συνάρτησης κατανομής και των αντίστοιχων μακροσκοπικών μεγεθών, όπως η ταχύτητα, η πίεση, η διατμητική τάση και η αδιάστατη παροχή G.

Έχοντας ως δεδομένα τα κινητικά αποτελέσματα, υπολογίζεται ο αντίστοιχος αριθμός Po για συγκεκριμένη διατομή κάνοντας χρήση της ακόλουθης σχέσης

$$Po = f \times Re = \frac{2\delta}{\overline{u}}, \tag{5}$$

όπου f ο συντελεστής τριβής κατά Darcy, δ είναι η παράμετρος αραιοποίησης και $\overline{u}$ η αδιάστατη μέση ταχύτητα.

Τέλος, η ισχύς της υπόθεσης της ακριβούς υδραυλικής διαμέτρου είναι δυνατόν να ελεγχθεί συγκρίνοντας την υδραυλική διάμετρο D_h και την ακριβή υδραυλική διάμετρο D_h^{exact} και κάνοντας χρήση της εξίσωσης

$$\frac{D_h^{exact}}{D_h} = \sqrt{\frac{Po_{tube}}{Po}}, \tag{6}$$

όπου Po_{tube} είναι ο αριθμός Poiseuille για την περίπτωση κυλινδρικού αγωγού, ενώ Po είναι ο αριθμός Poiseuille για οποιοδήποτε μη κυκλικό αγωγό.

Έρευνα σε θεωρητικό και πειραματικό επίπεδο πραγματοποιήθηκε για την μελέτη πλήρως ανεπτυγμένων ροών σε αγωγούς κυλινδρικής, ορθογώνιας, τριγωνικής και τραπεζοειδούς διατομής σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen. Η θεωρητική-αριθμητική προσέγγιση βασίζεται στο κινητικό μοντέλο BGK με οριακές συνθήκες διαχυτικής-κατοπτρικής ανάκλασης. Τα αντίστοιχα πειραματικά δεδομένα προήλθαν από την πειραματική διάταξη κενού TRANSFLOW, η οποία βρίσκεται στο ερευνητικό κέντρο της Καρλσρούης. Τα θεωρητικά και πειραματικά αποτελέσματα για την ροή μάζας και την ογκομετρική παροχή παρουσιάζουν πολύ καλή συμφωνία. Η μέγιστη διαφορά είναι της τάξης του 10%.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Β. Αραιοποιημένες ροές σε κυλινδρικούς αγωγούς πεπερασμένου μήκους

Οι παράμετροι που χαρακτηρίζουν την λύση του συγκεκριμένου προβλήματος είναι α) η γεωμετρική παράμετρος του λόγου μήκους προς την ακτίνα L/R του αγωγού, β) η παράμετρος αραιοποίησης δ και ο λόγος πίεσης ανάντη και κατάντη της ροής P_1/P_0. Εδώ, R είναι η ακτίνα του αγωγού, η οποία θεωρείται το χαρακτηριστικό μήκος της ροής, P_0 είναι η πίεση αναφοράς, μ_0 είναι το ιξώδες του αερίου σε θερμοκρασία αναφοράς T_0 και $\upsilon_0 = \sqrt{2kT_0/m}$ είναι η πλέον πιθανή ταχύτητα με k την σταθερά Boltzmann και m την μοριακή μάζα του αερίου. Τονίζεται επίσης ότι η παράμετρος αραιοποίησης δ είναι αντιστρόφως ανάλογη του αριθμού Knudsen με $\delta = \sqrt{\pi}/(2Kn)$. Ο κύριος στόχος είναι η μελέτη του πεδίου ροής, η οποία περιλαμβάνει τον υπολογισμό της αδιάστατης παροχής W συναρτήσει των L/R, δ και P_1/P_0. Η αδιάστατη παροχή ορίζεται ως $W = M/\dot{M}$, όπου $\dot{M}$ είναι η ροή μάζας διαμέσου κυκλικής σχισμής (L/R=0) στην ελεύθερη μοριακή περιοχή (δ=0) και για την περίπτωση ροής σε κενό ($P_1/P_0 = 0$). Τα αριθμητικά αποτελέσματα αντιστοιχούν σε διάφορες τιμές των βασικών παραμέτρων που κυμαίνονται ως $0 \leqslant \delta \leqslant 2 \times 10^3$, L/R=0, 0.1, 0.5, 1, 2, 5 και P_1/P_0=0, 0.1, 0.5 and 0.7.

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Στην παρούσα διδακτορική διατριβή πραγματοποιείται μια ολοκληρωμένη μελέτη ροών αραιοποιημένων αερίων σε αγωγούς μεγάλου και μικρού μήκους και διαφόρων γεωμετριών, σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen. Εφαρμόζονται ντετερμινιστικές και στοχαστικές μεθοδολογίες για την επίλυση προβλημάτων ροής με τεχνολογικό ενδιαφέρον στο πεδίο των μικροροών, της τεχνολογίας κενού και της αεροδιαστημικής. Η χρήση των γραμμικών κινητικών μοντέλων καθώς και η μέθοδος DSMC αποδεικνύονται αξιόπιστες τεχνικές για την μελέτη ροών που καλύπτουν όλο το εύρος του αριθμού Knudsen. Συγκεκριμένα, η γραμμική κινητική θεωρία, από πλευράς υπολογιστικού κόστους, θεωρείται ως η πιο αποτελεσματική μεθοδολογία για την επίλυση ροών με χαμηλές ταχύτητες, ενώ αντίθετα η μέθοδος DSMC είναι αποτελεσματική στην επίλυση ροών υψηλών ταχυτήτων.

Τονίζεται ότι τα αποτελέσματα και οι συγκρίσεις που παρατίθενται πραγματοποιούνται για πρώτη φορά σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen και παρουσιάζονται για πρώτη φορά στην διεθνή βιβλιογραφία. Τέλος, η μελέτη του πεδίου ροής σε κυλινδρικούς αγωγούς πεπερασμένου μήκους αναδύει νέα ευρήματα για το μέγεθος των μακροσκοπικών ποσοτήτων του πεδίου και τη συμπεριφορά τους. Η συγκεκριμένη προσπάθεια στοχεύει στην αξιοποίηση όλης της παραπάνω γνώσης σε τεχνολογικές εφαρμογές και συγκεκριμένα στον σχεδιασμό και βελτιστοποίηση μικροδιατάξεων και στον εξοπλισμό τεχνολογίας κενού όπως π.χ. βαλβίδες, αντλίες, δίκτυα σωληνώσεων κ.α.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Flows through channels of various cross sections in the whole range of the Knudsen number using deterministic and stochastic approaches

by

Stylianos V. Varoutis

Department of Mechanical and Industrial Engineering
University of Thessaly, Pedion Areos, 38334, Volos, Greece
Email: svarouti@mie.uth.gr

Extended Ph.D. Summary

Introduction

During the last decade research in rarefied gas dynamics has attracted a lot of attention. This refreshed interest is due to applications in the emerging field of nano- and micro-fluidics, as well as to the more traditional fields of vacuum technology under low, medium and high vacuum conditions and high altitude aerodynamics. Some of these applications may include mass flow controllers in gas metering, micro propulsion nozzles in high altitude and space gas dynamics, pipe networks, pumps and distillation towers in vacuum systems, membranes and porous media in filtering, fabrication processes in microelectronics and gaseous devices in micro-electromechanical systems. It is noted that gas flows through channels of various cross sections may be basic elements of all these equipments.

The gas rarefaction is specified by the Knudsen number (Kn), which is defined as the ratio of the mean free path over a characteristic macroscopic length of the problem. In general, when the flow is considered as far from local equilibrium, then the well known hydrodynamic equations cannot be applied since the continuum assumption and the associated constitutive laws are not valid anymore. In these cases two main approaches can be implemented in order to solve problems in the whole range of the Knudsen number.

The first approach is based on the kinetic theory as expressed by the Boltzmann equation or its associated kinetic models. The main unknown is the distribution function, which obeys a kinetic equation, while all the macroscopic quantities of practical interest are obtained by the moments of the distribution function. In many occasions kinetic model equations are very reliable and can be used as an alternative to the Boltzmann equation, producing accurate results with much less computational effort. Typical examples are the BGK and Shakhov models for isothermal and non-isothermal flows respectively. The second approach is the Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) method, which actually circumvents the direct solution of a kinetic equation and over the years it has been found to be very efficient in solving high speed flows. It is noted that the DSMC method recovers the solution of Boltzmann equation in the limit of vanishing discretization.

Both approaches may be used in the case of rarefied flows through channels. When the flow is very slow or when the channel is adequate long, then the flow is fully developed (no variation in the flow direction) and can be handled by applying linear kinetic theory. When the channel is short, end effects cannot be neglected and the flow becomes non linear. Then, the most efficient approach is the DSMC method.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Within the above framework, the present Ph.D. thesis is focused on the investigation of rarefied gas flows through long and short channels of various cross sections (cylindrical, annular cylindrical, orthogonal, triangular and trapezoidal), using kinetic equations and the DSMC method.

In the former approach, the linear BGK kinetic model is solved using the Discrete Velocity Method (DVM) is applied, which has been extensively used over the years with considerable success in the solution of the Boltzmann equation or of reliable kinetic models. It is characterized by the deterministic discretization of the kinetic equations in the physical and molecular velocity spaces.

In the latter approach, an upgraded version of the DSMC algorithm based on the Non Time Counter Scheme is used. This is a probabilistic scheme. The fundamental idea of the method is to track a large number of statistically representative particles. The primary approximation of DSMC is to uncouple the molecular motion and the intermolecular collisions over small time intervals. Particle motions are modeled deterministically, while the collisions are treated statistically. The core of the DSMC algorithm consists of four primary processes: free particle motion, index and cross-reference of the particles, simulation of collisions, and sampling of the flow field.

Contents of Ph.D. Thesis

The contents of the present Ph.D. thesis are splitted in two main entities and may summarized as follows:

A. Flows through long channels based on kinetic theory

- Development and specialization in kinetic algorithms for solving linearized kinetic equations in the whole range of Kn number.
- Solution of rarefied gas flows through annular circular ducts with infinite length in the whole range of Kn number.
- Calculation of Poiseuille number and the exact hydraulic diameter in ducts of various cross sections.
- Comparisons between corresponding kinetic and experimental results regarding the mass flow rate in long ducts of circular, square, equilateral triangular and isosceles trapezoidal cross sections, in the whole range of Kn number. To perform the detailed comparison the following tasks have been tackled:
    a. Compute the mass flow rate from the dimensionless results.
    b. Extend of analysis to the case of large pressure differences.
    c. Calculate the pressure distribution along the duct.

B. Flows through channels of finite length based on the DSMC method

- Extension and adaptation of the DSMC to the specific problems under consideration. In particular, the following upgrades of the typical DSMC code have been completed:
    a. Adapt to cylindrical geometry.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

b. Use of special surfaces along the flow field with different weighting factors.

c. Implement of multi-level grid.

- Study of rarefied gas flow between parallel plates and investigation of the required size of the inlet and outlet region.
- Study of rarefied gas flow through short tubes into vacuum ($P_2/P_1 = 0$) in the whole range of the Kn number. In addition to the detailed study of the flow field the influence of various gas-surface interaction and intermolecular potential models in the dimensionless flow rate has been examined and a comparison with experimental results has been performed.
- Study of rarefied gas flow through tubes of finite length, for the case of $P_2/P_1 \neq 0$.

It is noted that the flow patterns and the macroscopic quantities differ both qualitatively and quantitatively for flows through long and short channels. In long channels, the flow is incompressible characterized by low Ma and Re numbers. In short channels the flow is compressible and covers a wide range of Ma number. Depending on the flow and geometric parameters the flow may be subsonic or supersonic.

Statement of the problem

Consider the flow of a monatomic gas through a channel of hydraulic diameter D_h and finite length L, connecting two reservoirs, maintained at pressures P_0 and P_1 ($P_0 > P_1$). The temperature in the reservoirs is kept constant and equal to T_0. The geometric configuration for the case of cylindrical channels is shown in Fig. 1. The hydraulic diameter D_h of the channel is the characteristic length and the most probable molecular speed $v_0 = \sqrt{2kT_0/m}$, with k denoting the Boltzmann constant and m the molecular mass of the gas, is the characteristic velocity.

When $L/D_h \gg 1$ then the flow is considered as fully developed and linear and as a results the linearized kinetic theory is implemented. When L/D_h has finite value then end effects can not be neglected. The flow is non linear and the DSMC method is applied. Based on previous research, a typical value of L/D_h that distinguishes the long and short channel approach is $L/D_h = 100$.

A main parameter of the flow is the rarefaction parameter

$$\delta = \frac{P_0 D_h'}{\mu_0 v_0} = \frac{\sqrt{\pi}}{2}\frac{1}{Kn}. \tag{1}$$

All the results are presented in the whole range of δ, from the free molecular limit ($\delta = 0$), through the transition regime, up to the hydrodynamic limit ($\delta \to \infty$).

Methodology

A. Linearized kinetic theory

The flow of rarefied gases through channels of various cross sections and of infinite length due to a pressure gradient is investigated using the linearized BGK equation, which has been

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

shown to provide reliable results in the case of isothermal flows, subject to Maxwell diffuse-specular boundary conditions. The combination of diffuse and specular reflection at the wall pertains to the surface characterization and thus to a more consistent and reliable comparison with experimental results.

The flow is simulated by the linearized reduced BGK kinetic equation given by

$$c_x \frac{\partial \phi}{\partial x} + c_y \frac{\partial \phi}{\partial y} + \delta \phi = 2\delta c_z u - c_z, \tag{2}$$

where ϕ is the linearized distribution function, $\boldsymbol{c} = (c_x, c_y, c_z)$ is the molecular velocity vector and δ the rarefaction parameter. The macroscopic velocity at the right hand side is

$$u\,(x, y) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_z \phi e^{-c^2} dc_x dc_y dc_z. \tag{3}$$

At the stationary boundaries the gas-surface interaction is modeled as

$$\phi^{(+)} = (1 - \alpha)\phi^{(-)}, \qquad \boldsymbol{c} \cdot \boldsymbol{n} > 0. \tag{4}$$

The superscripts $(+)$ and $(-)$ denote distributions leaving from and arriving to the boundaries respectively, while $\boldsymbol{n}$ is the unit vector normal to the boundaries and pointing towards the flow. The coefficient $0 \leq \alpha \leq 1$ is the momentum accommodation coefficient and corresponds to the percentage of diffuse reflection of the gas at the wall.

The linear integro-differential problem defined by Eqs.(2) and (3), with the boundary conditions (4) is discretized using the discrete velocity method. The kinetic equation is discretized properly in the physical and molecular velocity spaces and then it is solved numerically in an iterative manner.

Although in the present work we are using the Discrete Velocity Method (DVM), an alternative approach for handling low speed flows is the so called Integro-Moment Method (IMM) [1,2]. The basic advantage of the IMM is that the derived equations are discretized only in the physical space and no discretization in the molecular velocity space is needed. Therefore, due to its nature, the IMM is not subject to boundary induced discontinuities.

B. The DSMC method

The flow of rarefied gases through tubes of finite length due to a pressure gradient is investigated by the Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) method. The DSMC method simulates a random sample of computational molecules, which move, interact with solid boundaries and collide with each other. At each time step the process is splitting between streaming and collisions. The state of the system is defined by the position and the velocity vectors of the particles. Each model particle in the simulation represents a large number of real molecules in the physical system. Particle motions are modeled deterministically, while the collisions are treated statistically. The core of the DSMC algorithm consists of four primary processes: free particle motion, index and cross-reference of the particles, simulation of collisions, and sampling of the flow field.

In order to improve the efficiency of the DSMC algorithm, various issues have been implemented. First, the non-equilibrium effects at the inlet and outlet of the tube have been considered by including in the computational domain large volumes of the upstream and downstream reservoirs [3,4,5,6].

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Second, the computational grid is structured and non-uniform containing cells with three different sizes. Such a three level grid is required in order to capture the steep macroscopic gradients close to the boundaries and maintain reasonable computational efficiency [3,4,5,6].

Finally, in order to maintain, as much as possible, uniform distributions of particles at each cell in the whole computational domain the concept of the weighting factor has been introduced [3,4,5,6]. In addition to the radial weighting zones, a number of axial weighting zones have been added. More specifically, in all cases, seven radial and three axial weighting zones have been applied. By following this practice, the statistical scattering of the results is significantly reduced, while the same number of model particles is maintained.

Results and discussion

A. Rarefied gas flows in long channels based on kinetic theory

The average pressure is defined as $\bar{P} = (P_0 + P_1)/2$, the area and the perimeter of the cross section are denoted by A' and Γ' respectively, while $D_h = 4A'/\Gamma'$. Implementing the discrete velocity method (DVM) the linearized BGK kinetic equation is solved. The macroscopic distributions of velocity, pressure, shear stress and overall quantities as the dimensionless flow rate G are calculated. Typical values of the flow rate G in terms of rarefaction parameter δ, for various ducts, are presented in Fig. 2 (left). Also various Maxwell diffuse-specular boundary conditions are implemented and typical results of the variation of the dimensionless flow rate G in terms of the accommodation coefficient α are presented in Fig. 2 (right).

In addition, since the kinetic results are available, the corresponding Po numbers can be estimated for any cross section using the equation [7,8,9]

$$Po = f \times Re = \frac{2\delta}{\overline{u}}, \tag{5}$$

where δ is the rarefaction parameter and $\overline{u}$ is the dimensionless mean velocity. In Fig. 3, the Po of various orthogonal ducts with aspect ratio H/W (left) and various annular cylindrical ducts (right) are presented.

Finally, the validity of the concept of the hydraulic diameter can be checked by comparing the approximate with the exact hydraulic diameter D_h and D_h^{exact} respectively according to [7,8,9]

$$\frac{D_h^{exact}}{D_h} = \sqrt{\frac{Po_{tube}}{Po}}, \tag{6}$$

where Po_{tube} is the Poiseuille number of a rarefied gas flow through a circular tube, while Po is the Poiseuille number corresponding to any cross section. In Fig. 4, the relative percent error in the approximate hydraulic diameter of orthogonal (left) and of annular cylindrical ducts (right) with purely diffuse boundary conditions (α=1), are plotted.

A computational and experimental study has been performed for the investigation of fully developed flows through channels of circular, orthogonal, triangular and trapezoidal cross sections in the whole range of the Knudsen number [10,11]. The theoretical-computational approach is based on the BGK kinetic model subject to Maxwell diffuse - specular boundary conditions. The experimental work has been performed at the vacuum test facility TRANS-FLOW at FZK. The computed and measured flow rates and conductances are in all cases in very good agreement. The discrepancies are within 10%. Typical comparisons for the case of isosceles trapezoidal and square duct are presented in Fig. 5.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

B. Rarefied gas flows in tubes of finite length based on the DSMC method

Three parameters determine the solution of this flow configuration. The first one is a geometric parameter, namely, the length to radius ratio L/R of the tube. The other two may be considered as flow parameters. They are the rarefaction parameter δ and the ratio of the downstream to upstream pressure P_1/P_0. Here, R is the radius of the tube and it is taken as the characteristic length, P_0 is the reference pressure, μ_0 is the gas viscosity at reference temperature T_0 and $\upsilon_0 = \sqrt{2kT_0/m}$ is the most probable molecular speed with k denoting the Boltzmann constant and m the molecular mass of the gas. It is also noted that the rarefaction parameter δ is proportional to the inverse Knudsen number, i.e., $\delta = \sqrt{\pi}/(2Kn)$. The objective is to calculate the detailed flow field in the tube and in the two reservoirs including the mass flow rate through the tube in terms of the parameters L/R, δ and P_1/P_0. The results are presented in terms of the reduced flow rate defined as $W = M/\dot{M}$, where $\dot{M}$ is the mass flow rate through an orifice (L/R=0) at the free-molecular limit (δ=0) [3,4,5,6].

Numerical calculations have been carried out for various values of $0 \leqslant \delta \leqslant 2 \times 10^3$, for L/R=0, 0.1, 0.5, 1, 2 and 5 and for P_1/P_0=0, 0.1, 0.5 and 0.7 [3,4,5,6]. In Fig. 6, the dimensionless flow rates W are presented for L/R=1 (left) and L/R=5 (right) in the whole range of δ. We continue with a more detailed observation insight the flow field by providing some results of the macroscopic distributions. The dimensionless distributions of axial velocity, pressure and temperature along the symmetry axis for all three pressure ratios for δ=1 and δ=100, are shown in Fig. 7 and Fig. 8 respectively [3,4,5,6].

Concluding remarks

In the present Ph.D. thesis, a thorough study of rarefied gas flows in long and short ducts of various cross sections, in the whole range of the Knudsen number, has been performed. Deterministic and stochastic approaches have been implemented in order to solve flow problems with technological interest in the field of microfluidics, in vacuum science and technology and in high altitude aerodynamics. Both linearized kinetic theory and DSMC approaches have been proven to be reliable techniques in studying flows in the whole gas rarefaction. In particular, in terms of computational effort, linear kinetic theory is probably the most efficient approach for solving low speed flows, while in the case of high speed flows the DSMC method becomes very productive for moderate and high Knudsen numbers.

In the flow problems examined, novel results have been produced about the flow fields and specific characteristics of the flow. The results for the Poiseuille number and the exact hydraulic diameter, as well as the detailed and complete comparison between computational and experimental results in the whole range of the Knudsen number are presented for first time in the literature. In addition, the investigation of the flow field for flows through short tubes, emerges new insight in the flow properties and characteristics. It is hoped that all the above knowledge may be useful for technological purposes and specially, in the design and optimization of micro devices or vacuum equipments i.e valves, pumps, piping etc.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

References

1. S. Varoutis, D. Valougeorgis and F. Sharipov. Application of the integro-moment method to multidimensional rarefied gas flows subject to boundary induced discontinuities. Journal of Computational Physics, 227, p:6272-6287 (2008).

2. S. Varoutis, D. Valougeorgis and F. Sharipov. The integro-moment method applied to two-dimensional rarefied gas flows. 25th Rarefied Gas Dynamics, St. Petersburg, Russia (2006).

3. S. Varoutis, O. Sazhin, D. Valougeorgis and F. Sharipov. Rarefied gas flow through short tubes into vacuum. Journal of Vacuum Science and Technology, A26(2), p:228-238 (2008).

4. S. Varoutis, O. Sazhin, D. Valougeorgis and F. Sharipov. Rarefied gas flow into vacuum through a short tube. 51st IUVSTA Workshop on Modern Problems and Capability of Vacuum Gas Dynamics, Sweden (2007).

5. S. Varoutis, D. Valougeorgis and F. Sharipov. Rarefied gas flow through tubes of finite length. 26th Rarefied Gas Dynamics, Kyoto, Japan (2008).

6. S. Varoutis, D. Valougeorgis and F. Sharipov. Rarefied gas flow through tubes of finite length. submitted (2008).

7. G. Breyiannis, S. Varoutis and D. Valougeorgis. Rarefied gas flow in concentric annular tube: Estimation of the Poiseuille number and the exact hydraulic diameter. European Journal of Mechanics, B/Fluid, 27(5), p:609-622 (2008).

8. S. Varoutis and D. Valougeorgis. The Poiseuille number in gas flows through nano- and micro- channels in the whole range of the Knudsen number. IUTAM Symposium on Advances in Micro- and Nanofluidics, Dresden, Germany (2007).

9. S. Varoutis, J. Lichnaropoulos, D. Mathioulakis, A. Tserepi and D. Valougeorgis. Estimation of the Poiseuille number and of the exact hydraulic diameter in rarefied gas flows through channels of various cross sections. 1st European Conference on Microfluidics, Bologna, Italy (2008).

10. S. Varoutis, V. Hauer, C. Day and D. Valougeorgis. Experimental and computational study of gas flows through long channels of various cross sections in the whole range of the Knudsen number. Journal of Vacuum Science and Technology A, accepted (2009).

11. J. Pitakarnop, S. Varoutis, D. Valougeorgis, S. Colin and L. Baldas. New experimental setup for accurate measurement of gas microflows. 1st European Conference on Microfluidics, Bologna, Italy (2008).

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

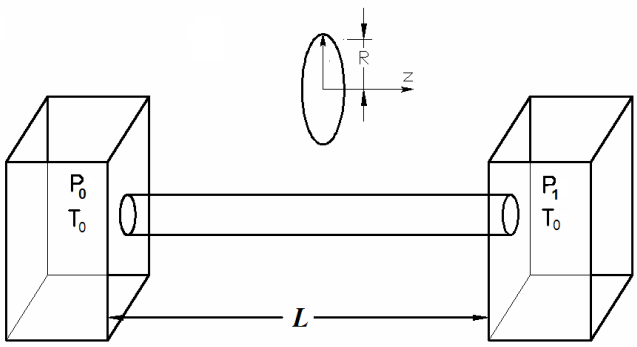


Figure 1: Geometric configuration of a cylindrical channel.

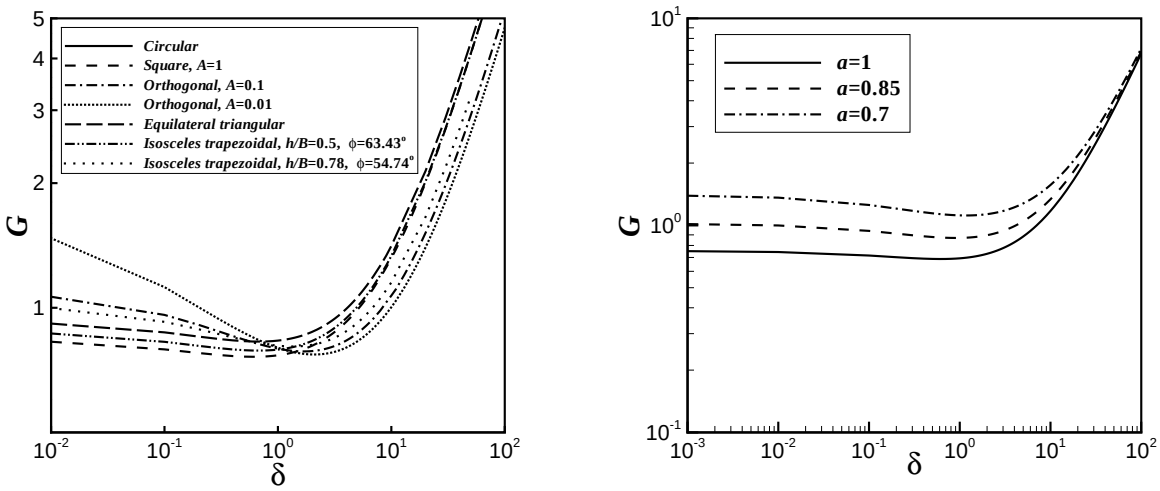


Figure 2: Dimensionless flow rate G for various ducts (left) in terms of δ ; Dimensionless flow rate G for a tube with various α (right) in terms of δ.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

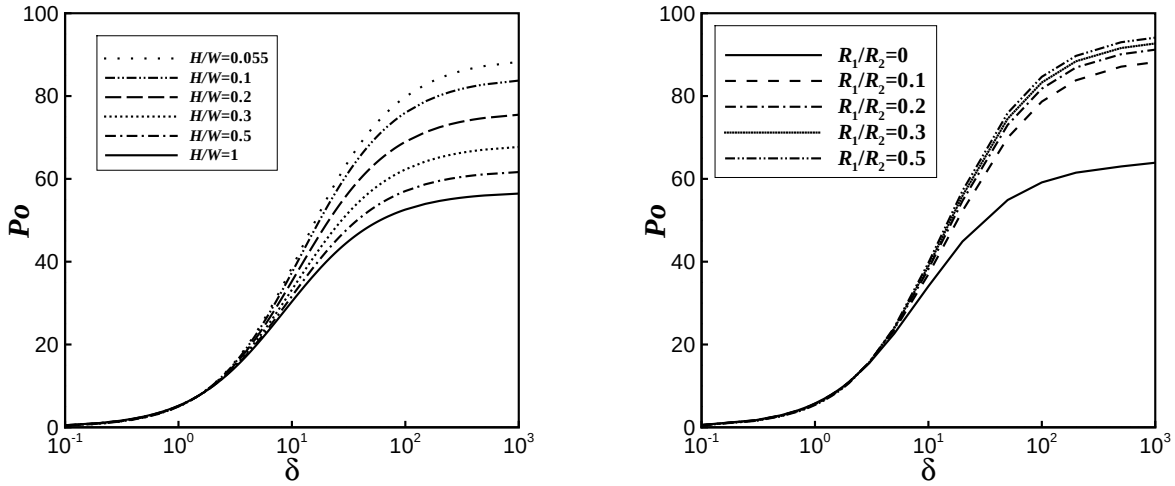


Figure 3: Po numbers for various orthogonal (left) and annular cylindrical ducts (right) in terms of δ.

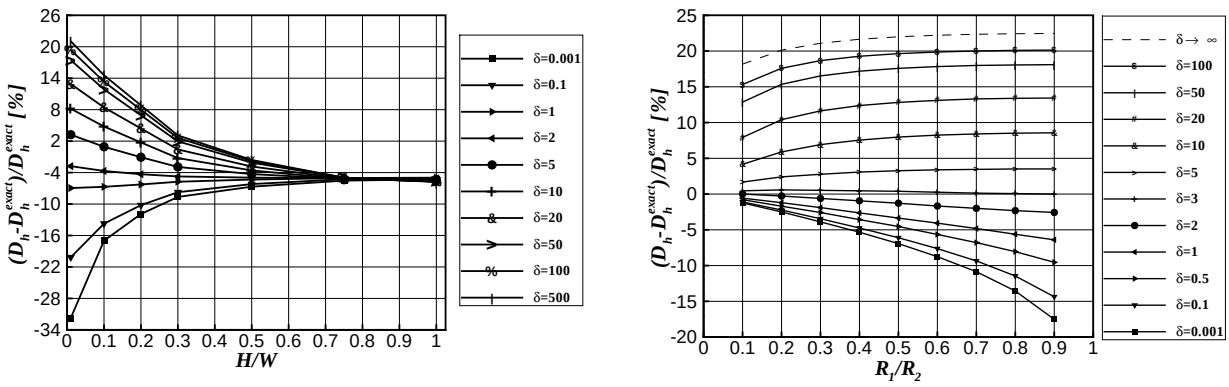


Figure 4: Percent error in the approximate hydraulic diameter compared to the exact hydraulic diameter in terms of rarefaction parameter δ for various orthogonal (left) and annular cylindrical (right) ducts.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

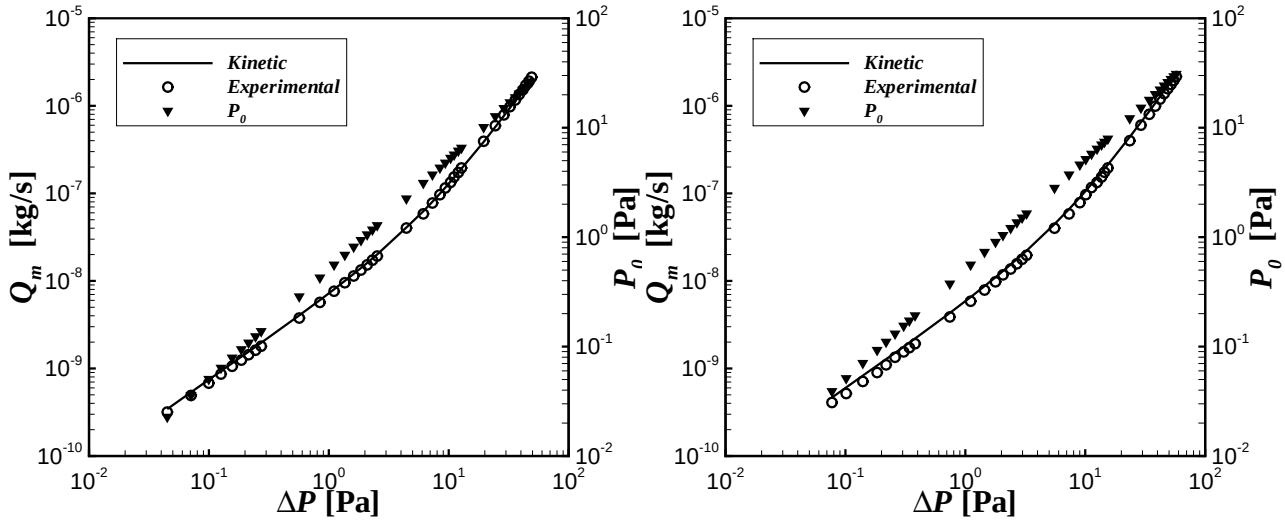


Figure 5: Comparisons between kinetic and experimental results for the case of long trapezoidal duct with D_h=16.48 mm, and $b/B = v/B$=0.5 (left) and long square duct with D_h=15.89 mm (right).

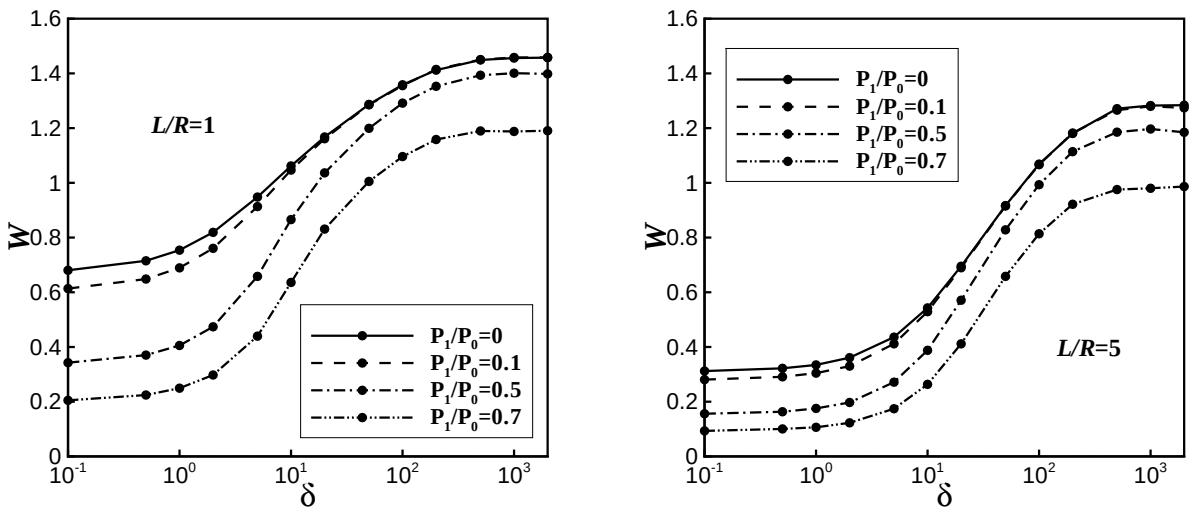


Figure 6: Dimensionless flow rate W in terms of δ for L/R=1 (left) and L/R=5 (right) for various values of P_1/P_0.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

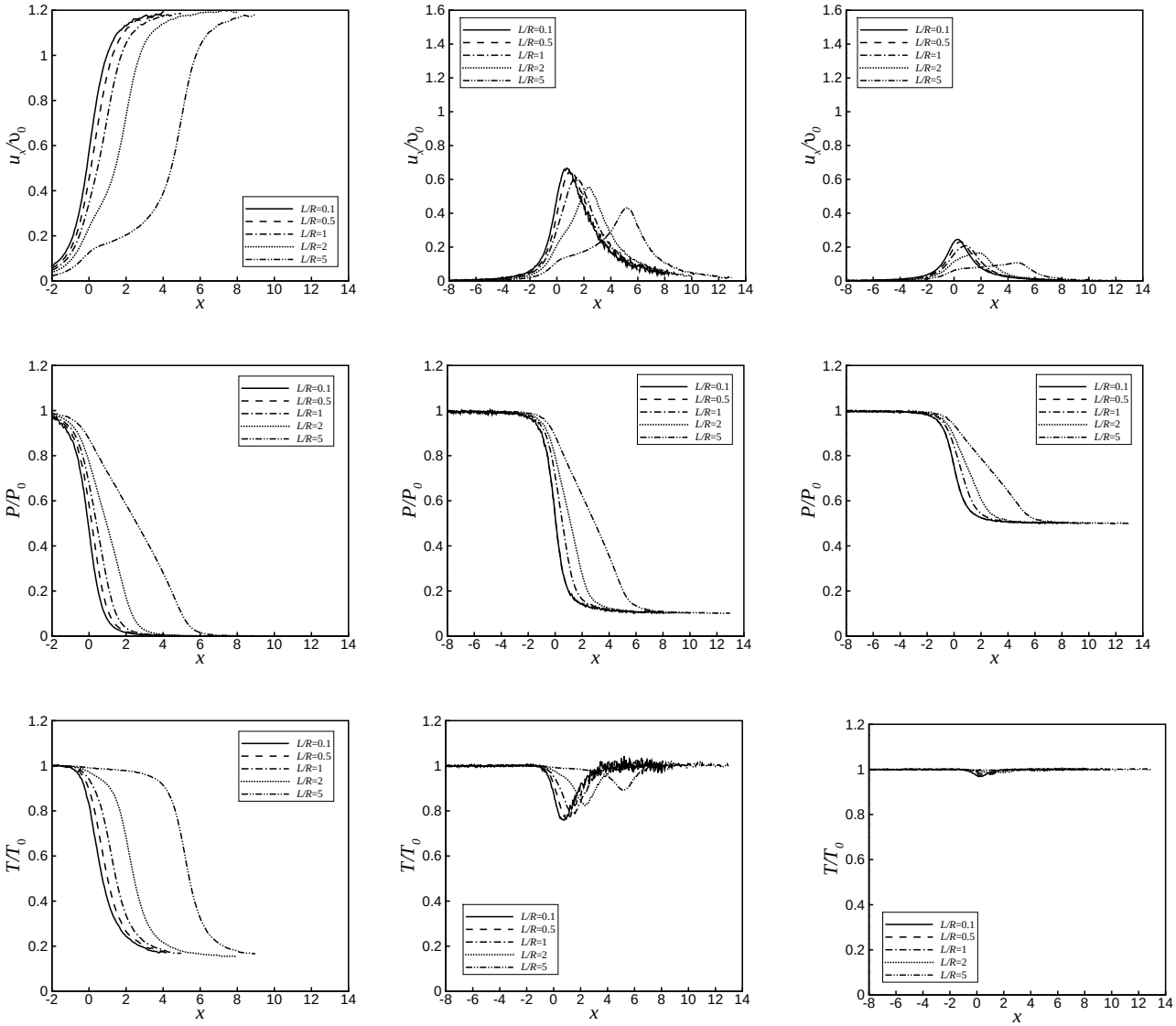


Figure 7: Dimensionless axial velocity (top), pressure (middle) and temperature (bottom) distributions for P_1/P_0=0 (left), P_1/P_0=0.1 (middle) and P_1/P_0=0.5 (right), along $r = 0$, for $\delta = 1$ and various L/R.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

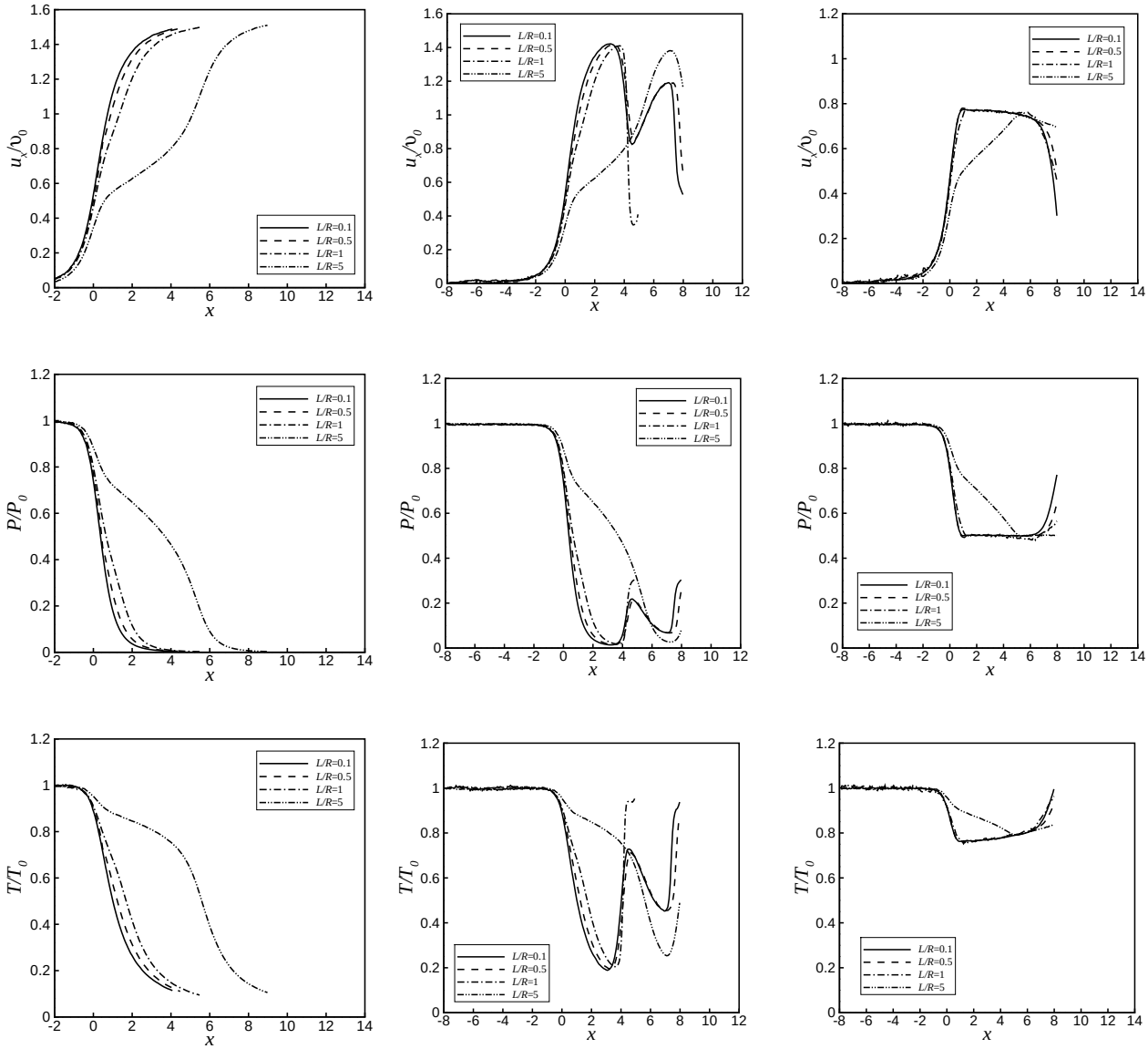


Figure 8: Dimensionless axial velocity (top), pressure (middle) and temperature (bottom) distributions for P_1/P_0=0 (left), P_1/P_0=0.1 (middle) and P_1/P_0=0.5 (right), along $r = 0$, for $\delta = 100$ and various L/R.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Περιεχομενα

Περίληψη διδακτορικής διατριβής **vi**

Summary of Ph.D. thesis **xii**

Κατάλογος σχημάτων **xxvii**

Κατάλογος πινάκων **xxxi**

Ευρετήριο όρων **xxxiv**

1 Ροές εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας **1**
1.1 Εισαγωγή 1
1.2 Περιεχόμενο διδακτορικής διατριβής 3
1.3 Πρωτοτυπία και επιστημονική συνεισφορά διδακτορικής διατριβής 5
1.4 Δομή διδακτορικής διατριβής 5

2 Βιβλιογραφική ανασκόπηση **9**
2.1 Κινητική Θεωρία 9
2.2 Δυναμική αραιοποιημένων αερίων 11
2.3 Εξίσωση Boltzmann και κινητικά μοντέλα 12
2.4 Οριακές συνθήκες 14
2.5 Αριθμητικές τεχνικές 16
2.6 Πλήρως ανεπτυγμένες - γραμμικές ροές 17
2.7 Μη γραμμικές ροές 20

3 Μελέτη ροών σε αγωγούς ποικίλων διατομών με γραμμική κινητική θεωρία **23**
3.1 Εισαγωγή 23
3.2 Ροή λόγω μικρής βαθμίδας πίεσης 24
3.2.1 Γενικά στοιχεία 24
3.2.2 Ροή σε κυλινδρικό και δακτυλοειδή αγωγό 27
3.2.3 Ροή σε ορθογώνιο αγωγό 28
3.2.4 Ροή σε τριγωνικό και τραπεζοειδή αγωγό 29
3.2.5 Αδιάστατες παροχές σε αγωγούς ποικίλων διατομών 30
3.3 Επέκταση της μεθοδολογίας σε μεγάλες βαθμίδες πίεσης 31
3.4 Υπολογισμός πτώσης πίεσης σε αγωγό 33
3.5 Συγκρίσεις ροών μάζας σε αγωγούς διαφόρων διατομών 35
3.6 Συγκρίσεις ροών μάζας σε διαφορετικά αέρια 37

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

4 Συγκρίσεις θεωρητικών και πειραματικών αποτελεσμάτων **47**
4.1 Εισαγωγή 47
4.2 Σύγκριση σε μικροροϊκές διατάξεις 47
4.3 Σύγκριση σε διατάξεις κενού 49

5 Αριθμός Poiseuille και υδραυλική διάμετρος σε αραιοποιημένες ροές **59**
5.1 Ο αριθμός Poiseuille 59
5.2 Ακριβής υδραυλική διάμετρος μη κυκλικών αγωγών 61
5.2.1 Ακριβής υδραυλική διάμετρος σε δακτυλοειδείς αγωγούς 64
5.2.2 Ακριβής υδραυλική διάμετρος σε ορθογώνιους αγωγούς 66
5.2.3 Ακριβής υδραυλική διάμετρος σε τριγωνικούς και τραπεζοειδείς αγωγούς 66

6 Εισαγωγή στις στοχαστικές διαδικασίες **75**
6.1 Εισαγωγή 75
6.2 Η Μέθοδος DSMC 75
6.3 Περιοχή ισχύος της μεθόδου DSMC 77
6.4 Μοντελοποίηση μοριακών συγκρούσεων 77
6.5 Περιορισμοί της μεθόδου - Αριθμητικά σφάλματα DSMC 80
6.6 Αλγόριθμος μεθόδου DSMC 80
6.7 Πρόσθετες διευκρινίσεις στον αλγόριθμο DSMC 82
6.7.1 Αρχικές συνθήκες 82
6.7.2 Υπολογιστικό πλέγμα 82
6.7.3 Επιλογή χρονικού βήματος 83
6.7.4 Ελεύθερη κίνηση σωματιδίων 83
6.7.5 Εισερχόμενα σωματίδια 84
6.7.6 Υπολογισμός μακροσκοπικών ποσοτήτων 84
6.8 Υπολογισμός μικροσκοπικών ταχυτήτων βασισμένος σε τυχαίους αριθμούς . . 85

7 Ροή διαμέσου παράλληλων πλακών **91**
7.1 Εισαγωγή 91
7.2 Περιγραφή προβλήματος 92
7.3 Αριθμητική μέθοδος 93
7.4 Αριθμητικά αποτελέσματα 94
7.4.1 Επίδραση υπολογιστικών χωρίων 94

8 Ροή αερίου διαμέσου κυλινδρικού αγωγού πεπερασμένου μήκους σε κενό **97**
8.1 Εισαγωγή 97
8.2 Περιγραφή του προβλήματος 98
8.3 Περιγραφή αλγορίθμου DSMC 99
8.4 Βελτιστοποίηση αλγορίθμου DSMC 100
8.5 Ανάλυση σφάλματος αλγορίθμου DSMC 102
8.6 Αριθμητικά αποτελέσματα 103
8.6.1 Αδιάστατη παροχή 104
8.6.2 Οριακές συνθήκες αερίου - τοιχώματος 105
8.6.3 Μοντέλο ενδομοριακού δυναμικού 107
8.6.4 Πεδίο Ροής 107

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

9 Ροή αερίου διαμέσου κυλινδρικού αγωγού πεπερασμένου μήκους **117**
9.1 Εισαγωγή 117
9.2 Περιγραφή προβλήματος 119
9.3 Αλγόριθμος DSMC 120
9.4 Αριθμητικά αποτελέσματα 123
9.4.1 Αδιάστατη παροχή 123
9.4.2 Πεδίο ροής 124

10 Ανακεφαλαίωση και μελλοντική έρευνα **145**
10.1 Ανακεφαλαίωση διδακτορικής διατριβής 145
10.2 Μελλοντική έρευνα 147

Βιβλιογραφία **149**

Παράρτημα Α **158**
Α-1 Περιγραφή πειραματικής διάταξης TRANSFLOW 159
Α-2 Μοριακές αντλίες κενού 161
Α-3 Αγωγοί διαφόρων γεωμετριών 162
Α-4 Επεξεργασία και διόρθωση πειραματικών δεδομένων 162

Παράρτημα Β **167**
Β-1 Εισαγωγή 167
Β-2 Αρχείο par1.f90 - Ορισμός βασικών παραμέτρων 167
Β-3 Αρχείο Shtube-arb-pr.f90 - Κώδικας DSMC 168
Β-4 Υπορουτίνα INIT 170
Β-5 Υπορουτίνα INIT1 173
Β-6 Υπορουτίνα INIT2 173
Β-7 Υπορουτίνα MOVE 173
Β-8 Υπορουτίνα INDEX 174
Β-9 Υπορουτίνα COLL 175
Β-10 Υπορουτίνα SAMPLE 177

Curriculum Vitae **183**

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Ευρετηριο Σχηματων

2.1 Αλληλεπίδραση μορίου-τοιχώματος (η διακεκομμένη γραμμή αντιστοιχεί σε κατοπτρική ανάκλαση). 15

3.1 Αδιάστατη παροχή για αγωγούς ποικίλων διατομών. 30
3.2 Σχεδιάγραμμα αγωγού, μήκους L. 33
3.3 Τυπικές κατανομές πίεσης κατά μήκος του αγωγού (επάνω αριστερά: ισοσκελής τραπεζοειδής, επάνω δεξιά: ισόπλευρος τριγωνικός, κάτω αριστερά: κυλινδρικός, κάτω δεξιά: τετραγωνικός). 38
3.4 Ροή μάζας αερίου αζώτου σε αγωγούς με ίδιο εμβαδόν (πάνω), ίδια περίμετρο (μέση) και ίδια υδραυλική διάμετρο (κάτω). 39
3.5 Ροή μάζας διαφόρων αερίων σε κυλινδρικό αγωγό (πάνω) και τετραγωνικό αγωγό (κάτω). 40
3.6 Ογκομετρική παροχή διαφόρων αερίων σε κυλινδρικό αγωγό (πάνω) και τετραγωνικό αγωγό (κάτω). 41

4.1 Πειραματική διάταξη. 48
4.2 Γεωμετρία μικροαγωγών. 48
4.3 Ροή μάζας αζώτου σε ορθογώνιο αγωγό με $T = 294.2\ K$: $0.012 \leq Kn_0 \leq 0.016$ και $P_{out} = 2 \times 10^5\ Pa$ (πάνω), $0.036 \leq Kn_0 \leq 0.05$ και $P_{out} = 0.65 \times 10^5\ Pa$ (κάτω). 53
4.4 Ροή μάζας ηλίου σε ορθογώνιο αγωγό με $T = 294.2\ K$: α) για $H/W = 0.088$, $0.037 \leq Kn_0 \leq 0.047$ και $P_{out} = 1.9 \times 10^5\ Pa$ (πάνω), $0.066 \leq Kn_0 \leq 0.083$ και $P_{out} = 1.026 \times 10^5\ Pa$ (μέση), β) για $H/W = 0.055$, $0.06 \leq Kn_0 \leq 0.083$ και $P_{out} = 1.9 \times 10^5\ Pa$ (κάτω). 54
4.5 Δίκτυο κενού στον αντιδραστήρα ITER (πάνω αριστερά), σημείο άντλησης (πάνω δεξιά), κρυογενική αντλία (κάτω). 55
4.6 Θεωρητικά και πειραματικά αποτελέσματα ροής μάζας αζώτου σε κυλινδρικό (επάνω αριστερά), τετραγωνικό (επάνω δεξιά), ισόπλευρο τριγωνικό (κάτω αριστερά) και ισοσκελή τραπεζοειδή (κάτω δεξιά) αγωγό. 56
4.7 Αριθμοί Knudsen, Mach και Reynolds σε κυλινδρικό (επάνω αριστερά), τετραγωνικό (επάνω δεξιά), ισόπλευρο τριγωνικό (κάτω αριστερά) και ισοσκελή τραπεζοειδή (κάτω δεξιά) αγωγό. 57
4.8 Θεωρητικά και πειραματικά αποτελέσματα ογκομετρικής παροχής αζώτου σε κυλινδρικό (επάνω αριστερά), τετραγωνικό (επάνω δεξιά), ισόπλευρο τριγωνικό (κάτω αριστερά) και ισοσκελή τραπεζοειδή (κάτω δεξιά) αγωγό. 58

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

5.1 Αριθμοί Poiseuille για κυλινδρικό αγωγό και δύο ορθογώνιους αγωγούς με λόγο πλευρών $H/W = 1$ και $H/W = 0.5$ (πάνω), για διάφορους ορθογώνιους (μέση) και για δακτυλοειδείς (κάτω) αγωγούς ως προς την παράμετρο αραιοποίησης δ και $\alpha = 1$. 62
5.2 Σχετικό σφάλμα στην υδραυλική διάμετρο σε σύγκριση με την ακριβή υδραυλική διάμετρο για δακτυλοειδή αγωγό με λόγο ακτίνων R_1/R_2 (πάνω) και ορθογώνιο αγωγό με λόγο πλευρών H/W (κάτω), με οριακές συνθήκες πλήρους διάχυσης $a = 1$ και διάφορες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ. 65

6.1 Περιοχές ισχύος συναρτήσει του χαρακτηριστικού μήκους L/d και της μέσης μοριακής απόστασης του συστήματος δ/d. 78
6.2 Διάγραμμα ροής αλγορίθμου DSMC. 88
6.3 Εξέλιξη του αριθμού των σωματιδίων συναρτήσει του χρόνου. 89
6.4 Αλληλεπίδραση μορίου - στερεού τοιχώματος. 89
6.5 Τυπικό γράφημα συνάρτησης κατανομής και αθροιστικής συνάρτησης. 90

7.1 Γεωμετρική απεικόνιση παράλληλων πλακών (πάνω) και υπολογιστικό πλέγμα (κάτω). 93

8.1 Γεωμετρική απεικόνιση αγωγού πεπερασμένου μήκους. 98
8.2 Υπολογιστικό πεδίο με 3 επίπεδα πύκνωσης του χωρικού πλέγματος. 101
8.3 Θέση επιφανειών με ειδικό συντελεστή βαρύτητας. 102
8.4 Σύγκριση αριθμητικών και πειραματικών αποτελεσμάτων για L/R=2 και 10. . 105
8.5 Σύγκριση αριθμητικών και πειραματικών αποτελεσμάτων για διάφορες τιμές του λόγου L/R. 106
8.6 Κατανομές αδιάστατης αξονικής ταχύτητας, πίεσης και θερμοκρασίας κατά μήκος του άξονα συμμετρίας $r = 0$, για δ=1 (αριστερά), δ=100 (δεξιά) και διάφορες τιμές του μήκους L/R. 110
8.7 Κατανομές αδιάστατης αξονικής ταχύτητας, πίεσης και θερμοκρασίας κατά μήκος του άξονα συμμετρίας $r = 0$, για $L/R = 0.5$ (αριστερά), $L/R = 5$ (δεξιά) και διάφορες τιμές του δ. 111
8.8 Κατανομές αδιάστατης αξονικής ταχύτητας στην είσοδο ($x = 0$: —), μέση ($x = L/(2R)$: $- - -$) και έξοδο ($x = L/R$: $- \cdot - \cdot -$) του αγωγού για διαφορετικές τιμές των L/R και δ. 112
8.9 Κατανομές πίεσης στην είσοδο ($x = 0$: —), μέση ($x = L/(2R)$: $- - -$) και έξοδο ($x = L/R$: $- \cdot - \cdot -$) του αγωγού για διαφορετικές τιμές των L/R και δ.113
8.10 Ισοϋψείς πίεσης κοντά στην περιοχή του αγωγού για $L/R = 0.1$ (αριστερά) και 10 (δεξιά) και διάφορες τιμές του δ. 114
8.11 Ισοϋψείς τοπικού αριθμού Ma κοντά στην περιοχή του αγωγού για $L/R = 0.1$ (αριστερά) και 10 (δεξιά) και διάφορες τιμές του δ. 115

9.1 Γεωμετρία και υπολογιστικό πεδίο (πάνω), Ζώνες με συντελεστή βαρύτητας (κάτω). 129
9.2 Αδιάστατη παροχή W συναρτήσει του δ για διάφορα L/R και P_1/P_0. 130
9.3 Αδιάστατη παροχή W συναρτήσει του P_1/P_0 για διάφορα L/R και δ. 131
9.4 Αδιάστατη παροχή W συναρτήσει του L/R για διάφορα P_1/P_0 και δ. 132
9.5 Σύγκριση μεταξύ των παρόντων αριθμητικών αποτελεσμάτων και των αντίστοιχων πειραματικών από τους Fujimoto & Usami. 133

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

9.6 Σύγκριση μεταξύ των παρόντων αριθμητικών αποτελεσμάτων και των αντίστοιχων πειραματικών από τον Sreekanth. 134
9.7 Ροϊκές γραμμές για διάφορα δ, με $P_1/P_0 = 0.5$ και $L/R = 0.5$ (αριστερά) και $L/R = 5$ (δεξιά). 135
9.8 Αδιάστατη κατανομή πίεσης κατά μήκος του άξονα συμμετρίας για $\delta = 1$ (αριστερά) και $\delta = 100$ (δεξιά) για διάφορα L/R και $P_1/P_0 = 0.1$ (πάνω) και $P_1/P_0 = 0.7$ (κάτω). 136
9.9 Αδιάστατη κατανομή θερμοκρασίας κατά μήκος του άξονα συμμετρίας $r = 0$ για $\delta = 1$ (αριστερά) and $\delta = 100$ (δεξιά) για διάφορα L/R και $P_1/P_0 = 0.1$ (πάνω) και $P_1/P_0 = 0.7$ (κάτω). 137
9.10 Μεταβολή του αριθμού Ma κατά μήκος του άξονα συμμετρίας $r = 0$ για διάφορα δ και P_1/P_0 με $L/R = 0.1$ (αριστερά) και $L/R = 5$ (δεξιά). 138
9.11 Κατανομές αδιάστατης αξονικής ταχύτητας στην είσοδο ($x = 0$: —), μέση ($x = L/(2R)$: $- - -$) και έξοδο ($x = L/R$: $- \cdot - \cdot -$) του αγωγού για διαφορετικές τιμές των L/R και δ. 139
9.12 Κατανομές αδιάστατης πίεσης στην είσοδο ($x = 0$: —), μέση ($x = L/(2R)$: $- - -$) και έξοδο ($x = L/R$: $- \cdot - \cdot -$) του αγωγού για διαφορετικές τιμές των L/R και δ. 140
9.13 Ισοϋψείς τοπικού αριθμού Ma για $L/R = 0.5$ (πάνω) και $L/R = 5$ (κάτω) και διάφορα δ με $P_1/P_0 = 0.1$. 141
9.14 Ισοϋψείς τοπικού αριθμού Ma για $L/R = 0.5$ (πάνω) και $L/R = 5$ (κάτω) και διάφορα δ με $P_1/P_0 = 0.5$. 142
9.15 Ισοϋψείς τοπικού αριθμού Ma για $L/R = 0.5$ (πάνω) και $L/R = 5$ (κάτω) και διάφορα δ με $P_1/P_0 = 0.7$. 143

A-1 Πειραματική διάταξη TRANSFLOW. 160
A-2 Ψηφιακές ενδείξεις πίεσης και παροχής. 164
A-3 Μετρητικά όργανα πίεσης στο δοχείο υψηλής (επάνω) και χαμηλής πίεσης (κάτω). 164
A-4 Μοριακές αντλίες κενού στην πειραματική διάταξη TRANSFLOW (πάνω αριστερά), τομή μοριακής αντλίας κενού (πάνω δεξιά), κοχλιωτή αντλία κενού (κάτω αριστερά) και εφεδρική φυγοκεντρική αντλία κενού (κάτω δεξιά). . . . 165
A-5 Αγωγοί διαφόρων γεωμετριών. 166

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Ευρετηριο Πινακων

3.1 Γεωμετρία αγωγών με ίδιο εμβαδόν $A' = 2.0 \times 10^{-4}\ m^2$. 35
3.2 Γεωμετρία αγωγών με ίδια περίμετρο $\Gamma' = 5.0 \times 10^{-2}\ m$. 36
3.3 Γεωμετρία αγωγών με ίδια υδραυλική διάμετρο $D_h = 1.6 \times 10^{-2}\ m$. 36
3.4 Ιδιότητες αερίων. 42
3.5 Εκφράσεις των D_h, A', A, Γ', Γ για διάφορους αγωγούς 42
3.6 Αδιάστατη παροχή G σε σχέση με την παράμετρο αραιοποίησης δ για κυλινδρικό αγωγό με α=1, 0.85 και 0.7. 43
3.7 Αδιάστατη παροχή G σε σχέση με την παράμετρο αραιοποίησης δ για ορθογώνιους αγωγούς με α=1, 0.85 και 0.7. 44
3.8 Αδιάστατη παροχή G σε σχέση με την παράμετρο αραιοποίησης δ, για τριγωνικούς αγωγούς με α=1. 45
3.9 Αδιάστατη παροχή G σε σχέση με την παράμετρο αραιοποίησης δ, για τραπεζοειδείς αγωγούς με α=1. 46

5.1 Αριθμός Po σε σχέση με την παράμετρο αραιοποίησης δ, για κυλινδρικό αγωγό και α=1, 0.85, 0.7. 67
5.2 Αριθμός Po σε σχέση με την παράμετρο αραιοποίησης δ, για ορθογώνιο αγωγό με λόγο πλευρών $H/W = 1, 0.5$ και 0.1 και α=1, 0.85, 0.7. 68
5.3 Αριθμός Po δακτυλοειδών αγωγών σε σχέση με την παράμετρο αραιοποίησης δ και του λόγου ακτίνων R_1/R_2 με α=1. 69
5.4 Αριθμός Po δακτυλοειδών αγωγών σε σχέση με την παράμετρο αραιοποίησης δ και του λόγου ακτίνων R_1/R_2 με α=0.85. 70
5.5 Αριθμός Po δακτυλοειδών αγωγών σε σχέση με την παράμετρο αραιοποίησης δ και του λόγου ακτίνων R_1/R_2 με α=0.7. 71
5.6 Αριθμός Po σε σχέση με την παράμετρο αραιοποίησης δ, για διάφορους τριγωνικούς και τραπεζοειδείς αγωγούς με α=1. 72
5.7 Λόγος ακριβούς υδραυλικής διαμέτρου προς την υδραυλική διάμετρο μη κυλινδρικού αγωγού συναρτήσει της παραμέτρου αραιοποίησης δ για ορθογώνιους αγωγούς με α=1. 73
5.8 Λόγος ακριβούς υδραυλικής διαμέτρου προς την υδραυλική διάμετρο μη κυλινδρικού αγωγού συναρτήσει της παραμέτρου αραιοποίησης δ για διάφορους τριγωνικούς και τραπεζοειδείς αγωγούς με α=1. 74

7.1 Αδιάστατη παροχή W για λόγο πίεσης P_1/P_0=0 συναρτήσει του μήκους των περιοχών πριν και μετά τον αγωγό καθώς και της παραμέτρου αραιοποίησης δ. 96
7.2 Αδιάστατη παροχή W για λόγο πίεσης P_1/P_0=0.5 συναρτήσει του μήκους των περιοχών πριν και μετά τον αγωγό καθώς και της παραμέτρου αραιοποίησης δ. 96
7.3 Χρόνος μοντελοποίησης. 96

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

8.1 Αδιάστατη παροχή W ως προς το μήκους L/R και την παράμετρο αραιοποίησης δ για μοντέλο σκληρών σφαιρών (HS) και οριακές συνθήκες πλήρους διάχυσης κατά την αλληλεπίδραση αερίου - τοιχώματος. 107
8.2 Αδιάστατη παροχή W ως προς διάφορες οριακές συνθήκες και μοντέλα ενδομοριακού δυναμικού: διαχυτική ανάκλαση ($\alpha_n = \alpha_t = 1$), CL - Cercignani-Lampis ($\alpha_n = 1$, $\alpha_t = 0.5$): HS - hard spheres, VHS - variable hard spheres (ήλιο, $\omega = 0.66$). 108

9.1 Αδιάστατη παροχή W για λόγο πίεσης $P_1/P_0 = 0.1$, συναρτήσει του μήκους L/R και της παραμέτρου αραιοποίησης δ. 127
9.2 Αδιάστατη παροχή W για λόγο πίεσης $P_1/P_0 = 0.5$, συναρτήσει του μήκους L/R και της παραμέτρου αραιοποίησης δ. 127
9.3 Αδιάστατη παροχή W για λόγο πίεσης $P_1/P_0 = 0.7$, συναρτήσει του μήκους L/R και της παραμέτρου αραιοποίησης δ. 128
9.4 Αδιάστατη παροχή W για λόγο πίεσης P_1/P_0=0.2, 0.3 και 0.4 συναρτήσει του μήκους L/R και της παραμέτρου αραιοποίησης δ. 128

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Ευρετηριο Ορων

D_h	Υδραυλική διάμετρος, 24
D_h^{exact}	Ακριβής υδραυλική διάμετρος, 61
G	Αδιάστατη παροχή, 27
Kn	Αριθμός Knudsen, 2
Ma	Αριθμός Mach, 26
N	Αριθμός σωματιδίων, 78
$P(x,r)$	Αδιάστατη πίεση, 99
P_1/P_0	Λόγος πίεσης, 92
Po	Αριθμός Poiseuille, 59
Re	Αριθμός Reynolds, 26
$T(x,r)$	Αδιάστατη θερμοκρασία, 99
V_c	Όγκος κελιού, 77
W	Αδιάστατη παροχή, 92
X_P	Αδιάστατη κλίση πίεσης, 24
α	Συντελεστής διαχυτικής ανάκλασης, 25
δ	Παράμετρος αραιοποίησης, 25
λ	Μέση ελεύθερη διαδρομή, 1
μ	Ιξώδες αερίου, 25
$\overline{\tau_w}$	Αδιάστατη μέση διατμητική τάση, 25
$\overline{u}$	Αδιάστατη μέση ταχύτητα, 24
σ_T	Συνολική ενεργός διατομή, 77
τ_m	Μέσος χρόνος σύγκρουσης, 83
υ_0	Πλέον πιθανή ταχύτητα, 37
c_0	Ταχύτητα του ήχου, 26
c_r	Σχετική μοριακή ταχύτητα, 77
d	Μοριακή διάμετρος, 1
k	Σταθερά Boltzmann, 24
m	Μοριακή μάζα, 24
$n(x,r)$	Αδιάστατη αριθμητική πυκνότητα, 99
$u_r(x,r)$	Αδιάστατη ταχύτητα ακτινικής διεύθυνσης, 99
$u_x(x,r)$	Αδιάστατη ταχύτητα αξονικής διεύθυνσης, 99

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Κεφαλαιο 1

Ροες εκτος θερμοδυναμικης ισορροπιας

1.1 Εισαγωγή

Τα γνωστικά αντικείμενα της μικρορευστοδυναμικής (νάνο και μίκρο ηλεκτρομηχανολογικά συστήματα) [1, 2, 3], της τεχνολογίας κενού (βάλβίδες, αντλίες και συστήματα σωληνώσεων σε συνθήκες χαμηλού, μέσου και υψηλού κενού) [4, 5] και της αεριοδιαστημικής (διαστημική τεχνολογία σε υψόμετρα μεγαλύτερα των 50 km) [6, 7, 8, 9] αποτελούν ιδιαίτερα ενδιαφέροντα και ταχύτατα αναπτυσσόμενα επιστημονικά πεδία. Μάλιστα, τα τελευταία χρόνια παρατηρείται μία αυξημένη ανάγκη για ανάπτυξη τεχνολογικών εφαρμογών. Όμως, ο σχεδιασμός και η παραγωγή αξιόπιστων συσκευών και διατάξεων είναι προβληματικός, αφού σε πολλές περιπτώσεις η κατανόηση των φυσικών φαινομένων που εμφανίζονται είναι ανεπαρκής. Κοινό χαρακτηριστικό των εμφανιζόμενων φαινομένων ροής και μεταφοράς είναι ότι βρίσκονται εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας. 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 [2].

Στο σημείο αυτό θα είναι χρήσιμο να αναφερθούμε στον ορισμό ενός συστήματος που βρίσκεται εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας και την διαφοροποίηση του από ένα σύστημα σε ισορροπία. Για τα αέρια, η μέση ελεύθερη διαδρομή λ ορίζεται ως η μέση απόσταση που διανύουν τα μόρια πριν συγκρουστούν. Θεωρώντας τα μόρια σαν σκληρές σφαίρες, η μέση ελεύθερη διαδρομή [2] δίδεται από την σχέση:

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}\pi n \sigma^2} = \frac{kT}{\sqrt{2}\pi p d^2}, \tag{1.1}$$

όπου n η αριθμητική πυκνότητα (αριθμός μορίων ανά μονάδα όγκου), d η μοριακή διάμετρος, k η σταθερά Boltzmann, p η πίεση και T η θερμοκρασία .

Η υπόθεση του συνεχούς μέσου ισχύει όταν το λ είναι πολύ μικρότερο από την χαρακτηριστική διάσταση της ροής L ($\lambda \ll L$). Όταν η συγκεκριμένη παραδοχή παραβιάζεται τότε η

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

ροή δεν είναι πλέον σε θερμοδυναμική ισορροπία και οι καταστατικές εξισώσεις Newton και Fourier, όπως και οι οριακές συνθήκες μη ολίσθησης, παύουν να ισχύουν.

Το χαρακτηριστικό μήκος L της ροής μπορεί να είναι μια γενική διάσταση του προβλήματος, αλλά και η κλίση ενός μακροσκοπικού μεγέθους του πεδίου ροής όπως π.χ η πυκνότητα ρ, ως

$$L = \frac{\rho}{\left|\frac{\partial \rho}{\partial y}\right|}. \tag{1.2}$$

Ο λόγος της μέσης ελεύθερης διαδρομής και του χαρακτηριστικού μήκους ονομάζεται αριθμός Knudsen (Kn) :

$$Kn = \frac{\lambda}{L}. \tag{1.3}$$

Η προσέγγιση του συνεχούς μέσου ισχύει κάνοντας παράλληλα χρήση τροποποιημένων οριακών συνθηκών για $Kn \leq 0.1$.

Η μελέτη των ρευστών και των φαινομένων μεταφοράς εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας $Kn > 0.1$ δεν αποτελεί εύκολο εγχείρημα, αφού τα συγκεκριμένα φαινόμενα δεν περιγράφονται επαρκώς με τις γνωστές συμβατικές μεθόδους επίλυσης των εξισώσεων Euler και Navier-Stokes [10]. Απαιτούνται άλλες εναλλακτικές προσεγγίσεις. Η απαίτηση αυτή προέρχεται από το γεγονός ότι η θεωρία του συνεχούς μέσου σε αυτές τις περιπτώσεις δεν επαρκεί και μάλιστα πολλές φορές καταρρέει. Παρ' όλα αυτά, εξακολουθεί να υπάρχει έντονη προσπάθεια εξέλιξης της θεωρίας του συνεχούς μέσου, είτε εφαρμόζοντας οριακές συνθήκες ολίσθησης [11] στις εξισώσεις Navier-Stokes [10], είτε κάνοντας χρήση εξελιγμένων και γενικευμένων εξισώσεων όπως οι εξισώσεις Burnett, super Burnett και άλλες [12]. Όταν η προσπάθεια αυτή δεν αποδίδει τα επιθυμητά αποτελέσματα, τότε εφαρμόζονται άλλες μέθοδοι όπως η μοριακή δυναμική [13], η μέθοδος Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) [14] και η κινητική θεωρία [15, 16, 17].

Η μοριακή δυναμική είναι αποτελεσματική μόνο σε μεγάλες πιέσεις ή/και πυκνότητες. Γενικά, η μέθοδος αυτή απαιτεί ιδιαίτερα μεγάλη υπολογιστική ισχύ, γεγονός που την καθιστά εφαρμόσιμη μόνο σε ειδικές περιπτώσεις.

Η μέθοδος DSMC προτάθηκε για πρώτη φορά από τον G. A. Bird, το 1963 [14], και έχει στατιστικό χαρακτήρα. Βασίζεται στην απ'ευθείας προσομοίωση καθορισμένου αριθμού σωματιδίων που είναι κατά πολύ μικρότερος από τον πραγματικό αριθμό μορίων της ροής. Η ροή λοιπόν προσεγγίζεται από ένα αρκετά μεγάλο αριθμό μορίων, τα οποία κινούνται με σταθερή ταχύτητα μέχρι τη στιγμή που θα συγκρουστούν με άλλα μόρια. Οι συγκρούσεις είναι δυαδικές έχοντας ως αποτέλεσμα την μεταβολή των αρχικών ταχυτήτων των μορίων και των αντίστοιχων εσωτερικών ενεργειών. Η επιλογή των δυαδικών συγκρούσεων γίνεται με στατιστική διαδικασία. Το αποτέλεσμα αυτής της προσέγγισης είναι μια φυσική και παράλληλα στατιστική προσομοίωση των αλληλεπιδράσεων εκατομμυρίων μορίων. Η μέθοδος DSMC χαρακτηρίζεται για την απλότητά της και την εφαρμογή της σε μη γραμμικά προβλήματα. Επίσης, αποτελεί πιο οικονομική μέθοδο σε σχέση με τον απαιτούμενο υπολογιστικό χρόνο

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

από την μοριακή δυναμική, ενώ ένα από τα μειονεκτήματα της είναι ο στατιστικός θόρυβος που παρουσιάζεται σε έρπουσες ροές (μικρές ταχύτητες). Χρησιμοποιείται αριθμητικό πλέγμα για τον καθορισμό των πιθανών συγκρούσεων, καθώς και για την συλλογή στατιστικών πληροφοριών. Σε κάθε κυψέλη του πλέγματος υπολογίζονται (σε ένα ή περισσότερα χρονικά βήματα) με βάση τον αριθμό και την ταχύτητα των μορίων, τα μακροσκοπικά μεγέθη όπως η ταχύτητα, αριθμητική πυκνότητα, θερμοκρασία κ.τ.λ. Το μη ισχυρό θεωρητικό και μαθηματικό υπόβαθρο της μεθόδου αποτελούσε διαχρονικά αιτία αρνητικών κριτικών. Τα τελευταία όμως χρόνια είναι πλέον επιστημονικά αποδεκτό ότι η μέθοδος DSMC αποτελεί μια αξιόπιστη μεθοδολογία προσομοίωσης στοχαστικών διαδικασιών που περιγράφονται από την κινητική εξίσωση Boltzmann [18].

Η κινητική θεωρία βασίζεται στον προσδιορισμό της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας, η οποία υπακούει στη γνωστή εξίσωση Boltzmann [19, 15, 20] και μέσω της οποίας μπορούν να υπολογιστούν όλα τα μακροσκοπικά μεγέθη. Η εξίσωση Boltzmann αποτελεί τμήμα της κινητικής θεωρίας 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, είναι ιδιαίτερα δύσκολη. Τα τελευταία χρόνια όμως με την ραγδαία ανάπτυξη των υπολογιστών και την συνεχόμενη αύξηση της ισχύος τους η επίλυση της παραπάνω εξίσωσης παραμένει επίπονη, αλλά είναι πλέον εφικτή και μπορεί να αντιμετωπίσει μια πλειάδα προβλημάτων με μεγάλη επιτυχία.

1.2 Περιεχόμενο διδακτορικής διατριβής

Το περιεχόμενο της παρούσας διδακτορικής διατριβής επικεντρώνεται στην επίλυση ροών σε αγωγούς ποικίλων διατομών απείρου και πεπερασμένου μήκους σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen. Οι μεθοδολογίες επίλυσης περιλαμβάνουν ντετερμινιστικές τεχνικές επίλυσης κινητικών εξισώσεων και την στοχαστική μέθοδο Direct Simulation Monte Carlo (DSMC). Ροές αυτού του τύπου εμφανίζονται πολύ συχνά στην μικρορευστομηχανική και στην τεχνολογία κενού όπως και σε άλλες τεχνολογικές εφαρμογές. Όταν η ροή είναι σε αγωγό μεγάλου (απείρου) μήκους θεωρείται πλήρως ανεπτυγμένη και γραμμική αφού οι όροι συναγωγής είναι αμελητέοι σε σχέση με τους όρους διάχυσης και προσεγγίζεται με γραμμικές κινητικές εξισώσεις που επιλύονται με την ντετερμινιστική μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων (DVM). Όταν η ροή είναι σε αγωγό πεπερασμένου μήκους είναι μη γραμμική και επιλύεται με βάση την μέθοδο DSMC. Η μελέτη περιλαμβάνει ροές σε αγωγούς με κυλινδρική, δακτυλοειδή, ορθογώνια, τριγωνική και τραπεζοειδή διατομή.

Η όλη προσπάθεια περιγράφεται επιγραμματικά ως εξής:

A. Πλήρως ανεπτυγμένες ροές (γραμμικές ροές)

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

- Ανάπτυξη και εξειδίκευση κινητικών αλγορίθμων αποτελεσματικής επίλυσης γραμμικών κινητικών εξισώσεων σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen.

- Επίλυση ροής σε δακτυλοειδείς αγωγούς.

- Υπολογισμός του αριθμού Poiseuille και της ακριβούς υδραυλικής διαμέτρου σε αγωγούς ποικίλων διατομών.

- Συγκρίσεις μεταξύ θεωρητικών και πειραματικών δεδομένων, ώστε να διαπιστωθεί η δυνατότητα της κινητικής θεωρίας να περιγράψει πραγματικές συνθήκες ροής καθώς και η ορθότητα και η αξιοπιστία των πειραματικών συσκευών και μετρήσεων. Στην ενότητα αυτή περιλαμβάνονται:

  α) η μεθοδολογία διαστατοποίησης για τον υπολογισμό ροής μάζας σε κυκλικούς, δακτυλοειδείς, ορθογώνιους, τριγωνικούς και τραπεζοειδείς αγωγούς,

  β) η επέκταση της ανάλυσης σε μεγάλες βαθμίδες πίεσης ανάντη και κατάντη της ροής και

  γ) ο υπολογισμός της κατανομής πίεσης κατά μήκος του αγωγού.

B. Ροές σε αγωγούς πεπερασμένου μήκους

- Ανάπτυξη, εμβάθυνση και εξειδίκευση του αλγορίθμου Direct Simulation Monte Carlo. Η αναβάθμιση του αλγορίθμου επιτυγχάνεται με την

  α) εισαγωγή κυλινδρικής γεωμετρίας,

  β) χρήση ειδικών επιφανειών διαχωρισμού του πεδίου ροής με διαφορετικούς συντελεστές βαρύτητας,

  γ) εφαρμογή πλέγματος με περισσότερα από ένα επίπεδα πύκνωσης και

  δ) αντιμετώπιση επιπλέον ειδικών υπολογιστικών θεμάτων

- Επίλυση ροής ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες πεπερασμένου μήκους.

- Επίλυση ροής διαμέσου κυκλικού αγωγού πεπερασμένου μήκους σε κενό με $P_1/P_0 = 0$ και μελέτη επίδρασης ενδομοριακού δυναμικού και οριακών συνθηκών.

- Επίλυση ροής διαμέσου κυκλικού αγωγού πεπερασμένου μήκους με $P_1/P_0 \neq 0$.

Σημειώνεται ότι τα χαρακτηριστικά της ροής αλλά και τα σχετικά μακροσκοπικά μεγέθη έχουν διαφορετική ποιοτική και ποσοτική συμπεριφορά στις δύο διαφορετικές ενότητες ροών που έχουν μελετηθεί. Συγκεκριμένα η ροή σε αγωγούς μεγάλου μήκους είναι ασυμπίεστη και χαρακτηρίζεται από πολύ μικρούς αριθμούς Ma και Re. Αντίθετα η ροή σε αγωγούς πεπερασμένου μήκους είναι συμπιεστή και χαρακτηρίζεται από ένα ευρύ φάσμα του αριθμού Ma. Ανάλογα με τις ροϊκές παραμέτρους, η ροή μπορεί να είναι υποηχητική ή υπερηχητική.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

1.3 Πρωτοτυπία και επιστημονική συνεισφορά διδακτορικής διατριβής

Η πρωτοτυπία της συγκεκριμένης διδακτορικής διατριβής και η συνεισφορά της στην επιστήμη επικεντρώνεται επιγραμματικά στα εξής τρία σημεία:

α) Η μελέτη ροών αερίων σε αγωγούς μεγάλου μήκους και ποικίλων διατομών με γραμμικές κινητικές εξισώσεις, έχει ως στόχο την δημιουργία μιας βάσης δεδομένων, η οποία ανά πάσα στιγμή θα αποτελεί σημείο αναφοράς και θα μπορεί να είναι προσβάσιμη για την μελέτη πραγματικών συνθηκών ροής. Η θεωρητική υποστήριξη τέτοιου είδους ροών δεν είναι διαθέσιμη μέχρι τώρα.

β) Η επίλυση του προβλήματος ροής αερίου σε δακτυλοειδείς αγωγούς σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen και για διαφορετικές οριακές συνθήκες ($\alpha \neq 0$) πραγματοποιείται για πρώτη φορά. Μελετήθηκε η επίδραση του συντελεστή διαχυτικής ανάκλασης α στην αδιάστατη παροχή του αγωγού.

γ) Ο υπολογισμός του αριθμού Poiseuille και της ακριβούς υδραυλικής διαμέτρου καθώς και η σύγκριση μεταξύ κινητικών και πειραματικών αποτελεσμάτων σε αγωγούς ποικίλων διατομών πραγματοποιούνται για πρώτη φορά σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen. Τα συγκεκριμένα προβλήματα δεν έχουν αντιμετωπιστεί συνολικά από την επιστημονική κοινότητα και δεν υπάρχουν διαθέσιμες σχετικές εργασίες.

δ) Η μέθοδος DSMC εφαρμόζεται για πρώτη φορά στην επίλυση μη γραμμικών ροών διαμέσου αγωγών πεπερασμένου μήκους λόγω βαθμίδας πίεσης σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen. Για την βελτίωση της αποτελεσματικότητας της μεθόδου DSMC αναπτύσσονται ειδικές υπολογιστικές τεχνικές.

ε) Το πρόβλημα ροής σε κενό ($P_1/P_0 = 0$) για κυλινδρικό αγωγό πεπερασμένου μήκους επιλύεται για πρώτη φορά για ένα μεγάλο εύρος των παραμέτρων Kn και L/R.

στ) Όμοια το πρόβλημα ροής διαμέσου κυλινδρικού αγωγού πεπερασμένου μήκους με λόγο πίεσης $P_1/P_0 \neq 0$ επιλύεται για πρώτη φορά σε ένα ευρύ φάσμα των παραμέτρων Kn, L/R και P_1/P_0.

1.4 Δομή διδακτορικής διατριβής

Η παρούσα διδακτορική διατριβή περιλαμβάνει τρεις βασικές ενότητες. Στη πρώτη ενότητα δίνονται γενικά στοιχεία που αφορούν την περιγραφή της υπάρχουσας κατάστασης στη διεθνή βιβλιογραφία και το ιστορικό υπόβαθρο στο οποίο στηρίζονται οι μεθοδολογίες επίλυσης (Κεφάλαια 1-2). Η δεύτερη ενότητα αποτελείται από τα Κεφάλαια 3 έως 5 και αναφέρεται στην μελέτη ροών σε αγωγούς ποικίλων διατομών λόγω βαθμίδας πίεσης με γραμμική κινητική θεωρία, ενώ η τρίτη ενότητα, η οποία αποτελείται από τα Κεφάλαια 6 έως 9 αναφέρεται στις

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

στοχαστικές μεθόδους και την εφαρμογή τους στην επίλυση ροών μονατομικών αερίων σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen.

Αναλυτικότερα, η δομή του παρόντος κειμένου έχει ως εξής: Στα Κεφάλαια 1 και 2 περιγράφεται ο στόχος της διδακτορικής διατριβής και γίνεται μια λεπτομερής διερεύνηση της υπάρχουσας διεθνούς βιβλιογραφίας. Εξετάζονται οι αναλυτικές και πειραματικές προσεγγίσεις προσομοίωσης ροών σε αγωγούς και στόμια για όλο το εύρος του αριθμού Knudsen. Επίσης, γίνεται αναφορά στην εξέλιξη των στοχαστικών μεθοδολογιών και την χρήση της μεθόδου DSMC στην δυναμική αραιοποιημένων αερίων.

Στο Κεφάλαιο 3 πραγματοποιείται μελέτη ροών αερίων σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen για αγωγούς μεγάλου μήκους και διαφόρων γεωμετριών κάνοντας χρήση των γραμμικών κινητικών εξισώσεων. Συγκεκριμένα, συγκρίνονται οι ροές μάζας σε αγωγούς κυλινδρικής, τετραγωνικής, τριγωνικής και τραπεζοειδούς γεωμετρίας με ίδιο εμβαδόν, περίμετρο και υδραυλική διάμετρο. Στην συνέχεια, για διαφορετικά αέρια εξετάζεται η μεταβολή της ροής μάζας καθώς και της ογκομετρικής παροχής στους παραπάνω αγωγούς.

Στο Κεφάλαιο 4 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των συγκρίσεων μεταξύ πειραματικών και θεωρητικών αποτελεσμάτων για τέσσερεις αγωγούς διαφορετικής γεωμετρίας (κυκλικό, τετραγωνικό, τριγωνικό και τραπεζοειδή) μεγάλου μήκους. Στόχος, είναι η επαλήθευση των πειραματικών αποτελεσμάτων καθώς και ο έλεγχος της ικανότητας της γραμμικής κινητικής θεωρίας για την προσομοίωση τέτοιων ροών. Τα πειραματικά αποτελέσματα προέρχονται από την πειραματική διάταξη TRANSFLOW του ερευνητικού κέντρου της Καρλσρούης (Ινστιτούτο Τεχνικής Φυσικής) στα οποία υπήρχε ενεργή συμμετοχή του Υποψήφιου Διδάκτορα. Η περιγραφή της πειραματικής διάταξης και των πειραμάτων παρουσιάζονται στο Παράρτημα A.

Στο Κεφάλαιο 5, γίνεται ο υπολογισμός του αριθμού Poiseuille σε αραιοποιημένες ροές βασισμένος σε γραμμικά κινητικά αποτελέσματα. Επίσης, εξετάζεται η ακρίβεια της προσεγγίσεως της ακριβούς υδραυλικής διαμέτρου για μη κυκλικούς αγωγούς. Τα παραπάνω αποτελέσματα μελετώνται σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen.

Το Κεφάλαιο 6, αποτελεί εισαγωγή στις στοχαστικές διαδικασίες και περιγράφεται αναλυτικά η μέθοδος DSMC, η οποία και εφαρμόζεται για την επίλυση μη γραμμικών προβλημάτων ροών εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας. Περιγράφεται αναλυτικά ο αλγόριθμος DSMC και τα βασικά στοιχεία λειτουργίας του υπολογιστικού κώδικα.

Στο Κεφάλαιο 7, επιλύεται το πρόβλημα ροής αερίου διαμέσου παράλληλων πλακών πεπερασμένου μήκους υπό την επίδραση διαφοράς πίεσης ανάντη και κατάντη της ροής. Παρουσιάζονται αποτελέσματα του πεδίου ροής και μελετάται η επίδραση του μεγέθους των ειδικών υπολογιστικών χωρίων πριν και μετά τον αγωγό στην αδιάστατη παροχή διαμέσου των παράλληλων πλακών.

Στο Κεφάλαιο 8, περιγράφεται το πρόβλημα που επιλύθηκε με την μέθοδο DSMC και συγκεκριμένα η ροή μονατομικού αερίου σε κενό ($P_1 = 0$) διαμέσου κυκλικού αγωγού πεπερασμένου μήκους [21]. Μελετάται η επιβολή διαφορετικών μοντέλων αλληλεπίδρασης αερίου-

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

τοιχώματος καθώς και διαφορετικών μοντέλων ενδομοριακού δυναμικού. Επίσης, παρουσιάζονται αριθμητικά αποτελέσματα που αφορούν την αδιάστατη παροχή και τις κατανομές των μακροσκοπικών ποσοτήτων.

Το Κεφάλαιο 9, αποτελεί επέκταση της ανάλυσης του Κεφαλαίου 8 και περιγράφει την ροή αερίου διαμέσου κυκλικού αγωγού πεπερασμένου μήκους υπό την επίδραση διαφορετικής πίεσης μεταξύ των δοχείων πριν και μετά τον αγωγό και συγκεκριμένα ο λόγος πίεσης ανάντη και κατάντη της ροής είναι μη μηδενικός.

Η διατριβή κλείνει με μια ανακεφαλαίωση στο Κεφάλαιο 10 και μια σύνοψη των κυριοτέρων σημείων της. 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.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Κεφαλαιο 2

Βιβλιογραφικη ανασκοπηση

2.1 Κινητική Θεωρία

Η κινητική θεωρία των αερίων έχει ως αφετηρία την χρονολογία 1859, όπου ο Maxwell εισήγαγε την στατιστική προσέγγιση στη κίνηση των αερίων. Η υπόθεση ότι όλα τα μόρια του αερίου κινούνται με την ίδια ταχύτητα εγκαταλείφθηκε, ενώ υιοθετήθηκε ο τυχαίος χαρακτήρας της κίνησής τους. Το 1860 ο Maxwell [22] σε δύο εργασίες του παρουσίασε αποτελέσματα για την θεωρία της κατανομής των μοριακών ταχυτήτων (Maxwellian velocity distribution), ενώ επτά χρόνια αργότερα ο ίδιος επανήλθε με σημαντικές διορθώσεις στην παραπάνω θεωρία [23]. Εν συνεχεία, διατυπώθηκε από τον Maxwell η εξίσωση μεταφοράς, η οποία περιγράφει τον συνολικό ρυθμό μεταβολής οποιασδήποτε μέσης μοριακής ποσότητας αερίου, του οποίου τα μόρια αποτελούν σημειακές μάζες και απωθούνται με δυνάμεις, οι οποίες είναι αντιστρόφως ανάλογες της μεταξύ τους απόστασης (Maxwell molecules).

Ο Boltzmann σε μια προσπάθεια αυστηρότερης διατύπωσης της θεωρίας του Maxwell για την τυχαιότητα της μοριακής κίνησης εδραίωσε το θεώρημα $\mathbb{H}$ [24], το οποίο περιγράφει την μη αντιστρεψιμότητα των φυσικών διεργασιών, ενώ περιγράφει πως οι μοριακές συγκρούσεις οδηγούν σε αύξηση της εντροπίας. Συγκεκριμένα, περιγράφει ότι κάθε αρχική κατανομή μοριακών θέσεων και ταχυτήτων τείνει σχεδόν πάντα σε κατάσταση ισορροπίας, στην οποία οι μοριακές ταχύτητες ακολουθούν την κατανομή Maxwell. Στην ίδια εργασία, ο Boltzmann διατύπωσε μια ολοκληροδιαφορική εξίσωση, η οποία περιγράφει την εξέλιξη της συνάρτησης κατανομής των μοριακών ταχυτήτων στο χώρο και στο χρόνο. Επίσης απέδειξε ότι η σχέση, η οποία προτάθηκε από τον Maxwell για την κατανομή των ταχυτήτων για διάφορους συντελεστές μεταφοράς και για μόρια Maxwell, αποτελεί λύση της παραπάνω ολοκληροδιαφορικής εξίσωσης. Η συγκεκριμένη ολοκληροδιαφορική εξίσωση ονομάστηκε εξίσωση Boltzmann.

Μετά από έρευνες των Maxwell, Boltzmann, Stefan και Langevin έγινε σαφές ότι η επίλυση της εξίσωσης Boltzmann είναι εφικτή μόνο για την περίπτωση αερίου που αποτελείται από μόρια Maxwell, ενώ σε άλλη περίπτωση η μαθηματική δυσκολία επίλυσης καθιστούσε το εγχείρημα αδύνατο. Το 1905 ο Lorentz [25] κατόρθωσε να απλοποιήσει την εξίσωση Boltz-

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

mann θεωρώντας δυαδικό μίγμα μορίων, όπου η μάζα του ενός είδους μορίων είναι αμελητέα σε σχέση με το άλλο είδος μορίων, ενώ οι συγκρούσεις μεταξύ των ελαφρών σωματιδίων αγνοούνται. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν σε συνδυασμό με την θεωρία ηλεκτρονίων σε μέταλλα ήταν ακριβή και αξιόπιστα. Η συγκεκριμένη αυτή προσπάθεια του Lorentz εν γένει δεν έπεισε την επιστημονική κοινότητα για την προώθηση μια γενικής μεθοδολογίας επίλυσης της εξίσωσης Boltzmann.

Το 1910, ο μαθηματικός Hilbert [26] παρουσίασε μία εργασία για την λογική δομή της εξίσωσης Boltzmann. Για την περίπτωση συμπαγών σφαιρικών σωματιδίων, ο Hilbert απέδειξε ότι η εξίσωση Boltzmann είναι ισοδύναμη με μια συγκεκριμένη γραμμική ολοκληρωτική εξίσωση δεύτερου είδους, η οποία βασιζόταν σε ισχυρό μαθηματικό υπόβαθρο. Κατ' αυτόν τον τρόπο απέδειξε την ύπαρξη και την μοναδικότητα μια λύσης καθώς και συγκεκριμένες ιδιότητες αυτής. Η συγκεκριμένη μαθηματική προσέγγιση της εξίσωσης Boltzmann αργότερα υιοθετήθηκε από τους Lunn [27], Carleman [28], Wild [29] ενώ η σημαντικότητα της προσφοράς του Hilbert έγκειται στην διατύπωση μιας αυστηρής λογικής δομής που αφορά την κινητική θεωρία.

Το πρόβλημα εύρεσης μιας μεθοδολογίας επίλυσης της εξίσωσης Boltzmann επιλύθηκε ανεξάρτητα από τους Chapman και Enskog την ίδια περίπου χρονική περίοδο. Η εργασία του Chapman [30] αποτελεί προέκταση της θεωρίας Maxwell και βασίζεται στην χρήση των εξισώσεων μεταφοράς, ενώ η προσέγγιση του Enskog εξαρτάται από την λύση εξίσωσης Boltzmann για την συνάρτηση κατανομής. Οι δύο παραπάνω προσεγγίσεις αποδεικνύεται ότι εξάγουν τους ίδιους συντελεστές μεταφοράς. Αργότερα, ο Chapman διατύπωσε εκφράσεις για τους συντελεστές ιξώδους και θερμικής αγωγιμότητας τόσο σε μονατομικό αέριο όσο και σε μίγμα αερίων, υποθέτοντας, όπως ο Maxwell, ότι η συνάρτηση κατανομής f ενός αερίου που βρίσκεται όχι πολύ μακριά από την θερμοδυναμική ισορροπία μπορεί να γραφεί ως $f = f_0(1+\phi)$, όπου ϕ είναι η απόκλιση από την ισορροπία ενώ f_0 είναι η συνάρτηση κατανομής Maxwell. Για μικρούς αριθμούς Knudsen, η συνάρτηση κατανομής f μπορεί να αναπτυχθεί στην παρακάτω δυναμοσειρά

$$f = f^{(0)} + Knf^{(1)} + Kn^2 f^{(2)} + \cdots \tag{2.1}$$

Αντικαθιστώντας την Εξ.(2.1) στην εξίσωση Boltzmann προκύπτει ένα σύστημα διαφορικών εξισώσεων. Στην συνέχεια, επιλέγοντας εξισώσεις που ανήκουν στην ίδια τάξη είναι δυνατόν να προκύψουν οι αντίστοιχες υδροδυναμικές εξισώσεις. Συγκεκριμένα από την εξίσωση μηδενικής τάξης προκύπτει η εξίσωση Euler, από την εξίσωση πρώτης τάξης προκύπτουν οι εξισώσεις Navier-Stokes, ενώ από την εξίσωση δεύτερης τάξης προκύπτουν οι μη γραμμικοί όροι μεταφοράς των εξισώσεων Burnett [31].

Μετά την διαπίστωση ότι για την περίπτωση αερίου σε κανονική θερμοκρασία και πίεση, η εξίσωση Boltzmann είναι δυνατόν να λυθεί, προσπάθειες αναπτύχθηκαν για την αντιμετώπιση βασικών θεμελιωδών περιορισμών που πηγάζουν από την εξίσωση Boltzmann. Συγκεκριμένα, η υπόθεση δυαδικών συγκρούσεων δεν επιτρέπει την επέκταση της κινητικής θεωρίας

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

σε πυκνά αέρια ή υγρά. Μια πρώτη προσπάθεια διατύπωσης μια γενικής εξίσωσης Boltzmann για υψηλές πυκνότητες έγινε από τον Enskog [32], η οποία ισχύει μόνο για την περίπτωση σκληρών σφαιρών. Σύντομα, έγινε σαφές ότι ήταν αναγκαία η εξέταση και αναδιατύπωση των θεμελιωδών αρχών της κινητικής θεωρίας.

Είναι γνωστό ότι προβλήματα ροών σε κανονικές θερμοκρασίες και πιέσεις περιγράφονται από τις εξισώσεις δυναμικής των ρευστών. Έτσι προκύπτει η ανάγκη σύνδεσης της εξίσωσης Boltzmann με τις εξισώσεις Euler και Navier-Stokes. Πρώτος ο Grad [33] απέδειξε την ισοδυναμία των υδροδυναμικών εξισώσεων με μια ασυμπτωτική μορφή της εξίσωσης Boltzmann. Η βασική διαφορά μεταξύ των δύο προσεγγίσεων είναι οι διαφορετικές χρονικές κλίμακες, που στην περίπτωση των υδροδυναμικών εξισώσεων είναι πολύ μεγαλύτερες σε σχέση με τις αντίστοιχες της κινητικής θεωρίας. Στο συγκεκριμένο πεδίο, ακόμα και σήμερα πραγματοποιείται αρκετή έρευνα ενώ αναγκαία είναι η λεπτομερής μελέτη για την ύπαρξη και μοναδικότητα μιας λύσης για προβλήματα αρχικών και οριακών τιμών της κινητικής θεωρίας.

2.2 Δυναμική αραιοποιημένων αερίων

Μία από τις πλέον σημαντικές εφαρμογές της κινητική θεωρίας, που αποτελεί και αντικείμενο της παρούσας διατριβής είναι η δυναμική αραιοποιημένων ροών (rarefied gas dynamics). Το αντικείμενο της δυναμικής αραιοποιημένων ροών (Rarefied Gas Dynamics)[34] έχει ως κύριο σκοπό την μελέτη ροών αερίων, στις οποίες η μέση απόσταση μεταξύ δύο διαδοχικών συγκρούσεων ενός σωματιδίου, αποκαλούμενη ως μέση ελεύθερη διαδρομή, είναι συγκρίσιμη με το χαρακτηριστικό μήκος της διάταξης (π.χ. ακτίνα κυκλικού αγωγού ή πλάτος ορθογώνιου αγωγού κλπ). Η θεωρία του συνεχούς μέσου καταρρέει και απαιτείται η χρήση εναλλακτικών μεθόδων που βασίζονται στην κινητική θεωρία των αερίων καθώς και στην θεμελιώδη ολοκληροδιαφορική εξίσωση Boltzmann, η οποία προτάθηκε από τον Ludwig Boltzmann το 1872 και φέρει το όνομά του [35, 36].

Στις οριακές περιπτώσεις της εξίσωσης Boltzmann ανήκουν η θεωρία του συνεχούς μέσου, η οποία βασίζεται στις εξισώσεις Euler ή Navier-Stokes, καθώς και η ελεύθερη μοριακή περιοχή, η οποία χαρακτηρίζεται από την απουσία μοριακών συγκρούσεων. Σημειώνεται, ότι η πληθώρα προβλημάτων της δυναμικής αραιοποιημένων ροών ανήκουν στην ενδιάμεση περιοχή μεταξύ της ελεύθερης μοριακής περιοχής και της περιοχής ολίσθησης, που ονομάζεται μεταβατική περιοχή.

Το αντικείμενο της δυναμικής αραιοποιημένων ροών αναπτύχθηκε κυρίως το δεύτερο ήμισυ του $20^{ου}$ αιώνα κατά την εξερεύνηση του διαστήματος [9, 37]. Αρχικά, παρουσιαστικάν πειραματικές και θεωρητικές μελέτες σχετικά με την γενική εποπτεία της εξίσωσης Boltzmann εμφανίστηκαν, ενώ περιορισμένος ήταν ο αριθμός των εργασιών που αναφέρονταν σε αναλυτικές λύσεις κλασσικών προβλημάτων. Οι πρώτες αριθμητικές επιλύσεις εμφανίστηκαν στις αρχές του '60, ενώ μετά την πάροδο μιας δεκαετίας, ο αριθμός των αριθμητικών προσεγγίσεων

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

παρέμεινε χαμηλός και με όχι ακριβή αποτελέσματα. Εν συνεχεία, παρατηρείται μια στροφή της ακαδημαϊκής κοινότητας προς το πεδίο της αριθμητικής μοντελοποίησης με παράλληλη μείωση σε πειραματικές μελέτες.

Η εξίσωση Boltzmann αποτέλεσε πρακτικό εργαλείο κατά την μελέτη της πτήσης αεροσκαφών σε μεγάλο ύψος, όπου κύριο χαρακτηριστικό είναι η μείωση της πυκνότητας με την αύξηση του ύψους. Η εν λόγω μείωση της πυκνότητας μειώνει τις αναπτυσσόμενες αεροδυναμικές αντιστάσεις και τις ροές θερμότητας που αναπτύσσονται σε ένα αεροσκάφος. Έτσι, ο σωστός σχεδιασμός και η κατασκευή των πολυδάπανων αυτών οχημάτων αποτελεί μονόδρομο και προϋποθέτει την χρήση της δυναμικής αραιοποιημένων ροών [9].

Στην περιοχή των περιβαλλοντικών προβλημάτων η δυναμική αραιοποιημένων ροών απαιτείται για την πλήρη κατανόηση και έλεγχο του σχηματισμού, της αντίδρασης και της εξέλιξης των σωματιδίων με ποικίλες συνθέσεις και σχήματα και με διάμετρο που κυμαίνεται από 0.001 μm έως και 50 μm. Επίσης, βασικό αντικείμενο έρευνας είναι η χωρική και χρονική κατανομή τους υπό της επίδραση βαθμίδων πίεσης, θερμοκρασίας και συγκέντρωσης. Τα συγκεκριμένα προβλήματα βρίσκουν εφαρμογή στην μελέτη εκπομπών σωματιδίων από εργοστάσια ηλεκτρικής ισχύος, χημικές βιομηχανίες, οχήματα μεταφοράς καθώς και στον σχηματισμό νέφους και την εκπεμπόμενη ραδιενέργεια από πυρηνικά εργοστάσια [20].

Ένα τρίτο πεδίο εφαρμογής της δυναμικής αραιοποιημένων ροών είναι η μελέτη ροής και φαινομένων μεταφοράς σε μικρο- και νανοσυστήματα γνωστά ως MEMS ή NEMS αντίστοιχα. Το μέγεθος των συγκεκριμένων συσκευών κυμαίνεται από μερικά μικρά έως μερικά χιλιοστά, ενώ λόγω των μικρών χαρακτηριστικών διαστάσεων λαμβάνουν χώρα αραιοποιημένες ροές [11].

Τέλος, μια ακόμη περιοχή στην οποία βρίσκει εφαρμογή η δυναμική αραιοποιημένων ροών είναι η τεχνολογία κενού, η οποία αν και έχει αναπτυχθεί εδώ και δεκαετίες, μόλις τα τελευταία χρόνια έχουν προκύψει αξιόπιστα πειραματικά και υπολογιστικά αποτελέσματα με τα τελευταία να βασίζονται στην χρήση της κινητικής θεωρίας και την αριθμητική επίλυση της εξίσωσης Boltzmann εφαρμόζοντας τεχνικές που θα αποτελέσουν το κύριο στοιχείο μελέτης της παρούσας διατριβής.

2.3 Εξίσωση Boltzmann και κινητικά μοντέλα

Στην βασική της μορφή, η εξίσωση Boltzmann περιγράφει την εξέλιξη ενός συστήματος μορίων μονατομικού αερίου θεωρώντας την ύπαρξη μοριακού χάους και δυατομικών ενδομοριακών συγκρούσεων. Η εξίσωση Boltzmann περιγράφεται από την ακόλουθη εξίσωση [36],

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{\xi},t)}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_i \frac{\partial f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{\xi},t)}{\partial \boldsymbol{r}} + \boldsymbol{F}_i \frac{\partial f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{\xi},t)}{\partial \boldsymbol{\xi}} = \iiint (f' f'_* - f f_*) g b db \, d\epsilon \, d\boldsymbol{\xi}_* \tag{2.2}$$

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

όπου $f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{\xi}, t)$ είναι η άγνωστη συνάρτηση κατανομής, η οποία περιγράφει την αριθμητική πυκνότητα των σωματιδίων του αερίου με διάνυσμα θέσης $\boldsymbol{r}$ και ταχύτητα $\boldsymbol{\xi}$ την χρονική στιγμή t. Η ποσότητα g εκφράζει την σχετική ταχύτητα των μορίων με $g = |\xi - \xi_*|$ ενώ η ποσότητα b ονομάζεται παράμετρος σύγκρουσης και εξαρτάται από το είδος του ενδομοριακού δυναμικού. Η παράμετρος ϵ εκφράζει την στερεά γωνία σύγκρουσης των δύο σωματιδίων. Το αριστερό μέρος της Εξ.(2.2) αντιπροσωπεύει την ελεύθερη κίνηση των σωματιδίων χωρίς την ύπαρξη συγκρούσεων κάτω από την επίδραση του πιθανού πεδίου δυνάμεων $\boldsymbol{F}$. Το δεξί μέλος της Εξ.(2.2) αντιπροσωπεύει τον όρο των συγκρούσεων και αποτελεί μια μη γραμμική και πολύπλοκη συναρτησιακή. Η παρουσία του συγκεκριμένου όρου καθιστά την επίλυση της εξίσωσης Boltzmann μη εφικτή έως και στις μέρες μας.

Για την αναλυτική ή αριθμητική επίλυση της εξίσωσης Boltzmann σε καταστάσεις εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας, συνήθως γίνεται χρήση κάποιων μοντέλων για την απλοποίηση του όρου των 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 $\mathbb{H}$ και τέλος θα πρέπει να δίνουν τους σωστούς συντελεστές μεταφοράς [36]. Τα κυριότερα κινητικά μοντέλα είναι το μοντέλο Bhatnagar-Gross-Krook (BGK model) [38, 39] που είναι το πρώτο που παρουσιάστηκε, το μοντέλο Shakhov (S model) που αποτελεί μια επέκταση του μοντέλου BGK προκειμένου να αντιμετωπιστούν μη ισοθερμοκρασιακές ροές, για ροές μιγμάτων το απλούστερο μοντέλο είναι του Hamel, ενώ το πιο νέο μοντέλο McCormack είναι αρκετά πιο αποτελεσματικό.

Το πρώτο μοντέλο που εμφανίστηκε ήταν το BGK [38, 39]. Συνιστά την απλούστερη δυνατή προσέγγιση του όρου των συγκρούσεων, αλλά και την βάση στην οποία αναπτύχθηκαν και τα περισσότερα μετέπειτα μοντέλα. Χρησιμοποιείται σε μεγάλη έκταση για ροές ενός συστατικού μέχρι και σήμερα, αφού τα αποτελέσματα που δίνει είναι σε αρκετές περιπτώσεις ικανοποιητικά. 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.

Μια βελτιωμένη εκδοχή όσον αφορά και πάλι ροές ενός συστατικού, παρουσιάστηκε το 1974 και ονομάστηκε μοντέλο Shakhov και χάριν συντομίας είναι γνωστό σαν μοντέλο S [40, 17]. Η διαφοροποίηση βρίσκεται στον όρο των συγκρούσεων που τώρα περιλαμβάνει δύο βαθμούς ελευθερίας με αποτέλεσμα να προκύπτουν σωστές τιμές του αριθμού Prandtl. Τώρα η ακριβής επίλυση μη ισοθερμοκρασιακών ροών είναι εφικτή. Αντίστοιχα αποτελέσματα δίνει και το επονομαζόμενο ελλειψοειδές μοντέλο (ES) [41], το οποίο βασίζεται στην αντικατάσταση την κατανομής Maxwell από μια ανισοτροπική κατανομή Gauss, όπου υπεισέρχεται ως ανεξάρτητη μεταβλητή και ο αριθμός Prandtl. Για τιμή του Prandtl μονάδα προκύπτει το μοντέλο BGK.

Η αντικατάσταση του όρου των συγκρούσεων όταν το ρευστό είναι μίγμα αερίων, έχει αποτελέσει αντικείμενο μελέτης από πολλούς ερευνητές [42, 43, 44, 36]. Μια σειρά από

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

μοντελοποιήσεις προτάθηκαν μέσα σε σύντομο χρονικό διάστημα [45, 46, 47, 48] με σχετικά όμως περιορισμένες δυνατότητες. Ενδεικτικά, αναφέρεται ότι το μοντέλο Hamel [48] αποτελεί την απ' ευθείας επέκταση του BGK για μίγμα δύο συστατικών. Επιλύονται από μία εξίσωση για κάθε συστατικό, ενώ ο όρος των συγκρούσεων είναι μια άθροιση των αποκλίσεων των συναρτήσεων πιθανότητας κατανομής από αυτές της κατά Maxwell ισορροπίας με διαφορετικό όμως χρόνο χαλάρωσης.

Ένα πιο σύνθετο μοντέλο από αυτά που ήδη αναφέρθηκαν, που όμως έχει πολύ καλύτερη φυσική θεμελίωση και μεγαλύτερες δυνατότητες, προτάθηκε από τον McCormack [49]. Είναι πολύπλοκο αλλά αξιόπιστο με διευρυμένο εύρος εφαρμογών, ενώ επιτρέπει και την ανεξάρτητη μοντελοποίηση του τύπου των σωματιδιακών συγκρούσεων χρησιμοποιώντας ακόμα και δεδομένα που έχουν προκύψει από πειραματικές παρατηρήσεις [50]. Ταυτόχρονα εκτός από την ικανοποίηση των νόμων διατηρησιμότητας και του θεωρήματος $\mathbb{H}$ [15] που όλα τα προαναφερθέντα μοντέλα επιτυγχάνουν, η εφαρμογή της διαδικασίας Chapman-Enskog δίνει τις σωστές εκφράσεις για όλους τους συντελεστές μεταφοράς, δηλαδή το ιξώδες, την θερμική αγωγιμότητα, τη διαχυτότητα και τη θερμική διαχυτότητα, κάτι που δεν συμβαίνει με τη πλειονότητα των υπολοίπων. Το γεγονός αυτό επιβεβαιώνεται και από τη σύγκριση των αποτελεσμάτων [51, 52, 53] με τα αντίστοιχα της ακριβούς εξίσωσης Boltzmann [54, 55].

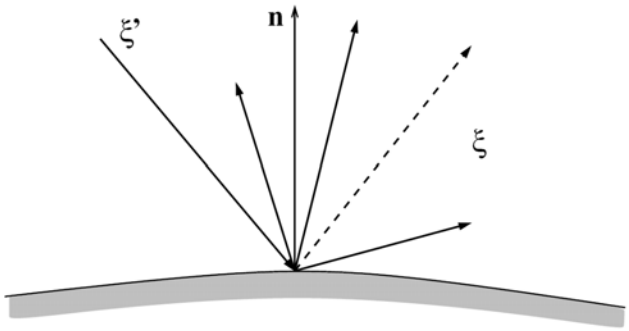
2.4 Οριακές συνθήκες

Για την επίλυση της εξίσωσης Boltzmann απαιτείται ο καθορισμός των οριακών συνθηκών, οι οποίες περιγράφουν την επίδραση των μορίων του αερίου με τα στερεά τοιχώματα. Η αλληλεπίδραση αερίου-τοιχώματος είναι η αιτία ύπαρξης τριβής και άντωσης σε στερεά σώματα όπως επίσης και της μεταφοράς θερμότητας μεταξύ αερίου και τοιχωμάτων.

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 και παραμένουν ίδιες ανεξάρτητα από το εάν η εξίσωση Boltzmann περιλαμβάνει τον όρο των σωματιδιακών συγκρούσεων.

Η μελέτη της αλληλεπίδρασης αερίου-τοιχώματος θεωρείται συνδετικός κρίκος μεταξύ κινητικής θεωρίας και φυσικής στερεάς κατάστασης και αποτελεί από μόνη της ένα ξεχωριστό αντικείμενο μελέτης. Η δυσκολία της θεωρητικής μελέτης της αλληλεπίδρασης αερίου-τοιχώματος έγκειται στο γεγονός της έλλειψης σημαντικής πληροφορίας σχετικά με την μορφολογία της στερεάς επιφάνειας, η οποία με την σειρά της επηρεάζει σε μεγάλο βαθμό το είδος της αλληλεπίδρασης. Καθώς ένα σωματίδιο προσπίπτει στο τοίχωμα, είναι πιθανόν να απορροφηθεί και να σχηματίσει χημικούς δεσμούς, να διασπαστεί, να ιονιστεί ή να αντικαταστήσει

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



Σχήμα 2.1: Αλληλεπίδραση μορίου-τοιχώματος (η διακεκομμένη γραμμή αντιστοιχεί σε κατοπτρική ανάκλαση).

επιφανειακά μόρια του στερεού τοιχώματος. Γενικά, η αλληλεπίδραση αερίου-τοιχώματος εξαρτάται από την τραχύτητα, την καθαρότητα, την θερμοκρασία κ.α της στερεάς επιφάνειας.

Ένα μόριο που χτυπά μια στερεά επιφάνεια με ταχύτητα ξ' απομακρύνεται από αυτήν με ταχύτητα ξ, της οποίας ο ακριβής υπολογισμός πραγματοποιείται εάν είναι γνωστή η τροχιά του σωματιδίου διαμέσου του τοιχώματος. Η δυσκολία του υπολογισμού της συγκεκριμένης τροχιάς είναι προφανής και εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από την θέση και την ταχύτητα των σωματιδίων επάνω στο τοίχωμα. Για τον λόγο αυτό, για την αποτελεσματικότερη περιγραφή της αλληλεπίδρασης εισάγεται η έννοια της πυκνότητας πιθανότητας $W(\xi' \to \xi, \mathbf{x}, t)$ κατά την οποία ένα σωματίδιο που προσπίπτει στην στερεά επιφάνεια με ταχύτητα ξ' γύρω από το $\xi' + d\xi'$ στο σημείο $\mathbf{x}$ και σε χρόνο t, θα εξέλθει από το ίδιο σημείο με ταχύτητα ξ γύρω από το $\xi + d\xi$ (Σχ. 2.1). Εάν η πιθανότητα W είναι γνωστή, τότε είναι δυνατόν να ορισθούν οι οριακές συνθήκες για την συνάρτηση κατανομής $f(\mathbf{r}, \xi, t)$.

Κατά τον προσδιορισμό των οριακών συνθηκών, κύριο μέλημά μας είναι η συσχέτιση της συνάρτησης κατανομής των σωματιδίων που απομακρύνονται από το τοίχωμα f^+ με αυτήν των σωματιδίων που προσπίπτουν στο τοίχωμα f^-. Γενικότερα, η συμπεριφορά αυτή μπορεί να διατυπωθεί μαθηματικά ως [17]:

$$f^+ = -\int \frac{\xi' \cdot \mathbf{n}}{\xi \cdot \mathbf{n}} W(\xi, \xi') f^-(\xi') d^3\xi' \tag{2.3}$$

Η συνάρτηση $W(\xi, \xi')$ είναι μια πιθανότητα, τέτοια ώστε το επερχόμενο μόριο με ταχύτητα ξ' θα ανακλαστεί από το 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 αυτή με ταχύτητες που ακολουθούν την κατανομή Maxwell, όπως αυτή ορίζεται από τις μακροσκοπικές ιδιότητες του στερεού τοιχώματος (diffuse scattering) [17]. Ο πυρήνας $W(\xi, \xi')$ έχει την μορφή

$$W_d(\xi' \to \xi) = \frac{m^2 \xi \cdot \mathbf{n}}{2\pi (k_B T_w)^2} e^{-\frac{m\xi^2}{2k_B T_w}} \tag{2.4}$$

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

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

$$W(\xi' \to \xi) = (1-\alpha)\,\delta\left(\xi' - \xi + 2\mathbf{n}\left[\xi' \cdot \mathbf{n}\right]\right) + \alpha \frac{m^2 \xi' \cdot \mathbf{n}}{2\pi \left(k_B T_w\right)^2} e^{-\frac{m\xi^2}{2k_B T_w}}. \tag{2.5}$$

Ο συντελεστής α είναι χαρακτηριστική ιδιότητα του συνδυασμού ρευστού-τοιχώματος και λαμβάνεται από πειραματικά δεδομένα [15].

Οι οριακές συνθήκες του Maxwell είναι αυτές που χρησιμοποιούνται στην πλειονότητα των περιπτώσεων, είναι αρκετά εύχρηστες και τα αποτελέσματα 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 επιφάνειας 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 ενέργειας. Η εφαρμογή των οριακών συνθηκών Cercignani-Lampis [56] όπως ονομάζονται, έχει γίνει με επιτυχία αν και περιορισμένα λόγω της αυξημένης πολυπλοκότητας που παρουσιάζουν [57].

2.5 Αριθμητικές τεχνικές

Η Μέθοδος των Διακριτών Ταχυτήτων (Discrete Velocity Method-DVM) [58, 59, 34, 60, 61] αποτελεί μια βασική μέθοδο για τη αριθμητική επίλυση της κινητικής εξίσωσης και είναι αυτή που εφαρμόζεται και αναπτύσσεται στην περίπτωση των γραμμικών ροών σε αγωγούς απείρου μήκους. Αποτελεί ντετερμινιστική προσέγγιση και η βασική της αρχή είναι η επιλογή ορισμένων διευθύνσεων και τιμών της μοριακής ταχύτητας, για τις οποίες αν είναι γνωστή η λύση της εξίσωσης Boltzmann, είναι δυνατός ο προσδιορισμός των μακροσκοπικών ιδιοτήτων.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

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 μια από τις πλέον αξιόπιστες μεθόδους αριθμητικής ολοκλήρωσης. Το σχήμα είναι επαναληπτικό και στη γενική περίπτωση συγκλίνει. 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 αυξάνεται πολύ ο αριθμός των επαναλήψεων. Για την αντιμετώπιση του προβλήματος αυτού, έχουν προταθεί ορισμένες βελτιώσεις [62] και σχήματα επιτάχυνσης της σύγκλισης των αλγορίθμων [61, 63].

Η μέθοδος Direct Simulation Monte Carlo [64], αποτελεί την δεύτερη βασική μέθοδο επίλυσης, η οποία ως κύριο χαρακτηριστικό έχει την στοχαστική αντιμετώπιση των μοριακών συγκρούσεων, ενώ παρακάμπτεται η απ' ευθείας επίλυση της εξίσωσης Boltzmann. Η συγκεκριμένη μέθοδος αποδείχθηκε ότι παρουσιάζει μεγαλύτερη ακρίβεια από την κλασσική μοριακή δυναμική και για τον λόγο αυτό σήμερα χρησιμοποιείται ευρέως σε όλες σχεδόν τις περιοχές δυναμικής αραιοποιημένων ροών. Η συγκεκριμένη μέθοδος εφαρμόζεται και αναπτύσσεται στην περίπτωση των μη γραμμικών ροών σε αγωγούς πεπερασμένου μήκους.

2.6 Πλήρως ανεπτυγμένες - γραμμικές ροές

Με βάση την επίλυση της γραμμικοποιημένης εξίσωσης Boltzmann έχει αντιμετωπιστεί μια πλειάδα προβλημάτων που αφορούν εσωτερικές και εξωτερικές ροές [15, 17]. Ειδικότερα, όσον αφορά ροές ενός συστατικού εντός αγωγών έχουν αντιμετωπιστεί με επιτυχία ροές μεταξύ παράλληλων πλακών υπό την επίδραση κλίσης πίεσης και θερμοκρασίας, μεταξύ κινούμενων πλακών καθώς και εντός κυλινδρικών και ορθογωνικών αγωγών. Αντίθετα, η διερεύνηση ροών μιγμάτων παραμένει σχετικά περιορισμένη και μόλις τα τελευταία χρόνια παρατηρείται μια προσπάθεια για τη συστηματική μελέτη τους με την επίλυση προβλημάτων, όπως αυτά της ροής μεταξύ πλακών [65] αλλά και εντός κυλινδρικών και ορθογωνικών αγωγών με πολύ μεγάλο μήκος [66, 67].

Για τον χαρακτηρισμό μιας ροής ως γραμμική θα πρέπει θεωρητικά το μήκος των αγωγών να είναι άπειρο, όμως έχει διαπιστωθεί ότι στις περιπτώσεις όπου $L/D_h > 100$, οι γραμμικές κινητικές εξισώσεις μπορούν να εφαρμοστούν με επιτυχία [17]. Στις πλήρως ανεπτυγμένες ροές, στο υδροδυναμικό όριο, η βασική υπόθεση είναι ότι οι όροι συναγωγής αγνοούνται και διατηρούνται μόνοι οι όροι διάχυσης. Έτσι, οι αρχικά μη γραμμικές εξισώσεις Navier-Stokes που περιγράφουν τις συγκεκριμένες ροές απλοποιούνται σε γραμμικές. Τέλος, η μόνη

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

συνιστώσα της ταχύτητας του ρευστού που επιβιώνει είναι αυτή στην κατεύθυνση της κύριας ροής. Συγκεκριμένα, η ταχύτητα κατά μήκος της ροής παραμένει αμετάβλητη για παράδειγμα στην περίπτωση κυλινδρικού αγωγού η ταχύτητα είναι συνάρτηση της ακτινικής διεύθυνσης r, ενώ σε αγωγούς άλλων διατομών η ταχύτητα είναι συνάρτηση των συντεταγμένων x και y που βρίσκονται σε επίπεδο κάθετο στην διεύθυνση της ροής. Η επιλογή της χρήσης γραμμικών εξισώσεων Navier-Stokes συνεπάγεται και χρήση γραμμικών κινητικών εξισώσεων.

Το πλήθος των άρθρων που αναφέρονται στην εφαρμογή της εξίσωσης Boltzmann για την επίλυση συγκεκριμένων προβλημάτων είναι μεγάλο και αναφέρεται σε διάφορα είδη ροών. Στην πλειονότητα βέβαια των περιπτώσεων χρησιμοποιείται στη γραμμικοποιημένη της μορφή κάτι που περιορίζει, αλλά όχι σημαντικά, το εύρος των εξεταζομένων προβλημάτων τουλάχιστον για ροές στη μεταβατική περιοχή.

Η απλούστερη ροή είναι η ροή μεταξύ δύο παράλληλων πλακών μεγάλου μήκους, υπό την επίδραση κλίσης πίεσης. Πιο συγκεκριμένα, η συγκεκριμένη περίπτωση αφορά μόνιμη ροή μονατομικού αερίου μεταξύ πλακών απείρου μήκους. Αποτελεί ένα πρότυπο πρόβλημα στο οποίο μπορεί να εξεταστεί η αποτελεσματικότητα διαφόρων νέων θεωριών ή τεχνικών. Η εφαρμογή οριακών συνθηκών διάχυσης σε συνδυασμό με το μοντέλο BGK για την αντικατάσταση του όρου των συγκρούσεων, έχει επιτρέψει την χρησιμοποίηση όλων των αναλυτικών και αριθμητικών μεθόδων για την εξαγωγή αποτελεσμάτων [68, 69, 70, 71, 72, 73, 74], τα οποία συνήθως αφορούν την παροχή μάζας και θερμότητας. Αντίστοιχα αποτελέσματα έχουν ληφθεί και με το μοντέλο S [75] καθώς και με απ' ευθείας επίλυση της εξίσωσης Boltzmann [76, 77, 78] βασιζόμενα πάντα στο μοντέλο σκληρών σφαιρών. Μια σημαντική παρατήρηση που μπορεί να εξαχθεί από όλες αυτές τις εργασίες είναι ότι τελικά, τουλάχιστον για απλές ροές, τα αποτελέσματα που προκύπτουν από τις μοντελοποιημένες εξισώσεις (BGK και S) παρουσιάζουν πολύ μικρή απόκλιση από αυτά της κανονικής εξίσωσης Boltzmann.

Η επόμενη ροή που έχει μελετηθεί ικανοποιητικά είναι η κίνηση ρευστού εντός κυλινδρικού αγωγού μεγάλου μήκους υπό την επίδραση διαφοράς πίεσης. Η περίπτωση της ροής εντός κυλίνδρου, ενώ στην πραγματικότητα είναι διδιάστατη, μαθηματικά μπορεί να γίνει μονοδιάστατη αν μεταφερθεί στο κυλινδρικό σύστημα συντεταγμένων όπου πλέον μεταβολές υπάρχουν μόνο στην ακτινική διεύθυνση. Και πάλι η εφαρμογή οριακών συνθηκών διάχυσης είναι η συνήθης πρακτική, σε συνδυασμό με διάφορες προτάσεις ως προς τον τρόπο επίλυσης της εξίσωσης, όπως απ' ευθείας αριθμητική επίλυση [79] ή με χρήση των ολοκληρωτικών εξισώσεων [80]. Ταυτόχρονα, και το μοντέλο S έχει δώσει ικανοποιητικά αποτελέσματα [81] αντίστοιχα με αυτά που δίνει η επίλυση της γραμμικοποιημένης εξίσωσης Boltzmann [82] για μοντέλο σκληρών σφαιρών. Αντίστοιχα στοιχεία έχουν προκύψει και για την περίπτωση των οριακών συνθηκών διαχυτικής - κατοπτρικής ανάκλασης για το μοντέλο BGK [83, 84, 85] καθώς και για το S [81].

Σε αγωγούς ορθογωνικής διατομής μεγάλου μήκους, ορισμένα στοιχεία υπάρχουν σε παλαιότερες εργασίες, οι οποίες όμως είτε δεν είχαν ολοκληρωμένη αντιμετώπιση του προβλήματος και προσδιορισμό των ακριβών συνθηκών [86], είτε είχαν περιορισμένα αποτελέσματα [87].

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Η πρώτη ολοκληρωμένη εργασία για μονατομικό αέριο αφορούσε την προσομοίωση μέσω της γραμμικοποιημένης εξίσωσης Boltzmann με το μοντέλο BGK σε συνδυασμό με τη μέθοδο DVM [88]. Αργότερα, η ίδια προσέγγιση επεκτάθηκε και στο μοντέλο S [89].

Μια άλλη περίπτωση για την οποία υπάρχουν αξιόπιστα αποτελέσματα είναι αυτή της ροής μέσω μιας μικρής κυλινδρικής οπής που συνδέει δύο δεξαμενές με διαφορετικές πιέσεις ή θερμοκρασίες [90, 91, 92, 93, 94, 95]. Η ροή έχει αντιμετωπιστεί τόσο για ισοθερμοκρασιακό όσο και για μη ισοθερμοκρασιακό πεδίο.

Για τις ροές μιγμάτων αερίων, η προσπάθεια που έχει καταβληθεί είναι περιορισμένη. Ελάχιστες εργασίες είχαν εμφανισθεί που να ασχολούνται με τον ακριβή υπολογισμό ροών. Μόλις πρόσφατα επιλύθηκαν ροές δυαδικών μιγμάτων ευγενών αερίων για διάφορα κλασσικά προβλήματα εφαρμόζοντας γραμμικές κινητικές εξισώσεις [65, 96, 67, 61].

Εκτός από την θεωρητική προσέγγιση των ροών σε αγωγούς μεγάλου μήκους απαραίτητη είναι και η πειραματική μελέτη, η οποία έχει αρχίσει από πολύ νωρίς επί εποχής Knudsen [97, 98]. Ο Knudsen μελέτησε την εξάρτηση της παροχής με την γεωμετρία και την επιβαλλόμενη διαφορά πίεσης. Παρατήρησε, ότι στην περίπτωση αγωγών μεγάλου μήκους για $Kn \approx 1$ εμφανίζεται ένα ελάχιστο της αδιάστατης παροχής. Η συγκεκριμένη συμπεριφορά στην περίπτωση κυκλικού αγωγού οφείλεται στον μικρό αριθμό σωματιδίων που εισέρχονται σε αυτόν ή που συγκρούονται με τα τοιχώματα έχοντας παράλληλα μικρή ακτινική ταχύτητα. Τα σωματίδια αυτά έχουν δυσανάλογα μεγάλη συνεισφορά στην ροή μάζας για μεγάλους αριθμούς Knudsen. Καθώς ο αριθμός Knudsen μειώνεται, ο αυξανόμενος αριθμός των μοριακών συγκρούσεων διακόπτει την ακτινική κίνηση των μορίων με αποτέλεσμα την μείωση της ροής μάζας. Περαιτέρω αύξηση των μοριακών συγκρούσεων οδηγεί σε αύξηση της ταχύτητας, η οποία συνεπάγεται περαιτέρω αύξηση της ροής μάζας διαμέσου του κυκλικού αγωγού. Πειράματα πραγματοποιήθηκαν σε κυλινδρικούς αγωγούς, όπου μελετήθηκαν ροές στην μεταβατική περιοχή [99], ενώ πρόσφατες πειραματικές εργασίες εμφανίστηκαν στην περιοχή της μικρορευστομηχανικής [1, 87, 100, 101] και συγκεκριμένα σε ροές διαμέσου ορθογώνιων μικροαγωγών λόγω βαθμίδα πίεσης. Τονίζεται, ότι βασικό χαρακτηριστικό των πειραμάτων στα άρθρα [87, 100, 101], είναι ότι τα αποτελέσματα κυμαίνονται από την υδροδυναμική έως την περιοχή ολίσθησης ($0 < Kn \leq 0.1$). Η προσπάθεια επέκτασης των αποτελεσμάτων στην μεταβατική ή την ελεύθερη μοριακή περιοχή ($Kn > 0.1$) βρίσκεται ακόμα σε εξέλιξη λόγω της απαίτησης ειδικών και μεγάλου κόστους αισθητήρων για την μέτρηση των αντίστοιχων μακροσκοπικών μεγεθών όπως π.χ. της πίεσης και της θερμοκρασίας. Τέλος, για την περίπτωση αγωγών τριγωνικής και τραπεζοειδούς διατομής δεν έχουν αναφερθεί αντίστοιχες πειραματικές μελέτες στην διεθνή βιβλιογραφία.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

2.7 Μη γραμμικές ροές

Είναι γνωστό ότι η μελέτη ροών αερίων σε αγωγούς μικρού μήκους, στόμια και ακροφύσια παρουσιάζει σημαντικές διαφοροποιήσεις σε σύγκριση με εκείνη σε αγωγούς μεγάλου μήκους. Στην δεύτερη περίπτωση, η ροή μπορεί να θεωρηθεί γραμμική (πλήρως ανεπτυγμένη) [15] ακόμα και σε περιπτώσεις μεγάλων διαφορών πίεσης, γεγονός το οποίο επιτρέπει την χρήση γραμμικών κινητικών εξισώσεων [102, 81, 88, 103, 67]. Αντίθετα στην πρώτη περίπτωση ροών, η ροή θεωρείται μη γραμμική και αναγκαία είναι η επίλυση μη γραμμικών κινητικών εξισώσεων ή εναλλακτικά η εφαρμογή της μεθόδου Direct Simulation Monte Carlo [15]. Πρέπει να τονιστεί, ότι στις ροές σε αγωγούς μικρού μήκους, στόμια και ακροφύσια και συγκεκριμένα στις περιπτώσεις ροών όπου ανήκουν στην μεταβατική και στην υδροδυναμική περιοχή, οι συναρτήσεις κατανομής των σωματιδίων στην είσοδο και την έξοδο του αγωγού (ή στομίου, ακροφυσίου) δεν είναι Maxwell (Maxwellians) και για τον λόγο αυτό κατά την μοντελοποίηση αναγκαία είναι η θεώρηση υπολογιστικών περιοχών πριν και μετά την είσοδο και την έξοδο του αγωγού (ή στομίου, ακροφυσίου) αντίστοιχα. Η μεθοδολογία αυτή συνεπάγεται ότι το υπολογιστικό φορτίο είναι σαφώς αυξημένο σε σύγκριση με το αντίστοιχο της περίπτωσης γραμμικοποιημένης ροής.

Στην περιοχή ροών διαμέσου ακροφυσίων, υπάρχει πληθώρα πειραματικών και υπολογιστικών εργασιών [90, 104, 105, 106, 107, 108]. Η πλειοψηφία των αναφερθέντων εργασιών στοχεύει στην βελτιστοποίηση του σχεδιασμού και της απόδοσης ακροφυσίων που χρησιμοποιούνται ως συστήματα πρόωσης στην αεροδιαστημική τεχνολογία. Τονίζεται, ότι στην περίπτωση ροών με χαμηλούς αριθμούς Re, οι παραπάνω μελέτες καταλήγουν στο συμπέρασμα ότι στην μεταβατική περιοχή τα ακροφύσια είναι δυνατόν να αντικατασταθούν με στόμια ή κυλινδρικούς αγωγούς μικρού μήκους, αφού τα τελευταία παρουσιάζουν μικρότερες απώλειες λόγω τριβής.

Εργασίες στην πειραματική και θεωρητική μελέτη ροών αερίων σε αγωγούς μικρού μήκους κατά το παρελθόν ήταν περιορισμένες. Από τις πρώτες μελέτες που εμφανίστηκαν είναι των Hanks και Weissberg [109], οι οποίοι πρότειναν εμπειρικές σχέσεις υπολογισμού της παροχής αερίου διαμέσου κυλινδρικών αγωγών μικρού μήκους, στο υδροδυναμικό όριο και στην μεταβατική περιοχή. Επίσης μελέτες προήλθαν από τους Barrer και Nicholson [110], οι οποίοι μελέτησαν την ροή αερίου σε κυλινδρικούς αγωγούς μικρού μήκους επιβάλλοντας χαμηλούς λόγους πίεσης.

Στην οριακή περίπτωση ροής διαμέσου κυλινδρικής οπής η πρώτη μελέτη προήλθε από τον Liepmann [111], ο οποίος σύγκρινε τα πειραματικά και τα αντίστοιχα υπολογιστικά αποτελέσματα στην μεταβατική περιοχή. Επέκταση της μελέτης σε κυλινδρική οπή έγινε από τον Sreekanth [112], ο οποίος μελέτησε την ροή σε κυλινδρικούς αγωγούς μικρού μήκους επιβάλλοντας υψηλούς λόγους πίεσης, οι οποίοι αντιστοιχούν σε αριθμό Knudsen κοντά στην μεταβατική περιοχή. Υπολόγισε την ροή μάζας αζώτου με τον λόγο πίεσης να κυμαίνεται από 1 έως 20. Προτάθηκε μια ημιεμπειρική σχέση, η οποία συνδέει την ροή μάζας με τον λόγο

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

πίεσης, τον αριθμό Knudsen και τον αδιάστατο λόγο του μήκους προς τη διάμετρο L/D.

Πιο πρόσφατες μελέτες παρουσιάστηκαν από τους Fujimoto και Usami [92], οι οποίοι μέτρησαν την ροή μάζας αερίων για υψηλούς λόγους πίεσης στην μεταβατική περιοχή και πρότειναν εμπειρική σχέση για τον υπολογισμό της ροής μάζας, με βάση τα πειραματικά τους αποτελέσματα. Μελέτες για ροή σε κυλινδρικούς αγωγούς σε κενό πραγματοποιήθηκαν από τον Barashkin [113]. Εν συνεχεία, μελέτες παρουσιάσθηκαν από τους Shinagawa et al. [114], οι οποίοι μέτρησαν την ροή μάζας του αζώτου διαμέσου κυλινδρικών αγωγών με διαφορετικό λόγο μήκους προς την διάμετρο του αγωγού (L/D). Τέλος, πρόσφατα οι Lilly et al. [115] κατά την βελτιστοποίηση του σχεδιασμού συστημάτων πρόωσης στην αεροδιαστημική, μελέτησαν την επίδραση του μήκους των αγωγών στην απόδοση των συγκεκριμένων συστημάτων για δύο περιπτώσεις του λόγου (L/D)=0.015 και 1.2 καθώς και για ευρύ φάσμα της διαφοράς πίεσης. Το συμπέρασμα από την συγκεκριμένη μελέτη εστιάζει στο γεγονός ότι η περίπτωση ροής σε κυκλικό στόμιο (L/D=0) έχει την μεγαλύτερη απόδοση στην πρόωση αεροδιαστημικών συσκευών όπως π.χ. μικροδορυφόρους.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Κεφαλαιο 3

Μελετη ροων σε αγωγους ποικιλων διατομων με γραμμικη κινητικη θεωρια

3.1 Εισαγωγή

Στο παρόν κεφάλαιο παρουσιάζεται η μελέτη ροών μονατομικών αερίων σε αγωγούς μεγάλου μήκους με κυλινδρική, δακτυλοειδή, ορθογώνια, τριγωνική και τραπεζοειδή διατομή. Το αίτιο που προκαλεί την ροή στις παραπάνω περιπτώσεις είναι η βαθμίδα πίεσης και η ροή θεωρείται πλήρως ανεπτυγμένη. Τα αριθμητικά αποτελέσματα προκύπτουν κατά την επίλυση γραμμικών κινητικών εξισώσεων και παρουσιάζονται για όλο το εύρος του αριθμού Knudsen. Η μελέτη εστιάζεται στον υπολογισμό της συνάρτησης κατανομής, από την οποία είναι δυνατόν να προκύψουν βασικά μακροσκοπικά μεγέθη όπως η ταχύτητα, η πυκνότητα και η θερμοκρασία. Επίσης, βάσει των μακροσκοπικών ποσοτήτων υπολογίζονται βασικές αδιάστατες ποσότητες μεταφοράς, όπως είναι η αδιάστατη παροχή και η μέση διατμητική τάση στα τοιχώματα του αγωγού.

Η μεθοδολογία για την αριθμητική επίλυση γραμμικών κινητικών εξισώσεων, καθώς και τον υπολογισμό της αδιάστατης παροχής, για αγωγούς διαφόρων γεωμετριών, έχει περιγραφεί λεπτομερώς σε διάφορες δημοσιευμένες εργασίες [81, 88, 103, 67, 102]. Αντίθετα, σύγκριση των αριθμητικών με αντίστοιχα πειραματικά αποτελέσματα δεν έχει πραγματοποιηθεί λόγω της μη ύπαρξης αξιόπιστων πειραματικών δεδομένων. Στο πλαίσιο αυτό, πραγματοποιείται σύγκριση μεταξύ θεωρητικών και πειραματικών αποτελεσμάτων, ώστε να διαπιστωθεί η ορθότητα και αξιοπιστία των πειραματικών αποτελεσμάτων καθώς και η δυνατότητα περιγραφής προβλημάτων από πλευράς κινητικής θεωρίας σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen.

Μέρος των πειραματικών αποτελεσμάτων προήλθε από την πειραματική διάταξη TRANSFLOW, η οποία ειδικεύεται στην προσομοίωση ροών εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας σε αγωγούς διαφόρων γεωμετριών και βρίσκεται στο ερευνητικό κέντρο της Καρλσρούης (FZK). Άλλα πειραματικά δεδομένα προήλθαν από το άρθρο [87], το οποίο αφορά ροές σε ορθογώνιους μικροαγωγούς. Βασιζόμενοι στα προαναφερθέντα πειραματικά δεδομένα, πραγματοποιείται

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

σύγκριση μεταξύ πειραματικών και θεωρητικών αποτελεσμάτων με σκοπό α) τον έλεγχο της ορθότητας κυρίως των πειραματικών δεδομένων καθώς και β) την ικανότητα της γραμμικής κινητικής θεωρίας στην μοντελοποίηση των παραπάνω ροών.

Η μοντελοποίηση ροών αερίων διαμέσου αγωγών μεγάλου μήκους πραγματοποιείται θεωρώντας αγωγό μήκους L, ο οποίος ενώνει δύο δοχεία με πιέσεις P_1 και P_2 αντίστοιχα. Η θερμοκρασία των δύο δοχείων είναι σταθερή και ίση με T_0, ενώ η ροή στον αγωγό θεωρείται πλήρως ανεπτυγμένη.

Η διατομή του αγωγού καθορίζεται στο εκάστοτε πρόβλημα και συγκεκριμένα στην παρούσα διατριβή παρατίθενται αποτελέσματα για κυλινδρικό, δακτυλοειδή, ορθογώνιο, τριγωνικό και τραπεζοειδή αγωγό. Τονίζεται, ότι κατά την αδιαστατοποίηση των μακροσκοπικών ποσοτήτων ως χαρακτηριστικό μέγεθος επιλέγεται η υδραυλική διάμετρος D_h του εκάστοτε αγωγού. Η αριθμητική επίλυση πραγματοποιείται, εφαρμόζοντας την μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων (DVM) στην αντίστοιχη γραμμική κινητική εξίσωση BGK. Τονίζεται ότι ο βασικός άγνωστος στην εκάστοτε κινητική εξίσωση είναι η συνάρτηση κατανομής, η οποία στην γενική περίπτωση είναι συνάρτηση έξι ανεξάρτητων μεταβλητών: α) τρεις χωρικές, β) τρεις συνιστώσες της μοριακής ταχύτητας. Ανάλογα με τη γεωμετρία οι τρεις χωρικές ανεξάρτητες μεταβλητές είναι δυνατόν να μειωθούν εφαρμόζοντας παραδοχές μονοδιάστατου ή διδιάστατου προβλήματος, αξονοσυμμετρικής ροής κ.α. Για την μείωση του αριθμού των μοριακών ταχυτήτων εφαρμόζεται η διαδικασία προβολής [15].

Στο Κεφάλαιο 3 θα επικεντρωθούμε στην αναλυτική περιγραφή της μεθοδολογίας διαστατοποίησης των αντίστοιχων μακροσκοπικών μεγεθών στην περίπτωση ροής σε κυλινδρικό, δακτυλοειδή, ορθογώνιο, τριγωνικό και τραπεζοειδή αγωγό.

3.2 Ροή λόγω μικρής βαθμίδας πίεσης

3.2.1 Γενικά στοιχεία

Πριν από την επιμέρους μελέτη ροών μονατομικών αερίων σε αγωγούς μεγάλου μήκους και ποικίλων διατομών, σκόπιμο είναι να αναφερθούν τα βασικά μεγέθη που υπολογίζονται σε κάθε περίπτωση. Συγκεκριμένα, οι αγωγοί συνδέουν δύο δοχεία με πιέσεις P_1 και P_2 αντίστοιχα με $\frac{|P_1-P_2|}{P_1} \ll 1$, τα οποία βρίσκονται στην ίδια θερμοκρασία T_0. Όλοι οι αγωγοί έχουν μήκος L, εμβαδόν A' και περίμετρο Γ', ενώ η υδραυλική διάμετρος D_h ορίζεται ως,

$$D_h = \frac{4A'}{\Gamma'} \tag{3.1}$$

με $D_h \ll L$ και αποτελεί το χαρακτηριστικό μήκος του κάθε αγωγού. Σε όλες τις περιπτώσεις αγωγών η ροή αναπτύσσεται στην z' κατεύθυνση. Το αδιάστατο εμβαδόν σε κάθε περίπτωση ορίζεται ως $A = A'/D_h^2$ και η αδιάστατη περίμετρο ως $\Gamma = \Gamma'/D_h$. Οι χωρικές συντεταγμένες αδιαστατοποιούνται ως $z = z'/D_h$, $x = x'/D_h$, $y = y'/D_h$ και $r = r'/D_h$ (ακτινική κατεύ-

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

θυνση). Η μακροσκοπική ταχύτητα στην διεύθυνση z' είναι η u', ενώ η διατμητική τάση στα τοιχώματα του αγωγού ορίζεται ως τ'_w. Η μέση μακροσκοπική ταχύτητα και η μέση διατμητική τάση ορίζονται ως $\overline{u'}$ και $\overline{\tau'_w}$ αντίστοιχα. Για τον υπολογισμό των αδιάστατων παραπάνω ποσοτήτων εφαρμόζεται η εξής αδιαστατοποίηση: Για την ταχύτητα u και την μέση ταχύτητα $\overline{u}$ ισχύει ότι $u = u'/(\upsilon_0 X_P)$ και $\overline{u} = \overline{u'}/(\upsilon_0 X_P)$ με $\upsilon_0 = \sqrt{2kT_0/m}$ η πλέον πιθανή ταχύτητα με k την σταθερά Boltzmann και m την μοριακή μάζα του αερίου. Η διατμητική τάση και η μέση διατμητική τάση στα τοιχώματα του αγωγού αδιαστατοποιούνται ως $\tau_w = \tau'_w/(2P_0 X_P)$ και $\overline{\tau_w} = \overline{\tau'_w}/(2P_0 X_P)$ αντίστοιχα. Η ποσότητα X_P ορίζεται ως

$$X_P = \frac{D_h}{P_0}\frac{dP}{dz'} = \frac{1}{P_0}\frac{dP}{dz} \ll 1 \tag{3.2}$$

και είναι η αδιάστατη τοπική κλίση πίεσης, η οποία προκαλεί την ροή, ενώ $P_0 = (P_1 + P_2)/2$ είναι η πίεση αναφοράς.

Εφαρμόζοντας ισοζύγιο δυνάμεων σε μια διαφορική φέτα του ρευστού που τέμνει κάθετα τον αγωγό, προκύπτει ότι η μέση διατμητική τάση που αναπτύσσεται στα τοιχώματα του αγωγού είναι ανάλογη του γινομένου της κλίσης πίεσης και του λόγου του εμβαδού προς την περίμετρο του αγωγού δηλαδή [10],

$$\overline{\tau'_w} = \frac{A'}{\Gamma'}\frac{dP'}{dz'}. \tag{3.3}$$

όπου A' είναι το εμβαδόν της διατομής του αγωγού και Γ' η περίμετρος. Αδιαστατοποιώντας την μέση διατμητική τάση $\overline{\tau_w}$, Εξ.(3.3) και θεωρώντας ότι $A/\Gamma = 1/4$ προκύπτει ότι

$$\overline{\tau_w} = \frac{\overline{\tau'_w}}{2PX_P} = \frac{A}{2\Gamma} = \frac{1}{8}, \tag{3.4}$$

αποτέλεσμα, το οποίο είναι ανεξάρτητο του αριθμού Knudsen, της γεωμετρίας του αγωγού καθώς και των οριακών συνθηκών αλληλεπίδρασης αερίου - τοιχώματος. Η Εξ.(3.4) χρησιμοποιήθηκε για τον έλεγχο των αριθμητικών αποτελεσμάτων της αριθμητικής επίλυσης των γραμμικών κινητικών εξισώσεων.

Η παράμετρος που απεικονίζει την αραιοποίηση της ροής είναι η παράμετρος αραιοποίησης δ , η οποία γενικά ορίζεται ως

$$\delta = \frac{D_h P_0}{\mu \upsilon_0} = \frac{\sqrt{\pi}}{2}\frac{1}{Kn}, \tag{3.5}$$

όπου μ το ιξώδες του αερίου σε θερμοκρασία αναφοράς T_0.

Οι οριακές συνθήκες που συνοδεύουν την εκάστοτε κινητική εξίσωση είναι [15, 116, 17]

$$\phi^+ = (1-\alpha)\phi^-, \qquad \boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{n} > 0, \tag{3.6}$$

όπου τα σύμβολα $(+)$ και $(-)$ υποδηλώνουν την κατανομή των σωματιδίων που απομακρύνονται και εισέρχονται στο τοίχωμα αντίστοιχα, ενώ $\boldsymbol{n}$ είναι το μοναδιαίο διάνυσμα κάθετο

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

στο τοίχωμα και με φορά προς στο εσωτερικό της ροής. Για $\alpha = 1$ αντιστοιχούν οι οριακές συνθήκες πλήρους διάχυσης, ενώ για $\alpha = 0$ αντιστοιχούν οι οριακές συνθήκες κατοπτρικής ανάκλασης.

Κατά την διαδικασία της διαστατοποίησης και κατ' επέκταση του υπολογισμού της ροής μάζας M σε kg/s, θα πρέπει οι ποσότητες της πίεσης P_1 και P_2 πριν και μετά τον αγωγό, η θερμοκρασία αναφοράς T_0, το εμβαδόν, το μήκος του αγωγού καθώς και το αέριο που διέρχεται, να είναι γνωστά εξ' αρχής. Η ροή μάζας M που διέρχεται από οποιονδήποτε αγωγό δίνεται από την ακόλουθη εξίσωση,

$$M = \int \rho u' dA'. \tag{3.7}$$

Εφαρμόζοντας την παραπάνω αδιαστατοποίηση και κάνοντας χρήση της σχέσης $\rho = 2P_0/\upsilon_0^2$ προκύπτει ότι

$$M = \upsilon_0 \rho X_P D_h^2 \int u dA = 2D_h^2 \frac{P_0 X_P}{\upsilon_0} \int u dA \tag{3.8}$$

ή

$$\frac{M\upsilon_0}{A' P_0 X_P} = \frac{2}{A} \int u dA = G. \tag{3.9}$$

Από την Εξ.(3.9) προκύπτει ότι

$$M = G\frac{A' P_0 X_P}{\upsilon_0} = G D_h \frac{A'}{\upsilon_0}\frac{dP}{dz'} = G D_h \frac{A D_h^2}{\upsilon_0}\frac{dP}{D_h dz} \tag{3.10}$$

ή

$$M = G\frac{A'}{\upsilon_0}\frac{P_2 - P_1}{L} \tag{3.11}$$

Η Εξ.(3.11) προκύπτει κάνοντας την παραδοχή ότι η μέση παράμετρος αραιοποίησης κατά μήκος του αγωγού μεταβάλλεται ελάχιστα και ουσιαστικά παραμένει σταθερή και ίση με $\delta_0 = (\delta_1 + \delta_2)/2$. Στην περίπτωση μεγάλων διαφορών πίεσης εφαρμόζεται διαφορετική μεθοδολογία που περιγράφεται στην Παράγραφο 3.3.

Για λόγους πληρότητας παρατίθεται ο υπολογισμός του αριθμού Ma και Re συναρτήσει της παραμέτρου αραιοποίησης δ. Από τον ορισμό του αριθμού Ma προκύπτει ότι

$$Ma = \frac{\overline{u'}}{c_0} \tag{3.12}$$

όπου c_0 η ταχύτητα του ήχου. Εφαρμόζοντας την παραπάνω αδιαστατοποίηση προκύπτει ότι

$$Ma = \frac{\overline{u}\upsilon_0 X_P}{c_0} = \overline{u}\frac{\upsilon_0}{c_0}\frac{D_h}{P_0}\frac{dP}{dz'} \tag{3.13}$$

ή

$$Ma = \overline{u}\sqrt{\frac{2}{\gamma}}\frac{P_2 - P_1}{P_0}\frac{D_h}{L}. \tag{3.14}$$

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Αντίστοιχα για τον αριθμό Re προκύπτει

$$Re = \frac{\overline{u'}\rho_0 D_h}{\mu_0} = \frac{\overline{u}\upsilon_0 X_P \rho_0 D_h}{\mu_0} \tag{3.15}$$

ή

$$Re = \overline{u}\frac{\upsilon_0}{\mu_0}\frac{D_h(P_2 - P_1)}{P_0 L} D_h \rho_0. \tag{3.16}$$

Αντικαθιστώντας όπου $\rho_0 = 2P_0/\upsilon_0^2$, έχουμε

$$Re = 2\overline{u}\frac{D_h P_0}{\mu_0 \upsilon_0}\frac{D_h}{L}\frac{(P_2 - P_1)}{P_0}. \tag{3.17}$$

ή

$$Re = 2\overline{u}\delta\frac{D_h}{L}\frac{(P_2 - P_1)}{P_0}. \tag{3.18}$$

Τέλος ο αριθμός Kn συνδέεται με τους αριθμούς Ma και Re ως

$$Kn = \sqrt{\frac{\gamma\pi}{2}}\frac{Ma}{Re}. \tag{3.19}$$

Από τις Εξ.(3.14) και (3.18) προκύπτει ότι για την περίπτωση όπου $D_h \ll L$ οι αριθμοί Ma και Re θα είναι μικροί ακόμα και για μεγάλες διαφορές πίεσης.

3.2.2 Ροή σε κυλινδρικό και δακτυλοειδή αγωγό

Στην περίπτωση ροής διαμέσου κυλινδρικού και δακτυλοειδούς αγωγού οι αντίστοιχες υδραυλικές διάμετροι ορίζονται ως $D_h = D$ και $2(R_2 - R_1)$ αντίστοιχα, όπου R_1 και R_2 οι ακτίνες του εσωτερικού και εξωτερικού κυλίνδρου. Η γραμμική κινητική εξίσωση BGK που περιγράφει τις συγκεκριμένες ροές είναι η

$$\zeta\left[\, cos\theta\frac{\partial\phi}{\partial r} - \frac{sin\theta}{r}\frac{\partial\phi}{\partial\theta}\right] + \delta\phi = \delta u - \frac{1}{2}, \tag{3.20}$$

όπου $\phi = \phi(r, \theta, \zeta)$ η συνάρτηση κατανομής, r η αδιάστατη ακτινική απόσταση, ζ το μέτρο της μοριακής ταχύτητας, ενώ θ είναι η πολική γωνία.

Η μακροσκοπική ταχύτητα προκύπτει από την μηδενική ροπή της συνάρτησης κατανομής ϕ ως

$$u = \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty}\phi\zeta e^{-\zeta^2} d\zeta d\theta. \tag{3.21}$$

Λαμβάνοντας υπόψη ότι $dA = 2\pi r dr$ από την Εξ.(3.8) προκύπτει ότι

$$M = 2\pi\rho\upsilon_0 X_P D_h^2 \int_0^{1/2} u r dr, \tag{3.22}$$

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

ενώ από την Εξ.(3.8) η αδιάστατη παροχή G δίνεται από την σχέση

$$G = \frac{M\upsilon_0}{A'P_0X_P} = 16\int_0^{1/2} urdr. \tag{3.23}$$

Όμοια, για την περίπτωση του δακτυλοειδούς αγωγού η ροή μάζας που διέρχεται από την διατομή του αγωγού για ασυμπίεστη ροή, ακολουθώντας την παραπάνω αδιαστατοποίηση, είναι αντίστοιχη της Εξ.(3.22) και δίνεται από την σχέση

$$M = 2\pi\rho\upsilon_0X_PD_h^2\int_{r_2}^{r_1} urdr, \tag{3.24}$$

όπου $r_1 = R_1/D_h$ και $r_2 = R_2/D_h$. Η αδιάστατη παροχή G δίνεται από την σχέση

$$G = \frac{4}{r_2^2 - r_1^2}\int_{r_1}^{r_2} urdr. \tag{3.25}$$

Επιλύοντας αριθμητικά την Εξ.(3.20), συνοδευόμενη από τις οριακές συνθήκες (3.6), υπολογίζεται η κατανομή της αδιάστατης ταχύτητας u καθώς και η αδιάστατη παροχή G από τις αντίστοιχες εξισώσεις Εξ.(3.23) και (3.25). Επίσης, τονίζεται ότι η αδιάστατη παροχή G εξαρτάται μόνο από την παράμετρο αραιοποίησης δ.

3.2.3 Ροή σε ορθογώνιο αγωγό

Έστω ροή αερίου σε ορθογώνιο αγωγό ύψους H και πλάτους W με $-W/2 \leq x' \leq W/2$ και $-H/2 \leq y' \leq H/2$. Ο λόγος των πλευρών H/W του καναλιού μπορεί να πάρει τιμές από 1 (αντιστοιχεί σε τετραγωνικό αγωγό) έως 0 (το πρόβλημα εκφυλίζεται σε μονοδιάστατη ροή). Το εμβαδόν και η περίμετρος του αγωγού ορίζονται ως $A' = H \times W$ και Γ' =$2(H+W)$ αντίστοιχα. Η υδραυλική διάμετρος D_h του αγωγού ορίζεται ως,

$$D_h = 2\frac{W \times H}{W + H}. \tag{3.26}$$

Στον Πίνακα 3.5 παρουσιάζονται τα διαστατά και αδιάστατα γεωμετρικά χαρακτηριστικά για όλους τους αγωγούς. Η γραμμική εξίσωση BGK που περιγράφει το συγκεκριμένο πρόβλημα είναι:

$$\zeta\left[\, cos\theta\frac{\partial\phi}{\partial x} + \sin\theta\frac{\partial\phi}{\partial y}\right] + \delta\phi = \delta u - \frac{1}{2}, \tag{3.27}$$

όπου $\phi = \phi(x, y, \theta, \zeta)$ η συνάρτηση κατανομής, ζ το μέτρο της μοριακής ταχύτητας, ενώ θ είναι η πολική γωνία. Η μακροσκοπική ταχύτητα u δίνεται από τη σχέση

$$u\,(x, y) = \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty} \phi\,(x, y, \zeta, \theta)\,\zeta e^{-\zeta^2} d\zeta d\theta \tag{3.28}$$

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Ακολουθώντας την παραπάνω διαδικασία αδιαστατοποίησης η ροή μάζας που διέρχεται από την διατομή του αγωγού για ασυμπίεστη ροή είναι

$$M = \rho \int_{-W/2}^{W/2} \int_{-H/2}^{H/2} u'(x', y') dy' dx' = \rho \upsilon_0 X_P D_h^2 \int_{-W/(2D_h)}^{W/(2D_h)} \int_{-H/(2D_h)}^{H/(2D_h)} u(x, y) dy dx, \quad (3.29)$$

ενώ η αδιάστατη παροχή G δίνεται από την σχέση

$$G = \frac{M \upsilon_0}{A' P_0 X_P} = \frac{8H/W}{\left(1 + H/W\right)^2} \int_{-W/(2D_h)}^{W/(2D_h)} \int_{-H/(2D_h)}^{H/(2D_h)} u(x, y) dy dx, \quad (3.30)$$

Κατά την διαδικασία διαστατοποίησης και υπολογισμού της ροής μάζας M χρησιμοποιείται η Εξ.(3.11).

3.2.4 Ροή σε τριγωνικό και τραπεζοειδή αγωγό

Θεωρείται αγωγός, του οποίου η διατομή μπορεί να είναι είτε ισόπλευρη τριγωνική με πλευρά α, είτε ισοσκελής τραπεζοειδής με βάση μεγάλη B, βάση μικρή b, ύψος h και γωνία θ. Η υδραυλική διάμετρος του τριγωνικού αγωγού ορίζεται ως (βλέπε Πίνακα 3.5)

$$D_h = \frac{\sqrt{3}}{3} \alpha, \quad (3.31)$$

ενώ για την περίπτωση του τραπεζοειδούς αγωγού ορίζεται ως

$$D_h = 1 \Big/ \left[\frac{1}{2h} + \frac{1}{(B + b) \sin \theta} \right]. \quad (3.32)$$

Η γραμμική κινητική εξίσωση BGK που περιγράφει τα συγκεκριμένα προβλήματα είναι η

$$\zeta \frac{\partial \phi}{\partial s} + \delta \phi = \delta u - \frac{1}{2}, \quad (3.33)$$

όπου s είναι η ανεξάρτητη μεταβλητή κατά μήκος της εκάστοτε χαρακτηριστικής του προβλήματος. Η Εξ.(3.33) συνοδεύεται από τις οριακές συνθήκες (3.6). Η μακροσκοπική ταχύτητα u δίνεται από την Εξ.(3.28). Η ροή μάζας που διέρχεται από την διατομή του αγωγού για ασυμπίεστη ροή δίδεται από την Εξ.(3.7) και ακολουθώντας την παραπάνω αδιαστατοποίηση προκύπτει ότι η αδιάστατη παροχή G δίνεται από τη σχέση

$$G = \frac{M \upsilon_0}{A' P_0 X_P} = \frac{2}{A} \int \int_A u(x, y) dy dx. \quad (3.34)$$

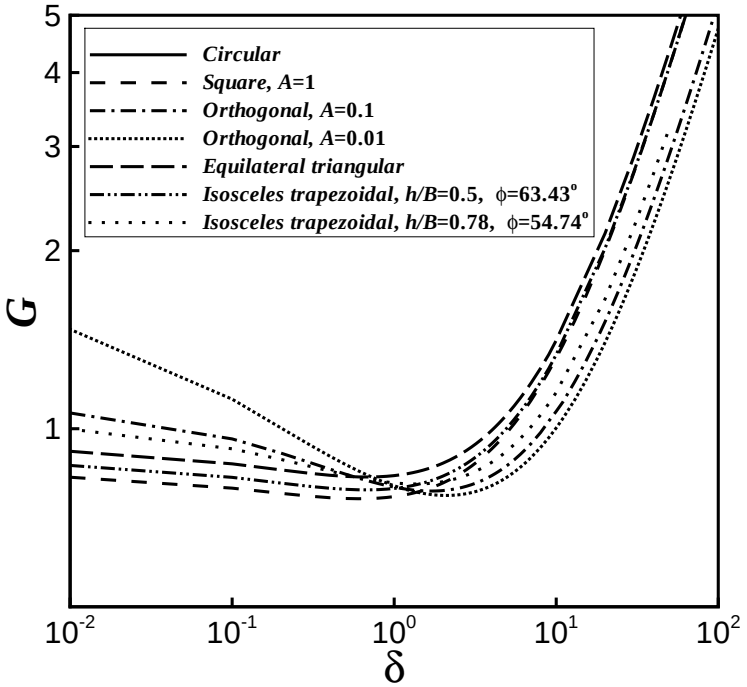
Όμοια με τις παραπάνω περιπτώσεις ροής, χρησιμοποιείται η Εξ.(3.11) για τον υπολογισμό της ροής μάζας M.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

3.2.5 Αδιάστατες παροχές σε αγωγούς ποικίλων διατομών

Στο Σχ. 3.1 απεικονίζεται η αδιάστατη παροχή G συναρτήσει της παραμέτρου δ για διάφορες γεωμετρίες αγωγών. Σε όλες τις γεωμετρίες, το χαρακτηριστικό μήκος είναι η υδραυλική διάμετρος D_h που επιτρέπει την άμεση σύγκριση των αποτελεσμάτων. Αντίθετα, στην περίπτωση που επιλέγονται ως χαρακτηριστικό μήκος γεωμετρικές διαστάσεις αγωγών (π.χ ακτίνα, ύψος ορθογωνίου αγωγού κλπ), τότε από τη σύγκριση των αποτελεσμάτων δεν είναι δυνατόν να προκύψουν αξιόλογα συμπεράσματα. Τα αναλυτικά αποτελέσματα της παροχής G δίνονται στους Πίνακες 3.6 - 3.9 συναρτήσει της παραμέτρου αραιοποίησης δ.

Παρατηρώντας το Σχ. 3.1 διαπιστώνεται ότι η αδιάστατη παροχή G παρουσιάζει την ίδια ποιοτική συμπεριφορά για όλους τους αγωγούς, εμφανίζοντας μια περιοχή όπου η παροχή G είναι σχεδόν σταθερή. Κοντά στην περιοχή όπου $\delta \simeq 1$ εμφανίζεται το ελάχιστο Kn και μάλιστα η περίπτωση του ορθογωνίου αγωγού με λόγο πλευρών $A = H/W = 0.1$ παρουσιάζει το πιο απότομο ελάχιστο. Τονίζεται ότι το ελάχιστο Kn εμφανίζεται σε διαφορετική θέση για κάθε αγωγό. Καθώς προσεγγίζεται το υδροδυναμικό όριο ($\delta \to \infty$) παρατηρείται, ότι η αδιάστατη παροχή G γίνεται ανάλογη της παραμέτρου αραιοποίησης δ.



Σχήμα 3.1: Αδιάστατη παροχή για αγωγούς ποικίλων διατομών.

Η εξάρτηση της αδιάστατης παροχής G από τον συντελεστή διαχυτικής ανάκλασης α παρουσιάζεται στους Πίνακες 3.6 και 3.7 που αντιστοιχούν στις περιπτώσεις κυλινδρικού και ορθογωνίου αγωγού με α=1, 0.85 και 0.7. Παρατηρείται ότι καθώς ο συντελεστής διαχυτικής ανάκλασης α μειώνεται (μείωση τραχύτητας των τοιχωμάτων αγωγού), η αδιάστατη παροχή G επίσης μειώνεται. Το γεγονός αυτό δικαιολογείται, διότι αυξάνεται ο αριθμός των

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

κατοπτρικών συγκρούσεων μεταξύ μορίων και τοιχωμάτων του αγωγού με αποτέλεσμα ο συντελεστής τριβής στο τοίχωμα να μειώνεται. Επίσης, παρατηρείται ότι η επίδραση του α στην αδιάστατη παροχή G είναι κυρίαρχη στην ελεύθερη μοριακή περιοχή και μειώνεται σταδιακά καθώς το δ αυξάνει, ενώ στην υδροδυναμική περιοχή εξαλείφεται η συγκεκριμένη επίδραση. Η συμπεριφορά αυτή είναι αντιπροσωπευτική για όλους τους αγωγούς.

3.3 Επέκταση της μεθοδολογίας σε μεγάλες βαθμίδες πίεσης

Σε προβλήματα ροών εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας, διαμέσου κλειστών αγωγών, οι περιοχές ροής που πιθανόν να παρουσιασθούν τοπικά στο εσωτερικό του αγωγού μπορεί να καλύψουν όλο το εύρος του αριθμού Kn από την ελεύθερη μοριακή περιοχή έως το υδροδυναμικό όριο. Οι περιπτώσεις αυτές εμφανίζονται όταν η διαφορά πίεσης είναι αρκετά μεγάλη [117]. Η γραμμική κινητική θεωρία εξακολουθεί να εφαρμόζεται στην περίπτωση αυτή. Για την χρήση της γραμμικής κινητικής θεωρίας βασική προϋπόθεση είναι η αδιάστατη βαθμίδα πίεσης να είναι $X_P \ll 1$, το οποίο διασφαλίζεται όταν $D_h/L \ll 1$, ανεξαρτήτως του μεγέθους του dP/dz'. Αυτό ισχύει διότι από την κλίση πίεσης έχουμε

$$X_P = \frac{D_h}{P_0}\frac{dP}{dz'} = \frac{D_h}{P_0}\frac{P_2 - P_1}{L} = \frac{2D_h}{L}\frac{(P_2 - P_1)}{P_2 + P_1}, \tag{3.35}$$

όπου ο όρος $\frac{(P_2-P_1)}{P_2+P_1}$ για μεγάλες βαθμίδες πίεσης είναι τάξης μονάδας. Έτσι ισχύει ότι

$$X_P = \frac{2D_h}{L}\frac{(P_2 - P_1)}{P_2 + P_1} \ll 1. \tag{3.36}$$

Η μεθοδολογία υπολογισμού της παροχής G για μεγάλες βαθμίδες πίεσης βασίζεται στις τοπικές συνθήκες του αγωγού. Συγκεκριμένα η τοπική παροχής G^* είναι συνάρτηση της τοπικής πίεσης ή επακόλουθα της τοπικής παραμέτρου αραιοποίησης δ σε ένα τυχαίο σημείο z^* του αγωγού, όπου $0 \leq z^* \leq L$. Στην περίπτωση ενός οποιουδήποτε αγωγού, στην θέση z^* ισχύει ότι

$$G^* = \frac{M\upsilon_0}{A'P\left(z^*\right)X_P}. \tag{3.37}$$

Η Εξ.(3.37) μπορεί να γραφεί στην μορφή

$$M = G^*\frac{A'P\left(z^*\right)}{\upsilon_0}\frac{D_h}{P\left(z^*\right)}\frac{dP}{dz'}. \tag{3.38}$$

Εάν αντικαταστήσουμε το αριστερό μέλος της Εξ.(3.38) με την Εξ.(3.11) τότε προκύπτει ότι

$$G\frac{A'D_h(P_2 - P_1)}{L\upsilon_0} = G^*\frac{A'P\left(z^*\right)}{\upsilon_0}\frac{D_h}{P\left(z^*\right)}\frac{dP}{dz'} \tag{3.39}$$

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

ή

$$G = G^* \frac{L}{P_2 - P_1} \frac{dP}{dz'} \tag{3.40}$$

ή

$$G dz' = \frac{L}{P_2 - P_1} G^* dP \tag{3.41}$$

Ολοκληρώνοντας το αριστερό μέλος της Εξ.(3.41) ως προς την διεύθυνση της ροής z' και το δεξιό μέλος στο διάστημα P_1 έως P_2 προκύπτει ότι

$$G = \frac{1}{P_1 - P_2} \int_{P_1}^{P_2} G^* (\delta) \, dP \tag{3.42}$$

Θεωρώντας ότι η παράμετρος αραιοποίησης δ είναι ανάλογη της πίεσης, λόγω του ορισμού

$$\delta = \frac{P_0 D_h}{\mu \upsilon_0}, \tag{3.43}$$

προκύπτει ότι

$$G = \frac{1}{\delta_1 - \delta_2} \int_{\delta_1}^{\delta_2} G^* (\delta) \, d\delta. \tag{3.44}$$

Η Εξ.(3.44) ισχύει για οποιαδήποτε πτώση πίεσης που εφαρμόζεται στον αγωγό.

Αντί της Εξ.(3.44) είναι δυνατόν να χρησιμοποιηθεί η ακόλουθη πιο απλή σχέση

$$G = G^* \left(\frac{\delta_1 + \delta_2}{2} \right), \tag{3.45}$$

η οποία στην περίπτωση του ορθογώνιου αγωγού παύει να δίνει αξιόπιστα αποτελέσματα για πολύ μικρές τιμές του λόγου H/W και για τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ κοντά στην μονάδα. Αυτό εξηγείται από το γεγονός, ότι για μικρές τιμές του λόγου H/W η καμπύλη που παρουσιάζει το ελάχιστο Kn είναι πιο απότομη. Συγκρίνοντας τις αδιάστατες παροχές G στην περίπτωση H/W=1 τότε στο σημείο που εμφανίζεται το ελάχιστο Kn, η παροχή G διαφέρει κατά 10% από την αντίστοιχη στην ελεύθερη μοριακή περιοχή, ενώ στην περίπτωση όπου H/W=0.01 η εν λόγω διαφορά πλησιάζει το 100%. Για τον λόγο αυτό η Εξ.(3.45) αποτυγχάνει όταν το δ_2 είναι κοντά στην μονάδα (κοντά στο ελάχιστο Kn) και το δ_1 είναι πολύ μικρό (κοντά στην ελεύθερη μοριακή περιοχή). Το παραπάνω συμπέρασμα ισχύει για οποιαδήποτε γεωμετρία του αγωγού.

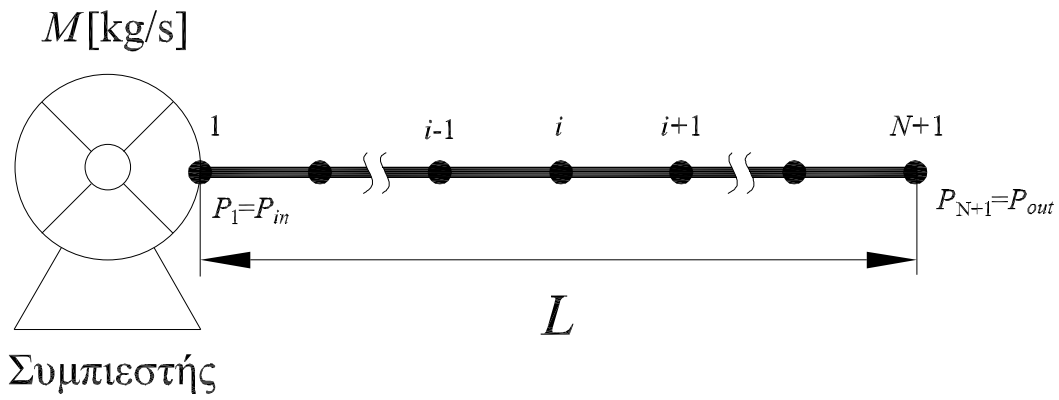
Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

3.4 Υπολογισμός πτώσης πίεσης σε αγωγό

Η μεθοδολογία υπολογισμού της ροής μάζας σε αγωγούς ποικίλων διατομών για όλο το εύρος του αριθμού Knudsen είναι δυνατόν να επεκταθεί και στον υπολογισμό της πτώσης πίεσης κατά μήκος του αγωγού, εφόσον γνωρίζουμε την παροχή.

Κατά την μελέτη δικτύων σωληνώσεων δύο περιπτώσεις προβλημάτων είναι δυνατόν να προκύψουν. Συγκεκριμένα, η πρώτη αφορά το πρόβλημα της εύρεσης της ροής μάζας αερίου σε έναν αγωγό για δεδομένη πτώση πίεσης ανάντη και κατάντη του αγωγού, ενώ το δεύτερο πρόβλημα είναι η εύρεση της πίεσης εξόδου του αγωγού γνωρίζοντας την πίεση εισόδου και την ροή μάζας που διέρχεται από αυτόν. Η δεύτερη περίπτωση θα αποτελέσει και το αντικείμενο μελέτης της παρούσας παραγράφου.

Έστω αγωγός μήκους L, όπου στην είσοδο του συνδέεται συμπιεστής δεδομένης πίεσης κατάθλιψης και ροής μαζας M. Ο κύριος στόχος είναι η εύρεση της κατανομής πίεσης κατά μήκος του αγωγού και της πίεσης εξόδου (P_{out}), έχοντας ως δεδομένα την πίεση στην είσοδο του αγωγού (P_{in}) (συμπίπτει με την πίεσης κατάθλιψης) καθώς και την ροή μάζας M που διέρχεται από αυτόν. Η μεθοδολογία επίλυσης του εν λόγω προβλήματος περιλαμβάνει την



Σχήμα 3.2: Σχεδιάγραμμα αγωγού, μήκους L.

αριθμητική επίλυση μια συνήθους διαφορικής εξίσωσης πρώτου βαθμού. Συγκεκριμένα, όπως φαίνεται και στο Σχ. 3.2, ο αγωγός διακριτοποιείται σε N διαστήματα $\Delta z'$, ενώ οι αντίστοιχοι κόμβοι είναι $i = 1, ..., N + 1$. Τότε η πίεση στην είσοδο και την έξοδο του αγωγού είναι αντίστοιχα $P_1 = P_{in}$ και $P_{N+1} = P_{out}$.

Από τον ορισμό της αδιάστατης παροχής G προκύπτει από την Εξ.(3.38) ότι

$$G^*(\delta_i) = \frac{M\upsilon_0}{A' D_h \left.\frac{dP}{dz'}\right|_i} \tag{3.46}$$

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

ή

$$\left.\frac{dP}{dz'}\right|_i = \frac{M\upsilon_0}{A'D_hG^*(\delta_i)} \tag{3.47}$$

Στην συνήθη διαφορική Εξ.(3.47) βασικός άγνωστος είναι το αριστερό μέλος της εξίσωσης. Η επίλυσή της πραγματοποιείται εφαρμόζοντας την μέθοδο Euler. Σύμφωνα με αυτή η τιμή της πίεσης στον κόμβο i θα εξαρτάται από την κλίση πίεσης στον κόμβο $i-1$ με $i = 2, ..., N+1$. Η διακριτοποιημένη μορφή της Εξ.(3.47) με βάση τον αλγόριθμο Euler είναι

$$P_i = P_{i-1} + \Delta z' \frac{M\upsilon_0}{A'D_hG^*(\delta_{i-1})}. \tag{3.48}$$

Επομένως, ξεκινώντας από τον κόμβο $i = 2$ εφαρμόζουμε την Εξ.(3.48) για $i = 2, 3, ..., N$ και βρίσκουμε την πίεση στους αντίστοιχους κόμβους μέχρι τον κόμβο $N+1$.

Εναλλακτική μεθοδολογία επίλυσης, η οποία παρουσιάζει μεγαλύτερη ακρίβεια σε σχέση με την μέθοδο Euler, είναι η χρήση της μεθόδου Rugne-Kutta τέταρτης τάξης. Τονίζεται, ότι η τελευταία αριθμητική μέθοδος επιτρέπει την χρήση αραιού πλέγματος για την επίτευξη αποτελεσμάτων της ίδιας ακρίβειας με τα αντίστοιχα της μεθόδου Euler σε πιο πυκνό πλέγμα.

Για τον έλεγχο των αριθμητικών αποτελεσμάτων που προκύπτουν χρησιμοποιήθηκαν δεδομένα συγκεκριμένης πτώση πίεσης ΔP που εφαρμόζεται στα άκρα του αγωγού, για την οποία είναι γνωστή η ροή μαζας M που διέρχεται από αυτόν. Γνωρίζοντας την συγκεκριμένη πληροφορία πραγματοποιήσαμε την αντίστροφη διαδικασία, όπου κάναμε χρήση της πίεσης εισόδου και της ροής μάζας M του αγωγού ώστε να ελεγχθεί εάν η προκύπτουσα πίεση εξόδου συμπίπτει με την δεδομένη αρχική πίεση εξόδου.

Εφαρμόζοντας την παραπάνω μεθοδολογία, διαπιστώθηκε ότι κατά τον υπολογισμό της πίεσης εξόδου, σημαντικό ρόλο παίζει η ακρίβεια υπολογισμού της ροής μάζας M. Παρατηρήθηκε, ότι μικρές αποκλίσεις της ροής μάζας M οδηγούν σε αποκλίσεις τάξης μεγέθους για την πίεση εξόδου. Για την αντιμετώπιση του συγκεκριμένου προβλήματος, χρησιμοποιήθηκε ο αναλυτικός υπολογισμός της αδιάστατης παροχής G κάνοντας χρήση της Εξ.(3.44). Αντίθετα, η απλή σχέση υπολογισμού του G από την Εξ.(3.45) δεν δίνει τα αναμενόμενα αποτελέσματα σχετικά με την υπολογιζόμενη πίεση εξόδου.

Στο Σχ. 3.3 παρουσιάζονται οι κατανομές πίεσης κατά μήκος των αγωγών για τέσσερεις διαφορετικές γεωμετρίες, καθώς και τέσσερα διαφορετικά ζεύγη της επιβαλλόμενης διαφοράς πίεσης $\Delta P = P_1 - P_2$ και της πίεσης αναφοράς $P_0 = (P_1 + P_2)/2$. Κάθε μια από τις τέσσερεις περιπτώσεις αντιστοιχεί και σε μια διαφορετική περιοχή ροής. Για όλες τις περιπτώσεις που εξετάστηκαν, η προκύπτουσα πίεση P_2 στην έξοδο του αγωγού υπολογίστηκε με αρκετά καλή ακρίβεια, ώστε να επαληθεύεται η αντίστοιχη ροή μάζας M που έχουμε θέσει εξ' αρχής. Η διακριτοποίηση του αγωγού πραγματοποιήθηκε χρησιμοποιώντας 1000 χωρικούς κόμβους με $0 < x < L$.

Από τα αποτελέσματα παρατηρείται ότι όταν η ροή ανήκει στην ελεύθερη μοριακή περιοχή ($\delta = 0.05$) καθώς και στο ενδιάμεσο της μεταβατικής περιοχής ($\delta = 0.91$), η κατανομή πίεσης

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

παρουσιάζει γραμμική συμπεριφορά. Αντίθετα, στις περιπτώσεις ροής στην περιοχή ολίσθησης ($\delta = 10.5$) και κοντά στο υδροδυναμικό όριο ($\delta = 68.4$) οι κατανομές πίεσης παρουσιάζουν παραβολική συμπεριφορά.

3.5 Συγκρίσεις ροών μάζας σε αγωγούς διαφόρων διατομών

Για διαφορετικές διατομές αγωγών, παρουσιάζονται διαστατά αποτελέσματα παροχής μάζας M σε kg/s, τα οποία βασίζονται στα αντίστοιχα κινητικά αποτελέσματα, συναρτήσει της διαφοράς πίεσης που εφαρμόζεται στην είσοδο και την έξοδο του αγωγού. Συγκεκριμένα, θα περιγραφεί η ροή ενός καθορισμένου αερίου, το οποίο βρίσκεται σε δεδομένες συνθήκες, όταν αυτό διαρρέει αγωγούς ποικίλων γεωμετριών. Οι γεωμετρίες που θα εξετασθούν αφορούν τον κυλινδρικό, τετραγωνικό, ισόπλευρο τριγωνικό και ισοσκελή τραπεζοειδή αγωγό (με γωνία $\theta = 63.43^o$). Επίσης, θα πραγματοποιηθεί σύγκριση των ροών μάζας για τους παραπάνω αγωγούς στην περίπτωση όπου έχουν το ίδιο εμβαδόν, περίμετρο και υδραυλική διάμετρο.

Θεωρείται αέριο άζωτο, το οποίο βρίσκεται σε μέση θερμοκρασία $T = 293\ K$. Η διαφορά πίεσης ΔP στην είσοδο και έξοδο όλων των αγωγών θεωρείται σταθερή και κυμαίνεται από $0.1 \leq \Delta P \leq 70\ Pa$. Τονίζεται, ότι αν και τα κινητικά αποτελέσματα βασίζονται στην παραδοχή μονατομικού αερίου, εντούτοις έχει διαπιστωθεί ότι είναι δυνατόν να προσομοιωθούν και δυατομικά αέρια, όπως το άζωτο, με ικανοποιητική ακρίβεια αποτελεσμάτων. Επίσης, σημειώνεται ότι καθώς αλλάζει η γεωμετρία του αγωγού, το εύρος της παραμέτρου αραιοποίησης για το δεδομένο εύρος πίεσης ΔP δεν παραμένει σταθερό. Το γεγονός αυτό οφείλεται στην μεταβολή της υδραυλικής διαμέτρου, η οποία και αποτελεί το χαρακτηριστικό μήκος της ροής. Τα κατασκευαστικά χαρακτηριστικά των εν λόγω αγωγών προκύπτουν εάν αρχικά θεωρηθεί κυλινδρικός αγωγός διαμέτρου $D = 1.6 \times 10^{-2}\ m$. Η μεταβολή των γεωμετρικών χαρακτηριστικών των αγωγών για τις περιπτώσεις ίδιου εμβαδού, περιμέτρου και υδραυλικής διαμέτρου παρουσιάζεται στους Πίνακες 3.1, 3.2 και 3.3. Για όλους τους αγωγούς θεωρήθηκε ότι δεν έχουν υποστεί ιδιαίτερη κατεργασία λείανσης και ως εκ τούτου οι οριακές συνθήκες αερίου-τοιχώματος επιλέχθηκαν να είναι αυτές της πλήρους διάχυσης ($\alpha = 1$).

Πίνακας 3.1: Γεωμετρία αγωγών με ίδιο εμβαδόν $A' = 2.0 \times 10^{-4}\ m^2$.

Αγωγός	$\Gamma'\ [m]$	$D_h\ [m]$	Γεωμετρία αγωγού $[m]$
Κυλινδρικός	5.0(-2)	1.6(-2)	$D = 1.6(-2)$
Τετραγωνικός	5.6(-2)	1.4(-2)	$\alpha = 1.41(-2)$
Ισόπλευρος τριγωνικός	6.4(-2)	1.2(-2)	$l = 2.15(-2)$
Ισοσκελής τραπεζοειδής	6.0(-2)	1.3(-2)	$B = 2.31(-2)$, $h = 1.15(-2)$

Στην περίπτωση όπου όλοι οι αγωγοί έχουν το ίδιο εμβαδόν, η παροχή μάζας M σε σχέση με την επιβαλλόμενη διαφορά πίεσης ΔP απεικονίζεται στο Σχ. 3.4 (πάνω). Το εμβαδόν για όλους τους αγωγούς ισούται με $A = 2 \times 10^{-4}\ m^2$, ενώ η περίμετρος Γ' κα-

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Πίνακας 3.2: Γεωμετρία αγωγών με ίδια περίμετρο $\Gamma' = 5.0 \times 10^{-2}\ m$.

Αγωγός	A' $[m^2]$	D_h $[m]$	Γεωμετρία αγωγού $[m]$
Κυλινδρικός	2.0(-4)	1.6(-2)	$D = 1.6(-2)$
Τετραγωνικός	1.6(-4)	1.2(-2)	$\alpha = 1.25(-2)$
Ισόπλευρος τριγωνικός	1.2(-4)	9.6(-3)	$l = 1.67(-2)$
Ισοσκελής τραπεζοειδής	1.4(-4)	1.1(-2)	$B = 1.91(-2)$, $h = 9.57(-3)$

Πίνακας 3.3: Γεωμετρία αγωγών με ίδια υδραυλική διάμετρο $D_h = 1.6 \times 10^{-2}\ m$.

Αγωγός	A' $[m^2]$	Γ' $[m]$	Γεωμετρία αγωγού $[m]$
Κυλινδρικός	2.0(-4)	5.0(-2)	$D = 1.6(-2)$
Τετραγωνικός	2.5(-4)	6.4(-2)	$\alpha = 1.6(-2)$
Ισόπλευρος τριγωνικός	3.3(-4)	8.3(-2)	$l = 2.76(-2)$
Ισοσκελής τραπεζοειδής	2.9(-4)	7.3(-2)	$B = 2.78(-2)$, $h = 1.39(-2)$

τατάσσεται ως $\Gamma'_{tube} < \Gamma'_{square} < \Gamma'_{trap} < \Gamma'_{triang}$. Αντίστοιχα η υδραυλική διάμετρος D_h κυμαίνεται ως $D_{h,triang} < D_{h,trap} < D_{h,square} < D_{h,tube}$. Το εύρος της παραμέτρου αραιοποίησης δ, το οποίο αντιστοιχεί στο παραπάνω εύρος πίεσης ΔP για τον κυλινδρικό, τετραγωνικό, ισόπλευρο τριγωνικό και ισοσκελή τραπεζοειδή αγωγό είναι $0.1 < \delta < 83.2$, $0.097 < \delta < 73.7$, $0.08 < \delta < 65$ και $0.09 < \delta < 69$ αντίστοιχα. Από το γράφημα παρατηρείται ότι κάθως αυξάνεται η διαφορά πίεσης ΔP αυξάνεται και η ροή μάζας M, ενώ για όλο το εύρος της διαφοράς πίεσης ΔP η παροχή μάζας είναι της ίδιας τάξης μεγέθους σε όλους τους αγωγούς. Μάλιστα με αύξουσα σειρά η ροή μάζας σε κάθε αγωγό κατατάσσεται ως $M_{triang} < M_{trap} < M_{square} < M_{tube}$, ενώ η αδιάστατη παροχή G κυμαίνεται ως $G_{trap} < G_{triang} < G_{square} < G_{tube}$. Στην συγκεκριμένη περίπτωση αγωγών η ροή μάζας είναι ανάλογη του όρου $M \sim G \times D_h$. Εξετάζοντας την παράμετρο αραιοποίησης δ είναι προφανές ότι η ροή καλύπτει όλο το εύρος του αριθμού Kn, από την ελεύθερη μοριακή περιοχή έως το υδροδυναμικό όριο, καθώς μεταβάλλεται η γεωμετρία του αγωγού αλλά και η επιβαλλόμενη διαφορά πίεσης ΔP.

Όταν οι αγωγοί έχουν την ίδια περίμετρο $\Gamma' = 5 \times 10^{-2}\ m$, τότε η ροή μάζας συναρτήσει της διαφοράς πίεσης ΔP απεικονίζεται στο Σχ. 3.4 (μέση). Στην περίπτωση αυτή ισχύει για το εμβαδόν και την υδραυλική διάμετρο ότι $A'_{triang} < A'_{trap} < A'_{square} < A'_{tube}$ και $D_{h,triang} < D_{h,trap} < D_{h,square} < D_{h,tube}$ αντίστοιχα. Η ροή μάζας κυμαίνεται ως $M_{triang} < M_{trap} < M_{square} < M_{tube}$, ενώ η παράμετρος αραιοποίησης ομοίως για τον κυλινδρικό, τετραγωνικό, ισόπλευρο τριγωνικό και ισοσκελή τραπεζοειδή αγωγό είναι $0.11 < \delta < 83.2$, $0.08 < \delta < 65.3$, $0.06 < \delta < 50.3$ και $0.07 < \delta < 57.2$ αντίστοιχα.

Τέλος, όταν οι αγωγοί έχουν ίδια υδραυλική διάμετρο $D_h = 1.6 \times 10^{-2}\ m$, δηλαδή παρουσιάζουν την ίδια μέση διατμητική τάση, για το εμβαδόν A' και την περίμετρο Γ' προκύπτει ότι $A'_{triang} < A'_{trap} < A'_{square} < A'_{tube}$ και $\Gamma'_{trap} < \Gamma'_{triang} < \Gamma'_{square} < \Gamma'_{tube}$ αντίστοιχα. Η

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

ροή μάζας M συναρτήσει της διαφοράς πίεσης ΔP απεικονίζεται στο Σχ. 3.4 (κάτω) και ισχύει ότι $M_{tube} < M_{square} < M_{trap} < M_{triang}$. Τονίζεται, ότι στην συγκεκριμένη περίπτωση η ροή μάζας είναι ανάλογη του όρου $M \sim G \times A'$. Το εύρος της παραμέτρου αραιοποίησης δ στην συγκεκριμένη περίπτωση είναι σταθερό για όλους τους αγωγούς και κυμαίνεται ως $0.11 < \delta < 83.2$.

3.6 Συγκρίσεις ροών μάζας σε διαφορετικά αέρια

Γίνεται σύγκριση της ροής μάζας (kg/s) και της ογκομετρικής παροχής (m^3/s) για τέσσερα διαφορετικά αέρια, το άζωτο (N_2), το ήλιο (He), το αργό (Ar) και το ξένο (Xe), τα οποία ρέουν σε κυλινδρικό και τετραγωνικό αγωγό. Η επιλογή των αερίων έγινε ώστε οι αντίστοιχες μοριακές μάζες να διαφέρουν έως και δύο τάξεις μεγέθους. Στην δεύτερη στήλη του Πίνακα 3.4 παρατίθενται οι μοριακές μάζες για κάθε αέριο, στην τρίτη στήλη παρουσιάζονται οι ειδικές σταθερές, ενώ στην τέταρτη στήλη παρατίθεται η πλέον πιθανή ταχύτητα $\upsilon_0 = \sqrt{2R^*T_0}$ για θερμοκρασία $T_0 = 294.2\ K$. Το αέριο ξένο αποτελεί το βαρύτερο, ενώ το ήλιο το ελαφρύτερο από τα τέσσερα αέρια.

Για την πραγματοποίηση όλων των υπολογισμών, θεωρούμε ότι τα αέρια βρίσκονται σε θερμοκρασία $T_0 = 294.2\ K$, ενώ στους αγωγούς εφαρμόζεται το ίδιο εύρος διαφοράς πίεσης ΔP, όπως και στην προηγούμενη παράγραφο, με $0.1 \leq \Delta P \leq 70\ Pa$.

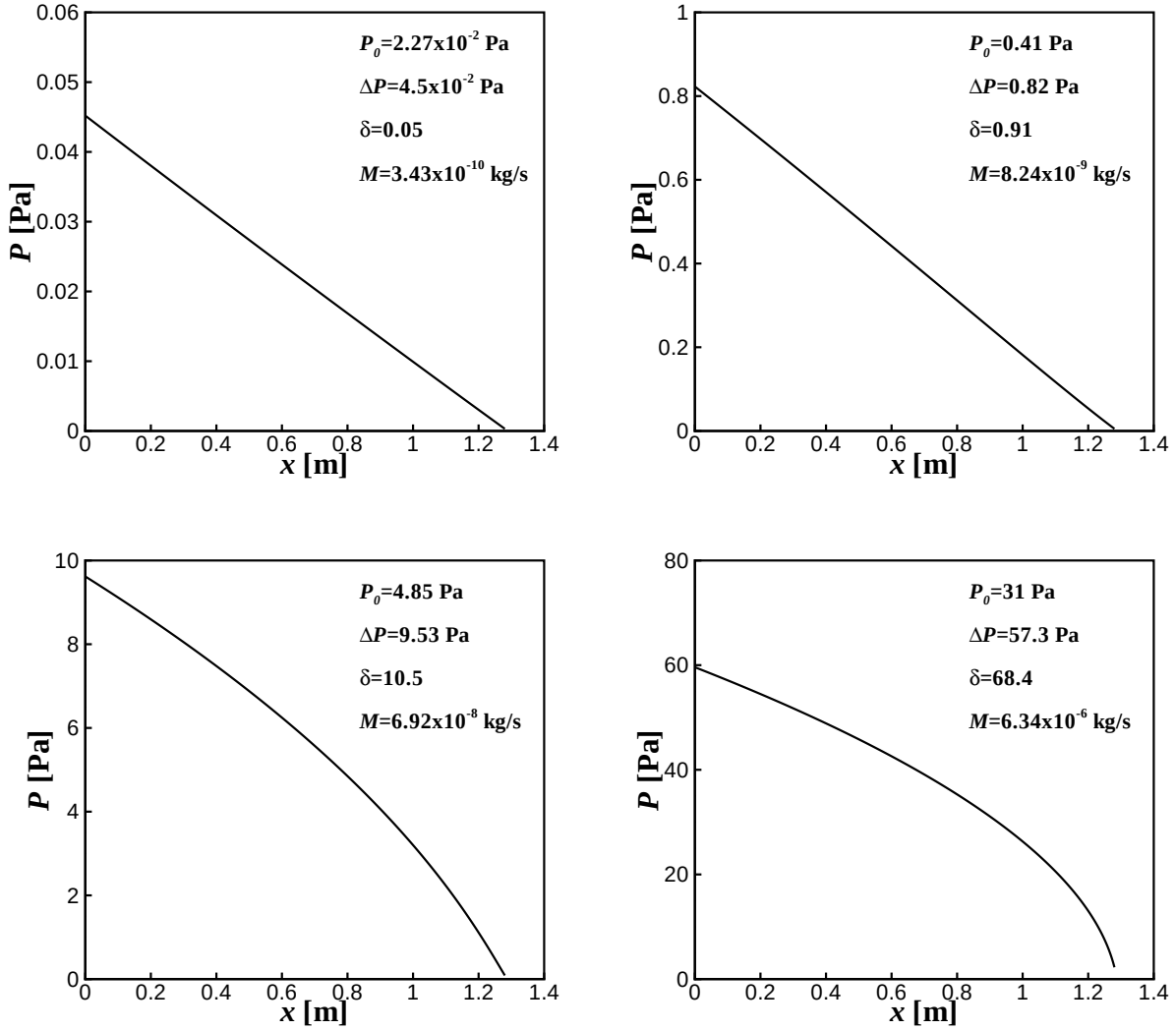
Η ροή μάζας M για τα τέσσερα αέρια στην περίπτωση του κυλινδρικού και του τετραγωνικού αγωγού απεικονίζονται στο Σχ. 3.5. Και στις δύο περιπτώσεις παρατηρείται ότι το βαρύ αέριο Xe παρουσιάζει την μεγαλύτερη ροή μάζας ενώ το ελαφρύτερο, το He την μικρότερη. Αντίθετα, η κατάσταση αντιστρέφεται (Σχ. 3.6) στην περίπτωση της ογκομετρικής παροχής ισχύει ότι $V = M/\rho_0$, όπου ρ_0 η πυκνότητα που αντιστοιχεί στις δεδομένες συνθήκες (P_0, T_0), όπου $P_0 = (P_1 + P_2)/2$ η μέση πίεση.

Γενικότερα, εάν θελήσουμε να συγκρίνουμε ποσοτικά τις ροές μάζας M για δύο διαφορετικά αέρια (1) και (2) στην ίδια διαφορά πίεσης και θερμοκρασία και για οποιαδήποτε γεωμετρία αγωγού προκύπτει ότι

$$\frac{M_1}{M_2} = \frac{G_1}{G_2}\sqrt{\frac{m_1}{m_2}} \tag{3.49}$$

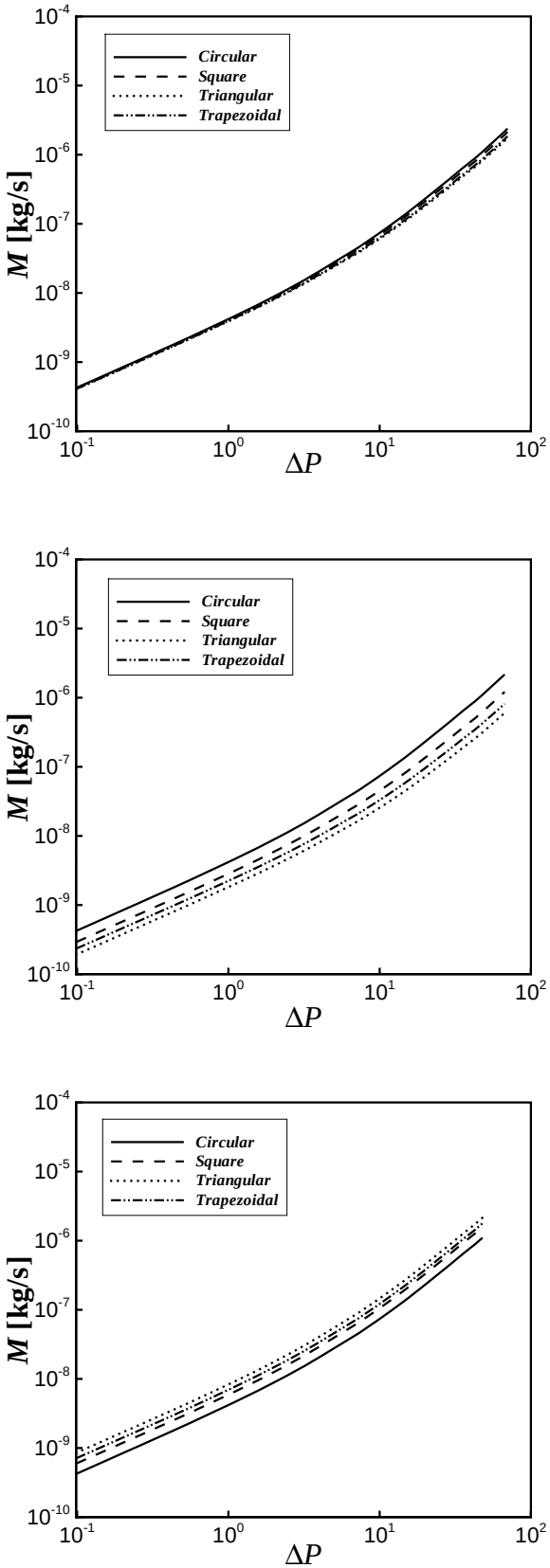
όπου G_1 και G_2 είναι οι αντίστοιχες αδιάστατες παροχές ενώ m_1 και m_2 οι αντίστοιχες μοριακές μάζες. Από την Εξ.(3.49) προκύπτει ότι ο λόγος των ροών μάζας είναι ανάλογος του λόγου των αδιάστατων παροχών και του λόγου των μοριακών μαζών.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



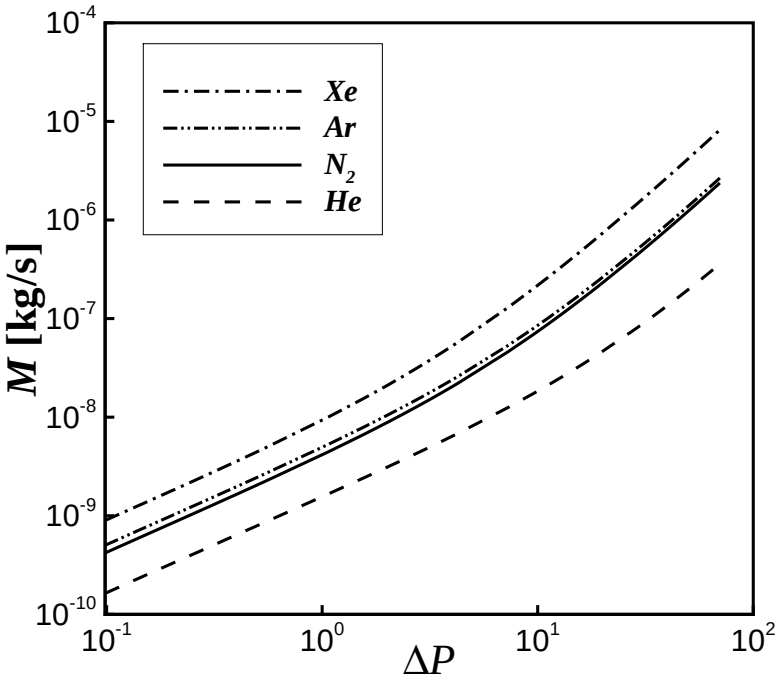
Σχήμα 3.3: Τυπικές κατανομές πίεσης κατά μήκος του αγωγού (επάνω αριστερά: ισοσκελής τραπεζοειδής, επάνω δεξιά: ισόπλευρος τριγωνικός, κάτω αριστερά: κυλινδρικός, κάτω δεξιά: τετραγωνικός).

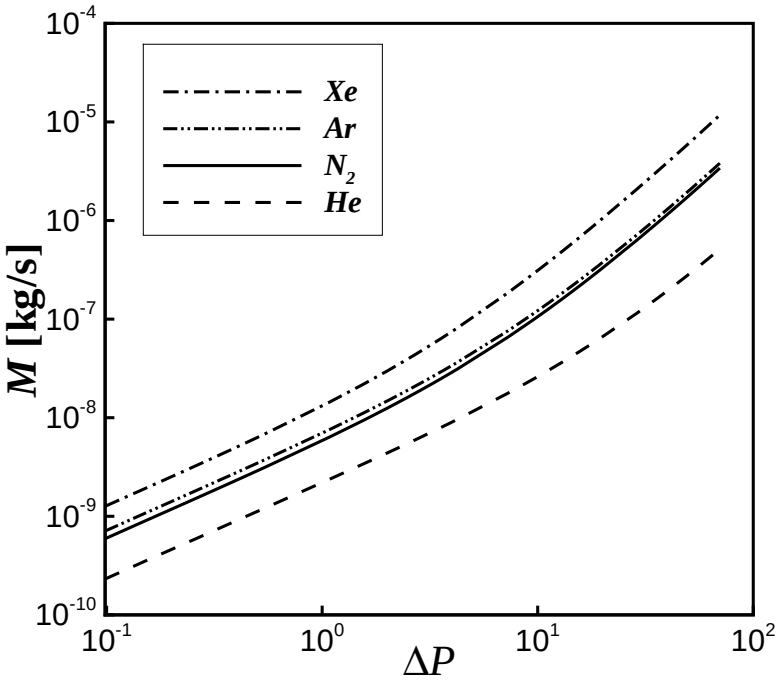
Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



Σχήμα 3.4: Ροή μάζας αερίου αζώτου σε αγωγούς με ίδιο εμβαδόν (πάνω), ίδια περίμετρο (μέση) και ίδια υδραυλική διάμετρο (κάτω).

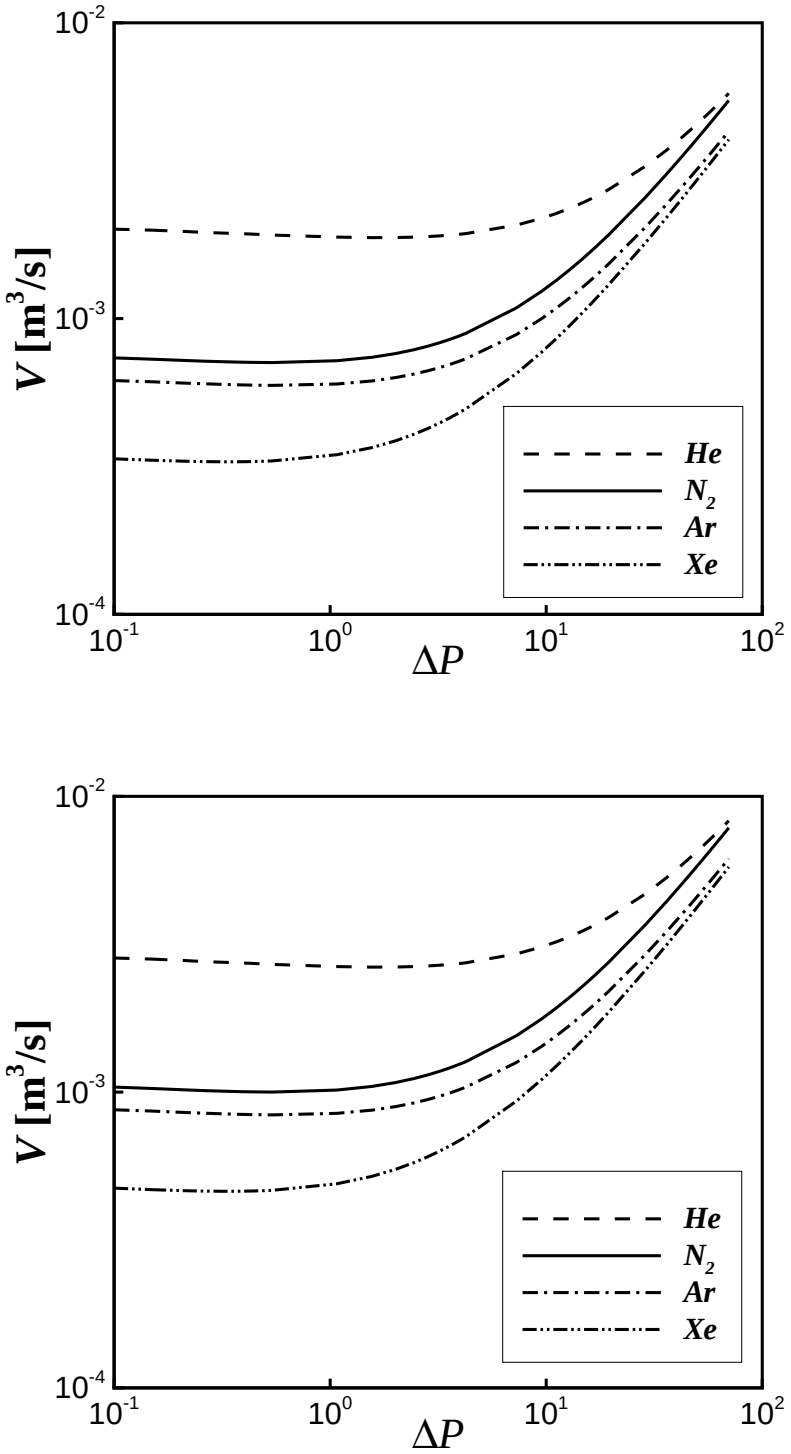
Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212





Σχήμα 3.5: Ροή μάζας διαφόρων αερίων σε κυλινδρικό αγωγό (πάνω) και τετραγωνικό αγωγό (κάτω).

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



Σχήμα 3.6: Ογκομετρική παροχή διαφόρων αερίων σε κυλινδρικό αγωγό (πάνω) και τετραγωνικό αγωγό (κάτω).

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Πίνακας 3.4: Ιδιότητες αερίων.

Αέριο	Μοριακή μάζα, $m \times 10^{-27}\ kg$	Σταθερά αερίου, R^*, $m^2/(s^2K)$	v_0, m/s
He	6.65	2078.6	1106
N_2	46.5	296.9	418
Ar	66.3	208	350
Xe	218	63.3	193

Πίνακας 3.5: Εκφράσεις των D_h, A', A, Γ', Γ για διάφορους αγωγούς

Διατομή	D_h	A'	$A = A'/D_h^2$	Γ'	Γ
Κυλινδρικός	D	$\frac{\pi D^2}{4}$	$\frac{\pi}{4}$	πD	π
Ορθογώνιος	$2\frac{W \times H}{W+H}$	$W \times H$	$\frac{1}{4}\frac{H}{W}\left(1+\frac{W}{H}\right)^2$	$2\left(W+H\right)$	$\frac{H}{W}\left(1+\frac{W}{H}\right)^2$
Ισόπλευρος τριγωνικός	$\frac{\alpha}{\sqrt{3}}$	$\frac{\sqrt{3}}{4}\alpha^2$	$\frac{3\sqrt{3}}{4}$	3α	$3\sqrt{3}$
Ισοσκελής τραπεζοειδής	$\frac{2(B+b)h}{B+b+\frac{2h}{\sin\theta}}$	$\frac{B+b}{2}h$	$\frac{1}{8}\frac{\left(1+\frac{b}{B}+\frac{h}{B}\frac{2}{\sin\theta}\right)^2}{\left(1+\frac{b}{B}\right)\frac{h}{B}}$	$B+b+\frac{2h}{\sin\theta}$	$\frac{1}{2}\frac{\left(1+\frac{b}{B}+\frac{h}{B}\frac{2}{\sin\theta}\right)^2}{\left(1+\frac{b}{B}\right)\frac{h}{B}}$

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Πίνακας 3.6: Αδιάστατη παροχή G σε σχέση με την παράμετρο αραιοποίησης δ για κυλινδρικό αγωγό με α=1, 0.85 και 0.7.

	G		
δ	$\alpha = 1$	$\alpha = 0.85$	$\alpha = 0.7$
10^{-3}	0.751	1.01	1.39
10^{-2}	0.744	0.999	1.36
0.1	0.715	0.941	1.25
0.3	0.695	0.896	1.18
0.5	0.689	0.879	1.14
1	0.693	0.870	1.12
1.5	0.709	0.879	1.12
2	0.729	0.896	1.13
3	0.777	0.941	1.17
4	0.829	0.992	1.22
5	0.884	1.05	1.28
6	0.940	1.10	1.33
7	0.997	1.16	1.39
8	1.06	1.22	1.45
9	1.11	1.28	1.51
10	1.17	1.34	1.57
11	1.23	1.40	1.63
13	1.35	1.52	1.75
15	1.48	1.64	1.87
20	1.78	1.95	2.18
30	2.40	2.56	2.80
40	3.02	3.19	3.42
50	3.64	3.81	4.04
100	6.76	6.93	7.16
200	13.0	13.2	13.4
500	31.7	31.9	32.1
1000	62.6	63.0	62.8

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Πίνακας 3.7: Αδιάστατη παροχή G σε σχέση με την παράμετρο αραιοποίησης δ για ορθογώνιους αγωγούς με α=1, 0.85 και 0.7.

	G								
	α=1			α=0.85			α=0.7		
	H/W			H/W			H/W		
δ	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1
10^{-3}	0.837	1.06	1.39	0.862	1.10	1.44	1.09	1.40	1.86
10^{-2}	0.828	1.05	1.36	0.852	1.08	1.41	1.06	1.36	1.79
0.1	0.793	0.987	1.27	0.813	1.01	1.30	0.961	1.20	1.54
0.3	0.769	0.944	1.19	0.783	0.963	1.22	0.877	1.08	1.37
0.5	0.762	0.929	1.17	0.773	0.944	1.19	0.838	1.03	1.29
1	0.768	0.926	1.15	0.773	0.935	1.17	0.797	0.970	1.21
1.5	0.786	0.942	1.16	0.787	0.945	1.17	0.785	0.952	1.19
2	0.810	0.964	1.19	0.807	0.964	1.19	0.786	0.950	1.18
3	0.864	1.02	1.24	0.855	1.01	1.24	0.804	0.965	1.19
4	0.924	1.08	1.30	0.908	1.07	1.29	0.833	0.993	1.22
5	0.987	1.14	1.37	0.965	1.12	1.35	0.867	1.03	1.26
6	1.05	1.21	1.44	1.02	1.18	1.41	0.905	1.07	1.29
7	1.12	1.28	1.47	1.08	1.24	1.48	0.944	1.11	1.33
8	1.18	1.35	1.51	1.14	1.31	1.54	0.985	1.15	1.38
9	1.25	1.41	1.58	1.20	1.37	1.60	1.03	1.19	1.42
10	1.32	1.48	1.65	1.26	1.43	1.67	1.07	1.23	1.46
11	1.39	1.55	1.72	1.32	1.49	1.73	1.11	1.28	1.51
13	1.52	1.69	1.79	1.45	1.62	1.86	1.20	1.36	1.60
15	1.66	1.83	1.93	1.57	1.74	1.99	1.29	1.45	1.69
20	2.00	2.18	2.28	1.89	2.06	2.31	1.52	1.68	1.92
30	2.70	2.88	2.98	2.52	2.70	2.95	1.98	2.15	2.38
40	3.40	3.58	3.69	3.16	3.34	3.59	2.44	2.61	2.85
50	4.10	4.28	4.39	3.80	3.98	4.24	2.91	3.08	3.32
100	7.61	7.79	7.70	7.01	7.19	7.45	5.26	5.44	5.68
200	14.6	14.8	11.6	13.4	13.6	13.9	9.98	10.2	10.4
500	35.7	35.9	36.2	32.7	32.9	33.2	24.2	24.3	24.6
1000	70.9	71.0	71.3	64.9	65.1	65.3	47.8	47.9	48.2

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Πίνακας 3.8: Αδιάστατη παροχή G σε σχέση με την παράμετρο αραιοποίησης δ, για τριγωνικούς αγωγούς με α=1.

	G	
δ	Equilateral $\phi = 60^o$	Isosceles $\phi = 54.74^o$
10^{-3}	0.927	0.932
10^{-2}	0.916	0.921
0.1	0.872	0.876
0.3	0.841	0.844
0.5	0.831	0.834
1	0.833	0.836
1.5	0.851	0.854
2	0.875	0.878
3	0.931	0.934
4	0.994	0.997
5	1.06	1.06
6	1.13	1.13
7	1.20	1.20
8	1.26	1.27
9	1.34	1.34
10	1.41	1.41
20	2.14	2.14
30	2.88	2.88
40	3.62	3.62
50	4.36	4.37
100	8.05	8.07

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Πίνακας 3.9: Αδιάστατη παροχή G σε σχέση με την παράμετρο αραιοποίησης δ, για τραπεζοειδείς αγωγούς με α=1.

	G	
δ	Equilateral $\phi = 60^o$	Isosceles $\phi = 54.74^o$
10^{-3}	0.877	1.02
10^{-2}	0.867	0.999
0.1	0.827	0.925
0.3	0.799	0.864
0.5	0.790	0.836
1	0.793	0.810
1.5	0.809	0.807
2	0.832	0.814
3	0.885	0.841
4	0.944	0.877
5	1.01	0.919
6	1.07	0.962
7	1.13	1.01
8	1.20	1.06
9	1.26	1.10
10	1.33	1.15
20	2.02	1.66
30	2.71	2.18
40	3.40	2.71
50	4.10	3.23
100	7.55	5.85

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Κεφαλαιο 4

Συγκρισεις θεωρητικων και πειραματικων αποτελεσματων

4.1 Εισαγωγή

Η έως και σήμερα έλλειψη αξιόπιστων πειραματικών δεδομένων κυρίως για ροές όπου $Kn > 0.1$, τόσο σε διατάξεις κενού όσο και σε μικροροϊκές διατάξεις, οφείλεται στην δυσκολία μέτρησης των μακροσκοπικών ποσοτήτων, καθώς και στην απαίτηση εξελιγμένης τεχνολογίας κυρίως σε συσκευές μέτρησης. Τα τελευταία χρόνια έχουν πραγματοποιηθεί σημαντικά βήματα προς την κατεύθυνση αυτή και αρκετά αξιόπιστα αποτελέσματα έχουν κάνει την εμφάνιση τους στην διεθνή βιβλιογραφία, καλύπτοντας τους δύο παραπάνω τομείς της τεχνολογίας [101, 4]. Με την εξέλιξη αυτή είναι προφανής η απαίτηση σύγκρισης των πειραματικών δεδομένων με τα αντίστοιχα θεωρητικά, ώστε να εξακριβωθεί η πιστότητα των δεδομένων καθώς και η ικανότητα της κινητικής θεωρίας να περιγράψει αποτελεσματικά πραγματικές συνθήκες ροής. Τονίζεται ότι η αντιμετώπιση των παραπάνω ροών βασίζεται σε μια ενιαία θεωρία, από την οποία προκύπτουν αδιάστατα αποτελέσματα, τα οποία ισχύουν για οποιαδήποτε περίπτωση. Με την διαδικασία διαστατοποίησης, όπως αυτή περιγράφηκε στο Κεφάλαιο 3, συγκεκριμενοποιείται η εκάστοτε εφαρμογή. Το παρόν κεφάλαιο περιλαμβάνει την σύγκριση πειραματικών δεδομένων που προέρχονται από μικροροϊκές διατάξεις [101], καθώς και από την τεχνολογία κενού [4], με τα αντίστοιχα θεωρητικά κινητικά αποτελέσματα.

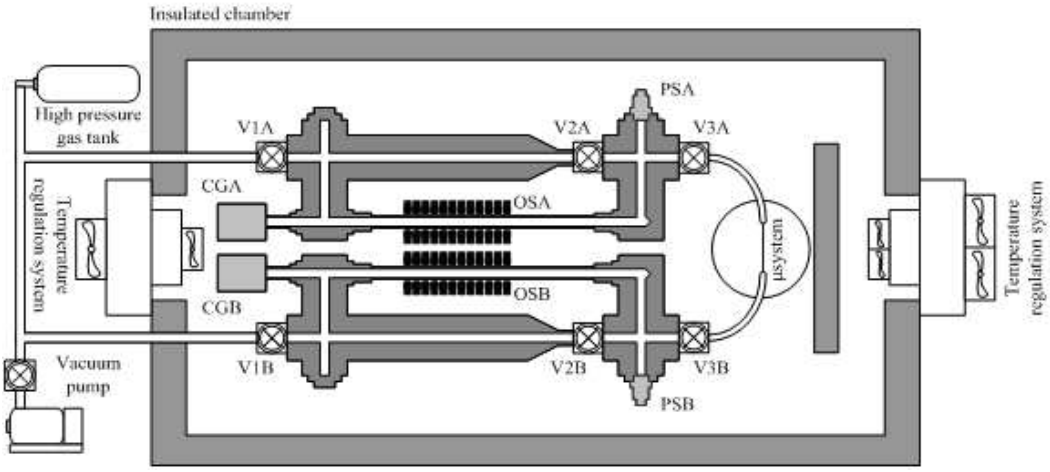
4.2 Σύγκριση σε μικροροϊκές διατάξεις

Στην παρούσα παράγραφο θα πραγματοποιηθεί περιγραφή των πειραματικών δεδομένων καθώς και των συνθηκών διεξαγωγής των πειραμάτων που περιγράφονται στο άρθρο [101]. Στον συγκεκριμένο άρθρο αναφέρονται πειράματα κυρίως στην υδροδυναμική περιοχή καθώς και στην περιοχή ολίσθησης σε ορθογώνιους μικροαγωγούς. Η κύρια ιδέα της πειραματικής

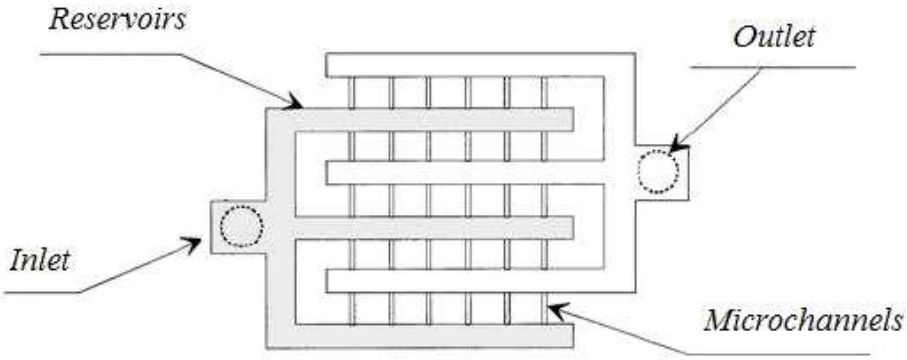
Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

διαδικασίας (Σχ. 4.1) είναι η διατήρηση της τιμής της πίεσης εξόδου P_{out} και η μεταβολή της πίεσης εισόδου P_{in} σύμφωνα με τον λόγο $\Pi = P_{in}/P_{out}$. Για κάθε μία από τις περιπτώσεις υπολογίζεται η ροή μάζας που διέρχεται από τον ορθογώνιο μικροαγωγό.

Οι συγκεκριμένοι μικροαγωγοί έχουν κατασκευασθεί με την μέθοδο της χάραξης DRIE (Deep Reactive Ion Etching) σε πλάκα πυριτίου, η οποία επικαλύπτεται με υλικό Pyrex. Η διατομή των αγωγών είναι ορθογώνια, ενώ σχηματίζεται μεγάλος αριθμός όμοιων αγωγών σε παράλληλη τοποθέτηση, όπως χαρακτηριστικά απεικονίζεται στο Σχ. 4.2. Ο σχεδιασμός αυτός επιτρέπει την μέτρηση ικανής ροής μάζας με μεγάλη ακρίβεια.



Σχήμα 4.1: Πειραματική διάταξη.



Σχήμα 4.2: Γεωμετρία μικροαγωγών.

Εξετάσθηκαν δύο περιπτώσεις αερίων, του αζώτου και του ήλιου, ενώ δύο είδη ορθογώνιων αγωγών χρησιμοποιήθηκαν. Στην πρώτη περίπτωση οι αγωγοί έχουν ύψος $H = 1.88\ \mu m$, πλάτος $W = 21.2\ \mu m$ και μήκος $L = 5\ mm$, ενώ ο λόγος H/W ισούται με 0.088. Ο συνολικός αριθμός των αγωγών είναι 45. Στην δεύτερη περίπτωση οι αγωγοί έχουν ύψος $H = 1.16\ \mu m$, πλάτος $W = 21.0\ \mu m$ και μήκος $L = 5\ mm$, ενώ ο λόγος H/W ισούται με 0.055. Ο συνολικός αριθμός των αγωγών είναι 380. Η ροή μάζας για κάθε αγωγό προκύπτει διαιρώντας την συνολική μετρούμενη ροή μάζας με τον συνολικό αριθμό των αγωγών ανά περίπτωση.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Έστω αέριο άζωτο σε θερμοκρασία $T = 294.2\ K$. Το αέριο διέρχεται από τους αγωγούς που έχουν λόγο $H/W = 0.088$. Τα θεωρητικά και πειραματικά αποτελέσματα που προκύπτουν απεικονίζονται στο Σχ. 4.3. Ο λόγος $\Pi = P_{in}/P_{out}$ παίρνει τιμές από 1.2 έως 2 καλύπτοντας έτσι μόνο την περιοχή ολίσθησης. Αξίζει να σημειωθεί, ότι σε όλες τις περιπτώσεις καθώς αυξάνεται ο λόγος των πιέσεων Π, ο μέσος αριθμός Kn_0 μειώνεται. Τονίζεται ότι ο αριθμός Kn_0 βασίζεται στην μέση πίεση $P_0 = (P_1 + P_2)/2$. Στο Σχ. 4.3 τα κινητικά αποτελέσματα παρουσιάζονται για τρεις διαφορετικές τιμές του συντελεστή α, $\alpha = 1, 0.9, 0.8$, ο οποίος εκφράζει την τραχύτητα του τοιχώματος. Σύμφωνα με τον συντελεστή $0 < \alpha \leq 1$, το ποσοστό των σωματιδίων που ανακλώνται από το τοίχωμα με συνθήκες πλήρους διάχυσης ισούται με α, ενώ το ποσοστό των σωματιδίων που ανακλώνται κατοπτρικά ισούται με $1 - \alpha$. Καθώς μειώνεται ο συντελεστής διαχυτικής ανάκλασης α, η τραχύτητα της επιφάνειας μειώνεται.

Στο Σχ. 4.3 παρατηρείται ότι υπάρχει αρκετά ικανοποιητική ταύτιση των θεωρητικών και πειραματικών αποτελεσμάτων. Συγκεκριμένα τα κινητικά αποτελέσματα αντιστοιχούν σε τρεις συγκεκριμένες τιμές του συντελεστή διαχυτικής ανάκλασης α, με α=1, 0.9 και 0.8. Η καμπύλη των πειραματικών δεδομένων τοποθετείται μεταξύ των καμπύλων που αντιστοιχούν σε α=1 και 0.9. Για τον λόγο αυτό θεωρείται ότι τα πειραματικά αποτελέσματα θα ταυτιστούν με τα κινητικά στην περίπτωση όπου $\alpha \simeq 0.95$. Η συμπεριφορά αυτή των πειραματικών δεδομένων είναι αναμενόμενη αφού ο αγωγός δεν έχει υποστεί ιδιαίτερη κατεργασία λείανσης.

Η μέγιστη τιμή του μέσου αριθμού Kn_0, ο οποίος βασίζεται στις πιέσεις πριν και μετά τον αγωγό, ισούται με 0.083, η οποία και ανήκει στην περιοχή ολίσθησης. Το μέγιστο σχετικό σφάλμα μεταξύ των θεωρητικών (α=1) και πειραματικών δεδομένων είναι της τάξης του 4.5%.

Στην περίπτωση αερίου ήλιου, το οποίο βρίσκεται στην ίδια θερμοκρασία $T = 294.2\ K$ όπως και πριν, τα αποτελέσματα της σύγκρισης απεικονίζονται στο Σχ. 4.4 (πάνω και μέση), όπου όμοια συμπεράσματα, όπως και παραπάνω, μπορούν να προκύψουν.

Κάνοντας χρήση του ορθογώνιου αγωγού με λόγο $H/W = 0.055$ και για αέριο ήλιο σε θερμοκρασία $T = 294.2\ K$, τα αποτελέσματα της σύγκρισης απεικονίζονται στο Σχ. 4.4 (κάτω). Και σε αυτή την περίπτωση υπάρχει ικανοποιητική ταύτιση, η οποία παρατηρείται για την περίπτωση όπου $\alpha \simeq 0.85$.

4.3 Σύγκριση σε διατάξεις κενού

Στην παρούσα παράγραφο θα παρουσιασθούν συγκρίσεις μεταξύ θεωρητικών και πειραματικών αποτελεσμάτων, σε ένα εντελώς διαφορετικό τεχνολογικό πεδίο, με αυτό της Παραγράφου 4.2, της τεχνολογίας κενού. Η συγκεκριμένη τεχνολογία έχει ευρεία εφαρμογή, ενώ εφαρμόζεται για την μελέτη ενός σημαντικού λειτουργικού τμήματος του αντιδραστήρα θερμοπυρηνικής σύντηξης ITER. Πιο συγκεκριμένα, ο αντιδραστήρας χρησιμοποιεί τρία επιμέρους συστήματα κενού για την εκκένωση και την διατήρηση της πίεσης στον πυρήνα όγκου 1350 m^3. Το κύριο σύστημα κενού έχει σχεδιαστεί για την άντληση των αερίων που δημιουργού-

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

νται στο πλάσμα καθώς και για το έλεγχο διαρροών στον πυρήνα. Αυτό συνεπάγεται ότι τα ποικίλα αέρια (π.χ ισότοπα υδρογόνου, υδρατμοί, υδρογονάνθρακες κ.α) 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 αποτελείται από ένα δίκτυο αγωγών διαφόρων γεωμετριών (Σχ. 4.5), οι οποίοι συνδέονται με τον πυρήνα του αντιδραστήρα για την απομάκρυνση των αερίων 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 είναι εγκατεστημένες οκτώ κρυογενικές αντλίες, τέσσερεις βρίσκονται εν λειτουργία και οι υπόλοιπες λειτουργούν ως εφεδρεία. Οι αντλίες αυτές λειτουργούν υπό χαμηλό, μέτριο και υψηλό κενό και έχουν δυνατότητα άντλησης 100 m^3/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. Ένας από τους πρωταρχικούς στόχους, είναι η μοντελοποίηση του συστήματος καθώς και η πιστοποίηση των δεδομένων που προέρχονται από τις αντίστοιχες πειραματικές διατάξεις. Στο πλαίσιο αυτό, κατασκευάστηκε πειραματική διάταξη, η οποία βρίσκεται στο ερευνητικό κέντρο της Καρλσρούης και ονομάζεται TRANSFLOW. Η λεπτομερής περιγραφή της συγκεκριμένης διάταξης πραγματοποιείται στο Παράρτημα Α. Κύριος στόχος της διάταξης είναι η μελέτη της ροής μάζας διαφόρων αερίων που διέρχονται από αγωγούς διαφόρων γεωμετριών, όπως κυλινδρικών, ορθογώνιων, τριγωνικών και τραπεζοειδών. Κύριο χαρακτηριστικό της συγκεκριμένης διάταξης είναι η μέτρηση ροής μάζας σε όλο το εύρος του αριθμού Kn και ιδιαίτερα στην μεταβατική περιοχή, όπου τα πειραματικά αποτελέσματα στην διεθνή βιβλιογραφία είναι περιορισμένα και τις περισσότερες φορές μη αξιόπιστα. Τα πειραματικά αποτελέσματα συγκρίνονται με τα αντίστοιχα κινητικά για την περίπτωση πλήρους διάχυσης, όπου $\alpha = 1$ και για εύρος διαφοράς πίεσης ίσο με $0.05 \leq \Delta P \leq 80$ Pa. Τα κινητικά αποτελέσματα προέκυψαν εφαρμόζοντας την μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων (DVM) για την επίλυση του αντίστοιχου γραμμικοποιημένου κινητικού μοντέλου BGK. Το αέριο που χρησιμοποιήθηκε σε όλες τις περιπτώσεις είναι το άζωτο.

Για την περίπτωση ροής αζώτου, με μέση θερμοκρασία $T = 293$ K, σε κυλινδρικό αγωγό υδραυλικής διαμέτρου $D_h = 15.96$ mm και μήκους $L = 1.28$ m, τα αποτελέσματα της ροής μάζας συναρτήσει της διαφοράς πίεσης ΔP πριν και μετά τον αγωγό απεικονίζονται στο Σχ. 4.6. Στο συγκεκριμένο σχήμα καθώς και στα υπόλοιπα γραφήματα συγκρίσεων, κάθε ένα σημείο αντιστοιχεί σε ξεχωριστά πειραματικά δεδομένα. Για τον καθορισμό της πειραματικής μέτρησης πρέπει να είναι γνωστά η διαφορά πίεσης $\Delta P = P_1 - P_2$ καθώς και μέση πίεση $P_0 = (P_1 + P_2)/2$.

Παρατηρείται αρκετά καλή ταύτιση των αποτελεσμάτων ενώ το μέγιστο σχετικό σφάλμα

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

που ορίζεται ως

$$\left|\frac{(M^{comp} - M^{exper})}{M^{comp}}\right| \tag{4.1}$$

είναι της τάξης του 10%. Τα συγκεκριμένα αποτελέσματα καλύπτουν την περιοχή ολίσθησης καθώς και την μεταβατική περιοχή, με τον αριθμό Kn να κυμαίνεται ως $0.01 \leq Kn \leq 8.05$. Το γεγονός ότι τα πειραματικά αποτελέσματα καλύπτουν μεγάλο μέρος της μεταβατικής περιοχής με αρκετά μεγάλη ακρίβεια ενισχύει την αξιοπιστία της πειραματικής διάταξης TRANSFLOW. Τέλος, σημειώνεται ότι καθώς αυξάνεται η διαφορά πίεσης ΔP, η ροή προσεγγίζει το υδροδυναμικό όριο.

Για την περίπτωση τετραγωνικού αγωγού υδραυλικής διαμέτρου $D_h = 15.89\ mm$ και μήκους $L = 1.28\ m$, τα αποτελέσματα της ροής μάζας συναρτήσει της διαφοράς πίεσης ΔP, απεικονίζονται στο Σχ. 4.6. Το εύρος του αριθμού Kn κυμαίνεται ως $0.013 \leq Kn \leq 10.24$. Στην περίπτωση αυτή, τα πειραματικά αποτελέσματα προσεγγίζουν με αρκετά καλή ακρίβεια την ελεύθερη μοριακή περιοχή. Το μέγιστο σχετικό σφάλμα είναι της τάξης του 15% και παρουσιάζεται για μεγάλους αριθμούς Knudsen.

Στο Σχ. 4.6 παρουσιάζονται επίσης, τα αποτελέσματα για ισόπλευρο τριγωνικό αγωγό υδραυλικής διαμέτρου $D_h = 17.06\ mm$ και ισοσκελούς τραπεζοειδούς αγωγού υδραυλικής διαμέτρου $D_h = 16.48\ mm$, ύψους $h = 14\ mm$, μεγάλης βάσης $B = 28\ mm$ και γωνίας $\theta = 63.43^o$. Το μήκος των δύο αγωγών παραμένει ίδιο, όπως και στις περιπτώσεις του κυλινδρικού και του τετραγωνικού αγωγού. Στην πρώτη περίπτωση το εύρος του αριθμού Kn είναι $0.017 \leq Kn \leq 21$, ενώ στην δεύτερη είναι $0.015 \leq Kn \leq 17.54$. Και στις δύο περιπτώσεις αγωγών, η ροή προσεγγίζει την ελεύθερη μοριακή περιοχή με ικανοποιητική ακρίβεια. Το μέγιστο σχετικό σφάλμα είναι περίπου 10%.

Στο Σχ. 4.7 παρουσιάζονται οι αριθμοί Knudsen, Mach και Reynolds που προκύπτουν κάνοντας χρήση των Εξ.(3.5), (3.14) και (3.18). Όπως προκύπτει ο αριθμός Knudsen κυμαίνεται από 10^{-2} έως 10^2, γεγονός που φανερώνει ότι οι συγκρίσεις καλύπτουν όλες τις περιοχές ροής, σε χαμηλό έως και υψηλό κενό. Οι τιμές του αριθμού Reynolds είναι μικρές και κυμαίνονται από 10^{-3} έως 10. Το γεγονός αυτό αποδεικνύει, ότι η ροή είναι στρωτή ακόμα και όταν βρισκόμαστε στο συνεχές όριο. Τέλος, οι τιμές του αριθμού Mach είναι επίσης μικρές και κυμαίνονται από 10^{-2} έως 10^{-1}. Τονίζεται, ότι καθώς το ΔP αυξάνει ο αριθμός Mach δεν μεταβάλλεται σημαντικά γεγονός που αποδεικνύει ότι η παραδοχή της ασυμπίεστης ροής είναι σωστή.

Στο Σχ. 4.8 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της ογκομετρικής παροχής (conductance) σε lt/sec συναρτήσει της παραμέτρου αραιοποίησης δ. Η ογκομετρική παροχή ορίζεται ώς [118]

$$C = \frac{q_{pv}}{\Delta P}. \tag{4.2}$$

Από την καταστατική εξίσωση των αερίων παραγωγίζοντας ως προς τον χρόνο και θεωρώντας

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

ότι η θερμοκρασία δεν μεταβάλλεται με τον χρόνο προκύπτει ότι

$$\frac{d(PV)}{dt} = \frac{d}{dt}\left(\frac{M}{m}\right) RT_0 \tag{4.3}$$

ή

$$q_{pv} = \frac{\dot{M}}{m} RT_0. \tag{4.4}$$

Αντικαθιστώντας την Εξ.(4.4) στην Εξ.(4.2) προκύπτει ότι

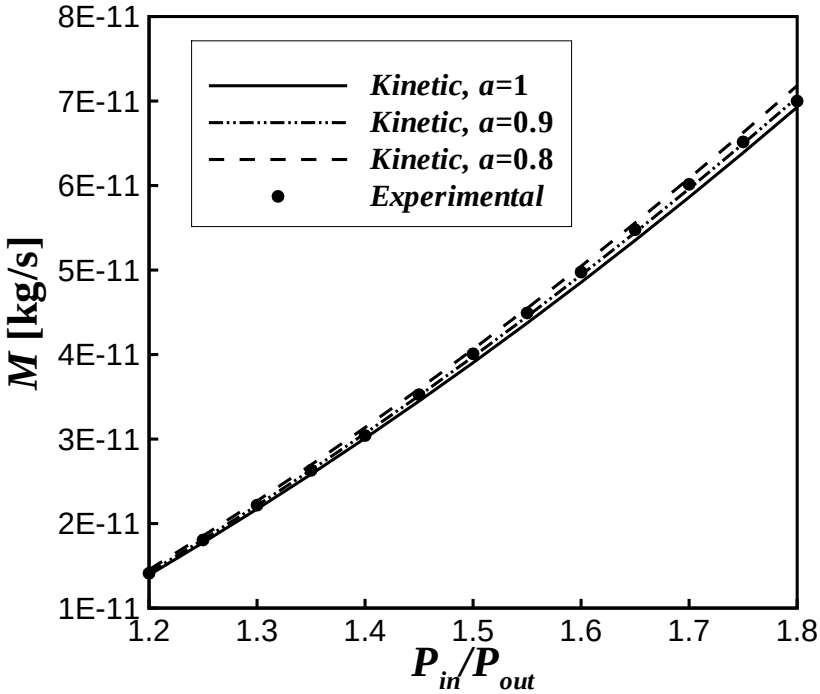
$$C = \frac{\dot{M}}{m}\frac{RT_0}{\Delta P} \tag{4.5}$$

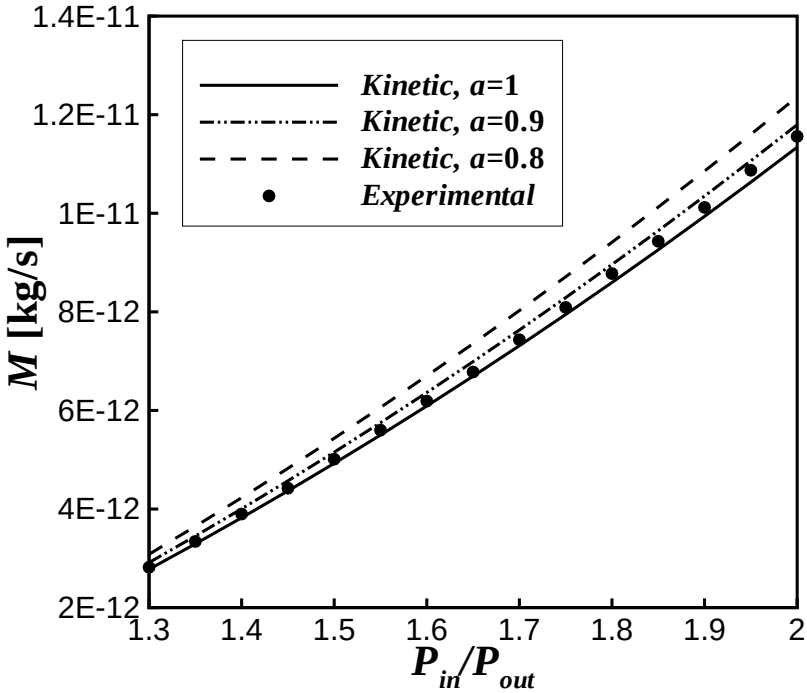
όπου $\dot{M}$ είναι η ροή μάζας σε kg/sec και m είναι η μοριακή μάζα του αερίου. Η συγκεκριμένη ποσότητα αποτελεί σημαντική παράμετρο στην τεχνολογία κενού. Από τα αποτελέσματα διαπιστώνεται και στην περίπτωση αυτή, η πολύ καλή ταύτιση μεταξύ των πειραματικών και θεωρητικών αποτελεσμάτων. Γενικότερα, η ογκομετρική παροχή C είναι σχεδόν σταθερή σε αραιοποιημένες ατμόσφαιρες, ενώ καθώς προσεγγίζεται η περιοχή ολίσθησης η ογκομετρική παροχή μεταβάλλεται ανάλογα της παραμέτρου αραιοποίησης δ. Τόσο τα πειραματικά όσο και τα θεωρητικά αποτελέσματα αποδεικνύουν την ύπαρξη του ελάχιστου Knudsen.

Τα σφάλματα για όλες τις περιπτώσεις αγωγών οφείλονται σε δύο κατηγορίες σφαλμάτων. Στην πρώτη ανήκουν τα σφάλματα μοντελοποίησης όπως η επιλογή του κινητικού μοντέλου, η επιλογή των οριακών συνθηκών καθώς και η μη θεώρηση των φαινομένων των άκρων (end effects). Στην δεύτερη κατηγορία ανήκουν κυρίως σφάλματα που προέρχονται από τα όργανα μέτρησης.

Όπως προκύπτει από τις παραπάνω συγκρίσεις, υπάρχει αρκετά καλή ταύτιση των αποτελεσμάτων, η οποία πιστοποιεί την ικανότητα της κινητικής θεωρίας να περιγράψει με ικανοποιητική ακρίβεια αραιοποιημένες ροές αερίων σε αγωγούς μεγάλου μήκους, καθώς και την αξιοπιστία των πειραματικών μετρήσεων. Επίσης, παρατηρείται ότι καθώς αυξάνεται η επιβαλλόμενη διαφορά πίεσης ΔP, η ροή μάζας M μεταβάλλεται έως και τέσσερεις τάξεις μεγέθους.

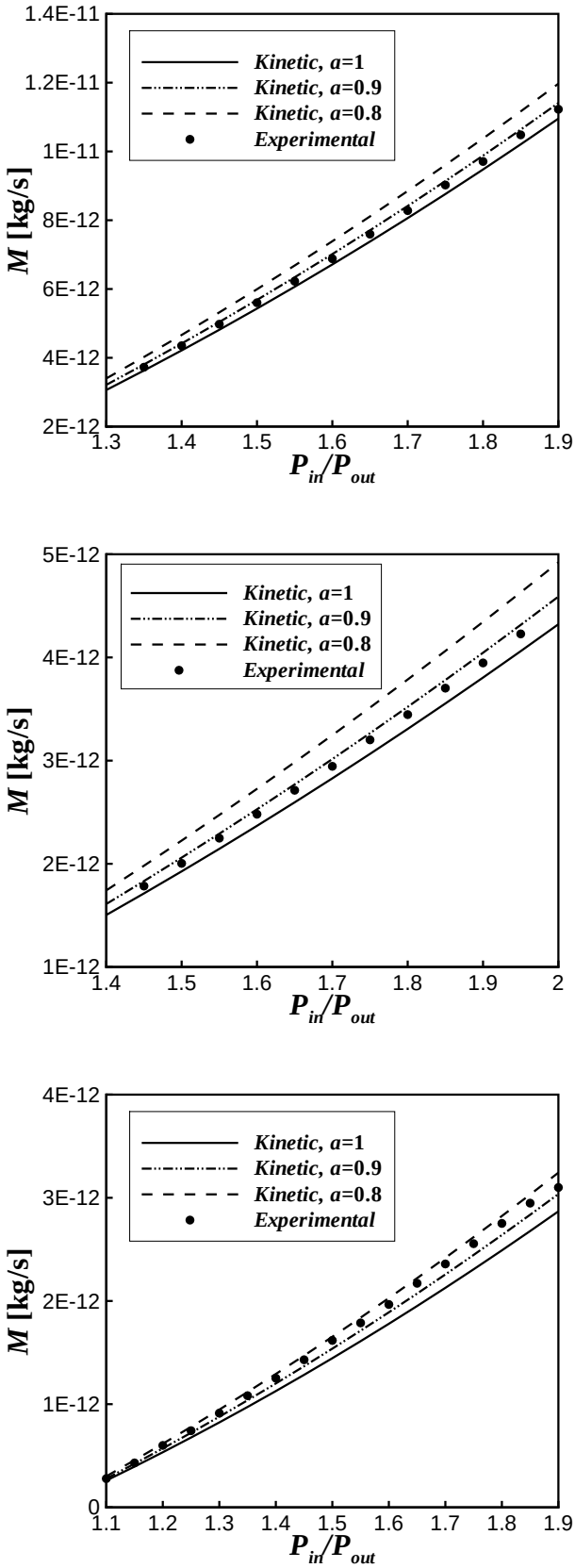
Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212





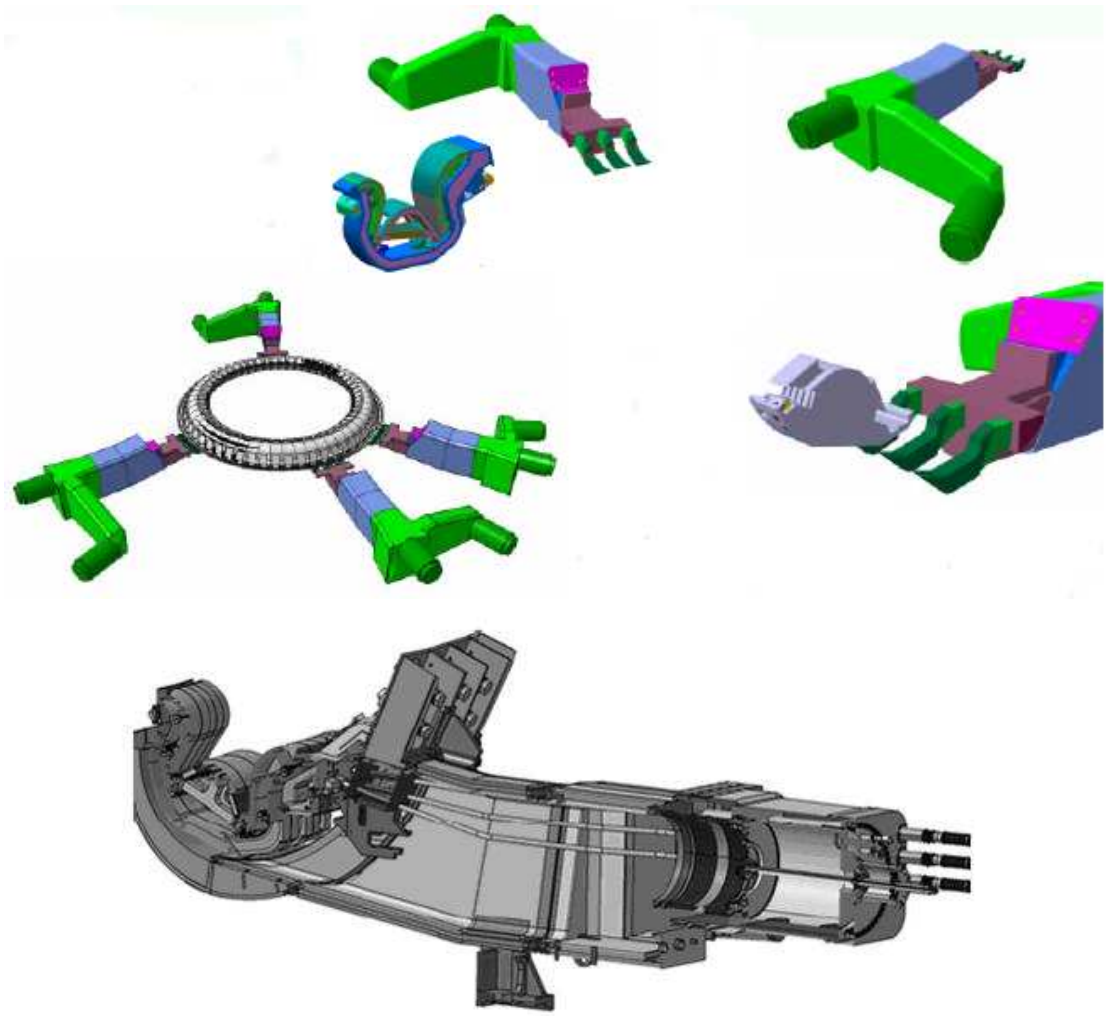
Σχήμα 4.3: Ροή μάζας αζώτου σε ορθογώνιο αγωγό με $T = 294.2\ K$: $0.012 \leq Kn_0 \leq 0.016$ και $P_{out} = 2 \times 10^5\ Pa$ (πάνω), $0.036 \leq Kn_0 \leq 0.05$ και $P_{out} = 0.65 \times 10^5\ Pa$ (κάτω).

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



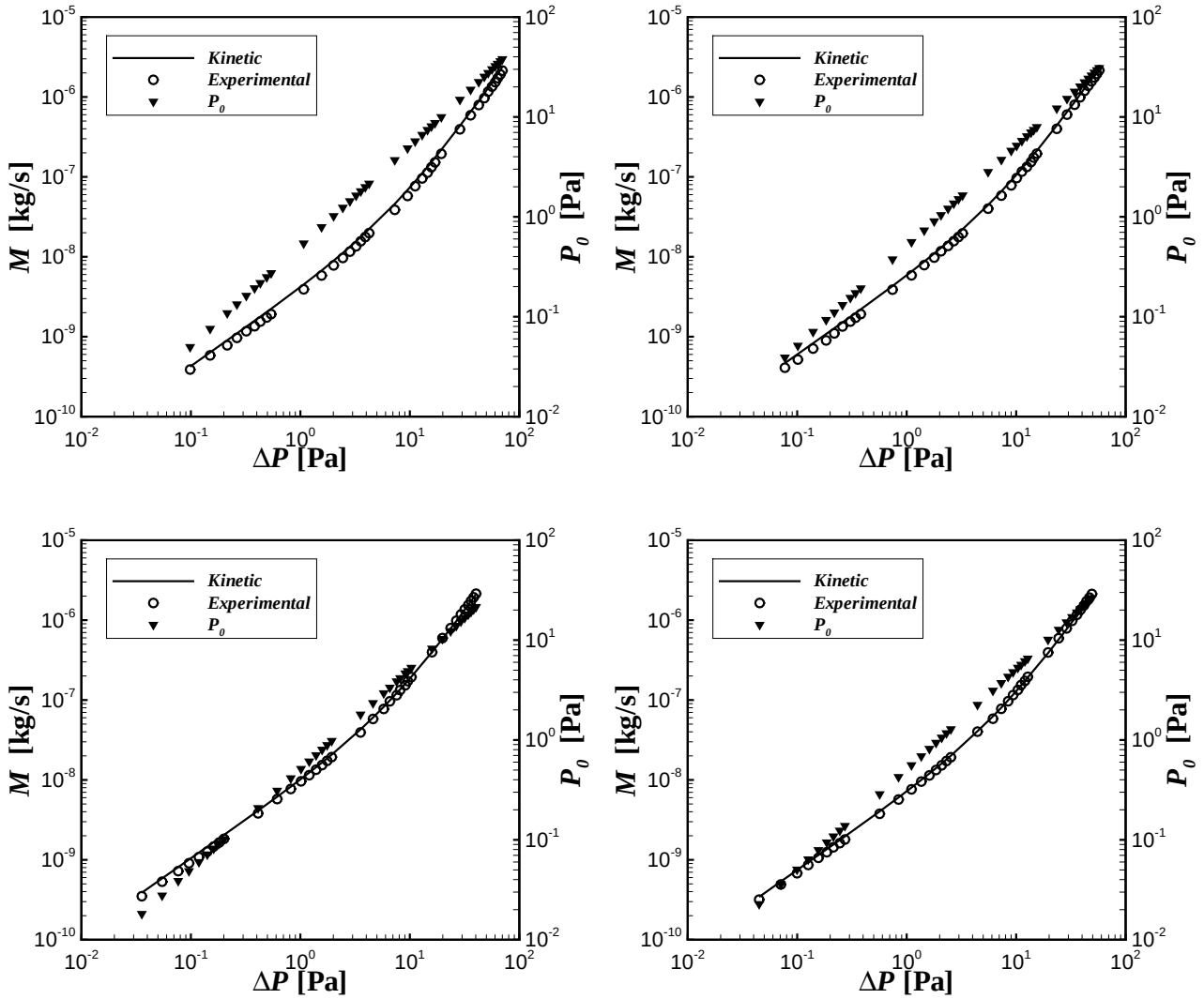
Σχήμα 4.4: Ροή μάζας ηλίου σε ορθογώνιο αγωγό με $T = 294.2\ K$: α) για $H/W = 0.088$, $0.037 \leq Kn_0 \leq 0.047$ και $P_{out} = 1.9 \times 10^5\ Pa$ (πάνω), $0.066 \leq Kn_0 \leq 0.083$ και $P_{out} = 1.026 \times 10^5\ Pa$ (μέση), β) για $H/W = 0.055$, $0.06 \leq Kn_0 \leq 0.083$ και $P_{out} = 1.9 \times 10^5\ Pa$ (κάτω).

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



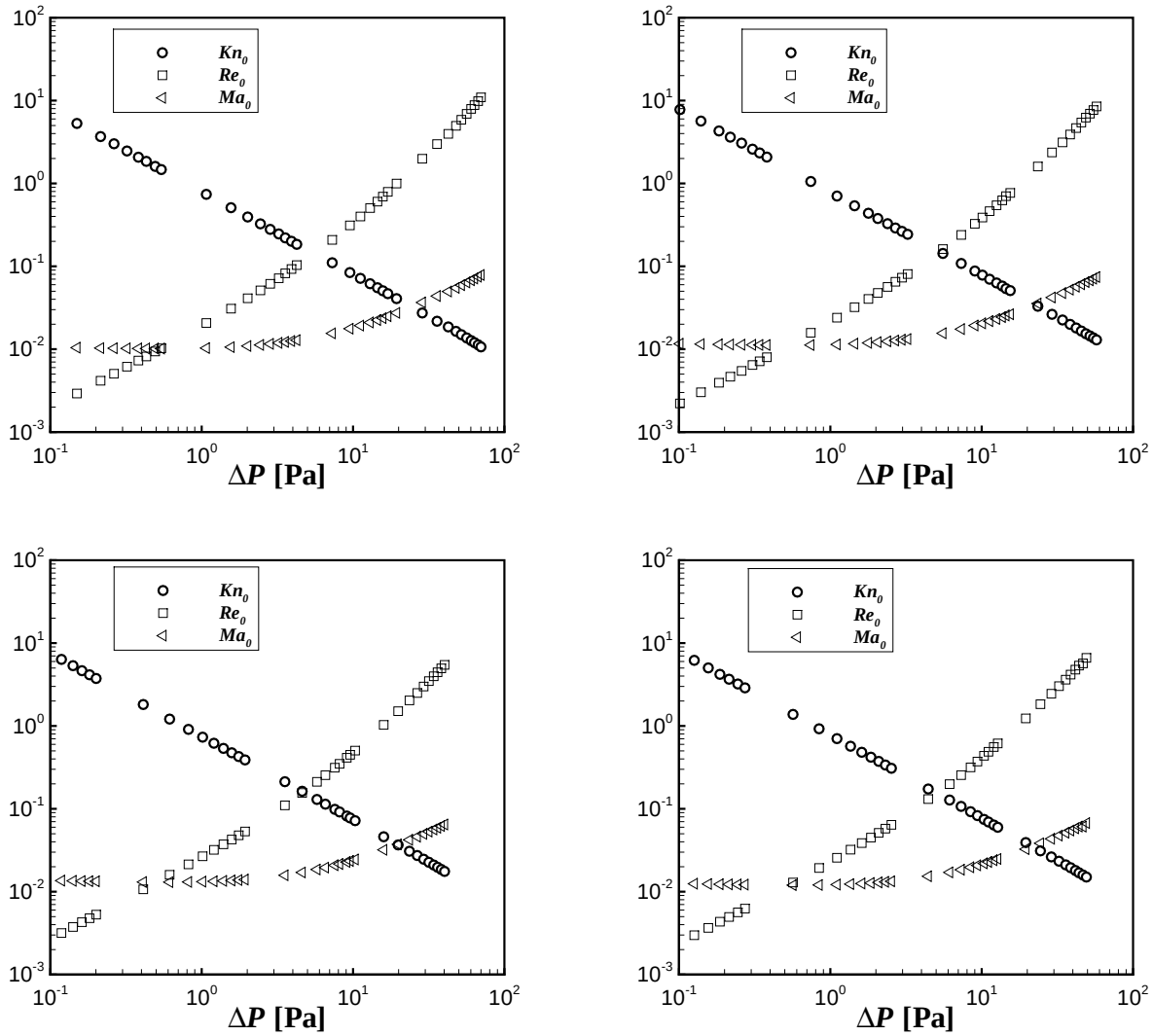
Σχήμα 4.5: Δίκτυο κενού στον αντιδραστήρα ITER (πάνω αριστερά), σημείο άντλησης (πάνω δεξιά), κρυογενική αντλία (κάτω).

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



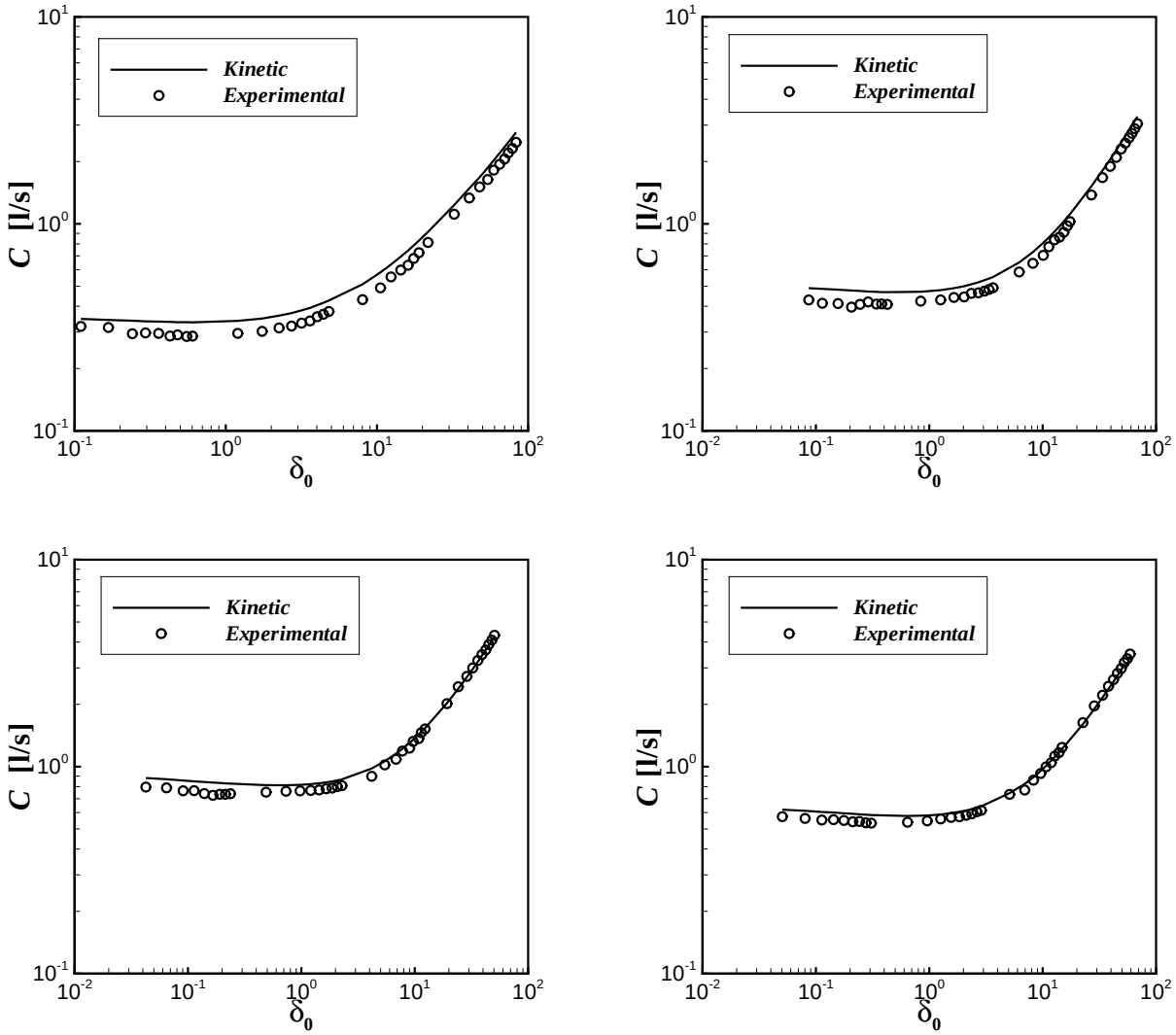
Σχήμα 4.6: Θεωρητικά και πειραματικά αποτελέσματα ροής μάζας αζώτου σε κυλινδρικό (επάνω αριστερά), τετραγωνικό (επάνω δεξιά), ισόπλευρο τριγωνικό (κάτω αριστερά) και ισοσκελή τραπεζοειδή (κάτω δεξιά) αγωγό.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



Σχήμα 4.7: Αριθμοί Knudsen, Mach και Reynolds σε κυλινδρικό (επάνω αριστερά), τετραγωνικό (επάνω δεξιά), ισόπλευρο τριγωνικό (κάτω αριστερά) και ισοσκελή τραπεζοειδή (κάτω δεξιά) αγωγό.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



Σχήμα 4.8: Θεωρητικά και πειραματικά αποτελέσματα ογκομετρικής παροχής αζώτου σε κυλινδρικό (επάνω αριστερά), τετραγωνικό (επάνω δεξιά), ισόπλευρο τριγωνικό (κάτω αριστερά) και ισοσκελή τραπεζοειδή (κάτω δεξιά) αγωγό.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Κεφαλαιο 5

Αριθμος Poiseuille και υδραυλικη διαμετρος σε αραιοποιημενες ροες

5.1 Ο αριθμός Poiseuille

Μια από τις σημαντικότερες παραμέτρους σε πλήρως ανεπτυγμένες ροές είναι ο αριθμός Poiseuille , ο οποίος ορίζεται ως το γινόμενο του συντελεστή τριβής Darcy και του αριθμού Reynolds [119, 10],

$$Po = f \times Re. \tag{5.1}$$

Ο συντελεστής τριβής Darcy ορίζεται ως

$$f = \frac{8\overline{\tau'_w}}{\rho\overline{u'}^2}, \tag{5.2}$$

όπου $\overline{\tau'_w}$ είναι η μέση διατμητική τάση που αναπτύσσεται στα τοιχώματα του αγωγού, $\overline{u'}$ είναι η μέση ταχύτητα και ρ η πυκνότητα του αερίου. Ο αριθμός Reynolds ορίζεται ως

$$Re = \frac{\rho\overline{u'}D_h}{\mu}, \tag{5.3}$$

όπου D_h είναι η υδραυλική διάμετρος του αγωγού και μ το ιξώδες του αερίου. Αντικαθιστώντας τις Εξ.(5.2) και (5.3) στην Εξ.(5.1) προκύπτει ότι

$$Po = \frac{8\overline{\tau'_w}D_h}{\mu\overline{u'}} \tag{5.4}$$

Οι Εξ.(5.1) και (5.4) από μαθηματική σκοπιά είναι όμοιες. Από φυσική σκοπιά όμως, η Εξ.(5.4) είναι πιο κατάλληλη για στρωτές ροές, αφού η μέση διατμητική τάση διαιρείται με την ιξώδη τάση και όχι με την δυναμική πίεση όπως γίνεται με στην Εξ.(5.1), η οποία είναι κατάλληλη για τυρβώδεις ροές.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Στο σημείο αυτό εισάγονται οι αδιάστατες ποσότητες: α) $A = A'/D_h^2$ το αδιάστατο εμβαδόν του αγωγού, β) $\Gamma = \Gamma'/D_h$ η αδιάστατη περίμετρος, γ) $\overline{u} = \overline{u'}/(\upsilon_0 X_P)$ και δ) $\overline{\tau_w} = \overline{\tau'_w}/(2PX_P)$, όπου

$$X_P = \frac{D_h}{P}\frac{dP}{dz'} = \frac{1}{P}\frac{dP}{dz} \tag{5.5}$$

είναι η αδιάστατη τοπική κλίση πίεσης, η οποία προκαλεί την ροή.

Επειδή η ροή θεωρείται πλήρως αναπτυγμένη και δεν υπάρχει μεταφορά ορμής στην διεύθυνση z' της ροής, από ισοζύγιο δυνάμεων σε μια διαφορική τομή του αγωγού προκύπτει ότι

$$\bar{\tau'_w} = \frac{A'}{\Gamma'}\frac{dP}{dz'} \tag{5.6}$$

Αδιαστατοποιώντας την Εξ.(5.6) και κάνοντας χρήση ότι $A/\Gamma = 1/4$ προκύπτει ότι

$$\bar{\tau_w} = \frac{\bar{\tau}'_w}{2P_0 X_P} = \frac{A}{2\Gamma} = \frac{1}{8} \tag{5.7}$$

Το συγκεκριμένο αποτέλεσμα ισχύει για οποιαδήποτε διατομή του αγωγού. Τότε η Εξ.(5.4) κάνοντας χρήση του ορισμού της παραμέτρου αραιοποίησης δ αδιαστατοποιείται ως

$$Po = \frac{8\bar{\tau}'_w D_h}{\mu_0 \bar{u}'} = \frac{8\bar{\tau}_w 2P_0 X_P D_h}{\mu_0 \bar{u} \upsilon_0 X_P} = \frac{16\bar{\tau}_w \delta}{\bar{u}} \tag{5.8}$$

όπου

$$\bar{u} = \frac{\bar{u}'}{\upsilon_0 X_P} = \frac{1}{A}\int_A u\,(x,y)dA \tag{5.9}$$

η μέση αδιάστατη ταχύτητα. Τελικά εισάγωντας την Εξ.(5.7) στην Εξ.(5.8) προκύπτει ότι [120]

$$Po = f \times Re = \frac{2\delta}{\overline{u}}. \tag{5.10}$$

Παρατηρώντας την Εξ.(5.10), διαπιστώνεται ότι ο υπολογισμός του αριθμού Poiseuille είναι εφικτός για όλο το εύρος του αριθμού Knudsen, εφόσον τα αντίστοιχα κινητικά αποτελέσματα για τον υπολογισμό της μέσης αδιάστατης ταχύτητας $\overline{u}$ είναι διαθέσιμα. Στους ακόλουθους Πίνακες 5.1 και 5.2 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των αριθμών Po για την περίπτωση ροής ανάμεσα κυλινδρικό αγωγό, καθώς και ροής σε ορθογώνιους αγωγούς. Συγκεκριμένα στον Πίνακα 5.1 παρουσιάζονται οι αριθμοί Po για κυλινδρικό αγωγό με τρεις διαφορετικές τιμές του συντελεστή διαχυτικής ανάκλασης που εκφράζει την αλληλεπίδραση αερίου - τοιχώματος. Παρατηρώντας τα αποτελέσματα, διαπιστώνεται ότι καθώς αυξάνει η παράμετρος αραιοποίησης, ο αριθμός Po αυξάνει. Αντίθετη συμπεριφορά εμφανίζει ο αριθμός Po καθώς μειώνεται ο συντελεστής α, που εκφράζει την τραχύτητα του αγωγού. Έτσι, όσο μειώνεται η τραχύτητα του αγωγού μειώνεται και ο αριθμός Po. Στο υδροδυναμικό όριο ($\delta \to \infty$) ο αριθμός Po τείνει στην αναλυτική τιμή, η οποία είναι ίση με 64.

Στον Πίνακα 5.2 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα του αριθμού Po για ροή σε ορθογώ-

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

νιους αγωγούς με λόγο πλευρών $H/W = 1, 0.5$ και 0.1. Όμοια συμπεράσματα όπως στην περίπτωση του κυλινδρικού, είναι δυνατόν να εξαχθούν. Αξίζει να σημειωθεί, ότι και στις τρεις περιπτώσεις των ορθογωνίων αγωγών τα αποτελέσματα που αντιστοιχούν στο υδροδυναμικό όριο ταυτίζονται με εκείνα του άρθρου [119].

Στο Σχ.5.1 (πάνω) πραγματοποιείται μια σύγκριση μεταξύ ενός κυλινδρικού αγωγού, ενός τετραγωνικού αγωγού και ενός ορθογώνιου αγωγού με λόγο πλευρών $H/W = 0.5$. Παρατηρείται ότι, ο ορθογώνιος αγωγός με λόγο πλευρών $H/W = 0.5$ παρουσιάζει τον ίδιο σχεδόν αριθμό Po με τον κυλινδρικό αγωγό. Τέλος, στο Σχ.5.1 (μέση) παρουσιάζονται οι αριθμοί Po για ορθογώνιους αγωγούς με διαφορετικό λόγο πλευρών H/W. Παρατηρείται, ότι καθώς ο λόγος H/W μειώνεται ο αριθμός Po αυξάνει σημαντικά κυρίως κοντά στο υδροδυναμικό όριο ($\delta \to \infty$).

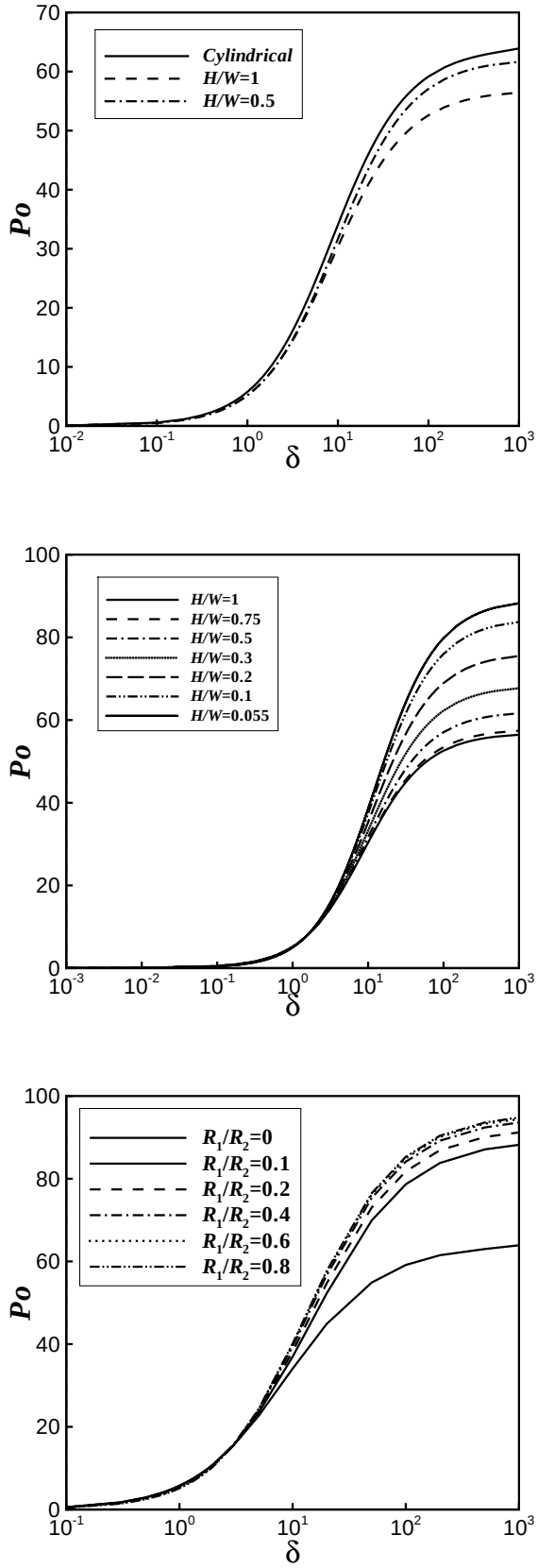
Στους Πίνακες 5.3 - 5.5 παρουσιάζονται αποτελέσματα του αριθμού Po για δακτυλοειδείς αγωγούς συναρτήσει της παραμέτρου αραιοποίησης δ και του λόγου των ακτίνων R_1/R_2, με α=1, 0.85 και 0.7 αντίστοιχα. Παρατηρώντας τα αποτελέσματα προκύπτει ότι για $10^{-3} \leq \delta \leq 10^{-1}$ (ελεύθερη μοριακή περιοχή), ο αριθμός Po αυξάνεται γραμμικά με το δ. Για $10^{-1} < \delta < 10^{1}$ (μεταβατική περιοχή) ο αριθμός Po συνεχίζει να αυξάνεται αλλά με μικρότερο ρυθμό, ενώ για $\delta \geq 10$ (περιοχή ολίσθησης) καθώς αυξάνεται το δ, ο αριθμός Po αυξάνεται πολύ αργά έως ότου προσεγγίσει ασυμπτωτικά τα αναλυτικά αποτελέσματα του υδροδυναμικού ορίου (τελευταία γραμμή στους Πίνακες 5.3 - 5.5) [116]. Η συμπεριφορά αυτή παρατηρείται για οποιαδήποτε τιμή του λόγου ακτίνων R_1/R_2 καθώς και του συντελεστή διαχυτικής ανάκλασης α. Τέλος, καθώς ο λόγος R_1/R_2 αυξάνει ο αριθμός Po επίσης αυξάνει, ενώ καθώς μειώνεται ο συντελεστής διαχυτικής ανάκλασης α ο αριθμός Po μειώνεται.

Στον Πίνακα 5.6 παρουσιάζονται αποτελέσματα του αριθμού Po για δυο τριγωνικούς και δύο τραπεζοειδείς αγωγούς σε όλο το εύρος της παραμέτρου αραιοποίησης δ. Παρατηρείται, ότι τα αριθμητικά αποτελέσματα παρουσιάζουν την ίδια ποιοτική συμπεριφορά σε σχέση με τους προηγούμενους αγωγούς. Τονίζεται ότι η μεταβολή του αριθμού Po συναρτήσει της διατομής A του αγωγού εξαρτάται από το εύρος του A. Για μικρές τιμές του δ ο αριθμός Po μεταβάλλεται ελάχιστα καθώς μεταβάλλεται το A, ενώ η μεταβολή του αριθμού Po είναι σημαντική για μεγάλες τιμές του δ. Γενικά, η επίδραση της διατομής του αγωγού στον αριθμό Po αυξάνεται καθώς κινούμαστε στο συνεχές όριο. Επίσης, παρατηρείται το γεγονός ότι οι αριθμοί Po για διαφορετικά A είναι μεγαλύτεροι ή μικρότεροι με τον αντίστοιχο αριθμό Po για κυλινδρικό αγωγό.

5.2 Ακριβής υδραυλική διάμετρος μη κυκλικών αγωγών

Η ιδέα του υπολογισμού της ακριβής διαμέτρου είναι ευρέως γνωστή στο πεδίο της κλασσικής ρευστομηχανικής [10]. Σύμφωνα με θεμελιώδεις αρχές, ο συντελεστής τριβής ενός μη κυλινδρικού αγωγού είναι περίπου ίσος με τον συντελεστή τριβής κυλινδρικού αγωγού με

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



Σχήμα 5.1: Αριθμοί Poiseuille για κυλινδρικό αγωγό και δύο ορθογώνιους αγωγούς με λόγο πλευρών $H/W = 1$ και $H/W = 0.5$ (πάνω), για διάφορους ορθογώνιους (μέση) και για δακτυλοειδείς (κάτω) αγωγούς ως προς την παράμετρο αραιοποίησης δ και $\alpha = 1$.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

διάμετρο $D_h = 4A'/\Gamma'$. Η υπόθεση αυτή αποτελεί μια προσέγγιση, διότι η μέση ταχύτητα σε έναν μη κυλινδρικό αγωγό δεν είναι πάντοτε ίση με την αντίστοιχη μέση ταχύτητα κυλινδρικού αγωγού διαμέτρου D_h. Στην παρούσα παράγραφο θα περιγραφεί η διαδικασία υπολογισμού της ακριβούς διαμέτρου D_h^{exact} ενώ τα αποτελέσματα που προκύπτουν καλύπτουν όλο το εύρος της παραμέτρου αραιοποίησης δ. Ειδικότερα τα αριθμητικά αποτελέσματα κοντά στο υδροδυναμικό όριο ($\delta \to \infty$) συγκρίνονται με αντίστοιχα αποτελέσματα, τα οποία είναι διαθέσιμα στην διεθνή βιβλιογραφία [10] για τον έλεγχο της ορθότητας των αποτελεσμάτων.

Ορίζουμε ως Po_{tube} τον αριθμό Poiseuille κυλινδρικού αγωγού με διάμετρο D_h, ενώ Po είναι ο αριθμός Poiseuille για οποιονδήποτε μη κυλινδρικό αγωγό. Ο αριθμός Poiseuille προκύπτει κάνοντας χρήση της Εξ.(5.10) με την βασική προϋπόθεση την ύπαρξη των αντίστοιχων κινητικών αποτελεσμάτων.

Η Εξ.(5.4) γράφεται στην μορφή

$$Po_{tube} = \frac{8\bar{\tau}'_w D_h^{exact}}{\mu_0 \bar{u}'} \tag{5.11}$$

όπου $\bar{u}'$ και τ'_w είναι η μέση ταχύτητα και διατμητική τάση ενός μη κυλινδρικού αγωγού. Η Εξ.(5.11) έπιλύεται ως προς την υδραυλική διάμετρο ως

$$D_h^{exact} = Po_{tube} \frac{\mu \bar{u}'}{8\bar{\tau}'_w} \tag{5.12}$$

και στην συνέχεια αδιαστατοποιείται ως

$$D_h^{exact} = Po_{tube} \frac{\mu \upsilon_0 X_P \bar{u}}{16 P_0 X_P \bar{\tau}_w} = Po_{tube} \frac{\bar{u} D_h}{16 \delta \bar{\tau}_w} \tag{5.13}$$

Κάνοντας χρήση της Εξ.(5.10) η Εξ.(5.13) γράφεται στην μορφή

$$\frac{D_h^{exact}}{D_h} = \frac{1}{8\bar{\tau}_w} \frac{Po_{tube}}{Po} \tag{5.14}$$

Στην συνέχεια βασιζόμενη στην Εξ.(5.10) και χρησιμοποιώντας ότι

$$\frac{A}{\Gamma} = \frac{1}{4} \frac{D_h^{exact}}{D_h} \tag{5.15}$$

η αδιάστατη μέση διατμητική τάση γίνεται

$$\bar{\tau}_w = \frac{1}{8} \frac{D_h^{exact}}{D_h} \tag{5.16}$$

Αντικαθιστώντας την Εξ.(5.16) στην Εξ.(5.14) προκύπτει ότι

$$\frac{D_h^{exact}}{D_h} = \sqrt{\frac{Po_{tube}}{Po}}. \tag{5.17}$$

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Η Εξ.(5.17) χαρακτηρίζεται για την απλότητα και την γενικότητα της, ενώ ισχύει για όλο το εύρος της παραμέτρου αραιοποίησης. Χρησιμοποιώντας την Εξ.(5.13) είναι δυνατή η μελέτη του σφάλματος, το οποίο εισάγεται κατά την χρήση της υδραυλικής διαμέτρου σε μη κυλινδρικούς αγωγούς. Το αποτέλεσμα αυτό αποκτά μεγαλύτερη σημασία σε περιπτώσεις ροών εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας σε σύγκριση με ροές στο συνεχές όριο. Στην πρώτη περίπτωση, η πολυπλοκότητα και το απαιτούμενο υπολογιστικό κόστος για την επίτευξη αξιόπιστων αποτελεσμάτων είναι σαφώς πιο μεγάλο εν συγκρίσει με την δεύτερη περίπτωση, με αποτέλεσμα η χρήση της ιδέας της υδραυλικής διαμέτρου να είναι πιο προσιτή κυρίως κατά την μελέτη τεχνολογικών εφαρμογών.

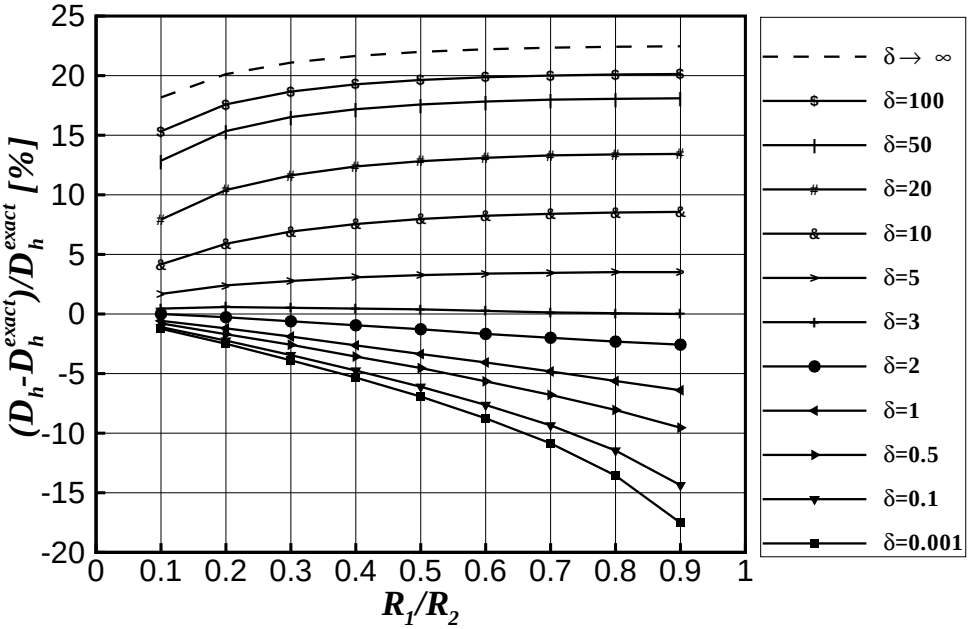
Στις επόμενες παραγράφους θα παρουσιασθούν αποτελέσματα της ακριβούς υδραυλικής διαμέτρου για δακτυλοειδείς και ορθογώνιους αγωγούς σε όλο το εύρος της παραμέτρου αραιοποίησης δ.

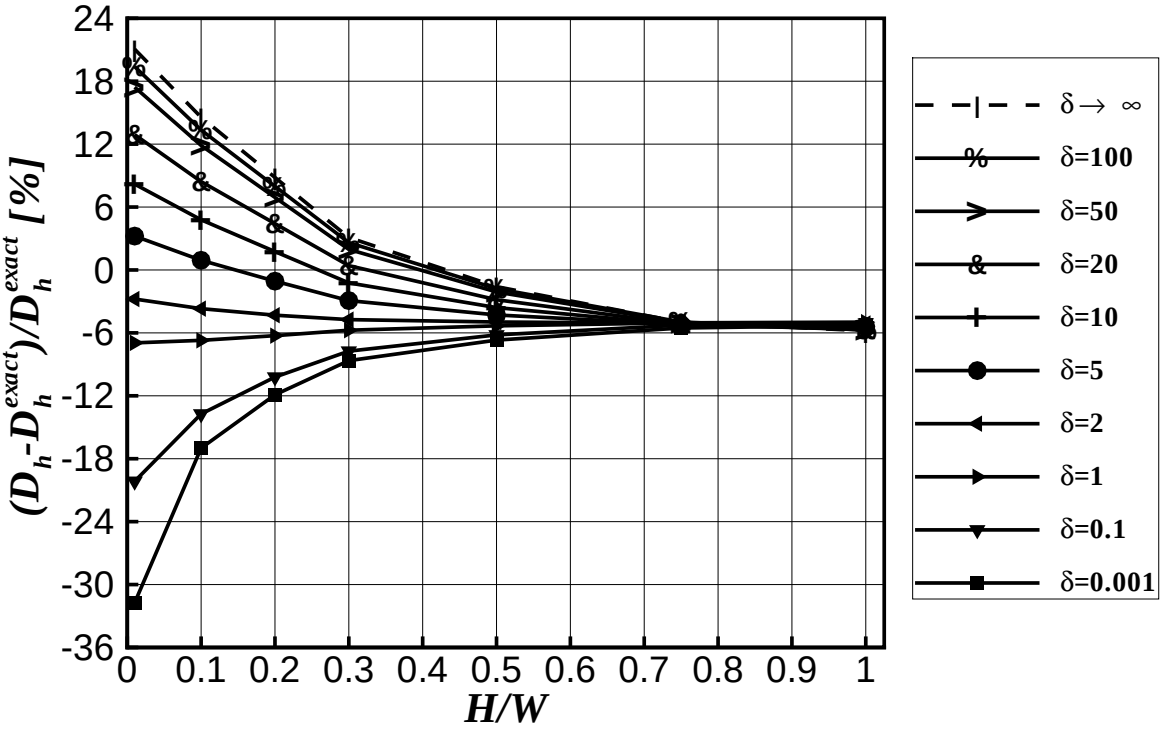
5.2.1 Ακριβής υδραυλική διάμετρος σε δακτυλοειδείς αγωγούς

Εάν το συγκεκριμένο πρόβλημα επιλυθεί αριθμητικά, εφαρμόζοντας την μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων είναι δυνατόν να υπολογιστούν οι κατανομές ταχυτήτων καθώς και οι αδιάστατες παροχές G για διάφορες τιμές του λόγου R_1/R_2. Στην συνέχεια, κάνοντας χρήση της παραπάνω πληροφορίας και εφαρμόζοντας την μεθοδολογία που περιγράφεται στην Παράγραφο 5.2 υπολογίζεται το σχετικό σφάλμα στην υδραυλική διάμετρο του αγωγού σε σχέση με την ακριβή τιμή της. Στο Σχ. 5.2 (πάνω) απεικονίζονται τα αποτελέσματα του σχετικού σφάλματος συναρτήσει του λόγου R_1/R_2, με οριακές συνθήκες πλήρους διάχυσης ($\alpha = 1$) και για όλο το εύρος της παραμέτρου αραιοποίησης δ. Από το Σχ. 5.2 (πάνω), διαπιστώνεται ότι για κάθε τιμή του λόγου R_1/R_2, το μέγιστο σχετικό σφάλμα είναι θετικό και παρουσιάζεται στο υδροδυναμικό όριο καθώς ($\delta \to \infty$). Το συγκεκριμένο γράφημα είναι σε πλήρη συμφωνία με το αντίστοιχο που παρουσιάζεται στο κλασσικό βιβλίο ρευστομηχανικής [10]. Καθώς η αραιοποίηση της ροής αυξάνει, το σχετικό σφάλμα μειώνεται ως και για $\delta \simeq 4$. Για $\delta \leq 3$ το σχετικό σφάλμα είναι αρνητικό και αυξάνεται καθώς προσεγγίζεται η ελεύθερη μοριακή περιοχή ($\delta = 10^{-3}$). Επίσης, στο συγκεκριμένο γράφημα παρατηρείται για κάθε τιμή της παραμέτρου αραιοποίησης το σχετικό σφάλμα (θετικό ή αρνητικό) αυξάνει καθώς ο λόγος R_1/R_2 αυξάνει. Το μέγιστο θετικό και αρνητικό σφάλμα παρατηρείται για $R_1/R_2 = 0.9$ και $\delta \to \infty$ και $\delta = 10^{-3}$ αντίστοιχα με τιμές $+22.5\%$ και -17.5% αντίστοιχα. Τέλος, σημειώνεται ότι για μικρές τιμές του λόγου R_1/R_2 και $\delta \leq 5$ το σχετικό σφάλμα κυμαίνεται μεταξύ $\pm 5\%$.

Βασικό στοιχείο που προκύπτει από την παραπάνω ανάλυση είναι ότι γενικά συμπεράσματα δεν μπορούν να διατυπωθούν αλλά το σίγουρο είναι ότι σε κάθε περίπτωση του λόγου R_1/R_2 το σφάλμα που εισάγεται είναι μικρότερο σε αραιοποιημένες ροές απ' ότι στις αντίστοιχες στο υδροδυναμικό όριο.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212





Σχήμα 5.2: Σχετικό σφάλμα στην υδραυλική διάμετρο σε σύγκριση με την ακριβή υδραυλική διάμετρο για δακτυλοειδή αγωγό με λόγο ακτίνων R_1/R_2 (πάνω) και ορθογώνιο αγωγό με λόγο πλευρών H/W (κάτω), με οριακές συνθήκες πλήρους διάχυσης $a = 1$ και διάφορες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

5.2.2 Ακριβής υδραυλική διάμετρος σε ορθογώνιους αγωγούς

Επιλύοντας αριθμητικά την αντίστοιχη γραμμική κινητική εξίσωση και εφαρμόζοντας την μεθοδολογία της Παραγράφου 5.2, τα αποτελέσματα που προκύπτουν για το σχετικό σφάλμα που εισάγεται στην υδραυλική διάμετρο του αγωγού απεικονίζονται στο Σχ. 5.2 (κάτω). Παρατηρείται, ότι καθώς αυξάνεται η παράμετρος αραιοποίησης, το σχετικό σφάλμα επίσης αυξάνεται. Η καμπύλη που αντιστοιχεί στο υδροδυναμικό όριο ($\delta \rightarrow \infty$) είναι σε πλήρη συμφωνία με την αντίστοιχη καμπύλη που παρουσιάζεται στο [10]. Σε κάθε περίπτωση του λόγου H/W του αγωγού, το σφάλμα κυμαίνεται μεταξύ -34 και 20%. Στην παρούσα περίπτωση, όπως και στην περίπτωση του δακτυλοειδούς αγωγού, γενικά συμπεράσματα δεν μπορούν να εξαχθούν για την τάση του σφάλματος, το οποίο όπως προκύπτει, εξαρτάται άμεσα από τους λόγους H/W ή R_1/R_2 των αγωγών και της παραμέτρου αραιοποίησης δ.

Για την ολοκληρωμένη μελέτη του σφάλματος σε ορθογώνιους αγωγούς, παρουσιάζεται στον Πίνακα 5.7 ο λόγος D_h^{exact}/D_h συναρτήσει της παραμέτρου αραιοποίησης δ. Συγκεκριμένα το σφάλμα στους ορθογώνιους αγωγούς παραμένει σταθερό και μικρό ιδιαίτερα στις περιπτώσεις όπου για $\gamma = H/W$ =1 και 0.5. Για τις περιπτώσεις όπου $\gamma = H/W$ =0.1 και 0.01 το σφάλμα είναι μικρό στην μεταβατική περιοχή και αυξάνεται σημαντικά στην ελεύθερη μοριακή περιοχή και την περιοχή ολίσθησης.

5.2.3 Ακριβής υδραυλική διάμετρος σε τριγωνικούς και τραπεζοειδείς αγωγούς

Τα αποτελέσματα του λόγου D_h^{exact}/D_h για δύο διαφορετικούς τριγωνικούς αγωγούς παρουσιάζονται στον Πίνακα 5.8. Παρατηρείται, ότι το σφάλμα και για τις δύο περιπτώσεις αγωγών είναι μικρό και της ίδιας τάξης μεγέθους που κυμαίνεται στο 10%. Τα αποτελέσματα για δύο διαφορετικούς τραπεζοειδείς αγωγούς παρουσιάζονται στον Πίνακα 5.8, όπου τα αποτελέσματα στο εισαγόμενο σφάλμα παρουσιάζουν σημαντικές διαφορές μεταξύ των δύο αγωγών. Στον ισοσκελή τραπεζοειδή αγωγό με $\phi = 63.43^o$ το σφάλμα είναι αρκετά μικρό και σταθερό σε όλο το εύρος του δ, ενώ στον δεύτερο αγωγό με $\phi = 54.74^o$ η συμπεριφορά του σφάλματος είναι όμοια με την περίπτωση ορθογωνίου αγωγού με λόγο πλευρών $\gamma = H/W$ =0.1. Τα αποτελέσματα στο υδροδυναμικό όριο ($\delta \rightarrow \infty$) είναι σε πλήρη συμφωνία με τα αποτελέσματα του άρθρου [119] όπου παρουσιάζονται αποτελέσματα κάνοντας χρήση των υδροδυναμικών εξισώσεων Navier-Stokes.

Τονίζεται, ότι η παρούσα ανάλυση και τα αριθμητικά αποτελέσματα θα αποτελέσουν χρήσιμο εργαλείο σε συγκρίσεις με αντίστοιχα πειραματικά δεδομένα καθώς και στον σχεδιασμό και βελτιστοποίηση μικροσυσκευών. Η παραπάνω μεθοδολογία είναι δυνατόν να επεκταθεί σε αγωγούς με διαφορετικές διατομές με δεδομένο ότι τα αντίστοιχα κινητικά αποτελέσματα είναι διαθέσιμα. Επίσης, είναι δυνατή η εφαρμογή του μοντέλου αλληλεπίδρασης αερίου-τοιχώματος θεωρώντας $\alpha \neq 1$.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Πίνακας 5.1: Αριθμός Po σε σχέση με την παράμετρο αραιοποίησης δ, για κυλινδρικό αγωγό και α=1, 0.85, 0.7.

	Po		
δ	$\alpha = 1$	$\alpha = 0.85$	$\alpha = 0.7$
10^{-3}	0.00533	0.00394	0.00288
10^{-2}	0.0538	0.0401	0.0294
0.1	0.559	0.425	0.319
0.3	1.73	1.43	1.02
0.5	2.90	2.28	1.75
1	5.77	4.60	3.58
1.5	8.46	6.83	5.36
2	11.0	8.93	7.06
3	15.5	12.8	10.2
4	19.3	16.1	13.1
5	22.6	19.1	15.7
6	25.5	21.8	18.0
7	28.1	24.1	20.1
8	30.3	26.3	22.1
9	32.3	28.2	23.9
10	34.1	29.9	25.5
11	35.6	31.5	27.0
13	38.4	34.3	29.7
15	40.7	36.6	32.1
20	44.9	41.1	36.7
30	50.0	46.8	42.9
40	53.0	50.2	46.8
50	54.9	52.5	49.5
100	59.1	57.7	55.8
200	61.5	60.7	59.7
500	63.0	62.6	62.3
.	.	.	.
.	.	.	.
∞	64	64	64

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Πίνακας 5.2: Αριθμός Po σε σχέση με την παράμετρο αραιοποίησης δ, για ορθογώνιο αγωγό με λόγο πλευρών $H/W = 1, 0.5$ και 0.1 και α=1, 0.85, 0.7.

	Po								
	α=1			α=0.85			α=0.7		
	H/W			H/W			H/W		
δ	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1
10^{-3}	0.00478	0.00377	0.00287	0.00464	0.00365	0.00278	0.00367	0.00285	0.00215
10^{-2}	0.0483	0.0383	0.0293	0.00464	0.00365	0.00278	0.0376	0.0294	0.0224
0.1	0.504	0.405	0.316	0.492	0.395	0.308	0.416	0.333	0.260
0.3	1.56	1.27	1.00	1.53	1.25	0.98	1.37	1.11	0.88
0.5	2.62	2.15	1.71	2.59	2.12	1.68	2.39	1.95	1.55
1	5.21	4.32	3.47	5.17	4.28	3.43	5.02	4.12	3.29
1.5	7.63	6.37	5.15	7.62	6.35	5.12	7.64	6.30	5.05
2	9.88	8.30	6.74	9.91	8.30	6.73	10.2	8.42	6.77
3	13.9	11.8	9.67	14.0	11.9	9.70	14.9	12.4	10.0
4	17.3	14.8	12.3	17.6	15.0	12.4	19.2	16.1	13.1
5	20.3	17.5	14.6	20.7	17.8	14.8	23.1	19.5	15.9
6	22.8	19.8	16.7	23.5	20.3	17.0	26.5	22.5	18.5
7	25.1	21.9	19.0	25.9	22.5	19.0	29.7	25.3	21.0
8	27.0	23.8	21.2	28.0	24.5	20.8	32.5	27.9	23.2
9	28.8	25.5	22.8	29.9	26.3	22.5	35.1	30.3	25.4
10	30.4	27.0	24.3	31.7	28.0	24.0	37.4	32.5	27.3
11	31.8	28.4	25.6	33.2	29.5	25.4	39.6	34.5	29.2
13	34.2	30.8	29.1	35.9	32.1	28.0	43.3	38.1	32.5
15	36.2	32.8	31.1	38.1	34.4	30.2	46.5	41.3	35.5
20	39.9	36.8	35.1	42.4	38.8	34.7	52.8	47.5	41.7
30	44.5	41.7	40.2	47.6	44.4	40.7	60.7	55.9	50.3
40	47.1	44.7	43.4	50.6	47.9	44.5	65.5	61.2	56.1
50	48.8	46.7	45.5	52.6	50.2	47.2	68.7	64.9	60.2
100	52.6	51.3	52.0	57.1	55.6	53.7	76.0	73.6	70.4
200	54.7	54.0	69.2	59.5	58.7	57.6	80.1	78.8	76.9
500	56.0	55.7	55.3	61.1	60.8	60.3	82.8	82.2	81.4
1000	56.4	56.3	56.1	61.6	61.5	61.2	83.7	83.4	83.0
.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
∞	56.9	56.9	56.9	62.2	62.2	62.2	84.7	84.7	84.7

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Πίνακας 5.3: Αριθμός Po δακτυλοειδών αγωγών σε σχέση με την παράμετρο αραιοποίησης δ και του λόγου ακτίνων R_1/R_2 με α=1.

δ	R_1/R_2									
	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
10^{-3}	0.533(-2)	0.519(-2)	0.506(-2)	0.492(-2)	0.477(-2)	0.461(-2)	0.443(-2)	0.423(-2)	0.398(-2)	0.362(-2)
10^{-2}	0.540(-1)	0.524(-1)	0.511(-1)	0.497(-1)	0.483(-1)	0.467(-1)	0.449(-1)	0.430(-1)	0.405(-1)	0.371(-1)
0.1	0.559	0.547	0.535	0.522	0.508	0.493	0.477	0.460	0.439	0.410
0.3	1.727	1.695	1.660	1.626	1.589	1.550	1.511	1.467	1.415	1.353
0.5	2.90	2.857	2.805	2.755	2.699	2.646	2.584	2.522	2.454	2.375
1	5.77	5.706	5.634	5.556	5.472	5.391	5.312	5.229	5.141	5.057
1.5	8.46	8.415	8.345	8.264	8.174	8.086	8.000	7.916	7.833	7.762
2	11.0	10.974	10.914	10.840	10.767	10.695	10.610	10.540	10.471	10.417
3	15.5	15.605	15.645	15.625	15.605	15.584	15.544	15.504	15.484	15.464
5	22.6	23.392	23.725	23.895	24.038	24.125	24.184	24.213	24.242	24.242
10	34.1	36.969	38.204	38.948	39.409	39.722	39.920	40.040	40.120	40.161
20	44.9	52.288	54.720	55.944	56.697	57.143	57.430	57.637	57.720	57.762
50	54.9	69.930	73.046	74.543	75.386	75.901	76.220	76.423	76.511	76.570
100	59.1	78.663	81.783	83.281	84.140	84.656	84.980	85.179	85.306	85.361
200	61.5	83.837	86.874	88.362	89.220	89.749	90.081	90.286	90.406	90.467
500	63.0	87.073	90.08	91.572	92.437	92.971	93.306	93.514	93.636	93.697
1000	63.9	88.207	91.202	92.694	93.561	94.097	94.433	94.642	94.764	94.826
.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
∞	64	89.372	92.352	93.845	94.713	95.250	95.588	95.798	95.920	95.982

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Πίνακας 5.4: Αριθμός Po δακτυλοειδών αγωγών σε σχέση με την παράμετρο αραιοποίησης δ και του λόγου ακτίνων R_1/R_2 με α=0.85.

δ	R_1/R_2									
	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
10^{-3}	0.394(-2)	0.385(-2)	0.375(-2)	0.364(-2)	0.353(-2)	0.341(-2)	0.328(-2)	0.313(-2)	0.295(-2)	0.269(-2)
10^{-2}	0.400(-1)	0.391(-1)	0.381(-1)	0.370(-1)	0.360(-1)	0.348(-1)	0.335(-1)	0.321(-1)	0.303(-1)	0.278(-1)
0.1	0.425	0.417	0.408	0.398	0.388	0.378	0.367	0.354	0.339	0.319
0.3	1.339	1.316	1.292	1.267	1.242	1.216	1.187	1.156	1.123	1.081
0.5	2.275	2.245	2.210	2.172	2.134	2.096	2.055	2.014	1.969	1.918
1	4.598	4.561	4.510	4.454	4.400	4.348	4.292	4.237	4.180	4.128
1.5	6.826	6.803	6.749	6.696	6.637	6.579	6.529	6.472	6.417	6.376
2	8.929	8.939	8.899	8.859	8.811	8.762	8.715	8.667	8.621	8.584
3	12.752	12.876	12.917	12.917	12.903	12.889	12.876	12.848	12.834	12.821
5	19.120	19.685	19.940	20.101	20.182	20.263	20.305	20.346	20.367	20.367
10	29.918	32.129	33.113	33.670	34.043	34.305	34.453	34.572	34.632	34.662
20	41.110	47.087	49.110	50.188	50.826	51.216	51.447	51.613	51.713	51.746
50	52.507	65.789	68.729	70.126	70.922	71.403	71.710	71.891	71.994	72.046
100	57.720	75.887	78.942	80.402	81.251	81.749	82.068	82.271	82.389	82.440
200	60.73	82.165	85.212	86.696	87.551	88.076	88.41	88.610	88.729	88.789
500	62.31	86.342	89.357	90.848	91.712	92.245	92.58	92.787	92.909	92.967
1000	63.73	87.831	90.830	92.322	93.189	93.723	94.06	94.268	94.390	94.452
.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
∞	64	89.372	92.352	93.845	94.713	95.250	95.588	95.798	95.920	95.982

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Πίνακας 5.5: Αριθμός Po δακτυλοειδών αγωγών σε σχέση με την παράμετρο αραιοποίησης δ και του λόγου ακτίνων R_1/R_2 με α=0.7.

δ	R_1/R_2									
	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
10^{-3}	0.287(-2)	0.281(-2)	0.273(-2)	0.266(-2)	0.258(-2)	0249(-2)	0.240(-2)	0.229(-2)	0.215(-2)	0.196(-2)
10^{-2}	0.293(-1)	0.287(-1)	0.280(-1)	0.272(-1)	0.265(-1)	0.256(-1)	0.247(-1)	0.237(-1)	0.224(-1)	0.206(-1)
0.1	0.319	0.313	0.307	0.300	0.293	0.286	0.278	0.269	0.259	0.246
0.3	1.020	1.005	0.988	0.971	0.954	0.935	0.917	0.896	0.874	0.848
0.5	1.748	1.730	1.705	1.681	1.656	1.630	1.604	1.576	1.547	1.515
1	3.578	3.559	3.527	3.490	3.457	3.422	3.387	3.353	3.317	3.287
1.5	5.357	5.352	5.324	5.286	5.254	5.217	5.181	5.150	5.119	5.089
2	7.061	7.086	7.067	7.042	7.011	6.981	6.950	6.926	6.897	6.879
3	10.230	10.318	10.354	10.363	10.363	10.354	10.345	10.336	10.318	10.318
5	15.662	16.077	16.260	16.380	16.447	16.502	16.543	16.556	16.584	16.584
10	25.526	27.137	27.836	28.269	28.551	28.736	28.860	28.944	28.986	29.007
20	36.731	41.322	42.941	43.812	44.321	44.643	44.868	44.994	45.045	45.070
50	49.480	60.790	63.452	64.725	65.466	65.898	66.181	66.335	66.445	66.467
100	55.843	72.346	75.287	76.702	77.504	78.003	78.309	78.493	78.601	78.647
200	59.67	79.924	82.981	84.46	85.308	85.829	86.155	86.357	86.475	86.535
500	62.31	85.337	88.361	89.851	90.713	91.244	91.577	91.784	91.905	91.966
1000	63.73	87.308	90.312	91.804	92.67	93.204	93.54	93.748	93.87	93.931
.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
∞	64	89.372	92.352	93.845	94.713	95.250	95.588	95.798	95.920	95.982

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Πίνακας 5.6: Αριθμός Po σε σχέση με την παράμετρο αραιοποίησης δ, για διάφορους τριγωνικούς και τραπεζοειδείς αγωγούς με α=1.

δ	Po			
	Equilateral $\phi = 60^o$	Isosceles $\phi = 54.74^o$	Isosceles trapezoidal $h/B = 0.5$, $\phi = 63.43^o$	Isosceles trapezoidal $h/B = 0.78$, $\phi = 54.74^o$
10^{-3}	0.00431	0.00429	0.00456	0.00393
10^{-2}	0.0437	0.0434	0.0461	0.04
0.1	0.458	0.456	0.483	0.432
0.3	1.43	1.42	1.5	1.39
0.5	2.41	2.4	2.53	2.4
1	4.8	4.78	5.05	4.94
1.5	7.05	7.03	7.41	7.43
2	9.14	9.11	9.62	9.83
3	12.9	12.8	13.6	14.3
4	16.1	16	16.9	18.2
5	18.9	18.8	19.8	21.8
6	21.3	21.2	22.4	25
7	23.4	23.3	24.7	27.8
8	25.3	25.2	26.7	30.3
9	27	26.8	28.5	32.6
10	28.4	28.3	30	34.7
20	37.4	37.4	39.7	48.3
30	41.7	41.6	44.3	55
40	44.2	44.2	47	59.1
50	45.9	45.8	48.8	61.9
100	49.7	49.6	52.9	68.4
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.
∞	53.3	-	-	74.6

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Πίνακας 5.7: Λόγος ακριβούς υδραυλικής διαμέτρου προς την υδραυλική διάμετρο μη κυλινδρικού αγωγού συναρτήσει της παραμέτρου αραιοποίησης δ για ορθογώνιους αγωγούς με α=1.

D_h^{exact}/D_h				
	Orthogonal ($\gamma = H/W$)			
δ	$\gamma = 1$	$\gamma = 0.5$	$\gamma = 0.1$	$\gamma = 0.01$
10^{-3}	1.05	1.07	1.2	1.46
10^{-2}	1.05	1.07	1.19	1.41
0.1	1.05	1.07	1.16	1.25
0.3	1.05	1.06	1.12	1.16
0.5	1.05	1.06	1.1	1.12
1	1.05	1.06	1.07	1.07
1.5	1.05	1.05	1.05	1.05
2	1.05	1.05	1.04	1.03
3	1.05	1.05	1.02	1.00
4	1.05	1.05	1.00	0.983
5	1.05	1.04	0.991	0.969
6	1.06	1.04	0.981	0.957
7	1.06	1.04	0.973	0.947
8	1.06	1.04	0.966	0.938
9	1.06	1.04	0.96	0.931
10	1.06	1.04	0.954	0.924
20	1.06	1.03	0.922	0.886
30	1.06	1.02	0.907	0.868
40	1.06	1.02	0.899	0.858
50	1.06	1.02	0.894	0.851
100	1.06	1.02	0.882	0.837
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.
∞	1.06	1.01	0.869	0.822

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Πίνακας 5.8: Λόγος ακριβούς υδραυλικής διαμέτρου προς την υδραυλική διάμετρο μη κυλινδρικού αγωγού συναρτήσει της παραμέτρου αραιοποίησης δ για διάφορους τριγωνικούς και τραπεζοειδείς αγωγούς με α=1.

δ	D_h^{exact}/D_h			
	Equilateral $\phi = 60^o$	Isosceles $\phi = 54.74^o$	Isosceles trapezoidal $h/B = 0.5$, $\phi = 63.43^o$	Isosceles trapezoidal $h/B = 0.78$, $\phi = 54.74^o$
10^{-3}	1.11	1.11	1.08	1.16
10^{-2}	1.11	1.11	1.08	1.16
0.1	1.1	1.11	1.07	1.14
0.3	1.1	1.1	1.07	1.11
0.5	1.1	1.1	1.07	1.1
1	1.1	1.1	1.07	1.08
1.5	1.09	1.1	1.07	1.07
2	1.09	1.1	1.07	1.06
3	1.09	1.1	1.07	1.04
4	1.09	1.1	1.07	1.03
5	1.09	1.1	1.07	1.02
6	1.09	1.1	1.07	1.01
7	1.09	1.1	1.06	1
8	1.09	1.1	1.06	1
9	1.09	1.1	1.06	0.995
10	1.09	1.1	1.06	0.99
20	1.09	1.1	1.06	0.964
30	1.09	1.1	1.06	0.953
40	1.09	1.1	1.06	0.946
50	1.09	1.1	1.06	0.942
100	1.09	1.1	1.05	0.930
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.
∞	1.09	-	-	0.926

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Κεφαλαιο 6

Εισαγωγη στις στοχαστικες διαδικασιες

6.1 Εισαγωγή

Τα τελευταία χρόνια έντονο είναι το ενδιαφέρον της επιστημονικής κοινότητας για την επίλυση φαινομένων ροής και μεταφοράς στην μεταβατική περιοχή. Όπως έχουμε αναφέρει, στην περιοχή αυτή η μέση ελεύθερη διαδρομή είναι συγκρίσιμη με το χαρακτηριστικό μήκος του εκάστοτε προβλήματος με αποτέλεσμα, η θεωρία του συνεχούς μέσου να καταρρέει και να είναι απαραίτητη η χρήση εναλλακτικών μεθοδολογιών επίλυσης. Μια από τις μεθοδολογίες επίλυσης είναι η χρήση της κινητικής θεωρίας, η οποία βασίζεται στην θεμελιώδη εξίσωση Boltzmann. Η μαθηματική δυσκολία επίλυσης της εν λόγω εξίσωσης αποκλείει την επίτευξη κλειστών αναλυτικών λύσεων. Για τον λόγο αυτό αναπτύχθηκε η μέθοδος Direct Simulation Monte Carlo (DSMC), η οποία παρακάμπτει την επίλυση της εξίσωσης Boltzmann. Στο παρόν Κεφάλαιο περιγράφεται η φιλοσοφία της μεθόδου DSMC, ενώ στα κεφάλαια που ακολουθούν (Κεφάλαια 7-9) δίδονται τρεις διαφορετικές εφαρμογές της μεθόδου.

6.2 Η Μέθοδος DSMC

Η πρώτη στοχαστική μέθοδος που αναπτύχθηκε ήταν η μέθοδος Test Particle Monte Carlo [121], η οποία εφαρμόζεται για την μοντελοποίηση ροών χωρίς την παρουσία ενδομοριακών συγκρούσεων. Η συγκεκριμένη μέθοδος αναπτύχθηκε για την μοντελοποίηση ροών σε πολύπλοκες γεωμετρίες. Κατά την μέθοδο αυτή, μοντελοποιείται ένας μεγάλος αριθμός μοριακών τροχιών και υπολογίζεται ο λόγος των σωματιδίων που εξέρχονται από το πεδίο, προς το σύνολο των μοντελοποιημένων σωματιδίων, γνωστός και ως transmission probability. Η μοντελοποίηση των τροχιών είναι ανεξάρτητη του χρόνου, ενώ λαμβάνονται υπόψη μόνο οι αλληλεπιδράσεις αερίου - τοιχώματος.

Μια εναλλακτική μέθοδος προκύπτει με την εισαγωγή της παραμέτρου του χρόνου και την ταυτόχρονη μοντελοποίηση των μοριακών τροχιών στο χρονικό αυτό διάστημα με την χρήση

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

ηλεκτρονικού υπολογιστή. Η μέθοδος αυτή είναι γνωστή ως μέθοδος Direct Simulation Monte Carlo και χρησιμοποιείται για την μοντελοποίηση αραιών αερίων [14].

Η βασική προσέγγιση της μεθόδου DSMC έγκειται στον διαχωρισμό της μοριακής κίνησης από τις μοριακές συγκρούσεις κατά την διάρκεια μικρού χρονικού βήματος Δt. Όλα τα σωματίδια διανύουν συγκεκριμένη απόσταση που αντιστοιχεί στο παραπάνω χρονικό βήμα, ενώ στην συνέχεια ακολουθεί η μοντελοποίηση των μοριακών συγκρούσεων μεταξύ δύο τυχαία επιλεγμένων σωματιδίων του ιδίου κελιού. Το χρονικό βήμα Δt πρέπει να είναι μικρότερο από τον μέσο χρόνο σύγκρουσης. Η μοριακή κίνηση πραγματοποιείται με απλές εξισώσεις κίνησης, ενώ απαραίτητη είναι η ταξινόμηση των σωματιδίων σε κελιά και υποκελιά ώστε οι μοριακές συγκρούσεις να πραγματοποιούνται μεταξύ γειτονικών μορίων. Η στοχαστική διαδικασία επιλογής αντιπροσωπευτικού ζεύγους σωματιδίων για την μοντελοποίηση των μοριακών συγκρούσεων βασίζεται άμεσα σε σχέσεις που πηγάζουν από την κινητική θεωρία. Για τον λόγο αυτό η μέθοδος DSMC εμφανίζει τους ίδιους περιορισμούς με την εξίσωση Boltzmann. Οι περιορισμοί είναι η υπόθεση του μοριακού χάους και η απαίτηση αραιών αερίων.

Η χωρική διακριτοποίηση σε δίκτυο κελιών πραγματοποιείται μόνο στον φυσικό χώρο, ενώ ο χώρος των μικροσκοπικών ταχυτήτων περιλαμβάνει τις τρεις συνιστώσες της μοριακής ταχύτητας. Ο φυσικός χώρος χρησιμοποιείται στην διαδικασία επιλογής του ζεύγους σωματιδίων κατά την μοριακή σύγκρουση καθώς και στον υπολογισμό των μακροσκοπικών ποσοτήτων. Τυχόν συμμετρίες του προβλήματος είναι δυνατόν να μειώσουν τον αριθμό των διαστάσεων των χωρικών κελιών, καθώς και τον αριθμό των χωρικών συντεταγμένων για κάθε σωματίδιο. Οι μοριακές συγκρούσεις αντιμετωπίζονται ως φαινόμενα τριών διαστάσεων. Τονίζεται, ότι οι χωρικές συντεταγμένες και οι μοριακές ταχύτητες μεταβάλλονται συνεχώς, ενώ η διατήρηση της μάζας, ορμής και ενέργειας επιβάλλονται κατά τις μοριακές συγκρούσεις.

Οι οριακές συνθήκες κατά την μέθοδο DSMC επιβάλλονται σε μοριακό επίπεδο και εξαρτώνται από την συμπεριφορά των σωματιδίων και δεν έχουν την μορφή συνάρτησης κατανομής. Το γεγονός αυτό επιτρέπει την μοντελοποίηση σύνθετων γεωμετριών και διεργασιών. Η μέθοδος DSMC αφορά την μοντελοποίηση μορίων κατάλληλου φυσικού μεγέθους και ο αριθμός τους μειώνεται δραστικά υποθέτοντας ότι κάθε σωματίδιο αντιπροσωπεύει ένα δεδομένο αριθμό F_N πραγματικών μορίων. Η ποσότητα αυτή είναι συνήθως ένας μεγάλος αριθμός της τάξης του 10^{20} πραγματικών μορίων.

Οι μακροσκοπικές αρχικές συνθήκες επιβάλλονται με την μορφή αρχικής ομοιόμορφης κατανομής σωματιδίων σε όλο το πεδίο. Η ροή εξελίσσεται έχοντας ως αφετηρία την παραπάνω αρχική κατάσταση συναρτήσει του χρόνου. Όλες οι διαδικασίες μπορούν να προσδιοριστούν κατάλληλα, ώστε ο υπολογιστικός χρόνος να είναι ανάλογος του αριθμού των σωματιδίων.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

6.3 Περιοχή ισχύος της μεθόδου DSMC

Στο Σχ.6.1 απεικονίζονται οι περιοχές ισχύος διαφόρων μεθοδολογιών, συναρτήσει του χαρακτηριστικού μήκους L του συστήματος και της μέσης μοριακής απόστασης δ. Για συγκεκριμένη τιμή της μοριακής διαμέτρου d, καθώς η μέση απόσταση μεταξύ των μορίων μειώνεται έχουμε αύξηση της πυκνότητας, όπως χαρακτηριστικά φαίνεται στον οριζόντιο άξονα του Σχ.6.1. Στην περίπτωση της μοριακής δυναμικής (Molecular Dynamics), η οποία βασίζεται στις πιο θεμελιώδεις εξισώσεις, η μέθοδος ισχύει για όλο το εύρος των παραμέτρων της πυκνότητας και του χαρακτηριστικού μεγέθους.

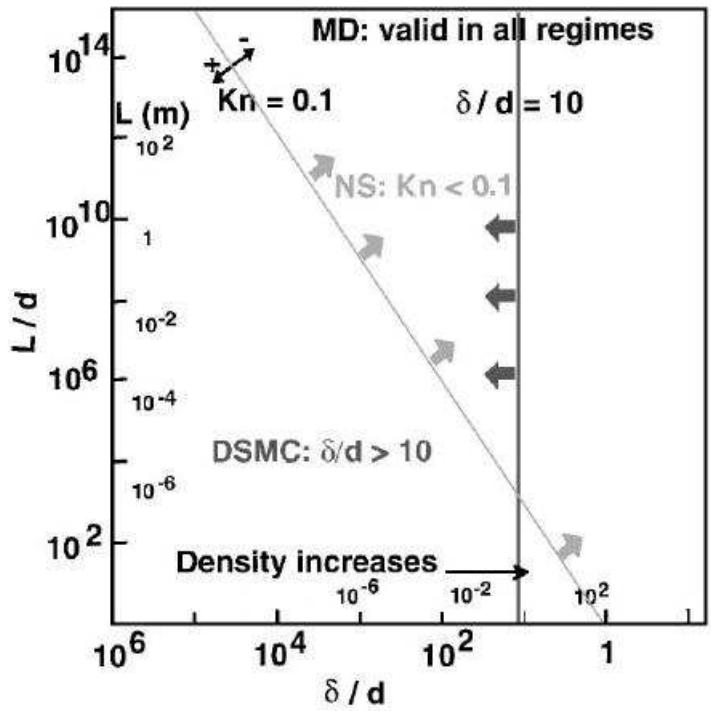
Όταν ο λόγος της μέσης μοριακής απόστασης δ προς την μοριακή διάμετρο d είναι πολύ μεγαλύτερος της μονάδας ($\delta/d \gg 1$) τότε το ρευστό ονομάζεται αραιό (dilute). Η μέθοδος DSMC, όπως και η Εξίσωση Boltzmann, είναι δυνατόν να χρησιμοποιηθεί για αραιά ρευστά όταν ο λόγος της μέσης ελεύθερης διαδρομής λ προς την μοριακή διάμετρο είναι τουλάχιστον $\lambda/d \geq 10$. Η μέθοδος DSMC αποτελεί μια στατιστική μέθοδο, η οποία είναι πολύ αποδοτική στην μεταβατική περιοχή όπου $0.1 < Kn < 10$. Η DSMC εξακολουθεί να ισχύει για μικρότερες τιμές του αριθμού Kn, έχοντας παράλληλα αρκετά αυξημένο υπολογιστικό κόστος. Όταν η μέση ελεύθερη διαδρομή του σωματιδίου είναι αρκετά μικρή σε σχέση με το χαρακτηριστικό μήκος του συστήματος, τότε το μέσο συμπεριφέρεται ως συνεχές ρευστό. Τότε οι ποσότητες της πυκνότητας, ταχύτητας και ενέργειας ορίζονται επακριβώς σε κάθε σημείο του πεδίου ροής. Η περιοχή αυτή αντιστοιχεί στην περιοχή όπου $Kn < 0.1$ και χρησιμοποιούνται οι εξισώσεις Navier-Stokes. Λόγω των διαφορετικών κριτηρίων για την χρήση των εξισώσεων N-S και της μεθόδου DSMC και οι δύο μέθοδοι ισχύουν στην τριγωνική περιοχή του Σχ. 6.1 όπου $\delta/d > 10$ και $Kn < 0.1$ [18].

6.4 Μοντελοποίηση μοριακών συγκρούσεων

Η πιθανότητα της πραγματοποίησης μια σύγκρουσης μεταξύ ενός ζεύγους σωματιδίων είναι ανάλογη του γινομένου της σχετικής ταχύτητας c_r και της συνολικής ενεργού διατομής σ_T . Σε κάθε κελί του πεδίου ροής υπολογίζεται η μέση καθώς και η μέγιστη τιμή του γινομένου $c_r\sigma_T$ και η αποδοχή της σύγκρουσης μεταξύ των μορίων πραγματοποιείται με την μέθοδο αποδοχής - απόρριψης. Σύμφωνα με την συγκεκριμένη μέθοδο για κάθε ζεύγος σωματιδίων υπολογίζεται η πιθανότητα σύγκρουσης, η οποία ισούται με τον λόγο του γινομένου $c_r\sigma_T$ προς την μέγιστη τιμή του, στο εκάστοτε κελί. Ο απαιτούμενος υπολογιστικός χρόνος στην συγκεκριμένη διαδικασία είναι ανάλογος του τετραγώνου του αριθμού των σωματιδίων σε κάθε κελί, ενώ ο συγκεκριμένος αλγόριθμος αποτελεί μέρος ενός ευρέως διαδεδομένου μοντέλου μοριακών συγκρούσεων, γνωστό ως Non Time Counter scheme (NTC) [14].

Σύμφωνα με το μοντέλο NTC, σε ένα κελί όγκου V_c στο οποίο κάθε σωματίδιο αντιστοιχεί σε F_N πραγματικά σωματίδια, η πιθανότητα σύγκρουσης P δύο σωματιδίων στο χρονικό

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



Σχήμα 6.1: Περιοχές ισχύος συναρτήσει του χαρακτηριστικού μήκους L/d και της μέσης μοριακής απόστασης του συστήματος δ/d.

διάστημα Δt, ισούται με το πηλίκο

$$P = F_N \sigma_T c_r \Delta t / V_c. \tag{6.1}$$

Στην Εξ.(6.1) η σχετική ταχύτητα μεταβάλλεται ανάλογα με την επιλογή των σωματιδίων, ενώ η συνολική ενεργός διατομή είναι συνάρτηση της σχετικής ταχύτητας. Ο μέσος αριθμός πραγματικών σωματιδίων στο κελί είναι nV_c, ενώ ο αριθμός των μοντελοποιημένων σωματιδίων είναι $N = nV_c/F_N$, όπου n η αριθμητική πυκνότητα του αερίου. Ο συνολικός αριθμός συγκρούσεων στο κελί είναι δυνατόν να υπολογιστεί επιλέγοντας $N(N-1)/2$ ζεύγη σωματιδίων και υπολογίζοντας την πιθανότητα σύγκρουσης P. Η συγκεκριμένη μεθοδολογία αποδεικνύεται ότι είναι ανεπαρκής, διότι η πιθανότητα P είναι μια μικρή ποσότητα και ο αριθμός των ζευγαριών είναι ανάλογος του τετραγώνου του αριθμού των μοντελοποιημένων σωματιδίων. Επίσης, λόγω του ότι ο αριθμός F_N είναι αρκετά μεγάλος, ο αριθμός των ζευγαριών ισούται με $N^2/2$. Το γεγονός αυτό οδηγεί σε ένα σφάλμα, το οποίο είναι αρκετά σημαντικό για μικρές τιμές του αριθμού των μοντελοποιημένων σωματιδίων.

Η παραπάνω διαδικασία μπορεί να βελτιωθεί εάν μόνο ένα ποσοστό των συνολικών ζευγαριών ληφθεί υπόψη στην μοντελοποίηση των μοριακών συγκρούσεων. Παράλληλα η πιθανότητα σύγκρουσης αυξάνει, διαιρώντας την Εξ.(6.1) με το συγκεκριμένο ποσοστό. Η μέγιστη απόδοση επιτυγχάνεται, όταν το εν λόγω ποσοστό είναι τέτοιο ώστε η μέγιστη πιθανότητα να

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

ισούται με την μονάδα. Το ποσοστό τότε δίνεται από την σχέση

$$P_{max} = F_N(\sigma_T c_r)_{max}\Delta t/V_c, \tag{6.2}$$

ενώ ο αριθμός των ζευγαριών ανά χρονικό βήμα προκύπτει εάν η Εξ.(6.2) πολλαπλασιαστεί με $N^2/2$. Τονίζεται ότι η ποσότητα N μεταβάλλεται χρονικά, με αποτέλεσμα η μέση τιμή του τετραγώνου να είναι διαφορετική από το τετράγωνο της μέσης τιμής. Αυτό συνεπάγεται ότι η ποσότητα N^2 πρέπει να αντικατασταθεί από το γινόμενο μιας χρονικά μέσης τιμής $\bar{N}$ με μιας στιγμιαίας τιμής N. Σύμφωνα με την μέθοδο NTC, ο συνολικός αριθμός πιθανών συγκρούσεων σε κάθε κελί ισούται με

$$\frac{1}{2}N\bar{N}F_N(\sigma_T c_r)_{max}\Delta t/V_c, \tag{6.3}$$

ενώ η πιθανότητα σύγκρουσης δίνεται από την σχέση

$$\frac{\sigma_T c_r}{(\sigma_T c_r)_{max}}. \tag{6.4}$$

Στην περίπτωση μίγματος αερίων, η μέθοδος NTC είναι ανεξάρτητη των συστατικών και αντιμετωπίζει το μίγμα ως ένα αέριο. Στην περίπτωση ύπαρξης μεγάλης διαφοράς μοριακών μαζών μεταξύ των συστατικών του μίγματος παρατηρείται το γεγονός ότι τα μικρά μόρια έχουν μεγάλη σχετική ταχύτητα και η ποσότητα $(\sigma_T c_r)_{max}$ είναι πολύ μεγαλύτερη από την αντίστοιχη των μεγαλύτερων σωματιδίων. Το γεγονός αυτό έχει ως αποτέλεσμα οι συγκρούσεις μεταξύ ελαφρών μορίων να πραγματοποιούνται πιο συχνά από ότι στην περίπτωση των βαρέων σωματιδίων. Για την αποφυγή του συγκεκριμένου προβλήματος η μέθοδος NTC εφαρμόζεται ξεχωριστά σε κάθε συστατικό και ο συνολικός αριθμός πιθανών συγκρούσεων μεταξύ του είδους p και του είδους q ισούται με

$$\frac{1}{2}N_p\bar{N}_q F_N(\sigma_T c_r)_{max,pq}\Delta t/V_c, \tag{6.5}$$

ενώ η πιθανότητα σύγκρουσης δίνεται από την σχέση

$$\frac{\sigma_T c_r}{(\sigma_T c_r)_{max,pq}}. \tag{6.6}$$

αντίστοιχα. Για μεγάλο αριθμό συστατικών του μίγματος απαιτείται μεγάλη μνήμη στον υπολογιστή γεγονός που καθιστά αδύνατο τον υπολογισμό πολυατομικών μιγμάτων. Η επίλυση του ζητήματος μνήμης πραγματοποιείται με τον διαχωρισμό των μορίων σε καθορισμένες ομάδες p και q και όχι στην θεώρηση ενός μόνο είδους.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

6.5 Περιορισμοί της μεθόδου - Αριθμητικά σφάλματα DSMC

Η μέθοδος DSMC ενσωματώνει δύο είδη σφαλμάτων: α) το στατιστικό σφάλμα, το οποίο πηγάζει από την στατιστική φύση της μεθόδου και β) τα ντετερμινιστικά σφάλματα, τα οποία εξαρτώνται από την επιλογή αριθμητικών παραμέτρων όπως π.χ. το χρονικό βήμα Δt, τον όγκο των χωρικών κελιών και τον συνολικό αριθμό των σωματιδίων. Στην πρώτη περίπτωση, κύρια πηγή είναι η θεώρηση ότι ένα σωματίδιο αντιπροσωπεύει ένα μεγάλο πλήθος πραγματικών σωματιδίων του αερίου. Το γεγονός αυτό έχει ως αποτέλεσμα την εμφάνιση στατιστικής διακύμανσης (statistical scattering), η οποία συνήθως ακολουθεί κατανομή Poisson της μορφής

$$(nV)^N \exp(-nV)/N. \tag{6.7}$$

όπου n η αριθμητική πυκνότητα, V ο όγκος και N ο αριθμός των σωματιδίων. Η τυπική απόκλιση είναι της τάξης της τετραγωνικής ρίζας του αριθμού των σωματιδίων που μοντελοποιούνται, ενώ η μέση τιμή της κατανομής είναι ίση με nV. Επίσης η στατιστική διακύμανση των αποτελεσμάτων μειώνεται σύμφωνα με την τετραγωνική ρίζα του αριθμού των σωματιδίων που χρησιμοποιούνται. Για την επίτευξη του επιθυμητού επιπέδου ακρίβειας εφαρμόζεται επαναληπτικός χάρτης ώστε τελικά να επιτευχθεί η επιθυμητή σύγκλιση, δηλαδή την επίτευξη μόνιμων μεγεθών μετά από ικανοποιητικό αριθμό δειγμάτων.

Πρέπει να τονιστεί ότι βασικό στατιστικό πρόβλημα στην μέθοδο DSMC αποτελεί η δημιουργία σημαντικών συνεπειών στο πραγματικό αέριο που οφείλονται κατά κύριο λόγο στην ύπαρξη μικρού αριθμού σωματιδίων. Για τον λόγο αυτό πρέπει να ελέγχεται σε κάθε βήμα ο αριθμός των σωματιδίων ανά χωρικό κελί ώστε να αποφεύγονται τέτοιου είδους σφάλματα.

Στην δεύτερη κατηγορία σφάλματος, ο βασικός περιορισμός που προκύπτει, είναι ότι το χρονικό βήμα Δt και ο όγκος των χωρικών κελιών δεν μπορούν να επιλεγούν αρκετά μικρά, λόγω της απαίτησης μεγάλης υπολογιστικής ισχύος. Συνήθως η συγκεκριμένη κατηγορία σφάλματος έχει μεγαλύτερη επίδραση στα αριθμητικά αποτελέσματα σε σχέση με το στατιστικό σφάλμα και αυτό διότι οι ντετερμινιστικές ποσότητες προκύπτουν άμεσα από το είδος της εκάστοτε προς μελέτη ροής. Η ακρίβεια της μεθόδου DSMC εν γένει αυξάνει καθώς το χρονικό βήμα και το μέγεθος των χωρικών κελιών τείνουν στο μηδέν, ενώ δεν υπάρχει αντίστοιχο κριτήριο ευστάθειας όπως του αριθμού Courant στις κλασσικές μεθόδους πεπερασμένων διαφορών.

Τέλος τονίζεται ότι ο απαιτούμενος υπολογιστικός χρόνος καθώς και η απαίτηση υπολογιστικής μνήμης είναι δύο βασικοί υπολογιστικοί περιορισμοί που χαρακτηρίζουν την μέθοδο DSMC.

6.6 Αλγόριθμος μεθόδου DSMC

Τα βασικά βήματα που περιέχονται σε έναν αλγόριθμο DSMC είναι τα εξής:

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

1. Καθορισμός των βασικών γεωμετρικών χαρακτηριστικών του πεδίου, τον συνολικό αριθμό σωματιδίων, του χρονικού βήματος Δt καθώς και των παραμέτρων που καθορίζουν το είδος της ροής όπως π.χ ο λόγος πίεσης P_2/P_1 και η παράμετρος αραιοποίησης δ.

2. Εφαρμογή αρχικών συνθηκών: Τα σωματίδια διανέμονται τυχαία μέσα στο υπολογιστικό πεδίο και ανατίθενται σε αυτά οι τρεις συνιστώσες της μοριακής ταχύτητας $\boldsymbol{c}$.

3. Κίνηση σωματιδίων: Όλα τα σωματίδια κινούνται σε κάθε χρονικό βήμα Δt σύμφωνα με την σχέση
$$\boldsymbol{x}_{new} = \boldsymbol{x}_{old} + \boldsymbol{c}\Delta t, \tag{6.8}$$
από την οποία προκύπτει η νέα θέση του σωματιδίου $\boldsymbol{x}_{new}$. Εάν κατά την κίνηση του σωματιδίου διαπιστωθεί σύγκρουση με στερεά τοιχώματα τότε καλείται η υπορουτίνα αλληλεπίδρασης αερίου-τοιχώματος. Επίσης εάν ένα σωματίδιο βρεθεί εκτός υπολογιστικού πεδίου τότε αυτό διαγράφεται από την μνήμη του υπολογιστή.

4. Εισαγωγή νέων σωματιδίων από τα όρια: Νέα σωματίδια δημιουργούνται στα εικονικά όρια του πεδίου με συγκεκριμένες αρχικές συντεταγμένες και συνιστώσες της μοριακής ταχύτητας $\boldsymbol{c}$.

5. Υπολογισμός μοριακών συγκρούσεων: Σε κάθε χωρικό κελί του πεδίου υπολογίζεται, σύμφωνα με το μοντέλο NTC, ο πιθανός αριθμός συγκρούσεων που θα συμβούν σε αυτό σε κάθε χρονικό βήμα Δt. Ο αριθμός των πιθανών ζευγαριών που θα συγκρουστούν είναι συνάρτηση του αριθμού των σωματιδίων στο κελί, του όγκου του κελιού καθώς και του χρονικού βήματος Δt. Πραγματοποιείται τυχαία επιλογή ζεύγους σωματιδίων, τα οποία ανήκουν στο ίδιο κελί και ίδιο υποκελί. Η αποδοχή ή η απόρριψη της σύγκρουσης δύο σωματιδίων βασίζεται σε μια πιθανότητα, η οποία είναι ανάλογη της σχετικής ταχύτητας καθώς και της ενεργού διατομής τους. Στην περίπτωση που μια σύγκρουση γίνει δεκτή τότε στα σωματίδια ανατίθενται οι αντίστοιχες ταχύτητες μετά την σύγκρουση που ικανοποιούν τις αρχές διατήρησης ορμής και ενέργειας.

6. Στο στάδιο αυτό γίνεται εντοπισμός και μετονομασία των σωματιδίων, των οποίων οι αρχικές χωρικές συντεταγμένες έχουν μεταβληθεί. Στο στάδιο αυτό δημιουργούνται μητρώα τα οποία περιέχουν την ονομασία του κάθε σωματιδίου καθώς και το κελί στο οποίο περιέχονται. Τα μητρώα αυτά θα χρησιμοποιηθούν κατάλληλα στο στάδιο υπολογισμού των συγκρούσεων και την τυχαία επιλογή ζεύγους σωματιδίων.

7. Υπολογισμός μακροσκοπικών ποσοτήτων: Υπολογίζονται οι μακροσκοπικές ποσότητες του αερίου συναρτήσει των μικροσκοπικών ιδιοτήτων των σωματιδίων στο γεωμετρικό μέσο κάθε κελιού. Το συγκεκριμένο στάδιο δεν πραγματοποιείται εν γένει σε κάθε χρονικό βήμα για την αποφυγή συσχετισμών μεταξύ των διαδοχικών επαναλήψεων.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

8. Αύξηση του υπολογιστικού χρόνου κατά Δt και έλεγχος της στατιστικής διακύμανσης εάν είναι μικρότερη του 1%. Εάν δεν ικανοποιείται η υπόθεση αυτή τότε ο αλγόριθμος επιστρέφει στο Βήμα 3.

Τα παραπάνω βήματα απεικονίζονται στο Σχήμα 6.2

6.7 Πρόσθετες διευκρινίσεις στον αλγόριθμο DSMC

Παρ' όλη την απλότητα του συγκεκριμένου αλγορίθμου, υπάρχουν σημαντικά ζητήματα που πρέπει να ληφθούν υπόψη ώστε η ακρίβεια και η ορθότητα των αποτελεσμάτων να διατηρούνται σε ικανοποιητικό επίπεδο. Συγκεκριμένα στην παράγραφο αυτή θα περιγραφούν λεπτομέρειες σχετικά με τις αρχικές συνθήκες, το μέγεθος των κελιών, την επιλογή του χρονικού βήματος Δt, βασικά ζητήματα που αφορούν την κίνηση των σωματιδίων καθώς και τον υπολογισμό των μικροσκοπικών ταχυτήτων με στοχαστικές μεθόδους.

6.7.1 Αρχικές συνθήκες

Το πρώτο βήμα του αλγορίθμου DSMC είναι η επιβολή αρχικών συνθηκών, η οποία βασίζεται στην τυχαία κατανομή των σωματιδίων κατά μήκος του πεδίου ροής και στην ανάθεση των τριών συνιστωσών της μοριακής ταχύτητας. Η δύο αυτές διαδικασίες εισάγουν ένα αρχικό στατιστικό σφάλμα, το οποίο θα διαδωθεί σε επόμενα χρονικά βήματα της μεθόδου. Για την μείωση του αρχικού στατιστικού σφάλματος και τον περιορισμό μετάδοσής του στις υπολογιζόμενες μακροσκοπικές ποσότητες πραγματοποιείται με διπλασιασμό σταδιακή αύξηση του αριθμού των σωματιδίων στο υπολογιστικό πεδίο. Η συγκεκριμένη διαδικασία απεικονίζεται στο Σχ. 6.3. Εάν αρχικά ο συνολικός αριθμός των σωματιδίων επιλέγεται να είναι 30×10^6, τότε κατά την επιβολή αρχικών συνθηκών χρησιμοποιούνται 7.5×10^6 σωματίδια, τα οποία ξεκινούν να αλληλεπιδρούν μεταξύ τους. Σε συγκεκριμένο υπολογιστικό χρόνο (t=10Δt) ο αριθμός των σωματιδίων διπλασιάζεται σε 15×10^6. Τονίζεται ότι κατά τον διπλασιασμό, τα νέα σωματίδια που προκύπτουν διατηρούν την θέση και την μοριακή ταχύτητα των αρχικών 7.5×10^6 σωματιδίων. Τα 15×10^6 σωματίδια που υπάρχουν στο πεδίο ροής ομοίως μετά από συγκεκριμένο χρονικό βήμα (t=13Δt) διπλασιάζονται σε 30×10^6. Όταν ολοκληρωθεί η παραπάνω διαδικασία διπλασιασμού του αριθμού των σωματιδίων ξεκινά και η κανονική προσομοίωση του πεδίου ροής και η καταγραφή των μακροσκοπικών μεγεθών. Η επιλογή του χρόνου διπλασιασμού των σωματιδίων βασίζεται σε εμπειρικά κριτήρια.

6.7.2 Υπολογιστικό πλέγμα

Η εφαρμογή του χωρικού πλέγματος κατά την μέθοδο DSMC πραγματοποιείται για την προσομοίωση των μοριακών συγκρούσεων καθώς και τον υπολογισμό των μακροσκοπικών ποσοτήτων. Για την εξασφάλιση μιας φυσικά αποδεκτής προσομοίωσης σύγκρουσης ενός

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

ζεύγους σωματιδίων, το μέγεθος κάθε χωρικού κελιού δεν πρέπει να ξεπερνάει μια μέση ελεύθερη διαδρομή λ. Στην περίπτωση όπου η απόσταση δύο σωματιδίων που θα συγκρουστούν είναι μεγαλύτερη από λ τότε εισάγεται ένα μη φυσικό σφάλμα κατά την μεταφορά ορμής και ενέργειας.

6.7.3 Επιλογή χρονικού βήματος

Η επιλογή του χρονικού βήματος Δt πρέπει να γίνει με τέτοιο τρόπο ώστε να είναι μικρότερο του μέσου χρόνου σύγκρουσης τ_m , ώστε να είναι δυνατή η πραγματοποίηση της αποσύζευξης της ελεύθερης κίνησης των σωματιδίων και των μοριακών συγκρούσεων. Ο μέσος χρόνος σύγκρουσης ορίζεται ως

$$\tau_m = \frac{1}{\upsilon} = \frac{\lambda}{\bar{c}} \tag{6.9}$$

όπου υ είναι η συχνότητα σύγκρουσης, λ είναι η μέση ελεύθερη διαδρομή και $\bar{c}$ είναι η μέση μοριακή ταχύτητα.

6.7.4 Ελεύθερη κίνηση σωματιδίων

Το στάδιο της ελεύθερης κίνησης των σωματιδίων στον αλγόριθμο DSMC περιλαμβάνει τρεις βασικές λειτουργίες:

1. Ανανέωση των χωρικών συντεταγμένων των σωματιδίων,
2. Προσομοίωση πιθανής αλληλεπίδρασης σωματιδίου-στερού τοιχώματος και
3. Καθορισμός του κελιού στο οποίο το σωματίδιο καταλήγει καθώς και την σχετική θέση του σωματιδίου μέσα σε αυτό.

Όπως προαναφέρθηκε στην Παράγραφο 6.6 η τελική θέση του σωματιδίου προκύπτει κάνοντας χρήση της Εξ.(6.8). Η απλή αυτή διαδικασία περικλείει μια πολυπλοκότητα, η οποία προέρχεται από το γεγονός της πιθανής σύγκρουσης του σωματιδίου με στερεό τοίχωμα. Για τυχαίες γεωμετρικές επιφάνειες ο υπολογισμός των συντεταγμένων του σημείου πρόσκρουσης του σωματιδίου με την στερεά επιφάνεια εμφανίζει μια δυσκολία αφού το σωματίδιο είτε μπορεί να διέλθει εφαπτομενικά της επιφάνειας (περίπτωση (1), Σχ. 6.4), είτε να το διαπεράσει και να μείνει στο εσωτερικό του (περίπτωση (2), Σχ. 6.4), είτε να το διαπεράσει και να εισέλθει ξανά στο πεδίο ροής (περίπτωση (3), Σχ. 6.4). Για τον λόγο αυτό δεν αρκεί μόνο ο υπολογισμός των αρχικών και τελικών συντεταγμένων του σωματιδίου, αλλά και ο συνεχής έλεγχος της τροχιάς του. Όπως αναφέρθηκε στην Παράγραφο 6.7.3, το ιδανικό χρονικό βήμα Δt είναι αυτό που δεν επιτρέπει το σωματίδιο να κινηθεί απόσταση μεγαλύτερη της μέσης ελεύθερης διαδρομής λ. Για τον λόγο αυτό σε κάθε χρονικό βήμα μόνο ένα ποσοστό των σωματιδίων θα μεταπηδήσει σε διπλανό κελί ή θα συγκρουστεί με στερεά τοιχώματα.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Στην περίπτωση που διαπιστωθεί σύγκρουση του σωματιδίου με στερεά τοιχώματα τα βήματα που πραγματοποιούνται είναι τα εξής:

1. Υπολογίζεται το σημείο σύγκρουσης λύνοντας ένα σύστημα εξισώσεων που αποτελείται από την εξίσωση τροχιάς του σωματιδίου και της εξίσωση που περιγράφει την στερεά επιφάνεια.

2. Υπολογισμός του χρόνου, στον οποίο συμβαίνει η σύγκρουση.

3. Ανάθεση στο σωματίδιο των κατάλληλων συνιστωσών της μοριακής ταχύτητας.

4. Κίνηση του σωματιδίου για το υπόλοιπο χρονικό διάστημα που απέμεινε.

Εν συνεχεία γίνεται έλεγχος του κελιού στο οποίο έχει καταλήξει το σωματίδιο ώστε η πληροφορία αυτή να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό των μακροσκοπικών ποσοτήτων καθώς και στην διαδικασία επιλογής σωματιδίων κατά την μοντελοποίηση των μοριακών συγκρούσεων.

6.7.5 Εισερχόμενα σωματίδια

Σε προβλήματα ροών στα οποία υπάρχουν μη πραγματικά όρια, σε κάθε χρονική στιγμή Δt, εισέρχεται συγκεκριμένος αριθμός σωματιδίων, ο οποίος δίνεται από την σχέση

$$N_b = \frac{1}{4} A n_0 v_t \Delta t, \tag{6.10}$$

όπου A είναι το εμβαδόν της επιφάνειας από την οποία θα διέλθουν τα σωματίδια, n_0 είναι η αριθμητική πυκνότητα ισορροπίας, ενώ $v_t = (2v_0)/\sqrt{\pi}$ είναι η θερμική ταχύτητα των εισερχόμενων σωματιδίων. Τονίζεται ότι τα σωματίδια που εισέρχονται στο πεδίο ροής έχουν κατανομές που αντιστοιχούν σε συνθήκες ισορροπίας μακριά από τα όρια του υπολογιστικού πεδίου. Σε συνθήκες ισορροπίας (steady state conditions), ο αριθμός των σωματιδίων που εξέρχονται από το πεδίο ροής πρέπει είναι ίσος με τον αριθμό των σωματιδίων που εισέρχονται, ώστε ο συνολικός μέσος αριθμός σωματιδίων να παραμένει σταθερός.

6.7.6 Υπολογισμός μακροσκοπικών ποσοτήτων

Στην παράγραφο αυτή διατυπώνονται οι σχέσεις υπολογισμού των μακροσκοπικών ποσοτήτων κατά μήκος του πεδίου ροής. Η αριθμητική πυκνότητα n σε κάθε κελί του πεδίου ροής ορίζεται ως

$$n = \frac{\bar{N} F_N}{V_{cell}} \tag{6.11}$$

Η ποσότητα $\bar{N}$ είναι ο χρονικά μέσος αριθμός των σωματιδίων σε κάθε κελί, V_{cell} είναι ο όγκος του χωρικού κελιού, ενώ F_N είναι ο αριθμός των σωματιδίων που αντιπροσωπεύει ένα

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

σωματίδιο της DSMC. Το διάνυσμα της μακροσκοπικής ταχύτητας δίνεται αντίστοιχα από την σχέση

$$\mathbf{u} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\mathbf{c_i} \tag{6.12}$$

όπου $\mathbf{c} = (c_x, c_y, c_z)$ είναι το διάνυσμα της μοριακής ταχύτητας του εκάστοτε σωματιδίου. Η θερμοκρασία σε κάθε κελί του πεδίου υπολογίζεται ως

$$\frac{3}{2}k_B T = \sum_{i=1}^{N}\frac{m(\bar{\mathbf{c}}^{\mathbf{2}} - \mathbf{u}^{\mathbf{2}})_i}{2} \tag{6.13}$$

όπου $\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)$ το διάνυσμα της μακροσκοπικής ταχύτητας στο εκάστοτε κελί. Για τον υπολογισμό της πίεσης σε κάθε κελί χρησιμοποιείται η καταστατική εξίσωση ως

$$P = nk_bT, \tag{6.14}$$

η οποία κάνει χρήση των τοπικών ποσοτήτων για την θερμοκρασία και την αριθμητική πυκνότητα.

Το διάνυσμα της ροής θερμότητας σε κάθε κελί υπολογίζεται ως

$$\mathbf{q} = mn\sum_{i=1}^{N}\left[(c-u)^2(\mathbf{c}-\mathbf{u})\right]_i \tag{6.15}$$

Τέλος η διατμητική τάση στο επίπεδο xy για κάθε κελί, δίνεται από την σχέση

$$\tau_{xy} = mn\sum_{i=1}^{N}\left[(c_x-u_x)(c_y-u_y)\right]_i, \tag{6.16}$$

ενώ αντίστοιχα προκύπτουν οι διατμητικές τάσεις και στα υπόλοιπα επίπεδα.

6.8 Υπολογισμός μικροσκοπικών ταχυτήτων βασισμένος σε τυχαίους αριθμούς

Η στοχαστική μοντελοποίηση φυσικών διεργασιών απαιτεί τη δημιουργία αντιπροσωπευτικών τιμών για τις μεταβλητές, οι οποίες ακολουθούν μια συγκεκριμένη κατανομή. Αυτό επιτυγχάνεται με την χρήση τυχαίων αριθμών και αποτελεί σημείο κλειδί της μεθόδου DSMC. Ας θεωρήσουμε μια ομάδα διαδοχικών τυχαίων αριθμών R_f, οι οποίοι είναι ομοιόμορφα κατανεμημένοι μεταξύ 0 και 1.

Η κατανομή της μεταβλητής x είναι δυνατόν να περιγραφεί από μια συνάρτηση κατανομής,

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

τέτοια ώστε η πιθανότητα μια τιμής του x να βρίσκεται μεταξύ x και $x + dx$ ισούται με

$$f_x dx. \tag{6.17}$$

Εάν το x κυμαίνεται από α έως β, τότε η συνολική πιθανότητα είναι

$$\int_{\alpha}^{\beta} f_x dx = 1. \tag{6.18}$$

Στο σημείο αυτό θεωρούμε την αθροιστική κατανομή F_x τέτοια ώστε

$$F_x = \int_{\alpha}^{x} f_x dx \tag{6.19}$$

Εάν δημιουργηθεί ένας τυχαίος αριθμός R_f, ο οποίος ισούται με την αθροιστική κατανομή, δηλαδή

$$F_x = R_f, \tag{6.20}$$

τότε στην περίπτωση του απλού παραδείγματος της μεταβλητής x, η οποία κυμαίνεται ομοιόμορφα από α έως β, η αντίστοιχη συνάρτηση f_x προκύπτει να είναι σταθερή και από την Εξ.(6.18) έχουμε ότι

$$f_x = 1/(\beta - \alpha), \tag{6.21}$$

ενώ από τις Εξ.(6.19) και (6.20) προκύπτει

$$F_x = \int_{\alpha}^{\beta} 1/(\beta - \alpha) dx = (x - \alpha)/(\beta - \alpha) = R_f, \tag{6.22}$$

ή πιο απλά

$$x = \alpha + R_f(\beta - \alpha), \tag{6.23}$$

Η λειτουργία της μεθόδου απεικονίζεται στο Σχήμα 6.5.

Η παραπάνω διαδικασία δεν μπορεί να εφαρμοστεί στην περίπτωση όπου δεν μπορεί να πραγματοποιηθεί αναλυτική ολοκλήρωση της f_x στην Εξ.(6.19). Ένα αντιπροσωπευτικό παράδειγμα είναι η συνάρτηση κατανομής της ταχύτητας ενός αερίου σε ισορροπία που δίνεται από την σχέση

$$f_u = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \exp(-\beta^2 u^2), \tag{6.24}$$

όπου $\beta = 1/\upsilon_0$ με $\upsilon_0 = \sqrt{2kT/m}$ η πλέον πιθανή ταχύτητα του αερίου. Αντικαθιστώντας την Εξ.(6.24) στην Εξ.(6.19) προκύπτει ότι

$$F_u = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{u} \exp(-\beta^2 u^2), \tag{6.25}$$

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

ή

$$F_u = \frac{1}{2}[1 + erf(\beta u)] \tag{6.26}$$

Η έκφραση (6.26) δεν μπορεί να αντιστραφεί ώστε να προκύψει η ταχύτητα u συναρτήσει του τυχαίου αριθμού R_f. Για τον λόγο αυτό σε αυτές τις περιπτώσεις εφαρμόζεται η μέθοδος αποδοχής-απόρριψης. Κατά την μέθοδο αυτή η τυχαία συνάρτηση κατανομής f_x διαιρείται με την μέγιστη τιμής f_{max} ως

$$f'_x = \frac{f_x}{f_{max}}. \tag{6.27}$$

Στην συνέχεια επιλέγεται μια τυχαία τιμή της μεταβλητής x, η οποία είναι ομοιόμορφα κατανεμημένη μεταξύ των ορίων της, έπειτα υπολογίζεται η συνάρτηση f'_x για την συγκεκριμένη τιμή του x. Η αποδοχή της τιμής του x πραγματοποιείται όταν η αντίστοιχη f'_x είναι μεγαλύτερη από ένα τυχαίο αριθμό R_f με $0 \leq R_f \leq 1$. Σε αντίθετη περίπτωση η τυχαία τιμή του x απορρίπτεται και επιλέγεται με βάσει πάντα τυχαίους αριθμούς μια άλλη τιμή του x. Η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται έως ότου η τιμή του x γίνει αποδεκτή.

Η μεθοδολογία αποδοχής-απόρριψης στον αλγόριθμο DSMC εφαρμόζεται στην διαδικασία αποδοχής ή απόρριψης μια μοριακής σύγκρουσης. Στην συγκεκριμένη περίπτωση υπολογίζεται η πιθανότητα που δίνεται από την Εξ.(6.4) και εξετάζεται εάν η πιθανότητα αυτή είναι μεγαλύτερη ή μικρότερη ενός τυχαίου αριθμού R_f. Στην περίπτωση όπου είναι μεγαλύτερη τότε δεχόμαστε ότι τα σωματίδια θα συγκρουστούν και υπολογίζουμε τις μοριακές ταχύτητες μετά την σύγκρουση. Σε αντίθετη περίπτωση επιλέγουμε νέο ζεύγος σωματιδίων και επαναλαμβάνουμε τα παραπάνω βήματα.

Για τον υπολογισμό των τριών συνιστωσών της μοριακής ταχύτητας δεν χρησιμοποιείται η διαδικασία αποδοχής ή απόρριψης, αλλά ακολουθείται η παρακάτω διαδικασία:

Οι μοριακές συνιστώσες c_x και c_y μπορούν μαθηματικά να διατυπωθούν ως

$$c_x = rcos\theta \tag{6.28}$$

και

$$c_y = rsin\theta. \tag{6.29}$$

Η γωνία θ είναι ομοιόμορφα κατανεμημένη σε όλο το 2π οπότε ισχύει ότι

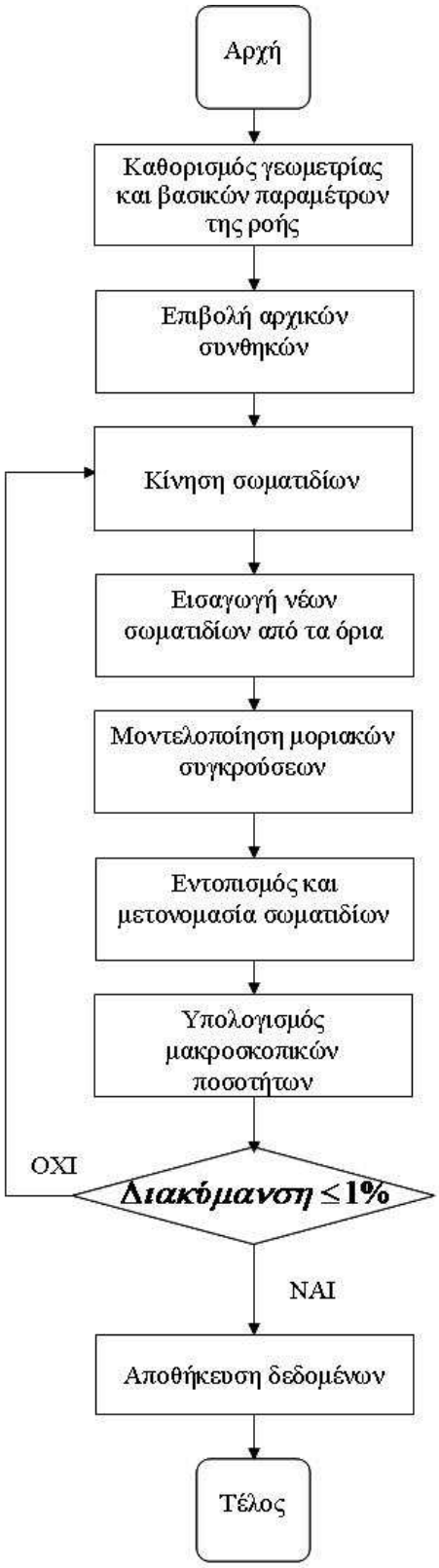
$$\theta = 2\pi R_f. \tag{6.30}$$

Επίσης το μέτρο r της μοριακής ταχύτητας και η μοριακή ταχύτητα c_z δίνονται από την σχέση

$$r = [-log(R_f)]^{1/2} / \beta. \tag{6.31}$$

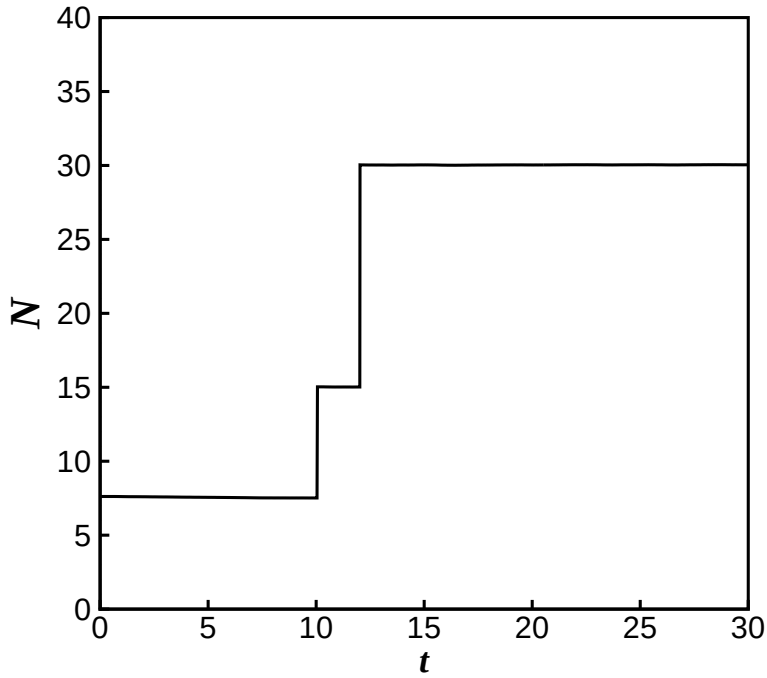
Έτσι κάθε φορά που απαιτείται η δημιουργία των δύο μοριακών συνιστωσών καλείται η αντίστοιχη υπορουτίνα του κώδικα DSMC, η οποία χρησιμοποιεί τις παραπάνω Εξ.(6.28-6.31).

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

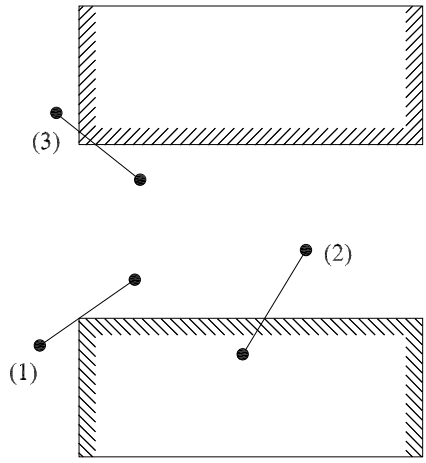


Σχήμα 6.2: Διάγραμμα ροής αλγορίθμου DSMC.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

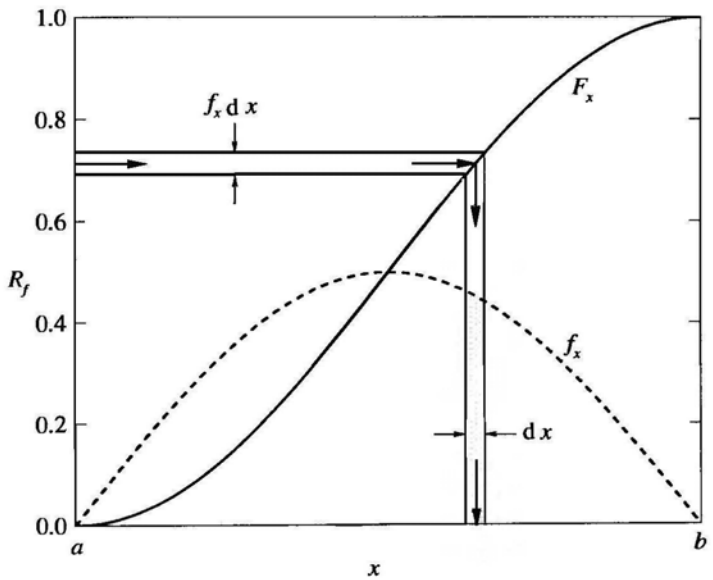


Σχήμα 6.3: Εξέλιξη του αριθμού των σωματιδίων συναρτήσει του χρόνου.



Σχήμα 6.4: Αλληλεπίδραση μορίου - στερεού τοιχώματος.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



Σχήμα 6.5: Τυπικό γράφημα συνάρτησης κατανομής και αθροιστικής συνάρτησης.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Κεφαλαιο 7

Ροη διαμεσου παραλληλων πλακων

7.1 Εισαγωγή

Στο παρόν κεφάλαιο επιλύεται η ροή μονατομικού αερίου διαμέσου παράλληλων πλακών, η οποία οφείλεται σε βαθμίδα πίεσης. Κύριος στόχος είναι μια πρώτη απλή εφαρμογή του αλγορίθμου DSMC και η μελέτη της επίδρασης του μεγέθους των περιοχών που βρίσκονται ανάντη και κατάντη της ροής. Συγκεκριμένα, αρκετές μελέτες [122, 123] υποθέτουν ότι τα σωματίδια, τα οποία εισέρχονται σε έναν αγωγό, έχουν συνάρτηση κατανομής Maxwell και δεν υφίσταται μεταβολή της συνάρτησης κατανομής στα δοχεία ανάντη και κατάντη της ροής. Η υπόθεση αυτή επαληθεύεται μόνο στην περίπτωση ροής που ανήκει στην ελεύθερη μοριακή περιοχή. Για τις περιπτώσεις ροών στην μεταβατική και υδροδυναμική περιοχή, συγκρούσεις πραγματοποιούνται μεταξύ των σωματιδίων που εισέρχονται ή εξέρχονται από τον αγωγό με σωματίδια των δύο δοχείων με αποτέλεσμα να μεταβάλλονται η τοπική ταχύτητα, πυκνότητα και θερμοκρασία, το οποίο συνεπάγεται μεταβολή της συνάρτησης κατανομής των σωματιδίων από την ισορροπία.

Μακριά από τον αγωγό η μακροσκοπική ταχύτητα είναι μηδενική και η συνάρτηση κατανομής των σωματιδίων είναι γνωστή και ισούται με την κατανομή Maxwell. Αντίθετα στην είσοδο (ή έξοδο) του αγωγού η μακροσκοπική ταχύτητα δεν είναι μηδενική και επομένως η κατανομή Maxwell ως οριακή συνθήκη εισόδου (ή εξόδου) στον αγωγό δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί. Η ταχύτητα στην είσοδο (ή έξοδο) του αγωγού είναι άγνωστη και αποτελεί μέρος της λύσης.

Στο άρθρο [124] η συνάρτηση κατανομής στην είσοδο του αγωγού βρέθηκε ότι διαφέρει σημαντικά από την συνάρτηση κατανομής Maxwell για αριθμούς Knudsen μεγαλύτερους του 0.1. Σημειώνεται ότι οι υπολογισμοί πραγματοποιήθηκαν για αγωγούς μεγάλου μήκους με $L/H > 25$ και για μεγάλο λόγο πίεσης $P_1/P_0 = 0.91$.

Η προσθήκη των υπολογιστικών χωρίων ανάντη και κατάντη της ροής επιφέρει σημαντική αύξηση του υπολογιστικού κόστους, το οποίο εξαρτάται άμεσα από το μέγεθος των συγκεκριμένων χωρίων. Στο παρόν κεφάλαιο εκτός από την μελέτη του πεδίου ροής, θα

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

πραγματοποιηθεί μια παραμετρική ανάλυση βασισμένη στο μέγεθος των περιοχών ροής ώστε να διαπιστωθεί η επίδραση του σε βασικές ποσότητες όπως π.χ. είναι η πίεση, η θερμοκρασία, η ταχύτητα και η αδιάστατη παροχή W που διέρχεται από το κανάλι κατά την μεταβολή του λόγου πίεσης P_1/P_0, του μήκους L/H και της παραμέτρου αραιοποίησης δ.

7.2 Περιγραφή προβλήματος

Θεωρούμε δύο παράλληλες πλάκες μήκους L, οι οποίες έχουν απόσταση H και συνδέουν δύο ημιάπειρα δοχεία. Οι παράλληλες πλάκες εκτείνονται στο άπειρο στην τρίτη διεύθυνση z', βλ. Σχ.7.1 (πάνω). Τις παράλληλες πλάκες διαρρέει μονοατομικό αέριο, το οποίο στο αριστερό δοχείο βρίσκεται σε πίεση ισορροπίας P_0 και θερμοκρασία T_0, ενώ στο δεξιό δοχείο έχει πίεση P_1 με $P_0 > P_1$ και βρίσκεται στην ίδια θερμοκρασία T_0. Τα στερεά τοιχώματα βρίσκονται επίσης σε θερμοκρασία T_0. Έτσι η ροή από το αριστερό προς το δεξί δοχείο οφείλεται μόνο σε βαθμίδα πίεσης.

Οι ποσότητες, οι οποίες καθορίζουν την λύση του προβλήματος είναι το αδιάστατο μήκος L/H των πλακών, ο λόγος πίεσης P_1/P_0 , το μέγεθος των περιοχών ανάντη και κατάντη της ροής και τέλος η παράμετρος αραιοποίησης δ, η οποία ορίζεται ως [17]

$$\delta = \frac{HP_0}{\mu_0 \upsilon_0}, \tag{7.1}$$

όπου H είναι η απόσταση των παράλληλων πλακών, μ_0 είναι το ιξώδες σε θερμοκρασία αναφοράς T_0, $\upsilon_0 = \sqrt{2kT_0/m}$ είναι η πλέον πιθανή ταχύτητα του αερίου, k είναι η σταθερά Boltzmann και m η μοριακή μάζα του αερίου.

Ο υπολογισμός της παροχής του αερίου που διαρρέει το κανάλι καθώς επίσης και η μελέτη του πεδίου ροής πραγματοποιείται συναρτήσει του αδιάστατου μήκου L/H και της παραμέτρου αραιοποίησης δ. Η αδιάστατη παροχή W ορίζεται ως

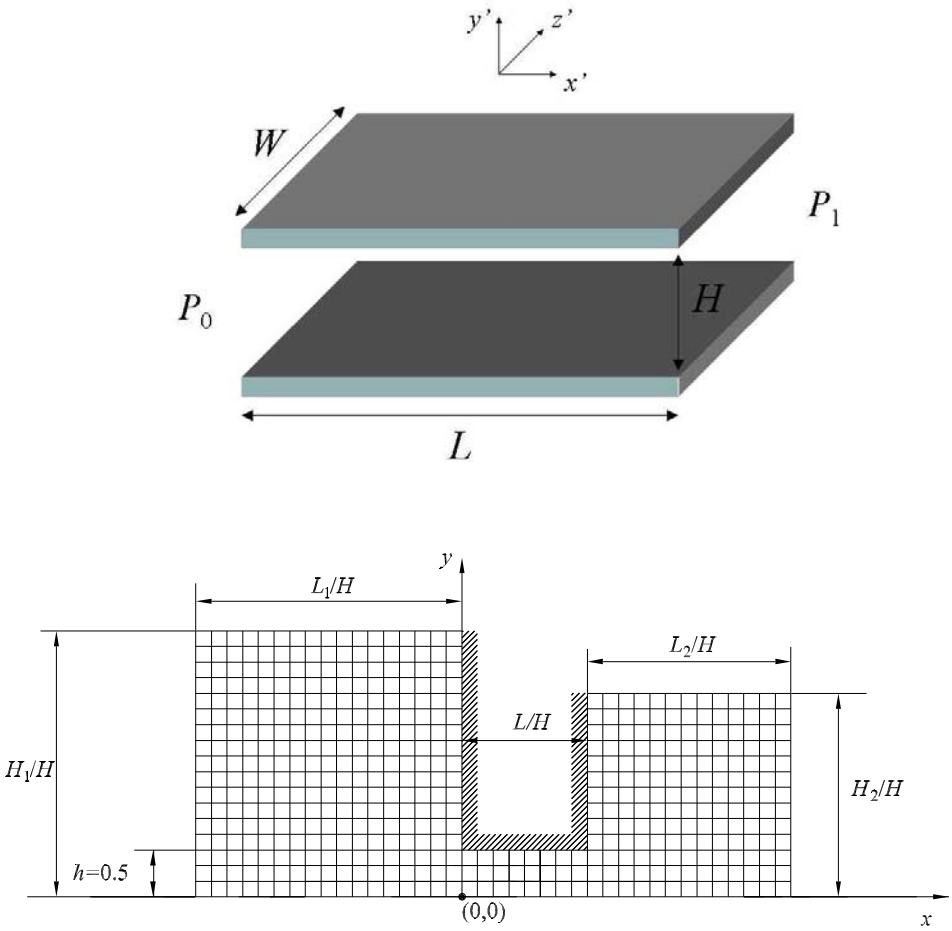
$$W = \frac{\dot{M}}{\dot{M}_0}, \tag{7.2}$$

όπου $\dot{M}_0$ είναι η ροή μάζας διαμέσου ορθογωνικής κοιλότητας στην περίπτωση ροής μονοατομικού αερίου σε κενό. Στην ειδική αυτή περίπτωση η ροή μάζας $\dot{M}_0$ εκφράζεται από την αναλυτική σχέση

$$\dot{M}_0 = \frac{H}{\upsilon_0\sqrt{\pi}} P_0. \tag{7.3}$$

Τονίζεται ότι οι κατανομές των αδιάστατων μακροσκοπικών ποσοτήτων της ταχύτητας $u_x(x, y)$, $u_y(x, y)$, αριθμητικής πυκνότητας $n(x, y)$, πίεσης $P(x, y)$ και θερμοκρασίας $T(x, y)$ προκύπτουν διαιρώντας τις αντίστοιχες διαστατές ποσότητες με τις χαρακτηριστικές ποσότητες αναφοράς υ_0, n_0, P_0 και T_0, ενώ από την καταστατική εξίσωση των αερίων ισχύει ότι $P_0 = n_0 kT_0$.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



Σχήμα 7.1: Γεωμετρική απεικόνιση παράλληλων πλακών (πάνω) και υπολογιστικό πλέγμα (κάτω).

Επίσης οι ποσότητες $x = x'/H$ και $y = y'/H$ εκφράζουν τις αδιάστατες χωρικές συντεταγμένες. Όλα τα αποτελέσματα που θα παρουσιασθούν σε αυτό το κεφάλαιο εκφράζονται συναρτήσει των παραπάνω αδιάστατων μακροσκοπικών ποσοτήτων. Λόγω της συμμετρίας του προβλήματος στην διεύθυνση x, επιλύεται το άνω μισό των παράλληλων πλακών. Κατά τον άξονα συμμετρίας εφαρμόζεται οριακή συνθήκη κατοπτρικής ανάκλασης των σωματιδίων. Η γεωμετρική διάταξη απεικονίζεται στο Σχ. 7.1 (κάτω).

7.3 Αριθμητική μέθοδος

Το συγκεκριμένο πρόβλημα επιλύθηκε κάνοντας χρήση της μεθόδου DSMC εφαρμόζοντας το μοντέλο Non Time Counter (NTC) για την μοντελοποίηση των μοριακών συγκρούσεων. Για την μοντελοποίηση του ενδομοριακού δυναμικού επιλέχθηκε το μοντέλο των σκληρών σφαιρών (Hard Sphere model), ενώ η αλληλεπίδραση αερίου-τοιχώματος μοντελοποιήθηκε

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

υποθέτοντας μοντέλο πλήρους διάχυσης ($\alpha = 1$). Οι περιοχές ανάντη και κατάντη της ροής θεωρήθηκαν τετραγωνικές και το μέγεθός τους κυμαίνεται από $2H$ έως $8H$. Ο συνολικός αριθμός σωματιδίων που χρησιμοποιήθηκαν κυμαίνεται ανά περίπτωση από $20 - 30 \times 10^6$. Το μέγεθος κάθε κελιού και στις δύο κατευθύνσεις ισούται με $H/20$, ενώ το χρονικό βήμα που επιλέχθηκε είναι $\Delta t = 0.01(H/v_0)$. Ο συνολικός αριθμός κελιών στο υπολογιστικό πεδίο κυμαίνεται από 3×10^3 έως 1.2×10^5.

7.4 Αριθμητικά αποτελέσματα

Τα αριθμητικά αποτελέσματα αφορούν τον υπολογισμό της αδιάστατης παροχής W διαμέσου των παράλληλων πλακών συναρτήσει της παραμέτρου αραιοποίησης δ, του αδιάστατου μήκους L/H των πλακών, του λόγου πίεσης P_1/P_0 ανάντη και κατάντη της ροής καθώς και του μεγέθου των υπολογιστικών χωρίων πριν και μετά τις παράλληλες πλάκες. Συγκεκριμένα η παράμετρος αραιοποίησης δ παίρνει τιμές 0, 1, 10 και 100, το αδιάστατο μήκος L/H παίρνει τιμές 0.5 και 2, ο λόγος πίεσης P_1/P_0 παίρνει τιμές 0 και 0.5 και τέλος έχουν επιλεχθεί πέντε περιπτώσεις μεγέθους των περιοχών ανάντη και κατάντη της ροής. Συγκεκριμένα η πρώτη περίπτωση αντιστοιχεί σε $H_1 = H_2 = L_1 = L_2 = 2H$, η δεύτερη σε $H_1 = H_2 = L_1 = L_2 = 4H$, η τρίτη σε $H_1 = L_1 = 4H$ και $H_2 = L_2 = 8H$, η τέταρτη σε $H_1 = L_1 = 8H$ και $H_2 = L_2 = 4H$ και η τελευταία σε $H_1 = H_2 = L_1 = L_2 = 8H$.

7.4.1 Επίδραση υπολογιστικών χωρίων

Στους Πίνακες 7.1 και 7.2 παρουσιάζονται αριθμητικά αποτελέσματα της αδιάστατης παροχής W συναρτήσει της παραμέτρου αραιοποίησης δ, του αδιάστατου μήκους L/H καθώς και του μεγέθους των υπολογιστικών χωρίων πριν και μετά τις παράλληλες πλάκες για λόγο πίεσης $P_1/P_0 = 0$ και 0.5 αντίστοιχα. Οι τιμές του δ επιλέχθηκαν ως ενδεικτικές των τεσσάρων περιοχών ροής, οι οποίες καλύπτουν όλο το εύρος του αριθμού Knudsen.

Τα αριθμητικά αποτελέσματα για την περίπτωση όπου $\delta = 0$ και $P_1/P_0 = 0$, συγκρίθηκαν με τα αντίστοιχα αποτελέσματα που παρατίθενται στον Πίνακα 29, σελ. 699 του [17], τα οποία προέκυψαν με την μέθοδο Test Particle Monte Carlo. Για την περίπτωση όπου $\delta = 0$ και $P_1/P_0 \neq 0$ ισχύει ότι

$$W = W^{ch}\left(1 - \frac{P_1}{P_0}\right), \tag{7.4}$$

όπου W^{ch} είναι η αδιάστατη παροχή για την περίπτωση ροής ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες με $\delta = 0$ και $P_1/P_0 = 0$. Η ποσότητα W^{ch} μπορεί να υπολογιστεί αναλυτικά από την σχέση [17]:

$$W^{ch} = \frac{1}{2}[1 + (1 + L^2)^{1/2} - L] - \frac{\frac{3}{2}\{L - ln[L + (L^2 + 1)^{1/2}]\}^2}{L^3 + 3L^2 + 4 - (L^2 + 4)(1 + L^2)^{1/2}}, \tag{7.5}$$

όπου L είναι το αδιάστατο μήκος του αγωγού. Τα αριθμητικά αποτελέσματα του παρόντος

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

κεφαλαίου ελέγχθηκαν με τα αντίστοιχα αναλυτικά και διαπιστώθηκε πλήρη ταύτιση. Τονίζεται ότι για την περίπτωση όπου $\delta \neq 0$ δεν βρέθηκαν αντίστοιχα πειραματικά δεδομένα για απ' ευθείας σύγκριση με τα αντίστοιχα αριθμητικά αποτελέσματα.

Στον Πίνακα 7.1 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα του W για ροή σε κενό ($P_1/P_0 = 0$). Παρατηρείται ότι για την περίπτωση ροής στην ελεύθερη μοριακή περιοχή ($\delta = 0$) δεν υπάρχει εξάρτηση του W ως προς το μέγεθος των περιοχών πριν και μετά τον αγωγό και για τις δύο περιπτώσεις του L/H. Το γεγονός αυτό δικαιολογείται από την απουσία των μοριακών συγκρούσεων. Αντίθετα καθώς το δ αυξάνεται παρατηρείται ότι το μέγεθος των περιοχών ανάντη και κατάντη της ροής παίζει σημαντικό ρόλο στην ακρίβεια της αδιάστατης παροχής W. Έτσι, καθώς αυξάνεται το μέγεθος των περιοχών μεταβάλλεται η αδιάστατη παροχή, η οποία τείνει να σταθεροποιηθεί για τις περιπτώσεις όπου $H_1 = L_1 = 8H$ και $H_2 = L_2 = 4H$ και $H_1 = H_2 = L_1 = L_2 = 8H$. Η συμπεριφορά αυτή οδηγεί στο συμπέρασμα ότι το μέγεθος της αριστερής περιοχής πριν τον αγωγό έχει μεγαλύτερη σημασία στην επίτευξη καλύτερης ακρίβειας στο W, απ' ότι η δεξιά περιοχή μετά τον αγωγό.

Στον Πίνακα 7.2 παρουσιάζονται τα αριθμητικά αποτελέσματα του W για την περίπτωση όπου ο λόγος πίεσης ισούται με $P_1/P_0 = 0.5$. Όμοια με τον προηγούμενο Πίνακα 7.1 για την περίπτωση όπου $\delta = 0$ δεν υπάρχει εξάρτηση του W ως προς το μέγεθος των περιοχών πριν και μετά τον αγωγό. Καθώς αυξάνεται η παράμετρος αραιοποίησης η επίδραση του μεγέθους των περιοχών είναι εμφανής. Ακόμα και για την περίπτωση όπου $H_1 = H_2 = L_1 = L_2 = 8H$ παρατηρείται ότι το συγκεκριμένο μέγεθος των περιοχών δίδει ακρίβεια μόνο δύο με τρία σημαντικά ψηφία στο W. Η ακρίβεια βελτιώνεται για την περίπτωση όπου $H_1 = H_2 = L_1 = L_2 = 12H$. Βεβαίως, η τελευταία περίπτωση απαιτεί πολύ μεγαλύτερο υπολογιστικό κόστος, γεγονός που την καθιστά ασύμφορη στα πλαίσια της παρούσας διατριβής.

Το υπολογιστικό κόστος κυρίως ως προς τον χρόνο που απαιτείται για την σύγκλιση του αλγορίθμου DSMC για την περίπτωση ροής ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες κυμαίνεται από μερικές δεκάδες έως μερικές εκατοντάδες ώρες ανάλογα των παραμέτρων που χρησιμοποιούνται. Στον Πίνακα 7.3 παρατίθενται οι χρόνοι σε ώρες για κάθε μια περίπτωση. Παρατηρείται ότι ο υπολογιστικός χρόνος αυξάνεται καθώς αυξάνεται η παράμετρος αραιοποίησης, το αδιάστατο μήκος L/H και ο λόγος πίεσης P_1/P_0. Καθώς το δ μεταβάλλεται από την ελάχιστη στην μέγιστη τιμή του και διατηρώντας τις υπόλοιπες μεταβλητές σταθερές, ο χρόνος σχεδόν τριπλασιάζεται για τις αντίστοιχες περιπτώσεις. Στην περίπτωση όπου μεταβάλλεται το L/H τότε για την περίπτωση όπου $\delta = 0$ και $\delta = 100$ απαιτείται ο ίδιος σχεδόν χρόνος αλλά διαφορετικής τάξης μεγέθους αντίστοιχα. Τέλος καθώς μεταβάλλεται ο λόγος πίεσης P_1/P_0 παρατηρείται ότι για $\delta < 10^2$, ο χρόνος σχεδόν διπλασιάζεται, ενώ για $\delta = 100$ απαιτείται ο ίδιος σχεδόν χρόνος για τις αντίστοιχες περιπτώσεις.

Με βάση την παραπάνω ανάλυση, ανάλογα με το προς επίλυση πρόβλημα, επιλέγονται αντίστοιχα οι διαστάσεις $8 - 4$ και $8 - 8$.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Πίνακας 7.1: Αδιάστατη παροχή W για λόγο πίεσης P_1/P_0=0 συναρτήσει του μήκους των περιοχών πριν και μετά τον αγωγό καθώς και της παραμέτρου αραιοποίησης δ.

		L_d/H				
L/H	δ	$2-2$	$4-4$	$4-8$	$8-4$	$8-8$
0.5	0	0.805	0.805	0.805	0.805	0.805
	1	1.15	1.21	1.21	1.25	1.25
	10	1.31	1.38	1.39	1.42	1.42
	100	1.33	1.40	1.40	1.43	1.43
2	0	0.542	0.542	0.542	0.542	0.542
	1	0.810	0.863	0.863	0.884	0.884
	10	1.14	1.21	1.21	1.23	1.23
	100	1.18	1.24	1.24	1.27	1.27

Πίνακας 7.2: Αδιάστατη παροχή W για λόγο πίεσης P_1/P_0=0.5 συναρτήσει του μήκους των περιοχών πριν και μετά τον αγωγό καθώς και της παραμέτρου αραιοποίησης δ.

		L_d/H				
L/H	δ	$2-2$	$4-4$	$4-8$	$8-4$	$8-8$
0.5	0	0.402	0.402	0.402	0.402	0.402
	1	0.936	1.04	1.05	1.07	1.09
	10	1.22	1.30	1.31	1.34	1.35
	100	1.22	1.32	1.32	1.35	1.36
2	0	0.271	0.271	0.271	0.271	0.271
	1	0.622	0.685	0.697	0.708	0.718
	10	1.03	1.12	1.12	1.14	1.15
	100	1.06	1.15	1.16	1.18	1.19

Πίνακας 7.3: Χρόνος μοντελοποίησης.

		$Time\ [h]$			
P_1/P_0	δ	$L/H = 0.5$	Fluctuation %	$L/H = 2$	Fluctuation %
0	0	73	0.5	74	0.7
	1	38	0.6	86	0.5
	10	51	0.8	144	0.5
	100	308	0.9	300	0.9
0.5	0	120	0.8	120	0.9
	1	100	0.7	176	0.5
	10	110	0.8	103	0.7
	100	308	0.9	368	0.9

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Κεφαλαιο 8

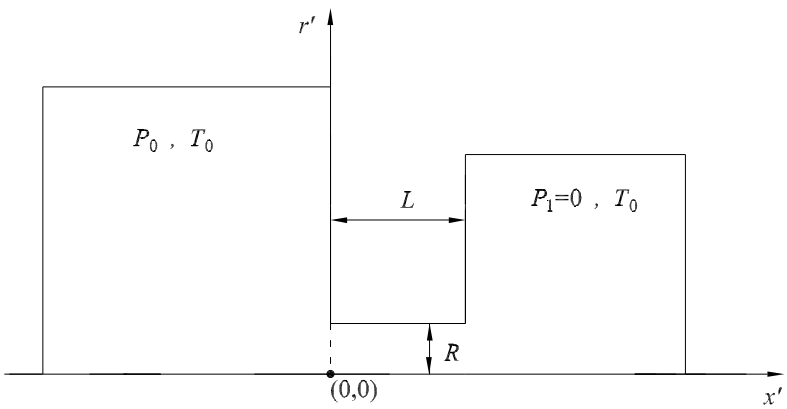
Ροη αεριου διαμεσου κυλινδρικου αγωγου πεπερασμενου μηκουσ σε κενο

8.1 Εισαγωγή

Οι ροές αερίων διαμέσου αγωγών πεπερασμένου μήκους αποτελούν αντικείμενο μελέτης τόσο σε πειραματικό όσο και σε υπολογιστικό επίπεδο τα τελευταία χρόνια. Τα χαρακτηριστικά των συγκεκριμένων ροών έχουν ζωτική σημασία στον σχεδιασμό και την κατασκευή συστημάτων κενού, σε συσκευές που απευθύνονται στη διαστημική τεχνολογία, στη διύλιση διαμέσου μεμβρανών και πορώδων μέσων, στην κατασκευή ημιαγωγών και τέλος σε μικροηλεκτρονικές συσκευές. Σε όλες τις παραπάνω εφαρμογές το σύστημα πιθανόν να βρίσκεται σε συνθήκες χαμηλού, μέτριου ή υψηλού κενού και σε συνδυασμό με το ότι η χαρακτηριστική διάσταση του συστήματος μπορεί να είναι της ιδίας τάξης ή μεγαλύτερη από την μέση ελεύθερη διαδρομή του αερίου, η ροή που αναπτύσσεται πιθανόν να καλύπτει όλο το εύρος του αριθμού Knudsen.

Στην παρούσα παράγραφο εφαρμόζεται η μέθοδος DSMC για την υπολογιστική μελέτη ροής μονοατομικού αερίου σε κενό διαμέσου αγωγού κυλινδρικής διατομής με το λόγο του μήκους προς την ακτίνα του αγωγού (L/R) να κυμαίνεται από 0 έως 10. Υπολογίζεται η αδιάστατη παροχή καθώς και οι μακροσκοπικές ποσότητες (αριθμητική πυκνότητα, πεδίο ταχυτήτων, πίεση και θερμοκρασία) σε όλο το πεδίο ροής και για όλο το εύρος του αριθμού Knudsen. Επίσης μελετήθηκε η επίδραση του μοντέλου αλληλεπίδρασης αερίου και τοιχώματος εφαρμόζοντας το μοντέλο πλήρης διάχυσης (diffuse reflection) και το μοντέλο Cercignani - Lampis [125]. Επιπρόσθετα μελετήθηκε η επίδραση του μοριακού δυναμικού (intermolecular potential) εφαρμόζοντας το μοντέλο των σκληρών σφαιρών (Hard Sphere Model) καθώς και το μοντέλο Variable Hard Sphere Model. Τέλος για συγκεκριμένες περιπτώσεις τα υπολογιστικά αποτελέσματα συγκρίνονται με τα αντίστοιχα πειραματικά αποτελέσματα [113, 92, 115], τα οποία είναι διαθέσιμα στην διεθνή βιβλιογραφία.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



Σχήμα 8.1: Γεωμετρική απεικόνιση αγωγού πεπερασμένου μήκους.

8.2 Περιγραφή του προβλήματος

Θεωρούμε αγωγό κυκλικής διατομής ακτίνας R και πεπερασμένου μήκους L, ο οποίος συνδέει δύο ημιάπειρα δοχεία. Η γεωμετρική διάταξη καθώς και το σύστημα συντεταγμένων (x', r') απεικονίζονται στο Σχ. 8.1. Τον αγωγό διαρρέει μονοατομικό αέριο, το οποίο στο αριστερό δοχείο βρίσκεται σε πίεση ισορροπίας P_0, ενώ στο δεξιό δοχείο έχει πολύ χαμηλή πίεση P_1, την οποία και θεωρούμε $P_1 = 0$. Η θερμοκρασία του αερίου στα δοχεία ανάντη και κατάντη καθώς και στο εσωτερικό του αγωγού είναι σταθερή και ίση με T_0. Οι ποσότητες, οι οποίες καθορίζουν την λύση του προβλήματος είναι το αδιάστατο μήκος L/R του αγωγού και η παράμετρος αραιοποίησης δ, η οποία ορίζεται ως [17]

$$\delta = \frac{RP_0}{\mu_0 \upsilon_0}, \tag{8.1}$$

όπου R είναι η ακτίνα του αγωγού, P_0 η πίεση αναφοράς, μ_0 είναι το ιξώδες σε θερμοκρασία αναφοράς T_0, $\upsilon_0 = \sqrt{2kT_0/m}$ είναι η πλέον πιθανή ταχύτητα του αερίου, k είναι η σταθερά Boltzmann και m η μοριακή μάζα του αερίου. Τονίζεται ότι η παράμετρος αραιοποίησης δ είναι αντιστρόφως ανάλογη του αριθμού Knudsen και συνδέονται από την σχέση

$$\delta = \frac{\sqrt{\pi}}{2}\frac{1}{Kn}. \tag{8.2}$$

Στόχος είναι ο υπολογισμός της παροχής του αερίου που διαρρέει τον αγωγό καθώς επίσης και η μελέτη του πεδίου ροής συναρτήσει του αδιάστατου μήκου L/R και της παραμέτρου αραιοποίησης δ. Η αδιάστατη παροχή W ορίζεται ως

$$W = \frac{\dot{M}}{\dot{M}_0}, \tag{8.3}$$

όπου $\dot{M}_0$ είναι η ροή μάζας διαμέσου κυκλικής οπής στην περίπτωση ροής μονοατομικού αερίου σε κενό. Στην ειδική αυτή περίπτωση η ροή μάζας $\dot{M}_0$ εκφράζεται από την αναλυτική

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

σχέση

$$\dot{M}_0 = \frac{\sqrt{\pi}R^2}{\upsilon_0}P_0. \tag{8.4}$$

Τονίζεται ότι οι κατανομές των αδιάστατων μακροσκοπικών ποσοτήτων της ταχύτητας $u_r(x,r)$, $u_x(x,r)$, αριθμητικής πυκνότητας $n(x,r)$, πίεσης $P(x,r)$ και θερμοκρασίας $T(x,r)$ προκύπτουν διαιρώντας τις αντίστοιχες διαστατές ποσότητες με τις χαρακτηριστικές ποσότητες αναφοράς υ_0, n_0, P_0 και T_0, ενώ από την καταστατική εξίσωση των αερίων ισχύει ότι $P_0 = n_0 k T_0$. Επίσης οι ποσότητες $r = r'/R$ και $x = x'/R$ εκφράζουν την αδιάστατη ακτινική και αξονική συντεταγμένη αντίστοιχα. Όλα τα αποτελέσματα που θα παρουσιασθούν σε αυτό το κεφάλαιο εκφράζονται συναρτήσει των παραπάνω αδιάστατων μακροσκοπικών ποσοτήτων.

8.3 Περιγραφή αλγορίθμου DSMC

Όπως αναφέρθηκε σε προηγούμενες παραγράφους, ο αλγόριθμος της μεθόδου DSMC περιέχει δύο βασικά βήματα: α) την ελεύθερη κίνηση των σωματιδίων και β) τις σωματιδιακές συγκρούσεις. Κατά την διάρκεια του πρώτου βήματος, τα σωματίδια διανύουν συγκεκριμένη απόσταση που καθορίζεται από την ταχύτητα τους καθώς και από το χρονικό βήμα Δt. Μέρος των σωματιδίων κατά την κίνηση τους, πιθανόν να αλληλεπιδράσουν με τα ακίνητα τοιχώματα των δοχείων ή του κυλινδρικού αγωγού. Στην περίπτωση αυτή χρησιμοποιούνται οι οριακές συνθήκες πλήρους διάχυσης (purely diffuse boundary conditions). Επίσης για την μελέτη της επίδρασης των οριακών συνθηκών αερίου - τοιχώματος εφαρμόσθηκε το μοντέλο Cercignani - Lampis [125, 15], για συγκεκριμένες τιμές του αδιάστατου μήκους (L/R) του αγωγού. Το μοντέλο C-L περιγράφεται από δύο συντελεστές (accommodation coefficients), έναν που αντιστοιχεί στην εφαπτομενική προς το τοίχωμα ορμή του σωματιδίου και έναν που αντιστοιχεί στην κινητική ενέργεια κάθετα στο τοίχωμα. Έτσι το μοντέλο C-L περικλείει δύο βαθμούς ελευθερίας και περιγράφει με πιο ρεαλιστικό τρόπο την αλληλεπίδραση αερίου - τοιχώματος. Ένα άλλο μέρος των σωματιδίων πιθανόν να εξέλθει από το υπολογιστικό πεδίο και στην περίπτωση αυτή το σωματίδιο διαγράφεται πλήρως από την μνήμη του ηλεκτρονικού υπολογιστή.

Μετά το τέλος της ελεύθερης κίνησης όλων των σωματιδίων, νέα σωματίδια δημιουργούνται στα μη πραγματικά όρια του πεδίου ροής. Ο αριθμός των σωματιδίων αυτών είναι προκαθορισμένος και υπολογίζεται από την Εξ.(6.10). Στο συγκεκριμένο πρόβλημα το λαμβάνοντας υπόψη την αξονοσυμμετρία του προβλήματος, το εμβαδόν A της επιφάνειας που διέρχονται τα σωματίδια ισούται με $A = \pi\Delta r^2$ για τις κάθετες επιφάνειες, ενώ $A = 2\pi\Delta x$ για τις οριζόντιες επιφάνειες. Τονίζεται ότι τα σωματίδια που εισέρχονται έχουν κατανομές που αντιστοιχούν σε συνθήκες ισορροπίας μακριά από την είσοδο και την έξοδο του αγωγού. Σε συνθήκες ισορροπίας (steady state conditions), ο αριθμός των σωματιδίων που εξέρχονται από το πεδίο ροής είναι ίσος με τον αριθμό των σωματιδίων που εισέρχονται, ενώ ο συνολικός μέσος

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

αριθμός σωματιδίων παραμένει σταθερός.

Κατά την διάρκεια του δεύτερου βήματος του αλγορίθμου DSMC, οι σωματιδιακές συγκρούσεις μοντελοποιούνται κάνοντας χρήση του ενδομοριακού μοντέλου σκληρών σφαιρών (Hard Sphere model - HS) καθώς και του μοντέλου (Variable Hard Sphere model - VHS) [14]. Στο πρώτο μοντέλο η συνολική ενεργός διατομή (total cross section) παραμένει σταθερή, ενώ το ιξώδες είναι ανάλογο της τετραγωνικής ρίζας της θερμοκρασίας $\sqrt{T}$. Τα αριθμητικά αποτελέσματα που προκύπτουν παρουσιάζουν μια γενικότητα και δεν απαιτείται ο καθορισμός του αερίου που χρησιμοποιείται. Αντίθετα στο δεύτερο μοντέλο η συνολική ενεργός διατομή δεν παραμένει σταθερή αλλά είναι συνάρτηση της σχετικής ταχύτητας των σωματιδίων. Το ιξώδες στην περίπτωση αυτή είναι ανάλογο του T^{ω}, όπου η παράμετρος ω χαρακτηρίζει και το αέριο που χρησιμοποιείται. Στο συγκεκριμένο πρόβλημα πραγματοποιήθηκε σύγκριση αποτελεσμάτων μεταξύ των δύο παραπάνω μοντέλων ενδομοριακού δυναμικού και συγκεκριμένα για την περίπτωση του μοντελου VHS χρησιμοποιήθηκε αέριο ήλιο με $\omega = 0.66$ [14].

Η δυναμική κίνηση των σωματιδίων μοντελοποιείται για ένα ικανό αριθμό χρονικών βημάτων, ώστε να επιτευχθούν συνθήκες μόνιμης ροής στο υπολογιστικό πεδίο. Το αδιάστατο χρονικό βήμα που χρησιμοποιήθηκε ισούται με $\Delta t/t_m = 0.01(R/\upsilon_0)$ και επίσης για όλες τις περιπτώσεις, οι συνθήκες μόνιμης ροής θεωρήθηκε ότι επιτεύχθηκαν όταν η στατιστική διακύμανση της παροχής είναι μικρότερη του 1%. Περισσότερες λεπτομέρειες για την ανάλυση σφάλματος του αλγορίθμου αναφέρονται στην ακόλουθη Παράγραφο 8.5.

8.4 Βελτιστοποίηση αλγορίθμου DSMC

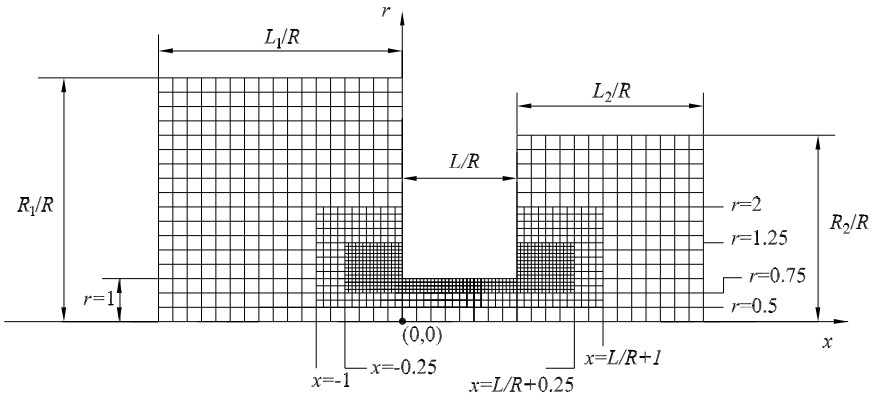
Για την επίτευξη της επιθυμητής ακρίβειας στα αριθμητικά αποτελέσματα πραγματοποιήθηκαν βελτιώσεις κατά την εφαρμογή του αλγορίθμου DSMC. Οι βελτιώσεις αυτές εστιάζονται σε δύο βασικά σημεία:

- Στην εφαρμογή τριών επιπέδων πύκνωσης του χωρικού πλέγματος και
- στην εισαγωγή επιφανειών με ειδικό συντελεστή βαρύτητας για την ομοιόμορφη κατανομή των σωματιδίων.

Για κάθε ένα από τα παραπάνω ζητήματα ακολουθεί αναλυτική περιγραφή των εννοιών και του τρόπου εφαρμογής τους στον αλγόριθμο της μεθόδου DSMC.

Η ροή αερίου διαμέσου αγωγού πεπερασμένου μήκους θεωρείται αξονοσυμμετρική, ενώ το υπολογιστικό πεδίο απεικονίζεται στο Σχ. 8.2. Αποτελείται από τον αγωγό που ορίζεται ως $(0 \leq r \leq 1,\ 0 \leq x \leq L/R)$, και τις δύο κυλινδρικές περιοχές πριν και μετά τον αγωγό που ορίζονται ως $(0 \leq r \leq R_1/R, -L_1/R \leq x \leq 0)$ και $(0 \leq r \leq R_2/R,\ L/R \leq x \leq (L+L_2)/R)$ αντίστοιχα. Το μέγεθος των παραπάνω κυλινδρικών περιοχών δεν είναι εξ' αρχής δεδομένο και για τον λόγο αυτό πραγματοποιήθηκε παραμετρική ανάλυση για την εύρεση των βέλτιστων διαστάσεων, με γνώμονα τη διατήρηση της αριθμητικής ακρίβειας των αποτελεσμάτων

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



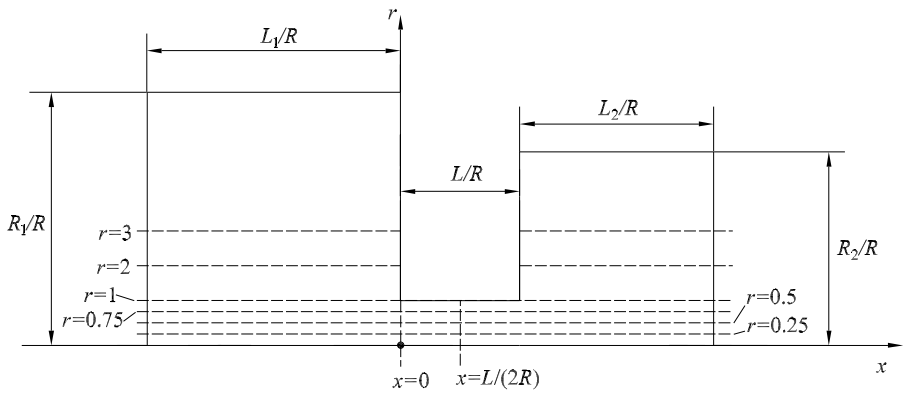
Σχήμα 8.2: Υπολογιστικό πεδίο με 3 επίπεδα πύκνωσης του χωρικού πλέγματος.

στο 1% καθώς και του υπολογιστικού χρόνου που απαιτείται. Οι τελικές διαστάσεις που χρησιμοποιήθηκαν σε όλες τις περιπτώσεις είναι $L_1 = R_1 = 8R$ και $L_2 = R_2 = 4R$. Το υπολογιστικό πλέγμα είναι ομοιόμορφο και περιέχει τρία επίπεδα πύκνωσης, όπως χαρακτηριστικά απεικονίζεται στο Σχ. 8.2. Κοντά στα τοιχώματα του αγωγού οι μεταβολές των μακροσκοπικών ποσοτήτων είναι αρκετά έντονες, γεγονός το οποίο δικαιολογεί την χρήση της πύκνωσης, διατηρώντας παράλληλα και την επιθυμητή ακρίβεια των αποτελεσμάτων στα συγκεκριμένα σημεία.

Όσον αφορά την χρήση επιφανειών με ειδικό συντελεστή βαρύτητας πρέπει να τονιστεί ότι στοχεύουν στην διατήρηση της ομοιόμορφης κατανομής των σωματιδίων σε όλο το υπολογιστικό πεδίο. Είναι προφανές ότι κατά την απουσία των συγκεκριμένων επιφανειών, ο αριθμός των σωματιδίων ανά μονάδα όγκου στους κυλινδρικούς δακτυλίους μακριά από τον άξονα συμμετρίας είναι πολύ μικρότερος σε σχέση με τις περιοχές κοντά σε αυτόν. Το γεγονός αυτό μειώνει την ικανότητα επίτευξης της επιθυμητής ακρίβειας. Στο συγκεκριμένο πρόβλημα έγινε χρήση επτά επιφανειών κατά την ακτινική και τριών κατά την αξονική κατεύθυνση. Η θέση των συγκεκριμένων επιφανειών απεικονίζεται στο Σχ. 8.3. Η βασική ιδέα της χρήσης των παραπάνω επιφανειών είναι η εξής: Τα σωματίδια που κινούνται προς τον άξονα συμμετρίας $r = 0$ ή από τα αριστερά προς τα δεξιά, καθώς διαπερνούν τις συγκεκριμένες επιφάνειες διπλασιάζονται και κάθε ένα από τα νέα σωματίδια αποκτούν το ήμισυ του αρχικού συντελεστή βαρύτητας. Αντίθετα, όταν τα σωματίδια απομακρύνονται από τον άξονα συμμετρίας ή κινούνται από τα δεξιά προς τα αριστερά, καθώς διαπερνούν τις εν λόγω επιφάνειες υποδιπλασιάζονται και το νέο σωματίδιο αποκτά το διπλάσιο συντελεστή βαρύτητας του αρχικού. Ακολουθώντας τη συγκεκριμένη διαδικασία περιορίζεται σημαντικά η στατιστική διακύμανση των αποτελεσμάτων, ενώ διατηρείται ο ίδιος μέσος αριθμός σωματιδίων σε όλο το υπολογιστικό πεδίο.

Ο αριθμός των σωματιδίων καθώς και των κελιών που χρησιμοποιήθηκαν εξαρτάται σημαντικά από το αδιάστατο μήκος του κυλινδρικού αγωγού (L/R). Πιο συγκεκριμένα ο αριθμός των σωματιδίων κυμαίνεται από 2×10^7 έως 3×10^7, ενώ ο αριθμός των κελιών από 4×10^4

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



Σχήμα 8.3: Θέση επιφανειών με ειδικό συντελεστή βαρύτητας.

εώς 8×10^4 ανά περίπτωση.

8.5 Ανάλυση σφάλματος αλγορίθμου DSMC

Η μέθοδος Direct Simulation Monte Carlo, λόγω της στατιστικής φύσης της, περιέχει σφάλματα που οφείλονται σε διαφορετικούς λόγους όπως π.χ. στη χρήση συγκεκριμένου αριθμού σωματιδίων για την μοντελοποίηση ενός πραγματικού αερίου, τον περιορισμό του υπολογιστικού πεδίου κοντά στην είσοδο και την έξοδο του αγωγού, η χωρική διακριτοποίηση του πεδίου ροής και τέλος τον διαχωρισμό της ελεύθερης κίνησης των σωματιδίων από τις σωματιδιακές συγκρούσεις. Κάθε ένας από τους παραπάνω λόγους θα πρέπει να αναλύεται ξεχωριστά ανάλογα με το εκάστοτε προς επίλυση πρόβλημα. Είναι προφανές ότι καθώς ο αριθμός των σωματιδίων που χρησιμοποιούνται αυξάνει ή καθώς το χωρικό πλέγμα πυκνώνει, η αριθμητική λύση θα προσεγγίζει την πραγματικότητα. Η βέλτιστη αυτή περίπτωση δεν είναι εφικτή λόγω του μεγάλου υπολογιστικού κόστους τόσο σε ισχύς όσο και σε χρόνο, που απαιτείται. Έτσι κάθε φορά ένας συμβιβασμός θα πρέπει να πραγματοποιείται ανάμεσα στα παραπάνω αίτια εισαγωγής σφάλματος στην μέθοδο DSMC.

Η μοντελοποίηση της ελεύθερης κίνησης των σωματιδίων καθώς και των μοριακών συγκρούσεων καθιστά τη μέθοδο DSMC ως ένα αριθμητικό πείραμα, στο οποίο δύο ήδη σφαλμάτων μπορούν να εμφανιστούν: α) τα σφάλματα που προκύπτουν από τη στοχαστική φύση της μεθόδου και β) τα συστηματικά σφάλματα που οφείλονται στη χωρική διακριτοποίηση, τον αριθμό των σωματιδίων, την επιλογή του χρονικού βήματος Δt, το μέγεθος του υπολογιστικού πεδίου κ.α. Στην πρώτη περίπτωση, το στατιστικό σφάλμα είναι δυνατόν να μειωθεί αυξάνοντας τον αριθμό των δειγμάτων (samples) που επιλέγονται κατά την αριθμητική διαδικασία. Ο αριθμός των δειγμάτων που πρέπει να επιτευχθεί ώστε το στατιστικό σφάλμα να είναι μικρότερο από ένα καθορισμένο άνω όριο, μπορεί να υπολογιστεί αναλυτικά. Συγκεκριμένα η στατιστική διακύμανση των αποτελεσμάτων στην μέθοδο DSMC είναι αντιστρόφως ανάλογη

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

της τετραγωνικής ρίζας του αριθμού των δειγμάτων [14]. Στο συγκεκριμένο πρόβλημα της ροής αερίου διαμέσου κυλινδρικού αγωγού πεπερασμένου μήκους, η βασική παράμετρος, από την οποία καθορίζεται το στατιστικό σφάλμα είναι η παροχή που διέρχεται από την είσοδο και την έξοδο του αγωγού. Η παροχή εκφράζεται συναρτήσει του συνολικού αριθμού σωματιδίων που διέρχονται από την διατομή του αγωγού. Έτσι στην περίπτωση του αριθμού των σωματιδίων N^+ που διέρχονται από την είσοδο του αγωγού (επίπεδο $x = 0$) και κινούνται από αριστερά προς τα δεξιά, η στατιστική διακύμανση είναι της τάξης $\sqrt{N^+}$. Αντίστοιχα η διακύμανση των σωματιδίων N^- που κινούνται από τα δεξιά προς τα αριστερά και διαπερνούν την είσοδο του αγωγού είναι της τάξης $\sqrt{N^-}$. Η παροχή που διέρχεται από την είσοδο του αγωγού ισούται με $N^+ - N^-$ και πραγματοποιώντας στατιστική ανάλυση, οι άνω και κάτω εκτιμήσεις της παροχής ισούνται με

$$(N^+ \pm \sqrt{N^+}) - (N^- \pm \sqrt{N^-}) \tag{8.5}$$

Κανονικοποιώντας με την παροχή $N^+ - N^-$ προκύπτει ότι

$$1 \pm \frac{\sqrt{N^+} + \sqrt{N^-}}{N^+ - N^-} \tag{8.6}$$

Σε όλες τις περιπτώσεις που μελετήθηκαν το κριτήριο τερματισμού του αλγορίθμου ήταν η ανισότητα

$$\frac{\sqrt{N^+} + \sqrt{N^-}}{N^+ - N^-} < 0.01, \tag{8.7}$$

δηλαδή το στατιστικό σφάλμα της παροχής στην είσοδο του κυλινδρικού αγωγού να είναι μικρότερο από 1%. Η ίδια μεθοδολογία πραγματοποιήθηκε και στην έξοδο ($x = L/R$) του αγωγού υπολογίζοντας το αντίστοιχο στατιστικό σφάλμα.

Κατά την μελέτη του συγκεκριμένου προβλήματος παρατηρήθηκε ότι καθώς η παράμετρος αραιοποίησης δ αυξάνει, δηλαδή καθώς προσεγγίζεται το υδροδυναμικό όριο, ο αριθμός των δειγμάτων για την επίτευξη του παραπάνω κριτηρίου σύγκλισης αυξάνει σημαντικά. Την ίδια τάση παρουσιάζει και η μεταβολή του αδιάστατου μήκους L/R του αγωγού.

8.6 Αριθμητικά αποτελέσματα

Τα αριθμητικά αποτελέσματα που προέκυψαν κατά την επίλυση του προβλήματος ροής αερίου σε αγωγό μικρού μήκους περιλαμβάνουν τον υπολογισμό της αδιάστατης παροχής W του αερίου συναρτήσει του αδιάστατου μήκους L/R του αγωγού καθώς και της παραμέτρου αραιοποίησης δ. Μελετήθηκαν οι περιπτώσεις όπου το αδιάστατο μήκος L/R παίρνει τιμές $L/R = 0, 0.1, 0.5, 1, 2, 5$ και 10, ενώ η παράμετρος αραιοποίησης κυμαίνεται από 0 (ελεύθερη μοριακή περιοχή) έως 2000 (υδροδυναμικό όριο). Επίσης παρουσιάζονται γραφήματα κατανομής των βασικών μακροσκοπικών ποσοτήτων της ταχύτητας, αριθμητικής πυκνότητας, πίεσης

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

και θερμοκρασίας, ποσότητες οι οποίες παρουσιάζουν πρακτικό ενδιαφέρον κατά το σχεδιασμό και τη χρήση των εν λόγω αγωγών.

Στην παρούσα παράγραφο θα αναλυθούν επίσης η επίδραση των διαφόρων οριακών συνθηκών αερίου - τοιχώματος που χρησιμοποιήθηκαν, καθώς και η επίδραση των διαφορετικών μοντέλων ενδομοριακού δυναμικού.

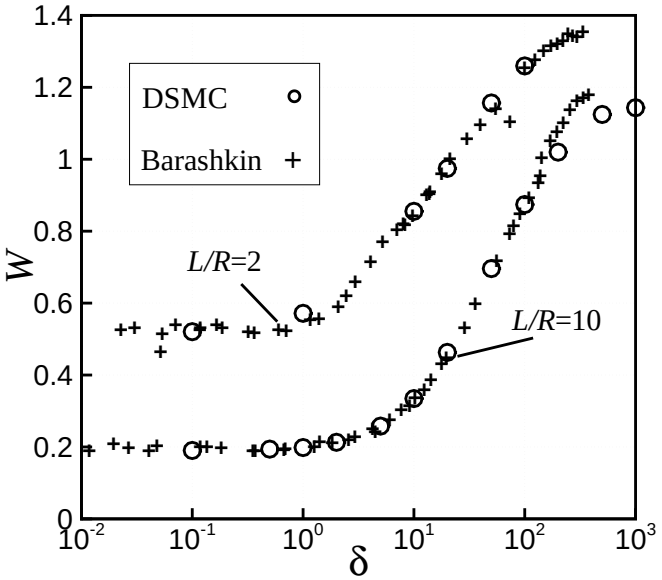
8.6.1 Αδιάστατη παροχή

Τα αριθμητικά αποτελέσματα για την αδιάστατη παροχή W χρησιμοποιώντας οριακές συνθήκες πλήρους διάχυσης και μοντέλο ενδομοριακού δυναμικού αυτό των σκληρών σφαιρών, παρουσιάζονται στον Πίνακα 8.1, συναρτήσει της παραμέτρου αραιοποίησης δ και του αδιάστατου μήκους L/R. Οι οριακές συνθήκες πλήρους διάχυσης είναι δυνατόν να προκύψουν από το μοντέλο Cercignani - Lampis θέτοντας τους συντελεστές α_t και α_n ίσους με την μονάδα. Η περίπτωση $L/R = 0$, η οποία αντιστοιχεί στην ροή αερίου διαμέσου κυλινδρικής κοιλότητας (orifice flow), προέρχεται από το άρθρο [53] και παρατίθεται για λόγους πληρότητας και σύγκρισης. Επίσης τα αποτελέσματα που αντιστοιχούν στην ελεύθερη μοριακή περιοχή ($\delta = 0$) συμπίπτουν με τα αντίστοιχα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στο άρθρο [17], τα οποία προκύπτουν κάνοντας χρήση της μεθόδου Test Particle Monte Carlo.

Αναλύοντας τα αριθμητικά αποτελέσματα της αδιάστατης παροχής W, παρατηρείται το γεγονός ότι διατηρώντας την παράμετρο αραιοποίησης δ σταθερή, καθώς αυξάνεται το αδιάστατο μήκος του αγωγού L/R μειώνεται η παροχή W. Τονίζεται ότι στην περίπτωση όπου $\delta = 1$, η τιμή του W για $L/R = 0.1$ είναι πέντε περίπου φορές μεγαλύτερη από την περίπτωση $L/R = 10$, ενώ για $\delta = 10^2$ η αντίστοιχη μείωση του W είναι μικρότερη από δύο φορές. Αντίθετα διατηρώντας το μήκος L/R του αγωγού σταθερό, παρατηρείται ότι η αδιάστατη παροχή W αυξάνει καθώς αυξάνεται η παράμετρος αραιοποίησης δ. Η εξάρτηση της παροχή W από την παράμετρο αραιοποίησης δ για όλες τις τιμές του μήκους L/R μπορεί να αποτυπωθεί σε τρεις διακριτές περιοχές. Η πρώτη περιοχή αντιστοιχεί σε μικρές τιμές του δ όπου παρατηρείται μικρή αύξηση της παροχής. Η δεύτερη περιοχή περιλαμβάνει τις ενδιάμεσες τιμές του δ, όπου παρατηρείται σημαντική αύξηση του W, η οποία είναι γραμμικά ανάλογη της κλίσης $\log \delta$, ενώ η τρίτη περιοχή περιλαμβάνει τις μεγάλες τιμές του δ, στις οποίες παρατηρείται ασθενής αύξηση του W, προσεγγίζοντας ασυμπτοτικά τα αντίστοιχα αποτελέσματα στο υδροδυναμικό όριο ($\delta \to \infty$).

Για την επαλήθευση των αριθμητικών αποτελεσμάτων της παροχής, πραγματοποιήθηκε σύγκριση με αντίστοιχα πειραματικά αποτελέσματα, τα οποία είναι διαθέσιμα στην διεθνή βιβλιογραφία. Στο Σχ. 8.4, παρουσιάζεται σύγκριση μεταξύ των αριθμητικών αποτελεσμάτων που αντιστοιχούν σε $L/R = 2$ και 10 και των αντίστοιχων πειραματικών για $L/R = 1.92$ και 10.66 αντίστοιχα [113]. Παρατηρείται ότι, ενώ τα πειραματικά αποτελέσματα αντιστοιχούν σε δυατομικό αέριο CO_2 και τα αριθμητικά αποτελέσματα αντιστοιχούν σε μονοατομικό αέριο, εν τούτοις παρουσιάζεται μια πολύ καλή ταύτιση των αποτελεσμάτων για κάθε τιμή της

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



Σχήμα 8.4: Σύγκριση αριθμητικών και πειραματικών αποτελεσμάτων για L/R=2 και 10.

παραμέτρου αραιοποίησης δ.

Οι Fujimoto και Usami [92], βασισμένοι στα πειραματικά αποτελέσματα τους, έχουν προτείνει μια εμπειρική σχέση, από την οποία υπολογίζεται η αδιάστατη παροχή συναρτήσει της παραμέτρου αραιοποίησης και του λόγου πίεσης πριν και μετά τον αγωγό. Στο Σχ. 8.5 απεικονίζεται η σύγκριση των αριθμητικών αποτελεσμάτων με τα αντίστοιχα πειραματικά αποτελέσματα, τα οποία βασίζονται στην εμπειρική σχέση των Fujimoto και Usami. Παρατηρείται μια πολύ καλή ταύτιση για όλες τις περιπτώσεις του αδιάστατου μήκους L/R και για $\delta < 500$.

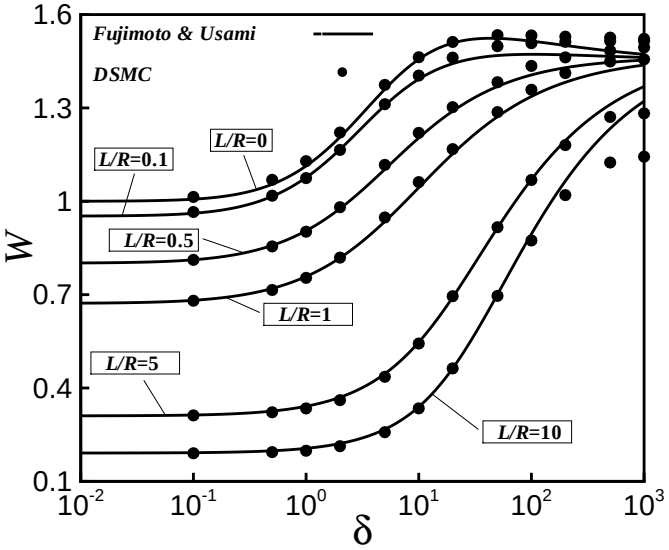
Τέλος, σύγκριση πραγματοποιήθηκε με πρόσφατα αριθμητικά αποτελέσματα από τους Lilly et al. [126], τα οποία αντιστοιχούν στις περιπτώσεις $L/R = 0.03$ και 2.4, ενώ οι αντίστοιχες πιέσεις πριν τον αγωγό είναι $P_1 = 1071$ και 410 Pa. Η παράμετρος αραιοποίησης δ που αντιστοιχεί στις δύο συγκεκριμένες περιπτώσεις είναι $\delta = 24.7$ και 9.45 αντίστοιχα. Και στις δύο περιπτώσεις η διαφορά μεταξύ των παρόντων αριθμητικών αποτελεσμάτων και αυτών στο [126] είναι μικρότερη του 2%.

Με τις παραπάνω συγκρίσεις, τα αριθμητικά αποτελέσματα του Πίνακα 8.1 μπορούν να χαρακτηριστούν αξιόπιστα για όλο το εύρος των τιμών του μήκους L/R του αγωγού.

8.6.2 Οριακές συνθήκες αερίου - τοιχώματος

Στην παρούσα παράγραφο θα περιγραφεί η επίδραση των διαφορετικών μοντέλων προσομοίωσης αερίου - τοιχώματος, τα οποία επηρεάζουν σε μεγάλο βαθμό την παροχή καθώς και το πεδίο ροής στον αγωγό. Στον Πίνακα 8.2 παρουσιάζονται αποτελέσματα της αδιάστα-

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



Σχήμα 8.5: Σύγκριση αριθμητικών και πειραματικών αποτελεσμάτων για διάφορες τιμές του λόγου L/R.

της παροχής W για συγκεκριμένες τιμές του μήκους L/R και της παραμέτρου αραιοποίησης δ, χρησιμοποιώντας οριακές συνθήκες πλήρους διάχυσης (3η στήλη) και οριακές συνθήκες Cercignani-Lampis (4η στήλη). Στη δεύτερη περίπτωση οι συντελεστές που αντιστοιχούν στην εφαπτομενική προς το τοίχωμα ορμή του σωματιδίου α_t και στην κινητική ενέργεια κάθετα στο τοίχωμα α_n, επιλέχθηκαν να ισούνται με α_t=0.5 και α_n=1. Τονίζεται ότι τα αποτελέσματα της τρίτης και τέταρτης στήλης του Πίνακα 8.2 αντιστοιχούν σε ενδομοριακό μοντέλο σκληρών σφαιρών HS, ενώ η πέμπτη στήλη αντιστοιχεί στο ενδομοριακό μοντέλο VHS. Από την ανάλυση του Πίνακα 8.2 προκύπτει ότι καθώς το μήκος του αγωγού L/R αυξάνεται, η επίδραση του μοντέλου αλληλεπίδρασης αερίου - τοιχώματος αυξάνεται δραστικά. Συγκεκριμένα, για $L/R = 0.1$, 1 και 10 και για $\delta = 1$, η αδιάστατη παροχή W στην τέταρτη στήλη έχει αυξηθεί κατά 1.8%, 18.4% και 83.3% σε σχέση με τα αντίστοιχα αποτελέσματα της τρίτης στήλης. Η ίδια τάση παρατηρείται για όλες τις τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ. Ως αποτέλεσμα, η εξάρτηση της παροχής στο μοντέλο αλληλεπίδρασης αερίου - τοιχώματος είναι πολύ ασθενής για $L/R < 1$, ενώ είναι αρκετά σημαντική στην περίπτωση όπου $L/R \geq 1$.

Τέλος από τον Πίνακα 8.2 παρατηρείται το γεγονός ότι η επίδραση του μοντέλου αλληλεπίδρασης έχει μικρή εξάρτηση από την παράμετρο αραιοποίησης. Συγκεκριμένα, για $L/R = 1$ και $\delta = 0.1$, 1 και 10, η παροχή W στην τέταρτη στήλη αυξάνεται κατά 17.9%, 18.2% και 11.4%, σε σχέση με τις αντίστοιχες τιμές της τρίτης στήλης. Γενικά όσο περισσότερο αραιοποιημένη είναι η ροή, τόσο μειώνεται η επίδραση του μοντέλου αλληλεπίδρασης αερίου τοιχώματος, ενώ στην περιοχή ολίσθησης καθώς και στην υδροδυναμική περιοχή η επίδραση αυτή παύει να υφίσταται.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Πίνακας 8.1: Αδιάστατη παροχή W ως προς το μήκους L/R και την παράμετρο αραιοποίησης δ για μοντέλο σκληρών σφαιρών (HS) και οριακές συνθήκες πλήρους διάχυσης κατά την αλληλεπίδραση αερίου - τοιχώματος.

	W						
δ	$L/R=0$	L/R=0.1	L/R=0.5	L/R=1	L/R=2	L/R=5	L/R=10
0.0	1.000	0.953	0.801	0.672	0.514	0.311	0.192
0.1	1.014	0.965	0.812	0.680	0.520	0.312	0.190
0.5	1.069	1.018	0.855	0.715	0.544	0.322	0.194
1	1.129	1.074	0.902	0.754	0.572	0.334	0.198
2	1.221	1.165	0.981	0.819	0.620	0.361	0.213
5	1.374	1.312	1.117	0.948	0.732	0.436	0.258
10	1.463	1.404	1.220	1.062	0.855	0.543	0.335
20	1.512	1.462	1.302	1.168	0.974	0.695	0.463
50	1.534	1.498	1.383	1.287	1.156	0.917	0.696
100	1.533	1.508	1.435	1.358	1.259	1.068	0.874
200	1.529	1.512	1.462	1.412	1.339	1.184	1.020
500	1.526	1.515	1.484	1.449	1.397	1.271	1.125
1000	1.523	1.515	1.494	1.456	1.406	1.282	1.143
2000	1.522	1.517	1.493	1.458	1.404	1.284	1.145

8.6.3 Μοντέλο ενδομοριακού δυναμικού

Όπως προαναφέρθηκε, μελετήθηκε η επίδραση του μοντέλου ενδομοριακού δυναμικού στις χαρακτηριστικές ποσότητες της ροής, εφαρμόζοντας το μοντέλο σκληρών σφαιρών HS - Hard Sphere model και το μοντέλο VHS - Variable Hard Sphere model. Στην τελευταία στήλη του Πίνακα 8.2 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της παροχής για αέριο ήλιο και θεωρώντας οριακές συνθήκες πλήρους διάχυσης. Συγκρίνοντας τα αποτελέσματα της τρίτης και της πέμπτης στήλης προκύπτει ότι η επίδραση του μοντέλου ενδομοριακού δυναμικού στην αδιάστατη παροχής W είναι αμελητέα. Συγκεκριμένα για $L/R \leq 1$, τα αποτελέσματα παραμένουν αμετάβλητα, ενώ για $L/R = 10$ και για μεγάλες τιμές του δ, εμφανίζεται μια μικρή επίδραση στην παροχής W με μέγιστη απόκλιση 5.3%.

8.6.4 Πεδίο Ροής

Στην παρούσα παράγραφο θα παρουσιασθούν και θα αναλυθούν οι κατανομές των βασικών μακροσκοπικών ποσοτήτων της αριθμητικής πυκνότητας, της ταχύτητας, της πίεσης και της θερμοκρασίας κατά μήκος του άξονα συμμετρίας $r = 0$ του αγωγού, καθώς και σε ολόκληρο το πεδίο ροής. Στην πρώτη περίπτωση ανήκει το Σχ. 8.6, στο οποίο παρουσιάζονται οι κατανομές των μακροσκοπικών μεγεθών για $\delta = 1$ και 10^2 και για διάφορες τιμές του μήκους L/R.

Σε όλες τις περιπτώσεις, καθώς αυξάνεται η x διεύθυνση, η αξονική ταχύτητα αυξάνεται, ενώ η πίεση και η θερμοκρασία μειώνονται. Τονίζεται ότι η αξονική ταχύτητα αυξάνεται ση-

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Πίνακας 8.2: Αδιάστατη παροχή W ως προς διάφορες οριακές συνθήκες και μοντέλα ενδομοριακού δυναμικού: διαχυτική ανάκλαση ($\alpha_n = \alpha_t = 1$), CL - Cercignani-Lampis ($\alpha_n = 1$, $\alpha_t = 0.5$): HS - hard spheres, VHS - variable hard spheres (ήλιο, $\omega = 0.66$).

		W		
		HS		VHS
L/R	δ	Diffuse	CL	Diffuse
0	0.1	1.014	1.010	1.014
	1	1.129	1.129	1.115
	10	1.462	1.454	1.446
	100	1.534	1.523	1.531
	1000	1.523	1.516	1.522
0.1	0.1	0.965	0.983	0.963
	1	1.074	1.093	1.063
	10	1.404	1.415	1.388
	100	1.508	1.507	1.507
	1000	1.515	1.509	1.514
1	0.1	0.680	0.802	0.680
	1	0.754	0.891	0.746
	10	1.062	1.183	1.041
	100	1.358	1.396	1.349
	1000	1.456	1.466	1.456
10	0.1	0.190	0.343	0.190
	1	0.198	0.363	0.197
	10	0.335	0.493	0.318
	100	0.874	0.932	0.842
	1000	1.143	1.162	1.117

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

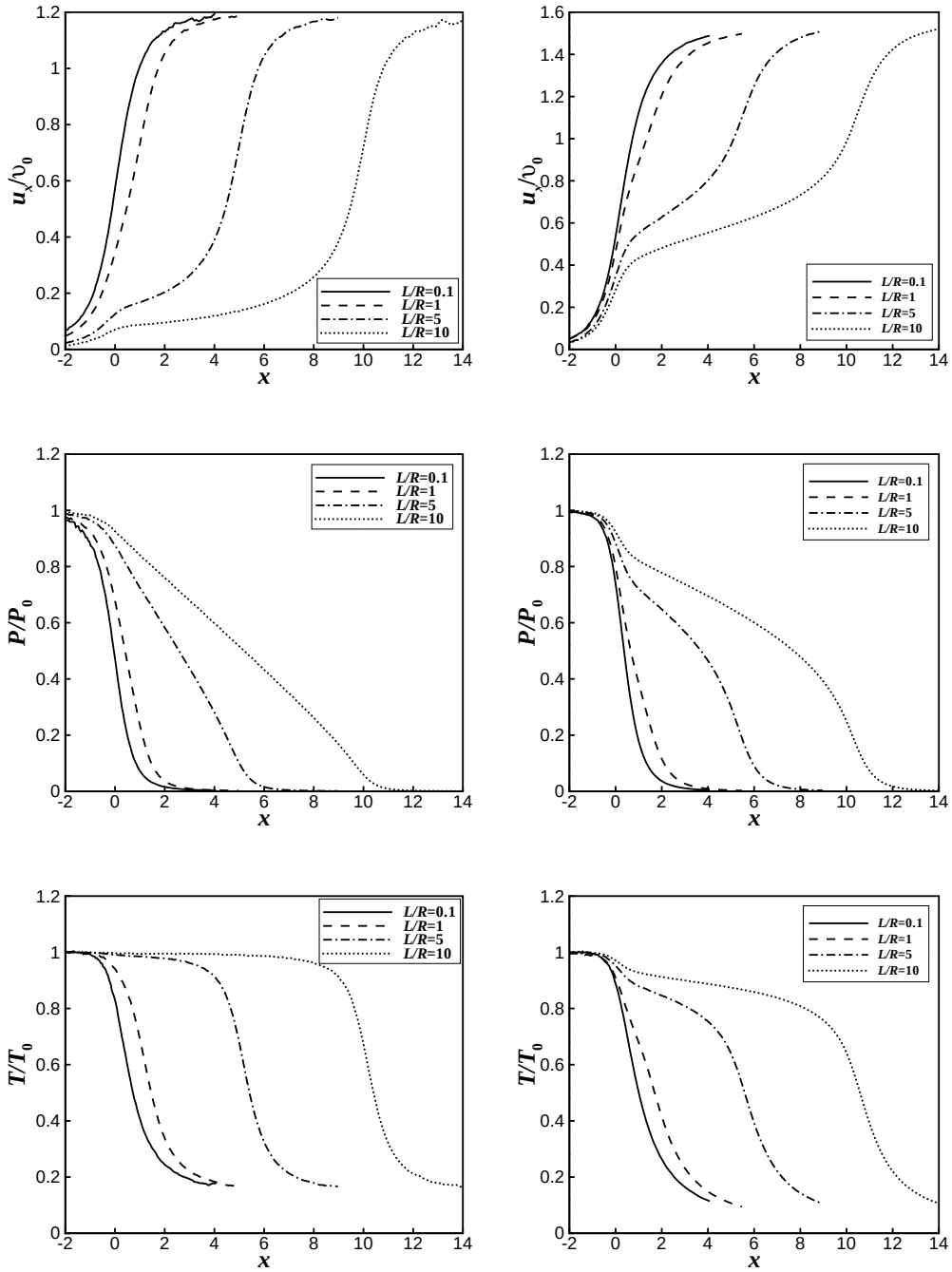
μαντικά κοντά στην είσοδο και την έξοδο του αγωγού, ενώ στο εσωτερικό του αυξάνεται με μικρότερο ρυθμό. Η συγκεκριμένη συμπεριφορά γίνεται ευκολότερα αντιληπτή στις περιπτώσεις για $L/R = 5$ και 10. Η μέγιστη αξονική ταχύτητα κατά μήκος του άξονα συμμετρίας εμφανίζεται μακριά από την έξοδο του αγωγού και είναι ανεξάρτητη του μήκους L/R του αγωγού, ενώ αντίθετα εξαρτάται από την παράμετρο αραιοποίησης δ, συγκρίνοντας τις περιπτώσεις για $\delta = 10^2$ και $\delta = 1$. Οι κατανομές της πίεσης και της θερμοκρασίας ποιοτικά εμφανίζουν αντίθετη συμπεριφορά σε σχέση με την αξονική ταχύτητα, γεγονός το οποίο ήταν αναμενόμενο.

Η επίδραση της παραμέτρου αραιοποίησης δ στις εν λόγω μακροσκοπικές ποσότητες απεικονίζεται στο Σχ. 8.7, το οποίο αντιστοιχεί σε κατανομές για $L/R = 0.5$ και 5. Παρατηρείται ότι τα αποτελέσματα για $\delta \leq 1$ και για $\delta \geq 10^2$, πλησιάζουν στα αντίστοιχα της ελεύθερης μοριακή περιοχή ($\delta = 0$) καθώς και του υδροδυναμικού ορίου ($\delta = 2000$). Το γεγονός αυτό έρχεται σε συμφωνία με τα αποτελέσματα του Πίνακα 8.1 όπου, όπως προαναφέρθηκε, η αδιάστατη παροχή W παραμένει σχεδόν αμετάβλητη σε μικρές και μεγάλες τιμές του δ, ενώ μειώνεται σημαντικά στο εύρος $1 < \delta < 10^2$. Πρέπει να τονιστεί ότι για μεγάλες τιμές του δ, η απότομη αύξηση στην ταχύτητα πριν και μετά τον αγωγό είναι περίπου η ίδια, ενώ στην περίπτωση μικρών τιμών του δ η αύξηση της ταχύτητας στην έξοδο του αγωγού είναι αρκετά πιο μεγάλη από την αντίστοιχη στην είσοδο του αγωγού. Το γεγονός αυτό απεικονίζεται καλύτερα στην περίπτωση $L/R = 5$.

Στο Σχ. 8.8 παρουσιάζονται τα προφίλ της αδιάστατης αξονικής ταχύτητας στην είσοδο ($x = 0$), το μέσο ($x = L/(2R)$) και την έξοδο ($x = L/R$) του αγωγού και για διαφορετικές τιμές των L/R και δ. Τα αντίστοιχα προφίλ πιέσεων απεικονίζονται στο Σχ. 8.9. Οι συνδυασμοί $L/R = 0.5, \delta = 1$ και $L/R = 5, \delta = 10^2$ μπορεί να θεωρηθούν ως ενδεικτικές περιπτώσεις όπου οι ποσότητες L/R και δ παίρνουν μικρές και μεγάλες τιμές αντίστοιχα ενώ οι άλλοι δύο συνδυασμοί π.χ $L/R = 0.5, \delta = 10^2$ και $L/R = 5, \delta = 1$ αντιπροσωπεύουν τις περιπτώσεις όπου μια από τις δύο ποσότητες είναι μεγάλη ενώ η δεύτερη μικρή. Για κάθε μια από τις τέσσερεις περιπτώσεις, οι κατανομές ταχύτητας και πίεσης χαρακτηρίζουν την εξέλιξη της ροής κατά μήκος του αγωγού.

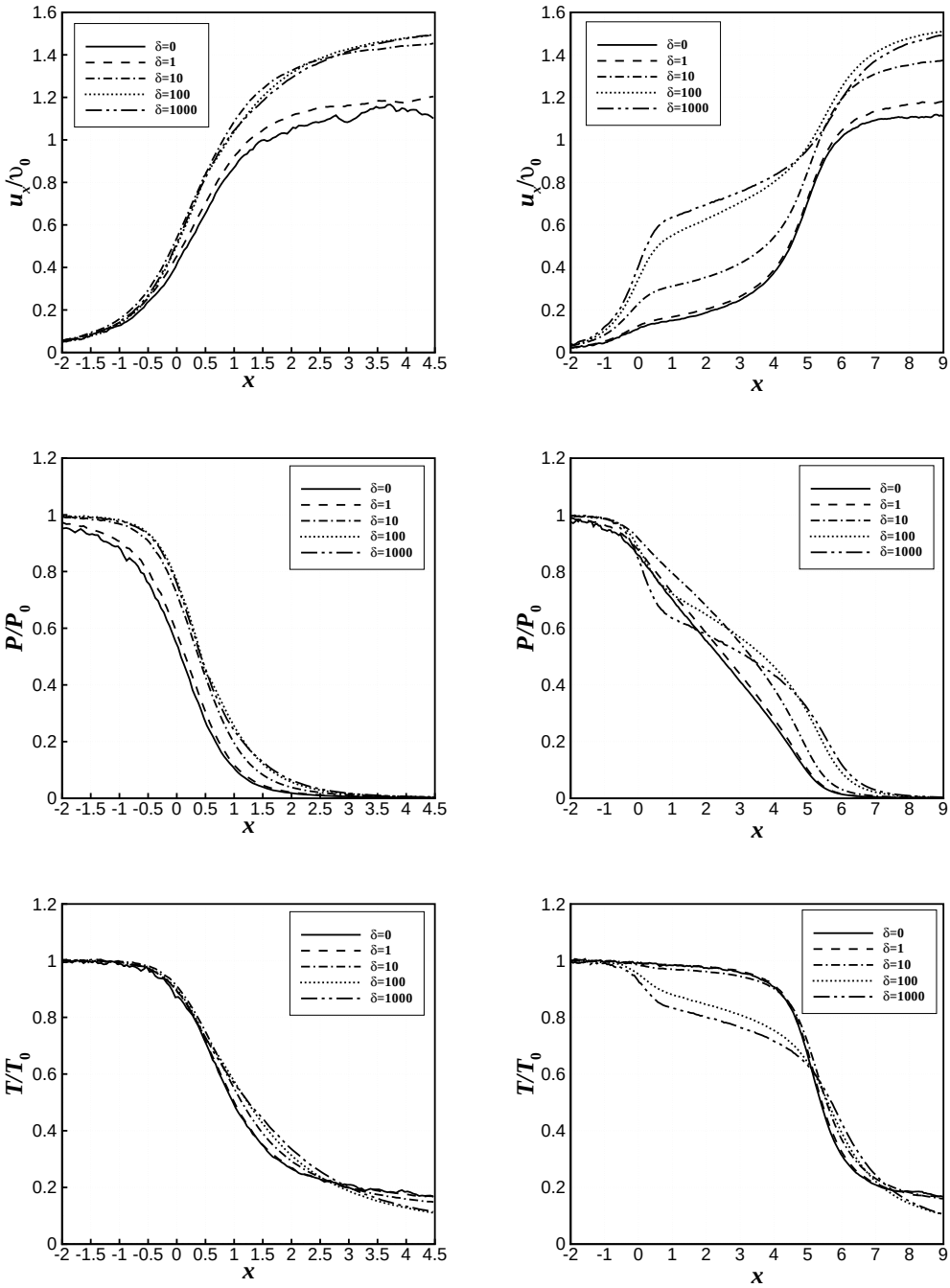
Τέλος στα Σχήματα 8.10 και 8.11 παρουσιάζονται οι ισοϋψείς καμπύλες της πίεσης και του τοπικού αριθμού Ma για $L/R = 0.1$ και 10 και $\delta = 1$, 10 και 1000. Μελετώντας τα συγκεκριμένα γραφήματα προκύπτει ότι στην περίπτωση όπου το δ παραμένει σταθερό και το μήκος L/R μεταβάλλεται από 0.1 σε 10, το πεδίο ροής διαφοροποιείται σημαντικά τόσο ποιοτικά όσο και ποσοτικά. Επίσης όταν το μήκος του αγωγού παραμένει σταθερό και το δ μεταβάλλεται από 1 έως το 1000 η ποιοτική συμπεριφορά των μεγεθών παραμένει αμετάβλητη ενώ ποσοτικά διαφοροποιούνται.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



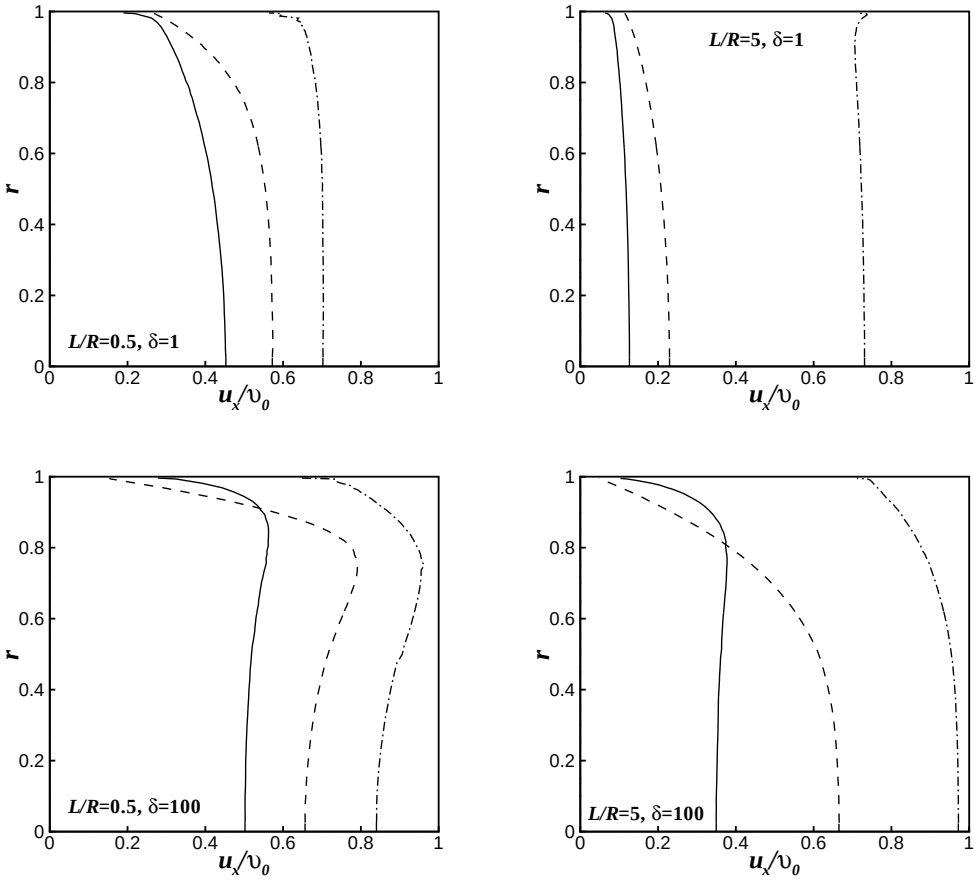
Σχήμα 8.6: Κατανομές αδιάστατης αξονικής ταχύτητας, πίεσης και θερμοκρασίας κατά μήκος του άξονα συμμετρίας $r = 0$, για δ=1 (αριστερά), δ=100 (δεξιά) και διάφορες τιμές του μήκους L/R.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



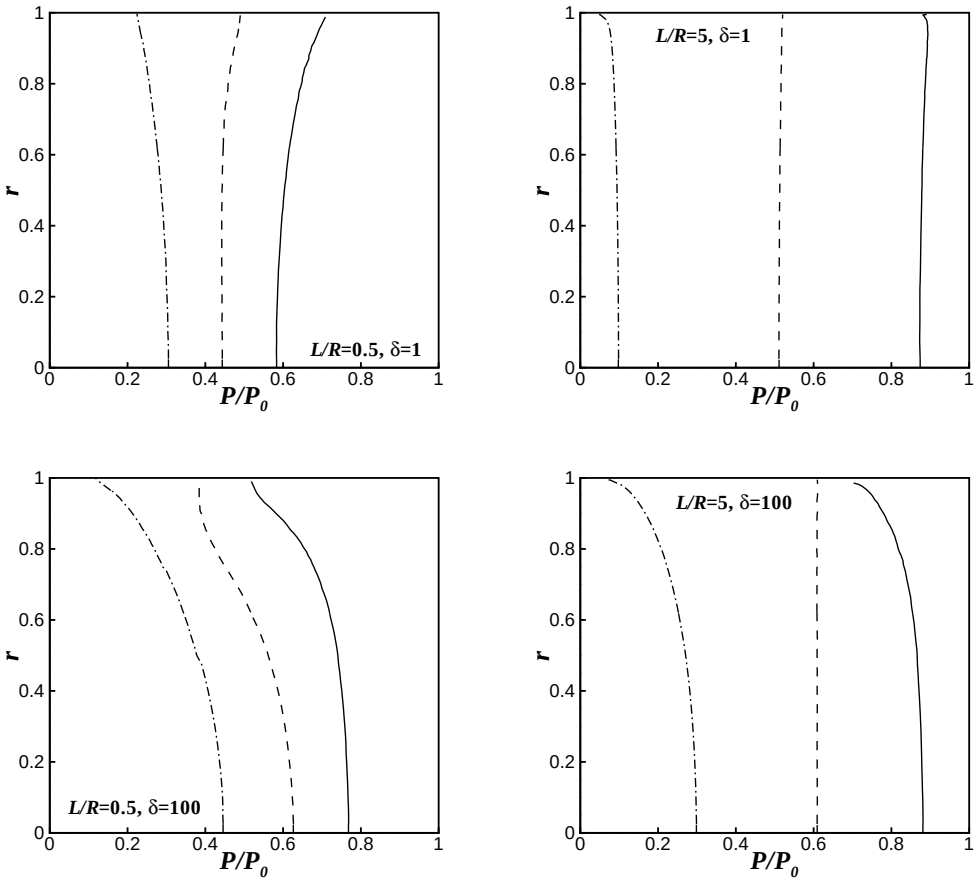
Σχήμα 8.7: Κατανομές αδιάστατης αξονικής ταχύτητας, πίεσης και θερμοκρασίας κατά μήκος του άξονα συμμετρίας $r = 0$, για $L/R = 0.5$ (αριστερά), $L/R = 5$ (δεξιά) και διάφορες τιμές του δ.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



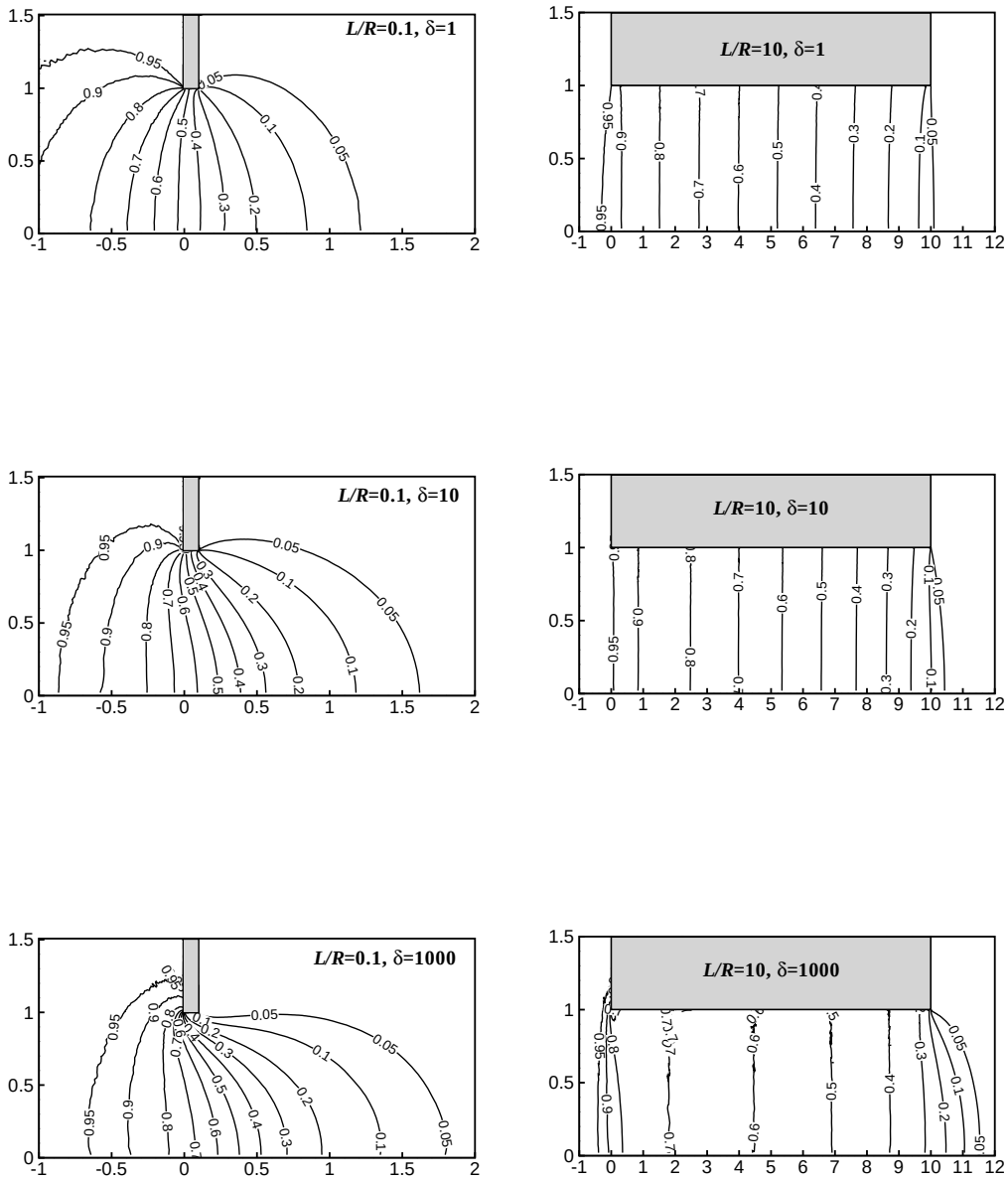
Σχήμα 8.8: Κατανομές αδιάστατης αξονικής ταχύτητας στην είσοδο ($x = 0$: —), μέση ($x = L/(2R)$: − − −) και έξοδο ($x = L/R$: − · − · −) του αγωγού για διαφορετικές τιμές των L/R και δ.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



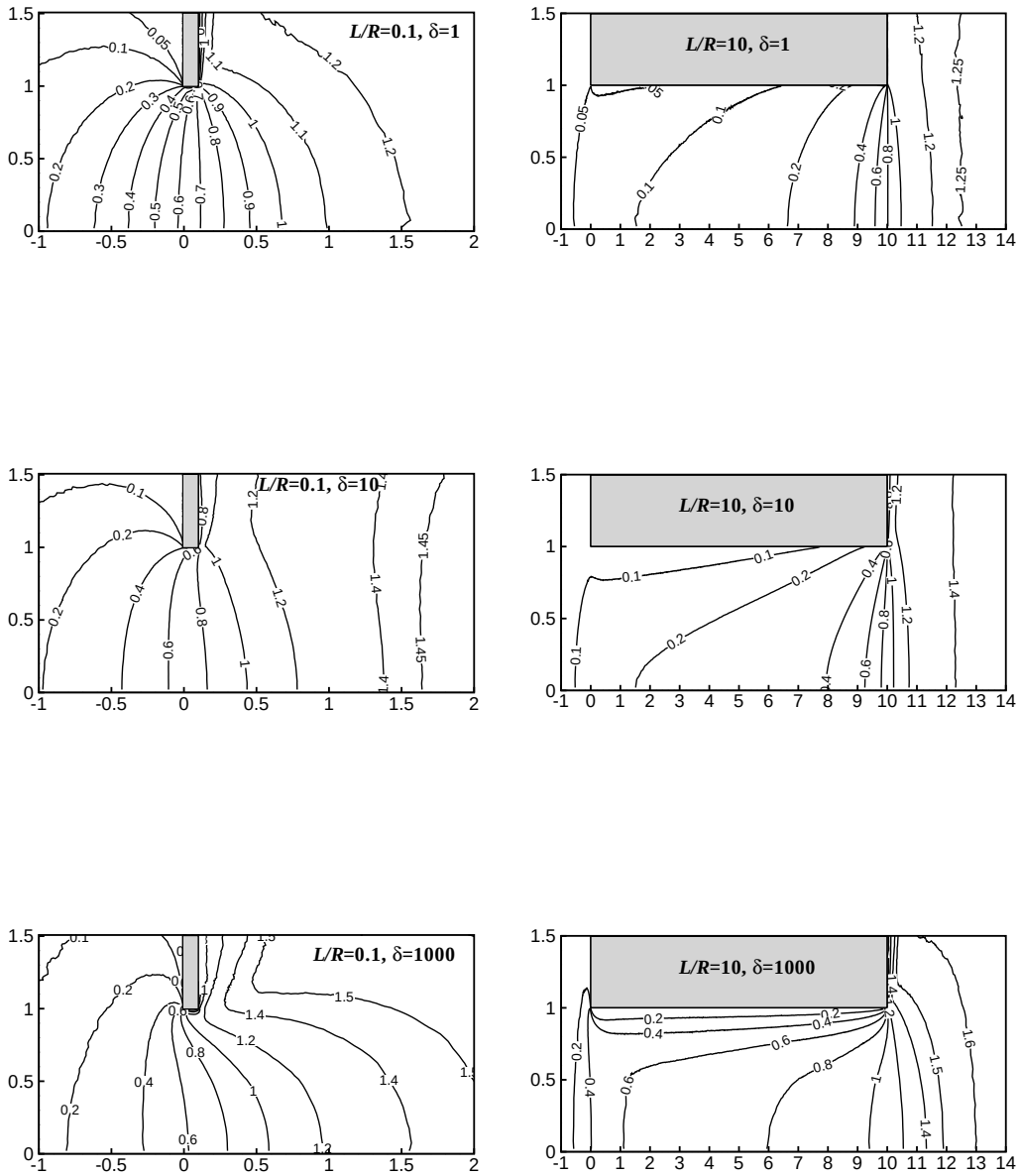
Σχήμα 8.9: Κατανομές πίεσης στην είσοδο ($x = 0$: —), μέση ($x = L/(2R)$: $- - -$) και έξοδο ($x = L/R$: $- \cdot - \cdot -$) του αγωγού για διαφορετικές τιμές των L/R και δ.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



Σχήμα 8.10: Ισοϋψείς πίεσης κοντά στην περιοχή του αγωγού για $L/R = 0.1$ (αριστερά) και 10 (δεξιά) και διάφορες τιμές του δ.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



Σχήμα 8.11: Ισοϋψείς τοπικού αριθμού Ma κοντά στην περιοχή του αγωγού για $L/R = 0.1$ (αριστερά) και 10 (δεξιά) και διάφορες τιμές του δ.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Κεφαλαιο 9

Ροη αεριου διαμεσου κυλινδρικου αγωγου πεπερασμενου μηκουσ

9.1 Εισαγωγή

Η λεπτομερής ποιοτική περιγραφή του πεδίου ροής αραιοποιημένων αερίων που διέρχονται από κυλινδρικούς αγωγούς πεπερασμένου μήκους παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον στον βέλτιστο σχεδιασμό και λειτουργία διαφόρων τύπων συσκευών σε ποικίλα τεχνολογικά πεδία. Μερικές από τις παραπάνω εφαρμογές είναι οι μετρητές ροής μάζας, τα μικροακροφύσια που χρησιμοποιούνται ως συστήματα πρόωσης στη αεροδιαστημική, τα δίκτυα σωληνώσεων, οι αντλίες και πύργοι απόσταξης σε συστήματα κενού, οι μεμβράνες και τα πορώδη μέσα στην τεχνολογία διύλισης και τέλος η κατασκευή μικροηλεκτρονικών συστημάτων και ροϊκών συσκευών σε μικρο-ηλεκτρομηχανολογικά συστήματα (MEMS).

Λόγω της θεωρητικής και πρακτικής σημασίας, το συγκεκριμένο πρόβλημα έχει εκτενώς μελετηθεί στο παρελθόν. Οι πρώτες εργασίες στο συγκεκριμένο θέμα παρουσιάστηκαν από τους Knudsen [97] και Clausing [127] και οι συγκεκριμένες εργασίες αποτέλεσαν σημείο αναφοράς για νεότερες μελέτες τόσο σε θεωρητικό όσο και πειραματικό επίπεδο για ροές διαμέσου σχισμών και κυλινδρικών αγωγών μικρού μήκους. Μερικά από τα επιστημονικά άρθρα που σχετίζονται άμεσα με την παρούσα μελέτη είναι τα [109, 112, 128, 92, 53]. Επίσης σημαντική ερευνητική προσφορά στο συγκεκριμένο θέμα έχει πραγματοποιηθεί από τους Sharipov και Seleznev [17] και πιο πρόσφατα από τον Xie [129].

Η αραιοποιημένη ροή αερίου διαμέσου κυλινδρικού αγωγού που ενώνει δύο δοχεία, παρόλη την απλή γεωμετρική περιγραφή, απαιτεί σημαντική υπολογιστική ισχύς, κυρίως λόγω του γεγονότος ότι για την ακριβή περιγραφή του πεδίου ροής κατά την προσομοίωση πρέπει να συμπεριληφθούν περιοχές των δοχείων ανάντη και κατάντη της ροής. Η πιο συνήθης υπολογιστική μέθοδος που έχει την δυνατότητα επίλυσης τέτοιων ροών στην μεταβατική περιοχή είναι η μέθοδος Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) [14]. Στην περιοχή ολίσθησης και υδροδυναμική περιοχή είναι δυνατόν να εφαρμοσθούν οι γνωστές εξισώσεις Navier-Stokes με

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

οριακές συνθήκες ολίσθησης ή μη. Τονίζεται ότι αν και η μέθοδος DSMC είναι εν γένει αρκετά αποτελεσματική, το υπολογιστικό κόστος είναι αρκετά μεγάλο όταν εξετάζονται όλες οι περιπτώσεις παραμέτρων ροής και γεωμετρίας. Οι πιο υπολογιστικά δαπανηρές περιπτώσεις ροών είναι όταν ο λόγος του μήκους προς την ακτίνα μειώνεται και η πτώση πίεσης είναι μικρή. Η ροή στις περιπτώσεις αυτές δεν μπορεί να θεωρηθεί ως πλήρως ανεπτυγμένη και για τον λόγο αυτό δεν μπορεί να επιλυθεί με την χρήση της γραμμικής κινητικής θεωρίας. Επίσης, ο απαιτούμενος υπολογιστικός χρόνος και η μνήμη αυξάνεται καθώς μειώνεται ο αριθμός Knudsen. Τέλος, τονίζεται ότι ο αριθμός των πειραματικών εργασιών στο συγκεκριμένο θέμα είναι πολύ μικρός και δεν καλύπτουν όλες τις περιπτώσεις ροών. Για τον λόγο αυτό, αν και το συγκεκριμένο θέμα μελετάτε εδώ και αρκετό καιρό, υπάρχουν περιορισμένα αξιόπιστα δεδομένα.

Στο πλαίσιο αυτό, οι Shinagawa et al. [114] πραγματοποίησαν επέκταση της εργασίας των Usami και Teshima [130], για τον υπολογισμό και την μέτρηση της ογκομετρικής παροχής (conductance) αζώτου διαμέσου κυλινδρικών αγωγών που αντιστοιχούν σε διάφορες τιμές του λόγου μήκους προς την ακτίνα καθώς και για διάφορες τιμές του λόγου πίεσης ανάντη και κατάντη της ροής. Τόσο οι πειραματικές όσο και οι υπολογιστικές ογκομετρικές παροχές βρέθηκαν να είναι χαμηλότερες από εκείνες που προκύπτουν κάνοντας χρήση της εξίσωσης που προτείνεται από τους Hanks και Weissberg [109]. Οι Koppenwallner et al. [131], μελέτησαν πειραματικά την εξάρτηση του συντελεστή εκτόνωσης (discharge coefficient) ως προς το λόγο μήκους προς την ακτίνα και του αριθμού Reynolds σε σχισμές κυκλικής διατομής. Είναι γνωστό ότι κυλινδρικοί μικροαγωγοί, οι οποίοι χρησιμοποιούνται ως μικροακροφύσια, παρουσιάζουν απλότητα στην κατασκευή τους. Στο άρθρο [131], εκτός από την μέτρηση της ογκομετρικής παροχής, πραγματοποιήθηκε έλεγχος της δομής της ροής στο εσωτερικό του αγωγού για την ύπαρξη κυμάτων συμπίεσης στο εσωτερικό του ακροφυσίου. Στην προσπάθεια βέλτιστου σχεδιασμού των αγωγών μικρού μήκους για την χρήση τους ως συστήματα πρόωσης στην αεροδιαστημική, οι Gimelshein et al. [132] και Lilly et al. [115] μελέτησαν τόσο πειραματικά όσο και υπολογιστικά την επίδραση του μήκους λεπτότοιχων κυκλικών σχισμών. Η συγκεκριμένη εργασία περιλαμβάνει δύο περιπτώσεις του λόγου μήκους προς την διάμετρο καθώς και ροές σε κενό. Το συμπέρασμα από την συγκεκριμένη εργασία που προκύπτει είναι ότι η σχισμή με μεγάλο μήκος εμφανίζει την υψηλότερη απόδοση πρόωσης. Στις περισσότερες από τις εργασίες που παρατίθενται, τα αποτελέσματα παρουσιάζονται σε διαστατές ποσότητες και για συγκεκριμένα αέρια. Πρόσφατα οι Varoutis et al. [21] ανάπτυξαν και εφάρμοσαν την μέθοδο DSMC για αδιάστατες ποσότητες, ώστε τα αδιάστατα αριθμητικά αποτελέσματα, ως προς την παροχή και τις μακροσκοπικές κατανομές για αγωγούς με διάφορες τιμές του λόγου μήκους προς την ακτίνα, να παρουσιάζουν μια γενικότητα.

Στην παρούσα εργασία η αδιάστατη έκδοση του αλγορίθμου DSMC εφαρμόστηκε για την αριθμητική επίλυση ροής μονατομικού αερίου διαμέσου κυλινδρικού αγωγού με τον λόγο μήκους προς την ακτίνα να κυμαίνεται από 0 έως 10, ενώ ο λόγος πίεσης ανάντη και κατάντη της ροής κυμαίνεται από 0.1 έως 0.7. Λόγω του ότι στην εργασία [21] πραγματοποιή-

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

θηκε έρευνα της εξάρτησης των αριθμητικών αποτελεσμάτων από το μοντέλο αλληλεπίδρασης αερίου-τοιχώματος και του μοντέλου ενδομοριακού δυναμικού, στην παρούσα μελέτη εφαρμόζεται το μοντέλο πλήρους διάχυσης για την αλληλεπίδραση αερίου-τοιχώματος, ενώ για την περίπτωση του ενδομοριακού δυναμικού χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο σκληρών σφαιρών. Τα αριθμητικά αποτελέσματα περιλαμβάνουν την αδιάστατη παροχή καθώς και κατανομές μακροσκοπικών ποσοτήτων (ταχύτητα, πίεση και θερμοκρασία) για όλο το εύρος του αριθμού Knudsen. Για συγκεκριμένες περιπτώσεις ροής τα αριθμητικά αποτελέσματα συγκρίνονται επιτυχώς με αντίστοιχα πειραματικά δεδομένα παλαιοτέρων εργασιών [112, 92].

9.2 Περιγραφή προβλήματος

Θεωρείται η αξονοσυμμετρική ροή μονατομικού αερίου διαμέσου κυλινδρικού αγωγού ακτίνας R και μήκους L, ο οποίος συνδέει δύο ημιάπειρα δοχεία με πιέσεις P_0 και P_1 ($P_0 > P_1$). Η θερμοκρασία στα δοχεία και στο εσωτερικό του αγωγού παραμένει σταθερή και ίση με T_0. Η γεωμετρική απεικόνιση, το σύστημα συντεταγμένων (x', r') και η αρχή των αξόνων απεικονίζονται στο Σχ. 9.1. Τα δοχεία ανάντη και κατάντη του αγωγού απεικονίζονται στο Σχ. 9.1. Οι ποσότητες n_0, P_0 και T_0 χρησιμοποιούνται ως ποσότητες αναφοράς της πυκνότητας, της πίεσης και της θερμοκρασίας με $P_0 = n_0 k T_0$. Επίσης, η ακτίνα R του αγωγού αποτελεί το χαρακτηριστικό μήκος και η πλέον πιθανή ταχύτητα $v_0 = \sqrt{2kT_0/m}$, με k την σταθερά Boltzmann, την χαρακτηριστική ταχύτητα του προβλήματος.

Η επίλυση του συγκεκριμένου προβλήματος καθορίζεται από τρεις παραμέτρους, τον λόγο μήκους προς την ακτίνα του αγωγού L/R, τον λόγο πίεσης P_1/P_0 και την παράμετρο αραιοποίησης δ, η οποία ορίζεται ως [17]

$$\delta = \frac{RP_0}{\mu_0 v_0}. \tag{9.1}$$

Τονίζεται ότι η παράμετρος αραιοποίησης δ είναι αντιστρόφως ανάλογη του αριθμού Knudsen ($\delta = \frac{\sqrt{\pi}}{2}\frac{1}{Kn}$).

Κύριος στόχος είναι ο υπολογισμός των αδιάστατων μακροσκοπικών κατανομών συναρτήσει των παραμέτρων L/R, P_1/P_0 και δ. Οι κατανομές αυτές περιλαμβάνουν τις δύο συνιστώσες του διανύσματος της μακροσκοπικής ταχύτητας $u_x(x,r)/v_0$ και $u_r(x,r)/v_0$, την αριθμητική πυκνότητα $n(x,r)/n_0$, την πίεση $P(x,r)/P_0$ και την θερμοκρασία $T(x,r)/T_0$. Οι ποσότητες $r = r'/R$ και $x = x'/R$ αντιστοιχούν τις συντεταγμένες στην αδιάστατη ακτινική και αξονική κατεύθυνση αντίστοιχα.

Επίσης, μια άλλη σημαντική ποσότητα είναι η αδιάστατη παροχή W που διέρχεται διαμέσου του αγωγού και ορίζεται ως

$$W = \frac{\dot{M}}{\dot{M}_{00}}, \tag{9.2}$$

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

όπου $\dot{M}$ είναι η ροή μάζας που διέρχεται από τον αγωγό και

$$\dot{M}_{00} = \frac{\sqrt{\pi}R^2}{v_0}P_0. \tag{9.3}$$

είναι η αντίστοιχη αναλυτική ποσότητα για ροή σε κενό ($P_1/P_2 = 0$), διαμέσου κυκλικής σχισμής ($L/R = 0$) στην ελεύθερη μοριακή περιοχή ($\delta = 0$). Στην περίπτωση ροής διαμέσου κυκλικής σχισμής στην ελεύθερη μοριακή περιοχή με λόγο πίεσης $P_1/P_2 \neq 0$ η ροή μάζας ορίζεται ως

$$\dot{M}_0 = \frac{\sqrt{\pi}R^2}{v_0}\left(1 - \frac{P_1}{P_0}\right), \tag{9.4}$$

ενώ η αδιάστατη παροχή είναι

$$W_0 = \frac{\dot{M}_0}{\dot{M}_{00}} = 1 - \frac{P_1}{P_0}. \tag{9.5}$$

Εν γένει, εκτός από τις παραπάνω δύο αναλυτικές σχέσεις κλειστής μορφής δεν υπάρχουν άλλες διαθέσιμες. Με την πάροδο των χρόνων, διάφορες εμπειρικές σχέσεις για το W εμφανίστηκαν, βασιζόμενες σε πειραματικά και αριθμητικά αποτελέσματα. Αν και οι εν λόγω εκφράσεις ισχύουν μόνο για συγκεκριμένες περιοχές ροής, εν τούτοις αποτελούν βασικό εργαλείο για πρόχειρους υπολογισμούς. Σ'αυτές τις εμπειρικές σχέσεις ανήκουν οι εξισώσεις που προτάθηκαν από τους Fujimoto και Usami (βλέπε Εξ. (21) και (22) στο [92]) για ροές σε κενό και από τον Sreekanth για διάφορες περιπτώσεις του λόγου πίεσης [112]:

$$W^{(S)} = \frac{1 - P_1/P_0}{1 + L/D}\left[\frac{1 + P_1/P_0}{5\sqrt{\pi}}\delta + 1.038\right]. \tag{9.6}$$

Η τελευταία σχέση καθώς και ορισμένα πειραματικά αποτελέσματα στο [92] χρησιμοποιήθηκαν στην Παράγραφο 9.4 για την πραγματοποίηση συγκρίσεων μεταξύ πειραματικών και των παρόντων αριθμητικών αποτελεσμάτων.

9.3 Αλγόριθμος DSMC

Όλοι οι υπολογισμοί πραγματοποιήθηκαν με την χρήση της μεθόδου DSMC βασισμένη στο μοντέλο NTC [14] για την μοντελοποίηση των μοριακών συγκρούσεων. Πρόσφατα, ο αλγόριθμος DSMC τροποποιήθηκε κατάλληλα και εφαρμόστηκε με επιτυχία για την μοντελοποίηση ροών σε κενό διαμέσου αγωγών πεπερασμένου μήκους [21]. Στην συγκεκριμένη εργασία, ο παραπάνω κώδικας επεκτάθηκε για περιπτώσεις με λόγο πίεσης $P_1/P_0 \neq 0$.

Το αξονοσυμμετρικό υπολογιστικό πλέγμα (Σχ. 9.1) αποτελείται από τρεία επίπεδα πύκνωσης για την επίτευξη ακρίβειας στις έντονες κλίσεις των μακροσκοπικών μεγεθών κοντά στα τοιχώματα του αγωγού. Επίσης δύο αξονικές και επτά ακτινικές ζώνες με ειδικό συντελεστή βαρύτητας χρησιμοποιήθηκαν για την ομοιόμορφη κατανομή των σωματιδίων σε κάθε

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

κελί [53]. Οι αριθμητικές παράμετροι επιλέχθηκαν για την επίτευξη ακρίβειας έως και δύο σημαντικά ψηφία και συγκεκριμένα για όλες τις περιπτώσεις το χρονικό βήμα και το μέγεθος των μεγαλύτερων κελιών του πεδίου επιλέχθηκαν ως

$$\Delta t = \frac{\Delta t'}{R/v_0} = 0.01 \tag{9.7}$$

και

$$\Delta r = \Delta x = \frac{\Delta x'}{R} = 0.05 \tag{9.8}$$

αντίστοιχα. Η συγκεκριμένη διακριτοποίηση εξασφαλίζει ότι ο χρόνος της ελεύθερης κίνησης των σωματιδίων είναι μικρότερος από τον μέσο χρόνο σύγκρουσης και ότι ο όγκος του κελιού είναι ένα ποσοστό της κυβικής ελεύθερης διαδρομής. Σε όλες τις περιπτώσεις ο αριθμός των σωματιδίων που επιλέχθηκε ισούται με $N = 3 \times 10^7$, ενώ το μέγεθος των υπολογιστικών περιοχών ανάντη και κατάντη του αγωγού επιλέχθηκε ίσο με $L_1 = R_1 = L_2 = R_2 = 8R$. Ο συνολικός αριθμός των κελιών είναι 8×10^4 και ο αριθμός των σωματιδίων ανά κελί κυμαίνεται από 10^2 and 2×10^3. Τέλος η επαναληπτική διαδικασία του αλγορίθμου τερματίζεται όταν η στατιστική διακύμανση των αποτελεσμάτων ικανοποιεί την ανισότητα

$$\frac{\sqrt{N^+}}{\sqrt{N^+} - \sqrt{N^-}} < 0.001, \tag{9.9}$$

όπου N^+ και N^- είναι ο συνολικός αριθμός σωματιδίων που διέρχονται από αριστερά προς τα δεξιά και από δεξιά προς τα αριστερά στην είσοδο του αγωγού ($x = 0$) για όλο το χρονικό διάστημα της μοντελοποίησης.

Τονίζεται ότι το υπολογιστικό κόστος αυξάνεται σημαντικά καθώς οι λόγοι P_1/P_0 και L/R αυξάνονται. Το γεγονός αυτό δικαιολογείται διότι καθώς τα P_1/P_0 και L/R αυξάνονται, η ποσότητα N^- επίσης αυξάνεται. Έτσι η στατιστική διακύμανση της ροής, η οποία είναι της τάξης $\sqrt{N^+}/(N^+ - N^-)$ μειώνεται. Μια άλλη αιτία αύξησης του υπολογιστικού κόστους είναι η αύξηση της παραμέτρου αραιοποίησης δ καθώς προσεγγίζει το υδροδυναμικό όριο. Στην περίπτωση αυτή ο αριθμός των συγκρούσεων που πρέπει να μοντελοποιηθούν είναι κατά πολύ μεγαλύτερος εν συγκρίσει με την περίπτωση ροής στην μεταβατική περιοχή.

Η μέθοδος DSMC αποτελεί μια στοχαστική μέθοδο με αποτέλεσμα οι φυσικές μακροσκοπικές ποσότητες με πρακτικό ενδιαφέρον να υπολογίζονται περιοδικά και ως μέσες τιμές. Η ροή μάζας $\dot{M}$ είναι δυνατόν να εκφραστεί συναρτήσει του συνολικού αριθμού των σωματιδίων που διέρχονται από την είσοδο του αγωγού ($x = 0$) ως

$$\dot{M} = \frac{m(N^+ - N^-)F_N}{t'} \tag{9.10}$$

όπου m η μοριακή μάζα και t' ο συνολικός χρόνος μοντελοποίησης. Τότε σύμφωνα με την

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Εξ.(9.2), η αδιάστατη παροχή W υπολογίζεται ως

$$W = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{(N^+ - N^-)}{t} \frac{V}{N}, \tag{9.11}$$

όπου $t = t'/(R/v_0)$ είναι ο αδιάστατος συνολικός χρόνος και $V = V'/R^3$ ο αδιάστατος συνολικός όγκος του πεδίου.

Η αριθμητική πυκνότητα σε ένα κελί ορίζεται ως

$$n_j = \frac{\bar{N}_j F_N}{V'_j}, \quad j = 1, 2, ..., J, \tag{9.12}$$

όπου το j δηλώνει το κελί του πεδίου με όγκο V'_j, J είναι ο συνολικός αριθμός των κελιών και $\bar{N}_j$ είναι η μέση τιμή του αριθμού των σωματιδίων στο κελί σε κάθε χρονικό βήμα. Η αριθμητική πυκνότητα αδιαστατοποιείται με την αριθμητική πυκνότητα αναφοράς n_0 ως

$$\frac{n_j}{n_0} = \frac{\bar{N}_j}{N} \frac{V}{V_j} \quad j = 1, 2, ..., J, \tag{9.13}$$

όπου $V_j = V'_j/R^3$ είναι ο αδιάστατος όγκος του κελιού. Όμοια η αδιάστατη μακροσκοπική ταχύτητα και θερμοκρασία ορίζονται ως

$$\frac{\mathbf{u}_j}{v_0} = \frac{1}{N_j} \sum_{i=1}^{N_j} \mathbf{c}_{ij}, \quad j = 1, 2, ..., J \tag{9.14}$$

και

$$\frac{T_j}{T_0} = \frac{2}{3} \left[\frac{1}{N_j} \sum_{i=1}^{N_j} c_{ij}^2 - (u/v_0)^2 \right], \quad j = 1, 2, ..., J. \tag{9.15}$$

αντίστοιχα. Στις Εξ.(9.14) και (9.15), N_j είναι ο αριθμός των σωματιδίων στο j κελί και $\mathbf{c}_{ij}$ δηλώνει τις αδιάστατες τρεις συνιστώσες της μοριακής ταχύτητας του i σωματιδίου στο j κελί. Τέλος, η αδιάστατη πίεση υπολογίζεται κάνοντας χρήση της καταστατικής εξίσωσης

$$\frac{P_j}{P_0} = \frac{n_j}{n_0} \frac{T_j}{T_0}, \quad j = 1, 2, ..., J. \tag{9.16}$$

Στην επόμενη παράγραφο θα παρουσιαστούν τα αριθμητικά αποτελέσματα της αδιάστατης παροχής και οι κατανομές των μακροσκοπικών μεγεθών της ταχύτητας, της πίεσης και της θερμοκρασίας.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

9.4 Αριθμητικά αποτελέσματα

Αριθμητικά αποτελέσματα παρατίθενται για $0 \leq \delta \leq 2 \times 10^3$, $0 \leq L/R \leq 10$ και $0 \leq P_1/P_0 \leq 0.7$. Για το συγκεκριμένο εύρος παραμέτρων τα αποτελέσματα παρουσιάζονται σε δύο υποενότητες. Η πρώτη εστιάζεται στην αδιάστατη παροχή και περιλαμβάνει συγκρίσεις με πειραματικά αποτελέσματα και η δεύτερη εστιάζεται στο πεδίο ροής και την χωρική μεταβολή των αντίστοιχων μακροσκοπικών μεγεθών. Τέλος μελετάται η εξάρτηση όλων των παραπάνω μακροσκοπικών μεγεθών στις παραμέτρους δ, L/R και P_1/P_0.

9.4.1 Αδιάστατη παροχή

Η συμπεριφορά της αδιάστατης παροχής W συναρτήσει των παραμέτρων δ, L/R και P_1/P_0 απεικονίζεται στα Σχ. 9.2, 9.3 και 9.4 αντίστοιχα. Στο Σχ. 9.2 παρουσιάζονται αποτελέσματα του W συναρτήσει της παραμέτρου αραιοποίησης για $L/R = 0.1, 1, 5$ και $P_1/P_0 = 0, 0.1, 0.5, 0.7$. Σε όλες τις περιπτώσεις η ποιοτική εξάρτηση του W από το δ είναι παρόμοια. Συγκεκριμένα, καθώς το δ αυξάνει, για μικρές τιμές του, το W αυξάνεται με μικρό ρυθμό. Σε ενδιάμεσες τιμές του δ ($1 \leq \delta \leq 10^2$), υπάρχει σημαντική αύξηση του W, ενώ για μεγάλες τιμές του δ, το W συνεχίζει να αυξάνει έως ότου προσεγγίσει ασυμπτωτικά τα αντίστοιχα αποτελέσματα στο υδροδυναμικό όριο ($\delta \to \infty$). Τονίζεται ότι τα αποτελέσματα για $P_1/P_0 = 0$ και 0.1 σχεδόν ταυτίζονται όταν $\delta > 1$.

Η εξάρτηση του W από το P_1/P_0 για $L/R = 0.1, 1, 5$ και $\delta = 1, 10, 10^2, 10^3$ απεικονίζεται στο Σχ. 9.3. Σε όλες τις περιπτώσεις το W αυξάνει καθώς το P_1/P_0 μειώνεται. Σημειώνεται ότι καθώς ο λόγος πίεσης μειώνεται, για μικρά L/R και δ, το W αυξάνεται απότομα, ενώ για μεγάλα L/R και δ η αύξηση του W είναι μικρότερη. Σε ορισμένες περιπτώσεις (π.χ. $L/R = 5$ και $\delta = 10^2$ ή 10^3) υπάρχει ένας κρίσιμος λόγος πίεσης $(P_1/P_0)^*$ πέρα από τον οποίο περαιτέρω μείωση του P_1/P_0 δεν συνεπάγεται σημαντική αύξηση του W. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται στραγγαλισμός της ροής (choked flow) και είναι ευρέως γνωστό στο υδροδυναμικό όριο. Από τα αριθμητικά αποτελέσματα παρατηρείται ότι το φαινόμενο αυτό παρουσιάζεται και σε αραιοποιημένες ροές. Επίσης η τιμή του κρίσιμου λόγου πίεσης μειώνεται καθώς η τιμή της παραμέτρου αραιοποίησης μειώνεται. Τέλος τονίζεται ότι για $L/R = 0.1$ τα αντίστοιχα αποτελέσματα για $\delta = 10^2$ και 10^3 σχεδόν ταυτίζονται.

Στο Σχ. 9.4 παρουσιάζονται αποτελέσματα του W συναρτήσει του L/R για $P_1/P_0 = 0.1, 0.5, 0.7$ και $\delta = 10^{-1}, 1, 10, 10^2, 10^3$. Όπως αναμένεται, σε όλες τις περιπτώσεις το W μειώνεται καθώς το L/R αυξάνεται. Παρατηρείται όμως το γεγονός ότι για συγκεκριμένες παραμέτρους (μεγάλα P_1/P_0 και δ), το W παρουσιάζει ένα μέγιστο στο L/R. Η παρατήρηση αυτή δεν μπορεί να εξηγηθεί φυσικά και πιθανόν να οφείλεται στο υπολογιστικό σφάλμα των αποτελεσμάτων.

Στο Σχ. 9.5 παρουσιάζεται σύγκριση μεταξύ των παρόντων αριθμητικών αποτελεσμάτων και των αντίστοιχων πειραματικών από τους Fujimoto και Usami [92]. Τα πειραματικά αποτελέσματα προήλθαν από το Σχ. 8 του άρθρου [92] για $L/R = 0.99$, $\delta > 1$ και $0 \leq P_1/P_0 \leq 0.5$.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Για την πραγματοποίηση της σύγκρισης τα αντίστοιχα αριθμητικά αποτελέσματα του W για $L/R = 1$ πολλαπλασιάστηκαν με την ποσότητα $(1 - P_1/P_0)^{-1}$. Η πολύ καλή ταύτιση μεταξύ πειραματικών και αριθμητικών αποτελεσμάτων σε ένα μεγάλο εύρος του δ και του P_1/P_0 πιστοποιεί την αριθμητική λύση για $L/R = 1$ και θεωρείται ότι η συγκεκριμένη ακρίβεια επεκτείνεται και για τις υπόλοιπες περιπτώσεις του L/R.

Μια άλλη σύγκριση με πειραματικά αποτελέσματα παρουσιάζεται στο Σχ. 9.6. Τα πειραματικά αποτελέσματα βασίζονται στην εμπειρική σχέση (9.6) που προτάθηκε από τον Sreekanth [112], για διάφορα σετ παραμέτρων. Η σύγκριση είναι πολύ καλή στην ελεύθερη μοριακή περιοχή και σε ένα μέρος της μεταβατικής περιοχής έως και για $\delta \leq 2$ και αρκετά καλή για $2 < \delta \leq 5$ και $P_1/P_0 = 0.7$ και 0.5. Πέραν του συγκεκριμένου εύρους παραμέτρων η συγκεκριμένη σχέση (9.6) δεν είναι αξιόπιστη.

Η συγκεκριμένη υποενότητα κλείνει με την παρουσίαση πινακοποιημένων αριθμητικών αποτελεσμάτων της αδιάστατης παροχής W συναρτήσει του δ και L/R στους Πίνακες 9.1, 9.2 και 9.3 για $P_1/P_0 = 0.1$, 0.5 και 0.7 αντίστοιχα. Για την περίπτωση όπου $L/R = 10$ το υπολογιστικό κόστος αυξάνεται σημαντικά και για τον λόγο αυτό παρουσιάζεται περιορισμένος αριθμός περιπτώσεων του δ που καλύπτει την ελεύθερη μοριακή και την μεταβατική περιοχή. Στον Πίνακα 9.4 παρουσιάζονται αποτελέσματα του W για την περίπτωση όπου $P_1/P_0 = 0.2$, 0.3, 0.4 και για χαρακτηριστικές τιμές του δ και L/R. Τονίζεται ότι οι Πίνακες 9.1-9.4 περιέχουν αποτελέσματα που έχουν παρουσιαστεί στο παρελθόν σε γραφική μορφή και επίσης επιπρόσθετα αποτελέσματα που καλύπτουν ένα μεγάλο εύρος των παραμέτρων που επηρεάζουν την ροή. Θεωρείται ότι τα πινακοποιημένα αποτελέσματα παρουσιάζουν ιδιαίτερο ενδιαφέρον στην συγκεκριμένη ερευνητική εργασία αφού μπορούν εύκολα να χρησιμοποιηθούν από την ερευνητική κοινότητα για συγκρίσεις με αντίστοιχα πειραματικά αποτελέσματα ή για έλεγχο αξιοπιστίας νέων αριθμητικών αποτελεσμάτων.

9.4.2 Πεδίο ροής

Η μελέτη συνεχίζεται με μια πιο λεπτομερή παρατήρηση του πεδίου ροής, η οποία αρχικά πραγματοποιείται με την παρουσίαση των γραμμών ροής για $P_1/P_0 = 0.5$, $L/R = 0.5, 5$ και $\delta = 1, 10, 10^2, 10^3$ στο Σχ. 9.7. Παρατηρείται ότι στην μεταβατική περιοχή ($\delta = 1$) οι γραμμές ροής είναι σχεδόν συμμετρικές πριν και μετά τον αγωγό και δεν παρουσιάζονται δίνες. Η συγκεκριμένη συμπεριφορά είναι χαρακτηριστική για όλες τις περιπτώσεις με $\delta \leq 1$. Καθώς το δ αυξάνει οι γραμμές ροής κάμπτονται και δίνες εμφανίζονται κατάντη του αγωγού. Για $\delta = 10$, οι δίνες έχουν ήδη εμφανιστεί, ενώ για $\delta = 10^2$ και 10^3 το μέγεθος των δινών αυξάνεται με αποτέλεσμα ισχυρά jet αερίου κατά μήκος του $r = 0$ στην έξοδο του αγωγού να δημιουργηθούν. Η διάμετρος των jet είναι ίση με την διάμετρο του αγωγού και το μήκος τους εκτείνεται ακόμα και έξω από πεδίο ροής. Συγκρίνοντας τις γραμμές ροής για $L/R = 0.5$ και 5, παρατηρείται ότι η εμφάνιση της δίνης καθυστερείται καθώς το L/R αυξάνει. Η συμπεριφορά της ροής, όπως απεικονίζεται στο Σχ. 9.7, για $P_1/P_0 = 0.5$ είναι χαρακτηριστική

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

για οποιοδήποτε λόγο πίεσης μεταξύ $0 \leq P_1/P_0 \leq 0.7$.

Η μεταβολή της αδιάστατης πίεσης και θερμοκρασίας κατά μήκος του άξονα συμμετρίας $r = 0$ και $-8 \leq x \leq L/R + 8$ απεικονίζεται στα Σχ. 9.8 και 9.9 αντίστοιχα για $\delta = 1, 10^2$, $L/R = 0.1, 1, 5$ και $P_1/P_0 = 0.1, 0.2, 0.3, 0.5$. Στο Σχ. 9.8, για $\delta = 1$, η μεταβολή της πίεσης μειώνεται μονότονα. Ξεκινά από την τιμή ισορροπίας, η οποία ισούται με μονάδα, και παραμένει σταθερή για $x \leq -2$. Στην συνέχεια, η πίεση μειώνεται κατά μήκος της απόστασης $-2 \leq x \leq L/R + 2$ έως ότου φτάσει την κατάντη πίεση ισορροπίας, η οποία ισούται με P_1/P_0 και παραμένει σταθερή για $x > L/R + 2$. Η αντίστοιχη μεταβολή της θερμοκρασίας απεικονίζεται στο Σχ. 9.9 και για $\delta = 1$, παραμένει σταθερή και ίση με την τιμή ισορροπίας για $x \leq -2$, ενώ στην συνέχεια μειώνεται έως το $x = 0$, όπου για όλες τις περιπτώσεις των L/R, παρουσιάζει ένα ελάχιστο. Στην συνέχεια η θερμοκρασία αυξάνεται έως ότου φτάσει την τιμή ισορροπίας της. Γενικά, η μεταβολή της θερμοκρασίας, για $\delta = 1$, είναι μικρή και μειώνεται καθώς ο λόγος πίεσης και το L/R αυξάνεται. Για $\delta = 10^2$, τόσο η μεταβολή της πίεσης όσο και της θερμοκρασίας συγκρινόμενες με τις αντίστοιχες για $\delta = 1$ αλλάζουν δραστικά. Στην περίπτωση αυτή η μεταβολή δεν είναι μονότονη. Στο Σχ. 9.8 για $\delta = 10^2$, η πίεση στην έξοδο του αγωγού μειώνεται πιο κάτω από το P_1/P_0 και στην συνέχεια κατά μήκος της απόστασης $L/R < x \leq L/R+8$ χαρακτηρίζεται από μια ταλαντωτική συμπεριφορά, της οποίας το πλάτος μειώνεται γύρω από την τιμή ισορροπίας. Η συγκεκριμένη ταλαντωτική συμπεριφορά μειώνεται καθώς ο λόγος πίεσης αυξάνεται, ενώ για $P_1/P_0 = 0.5$ εξαφανίζεται. Η ταλαντωτική συμπεριφορά της πίεσης οφείλεται στα κύματα συμπιέσης, τα οποία δημιουργούνται στο στο εσωτερικό του αγωγού και μεταφέρονται κατάντη της ροής. Η αντίστοιχη συμπεριφορά της μεταβολής της θερμοκρασίας απεικονίζεται στο Σχ. 9.9, όπου για $\delta = 1$ και 10^2 παρατηρείται ότι έχει τα ίδια χαρακτηριστικά με αυτά της πίεσης. Συγκρίνοντας την μεταβολή της θερμοκρασίας στο Σχ. 9.9 για $\delta = 1$ και 10^2 παρατηρείται ότι το ελάχιστο στη τελευταία περίπτωση είναι πιο έντονο. Τονίζεται ότι όμοια συμπεριφορά της μεταβολής της πίεσης και της θερμοκρασίας παρατηρείται για όλα τα L/R. Ως γενική παρατήρηση, σημειώνεται ότι τα πεδία πίεσης και θερμοκρασίας (και όλου του πεδίου ροής) εξαρτώνται άμεσα από τον λόγο πίεσης P_1/P_0 καθώς και από το δ, ενώ η εξάρτηση τους από το L/R δεν είναι αρκετά σημαντική.

Στο Σχ. 9.10 παρουσιάζεται μια πιο ολοκληρωμένη εικόνα της επίδρασης της παραμέτρου αραιοποίησης στο πεδίο ροής. Παρουσιάζεται η μεταβολή του αριθμού Ma για $\delta = 1, 10, 10^2, 10^3$, $L/R = 0.1, 5$ και $P_1/P_0 = 0.1, 0.2, 0.3, 0.5$. Για μονατομικά αέριο ο αριθμός Ma υπολογίζεται από την ταχύτητα του αερίου ως $Ma = \sqrt{6/5}(u_x(r,0)/v_0)$. Σε όλες τις περιπτώσεις ο αριθμός Ma ξεκινά από το μηδέν, όπου είναι η τιμή ισορροπίας μακριά από την είσοδο του αγωγού και στην συνέχεια ξεκινά να μειώνεται στο ίδιο σημείο ($x = -2$), όπου η πίεση ξεκινά να μειώνεται. Ο αριθμός Ma συνεχίζει να αυξάνεται κατά μήκος του αγωγού και φτάνει την μέγιστη τιμή του, η οποία εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από τα P_1/P_0 και δ, ενώ είναι πρακτικά ανεξάρτητος του L/R στην έξοδο του αγωγού. Στην συνέχεια, ο αριθμός Ma ξεκινά να μειώνεται έως την τιμή ισορροπίας κατάντη της ροής, η οποία ισούται

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

με μηδέν. Παρατηρείται ότι για τον ίδιο λόγο πίεσης, καθώς το δ αυξάνει, η μέγιστη τιμή του Ma μειώνεται δραστικά. Για χαμηλούς λόγους πίεσης η ροή είναι υπερηχητική στην έξοδο του αγωγού όταν $\delta = 10^2$ και 10^3, ενώ γίνεται υποηχητική όταν $\delta = 1$ και 10. Επίσης, για τον ίδιο λόγο πίεσης η ταλαντωτική συμπεριφορά του αριθμού Ma στο δεξί δοχείο μειώνεται και τελικά εξαφανίζεται καθώς η παράμετρος αραιοποίησης μειώνεται. Η παρατηρήσεις αυτές είναι σε συμφωνία με τις αδιάστατες παροχές της προηγούμενης υποενότητας.

Στο Σχ. 9.11 κατανομές της αδιάστατης αξονικής ταχύτητας, στην είσοδο ($x = 0$), μέση ($x = L/(2R)$) και έξοδο ($x = L/R$) του αγωγού παρουσιάζονται για $\delta = 1, 10^3$, $L/R = 0.5, 5$ και $P_1/P_0 = 0.1, 0.7$. Οι αντίστοιχες κατανομές πίεσης παρουσιάζονται στο Σχ. 9.12. Οι συνδυασμοί $L/R = 0.5, \delta = 1$ και $L/R = 5, \delta = 10^3$ θεωρούνται ενδεικτικές περιπτώσεις όταν L/R και δ είναι μικρά ή μεγάλα αντίστοιχα, ενώ τα υπόλοιπα δύο δηλαδή $L/R = 0.5, \delta = 10^3$ και $L/R = 5, \delta = 1$ είναι αντιπροσωπευτικά των περιπτώσεων όπου μια από τις παραμέτρους είναι μικρή και η άλλη μεγάλη. Επίσης, τα αποτελέσματα για δυο διαφορετικούς λόγους πίεσης είναι ενδεικτικά για μεγάλες και μικρές πτώσεις πίεσης. Τα συγκεκριμένα γραφήματα είναι χαρακτηριστικά για την εξέλιξη της ροής (επιτάχυνση ροής και πτώση πίεσης του αερίου) κατά μήκους του αγωγού.

Τέλος στα Σχήματα 9.13 έως 9.15 παρουσιάζονται οι ισοϋψείς καμπύλες του τοπικού αριθμού Ma για $L/R = 0.5$ και 5 και $\delta = 1$ και 100. Μελετώντας τα συγκεκριμένα γραφήματα προκύπτει ότι στην περίπτωση όπου το δ παραμένει σταθερό και το μήκος L/R μεταβάλλεται από 0.5 σε 5, το πεδίο ροής διαφοροποιείται σημαντικά τόσο ποιοτικά όσο και ποσοτικά. Επίσης όταν το μήκος του αγωγού παραμένει σταθερό και το δ μεταβάλλεται από 1 σε 100 η ποιοτική συμπεριφορά των μεγεθών παραμένει αμετάβλητη ενώ ποσοτικά διαφοροποιούνται. Τέλος καθώς αυξάνεται ο λόγος πίεσης παρατηρείται ότι ποσοτικά οι αριθμοί Ma μειώνονται για όλες τις περιπτώσεις του δ και L/R.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Πίνακας 9.1: Αδιάστατη παροχή W για λόγο πίεσης $P_1/P_0 = 0.1$, συναρτήσει του μήκους L/R και της παραμέτρου αραιοποίησης δ.

	W					
δ	L/R=0.1	L/R=0.5	L/R=1	L/R=2	L/R=5	L/R=10
0	0.856	0.721	0.605	0.463	0.279	0.170
0.1	0.869	0.731	0.613	0.468	0.281	
0.5	0.924	0.775	0.648	0.493	0.291	1.171
1	0.984	0.826	0.689	0.521	0.304	
2	1.08	0.911	0.761	0.573	0.330	0.192
5	1.27	1.08	0.913	0.699	0.412	
10	1.38	1.20	1.05	0.842	0.529	0.321
20	1.45	1.29	1.16	0.985	0.689	
50	1.49	1.38	1.28	1.15	0.915	
100	1.51	1.43	1.35	1.26	1.07	
200	1.51	1.46	1.41	1.34	1.18	
500	1.51	1.48	1.45	1.39	1.27	
1000	1.51	1.49	1.46	1.40	1.28	
2000	1.51	1.49	1.46	1.40	1.27	

Πίνακας 9.2: Αδιάστατη παροχή W για λόγο πίεσης $P_1/P_0 = 0.5$, συναρτήσει του μήκους L/R και της παραμέτρου αραιοποίησης δ.

	W					
δ	L/R=0.1	L/R=0.5	L/R=1	L/R=2	L/R=5	L/R=10
0	0.475	0.399	0.336	0.256	0.155	0.0935
0.1	0.486	0.409	0.343	0.260	0.156	
0.5	0.528	0.444	0.370	0.280	0.163	0.0934
1	0.583	0.488	0.405	0.304	0.175	
2	0.688	0.573	0.474	0.351	0.197	0.114
5	0.948	0.796	0.658	0.486	0.271	
10	1.15	1.01	0.866	0.669	0.388	0.223
20	1.27	1.15	1.04	0.864	0.571	
50	1.35	1.28	1.20	1.07	0.828	
100	1.37	1.35	1.29	1.19	0.993	
200	1.39	1.39	1.35	1.28	1.11	
500	1.39	1.41	1.39	1.32	1.18	
1000	1.39	1.42	1.40	1.34	1.20	
2000	1.39	1.42	1.40	1.34	1.19	

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

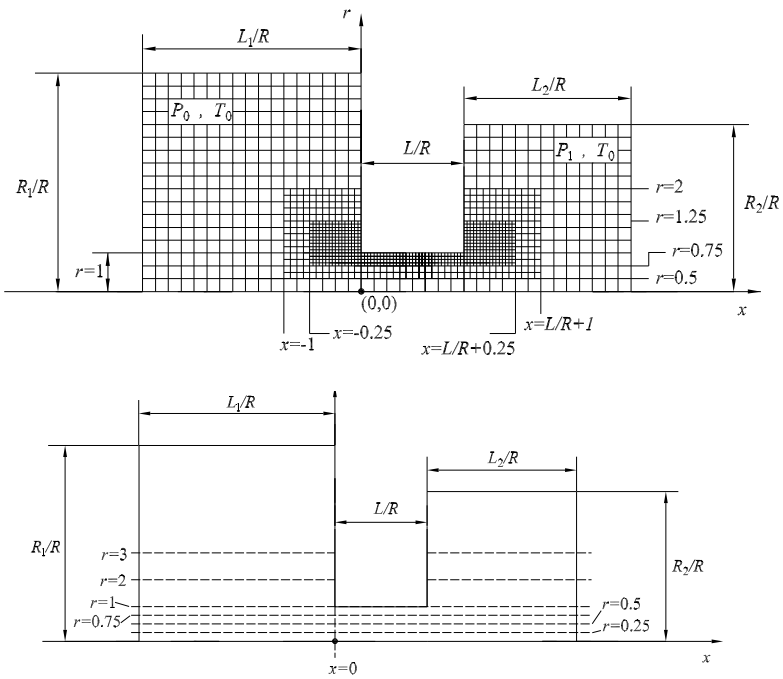
Πίνακας 9.3: Αδιάστατη παροχή W για λόγο πίεσης $P_1/P_0 = 0.7$, συναρτήσει του μήκους L/R και της παραμέτρου αραιοποίησης δ.

	W					
δ	L/R=0.1	L/R=0.5	L/R=1	L/R=2	L/R=5	L/R=10
0	0.286	0.241	0.201	0.153	0.093	0.0543
0.1	0.292	0.246	0.205	0.156	0.093	
0.5	0.321	0.270	0.224	0.170	0.100	0.0606
1	0.361	0.300	0.249	0.190	0.106	
2	0.436	0.363	0.298	0.220	0.123	0.0700
5	0.654	0.541	0.440	0.319	0.174	
10	0.885	0.762	0.640	0.471	0.263	0.146
20	1.03	0.937	0.831	0.672	0.411	
50	1.12	1.08	1.00	0.884	0.658	
100	1.15	1.15	1.10	1.00	0.814	
200	1.16	1.19	1.16	1.09	0.922	
500	1.17	1.20	1.19	1.13	0.975	
1000	1.16	1.20	1.19	1.13	0.980	
2000	1.16	1.20	1.19	1.13	0.986	

Πίνακας 9.4: Αδιάστατη παροχή W για λόγο πίεσης P_1/P_0=0.2, 0.3 και 0.4 συναρτήσει του μήκους L/R και της παραμέτρου αραιοποίησης δ.

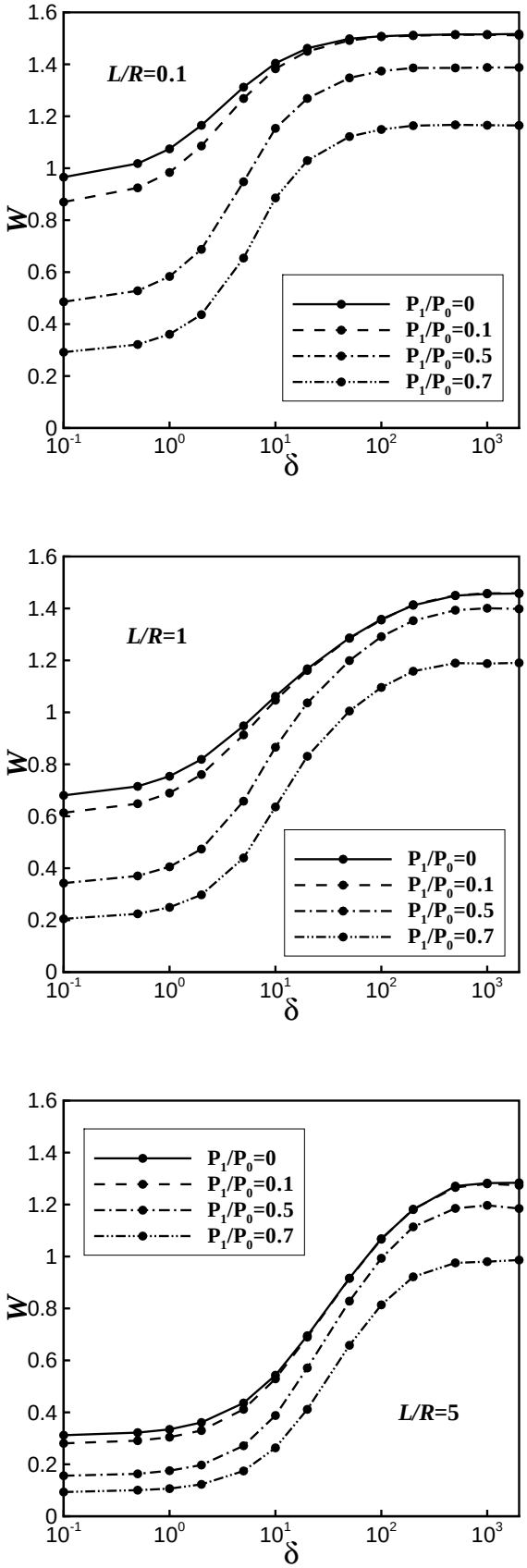
		W		
P_1/P_0	δ	L/R=0.1	L/R=1	L/R=5
0.2	1	0.889	0.622	0.269
	10	1.35	1.02	0.507
	100	1.49	1.35	1.06
	1000	1.51	1.45	1.26
	2000	1.51	1.46	
0.3	1	0.790	0.552	0.242
	10	1.30	0.989	0.477
	100	1.47	1.35	1.05
	1000	1.49	1.45	1.27
	2000		1.45	1.25
0.4	1	0.689	0.480	0.208
	10	1.24	0.937	0.437
	100	1.43	1.33	1.031
	1000	1.45	1.43	1.22
	2000		1.43	1.23

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



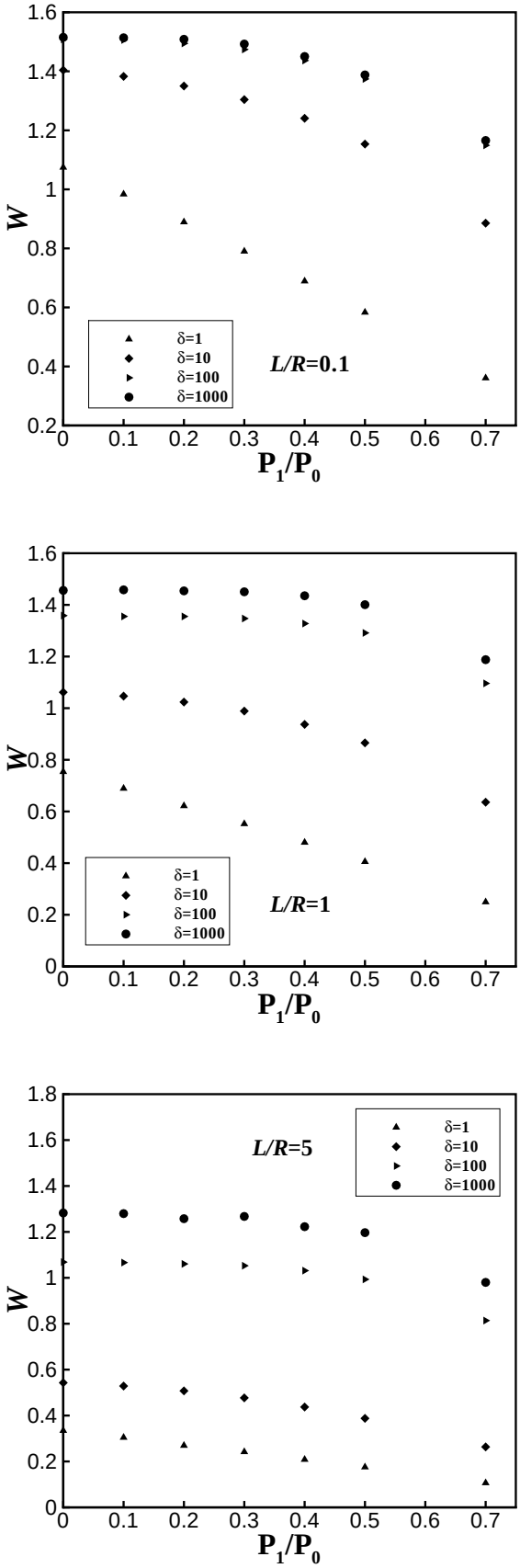
Σχήμα 9.1: Γεωμετρία και υπολογιστικό πεδίο (πάνω), Ζώνες με συντελεστή βαρύτητας (κάτω).

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



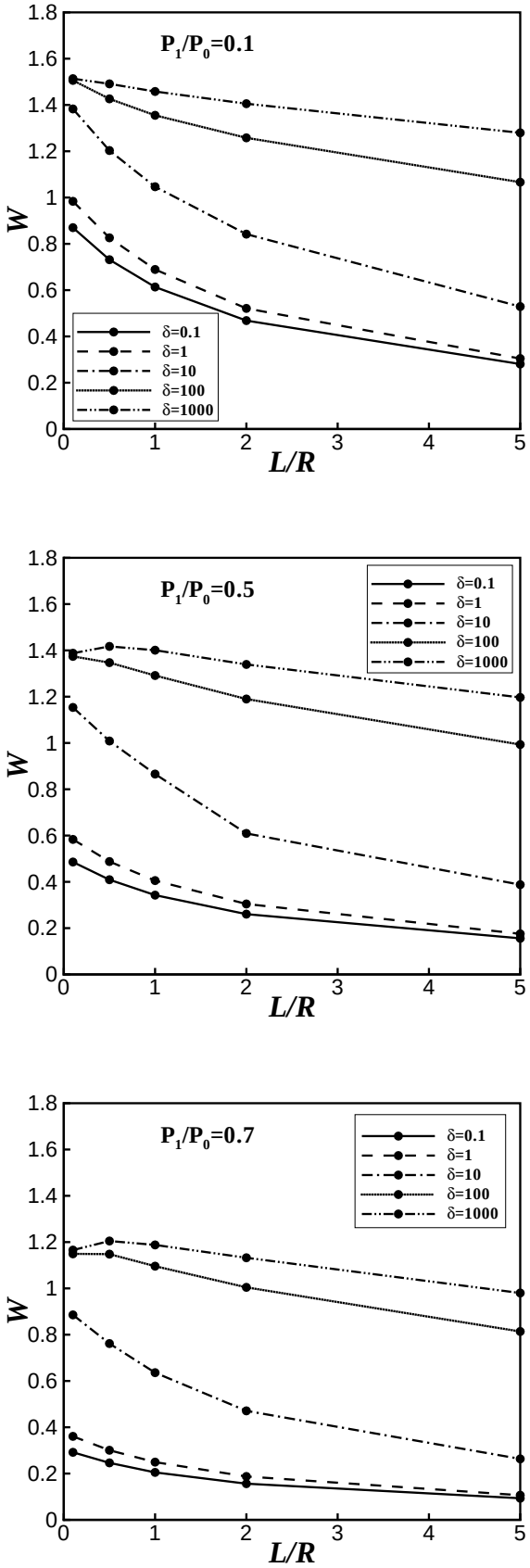
Σχήμα 9.2: Αδιάστατη παροχή W συναρτήσει του δ για διάφορα L/R και P_1/P_0.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



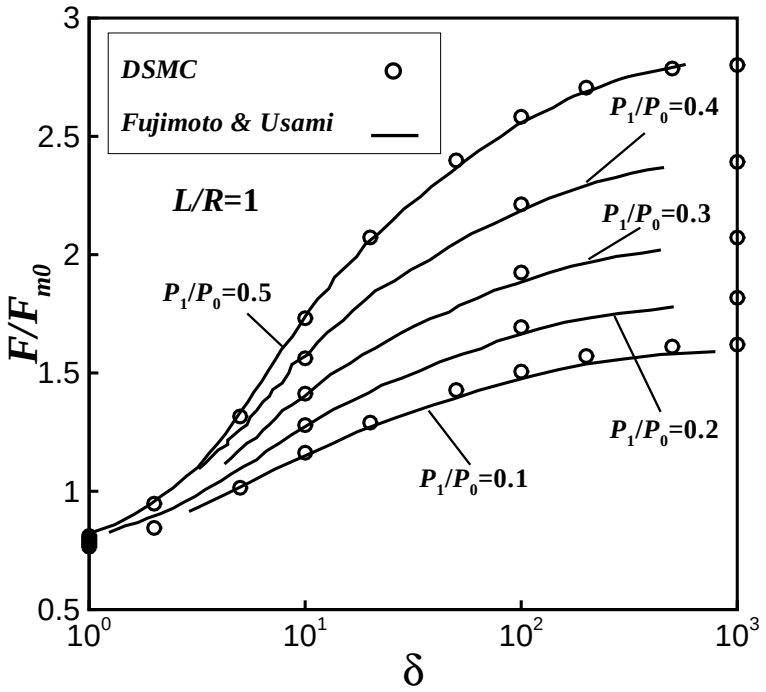
Σχήμα 9.3: Αδιάστατη παροχή W συναρτήσει του P_1/P_0 για διάφορα L/R και δ.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



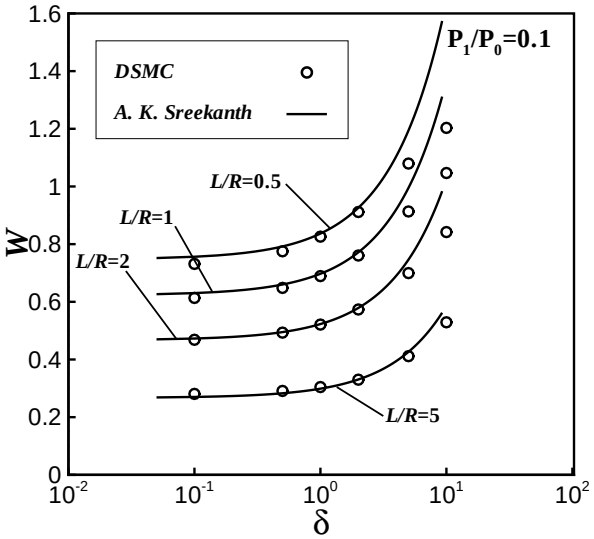
Σχήμα 9.4: Αδιάστατη παροχή W συναρτήσει του L/R για διάφορα P_1/P_0 και δ.

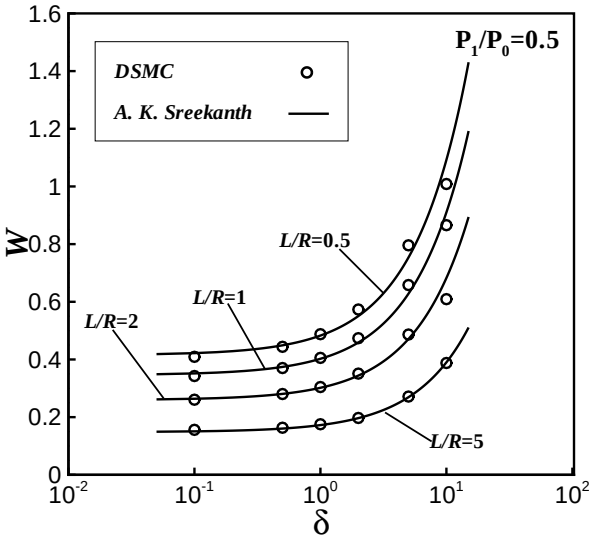
Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

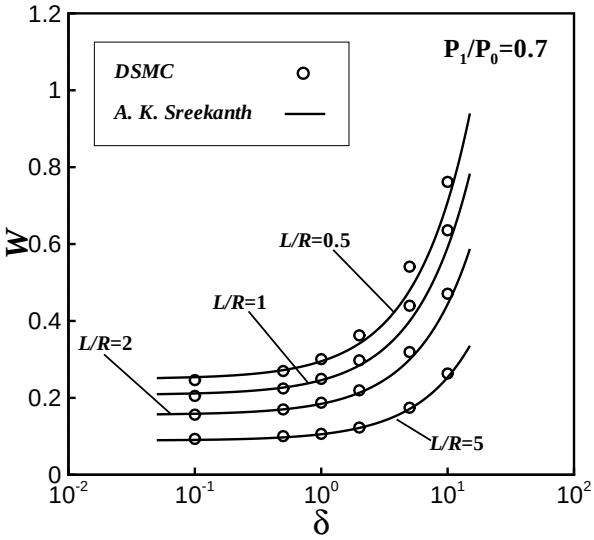


Σχήμα 9.5: Σύγκριση μεταξύ των παρόντων αριθμητικών αποτελεσμάτων και των αντίστοιχων πειραματικών από τους Fujimoto & Usami.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

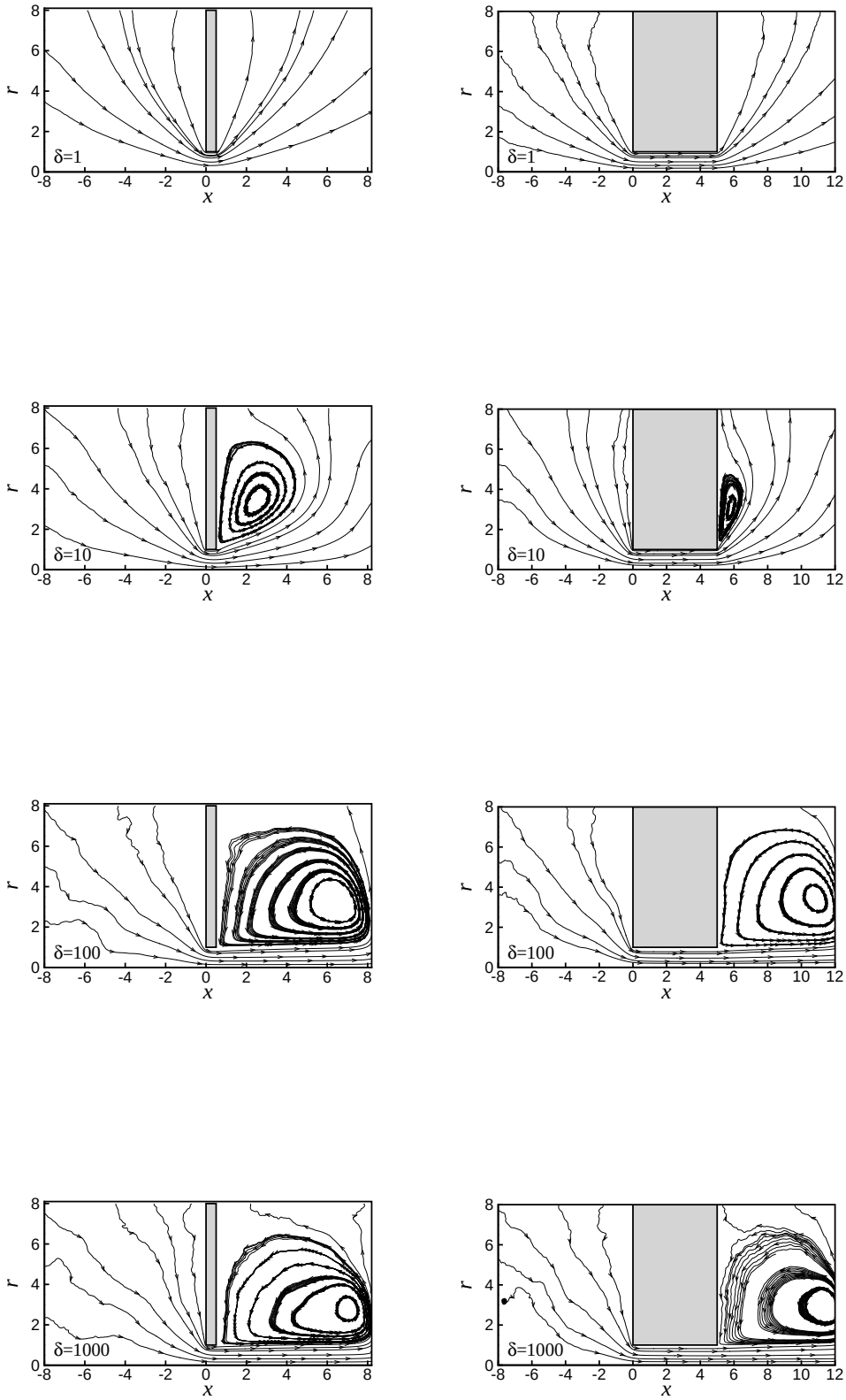






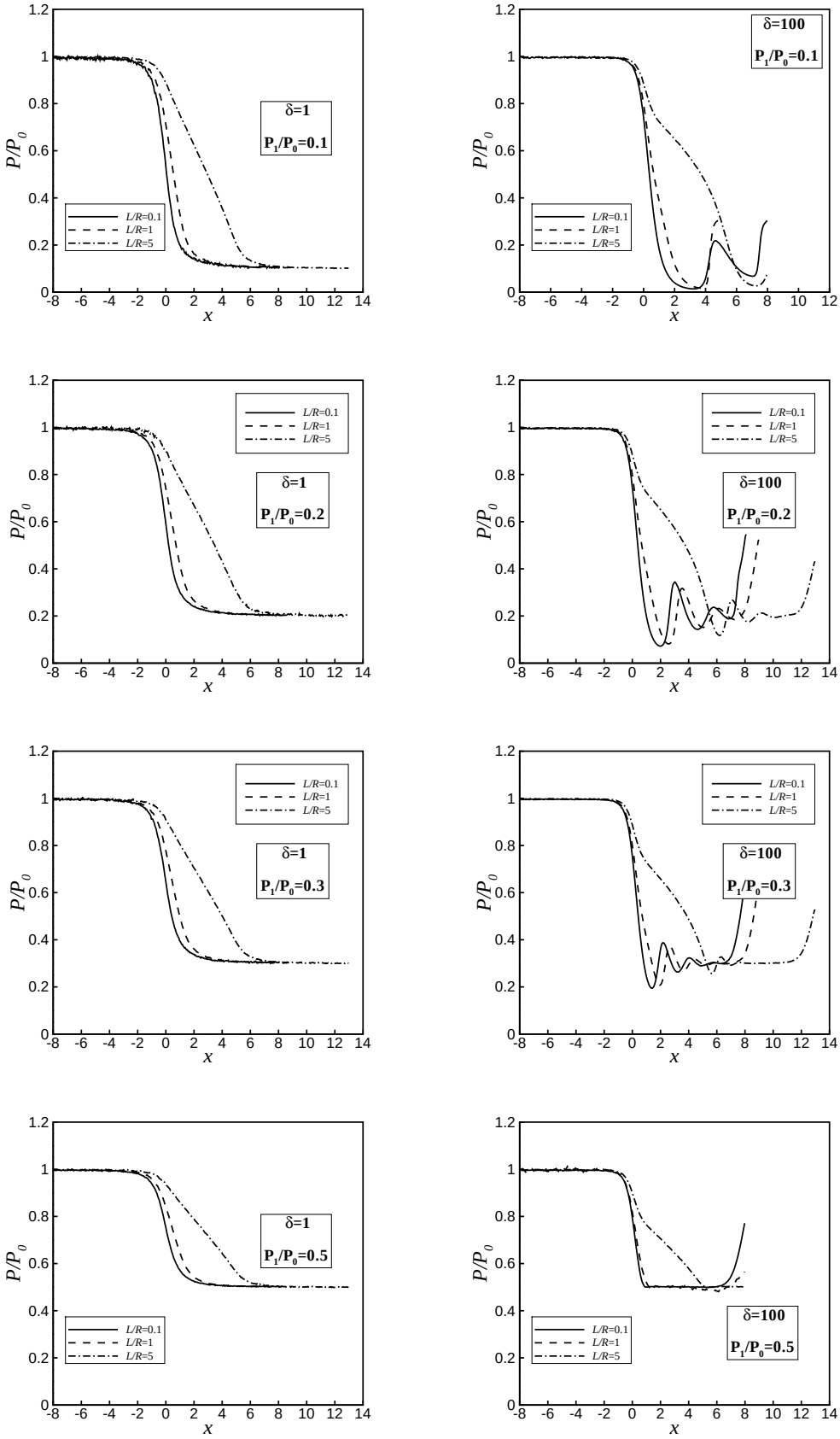
Σχήμα 9.6: Σύγκριση μεταξύ των παρόντων αριθμητικών αποτελεσμάτων και των αντίστοιχων πειραματικών από τον Sreekanth.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



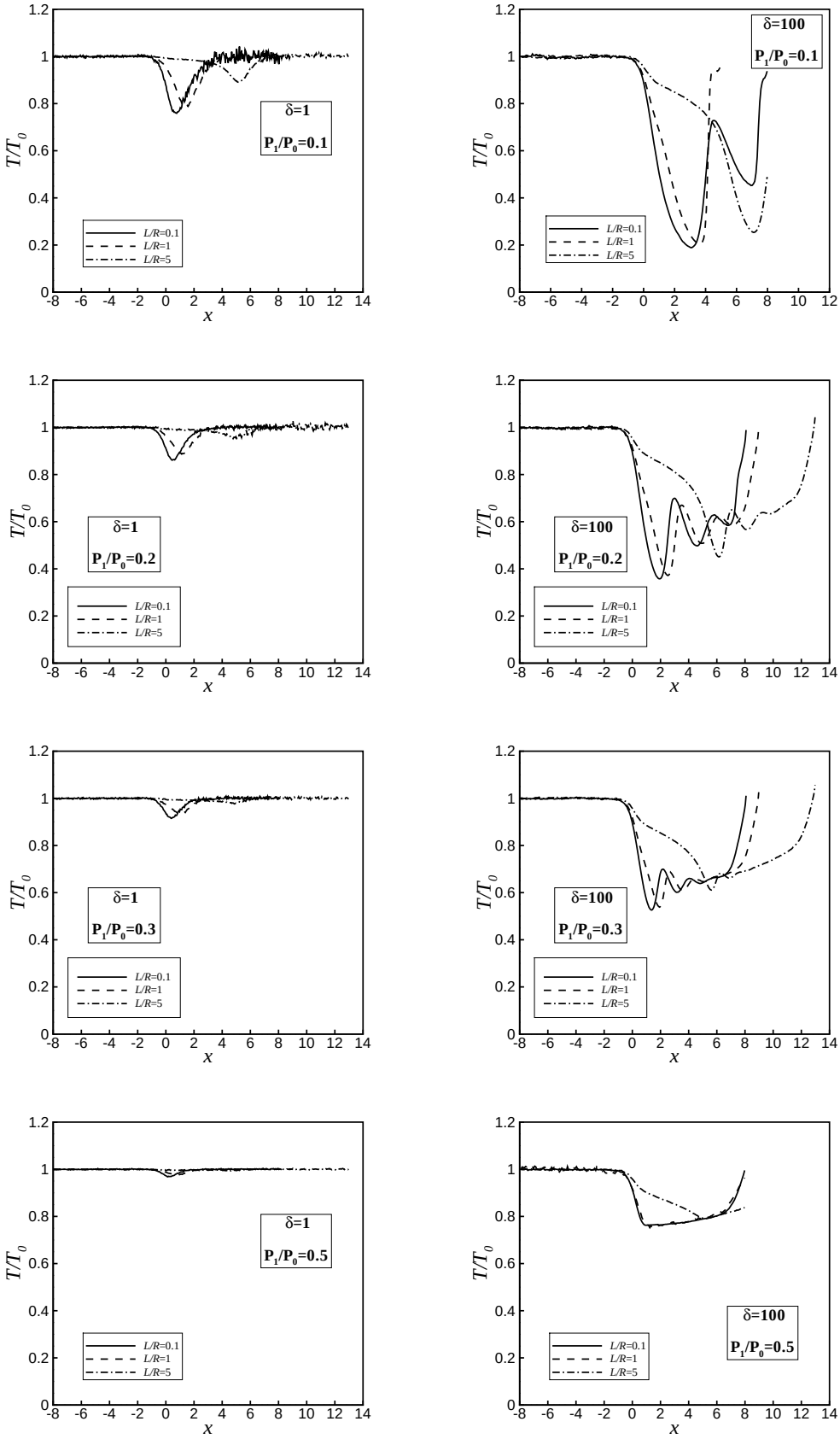
Σχήμα 9.7: Ροϊκές γραμμές για διάφορα δ, με $P_1/P_0 = 0.5$ και $L/R = 0.5$ (αριστερά) και $L/R = 5$ (δεξιά).

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



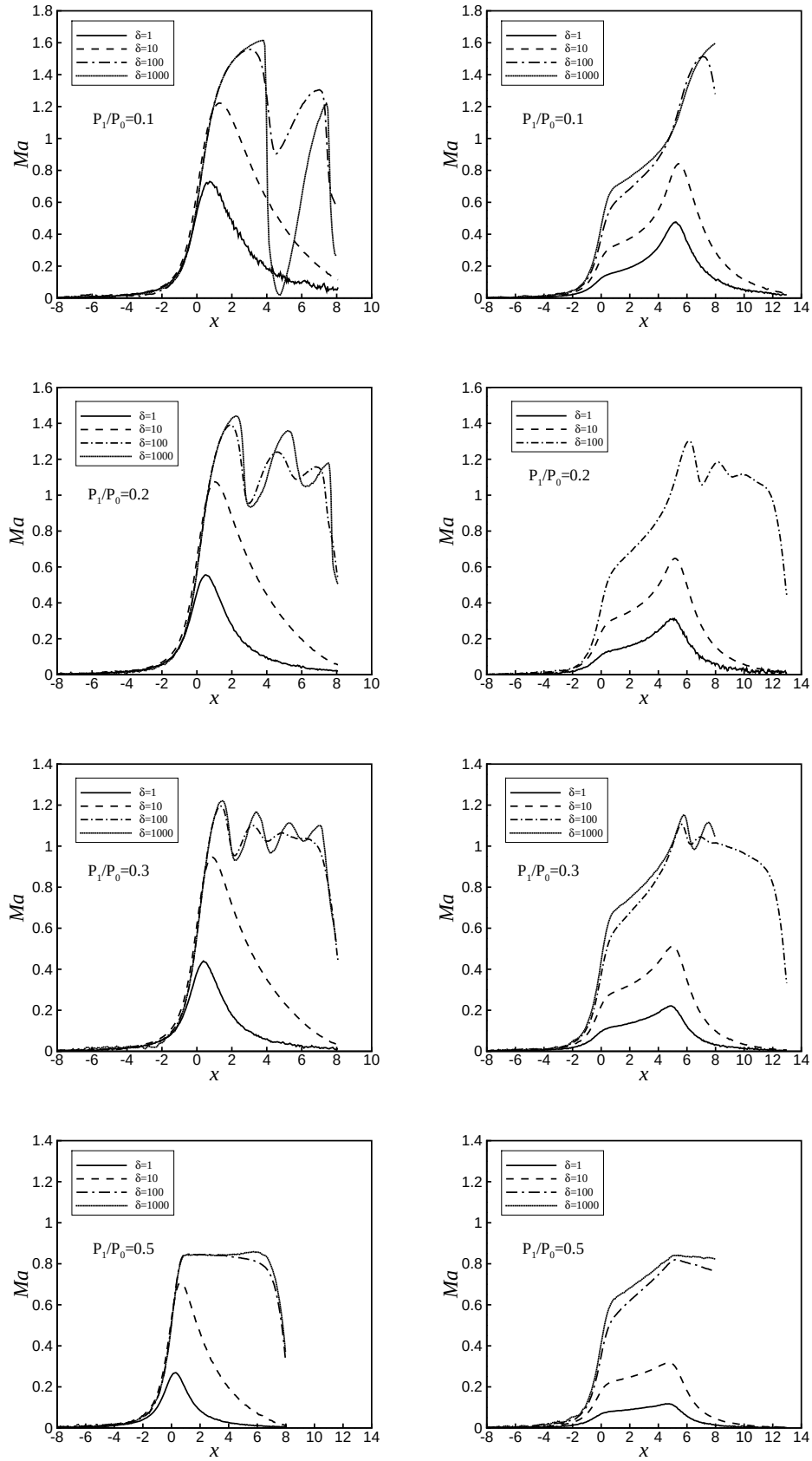
Σχήμα 9.8: Αδιάστατη κατανομή πίεσης κατά μήκος του άξονα συμμετρίας για $\delta = 1$ (αριστερά) και $\delta = 100$ (δεξιά) για διάφορα L/R και $P_1/P_0 = 0.1$ (πάνω) και $P_1/P_0 = 0.7$ (κάτω).

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



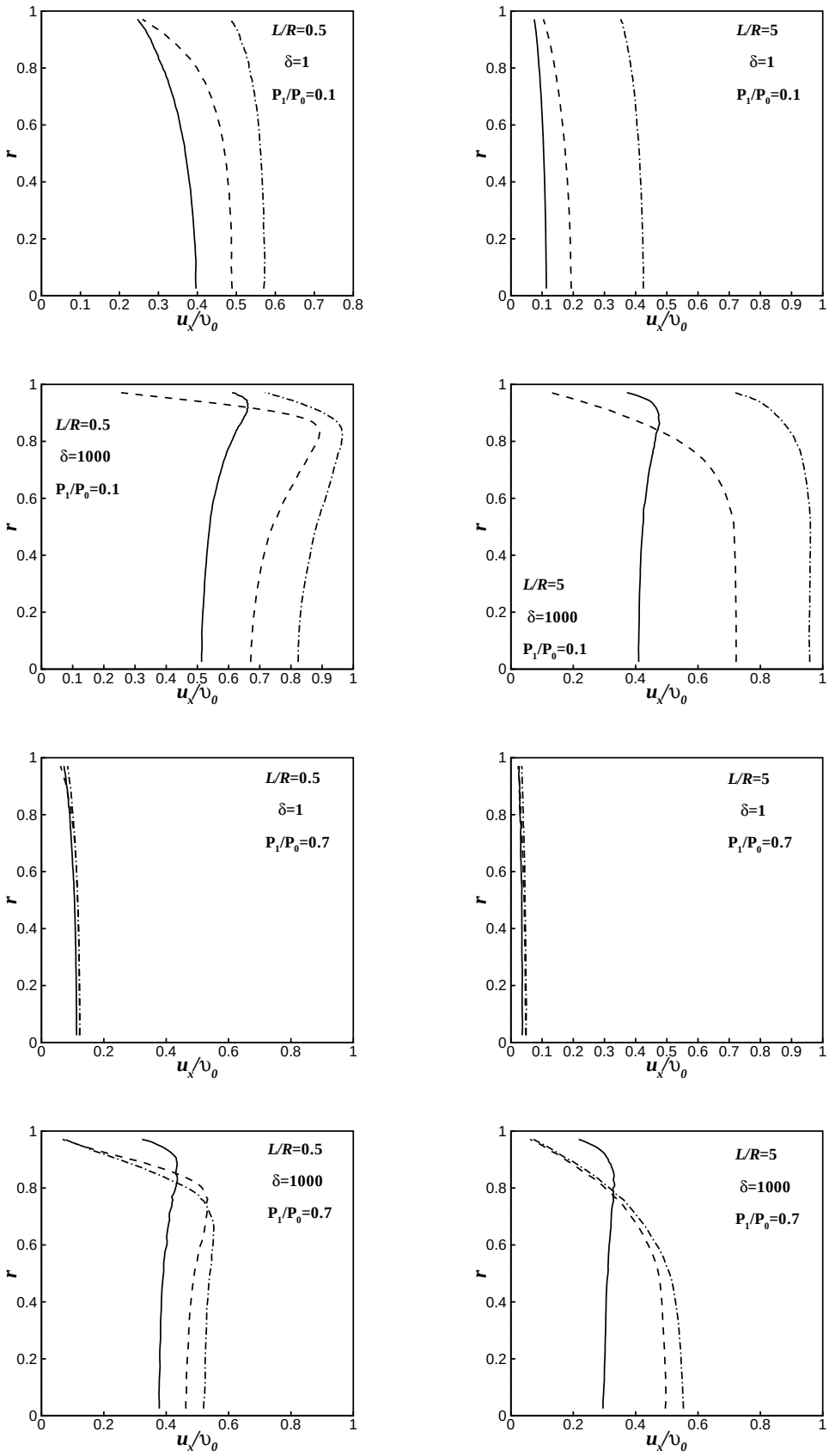
Σχήμα 9.9: Αδιάστατη κατανομή θερμοκρασίας κατά μήκος του άξονα συμμετρίας $r = 0$ για $\delta = 1$ (αριστερά) and $\delta = 100$ (δεξιά) για διάφορα L/R και $P_1/P_0 = 0.1$ (πάνω) και $P_1/P_0 = 0.7$ (κάτω).

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



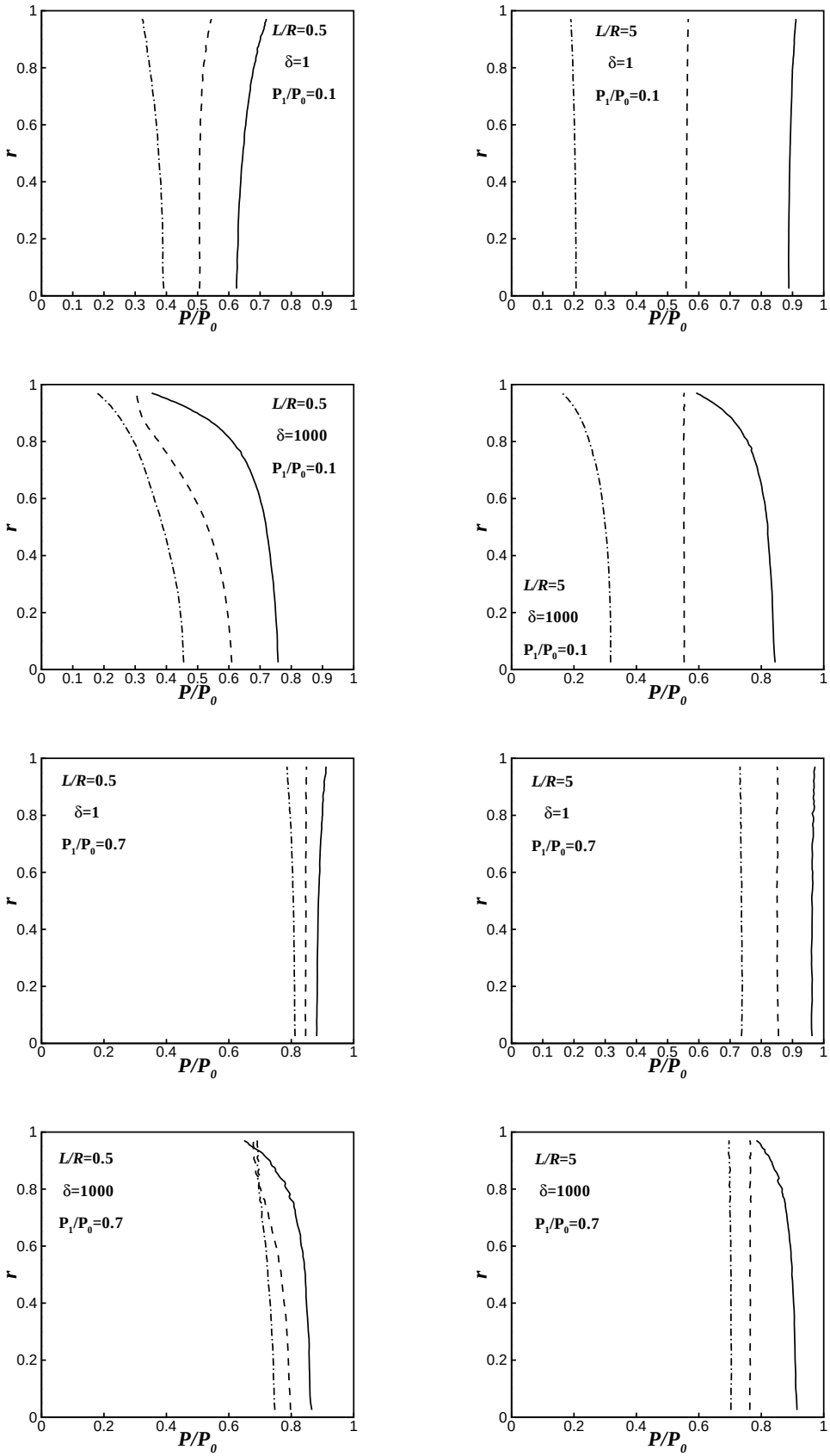
Σχήμα 9.10: Μεταβολή του αριθμού Ma κατά μήκος του άξονα συμμετρίας $r = 0$ για διάφορα δ και P_1/P_0 με $L/R = 0.1$ (αριστερά) και $L/R = 5$ (δεξιά).

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



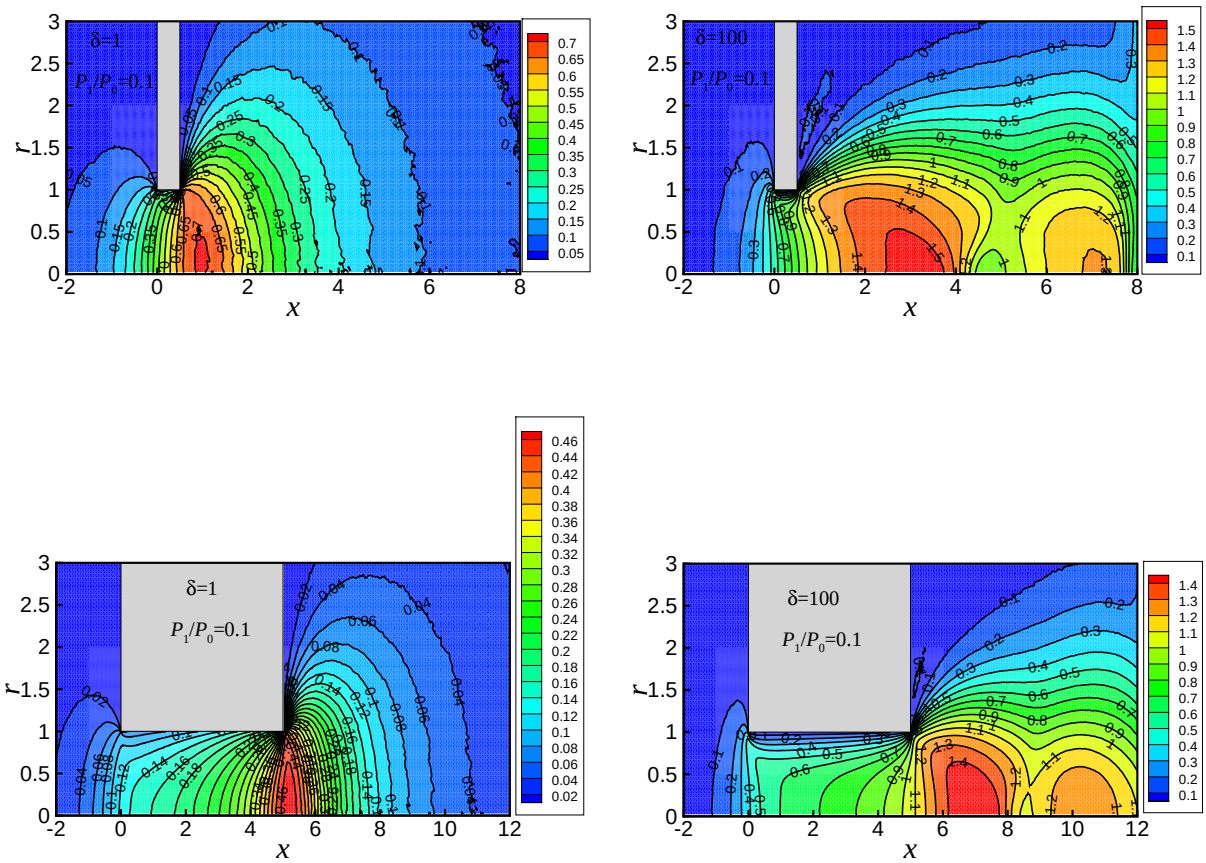
Σχήμα 9.11: Κατανομές αδιάστατης αξονικής ταχύτητας στην είσοδο ($x = 0$: —), μέση ($x = L/(2R)$: − − −) και έξοδο ($x = L/R$: − · − · −) του αγωγού για διαφορετικές τιμές των L/R και δ.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



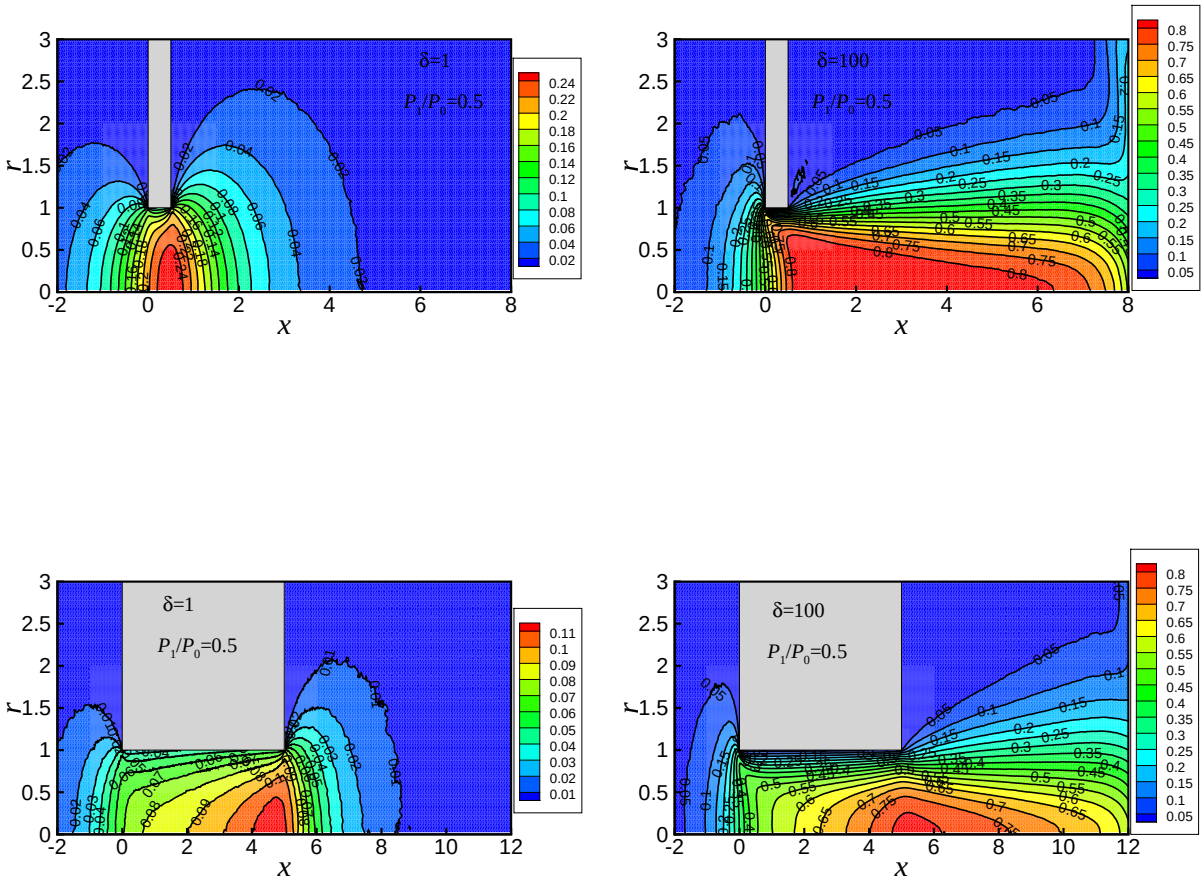
Σχήμα 9.12: Κατανομές αδιάστατης πίεσης στην είσοδο ($x = 0$: —), μέση ($x = L/(2R)$: − − −) και έξοδο ($x = L/R$: − · − · −) του αγωγού για διαφορετικές τιμές των L/R και δ.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



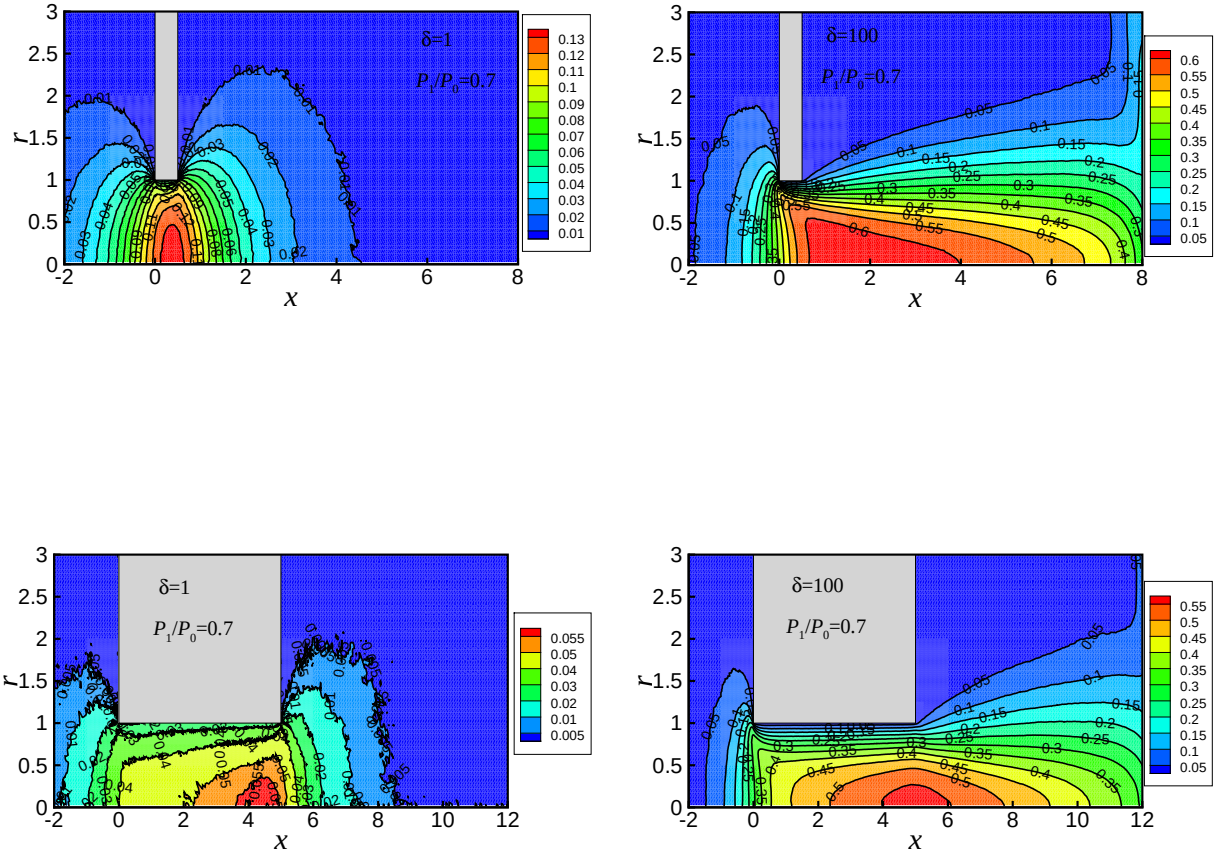
Σχήμα 9.13: Ισοϋψείς τοπικού αριθμού Ma για $L/R = 0.5$ (πάνω) και $L/R = 5$ (κάτω) και διάφορα δ με $P_1/P_0 = 0.1$.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



Σχήμα 9.14: Ισοϋψείς τοπικού αριθμού Ma για $L/R = 0.5$ (πάνω) και $L/R = 5$ (κάτω) και διάφορα δ με $P_1/P_0 = 0.5$.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



Σχήμα 9.15: Ισοϋψείς τοπικού αριθμού Ma για $L/R = 0.5$ (πάνω) και $L/R = 5$ (κάτω) και διάφορα δ με $P_1/P_0 = 0.7$.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Κεφαλαιο 10

Ανακεφαλαιωση και μελλοντικη ερευνα

10.1 Ανακεφαλαίωση διδακτορικής διατριβής

Το αντικείμενο της παρούσας διατριβής είναι η μελέτη και επίλυση ροών σε αγωγούς απείρου και πεπερασμένου μήκους σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen. Εξετάζονται αγωγοί με κυλινδρική, δακτυλοειδή, ορθογώνια, τριγωνική και τραπεζοειδή διατομή. Σε όλες τις περιπτώσεις, η ροή οφείλεται σε βαθμίδα πίεσης. Σημειώνεται ότι οι ροές αυτού του τύπου συναντώνται σε πολλές τεχνολογικές εφαρμογές. Η επίλυση των προβλημάτων βασίζεται σε μεθοδολογίες μεσοκλίμακας και συγκεκριμένα α) στην κινητική θεωρία και β) στην μέθοδο DSMC.

Η ροή σε αγωγό μεγάλου (απείρου) μήκους θεωρείται ότι είναι πλήρως ανεπτυγμένη και επομένως γραμμική. Στη περίπτωση αυτή, εφαρμόζεται και επιλύεται με την μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων το γραμμικό κινητικό μοντέλο BGK με οριακές συνθήκες διαχυτικής-κατοπτρικής ανάκλασης τύπου Maxwell. Το ερευνητικό έργο στη ενότητα των πλήρως ανεπτυγμένων ροών περιλαμβάνει:

- Ανάπτυξη και εξειδίκευση κινητικών αλγορίθμων αποτελεσματικής επίλυσης γραμμικών κινητικών εξισώσεων σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen.
- Επίλυση ροής σε δακτυλοειδείς αγωγούς.
- Υπολογισμό του αριθμού Poiseuille και της ακριβούς υδραυλικής διαμέτρου σε αγωγούς ποικίλων διατομών.
- Συγκρίσεις μεταξύ θεωρητικών και πειραματικών δεδομένων και ανάπτυξη μεθοδολογίας προσδιορισμού της κατανομής πίεσης κατά μήκος του αγωγού.

Στην περίπτωση ροής σε αγωγό πεπερασμένου μήκους, η ροή θεωρείται μη γραμμική και επιλύεται με τη μέθοδο DSMC. Στη ενότητα των μη γραμμικών ροών το ερευνητικό έργο περιλαμβάνει:

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

- Ανάπτυξη, εμβάθυνση και εξειδίκευση του αλγορίθμου Direct Simulation Monte Carlo. Η αναβάθμιση του αλγορίθμου περιλαμβάνει

  α) εισαγωγή κυλινδρικής γεωμετρίας,

  β) χρήση ειδικών επιφανειών διαχωρισμού του πεδίου ροής με διαφορετικούς συντελεστές βαρύτητας,

  γ) εφαρμογή πλέγματος με περισσότερα από ένα επίπεδα πύκνωσης και

  δ) αντιμετώπιση επιπλέον ειδικών υπολογιστικών θεμάτων.

- Επίλυση ροής αερίου διαμέσου παράλληλων πλακών με χρήση της μεθόδου DSMC και τη μελέτη της επίδρασης του μεγέθους των υπολογιστικών χωρίων στην είσοδο και την έξοδο του αγωγού.

- Επίλυση ροής αερίου σε κυλινδρικό αγωγό πεπερασμένου μήκους σε κενό ($P_1/P_0 = 0$) και με οποιονδήποτε λόγο πίεσης $P_1/P_0 \neq 0$.

Σημειώνεται ότι τα χαρακτηριστικά της ροής αλλά και τα σχετικά μακροσκοπικά μεγέθη έχουν διαφορετική ποιοτική και ποσοτική συμπεριφορά στις δύο διαφορετικές ενότητες ροών που έχουν μελετηθεί. Συγκεκριμένα η ροή σε αγωγούς μεγάλου μήκους είναι ασυμπίεστη και χαρακτηρίζεται από πολύ μικρούς αριθμούς Ma και Re. Αντίθετα η ροή σε αγωγούς πεπερασμένου μήκους είναι συμπιεστή και χαρακτηρίζεται από ένα ευρύ φάσμα του αριθμού Ma. Ανάλογα με τις ροϊκές παραμέτρους, η ροή μπορεί να είναι υποηχητική ή υπερηχητική.

Όπως αναφέραμε και σε προηγούμενα κεφάλαια, η παρούσα ερευνητική εργασία περιλαμβάνει αποτελέσματα που παρουσιάζονται για πρώτη φορά στην διεθνή βιβλιογραφία. Στην περίπτωση των ροών σε αγωγούς μεγάλου μήκους, ο υπολογισμός του αριθμού Po και της ακριβούς υδραυλικής διαμέτρου D_h^{exact} επιτυγχάνεται για πρώτη φορά [116, 133]. Οι ποσότητες αυτές είναι ιδιαίτερα σημαντικές σε πολλαπλές εφαρμογές, διευκολύνοντας τον σχεδιασμό και την βελτιστοποίηση συσκευών και διατάξεων. Επίσης, η συστηματική και λεπτομερής σύγκριση θεωρητικών και πειραματικών αποτελεσμάτων σε ένα ευρύ φάσμα του αριθμού Knudsen για αγωγούς τεσσάρων διαφορετικών διατομών αποδεικνύει την δυναμική της προσομοίωσης με κινητικές εξισώσεις και επίσης την δυνατότητα ανάπτυξης πειραματικών διατάξεων με "δύσκολες" συνθήκες λειτουργίας (χαμηλές πιέσεις ή/και μικρές διαστάσεις) [21]. Η ροή σε δακτυλοειδή αγωγό αν και έχει αντιμετωπιστεί στο παρελθόν, τώρα ολοκληρώνεται με την παρουσίαση αποτελεσμάτων για σύνθετες οριακές συνθήκες διαχυτικής-κατοπτρικής ανάκλασης [116].

Στην συνέχεια, οι ροές σε αγωγούς πεπερασμένου μήκους αν και φαίνονται απλές, απαιτούν ισχυρά και αποτελεσματικά αριθμητικά σχήματα και μεθόδους. Υπενθυμίζουμε ότι τα αποτελέσματα πρέπει να είναι αξιόπιστα σε όλο το εύρος του αριθμού Kn. Τα δημοσιευμένα αποτελέσματα είναι περιορισμένα. Αξιοποιώντας τις υπολογιστικές δυνατότητες του Εργαστηρίου Φυσικών και Χημικών Διεργασιών, παρουσιάζονται για πρώτη φορά αποτελέσματα

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

για μεγάλο εύρος γεωμετρικών και ροϊκών παραμέτρων που επηρεάζουν την ροή, δηλαδή τον αριθμό Kn, το αδιάστατο μήκος L/R και τον λόγο πίεσης P_1/P_0. Αυτό επιτυγχάνεται έχοντας αναβαθμίσει και εξειδικεύσει τον κλασσικό αλγόριθμο DSMC. Τα αποτελέσματα περιγράφουν ποιοτικά και ποσοτικά τα χαρακτηριστικά της ροής διαμέσου κυλινδρικών αγωγών πεπερασμένου μήκους.

Επιπλέον της θεωρητικής σημασίας των αριθμητικών αποτελεσμάτων, αυτά μπορούν επίσης να χρησιμοποιηθούν σε πολλές εφαρμογές όπως π.χ. σε μετρητές ροής μάζας, σε μικροακροφύσια που χρησιμοποιούνται ως συστήματα πρόωσης στη αεροδιαστημική, σε δίκτυα σωληνώσεων, σε αντλίες και πύργους απόσταξης, σε συστήματα κενού, σε μεμβράνες και σε πορώδη μέσα στην τεχνολογία διύλισης και στην κατασκευή μικροηλεκτρονικών συστημάτων και ροϊκών συσκευών σε μικρο-ηλεκτρομηχανολογικά συστήματα (MEMS).

10.2 Μελλοντική έρευνα

Οι τομείς στους οποίους θα μπορούσε να εξελιχθεί η παρούσα ερευνητική προσπάθεια, περιλαμβάνει πολλές εναλλακτικές περιοχές που βασίζονται τόσο σε θεωρητικά όσο και σε πρακτικά αντικείμενα.

Επέκταση της θεωρητικής έρευνας θα μπορούσε να περιλαμβάνει ειδικές ενότητες της κινητικής θεωρίας. Έχοντας εμβαθύνει και εξειδικευθεί στην επίλυση γραμμικών κινητικών μοντέλων, το επόμενο βήμα θα είναι η αντιμετώπιση της γραμμικής εξίσωσης Boltzmann. Σημειώνεται ότι ελάχιστες ερευνητικές ομάδες στον κόσμο έχουν την δυνατότητα επίλυσης της συγκεκριμένης ολοκληροδιαφορικής εξίσωσης. Η προσπάθεια αυτή πέρα από το καθαρά μαθηματικό-υπολογιστικό ενδιαφέρον, θα έχει και σημαντικά τεχνικά οφέλη αφού διευρύνει το πεδίο εφαρμογής και επιτρέπει την επίλυση φαινομένων ροής και μεταφοράς, στα οποία τα γνωστά κινητικά μοντέλα, που αποτελούν απλοποιήσεις της εξίσωσης Boltzmann, αστοχούν. Επίσης, σημαντική θα είναι η προσπάθεια επίλυσης μη γραμμικών κινητικών μοντέλων. Η μελέτη και η αντιμετώπιση μη γραμμικών κινητικών εξισώσεων θα επιτρέψει την επέκταση της εφαρμοσιμότητας της προσέγγισης και σε ροές με μεγάλους αριθμούς Re και Ma, ανοίγοντας παράλληλα τον δρόμο για την εμπεριστατομένη σύγκριση μεταξύ των κινητικών εξισώσεων και της μεθόδου DSMC σε πρότυπα προβλήματα ροής. Ένα άλλο ερευνητικό πεδίο για περαιτέρω θεωρητική και υπολογιστική ανάπτυξη της παρούσας διατριβής είναι η επέκταση του αλγορίθμου DSMC σε μίγματα αερίων, σε ροές με χημική αντίδραση και σε ροές με πολυατομικά αέρια (με περισσότερους από ένα βαθμούς ελευθερίας).

Σε πρακτικό επίπεδο οι εφαρμογές είναι πολλές. Μερικές από αυτές συναντώνται σε μικροηλεκτρομηχανολογικά συστήματα, στην αεροδιαστημική μεγάλων υψομέτρων, σε συστήματα κενού, στην τεχνολογία διύλισης σε πορώδη μέσα, στην μελέτη της ατμοσφαιρικής ρύπανσης από αιωρούμενα σωματίδια κ.α. Οι μέθοδοι που έχουν αναπτυχθεί στην παρούσα εργασία θα πρέπει να εξειδικευθούν σε συγκεκριμένες γεωμετρίες και συνθήκες ώστε να δώ-

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

σουν απαντήσεις σε προβλήματα, τα οποία παραμένουν ανοικτά. Παραδείγματα τέτοιων προβλημάτων είναι η μελέτη των αισθητήρων του αερόσακου των αυτοκινήτων, τα συστήματα κενού του αντιδραστήρα ITER, οι αντλίες κενού κ.α. Οι συγκρίσεις επίσης με πειραματικά αποτελέσματα θα μπορούσαν να επεκταθούν για την περίπτωση μιγμάτων αερίων και σε αγωγούς με διαβαθμίσεις και καμπύλα τμήματα.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Βιβλιογραφια

[1] T Ewart, P Perrier, I Graur, and Méolans. Mass flow rate measurements in a microchannel, from hydrodynamic to near free molecular regimes. Journal of Fluid Mechanics, 584:337–356, 2007.

[2] M Gad-el Hak. The MEMS Handbook. CRC Press, Florida, USA, 2002.

[3] N G Hadjiconstantinou. Sound wave propagation in a transition regime of micro and nanochannels. Phys. Fluids, 14(2):802–809, 2002.

[4] Chr Day, A Antipenkov, M Dremel, H Haas, V Hauer, A Mack, D Murdoch, and M Wykes. Research, development and design for the cryogenic and mechanical vacuum pumping systems of iter. Vaccum, 81(6):738–747, 2007.

[5] F Sharipov and V Seleznev. Rarefied gas flow through a long tube at any pressure ratio. J. Vac. Sci. Technol. A, 12(5):2933–2935, 1994.

[6] Y G Sikharulidze, P Moraes Jr, and A N Korchagin. Analysis of accuracy at ballistic re-entry in the earth atmosphere. In 14th Int. Symp. Space Flight Dynamics, 1999.

[7] J C Taylor, A B Carlson, and H A Hassan. Monte Carlo simulation of radiating re-entry flows. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 8(3):478–485, 1994.

[8] J Allégre, A Chpoun, M Raffin, and J C Lengrand. Experimental and numerical investigation of rarefied hypersonic flow around the ard reentry module. In C Shen, editor, Rarefied Gas Dynamics, pages 473–478, Beijing (China), 1997. 20th Int. Symp., 1996, Pekin University Press.

[9] J M Reese, M A Gallis, and D A Lockerby. New direction in fluid mechanics: non-equilibrium aerodynamic and microsystem flows. Phil. Trans. R. Soc. lond. A, 361:2967–2988, 2003.

[10] F M White. Viscous Fluid Flows. McGraw-Hill, New York, 1974.

[11] G E Karniadakis and A Beskok. Micro Flows. Fundamentals and Simulation. Spinger-Verlag, New York, 2002.

[12] L H Soderholm. Nonlinear acoustics to second order in knudsen number without unphysical instabilities. In Rarefied Gas Dynamics, volume 24, pages 54–59. 24th Int. Symp., 2005.

[13] X-D Din and E E Michaelides. Kinetic theory and molecular dynamics simulations of microscopic flows. Phys. Fluids, 9(12):3915–3925, 1997.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

[14] G A Bird. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. Oxford University Press, Oxford, 1994.

[15] C Cercignani. The Boltzmann Equation and its Application. Springer-Verlag, New York, 1988.

[16] Y Sone. Kinetic Theory and Fluid Dynamics. Birkhäuser, Boston, 2002.

[17] F Sharipov and V Seleznev. Data on internal rarefied gas flows. J. Phys. Chem. Ref. Data, 27(3):657–706, 1998.

[18] E Oran, C Oh, and B Cybyk. Direct simulation monte carlo: Recent advances and applications. Annu. Rev. Fluid Mech., 30:403–441, 1998.

[19] L Boltzmann. Lectures on Gas Theory. Dover Publication, New York, 1995.

[20] C Cercignani. Rarefied Gas Dynamics. From Basic Concepts to Actual Calculations. Cambridge University Press, Cambridge, 2000.

[21] S Varoutis, D Valougeorgis, O Sazhin, and F Sharipov. Rarefied gas flow through short tubes into vacuum. J. Vac. Sci. Technol., A 26(2):228–238, 2008.

[22] J C Maxwell. Illustrations of the dynamical theory of gases, i. on the motion and collisions of perfectly elastic spheres, ii. on the process of diffusion of two or more kinds of moving particles among one another, iii. on the collision of perfectly elastic bodies of any form. Philos. Magazine, 19, 20:19–32, 21–32, 33–36, 1860.

[23] J C Maxwell. On the dynamical theory of gases. Phil Trans. R. Soc. Lond., 49-88:157, 1867.

[24] L Boltzmann. Weitere studien über das wärmegleichgewicht unter gasmolekülen. Sitzung Berichte Kaiserl. Akad. der Wissenschaften, 66(2):275–370, 1872.

[25] H A Lorentz. The motion of electrons in metallic bodies. Proc. Sect. Sci. Kon. Akad. Wet., 7:438–453, 585–593, 684–691, 1905.

[26] D Hilbert. Grundüge einer allgemein Theorie der linearen Integralgleichungen. Teubner, Leipzig, 1912.

[27] A C Lunn. Integral equations in the kinetic theory of gases (abstract). Bull. Am. Math. Soc., 19:455, 1913.

[28] T Carleman. Sur la theorie le l'equation integro-differentielle de bolztmann. Acta Mathematica, 60:91–146, 1933.

[29] E Wild. On boltzmann's equation in kinetic theory of gases. Proc. Cambridge Philos. Soc., 47:602–609, 1951.

[30] S Chapman. On the law of distribution of molecular velocities, and on the theory of viscosity and thermal conduction, in a non-uniform simple monoatomic gas. Phil. Trans. Roy. Soc. London, 216:279–341, 1916.

[31] D Burnett. The distribution of molecular velocities and the mean motion in a non-uniform gas. Proc. London Math. Soc., 39:385–430, 1935.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

[32] D Enskog. Die numerische berechnung der vorgange in massig verdunnten gasen. Ark. Mat. Astron. Fys., 16:1–60, 1922.

[33] H Grad. On the kinetic theory of rarefied gases. Commun. Pure Appl. Math., (2):331–407, 1949.

[34] M N Kogan. Rarefied Gas Dynamics. Plenum, New York, 1969.

[35] S Harris. An Introduction to the Theory of the Boltzmann Equation. Dover Publications, New York, 1971.

[36] J H Ferziger and H G Kaper. Mathematical Theory of Transport Processes in Gases. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1972.

[37] R A East. A reusable space-rescue vehicle: Re-entry simulation. Phil. Trans. R. Soc. Lond, A357:2177–2195, 1999.

[38] P L Bhatnagar, E P Gross, and M A Krook. A model for collision processes in gases. Phys. Rev., 94:511–525, 1954.

[39] P Welander. On the temperature jump in a rarefied gas. Arkiv Fys., 7(5):507–553, 1954.

[40] E M Shakhov. Method of Investigation of Rarefied Gas Flows. Nauka, Moscow, 1974. [in Russian].

[41] C Cercignani. Mathematical Methods in Kinetic Theory. Plenum, New York, 1969.

[42] S Chapman and T G Cowling. The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases. University Press, Cambridge, 1952.

[43] E P Gross and M Krook. Model for collision processes in gases: Small-amplitude oscillations of charged two-component systems. Phys. Rev., 102(3):93–604, 1956.

[44] E P Gross, E A Jackson, and S Ziering. Boundary value problems in kinetic theory of gases. Ann. Phys., 1:141–167, 1957.

[45] L Sirovich. Kinetic modeling of gas mixture. Phys. Fluids, 5(8):908–918, 1962.

[46] T F Morse. Kinetic model for gases with internal degrees of freedom. Phys. Fluids, 7(2):159–169, 1964.

[47] T F Morse. Kinetic model equations for a gas mixture. Phys. Fluids, 7(12):2012–2013, 1964.

[48] B B Hamel. Kinetic model for binary gas mixture. Phys. Fluids, 8(3):418–425, 1965.

[49] F J McCormack. Construction of linearized kinetic models for gaseous mixture and molecular gases. Phys. Fluids, 16:2095–2105, 1973.

[50] F Sharipov, L M G Cumin, and D Kalempa. Plane Couette flow of binary gaseous mixture in the whole range of the Knudsen number. Eur. J. Mech. B/Fluids, 23:899–906, 2004.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

[51] F Sharipov and D Kalempa. Velocity slip and temperature jump coefficients for gaseous mixtures. I. Viscous slip coefficient. Phys. Fluids, 15(6):1800–1806, 2003.

[52] F Sharipov and D Kalempa. Velocity slip and temperature jump coefficients for gaseous mixtures. II. Thermal slip coefficient. Phys. Fluids, 16(3):759–764, 2004.

[53] F Sharipov. Numerical simulation of rarefied gas flow through a thin orifice. J. Fluid Mech., 518:35–60, 2004.

[54] S Takata. Diffusion slip for a binary mixture of hard-sphere molecular gases: Numerical analysis based on the linearized Boltzmann equation. In T J Bartel and M A Gallis, editors, Rarefied Gas Dynamics, volume 585, pages 22–29, New York, 2001. 22nd Int. Symp., AIP Conference Proc.

[55] S Takata, S Yasuda, S Kosuge, and K Aoki. Numerical analysis of thermal-slip and diffusion-slip flows of a binary mixture of hard-sphere molecular gases. Phys. Fluids, 15:3745–3766, 2003.

[56] F Sharipov. Application of the Cercignani-Lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows. I. Plane flow between two parallel plates. Eur. J. Mech. B / Fluids, 21(1):113–123, 2002.

[57] M Epstein. A model of the wall boundary condition in kinetic theory. AIAA Journal, 5(10):1797–1800, 1967.

[58] E J Broadwell. Study of rarefied flow by the discrete velocity method. J. Fluid Mech., 19:401–414, 1964.

[59] A B Huang and D L Hartley. Nonlinear rarefied couette flow with heat transfer. Phys. Fluids, 11(6):1321–1326, 1968.

[60] F Sharipov. Rarefied gas flow through a slit: Influence of the gas-surface interaction. Phys. Fluids, 8(1):262–268, 1996.

[61] D Valougeorgis and S Naris. Acceleration schemes of the discrete velocity method: Gaseous flows in rectangular microchannels. SIAM J. Scient. Comp., 25(2):534–552, 2003.

[62] F M Sharipov and E A Subbotin. An optimization of the discrete velocity method used in rarefied gas dynamics. Z. Angew. Math. Phys. (ZAMP), 44:572–577, 1993.

[63] J Lihnaropoulos, S Naris, and D Valougeorgis. Formulation and stability analysis of rapidly convergent iteration schemes for 2d discrete velocity calculations. Transport Theory and Statistical Physics, 36(4-6):513–528, 2007.

[64] G A Bird. Molecular Gas Dynamics. Clarendon Press, Oxford, 1976.

[65] 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, 336(3-4):294–318, 2004.

[66] F Sharipov and D Kalempa. Gaseous mixture flow through a long tube at arbitrary Knudsen number. J. Vac. Sci. Technol. A, 20(3):814–822, 2002.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

[67] S Naris, D Valougeorgis, D Kalempa, and F Sharipov. Flow of gaseous mixtures through rectangular microchannels driven by pressure, temperature and concentration gradients. Phys. Fluids, 17(10):100607.1–100607.12, 2005.

[68] T T Bramlette. Plane Poiseuille flow of rarefied gas based on the finite element method. Phys. Fluids, 14(2):288–293, 1971.

[69] V Boffi, De Socio L, Gaffuri G, and Pescatare. Rigorous constructive solution to monodimensional. Poiseuille and thermal creep flows. Meccanica, 11:183–190, 1976.

[70] C Cercignani. Plane Poiseuille flow according to the method of elementary solutions. J. Math. Anal. Appl., 12:254–262, 1965.

[71] C Cercignani and A Daneri. Flow of a rarefied gas between two parallel plates. J. Appl. Phys., 34:3509–3513, 1963.

[72] C Cercignani and C D Pagani. Variational approach to boundary value problems in kinetic theory. Phys. Fluids, 9(6):1167–1173, 1966.

[73] A B Huang, D P Giddens, and C W Bagual. Rarefied gas flow between parallel plates based on the discrete ordinate method. Phys. Fluids, 10(3):498–502, 1967.

[74] S K Loyalka, N Petrellis, and T S Storvik. Some exact numerical results for the BGK model: Couette, Poiseuille and thermal creep flow between parallel plates. Z. Angew. Math. Phys (ZAMP), 30:514–521, 1979.

[75] C E Siewert and Valougeorgis D. An analytical discrete-ordinates solution of the S-model kinetic equation for flow in a cylindrical tube. J. Quant. Spectr. Rad. Tran., 72:351–550, 2002.

[76] K A Hickey and S K Loyalka. Plane Poiseuille flow: Rigid sphere gas. J. Vac. Sci. Tecnol. A, 8(2):957–960, 1990.

[77] S K Loyalka and K A Hickey. Kinetic theory of thermal transpiration and the mechanocaloric effect: Planar flow of a rigid sphere gas with arbitrary accommodation at the surface. J. Vac. Sci.Technol. A, 9(1):158–163, 1991.

[78] T Ohwada, Y Sone, and K Aoki. Numerical analysis of the Poiseuille and thermal transpiration flows between two parallel plates on the basis of the Boltzmann equation for hard sphere molecules. Phys. Fluids A, 1(12):2042–2049, 1989.

[79] C Cercignani and F Sernagiotto. Cylindrical Poiseuille flow of a rarefied gas. Phys. Fluids, 9(1):40–44, 1966.

[80] S S Lo and S K Loyalka. An efficient computation of near-continuum rarefied gas flows. Z. Angew. Math. Phys (ZAMP), 33:419–424, 1982.

[81] F Sharipov. Rarefied gas flow through a long tube at any temperature difference. J. Vac. Sci. Technol. A, 14(4):2627–2635, 1996.

[82] S K Loyalka and S A Hamoodi. Poiseuille flow of a rarefied gas in a cylindrical tube: Solution of linearized Boltzmann equation. Phys.Fluids A, 2(11):2061–2065, 1990.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

[83] S S Lo, S K Loyalka, and T S Storvick. Kinetic theory of thermal transpiration and mechanocaloric effect. V. Flow of polyatomic gases in a cylindrical tube with arbitrary accommodation at the surface. J. Chem. Phys., 81:2439–2449, 1984.

[84] S K Loyalka. Kinetic theory of thermal transpiration and mechanocaloric effect. II. J. Chem. Phys., 63(9):4054–4960, 1975.

[85] B T Porodnov, A N Kulev, and F T Tukhvetov. Thermal transpiration in a circular capillary with a small temperature difference. J. Fluid Mech., 88(4):609–622, 1978.

[86] S K Loyalka, T.S. Storvick, and H.S. Park. Poiseuille flow and thermal creep flow in long, rectangular channel in the molecular and transition flow regimes. J. Vac. Sci. Technol., 13(6):1188–1192, 1976.

[87] S Colin, C Aubert, and R Caen. Unsteady gaseous flows in rectangular microchannels: frequency response of one or two pneumatic lines connected in series. Eur. J. Mech. B / Fluids, 17(1):79–104, 1998.

[88] F Sharipov. Rarefied gas flow through a long rectangular channel. J. Vac. Sci. Technol. A, 17(5):3062–3066, 1999.

[89] F Sharipov. Non-isothermal gas flow through rectangular microchannels. J. Micromech. Microeng., 9(4):394–401, 1999.

[90] G M Alder. The numerical solution of choked and supercritical ideal gas flow through orifices and convergent conical nozzles. J. Mech. Eng. Sci., 21(3):197–203, 1979.

[91] A A Alexeenko, D A Levin, S F Gimelshein, M S Ivanov, and A D Ketsdever. Numerical and experimental study of orifice flow in the transition regime. AIAA Paper 2001-3072, 2001.

[92] T Fujimoto and M Usami. Rarefied gas flow through a circular orifice and short tubes. J. Fluids Eng., 106(4):367–373, 1984.

[93] M Hasegawa and Y Sone. Rarefied gas flow through a slit. Phys.Fluids A, 3(3):466–477, 1991.

[94] V D Akinshin, V D Seleznev, and F M Sharipov. Non-isothermal rarefied gas flow through a narrow slit. Izvestia Akademii Nauk SSSR, Mekhanika Zhidkosti i Gaza, 4:171–175, 1990. [in Russian]. Translated in Fluid Dynamics **25**(4), 642-645 (1990).

[95] F Sharipov. Rarefied gas flow into vacuum through a thin orifice. Influence of the boundary conditions. AIAA Journal, 40(10):2006–2008, 2002.

[96] S Naris, D Valougeorgis, F Sharipov, and D Kalempa. Discrete velocity modelling of gaseous mixture flows in MEMS. Superlattices and Microstructures, 35:629–643, 2004.

[97] M Knudsen. Die molekularstromung der gase durch offnungen und die effusion. Ann. Phys., 28:999, 1909.

[98] M Knudsen. Die fesetse der molecular Stromung und die inneren Reibungstromung der gase durch rohren. Ann. Phys. (Leipzig), 28:75–130, 1909.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

[99] A K Sreekanth. Slip flow through long circular tubes. In Rarefied Gas Dynamics, volume 1, pages 667–680. 6th Int. Symp., 1968.

[100] S Colin and L Baldas. Rarefaction effects in gaseous microflows. Comptes Rendus Physique, 5(5):521–530, 2004.

[101] S Colin, P Lalonde, and R Caen. Validation of second-order slip flow model in rectangular microchannels. Heat Transfer Engineering, 25(3):23–30, 2004.

[102] D Valougeorgis and J R Thomas. Exact numerical results for Poiseuille and thermal creep flow in a cylindrical tube. Phys. Fluids, 29(2):423–429, 1986.

[103] F Sharipov. Application of the Cercignani-Lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows. III. Poiseuille flow and thermal creep through a long tube. Eur. J. Mech. B / Fluids, 22:145–154, 2003.

[104] A A Alexeenko, D.A. Levin, S.F. Gimelshein, D.A. Levin, R.J Collins, and B.D. Reed. Numerical modelling of axisymetric and three-dimensional flows in microelectromechanical systems nozzles. AIAA J., 40(5):897–904, 2002.

[105] R H Edwards. Low-density flows though tubes and nozzles. Proc. of 10th International Symp. in Rarefied Gas Dynamics, 51, 1977.

[106] A Ketsdever, M Clabough, S Gimelshein, and A Alexeenko. Experimental and numerical determination of micropropulsion device efficiencies at low reynolds numbers. AIAA J., 43(3):633–641, 2005.

[107] A Ketsdever, T Lilly, S Gimelshein, and A Alexeenko. Experimental and numerical study of nozzle plume impingement on spacecraft surfaces. pages 367–372, Bari, Italy, 2004.

[108] G N Markelov and M S Ivanov. Numerical study of 2d/3d micronozzles flows. pages 539–546, Sydney, 2000. 22nd Rarefied Gas Dynamics Int. Symp., 2000, American Insitute of Physics.

[109] R.W. Hanks and H.L. Weissberg. Slow viscous flow of rarefied gases through short tubes. J. Appl. Phys., 35(1):142–144, 1964.

[110] R M Barrer and D Nicholson. Flow in capillary system. ii. low pressure transition flow of gases in short capillaries, rectangular slits, beds of spheres and parallel capillary bundles. Brit. J. Appl. Phys., 17:1092–1102, 1966.

[111] H W Liepmann. Gas kinetics and gas dynamics of orifice flow. J. Fluid Mech., 10:65–79, 1961.

[112] A K Sreekanth. Transition flow through short circular tubes. Phys. Fluids, 8(11):1951–1956, 1965.

[113] S T Barashkin. Experimental investigation of flows of gas into vacuum. PhD thesis, Ural State Tech. University, 1977.

[114] H Shinagawa, H Setyawan, T Asai, Y Yuuichi, and K Okuyama. An experimental and theoretical investigation of rarefied gas flow through circular tube of finite length. Chem. Eng. Sci., 57:4027–4036, 2002.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

[115] T C Lilly, S F Gimelshein, A D Ketsdever, and G N Markelov. Measurements and computations of mass flow and momentum flux through short tubes in rarefied gases. Phys. Fluids, 18:093601, 2006.

[116] G Breyiannis, S Varoutis, and D Valougeorgis. Rarefied gas flow in concentric annular tube: Estimation of the poiseuille number and the exact hydraulic diameter. Eur. J. Mech. B/Fluids, 27(5):609–622, 2008.

[117] 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.

[118] W Umrath. Fundamentals of Vacuum Technology. Laybold Press, 1998.

[119] G L Morini, M Spiga, and P Tartarini. The rarefaction effect on the friction factor of gas flow in microchannels. Superlattices and Microstructures, 35:587–599, 2004.

[120] D Valougeorgis. The friction factor of a rarefied gas flow in a circular tube. Phys. Fluids, 19:091702–091702–4, Sept 2007.

[121] J K Haviland and M L Lavin. Application of the Monte-Carlo method to heat transfer in a rarefied gas. Phys. Fluids, 5(11):1399–1405, 1962.

[122] P Raghuraman and D R Willis. Kinetic theory analysis of rarefied gas flow through finite length slots. Phys. Fluids, 20(6):895–902, 1977.

[123] 11th Int. Symp. Nearly free molecular flow through two-dimensional channel of infinite length, volume 1, Paris, 1979. Rarefied Gas Dynamics.

[124] C Chung and S Wereley. Analysis of gas flows in microchannels with small pressure differences. AIAA Paper No 2003-861, 2003.

[125] C Cercignani and M Lampis. Kinetic model for gas-surface interaction. Transp. Theory and Stat. Phys., 1:101–114, 1971.

[126] T C Lilly, N P Selden, S F Gimelshein, A D Ketsdever, and G N Markelov. Numerical and experimental study of low reynolds number flow through thin-wall orifice and short circular tube. AIAA J., pages 2004–2385, 2004.

[127] P. Clausing. The flow of highly rarefied gases through tubes of arbitrary length. J. Vac. Sci. Technol., 8(5):636–646, 1971.

[128] B T Porodnov, P E Suetin, S F Borisov, and V D Akinshin. Experimental investigation of rarefied gas flow in different channels. J. Fluid Mech., 64(3):417–437, 1974.

[129] C Xie. Characteristics of micronozzle gas flows. Phys. Fluids., 19:037102.1–037102.2, 2007.

[130] M Usami and K Teshima. Molecular simulation of rarefiedsupersonic free jets by dsmc method. JSME International Journal Series B-Fluids and Thermal Engineering, 42, 1999.

[131] G Koppenwallner. Discharge coefficents and on axis flow properties in small sonic orifices at low reynold numbers. In M S Ivanov and A K Rebrov, editors, Rarefied Gas Dynamics, pages 585–591, Novosibirsk, 2007. 25th Int. Symp., Russia, 2007.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

[132] S F Gimelshein, G N Markelov, T C Lilly, N P Selden, and A D Ketsdever. Experimental and numerical modeling of rarefied gas flows through orifices and short tubes. In M Capitelli, editor, Rarefied Gas Dynamics, pages 437–443. 24th Int. Symp., Italy, 2004.

[133] S Varoutis, J Lihnaropoulos, D Valougeorgis, D Mathioulakis, and A Tserepi. Estimation of the poiseuille number and of the exact hydraulic diameter in rarefied gas flows through channels of various cross sections. submitted, 2008.

[134] MKS Baratrons High Accuracy Signal Conditioner. MKS Instruments Inc., USA, 1998.

[135] MKS Type 270D High Accuracy Signal Conditioner. MKS Instruments Inc., USA, 1998.

[136] VISCOVAC VM212, Operating instructions. Leybold Vacuum, France, 1996.

[137] T Takaishi and Y Sensui. Thermal transpiration effect of hydrogen, rare gauges and methane. Trans. Faraday Soc., 59, 1963.

[138] W Jitschin and P Roehl. Quantitative study of thermal transpiration effect in vacuum gauges. J. Vac. Sci. Technol., 5(3), 1987.

[139] G Class and A Class. Stromung von Gasen in prismatischen Kanalen konstanter Temperatur bei beliebigen Knudsen-Zahlen. Institut fur Kern- und Energietechnik, Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe, 2004.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Παραρτημα Α

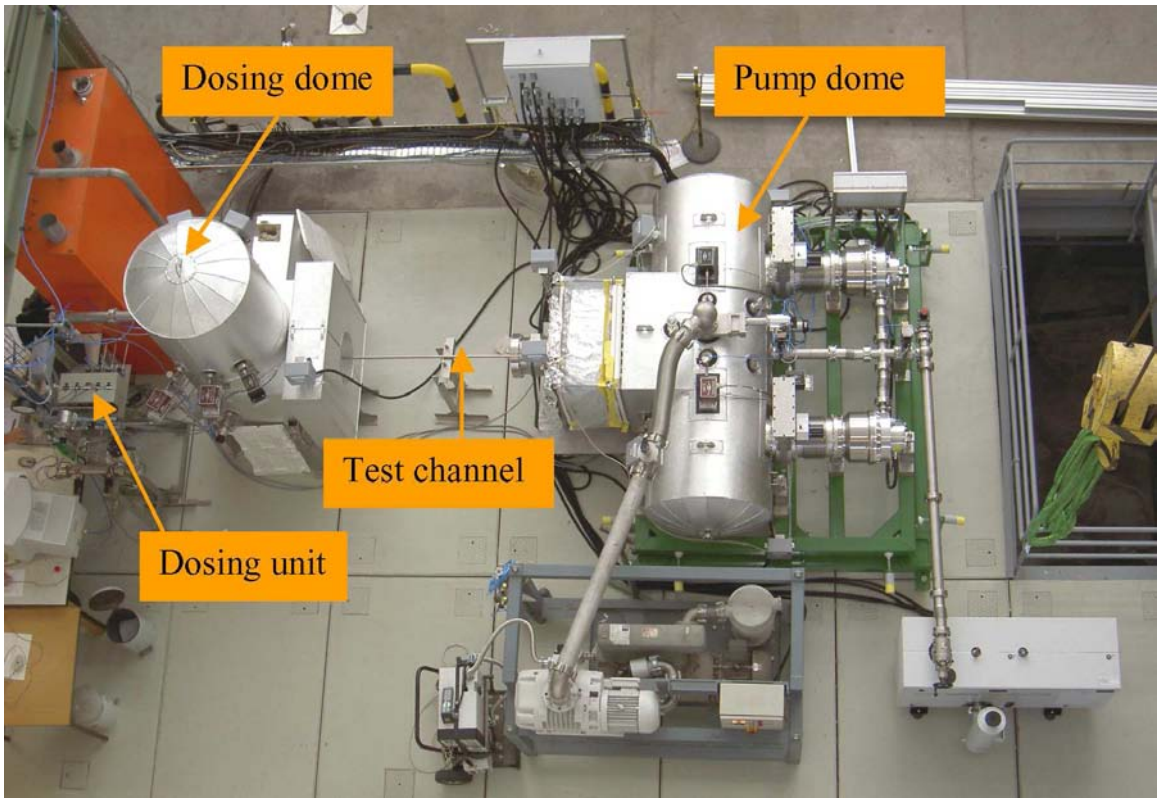
Α-1 Περιγραφή πειραματικής διάταξης TRANSFLOW

Η πειραματική διάταξη TRANSFLOW, η οποία βρίσκεται στο ερευνητικό κέντρο της Καρλσρούης - Γερμανία, αποτελείται από δύο δοχεία υψηλής και χαμηλής πίεσης, τα οποία συνδέονται με αγωγό διαφόρων διατομών. Στην συγκεκριμένη πειραματική διάταξη πραγματοποιήθηκαν πειράματα για την μέτρηση της διαφοράς πίεσης που αντιστοιχεί σε προκαθορισμένη ροή μάζας που διέρχεται από τον αγωγό. Στην συνέχεια συγκρίσεις πραγματοποιήθηκαν μεταξύ των πειραματικών και των αντίστοιχων κινητικών αποτελεσμάτων για την πιστοποίηση των πειραματικών δεδομένων. Στην παρούσα παράγραφο θα περιγραφεί ο τρόπος λειτουργίας και μέτρησης κατά την πειραματική διαδικασία.

Πριν την έναρξη οποιασδήποτε πειραματικής μέτρησης στην εγκατάσταση TRANSFLOW, πραγματοποιείται άντληση και επίτευξη της πίεσης τόσο στο δοχείο πριν τον αγωγό (Dosing dome) όσο και στο δοχείο μετά τον αγωγό (Pump dome) σε επίπεδα της τάξης των 10^{-6} $mbar$. Στην συνέχεια προκαθορίζεται η ροή που θα διέλθει από τον αγωγό κάνοντας χρήση της συσκευής Mass Flow Controller (Dosing Unit). Η συγκεκριμένη συσκευή βρίσκεται πριν το δοχείο υψηλής πίεσης (Σχ. Α-1), συνδέεται με δοχείο που περιέχει το προς χρήση αέριο (Άζωτο, N_2) και έχει την δυνατότητα επίτευξης παροχών διαμέσου οποιουδήποτε αγωγού, της τάξης των 0.1 $sccm$, 1 $sccm$, 10 $sccm$, 10^2 $sccm$, 10^3 $sccm$ και 10^4 $sccm$. Η διαδικασία επιλογής της επιθυμητής ροής πραγματοποιείται διαμέσου ψηφιακής οθόνης. Στο Σχ. Α-2 απεικονίζεται η συσκευή MFC, η οποία βρίσκεται στο κάτω μέρος της φωτογραφίας. Η πειραματική διαδικασία ξεκινάει με την έναρξη της προκαθορισμένης ροής από την συσκευή MFC. Η πιέσεις και στα δύο δοχεία πριν και μετά τον αγωγό αυξάνουν, έως ότου επιτευχθεί διαφορά πίεσης που αντιστοιχεί στην προκαθορισμένη ροή μάζας. Τονίζεται ότι, το δοχείο κατάθλιψης συνδέεται με δύο ειδικές μοριακές αντλίες (Turbomolecular Pumps), οι οποίες λειτουργούν στο μέγιστο των δυνατοτήτων τους και αντλούν το αέριο, το οποίο εξέρχεται από τον αγωγό. Με άλλα λόγια οι ειδικές αυτές αντλίες συντελούν στην επίτευξη χαμηλής πίεσης καθώς και μόνιμης ροής (steady state flow) κατά την διάρκεια του πειράματος.

Οι πιέσεις τόσο στο δοχείο υψηλής όσο και στο δοχείο χαμηλής πίεσης καταμετρώνται από μετρητικά όργανα τύπου Baratron, τα οποία αντιστοιχούν σε διαφορετικό μέγιστο εύρος της μετρούμενης πίεσης. Στην περίπτωση του δοχείου υψηλής πίεσης υπάρχουν τρία μετρητικά όργανα τύπου Baratron ($P202$, $P201$, $P203$), τα οποία έχουν μέγιστο εύρος μετρούμενης

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



Σχήμα A-1: Πειραματική διάταξη TRANSFLOW.

πίεσης 1, 10 και 1000 $Torr$ αντίστοιχα (Σχ. A-3-επάνω). Όμοια στο δοχείο κατάθλιψης υπάρχουν τρία μετρητικά όργανα του ιδίου τύπου ($P302, P301, P303$) με εύρος 0.1, 10 και 1000 Torr αντίστοιχα (Σχ. A-3-κάτω). Εκτός από τα όργανα τύπου Baratron χρησιμοποιούνται και δύο μετρητικά όργανα πίεσης τύπου Bayard-Alpert στο δοχείο υψηλής ($P204$) και χαμηλής πίεσης ($P304$) αντίστοιχα. Το εύρος μετρούμενης πίεσης στα όργανα αυτά είναι από 10^{-2} έως 10^{-10} $mbar$. Τέλος στο δοχείο υψηλής πίεσης είναι τοποθετημένη μια ακόμα συσκευή μέτρησης πίεσης τύπου Spinning Rotor Gauge-Viscovac ($P205$) με εύρος μετρούμενης πίεσης από 10^{-1} έως 10^{-6} $mbar$. Οι μετρούμενες τιμές της πίεσης από όλα τα μετρητικά όργανα καταγράφονται καθ' όλη την διάρκεια του πειράματος σε ψηφιακές οθόνες, όπως χαρακτηριστικά απεικονίζεται στο Σχ. A-2. Συγκεκριμένα, η πρώτη συσκευή ξεκινώντας από την κορυφή, αντιστοιχεί στο μετρητικό όργανο τύπου Spinning Rotor Gauge, το οποίο βρίσκεται στο δοχείο υψηλής πίεσης. Στην συνέχεια οι τρεις ακόλουθες οθόνες στο αριστερό μέρος του Σχ. A-2 αντιστοιχούν στα μετρητικά όργανα τύπου Baratron που βρίσκονται στο δοχείο υψηλής πίεσης, ενώ οι οθόνες στην δεξιά πλευρά αντιστοιχούν στα μετρητικά όργανα του ιδίου τύπου αλλά για το δοχείο χαμηλής πίεσης. Οι δύο επόμενες συσκευές αντιστοιχούν στα μετρητικά όργανα τύπου Bayard-Alpert που βρίσκεται τοποθετημένα στο δοχείο υψηλής και χαμηλής πίεσης αντίστοιχα. Εκτός από τα όργανα μέτρησης πίεσης, είναι τοποθετημένα και όργανα μέτρησης θερμοκρασίας των δύο δοχείων και του αγωγού καθώς και όργανα μέτρησης παροχής αερίου που διέρχεται διαμέσου του αγωγού.

Εφόσον έχει επιτευχθεί η σταθερή διαφορά πίεσης στα δύο δοχεία, τότε ξεκινά η διαδικασία

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

καταγραφής των δεδομένων με την χρήση ηλεκτρονικού υπολογιστή (2 τιμές/sec). Όλα τα δεδομένα που προέρχονται από τα διάφορα μετρητικά όργανα συλλέγονται από μια κεντρική μονάδα επεξεργασίας, η οποία επικοινωνεί με ηλεκτρονικό υπολογιστή. Με τον τρόπο αυτό, όταν έχει επιτευχθεί μόνιμη κατάσταση, καταγράφονται οι μετρήσεις θερμοκρασίας, πίεσης και παροχής που επικρατούν στην πειραματική διάταξη. Τα δεδομένα καταγράφονται σε μορφή διαφοράς δυναμικού (Volts), τα οποία στην συνέχεια με ειδική μαθηματική επεξεργασία είναι δυνατόν να μετατραπούν σε μονάδες πίεσης, θερμοκρασίας και παροχής. Για την σωστή στατιστική επεξεργασία των πειραματικών αποτελεσμάτων επιλέγεται συγκεκριμένος αριθμός μετρήσεων (100 μετρήσεις/πείραμα).

A-2 Μοριακές αντλίες κενού

Στην πειραματική διάταξη TRANSFLOW υπάρχουν συνολικά τέσσερεις αντλίες κενού. Όπως προαναφέρθηκε ο θάλαμος χαμηλής πίεσης συνδέεται με δύο ειδικές μοριακές αντλίες (Turbomolecular Pumps-LEYBOLD MAG W 2800) (Σχ. A-4, επάνω αριστερά), οι οποίες έχουν μέγιστη συνολική ταχύτητα άντλησης 2600 l/s για αέριο N_2. Η πίεση στη κατάθλιψη είναι της τάξης των 10^{-2} $mbar$. Οι συγκεκριμένες αντλίες ελέγχονται ηλεκτρονικά, ενώ για μέγιστη απόδοση ψύχονται με κλειστό κύκλωμα νερού.

Οι συγκεκριμένες αντλίες χρησιμοποιούνται, κατά κύριο λόγο, στην τεχνολογία κενού για την επίτευξη υψηλού κενού και έχουν ως βασικό χαρακτηριστικό την καθοδηγούμενη μεταβολή της ορμής των σωματιδίων όταν αυτά συγκρούονται με τα πτερύγια του κινούμενου μέρους (rotor) (Σχ. A-4, επάνω δεξιά). Κατά τον τρόπο αυτό τα σωματίδια μεταφέρονται από την είσοδο προς την έξοδο της αντλίας. Οι μοριακές αντλίες λειτουργούν σε υψηλές ταχύτητες, ενώ για την αποφυγή υπερθέρμανσης ο άξονας της αντλίας εδράζεται σε μαγνητικά έδρανα.

Οι δύο μοριακές αντλίες της διάταξης TRANSFLOW ενώνονται με μία κοχλιωτή αντλία κενού (LEYBOLD SP250) (Σχ. A-4, κάτω αριστερά), η οποία έχει μέγιστη ταχύτητα άντλησης 250 m^3/h και ελάχιστη πίεση λειτουργίας τα 10^{-2} $mbar$. Η συγκεκριμένη αντλία χρησιμοποιείται για την μετατροπή της πίεσης του αερίου στην έξοδο των δύο ειδικών αντλιών όπου είναι της τάξης των 10^{-2} $mbar$, σε πίεση περιβάλλοντος. Η τέταρτη αντλία κενού (LEYBOLD DK200) (Σχ. A-4, κάτω δεξιά) είναι φυγοκεντρική και χρησιμοποιείται ως εφεδρική. Η μέγιστη ταχύτητα άντλησης είναι 1000 m^3/h, ενώ η ελάχιστη πίεση λειτουργίας είναι τα 10^{-3} $mbar$. Συνήθως χρησιμοποιείται σε συνδυασμό με την κοχλιωτή αντλία, σε πειράματα όπου η πίεση του δοχείου χαμηλής πίεσης είναι μεγαλύτερη από 1 $mbar$.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

A-3 Αγωγοί διαφόρων γεωμετριών

Ο βασικός στόχος της πειραματικής διάταξης TRANSFLOW είναι η μελέτη της ροής αερίων διαμέσου αγωγών διαφόρων γεωμετριών σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen. Για τον λόγο αυτό έχουν επιλεγεί για μελέτη, 9 διαφορετικοί αγωγοί με διαφορετικό μήκος και διατομή (Σχ. A-5). Οι κατηγορίες αγωγών είναι οι εξής:

1. Τέσσερεις (4) αγωγοί μήκους 1280 mm και διατομή κυλινδική, τετραγωνική, τριγωνική και τραπεζοειδής. Οι αγωγοί αυτοί δεν έχουν υποστεί επιφανειακή κατεργασία λείανσης.

2. Ένας (1) αγωγός κυκλικής διατομής και μήκους 1280 mm με ειδική κατεργασία της εσωτερικής επιφάνειας του (electropolished).

3. Τέσσερεις (4) αγωγοί μήκους 160 mm και διατομή κυκλική, τετραγωνική, τριγωνική και τραπεζοειδής. Επίσης οι αγωγοί αυτοί δεν έχουν υποστεί επιφανειακή κατεργασία λείανσης.

A-4 Επεξεργασία και διόρθωση πειραματικών δεδομένων

Μετά το τέλος οποιασδήποτε πειραματικής διαδικασίας, τα αποτελέσματα αποθηκεύονται σε ηλεκτρονική μορφή (Excel files). Τα πειραματικά δεδομένα (πίεση και παροχή) αποθηκεύονται σε μορφή διαφοράς δυναμικού ($Volts$) όπως προαναφέρθηκε. Για το λόγο αυτό είναι απαραίτητη η μετατροπή τους σε χρήσιμες μονάδες πίεσης ($mbar$) και ογκομετρικής παροχής ($sccm$). Ακολουθούν οι γραμμικές αναλογίες που ισχύουν για κάθε μια μετρητική συσκευή:

1. Ροή μάζας: τα 5 V αντιστοιχούν σε 1 $sccm$.

2. Πίεση (Baratrons): τα 10 V αντιστοιχούν σε 1 $Torr$. Γενικότερα ισχύει η ακόλουθη σχέση για μετατροπή της πίεσης P από V σε $mbar$ [134]:

$$P = \frac{1013.25 \times U \times A}{760 \times 10}, \tag{A-1}$$

   όπου A είναι το μέγιστο εύρος μετρούμενης πίεσης για κάθε συσκευή σε μονάδες $Torr$, ενώ U είναι η διαφορά δυναμικού σε μονάδες V.

3. Πίεση (Bayard-Alpert) [135]:

$$P = 10^{U-11}, \tag{A-2}$$

4. Πίεση (Spinning Rotor Gauge) [136]:

$$P = 10^{\frac{U}{2}-6}, \tag{A-3}$$

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Το επόμενο βήμα είναι η διόρθωση των δεδομένων λόγω σφαλμάτων που υπεισέρχονται κατά την πειραματική διαδικασία. Οι κύριες αιτίες εισαγωγής σφαλμάτων στην πειραματική διαδικασία είναι δύο: α) σφάλματα που προέρχονται από την ύπαρξη διαφοράς θερμοκρασίας μεταξύ των μετρητικών οργάνων πίεσης και της πειραματικής διάταξης και β) σφάλματα που οφείλονται στα ίδια τα μετρητικά όργανα πίεσης καθώς και στις ψηφιακές συσκευές απεικόνισης. Τα δύο αυτά σφάλματα αυτά ονομάζονται "κύρια σφάλματα", ενώ υπάρχουν και δευτερεύοντα σφάλματα, τα οποία και θα περιγράψουμε παρακάτω.

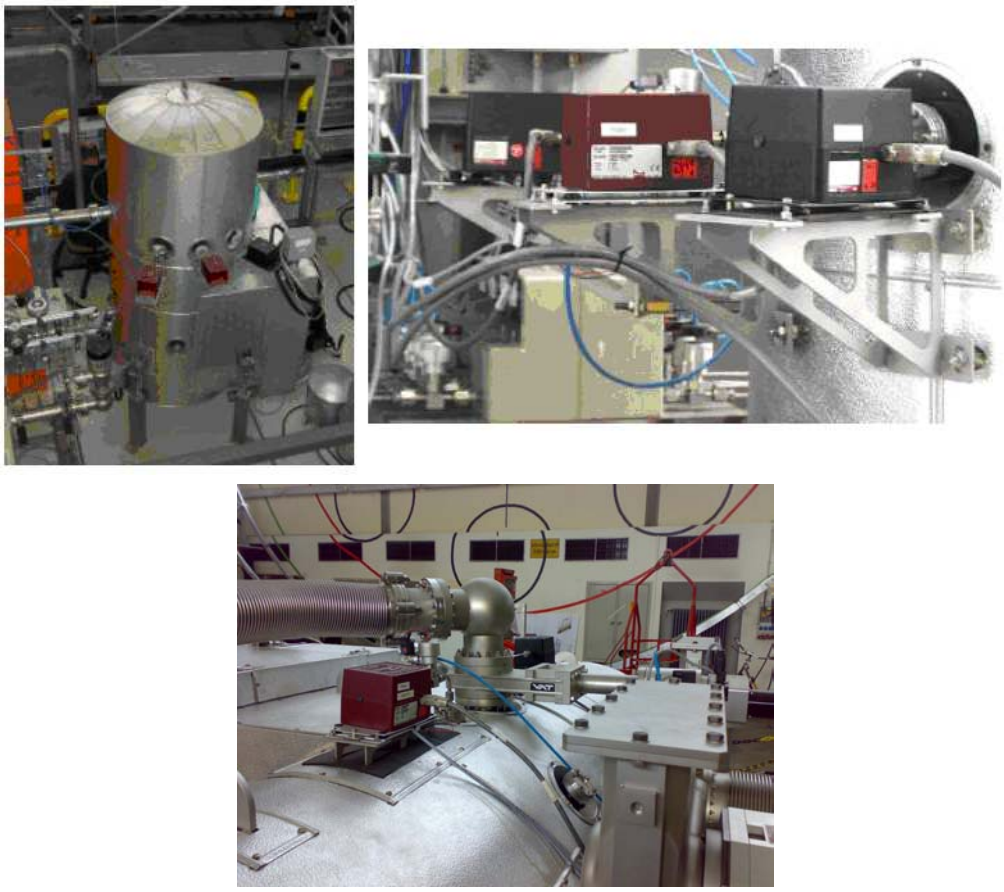
Στην πρώτη περίπτωση των κύριων σφαλμάτων, παρατηρείται μια διαφορά θερμοκρασίας κατά την διάρκεια του πειράματος μεταξύ του μετρητικού οργάνου και του αντίστοιχου δοχείου, στο οποίο βρίσκεται. Η συνήθης θερμοκρασία του μετρητικού οργάνου (Baratrons) είναι 40^oC ενώ τα δοχεία βρίσκονται σε θερμοκρασία περιβάλλοντος. Η διόρθωση στην μετρούμενη πίεση προέρχεται από συγκεκριμένη σχέση, η οποία διατυπώνεται στα άρθρα [137, 138]. Στα συγκεκριμένα άρθρα περιγράφεται αναλυτικά το φαινόμενο και η θεωρία, στην οποία βασίζεται.

Στην δεύτερη περίπτωση των κύριων σφαλμάτων, για την διόρθωση των αποτελεσμάτων χρησιμοποιούνται ειδικοί πίνακες βαθμονόμησης (calibration data) που αντιστοιχούν σε κάθε μετρητικό όργανο. Ανάλογα με την ένδειξη πίεσης ή της παροχής που καταγράφεται από το μετρητικό όργανο, υπολογίζεται συνήθως με γραμμική παρεμβολή το αντίστοιχο σφάλμα που πρέπει να προστεθεί ή να αφαιρεθεί ώστε να προκύψει η διορθωμένη τιμή.

Στην περίπτωση των δευτερευόντων σφαλμάτων, ανήκει ο υπολογισμός της πίεσης στην είσοδο και έξοδο του αγωγού συναρτήσει της πίεσης στα αντίστοιχα δοχεία υψηλής και χαμηλής πίεσης. Όλες οι πιέσεις που καταγράφονται από τα όργανα περιγράφουν την κατάσταση στο εσωτερικό των δύο δοχείων και όχι την κατάσταση ακριβώς στην είσοδο και έξοδο του αγωγού. Για το λόγο αυτό, χρησιμοποιείται ο υπολογιστικός κώδικας ITERVAC [139] για τον υπολογισμό της πραγματικής διαφοράς πίεσης που υπάρχει μεταξύ εισόδου και εξόδου του αγωγού.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Σχήμα A-2: Ψηφιακές ενδείξεις πίεσης και παροχής.

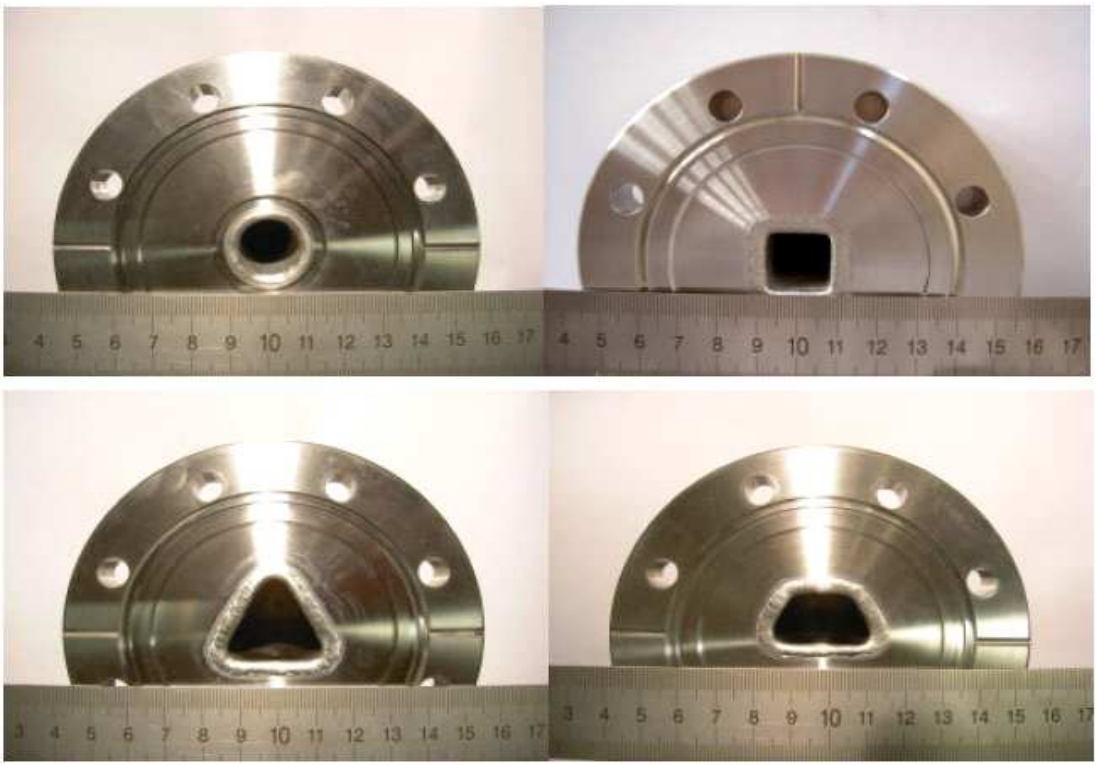


Σχήμα A-3: Μετρητικά όργανα πίεσης στο δοχείο υψηλής (επάνω) και χαμηλής πίεσης (κάτω).

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Σχήμα A-4: Μοριακές αντλίες κενού στην πειραματική διάταξη TRANSFLOW (πάνω αριστερά), τομή μοριακής αντλίας κενού (πάνω δεξιά), κοχλιωτή αντλία κενού (κάτω αριστερά) και εφεδρική φυγοκεντρική αντλία κενού (κάτω δεξιά).

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212



Σχήμα Α-5: Αγωγοί διαφόρων γεωμετριών.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Εγχειρίδιο κώδικα DSMC

B-1 Εισαγωγή

Ο κώδικας επίλυσης ροής μονατομικού αερίου διαμέσου αγωγού πεπερασμένου μήκους αποτελείται από δύο αρχεία: το par1.f90 και το Shtube-arb-pr.f90.

Το πρώτο αρχείο par1.f90 περιλαμβάνει τις αρχικές παραμέτρους που απαιτούνται α) για τον καθορισμό των σωματιδίων που θα χρησιμοποιηθούν β) για την δημιουργία της γεωμετρίας του πεδίου ροής γ) για την επιβολή των αρχικών συνθηκών δ) για τον ορισμό επιπλέον μεταβλητών που θα χρησιμοποιηθούν στον αλγόριθμο DSMC. Το συγκεκριμένο αρχείο εισάγεται στον κυρίως κώδικα με την εντολή INCLUDE και οι μεταβλητές σε αυτό είναι κοινές (COMMON) τόσο στο κυρίως πρόγραμμα όσο και στις υπορουτίνες που χρησιμοποιούνται.

Το δεύτερο αρχείο Shtube-arb-pr.f90 περιέχει τον κυρίως κώδικα της μεθόδου DSMC καθώς και τις αντίστοιχες υπορουτίνες. Η δομή του συγκεκριμένου κώδικα θα περιγραφεί λεπτομερώς σε ακόλουθες παραγράφους.

B-2 Αρχείο par1.f90 - Ορισμός βασικών παραμέτρων

Στην παρούσα παράγραφο θα περιγραφούν οι μεταβλητές που ορίζονται στο αρχείο par1.f90 καθώς και η χρησιμότητά τους. Οι μεταβλητές που ορίζονται είναι οι ακόλουθες:

```
DEL:  Παράμετρος αραιοποίησης.
P2P1: Λόγος πίεσης ανάντη και κατάντη της ροής.
AL:   Μήκος κυλινδρικού αγωγού.
DTM0: Χρονικό διάστημα.
NDBL: Αριθμός διπλασιασμού των σωματιδίων.
INM0: Συνολικός μέσος αριθμός σωματιδίων που μοντελοποιούνται.
```

Για την μείωση του στατιστικού σφάλματος που υπεισέρχεται κατά τον καθορισμό των οριακών συνθηκών, καθώς και την αποσύζευξη της αρχικής από την τελική κατάσταση, πραγματοποιείται διπλασιασμός των σωματιδίων σε συγκεκριμένα χρονικά διαστήματα Δt.

```
INM:  Μέσος αριθμός σωματιδίων μετά από κάθε διπλασιασμό.
NCO:  Αριθμός κελιών σε μια ακτίνα R του αγωγού
      (πρέπει να είναι πολλαπλάσιο του 4).
NSXR: Μήκος δεξιάς περιοχής κατάντη του αγωγού.
NSYR: Ακτίνα δεξιάς πλευράς κατάντη του αγωγού.
NSL:  Μήκος και ακτίνα αριστερής περιοχής ανάντη του αγωγού.
NSCX: Αριθμός υποκελιών σε κάθε κελί
```


Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

```
      (πρέπει να είναι πολλαπλάσιο του 2).
NRW:  Αριθμός επιφανειών με ειδικό συντελεστή βαρύτητας
      στην ακτινική διεύθυνση.
NXW:  Αριθμός επιφανειών με ειδικό συντελεστή βαρύτητας
      στην αξονική διεύθυνση.
NJ:   Αριθμός κελιών που συγχωνεύονται κατά την αξονική διεύθυνση.
NCXR: Αριθμός κελιών στην αξονική διεύθυνση στην δεξιά περιοχή.
NCYR: Αριθμός κελιών στην ακτινική διεύθυνση στην δεξιά περιοχή.
NCXL: Αριθμός κελιών στην ακτινική και αξονική διεύθυνση
      στην αριστερή περιοχή.
NCT:  Αριθμός κελιών στην αξονική διεύθυνση στο εσωτερικό του αγωγού.
NCTT: Συνολικός αριθμός κελιών στον κυλινδρικό αγωγό
      συμπεριλαμβανομένου και των τριών επιπέδων πύκνωσης.
NCELL:Συνολικός αριθμός κελιών στο πεδίο ροής.
NCLFT:Αριθμός κελιών στην αριστερή περιοχή ανάντη της ροής.
NSCELL:Συνολικός αριθμός υποκελιών στο πεδίο ροής.
MNM:  Μέγιστος αριθμός σωματιδίων. Η συγκεκριμένη ποσότητα
      χρησιμοποιείται για την δέσμευση μνήμης που καταλαμβάνουν
      πίνακες που περιέχουν πληροφορία σχετικά με την θέση
      και την ταχύτητα των σωματιδίων.
NNWML:Μέγιστος αριθμός σωματιδίων στον buffer.
```

B-3 Αρχείο Shtube-arb-pr.f90 - Κώδικας DSMC

Το αρχείο Shtube-arb-pr.f90 περιέχει τον κώδικα DSMC καθώς και τις υπορουτίνες που χρησιμοποιούνται. Αποτελείται από ένα κυρίως πρόγραμμα, μέσα από το οποίο καλούνται οι αντίστοιχες υπορουτίνες για τον καθορισμό των αρχικών συνθηκών (initial conditions), την προσομοίωση της κίνησης των σωματιδίων (free molecular flight), την μοντελοποίηση των μοριακών συγκρούσεων (intermolecular collisions), την μετονομασία των σωματιδίων (indexing) και τον υπολογισμό των μακροσκοπικών ποσοτήτων. Το κυρίως πρόγραμμα είναι το ακόλουθο:

```
INCLUDE "par1.f90"
OPEN(20,FILE="shtb1.lst")
νοιγμα αρχείου για αποθήκευση πληροφορίων
TIMEg=0.
CALL INIT
Καθορισμός αρχικών συνθηκών
DO JJJ=1,1000000    Επαναλήψεις
```


Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

```
        TIME=TIME+DTM
        Χρόνος μετά από κάθε μηδενισμό
        TIMEg=TIMEg+DTM
        Συνολικός χρόνος
        WRITE(*,2)flrt,flrt1,dfl,timeg,nm/1.e6,nwt
        WRITE(20,2)flrt,flrt1,dfl,timeg,nm/1.e6,nwt
        CALL FLUSH (20)
2       format(f10.7,1x,f10.7,1x,f9.5,1X,F7.2,2x,f8.4,1X,I2)
        CALL MOVE
        Ελεύθερη κίνηση σωματιδίων
        CALL INDE
        Εντοπισμός - Μετονομασία σωματιδίων
        CALL COLL
        Ενδομορικές συγκρούσεις
        CALL SAMPLE   Υπολογισμός μακροσκοπικών ποσοτήτων
        IF(mod(JJJ,100).eq.0) CALL OUT
        Αποθήκευση μακροσκοπικών μεγεθών
        IF(TIMEg > 10..AND.NWT==0) CALL INIT2
        Διπλασιασμός σωματιδίων και μηδενισμός μεταβλητών
        IF(TIMEg > 12..AND.NWT==1) CALL INIT2
        Διπλασιασμός σωματιδίων και μηδενισμός μεταβλητών
        IF(TIMEg > 15..AND.NWT==2) CALL INIT1
        Μηδενισμός μεταβλητών
        IF(TIMEg > 100000..or.DFL < 0.001) STOP
        Κριτήριο σύγκλισης
      END DO
      STOP
      END
```

Το παραπάνω κυρίως πρόγραμμα ξεκινά με την επιβολή των αρχικών συνθηκών καλώντας την υπορουτίνα INIT, η οποία περιλαμβάνει την κατασκευή του πλέγματος, την τοποθέτηση σωματιδίων και ανάθεση μοριακών ταχυτήτων καθώς και τον υπολογισμό βασικών ποσοτήτων που θα χρησιμοποιηθούν κατά την επαναληπτική διαδικασία. Λεπτομερής περιγραφή της υπορουτίνας INIT θα πραγματοποιηθεί στην ακόλουθη παράγραφο. Εν συνεχεία ξεκινάει μια επαναληπτική διαδικασία, κατά την οποία καλούνται οι υπορουτίνες MOVE, INDE, COLL, SAMPLE και OUT. Επίσης σε συγκεκριμένες χρονικές στιγμές γίνεται διπλασιασμός και μηδενισμός βασικών μεταβλητών καλώντας τις υπορουτίνες INIT2 και INIT1. Η επαναληπτική διαδικασία τερματίζει όταν ικανοποιηθούν τα κριτήρια για τον συνολικό χρόνο TIMEg ή για την στατιστική διακύμανση DFL.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

B-4 Υπορουτίνα INIT

Στην υπορουτίνα INIT γίνεται ο καθορισμός των αρχικών συνθηκών, ο οποίος περιλαμβάνει τον υπολογισμό του όγκου κάθε κελιού, την κατασκευή του πλέγματος, στην οποία περιλαμβάνεται η πύκνωσή του, την ομοιόμορφη κατανομή των σωματιδίων, τον υπολογισμό των σωματιδίων που εισέρχονται κάθε χρονική στιγμή Δt, καθώς και τον υπολογισμό διάφορων βασικών ποσοτήτων που θα χρησιμοποιηθούν στις υπόλοιπες υπορουτίνες.

Αρχικά η υπορουτίνα INIT ξεκινά με τον καθορισμό των επιφανειών με ειδικό συντελεστή βαρύτητας στην αξονική και ακτινική κατεύθυνση. Ο πίνακας RW περιέχει τις ακτίνες που καθορίζουν τις συγκεκριμένες επιφάνειες, ενώ ο πίνακας XW περιέχει τις θέσεις στην αξονική κατεύθυνση.

```
Θέσεις επιφανειών στην ακτινική κατεύθυνση
      RW(1)=0.25
      RW(2)=0.5
      RW(3)=0.75
      RW(4)=1.
      RW(5)=2.
      RW(6)=3.
Θέσεις επιφανειών στην αξονική κατεύθυνση
      XW(1)=0.
```

Στην συνέχεια ορίζονται οι πίνακες PPX(N) και PPY(N), οι οποίοι θα περιέχουν τις χωρικές συντεταγμένες του σωματιδίου N, ενώ οι πίνακες PVX(N), PVY(N) και PVZ(N) θα περιέχουν τις τρεις συνιστώσες της μοριακής ταχύτητας του σωματιδίου N αντίστοιχα. Ο πίνακας MOLNEW θα περιέχει τα σωματίδια που εξέρχονται του πεδίου ροής και αποθηκεύονται στον buffer. Ο πίνακας IPL περιέχει τον αριθμό του υποκελιού, όπου κάθε σωματίδιο N ανήκει, ενώ ο πίνακας IR περιέχει την ονομασία που αντιστοιχεί σε κάθε σωματίδιο N, η οποία βασίζεται στην αρίθμηση των υποκελιών. Οι ποσότητες που ακολουθούν στον κώδικα DSMC ορίζονται ακολούθως:

```
VREGL: Ογκος αριστερής περιοχής λαμβάνοντας υπόψη τους συντελεστές βαρύτητας.
VREGR: Ογκος δεξιάς περιοχής λαμβάνοντας υπόψη τους συντελεστές βαρύτητας.
VREGT: Ογκος αγωγού λαμβάνοντας υπόψη τους συντελεστές βαρύτητας.
DENM:  Πυκνότητα ισορροπίας των σωματιδίων που μοντελοποιούνται.
CW:    Μέγεθος κελιών στην αξονική και ακτινική κατεύθυνση.
CG(1,M): Η ελάχιστη τιμή της συντεταγμένης του κελιού M στην κατεύθυνση x
CG(2,M): Η μέγιστη τιμή της συντεταγμένης του κελιού M στην κατεύθυνση x
CG(3,M): Η ελάχιστη τιμή της συντεταγμένης του κελιού M στην κατεύθυνση y
CG(4,M): Η μέγιστη τιμή της συντεταγμένης του κελιού M στην κατεύθυνση y
VCELL(NC): Ογκος του κελιού NC λαμβάνοντας υπόψη τους συντελεστές βαρύτητας.
```


Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

```
ANMCL: Αριθμός σωματιδίων σε κάθε κελί
MSC:   Αριθμός υποκελιού, στο οποίο βρίσκεται το εκάστοτε σωματίδιο
AMEL(1,NC): Αριθμός σωματιδίων που εισέρχονται στο οριακό κελί NC
            της αριστερής κάθετης πλευράς σε κάθε χρονική στιγμή Δt
AMEL(2,NC): Αριθμός σωματιδίων που εισέρχονται στο οριακό κελί NC
            της αριστερής οριζόντιας πλευράς σε κάθε χρονική στιγμή Δt
AMER(1,NC): Αριθμός σωματιδίων που εισέρχονται στο οριακό κελί NC
            της δεξιάς κάθετης πλευράς σε κάθε χρονική στιγμή Δt
AMER(2,NC): Αριθμός σωματιδίων που εισέρχονται στο οριακό κελί NC
            της δεξιάς οριζόντιας πλευράς σε κάθε χρονική στιγμή Δt
CS(M,N) με M=1,...,8 και N=1,...,NCELL: Πίνακας που περιέχει στατιστική
                                         πληροφορία για κάθε κελί.
```

Κατά τον υπολογισμό του όγκου λαμβάνεται υπόψη η αξονοσυμμετρία του προβλήματος και ο όγκος κάθε κελιού αντιστοιχεί στον όγκο ενός δακτυλίου για το οποίο γνωρίζουμε την εσωτερική και εξωτερική ακτίνα R_1 και R_2 αντίστοιχα καθώς και το πάχος του Δx. Έτσι ο όγκος για ένα οποιοδήποτε δακτύλιο θα είναι

$$V_{cell} = \pi(R_1^2 - R_2^2)\Delta x. \tag{B-4}$$

Τονίζεται ότι για τα κελιά που βρίσκονται μετά από επιφάνειες με ειδικό συντελεστή βαρύτητας οι όγκοι των κελιών αυτών διπλασιάζονται.

Μια βασική παράμετρος που εισάγει την παράμετρο αραιοποίησης δ στον κώδικα είναι η ποσότητα CC, η οποία υπολογίζεται σε κάθε κελί του πεδίου. Η ποσότητα CC εμφανίζεται στην σχέση υπολογισμού των πιθανών συνολικών συγκρούσεων σε κάθε κελί σύμφωνα με το μοντέλο NTC. Ο αριθμός των πιθανών συνολικών συγκρούσεων δίνεται από την Εξ.(6.3). Εισάγωντας την ακόλουθη αδιαστατοποίηση $(\sigma_T v_r) = \frac{(\sigma_T v_r)'}{\pi d^2 v_0}$, $\Delta t = \frac{\Delta t'}{R/v_0}$, $V_{cell} = \frac{V'_{cell}}{R^3}$ και κάνοντας χρήση των σχέσεων $\delta = \sqrt{\pi}R/2\lambda$, $\lambda = 1/(\sqrt{2}\pi d^2 n_0)$ και $F_N = n_0 R^3/(DENM)$ Η Εξ.(6.3) γίνεται

$$N_{coll} = N\bar{N}(\sigma_T c_r)_{max}\frac{\delta\Delta t}{\sqrt{2\pi}(DENM)V_{cell}} \tag{B-5}$$

ή

$$N_{coll} = N\bar{N}(\sigma_T c_r)_{max}(CC) \tag{B-6}$$

όπου

$$CC = \frac{\delta\Delta t}{\sqrt{2\pi}(DENM)V_{cell}} \tag{B-7}$$

Η ποσότητα n_0 είναι η πυκνότητα ισορροπίας μακριά από την είσοδο και την έξοδο του αγωγού, d είναι η μοριακή διάμετρος και $DENM$ είναι η πυκνότητα ισορροπίας των σωματιδίων που

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

μοντελοποιούνται, η οποία ορίζεται ως

$$DENM = \frac{INM}{V_{total}} \tag{B-8}$$

όπου V_{total}=VREGL+VREGT+VREGR(P2P1) είναι ο συνολικός αδιάστατος όγκος του πεδίου ροής.

Στην συνέχεια της υπορουτίνας INIT ορίζονται οι αρχικές συνθήκες, οι οποίες περιλαμβάνουν την ομοιόμορφη κατανομή των σωματιδίων σε κάθε κελί καθώς και τον καθορισμό των τριών συνιστωσών της μοριακή ταχύτητας. Οι ποσότητες PPX και PPY αντιπροσωπεύουν τις χωρικές συντεταγμένες του σωματιδίου στην αξονική και ακτινική διεύθυνση αντίστοιχα. Ενώ οι ποσότητες PVX, PVY και PVZ είναι οι τρεις συνιστώσες της μοριακής ταχύτητας. Κατά την ομοιόμορφη κατανομή των σωματιδίων όλες οι παραπάνω ποσότητες βασίζονται σε τυχαίους αριθμούς. Ο αριθμός των σωματιδίων ANMCL που θα τοποθετηθούν σε ένα κελί που βρίσκεται αριστερά και στο εσωτερικό του αγωγού ορίζεται ώς

$$ANMCL = \frac{INMV_{cell}}{V_{total}}, \tag{B-9}$$

ενώ για για την περίπτωση κελιού που βρίσκεται στο δεξί δοχείο ισχύει ότι

$$ANMCL = \frac{INMV_{cell}(P_2/P_1)}{V_{total}}. \tag{B-10}$$

κατά την ομοιόμορφη κατανομή των σωματιδίων εκτός από τις χωρικές συντεταγμένες και τις τρεις συνιστώσες της μοριακής ταχύτητας υπολογίζεται και ο αριθμός του υποκελιού στο οποίο βρίσκεται το σωματίδιο. Η πληροφορία αυτή περιγράφεται από το μητρώο IPL.

Το τελευταίο βήμα είναι ο υπολογισμός του αριθμού των σωματιδίων που εισέρχονται σε κάθε χρονική στιγμή Δt από τα όρια του πεδίου ροής. Η γενική σχέση που δίνει τον αριθμό των σωματιδίων στάσιμου αερίου που εισέρχονται από μια επιφάνεια εμβαδού A είναι

$$N_b = \frac{1}{4} A n_0 v_t \Delta t, \tag{B-11}$$

όπου n_0 είναι η αριθμητική πυκνότητα ισορροπίας, ενώ v_t είναι η θερμική ταχύτητα των εισερχόμενων σωματιδίων. Για την περίπτωση των σωματιδίων που εισέρχονται από ένα κελί NC της κάθετη πλευράς της αριστερής περιοχής ισχύει ότι $A = r(\Delta\theta) = \frac{1}{2}(2NC-1)CW^2 2\pi$ και $v_t = 2/\sqrt{\pi}$. Τότε η Εξ.(B-11) γίνεται

$$N_b = \frac{1}{4}\frac{1}{2}(2NC-1)CW^2 2\pi n_0 \frac{2}{\sqrt{\pi}} \Delta t, \tag{B-12}$$

ή

$$N_b = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}(2NC-1)(CW^2) n_0 \Delta t. \tag{B-13}$$

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Όμοια για την περίπτωση των σωματιδίων που εισέρχονται από ένα κελί NC της οριζόντιας πλευράς της αριστερής περιοχής ισχύει ότι $A = 2\pi(CW)(NSL)$ οπότε η Εξ.(B-11) γίνεται

$$N_b = \frac{1}{4} 2\pi(CW)(NSL) n_0 \frac{2}{\sqrt{\pi}} \Delta t, \tag{B-14}$$

ή

$$N_b = \sqrt{\pi}(CW)(NSL) n_0 \Delta t. \tag{B-15}$$

Στην περίπτωση των σωματιδίων που εισέρχονται από την κάθετη πλευράς της δεξιάς περιοχής τότε η μόνη αλλαγή που εμφανίζεται στην Εξ.(B-12) είναι η παρουσία του λόγου πίεσης P_2/P_1. Έτσι η αντίστοιχη εξίσωση είναι

$$N_b = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}(2NC - 1)(CW^2) n_0 \frac{P_2}{P_1} \Delta t, \tag{B-16}$$

ενώ για την περίπτωση της οριζόντιας δεξιάς πλευράς η αντίστοιχη εξίσωση είναι

$$N_b = \sqrt{\pi}(CW)(NSXR) n_0 \frac{P_2}{P_1} \Delta t. \tag{B-17}$$

B-5 Υπορουτίνα INIT1

Η υπορουτίνα INIT1 καλείται μετά από κάποιο συγκεκριμένο χρονικό διάστημα (η επιλογή της χρονικής στιγμής είναι εμπειρική) για τον μηδενισμό των βασικών μακροσκοπικών ποσοτήτων όπως π.χ. των μέσων ταχυτήτων στο πεδίο ροής και των παροχών στην είσοδο και έξοδο του αγωγού.

B-6 Υπορουτίνα INIT2

Η υπορουτίνα INIT2 καλείται στον συγκεκριμένο κώδικα δυο φορές για τον διπλασιασμό του αριθμού των σωματιδίων στο πεδίο ροής. Κατά τον διπλασιασμό του αριθμού των σωματιδίων πραγματοποιείται υποδιπλασιασμός του χρονικού βήματος Δt, διπλασιασμός της ποσότητας DENM, ενώ ταυτόχρονα υποτετραπλασιάζεται η ποσότητα CC.

B-7 Υπορουτίνα MOVE

Η υπορουτίνα MOVE καλείται σε κάθε χρονική στιγμή Δt για την μοντελοποίηση της ελεύθερης κίνησης των σωματιδίων και την αλληλεπίδρασή τους με τα στερεά τοιχώματα. Στην συγκεκριμένη υπορουτίνα εξετάζεται ξεχωριστά για κάθε σωματίδιο του πεδίου η τροχιά του κατά την διάρκεια του χρονικού βήματος Δt και γίνεται έλεγχος για τυχόν συγκρούσεις

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

με τα στερεά τοιχώματα του πεδίου. Κάθε φορά όπου διαπιστώνεται σύγκρουση με στερεό τοίχωμα καλείται η υπορουτίνα DIFFUSE, η οποία επιστρέφει τις τρεις νέες συνιστώσες της μοριακής ταχύτητας. Στην περίπτωση όπου το σωματίδιο εξέλθει από το πεδίο ροής, τότε αυτό διαγράφεται από την μνήμη του Η/Υ.

Για τον υπολογισμό της ροής μάζας που διέρχεται από την είσοδο και την έξοδο του αγωγού, απαραίτητος είναι ο υπολογισμός του αριθμού των σωματιδίων που διέρχονται ή εξέρχονται από αυτές. Έτσι για κάθε σωματίδιο γίνεται έλεγχος για το εάν πέρασε από την επιφάνεια x =0 (είσοδος αγωγού) ή την επιφάνεια x =AL (έξοδος αγωγού) και προστίθεται στον συνολικό αριθμό σωματιδίων που έχουν διέλθει από την έναρξη του αλγορίθμου. Συγκεκριμένα οι ποσότητες που υπολογίζονται είναι:

`flrtl` : Συνολικός αριθμός σωματιδίων που μετακινήθηκαν από το αριστερό δοχείο στο εσωτερικού του αγωγού.

`flrtr` : Συνολικός αριθμός σωματιδίων που μετακινήθηκαν από το εσωτερικού του αγωγού στο αριστερό δοχείο.

`flrtl1` : Συνολικός αριθμός σωματιδίων που μετακινήθηκαν από το δεξί δοχείο στο εσωτερικού του αγωγού.

`flrtr1` : Συνολικός αριθμός σωματιδίων που μετακινήθηκαν από το εσωτερικού του αγωγού στο δεξί δοχείο.

Τονίζεται ότι αφού έχουν υπολογιστεί οι τελικές συντεταγμένες του σωματιδίου, τότε καλείται η υπορουτίνα CELNUM, η οποία θα επιστρέψει τον αριθμό του χωρικού κελιού, στο οποίο μετακινήθηκε το σωματίδιο. Όταν ολοκληρωθεί η κίνηση όλων των σωματιδίων του πεδίου τότε καλείται η υπορουτίνα ENTER, η οποία εισάγει νέα σωματίδια από τα όρια του πεδίου ροής.

B-8 Υπορουτίνα INDEX

Η υπορουτίνα INDEX καλείται για την μετονομασία των σωματιδίων του πεδίου ροής μετά το τέλος της ελεύθερης κίνησης τους. Οι ποσότητες που υπολογίζονται σε αυτήν είναι οι:

`IC(1,N)` : Ονομασία του σωματιδίου, η οποία βασίζεται στον αριθμό του κελιού, στο οποίο βρίσκεται.

`IC(2,N)` : Αριθμός σωματιδίων που περιέχονται στο χωρικό κελί N.

`ISCG(1,M)` : Ονομασία του σωματιδίου, η οποία βασίζεται στον αριθμό του υποκελιού, στο οποίο βρίσκεται.

`ISCG(2,M)` : Αριθμός σωματιδίων που περιέχονται στο υποκελί M.

Όλες οι παραπάνω ποσότητες περιέχουν σημαντική πληροφορία, η οποία θα χρησιμοποιηθεί στην υπορουτίνα μοντελοποίησης των μοριακών συγκρούσεων (υπορουτίνα COLL). Συγκε-

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

κριμένα οι ποσότητες αυτές θα εμφανιστούν στην διαδικασία της τυχαίας επιλογής δύο σωματιδίων που βρίσκονται στο ίδιο υποκελί καθώς και τον έλεγχο πραγματοποίησης σύγκρουσης μεταξύ των δύο. Περισσότερες λεπτομέρειες θα δοθούν στην ακόλουθη παράγραφο περιγραφής της υπορουτίνας COLL.

B-9 Υπορουτίνα COLL

Η υπορουτίνα COLL καλείται για την μοντελοποίηση των μοριακών συγκρούσεων και βασίζεται στο μοντέλο Non Time Counter Scheme (NTC). Σύμφωνα με το μοντέλο NTC, σε κάθε κελί του πεδίου ροής υπολογίζεται ο συνολικός αριθμός N_{coll} των πιθανών συγκρούσεων που θα πραγματοποιηθούν σε αυτό και ορίζεται ως

$$N_{coll} = \frac{1}{2} N \bar{N} F_N (\sigma_T c_r)_{max} \Delta t / V_c. \tag{B-18}$$

Η ποσότητα N_{coll} εξαρτάται από τον αριθμό των σωματιδίων N στο εκάστοτε κελί, τον μέσο αριθμό σωματιδίων $\bar{N}$ που έχουν υπάρξει στο συγκεκριμένο κελί, την ενεργό διατομή σ_T, η οποία εξαρτάται από το μοντέλο ενδομοριακού δυναμικού, την μέγιστη σχετική μοριακή ταχύτητα c_r που αντιστοιχεί στο συγκεκριμένο κελί, το χρονικό βήμα Δt, τον όγκο V_c του κελιού και τέλος την ποσότητα F_N, η οποία εκφράζει τον αριθμό των πραγματικών σωματιδίων που αντιπροσωπεύει ένα σωματίδιο της μεθόδου DSMC.

Εφαρμόζοντας την αδιαστατοποίηση της παραγράφου B-4 στην παραπάνω σχέση εμφανίζεται η ποσότητα CC, η οποία εξαρτάται από την παράμετρο αραιοποίησης δ. Στον κώδικα DSMC και στην υπορουτίνα COLL, αρχικά υπολογίζεται η ποσότητα ASEL, η οποία εκφράζει τον αριθμό των πιθανών συγκρούσεων N_{coll} σε ένα κελί N του πεδίου και ορίζεται ως

```
ASEL=IC(2,N)*CCG(1,N)*CC(N)*CS(1,N)/NSMP+CCG(2,N),
```

όπου η ποσότητα CCG(1,N) είναι η μέγιστη τιμή, η οποία έχει εμφανιστεί έως την συγκεκριμένη χρονική στιγμή, της σχετικής ταχύτητας c_r, ενώ η ποσότητα NSMP ταυτίζεται με τον αριθμό των επαναλήψεων που έχουν πραγματοποιηθεί έως την παρούσα χρονική στιγμή.

Στην συνέχεια για κάθε μια από τις ASEL συγκρούσεις σε ένα συγκεκριμένο κελί πραγματοποιείται η τυχαία επιλογή δύο σωματιδίων που ανήκουν στο ίδιο υποκελί. Η διαδικασία επιλογής σωματιδίων πραγματοποιείται από την υπορουτίνα SELECT. Στην υπορουτίνα SELECT επιλέγονται δύο σωματίδια που ανήκουν στο ίδιο κελί και υποκελί και υπολογίζεται η σχετική τους ταχύτητα VR. Στην περίπτωση όπου ο αριθμός των σωματιδίων σε ένα υποκελί είναι ίσος με μονάδα τότε για την πραγματοποίηση της επιλογής σωματιδίων γίνεται αναζήτηση σωματιδίων σε γειτονικά κελιά.

Κατά την τυχαία επιλογή ζεύγους σωματιδίων είναι πιθανόν ένα σωματίδιο να επιλεγεί δύο συνεχόμενες φορές. Στην περίπτωση αυτή η διαδικασία τυχαίας επιλογής επαναλαμβάνεται έως ότου προκύψει ένα διαφορετικό σωματίδιο που θα συμμετάσχει στην μοντελοποίηση της

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

μοριακής σύγκρουσης. Ο μέγιστος αριθμός συνεχόμενων εμφανίσεων ενός σωματιδίου είναι 100 φορές.

Επανερχόμαστε στην υπορουτίνα COLL και στο σημείο όπου γίνεται η επιβολή του μοντέλου ενδομοριακού δυναμικού. Στην περίπτωση όπου έχουμε μοντέλο σκληρών σφαιρών (HS) η σχετική ταχύτητα VR που προήλθε από την υπορουτίνα SELECT εξισώνεται με το γινόμενο $\sigma_T c_r$, το οποίο εκφράζεται από την μεταβλητή SIGVR. Στον κώδικα η αντίστοιχη εντολή είναι

```
SIGVR=VR.
```

Όμοια για την περίπτωση του μοντέλου VHS ισχύει ότι το γινόμενο $\sigma_T c_r$ σε αδιάστατη μορφή ισούται με

$$\sigma_T c_r = c_r^{2(1-\omega)} \frac{2^{\omega-\frac{1}{2}}}{\Gamma(\frac{5}{2}-\omega)}, \tag{B-19}$$

όπου ω είναι ένας συντελεστής που εξαρτάται από το αέριο που χρησιμοποιείται. Τιμές του συγκεκριμένου συντελεστή βρίσκονται στον Πίνακα A1 (σελ. 408) του Παραρτήματος A του βιβλίου [14]. Για αέριο ήλιο με ω=0.66 το γινόμενο $\sigma_T c_r$ περιγράφεται στον κώδικα ως

```
SIGVR=1.185309234*VR**0.68.
```

Στην συνέχεια εξετάζεται εάν η τιμή SIGVR είναι μεγαλύτερη από την μέγιστη τιμή της VM, η οποία έχει εμφανιστεί στο συγκεκριμένο κελί. Εάν πράγματι συμβαίνει αυτό, τότε ανανεώνεται η μεταβλητή VM. Τονίζεται ότι κατά την εξέλιξη των επαναλήψεων η μέγιστη τιμή VM μεταβάλλεται σε κάθε κελί έως ότου αυτή προσεγγίσει μια τιμή, η οποία δεν θα αλλάζει με την πάροδο του χρόνου.

Το επόμενο βήμα είναι η αποδοχή ή όχι της σύγκρουσης των δύο τυχαία επιλεγμένων σωματιδίων. Εφαρμόζεται η διαδικασία αποδοχής-απόρριψης σύμφωνα με την οποία για κάθε ζεύγος υπολογίζεται η πιθανότητα

$$\frac{(\sigma_T c_r)}{(\sigma_T c_r)_{max}} \tag{B-20}$$

και εξετάζεται εάν είναι μικρότερη ή μεγαλύτερη από έναν τυχαίο αριθμό. Εάν η συγκεκριμένη πιθανότητα είναι μεγαλύτερη από τον τυχαίο αριθμό τότε θα πραγματοποιηθεί σύγκρουση, ενώ σε αντίθετη περίπτωση δεχόμαστε ότι τα σωματίδια δεν θα συγκρουστούν. Στην περίπτωση σύγκρουσης καλείται η υπορουτίνα ELASTIC από την οποία θα προκύψουν οι συνιστώσες της μοριακής ταχύτητας μετά την σύγκρουση (post collision velocities) για κάθε ένα σωματίδιο.

Στην υπορουτίνα ELASTIC για τον υπολογισμό των ταχυτήτων μετά την σύγκρουση χρησιμοποιούνται οι δύο σχέσεις της Εξ.(2.5) που διατυπώνονται στο [14] (σελ. 31). Για μονατομικό αέριο οι συγκεκριμένες σχέσεις διατυπώνονται ως

$$\mathbf{c_1^*} = \mathbf{c_m} + \frac{1}{2}\mathbf{c_r} \tag{B-21}$$

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

και

$$\mathbf{c_2^*} = \mathbf{c_m} - \frac{1}{2}\mathbf{c_r} \tag{B-22}$$

όπου $\mathbf{c_1^*}$ και $\mathbf{c_2^*}$ είναι τα διανύσματα των ταχυτήτων μετά την σύγκρουση, $\mathbf{c_m}$ είναι το διάνυσμα της ταχύτητας του κέντρου μάζας και $\mathbf{c_r}$ είναι η σχετική ταχύτητα των σωματιδίων.

Στον κώδικα DSMC οι τρεις συνιστώσες της ταχύτητας $\mathbf{c_m}$ του κέντρου μάζας εκφράζονται από το διάνυσμα VCCM, ενώ οι τρεις συνιστώσες της σχετικής ταχύτητας $\mathbf{c_r}$ εκφράζονται από το διάνυσμα VRCP.

Με τον υπολογισμό των ταχυτήτων μετά την σύγκρουση για κάθε ένα από τα ASEL ζεύγη σωματιδίων, ολοκληρώνεται η διαδικασία μοντελοποίησης των μοριακών συγκρούσεων σε ένα συγκεκριμένο κελί. Η διαδικασία μοντελοποίησης των μοριακών συγκρούσεων επαναλαμβάνεται σε όλα τα κελιά του πεδίου ροής.

B-10 Υπορουτίνα SAMPLE

Στην υπορουτίνα SAMPLE γίνεται ο υπολογισμός των αδιάστατων μακροσκοπικών ποσοτήτων που περιγράφουν το πεδίο ροής. Συγκεκριμένα υπολογίζονται η αριθμητική πυκνότητα (ANUDE), η θερμοκρασία (TEMP), το διάνυσμα της μακροσκοπικής ταχύτητας, η αδιάστατη ροή μάζας W στην είσοδο (FLRT) και την έξοδο του αγωγού (FLRT1) και τέλος η στατιστική διακύμανση (DFL), η οποία και αποτελεί το κριτήριο σύγκλισης του αλγορίθμου DSMC.

Αρχικά σε κάθε κελί του πεδίου ροής υπολογίζονται αθροίσματα που περιγράφουν: α) τον συνολικό αριθμό των σωματιδίων που υπήρξαν στο κελί N. Η ποσότητα αυτή εκφράζεται από τον πίνακα CS(1,N). β) τις συνολικές x, y και z συνιστώσες της μοριακής ταχύτητας των σωματιδίων που υπήρξαν στο κελί N. Οι ποσότητες αυτές εκφράζονται από τους πίνακες CS(2,N), CS(3,N) και CS(4,N) και γ) τις συνολικές τιμές των τετραγώνων των x, y και z συνιστωσών της μοριακής ταχύτητας των σωματιδίων που υπήρξαν στο κελί N. Οι ποσότητες αυτές εκφράζονται από τους πίνακες CS(5,N), CS(6,N) και CS(7,N). Στον κώδικα DSMC η συγκεκριμένη διαδικασία περιγράφεται παρακάτω:

```
DO N=1,NCELL
  L=IC(2,N)
  IF (L.GT.0) THEN
    DO J=1,L
      K=IC(1,N)+J
      M=IR(K)
      CS(1,N)=CS(1,N)+1
      CS(2,N)=CS(2,N)+PVX(M)
      CS(3,N)=CS(3,N)+PVY(M)
      CS(4,N)=CS(4,N)+PVZ(M)
```


Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

```
          CS(5,N)=CS(5,N)+PVX(M)**2
          CS(6,N)=CS(6,N)+PVY(M)**2
          CS(7,N)=CS(7,N)+PVZ(M)**2
        END DO
      END IF
    END DO
```

Στην συνέχεια πραγματοποιείται ο υπολογισμός της αδιάστατης παροχής W, η οποία ορίζεται ώς

$$W = \frac{\dot{M}}{\dot{M}_0}, \tag{B-23}$$

όπου $\dot{M}_0$ είναι η ροή μάζας διαμέσου κυλινδρικής κοιλότητας στην περίπτωση ροής μονοατομικού αερίου σε κενό. Στην ειδική αυτή περίπτωση η ροή μάζας $\dot{M}_0$ εκφράζεται από την αναλυτική σχέση

$$\dot{M}_0 = \frac{\sqrt{\pi}R^2}{\upsilon_0}P_0. \tag{B-24}$$

Η ροή μάζας $\dot{M}$ που διέρχεται από μια διατομή του αγωγού σε χρονικό διάστημα t' ισούται με

$$\dot{M} = \frac{m(N^+ - N^-)F_N}{t'}. \tag{B-25}$$

Αντικαθιστώντας τις Εξ.(B-24) και (B-25) στην Εξ.(B-23) και κάνοντας χρήση των σχέσεων $t = t'(R/\upsilon_0)$, $P_0 = \frac{1}{2}mn_0\upsilon_0^2$ και $F_N = n_0R^3/(DENM)$ προκύπτει ότι

$$W = \frac{2(N^+ - N^-)}{DENM\ t\sqrt{\pi}} \tag{B-26}$$

όπου ο χρόνος t είναι ο αδιάστατος χρόνος που έχει περάσει μετά από κάθε διπλασιασμό των σωματιδίων του πεδίου ροής καλώντας τις υπορουτίνες INIT1 ή INIT2. Οι ποσότητες N^+ και N^- είναι τα σωματίδια που διέρχονται από τα αριστερά και τα δεξιά μιας διατομής του αγωγού αντίστοιχα.

Στην συνέχεια για κάθε κελί του πεδίου ροής πραγματοποιείται ο υπολογισμός της αριθμητικής πυκνότητας n', η οποία ορίζεται ως

$$n'_j = \int f d\mathbf{c} = \frac{\bar{N}_j F_N}{V'_{cell,j}}. \tag{B-27}$$

Αδιαστατοποιώντας την Εξ.(B-27) προκύπτει ότι

$$n_j = \frac{n'_j}{n_0} = \frac{\bar{N}_j DENM}{V_{cell,j}}. \tag{B-28}$$

Η ποσότητα $\bar{N}_j$ εκφράζει τον χρονικά μέσο αριθμό σωματιδίων που υπήρξαν στο κελί j, έως την συγκεκριμένη χρονική στιγμή που πραγματοποιείται ο υπολογισμός.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Στον κώδικα DSMC οι αντίστοιχες γραμμές υπολογισμού της αριθμητικής πυκνότητας στο κελί MC είναι

```
ANUDE(MC)=CS(1,MC)*DTM/(TIME*DENM*VCELL(MC))
```

όπου CS(1,MC) είναι ο συνολικός αριθμός σωματιδίων που υπήρξαν στο κελί MC.

Το διάνυσμα της μακροσκοπικής ταχύτητας $\mathbf{u}'$ στο j κελί του πεδίου ροής ορίζεται ως

$$\mathbf{u}'_j = \frac{1}{n}\int f\mathbf{c}'d\mathbf{c}' = \frac{1}{N_j}\sum_i \mathbf{c}'_\mathbf{i}, \tag{B-29}$$

όπου για τον δείκτη i ισχύει ότι $i = 1, ..., I$ με I τον αριθμό των σωματιδίων στο κελί j. Αδιαστατοποιώντας την Ε.(B-29) προκύπτει ότι

$$\mathbf{u}_j = \frac{\mathbf{u}'_j}{v_0} = \frac{1}{N_j}\sum_i \mathbf{c}_\mathbf{i}. \tag{B-30}$$

Στον κώδικα DSMC οι αντίστοιχες γραμμές υπολογισμού των τριών συνιστωσών της αδιάστατης μακροσκοπικής ταχύτητας u στο κελί MC είναι

```
UX(MC)=CS(2,MC)/CS(1,MC)
UY(MC)=CS(3,MC)/CS(1,MC)
UZ(MC)=CS(4,MC)/CS(1,MC)
```

Η θερμοκρασία T' στο κελί j του πεδίου ροής ορίζεται από την σχέση

$$\frac{3}{2}kT'_j = \frac{m}{2kn}\int f(\mathbf{c}' - \mathbf{u}')^2 d\mathbf{c}' = \sum_i \frac{m(\bar{\mathbf{c}'}^\mathbf{2} - \mathbf{u}'^\mathbf{2})_i}{2} \tag{B-31}$$

και αδιαστατοποιώντας την Εξ.(B-31) προκύπτει ότι

$$T_j = \frac{T'}{T_0} = \frac{2}{3}\sum_i (\frac{\mathbf{c}^\mathbf{2}}{\mathbf{N_j}} - \mathbf{u}^\mathbf{2})_i \tag{B-32}$$

Στον κώδικα DSMC οι αντίστοιχες γραμμές υπολογισμού των τριών συνιστωσών της αδιάστατης μακροσκοπικής ταχύτητας u στο κελί MC είναι

```
TEMP(MC)=(2/3)*((CS(5,MC)+CS(6,MC)+CS(7,MC))/CS(1,MC)- &
                (UX(MC)**2+UY(MC)**2+UZ(MC)**2))
```

Στην συνέχεια ακολουθεί μια λίστα που περιλαμβάνει αλφαβητικά όλες τις μεταβλητές που χρησιμοποιούνται στον κώδικα DSMC.

```
ANUDE(M)    αριθμητική πυκνότητα
AMEL(N,K)   Αριθμός σωματιδίων που εισέρχονται στο κελί K
            της αριστερής πλευράς την χρονική στιγμή  DTM
```


Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

```
            N=1 - κάθετη πλευρά, N=2 - οριζόντια πλευρά
AMER(N,K)  Αριθμός σωματιδίων που εισέρχονται στο κελί K
            της δεξιάς πλευράς την χρονική στιγμή  DTM
            N=1 - κάθετη πλευρά, N=2 - οριζόντια πλευρά
AMRL(N,K)  Υπόλοιπο στρογγυλοποίησης της ποσότητας AMEL
AMRR(N,K)  Υπόλοιπο στρογγυλοποίησης της ποσότητας AMER
CCG(N,M)   Πληροφορία για τις συγκρούσεις στο κελί M
   N=1     Μέγιστη τιμή της σχετικής ταχύτητας
   N=2     Υπόλοιπο στρογγυλοποίησης του αριθμού των συγκρούσεων
CG(N,M)    Γεωμετρία του κελιού M
   N=1 - min x, N=2 - max x, N=3 - min y, N=4 - max y
CS(N,M)   Μέσες ποσότητες στο κελί  M
   N=1      Αριθμός σωματιδίων
   N=2,3,4  θροισμα των u,v,w αντίστοιχα
   N=5,6,7  θροισμα των u*u,v*v,w*w αντίστοιχα
CW        Διάσταση κελιού
DEL       Παράμετρος αραιοποίησης
DENM      Πυκνότητα σωματιδίων στην κατάσταση ισορροπίας
DTM       Χρονικό βήμα
IC(N,M)   Πληροφορία σωματιδίων στο κελί M
  N=1     νομα πρώτου σωματιδίου στον πίνακα IR
  N=2     Αριθμός σωματιδίων στο κελί
INM       Αριθμός σωματιδίων που καταλαμβάνουν
          το πεδίο ροής σε ισορροπία
IPL(M)    Αριθμός υποκελιού του σωματιδίου M
IR(M)     Πίνακας διάταξης του ονόματος των σωματιδίων
          με βάση την αρίθμηση των υποκελιών
ISC(M)    Κελί στο οποίο βρίσκεται το υποκελί M
ISCG(N,M) Πληροφορία στο υποκελί M
  N=1     νομα πρώτου σωματιδίου στον πίνακα IR
  N=2     Αριθμός σωματιδίων στο υποκελί
FLRT      ροή μάζας στην είσοδο του αγωγού
FLRT1     ροή μάζας στην έξοδο του αγωγού
MC        Αριθμός κελιού
MNM       Μέγιστος αριθμός σωματιδίων
MSC       Αριθμός υποκελιού
NCELL     Συνολικός αριθμός κελιών
NSCELL    Συνολικός αριθμός υποκελιών
NCXL      Συνολικός αριθμός κελιών στην αριστερή
```


Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

	πλευρά στην αξονική διεύθυνση
NCXR	Συνολικός αριθμός κελιών στην δεξιά πλευρά στην αξονική διεύθυνση
NCYL	Συνολικός αριθμός κελιών στην αριστερή πλευρά στην ακτινική διεύθυνση
NCYR	Συνολικός αριθμός κελιών στην δεξιά πλευρά στην ακτινική διεύθυνση
NCO	Αριθμός κελιών που κατά μήκος της ακτίνας R
NDBL	Αριθμός διπλασιασμός των σωματιδίων
NFLL	Συνολικός αριθμός σωματιδίων που εισέρχονται από αριστερά στον αγωγό
NFLT	Συνολικός αριθμός σωματιδίων που εξέρχονται από τον αγωγό στο αριστερό δοχείο
NFLL1	Συνολικός αριθμός σωματιδίων που εισέρχονται από δεξιά στον αγωγό
NFLT1	Συνολικός αριθμός σωματιδίων που εξέρχονται από τον αγωγό στο δεξί δοχείο
NJ	Αριθμός κελιών που συγχωνεύονται κατά μήκος του άξονα συμμετρίας
NM	Πραγματικός αριθμός σωματιδίων
NNWML	Αριθμός νέων σωματιδίων σε κάθε επανάληψη
NRL	Ακτίνα περιοχής που βρίσκεται αριστερά του αγωγού
NRR	Ακτίνα περιοχής που βρίσκεται δεξιά του αγωγού
NSEL	Αριθμός πιθανών συγκρούσεων
NRW	Αριθμός επιφανειών με ειδικό συντελεστή βαρύτητας στην ακτινική διεύθυνση
NSCELL	Αριθμός σωματιδίων στο κελί
NSCX,NSCY	Αριθμός υποκελιών σε ένα κελί στην αξονική και ακτινική διεύθυνση
NSMP	Αριθμός δειγμάτων
NSR	Μήκος και ακτίνα δεξιάς περιοχής
NSXL	Μήκος αριστερής περιοχής
NSYL	Ακτίνα αριστερής περιοχής
NXW	Αριθμός επιφανειών με ειδικό συντελεστή βαρύτητας στην αξονική διεύθυνση
P2P1	Λόγος πίεσης
PPX(M)	x συντεταγμένη του σωματιδίου M
PPY(M)	y συντεταγμένη του σωματιδίου M
PVX(M)	x συνιστώσα της μοριακής ταχύτητας

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

PVY(M)	y συνιστώσα της μοριακής ταχύτητας
PVZ(M)	z συνιστώσα της μοριακής ταχύτητας
TIME	Χρόνος μετά από κάθε διπλασιασμό
UX,UY,UZ	Διάνυσμα μακροσκοπικής ταχύτητας
VCCM(K)	Διάνυσμα ταχύτητας κέντρου μάζας
VCELL	Ογκος κελιού
VR	Σχετική ταχύτητα
VRCP(K)	Σχετική ταχύτητα μετά την σύγκρουση
VREGT	Ογκος αγωγού

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

CURRICULUM VITAE

Stylianos V. Varoutis

Contact Information

Asklypiou 35-37 Str.
Korydallos-Piraeus, GREECE, PC 18120

Home: (+30) 210-4973481
Office: (+30) 24210-74337
Mobile: (+30) 697-4822944
E-mail: svarouti@mie.uth.gr

Citizenship

GREEK

Date of Birth

November 7, 1980

Education

University of Thessaly, Volos, GREECE

Ph.D., December 2008

- Thesis topic: Study of transport phenomena in piping systems of various cross sections, in the whole range of the Knudsen number, using deterministic (Kinetic theory) and stochastic (DSMC) approaches
- Advisor: Professor Dimitrios Valougeorgis
- Area of Study: Kinetic Theory, Rarefied gas dynamics, Vacuum flows, Vacuum equipment (turbomolecular pumps, forepumps, mass flow controllers, compressors, sensors, valves, etc), Microfluidics, Aerospace applications

M.Sc., Modern design and analysis methods in industrial processes, June 2006

- Thesis Topic: Application of the Integro-Moment Method in vacuum flows
- Area of Study: Kinetic Theory, Rarefied gas dynamics

Diploma (5-year course), GPA=7.7/10,
Mechanical and Industrial Engineering, June 2004

- Thesis Topic: Design and Optimization of Pipe Networks of Compressible and Incompressible Fluids
- Area of Study: Fluid Mechanics and Optimization

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Foreign languages

- English (Proficiency level - Michigan Proficiency in English)
- German (Good level - Zertifikat Deutsch als Fremdsprache)

Awards

- Greek Scholarship Institution, 1999.
- Research Committee of University of Thessaly, 2005.
- Greek Fusion Program - Euratom Scholarship, 2006, 2007 and 2008.

I. Professional Experience

ITER Vacuum Systems

- Two-months training in TRANSFLOW experimental facility in Research Center of Karlsruhe (FZK), Germany. Experiments in vacuum flows through long and short ducts of various cross sections (circular, orthogonal, triangular and trapezoidal) have been performed. Acquainted with the vacuum technology for ITER fusion reactor (September 2006 and April 2007).

- Familiar with the design of the three substantial high vacuum pumping systems of evacuation and maintenance of the needed low pressure levels in the torus, cryostat and in neutral beam injectors (NBI) of ITER as well as with the design, testing and manufacturing of first prototype cryogenic pump for torus vacuum system of ITER and also for ITER Neutral Beam Injector (NBI) cryopump. Knowledge of the design and testing of prototype cryosorption panels coated with charcoal, which are included in torus cryogenic pumps.

Microfluidics

- One-month training in the University of Toulouse - INSA; Experiments in rarefied gas flows through orthogonal micro and nano-ducts have been performed (March 2008). Comparisons between experimental and corresponding kinetic results have been performed and excellent agreement has been obtained.

Industry

- One-month training in Metal Construction of Greece SA (METKA), which mainly deals with the manufacturing and construction of complex and advanced metal and mechanical structures, as well as with Energy Projects, Infrastructure Projects, Defense projects, etc. Acquainted with the programming of CNC metal cutting, 2003.

- One-month training in AIAS Engineering Ltd, an engineering and consulting company. Introduction to the field of Computational Fluid Dynamics (CFD) and usage of ANSYS-CFX commercial package, 2002.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

II. Research Expertise

- Expertise in DSMC simulations focused on non linear vacuum gas flows through channels of various cross sections (orifice flow, flows in short circular channels and short rectangular ducts). Comparisons between theoretical and experimental results have been performed. Extension of DSMC method in binary gas mixtures and polyatomic gases. Development of parallel algorithms applied to DSMC method.

- Fully developed gas flows of single gases and binary gas mixtures through ducts of various cross sections due to pressure, temperature and concentration gradients have been studied using linear Kinetic Theory based on BGK, S and McCormack kinetic collision models for isothermal and non-isothermal flows respectively. The main advantage of the kinetic approach is that the solution is valid in the whole range of the Knudsen number from the free molecular through the transition and slip regimes all the way up to the hydrodynamic limit.

  - Implementation of Discrete Velocity Method (DVM) for simulating rarefied gas flows through long channels of various cross sections (circular, rectangular, triangular, trapezoidal). Comparisons between kinetic and corresponding experimental results for vacuum flows have been performed.

  - Development and implementation of Integro-Moment Method (IMM) in vacuum flows.

III. Teaching Experience

University of Thessaly, Volos, GREECE

Teaching Assistant

- Provided in-class support to undergraduate engineering students in the semester course of "Numerical Analysis". Graded weekly assignments on programming and drafting, Winter semester 2004
- Provided in-class support to undergraduate engineering students in the in the semester course of "Numerical Methods for Engineers". Graded weekly assignments on programming and drafting, Winter semester 2005
- Provided in-class support to postgraduate engineering students in the semester course of "Kinetic Theory", spring semester 2006
- Provided in-class support to postgraduate engineering students in the semester course of "Partial Differential Equations", spring semester 2007

Technical Skills

Extensive hardware and software experience in cluster networking. System administrator of 40-processor cluster, based on Linux-Fedora 7 OS.

MATLAB experience: linear algebra, nonlinear numerical methods, visualization.

MATLAB toolboxes: optimization, design and genetic algorithms.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Programming: Fortran, C, UNIX shell scripting, Mathematica, MPI parallel processing.

Applications: TEX, LATEX, BIBTEX, Tecplot360, CAD/CAM (AutoDesk), CorelDRAW, Microsoft Office and other common productivity packages for Windows, OS X, and Linux platforms.

Operating Systems: Microsoft Windows Vista/XP/2000, Linux, Apple OS X.

Publications

I. Scientific Journals

1. S. Varoutis, V. Hauer, C. Day and D. Valougeorgis. Experimental and computational study of gas flows through long channels of various cross sections in the whole range of the Knudsen number. Journal of Vacuum Science and Technology A, accepted (2008).

2. S. Varoutis, D. Valougeorgis and F. Sharipov. Rarefied gas flow through tubes of finite length. submitted (2009).

3. S. Varoutis, D. Valougeorgis and F. Sharipov. Application of the Integro-moment method to multidimensional rarefied gas flows subject to boundary induced discontinuities. Journal of Computational Physics, 227, p:6272-6287 (2008).

4. S. Varoutis, O. Sazhin, D. Valougeorgis and F. Sharipov. Rarefied gas flow through short tubes into vacuum. Journal of Vacuum Science and Technology, A26(2), p:228-238 (2008).

5. G. Breyiannis, S. Varoutis and D. Valougeorgis. Rarefied gas flow in concentric annular tube: Estimation of the Poiseuille number and the exact hydraulic diameter. European Journal of Mechanics, B Fluid, 27(5), p:609-622 (2008).

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

II. Conference Proceedings

1. S. Varoutis, S. Naris, D. Valougeorgis, V. Hauer, Chr. Day. A study of flows in triangular and trapezoidal channels under low, medium and high vacuum conditions. 10th European Vacuum Conference, Balaton Lake, Hungary (2008).

2. S. Varoutis, J. Lichnaropoulos, D. Mathioulakis, A. Tserepi and D. Valougeorgis. Estimation of the Poiseuille number and of the exact hydraulic diameter in rarefied gas flows through channels of various cross sections. 1st European Conference on Microfluidics, Bologna, Italy (2008).

3. J. Pitakarnop, S. Varoutis, S. Colin, L. Baldas and D. Valougeorgis. New experimental setup for accurate measurement of gas microflows. 1st European Conference on Microfluidics, Bologna, Italy (2008).

4. S. Varoutis, D. Valougeorgis and F. Sharipov. Rarefied gas flow through tubes of finite length. 26th Rarefied Gas Dynamics, Kyoto, Japan (2008).

5. S. Varoutis and D. Valougeorgis. Non-equilibrium gas flows in nano and microfluidic systems with applications in biotechnology. 4th International Greek Biotechnology Forum, Athens, Greece (2008).

6. S. Varoutis and D. Valougeorgis. The Poiseuille number in gas flows through nano- and micro- channels in the whole range of the Knudsen number. IUTAM Symposium on Advances in Micro- and Nanofluidics, Dresden, Germany (2007).

7. S. Varoutis, D. Valougeorgis, C. Day. Computational and experimental investigation of flows in long channels of various cross sections under low, medium and high vacuum conditions. 17th International Vacuum Conference (IVC-17), Stockholm, Sweden, (2007).

8. S. Varoutis, O. Sazhin, D. Valougeorgis and F. Sharipov. Rarefied gas flow into vacuum through a short tube. 51st IUVSTA Workshop on Modern Problems and Capability of Vacuum Gas Dynamics, Sweden (2007).

9. S. Varoutis, C. Day, D. Valougeorgis. Computational and experimental investigation of flows in long channels of various cross sections under low, medium and high vacuum conditions. 6th School on Fusion Physics and Technology, Volos, Greece (2007).

10. S. Varoutis, D. Valougeorgis. Non-equilibrium gas flow through a short tube into vacuum by the Direct Simulation Monte Carlo method. 6th School on Fusion Physics and Technology, Volos, Greece (2007).

11. S. Varoutis, S. Naris, D. Mathioulakis and D. Valougeorgis. Nano- and micro-flows of single gases and binary mixtures through tubes and orthogonal ducts via kinetic theory. Micro and Nanoscale Flows: Advancing the Engineering Science and Design, Glasgow, UK (2006).

12. S. Varoutis, D. Valougeorgis and F. Sharipov. The integro-moment method applied to two-dimensional rarefied gas flows. 25th Rarefied Gas Dynamics, St. Petersburg, Russia (2006).

13. S. Varoutis, D. Valougeorgis. Vacuum flows in fusion reactors. Annual reports for Association EURATOM-Hellenic Republic, 2005, 2006 and 2007.

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212

Referees

Professor Dimitris Valougeorgis
Department of Mechanical and Industrial Engineering
University of Thessaly, Volos, 38334, GREECE.
Email: diva@mie.uth.gr
Office:(0030)24210-74058

Professor Nikolaos Vlachos
Department of Mechanical and Industrial Engineering
University of Thessaly, Volos, 38334, GREECE.
Email: vlachos@mie.uth.gr

Professor Dimitris Mathioulakis
Department of Mechanical Engineering
National Technical University of Athens, Athens, 15780, GREECE.
Email: mathew@fluid.mech.ntua.gr

Professor Stefan Colin
Department of Mechanical Engineering
National Institute of Applied Sciences (INSA), Toulouse, 31077, FRANCE.
Email: stephane.colin@insa-tlse.fr

Professor Felix Sharipov
Department of Physics
State University of Parana, Curitiba, 19044, BRAZIL.
Email: sharipov@fisica.ufpr.br

Dr. Christian Day
Institute of Technical Physics (ITP)
Research Center of Karlsruhe (FZK), GERMANY.
Email: Christian.Day@itp.fzk.de

Dr. Stefan Stefanov
Department of Complex and Multiphase Flows
Institute of Mechanics, Sofia, BULGARIA.
Email: stefanov@imbm.bas.bg

Institutional Repository - Library & Information Centre - University of Thessaly
15/10/2023 16:50:55 EEST - 167.114.118.212