

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

**ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ ΚΙΝΗΤΙΚΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ
ΣΕ ΧΡΟΝΟΜΕΤΑΒΑΛΛΟΜΕΝΑ ΦΑΙΝΟΜΕΝΑ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ
ΕΚΤΟΣ ΘΕΡΜΟΔΥΝΑΜΙΚΗΣ ΙΣΟΡΡΟΠΙΑΣ**

υπό

ΛΥΧΝΑΡΟΠΟΥΛΟΥ Ν. ΙΩΑΝΝΗ

Πτυχιούχου Μαθηματικού, Πανεπιστημίου Ιωαννίνων, 1992
Κατόχου Μεταπτυχιακού Διπλώματος Ειδίκευσης, Τμήματος Μηχανολόγων
Μηχανικών Βιομηχανίας, Πανεπιστημίου Θεσσαλίας, 2008

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

2014

© 2014 Λυχναρόπουλος Ν. Ιωάννης

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.

Εγκρίθηκε από τα μέλη της Επταμελούς Εξεταστικής Επιτροπής:

Πρώτος Εξεταστής
(Επιβλέπων)

Δρ. Βαλουγεώργης Δημήτριος,
Καθηγητής
Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Δεύτερος Εξεταστής

Δρ. Μποντόζογλου Βασίλειος,
Καθηγητής
Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Τρίτος Εξεταστής

Δρ. Πελεκάσης Νικόλαος,
Καθηγητής
Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Τέταρτος Εξεταστής

Δρ. Λυμπερόπουλος Γεώργιος,
Καθηγητής
Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Πέμπτος Εξεταστής

Δρ. Βαβουγιός Διονύσιος,
Καθηγητής
Παιδαγωγικό Τμήμα Ειδικής Αγωγής
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Έκτος Εξεταστής

Δρ. Καρακασίδης Θεόδωρος,
Αναπληρωτής Καθηγητής
Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Έβδομος Εξεταστής

Δρ. Παντελής Δημήτριος,
Επίκουρος Καθηγητής
Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Στη σύζυγο μου Βαλεντίνα
και στα παιδιά μας Έλενα και Νίκο

Ευχαριστίες

Η παρούσα Διδακτορική Διατριβή εκπονήθηκε στο Εργαστήριο Φυσικών και Χημικών Διεργασιών του Τμήματος Μηχανολόγων Μηχανικών του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας με την μερική οικονομική υποστήριξη που προσφέρθηκε από το Εθνικό Πρόγραμμα Ελεγχόμενης Θερμοπυρηνικής Σύντηξης: Association EURATOM – Hellenic Republic.

Ολοκληρώνοντας τη διατριβή αυτή, θα ήθελα να ευχαριστήσω όλους όσους με καθοδήγησαν, με βοήθησαν και μου συμπαραστάθηκαν όλα αυτά τα χρόνια. Ιδιαίτερες ευχαριστίες οφείλω στον επιβλέποντα της διατριβής μου Καθηγητή κ. Δημήτριο Βαλουγεώργη για την πολύτιμη επιστημονική του καθοδήγηση, την ενθάρρυνση και την ακούραστη υποστήριξή του καθ' όλη την διάρκεια της συνεργασίας μας.

Ξεχωριστά ευχαριστώ όλους τους συναδέλφους μου για τη βοήθεια που μου προσέφεραν κατά την εκπόνηση της διατριβής μου. Ιδιαίτερα ευχαριστώ τους Τάντο Χρήστο, Δρ. Βαρούτη Στέλιο, Δρ. Νάρη Στέργιο, Μισδανίτη Μάκη και Δρ. Πανταζή Σαράντη για τις χρήσιμες συζητήσεις που είχαμε κατά καιρούς και τις εύστοχες υποδείξεις τους. Επίσης ευχαριστώ για την συνεργασία τους, τους Dr. Manuel Vargas και Olga Buchina.

Θα ήθελα ακόμα να ευχαριστήσω τα υπόλοιπα μέλη της επταμελούς εξεταστικής επιτροπής για τη διάθεση και το χρόνο που αφιέρωσαν στη μελέτη της παρούσας εργασίας.

Τέλος ένα μεγάλο ευχαριστώ οφείλω στους δικούς μου ανθρώπους, τη σύζυγό μου Βαλεντίνα και τους γονείς μου Νίκο και Ελένη, για την αγάπη τους, την υποστήριξη, την κατανόηση και τη συμπαράστασή τους, καθ' όλη τη διάρκεια της προσπάθειάς μου.

ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ ΚΙΝΗΤΙΚΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ ΣΕ ΧΡΟΝΟΜΕΤΑΒΑΛΛΟΜΕΝΑ ΦΑΙΝΟΜΕΝΑ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΕΚΤΟΣ ΘΕΡΜΟΔΥΝΑΜΙΚΗΣ ΙΣΟΡΡΟΠΙΑΣ

Ιωάννης Λυχναρόπουλος

Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Σεπτέμβριος 2014

Επιβλέπων: Δρ. Δημήτριος Βαλουγεώργης, Καθηγητής

Περίληψη

Εισαγωγή

Η μελέτη ροών αερίων εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας αποτελεί ένα συνεχώς αναπτυσσόμενο τομέα της ρευστομηχανικής με ιδιαίτερο επιστημονικό ενδιαφέρον και πληθώρα πρακτικών εφαρμογών. Τέτοιες ροές παρατηρούνται σε μικρές διαστάσεις και χαμηλές πιέσεις, που εμφανίζονται κυρίως σε μικροδιατάξεις (MEMS, NEMS), στην αεριοδυναμική υψηλών υψομέτρων και στην τεχνολογία κενού. Κύριο χαρακτηριστικό τους αποτελεί το γεγονός ότι στις ροές αυτές η θεωρία του συνεχούς μέσου καταρρέει και η μελέτη τους απαιτεί νέες μεθοδολογίες και τεχνικές, όπως είναι η χρήση της κινητικής θεωρίας και της εξίσωσης Boltzmann, αντικείμενα που μελετά ο κλάδος της Στατιστικής Μηχανικής.

Οι πλήρως ανεπτυγμένες μόνιμες ροές έχουν μελετηθεί εκτενώς στη διεθνή βιβλιογραφία. Το πεδίο, όμως, των αναπτυσσόμενων, μη μόνιμων (ή μεταβατικών ή χρονομεταβαλλόμενων) ροών είναι εξίσου σημαντικό, και δεν έχει διερευνηθεί ακόμη σε βάθος. Η μελέτη τους έχει σημαντική πρακτική εφαρμογή στη βιομηχανία σε διάφορα πεδία που περιλαμβάνουν την κατασκευή διαστημικών εργαλείων και συσκευών, την χρήση πορωδών υλικών (φίλτρα, κ.τ.λ.), την επίστρωση μετάλλου σε CD/DVD, την τεχνολογία κενού (αντλίες, μετρητές, κ.ά.), την κατασκευή φασματογράφων μάζας, την ανίχνευση διαρροών κ.ά. Ειδικότερα οι εφαρμογές τους είναι ιδιαίτερα σημαντικές στα MEMS και σε διάφορα υποσυστήματα των επιταχυντών και των πυρηνικών αντιδραστήρων σύντηξης δευτερίου-τρίτιου.

Αντικείμενο της παρούσας διδακτορικής διατριβής είναι η μελέτη χρονομεταβαλλόμενων αραιοποιημένων ροών αερίων και δυαδικών μιγμάτων τους σε αγωγούς μεγάλου μήκους και ποικίλων

διατομών. Επίσης μελετώνται τα μη γραμμικά προβλήματα της μετάδοσης θερμότητας ανάμεσα σε πλάκες και διατμητικής ροής ανάμεσα σε κινούμενες μη ισοθερμοκρασιακές πλάκες. Σε όλες τις περιπτώσεις επιλύονται, αριθμητικά, κατάλληλα κινητικά μοντέλα σε όλο το εύρος της αραιοποίησης. Στόχος είναι η εδραίωση μιας μεθοδολογίας αντιμετώπισης των χρονομεταβαλλόμενων κινητικών εξισώσεων και η διερεύνηση των μεταβατικών φαινομένων μεταφοράς.

Γραμμικές χρονομεταβαλλόμενες ροές μονατομικών αερίων

Εξετάζονται χρονομεταβαλλόμενες, πλήρως ανεπτυγμένες ροές μονατομικών αερίων σε αγωγούς μεγάλου μήκους οφειλόμενες σε βαθμίδα πίεσης κατά μήκος του πεδίου ροής καθώς και ροές οφειλόμενες σε κίνηση των τοιχωμάτων. Οι ροές που μελετώνται είναι η ροή Poiseuille ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες και σε αγωγούς κυλινδρικής και ορθογώνιας διατομής καθώς και η ροή Couette ανάμεσα σε παράλληλες κινούμενες πλάκες. Το χαρακτηριστικό των συγκεκριμένων ροών είναι πως λόγω του μεγάλου μήκους του αγωγού, τα φαινόμενα στα άκρα του αγνοούνται και η ροή θεωρείται πλήρως ανεπτυγμένη με αποτέλεσμα να μπορεί να γραμμικοποιηθεί. Τα αριθμητικά αποτελέσματα, επομένως, προκύπτουν με την επίλυση γραμμικών κινητικών εξισώσεων και είναι έγκυρα σε 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 ποσότητες μεταφοράς, όπως είναι η παροχή και η μέση διατμητική τάση στα τοιχώματα του αγωγού.

Ξεκινώντας από τη διατύπωση της εξίσωσης Boltzmann γίνεται μοντελοποίηση του όρου των συγκρούσεων με τα κινητικά μοντέλα BGK και Shakhov, τα οποία επιλύονται, αριθμητικά, με την υπόθεση οριακών συνθηκών πλήρους διάχυσης. Η προσέγγιση των παραγώγων γίνεται με πεπερασμένες διαφορές διάφορων μορφών, οι οποίες δίνουν τρία βασικά αριθμητικά σχήματα εκ των οποίων το ένα ρητό και τα άλλα δύο ημιπεπλεγμένα. Η αριθμητική επίλυση τους πραγματοποιείται, με την εφαρμογή της μεθόδου των διακριτών ταχυτήτων, η οποία είναι γνωστή στη διεθνή βιβλιογραφία ως Discrete Velocity Method (DVM). Ο βασικός άγνωστος στην εκάστοτε κινητική εξίσωση είναι η συνάρτηση κατανομής, η οποία στη γενική περίπτωση είναι συνάρτηση επτά ανεξάρτητων μεταβλητών: των τριών συνιστωσών του διανύσματος θέσης, των τριών συνι-

στωσών του διανύσματος της μοριακής ταχύτητας και του χρόνου. Ανάλογα με τη γεωμετρία, οι τρεις χωρικές ανεξάρτητες μεταβλητές μειώνονται με την εφαρμογή παραδοχών μονοδιάστατου ή δισδιάστατου προβλήματος, αξισυμμετρικής ροής κ.α. Για τη μείωση του αριθμού των διακριτών μοριακών ταχυτήτων εφαρμόζεται η διαδικασία προβολής στο χώρο των μοριακών ταχυτήτων.

Η επικαιροποίηση των αριθμητικών αποτελεσμάτων, γίνεται με σύγκρισή τους με την αναλυτική λύση των συγκεκριμένων ροών στο υδροδυναμικό όριο. Επίσης γίνεται σύγκρισή τους με τα αντίστοιχα αποτελέσματα, που δίνει η μέθοδος προσομοίωσης Direct Simulation Monte Carlo (DSMC). Και στις δύο περιπτώσεις παρατηρείται πολύ καλή συμφωνία των αποτελεσμάτων. Τέλος, παρουσιάζεται αναλυτικά η διαδικασία διαστατοποίησης των αποτελεσμάτων, καθώς αυτή δεν είναι τετριμμένη.

Τα αποτελέσματα παρέχουν μια λεπτομερή περιγραφή της χρονικής εξέλιξης των πεδίων ροής κατά τη μετάβασή τους από την ηρεμία προς τη μόνιμη κατάσταση. Σε κάθε περίπτωση, παρουσιάζεται η χρονική εξέλιξη των κατανομών των μακροσκοπικών ποσοτήτων και των παροχών, καθώς επίσης και η μεταβολή του χρόνου ισορροπίας ανάλογα με το μέγεθος της αραιοποίησης. Ως χρόνο ισορροπίας θεωρούμε τη χρονική στιγμή κατά την οποία η υπολογιζόμενη παροχή ανακτά την κατανομή της παροχής του αντίστοιχου μόνιμου πρόβληματος με απόκλιση μικρότερη του 1%. Παρατηρούμε ότι ο χρόνος ισορροπίας παρουσιάζει μία μη μονότονη συμπεριφορά ως προς την αραιοποίηση του αερίου, εμφανίζοντας ελάχιστη τιμή κοντά στο σημείο, που είναι γνωστό ως «ελάχιστο Knudsen».

Γραμμικές χρονομεταβαλλόμενες ροές δυαδικών μίγμάτων αερίων

Γίνεται μελέτη χρονομεταβαλλόμενων ροών μίγμάτων δύο αέριων συστατικών, ανάμεσα σε πλάκες και σε κυλινδρικούς αγωγούς. Οι ροές οφείλονται στην επιβολή τοπικών βαθμίδων πίεσης, θερμοκρασίας ή συγκέντρωσης κατά την αξονική διεύθυνση. Οι τοπικές κλίσεις αυτές είναι μικρού μεγέθους και επομένως δικαιολογείται η χρήση του μοντέλου McCormack για τη μοντελοποίηση του όρου των σωματιδιακών συγκρούσεων. Οι ροές ενός μίγματος αερίου χαρακτηρίζονται από το γεγονός πως η μέση μοριακή ταχύτητα δεν ταυτίζεται με την μακροσκοπική (υδροδυναμική ταχύτητα) του μίγματος, όπως συμβαίνει με τις ροές απλών αερίων. Γενικά, παρατηρείται μία σχετική κίνηση (διάχυση) του ενός συστατικού του μίγματος ως προς το άλλο και εμφανίζεται

το φαινόμενο του διαχωρισμού των συστατικών του μίγματος, ιδίως για την περίπτωση που η διαφορά μεταξύ των μοριακών μαζών των δύο συστατικών του είναι μεγάλη. Στις ροές μιγμάτων μας ενδιαφέρει μεταξύ άλλων ο χρόνος που απαιτείται, ώστε οι τιμές της αδιάστατης παροχής και της ολικής θερμορροής, που αφορούν στο κάθε συστατικό της χρονομεταβαλλόμενης ροής, να ανακτήσουν τις αντίστοιχες τιμές της μόνιμης ροής με απόκλιση μικρότερη του 1%. Γενικά οι δύο αυτές ποσότητες δεν συγκλίνουν ταυτόχρονα στις αντίστοιχες μόνιμες τιμές τους, και επομένως η ποσότητα που καθυστερεί περισσότερο καθορίζει και το χρόνο ισορροπίας του κάθε συστατικού.

Διερευνάται η συμπεριφορά δύο αντιπροσωπευτικών μιγμάτων αερίων σε ροές ανάμεσα σε πλάκες και σε κυλινδρικούς αγωγούς. Τα μίγματα αυτά είναι το Ne-Ar και το He-Xe. Στο πρώτο μίγμα οι μοριακές μάζες των συστατικών του είναι σχετικά κοντά μεταξύ τους, ενώ στο δεύτερο μίγμα είναι πολύ διαφορετικές. Για την επιβεβαίωση των αριθμητικών αποτελεσμάτων γίνεται σύγκριση της μεθόδου DVM με τη μέθοδο DSMC και παρατηρείται πολύ καλή συμφωνία των αποτελεσμάτων.

Στα αποτελέσματα παρουσιάζεται η χρονική εξέλιξη των κατανομών των μακροσκοπικών ποσοτήτων και των παροχών, καθώς επίσης και η μεταβολή του χρόνου ισορροπίας ανάλογα με το μέγεθος της αραιοποίησης. Γίνεται διερεύνηση της επίδρασης του λόγου μαζών των συστατικών του μίγματος, της συγκέντρωσης του μίγματος καθώς και του μεγέθους της αραιοποίησης. Η συγκέντρωση του μίγματος ορίζεται ως ο λόγος της αριθμητικής πυκνότητας του ελαφρύτερου συστατικού ως προς το άθροισμα των αριθμητικών πυκνοτήτων των δύο συστατικών του και καθορίζει το ποσοστό συμμετοχής του ελαφρύτερου αερίου στο μίγμα. Οι καμπύλες που προκύπτουν είναι αντίστοιχες με αυτές που συναντάμε σε ροές απλών αερίων. Παρατηρούμε ότι στο μίγμα He-Xe γίνεται ιδιαίτερα εμφανής ο διαχωρισμός των συστατικών του. Για τους χρόνους ισορροπίας του κάθε συστατικού παρατηρούμε αντίστοιχη συμπεριφορά με τους χρόνους ισορροπίας σε ροές απλών αερίων, όπου η μορφή της καμπύλης γίνεται ελάχιστη κοντά στο ελάχιστο σημείο Knudsen.

Μη γραμμικά χρονομεταβαλλόμενα φαινόμενα μεταφοράς μονοατομικών αερίων

Εξετάζονται χρονομεταβαλλόμενα μη γραμμικά φαινόμενα μεταφοράς εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας. Μελετάται η μεταφορά θερμότητας ανάμεσα σε πλάκες και η διατμητική ροή Couette ανάμεσα σε μη ισοθερμοκρασιακές κινούμενες πλάκες. Τα αριθμητικά αποτελέσματα προκύπτουν

με την αριθμητική επίλυση μη γραμμικών κινητικών εξισώσεων και είναι έγκυρα σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen. Χρησιμοποιούνται τα μη γραμμικά μοντέλα BGK και Shakhon με την παραδοχή του ενδομοριακού δυναμικού των σκληρών σφαιρών και των οριακών συνθηκών πλήρους διάχυσης. Η επίλυσή τους γίνεται με τη μέθοδο DVM σε όλο το εύρος της αραιοποίησης.

Παρουσιάζεται η χρονική εξέλιξη των κατανομών της πυκνότητας, της ταχύτητας, της θερμορροής, της θερμοκρασίας και της πίεσης καθώς και ο συνολικός χρόνος ισορροπίας σε κάθε περίπτωση. Εκτός από το βαθμό αραιοποίησης, διερευνάται επίσης η επίδραση στη ροή της διαφοράς θερμοκρασίας μεταξύ των πλακών καθώς και η ταχύτητα κίνησής τους (για τη ροή Couette). Παρατηρείται μια ταλαντωτική συμπεριφορά των κατανομών όλων των μακροσκοπικών ποσοτήτων, η οποία οφείλεται στη δημιουργία κυματισμών πυκνότητας λόγω της μεταβολής της θερμοκρασίας των τοιχωμάτων. Επίσης, καθώς ο βαθμός αραιοποίησης ελαττώνεται, και καθώς η διαφορά θερμοκρασίας ανάμεσα στις πλάκες μεγαλώνει, προκύπτει ότι το θερμοκρασιακό άλμα στα τοιχώματα χάνει τη συμμετρία του και στο θερμό τοίχωμα έχει μεγαλύτερη τιμή από ό,τι στο κρύο τοίχωμα. Το αντίθετο συμβαίνει στην πυκνότητα. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα να χάνεται η συμμετρία των κατανομών και των υπόλοιπων μακροσκοπικών ποσοτήτων.

Μελλοντική έρευνα

Οι περιπτώσεις των μεταβατικών ροών, που μελετώνται στην παρούσα διατριβή, θεωρούνται πρότυπες, και προφανώς δεν εξαντλούν τις πρακτικές εφαρμογές των χρονομεταβαλλόμενων ροών. Πεδίο μελλοντικής έρευνας αποτελεί η ανάπτυξη νέων, ισχυρότερων, αριθμητικών σχημάτων ως προς τη χρονική παράγωγο, για τη μελέτη μεταβατικών ροών μονοατομικών αερίων ή μιγμάτων αερίων σε πιο σύνθετες γεωμετρίες, όπως αγωγοί μικρού μήκους, οπές και ακροφύσια διάφορων διατομών. Επίσης, μπορεί να εξετασθεί η επίδραση στα αποτελέσματα πιο σύνθετων μοντέλων ενδομοριακού δυναμικού και οριακών συνθηκών. Τέλος, μπορεί να διερευνηθεί η χρήση υβριδικών αριθμητικών σχημάτων με σκοπό την αντιμετώπιση του υπολογιστικού κόστους κοντά στην ελεύθερη μοριακή και στην υδροδυναμική περιοχή.

COMPUTATIONAL SOLUTION OF KINETIC EQUATIONS DESCRIBING TIME DEPENDENT TRANSPORT PHENOMENA FAR FROM THERMODYNAMIC EQUILLIBRIUM

John Lihnaropoulos

University of Thessaly, Volos, Greece

September 2014

Supervisor: Dr. Dimitris Valougeorgis, Professor

Extended Summary

Introduction

The study of gas flows far from thermodynamic equilibrium constitutes an ever growing field of fluid mechanics with special scientific interest and a variety of practical applications. Such flows occur in small dimensions and low pressures, which mainly appear in micro systems (MEMS, NEMS), in high altitude gas dynamics and in vacuum technology. Their main characteristic is that in such flows the continuum theory collapses and their study requires alternative methodologies and techniques, such as the use of kinetic theory and the Boltzmann equation, concepts studied by the branch of Statistical Mechanics.

Fully developed, steady flows have been extensively studied in the past. The field, however, of the developing, unsteady (or transitional or time dependent) flows are equally important, and has not yet been investigated in depth. These flows have important practical application in industry in various fields including the manufacturing of space tools and equipment, the use of porous materials (filters, etc.), the coating of CDs / DVDs, the vacuum technology (pumps, gauges, etc..), the construction of mass spectrometers, leak detection, etc. In particular, their applications are especially important in MEMS and in various subsystems of particle accelerators and the nuclear Deuterium-Tritium fusion reactors.

The topic of this thesis is the investigation of unsteady rarefied single gas or binary mixtures flows in long channels of various cross sections. Also, the nonlinear problems of heat transfer between plates and the shear flow between non-isothermal moving plates are studied. In all cases

appropriate kinetic models are numerically solved in the whole range of gas rarefaction. The aim is to establish a general methodology of handling the time dependent kinetic equations and to investigate the transient transport phenomena. Each of the three different segments of the work are described below.

Linear time dependent single gas flows

Fully developed, time dependent, gas flows in long channels due to an imposed pressure gradient along the flow field as well as flows caused by the movement of the boundaries, are investigated. The flows studied include the Poiseuille flow between parallel plates, in cylindrical tubes and in ducts of rectangular cross section, as well as, the Couette flow between moving parallel plates. The characteristic of these flows is that due to the long length of the channel, the phenomena at the ends can be ignored and the flow is considered fully developed and can be linearized. The numerical results are obtained by solving linear time dependent kinetic equations and are valid over the entire range of the Knudsen number. The study focuses on the calculation of the distribution function, by which it is possible to obtain basic macroscopic quantities such as the velocity, density and temperature profiles. Based on these transient macroscopic quantities, the reduced flow rate and the average shear stress on the walls as a function of time are calculated.

Starting from the formulation of the Boltzmann equation, the collisions term is substituted by the linearized BGK and Shakhov models, which are then solved numerically, assuming complete diffusion boundary conditions. The approximation of the derivatives is done by various finite difference schemes, which result to three basic numerical algorithms, one of which is explicit and the other two are semi implicit. The numerical solution takes place by applying the well-known Discrete Velocities Method (DVM). Always, the main unknown in the respective kinetic equation is the distribution function, which in the general case is a function of seven independent variables: the three components of the position vector, the three components of the vector of molecular velocities and the time variable. Depending on the geometry, the three spatial independent variables are reduced by the geometrical simplifications of the flow configuration (1D, 2D, axisymmetry, etc). For the reduction of the number of the discrete molecular velocities, a projection procedure in the space of molecular velocities is applied.

To check the validity of the numerical results, a comparison to the analytical solution in the hydrodynamic limit is made. Also a comparison to the corresponding results given by the Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) method is performed. In both cases it is seen that there is a very good agreement between the corresponding results. Finally, the procedure of dimensionalization of the results is presented in detail, as it is not trivial, in order to deduce some practical guidelines.

The results obtained provide a detailed description of the time evolution of the flow field during the transition time from the initial conditions to the steady state. In each case the time evolution of the macroscopic quantities is shown, as well as the change in the equilibrium time, i.e., the time needed to reach steady-state conditions, depending on the degree of gas rarefaction. The equilibrium time is defined as the point at which the estimated reduced flow rate recovers its corresponding steady-state value with a variation of less than 1%. The equilibrium time presents a non-monotonic behavior against the gas rarefaction, displaying a minimum value near the point, which is known as the Knudsen minimum.

Linear time dependent flows of binary gas mixtures

Time dependent flows of binary gas mixtures of two components, between plates and cylindrical tubes are investigated. The flows are formed due to an imposed local gradient of pressure, temperature or concentration in the axial direction. These local gradients are small and thus justifying the use of the McCormack model, which is linear, for modeling the collisions term. The flows of gas mixtures are characterized by the fact that the average molecular speed is not equal to the macroscopic (hydrodynamic velocity) of the mixture, as with ordinary gas flows. Generally, there is a relative movement (diffusion) between the two components of the mixture causing the phenomenon of gas separation, particularly when the difference between the molecular masses of the two components is large. In the study of gaseous mixtures flows the acquisition of the equilibrium time for each component is useful. The equilibrium time, in this case, is defined as the time needed for both the reduced dimensionless flow rate and heat flux to recover their corresponding steady state values with a variation of less than 1%. In general these two quantities do not converge simultaneously to their corresponding steady state values, and hence the quantity that takes longer determines the equilibrium time of each component.

The behavior of two representative gas mixtures in flows between plates and cylindrical tubes is investigated. The study includes the gas mixtures of Ne-Ar and He-Xe. In the former mixture, the molar masses of its components are relatively close together, while in the latter mixture they are very different. The concentration of the mixture is defined as the ratio of the number density of the lighter component to the sum of the number densities of the two components and determines the contribution of the lighter component to the gas mixture. The results include the time evolution of the distributions of the macroscopic quantities and the reduced flow rates, as well as the change in the equilibrium time in terms of the gas rarefaction parameter, the mass ratio of the mixture components and the concentration of the mixture.

For the mixture flows caused by a pressure gradient, the effect of the concentration on the time evolution of the reduced flow rates is smaller for the mixture of Ne-Ar than that for the mixture of He-Xe. The reduced flow rates start at zero and rise sharply within small values of time and then asymptotically reach the steady state solution at larger times. The rising is steeper for the He in the He-Xe mixture, and thus He approaches the steady state much faster than Xe. Also, the gas separation effect is more prominent for smaller values of the gas rarefaction parameter, especially for the He-Xe mixture. This causes the flow rate evolution of each gas of the mixture to evolve independently from each other. When the values of the rarefaction parameter are higher, the Ne-Ar mixture behaves almost like a single gas. The equilibrium times of the heavier components are larger than the corresponding times of the lighter components. This difference is more apparent for the He-Xe mixture. The equilibrium times follow the non-monotonic behavior as that for the single gas flows: they start with large values for small δ , then they gradually decrease taking a minimum value close to $\delta = 1$ and they increase again for higher values of δ . Similar observations are made for the cases of gas mixture flows caused by temperature and concentration gradients.

Nonlinear time dependent transport phenomena of single gases

Time dependent, nonlinear, transport phenomena far from thermodynamic equilibrium are investigated. The heat transfer between parallel plates and the Couette shear flow between non-isothermal moving plates is studied. The nonlinear BGK and Shakhov kinetic models are used, assuming the hard spheres intermolecular potential and fully diffusion boundary conditions. The

solution of the kinetic equations is performed by the DVM across the whole range of the gas rarefaction. The time evolution of all macroscopic distributions as well as the total equilibrium time in each case is presented. The effect of the gas rarefaction, the temperature difference between the two plates and the plate velocity (for the Couette flow) are explored.

In all cases an oscillatory behavior of the distributions of all macroscopic quantities, caused by the creation of density waves due to the change in temperature of the walls, is observed. It is noted that in the transient heat transfer problem the normal velocity to the walls is initially nonzero presenting an oscillating behavior. Then, as the heat transfer set-up reaches its steady state the velocity is reduced and finally becomes zero. For large values of the rarefaction parameter and for small temperature difference between the plates, the profiles of the temperature and the density are approximately antisymmetric with respect to the center between the plates. There are temperature and density jumps at the walls, which become larger as the gas rarefaction parameter decreases, with the temperature jump on the hot plate being greater than that on the cold plate. The opposite is observed on the density profile. The heat flow is always positive, indicating a direction from the hot towards the cold plate. Its initial value is zero and as soon as the heat transfer starts to evolve its value on the walls increase faster than its value on the space between the plates. Then, an overall upward movement of the graph is observed as it reaches the steady state profile, where some oscillations occur before settling down. The oscillations of the macroscopic quantities are more prominent when the temperature difference between the plates is larger. The equilibrium times follow the same non monotonic behavior as that for the gas flows.

Concluding remarks and future work

A general computational methodology has been established to simulate time-dependent rarefied gas flows and heat transfer phenomena by solving linear and nonlinear kinetic model equations in the whole range of the Knudsen number. The transient flows of single gases and binary mixtures flowing between plates and through channels of circular and rectangular cross sections have been investigated. The phenomenon of gas separation has been studied. Time-dependent heat transfer between parallel plates has been also investigated. Various reliable numerical schemes have been developed and Fortran codes have been developed for the efficient solution of the transient kinetic

equations. Taking into account the specific geometry and flow characteristics optimal computational performance has been achieved. The work is novel and it is presented for first time in the literature.

The cases of transitional flows studied in this thesis are considered standard, and obviously do not exhaust the practical applications of the time dependent transport phenomena. Future research may focus on the development of more powerful schemes and in more complex geometries. The implementation of hybrid time dependent schemes coupling kinetic with hydrodynamic solvers is also an emerging research field with a lot of potential.

Περιεχόμενα

Κεφάλαιο 1	Εισαγωγή	1
1.1	Ροές αερίων εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας	1
1.2	Περιεχόμενο και δομή διδακτορικής διατριβής	4
1.3	Πρωτοτυπία και επιστημονική συνεισφορά διδακτορικής διατριβής	6
Κεφάλαιο 2	Βιβλιογραφική ανασκόπηση	9
2.1	Στοιχεία Κινητικής Θεωρίας	9
2.2	Μόνιμες ροές	14
2.3	Μεταβατικές ροές	15
Κεφάλαιο 3	Γραμμικές χρονομεταβαλλόμενες αραιωποιημένες ροές αερίων	19
3.1	Εισαγωγή	19
3.2	Ροές Poiseuille ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες	20
3.3	Ροή Couette ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες	30
3.4	Ροή Poiseuille σε κυλινδρικό αγωγό	32
3.5	Ροή Poiseuille σε αγωγό ορθογωνικής διατομής	37
3.6	Αδιάστατες παροχές, διατμητικές τάσεις, θερμοροές και συνολικοί χρόνοι ισορροπίας	40
3.7	Αναλυτικές λύσεις στο υδροδυναμικό όριο	41
3.8	Διαστατοποίηση αποτελεσμάτων	42
3.9	Σύγκριση με DSMC	45
Κεφάλαιο 4	Γραμμικές χρονομεταβαλλόμενες ροές μιγμάτων αερίων	69
4.1	Βασικοί ορισμοί	69
4.2	Ροή ανάμεσα σε πλάκες	71
4.3	Ροή σε κυλινδρικό αγωγό	78
4.4	Χρονική εξέλιξη αδιάστατων παροχών και θερμοροών	83
4.5	Φαινόμενο διαχωρισμού συστατικών σε ροές μιγμάτων	87
4.6	Σύγκριση με DSMC	88
Κεφάλαιο 5	Μη γραμμικά χρονομεταβαλλόμενα φαινόμενα μεταφοράς	109
5.1	Εισαγωγή	109
5.2	Μεταφορά θερμότητας ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες - Μοντέλο BGK	110
5.3	Μεταφορά θερμότητας ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες - Μοντέλο Shakhov	118
5.4	Μεταφορά θερμότητας ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες - Αναλυτική λύση	119
5.5	Ροή Couette με ταυτόχρονη μεταφορά θερμότητας ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες - Μοντέλο BGK	122
Κεφάλαιο 6	Συμπεράσματα και μελλοντική έρευνα	157

Παράρτημα Α	Γραμμικοποίηση αδιαστατοποίηση και προβολή κινητικών εξισώσεων χρο- νομεταβαλλόμενου μοντέλου BGK	161
A.1	Γενική μορφή εξίσωσης BGK και γραμμικοποίηση κατανομής	161
A.2	Γραμμικοποίηση και αδιαστατοποίηση των ροπών της f	162
A.3	Γραμμικοποίηση και αδιαστατοποίηση εξίσωσης BGK	166
A.4	Προβολή γραμμικοποιημένου BGK για ροή σε παράλληλες πλάκες	168

Κατάλογος πινάκων

Πίνακας 3.1: Τμήμα κινητικής βάσης δεδομένων μοντέλου BGK για μεταβατική ροή Poiseuille σε κυλινδρικό αγωγό	47
Πίνακας 3.2: Περιπτώσεις ροών που παρουσιάζονται στο γράφημα 3.18	47
Πίνακας 3.3: Περιπτώσεις ροών που παρουσιάζονται στο γράφημα 3.19	47
Πίνακας 3.4: Μεταβατική ροή Poiseuille σε κυλινδρικό αγωγό: Σύγκριση αδιάστατων παροχών $G(t)$ μεταξύ DVM και DSMC για $\delta = 0.1$	48
Πίνακας 3.5: Μεταβατική ροή Poiseuille σε κυλινδρικό αγωγό: Σύγκριση αδιάστατων παροχών $G(t)$ μεταξύ DVM και DSMC για $\delta = 1$	48
Πίνακας 3.6: Μεταβατική ροή Poiseuille σε κυλινδρικό αγωγό: Σύγκριση αδιάστατων παροχών $G(t)$ μεταξύ DVM και DSMC για $\delta = 10$	49
Πίνακας 4.1: Σύγκριση αδιάστατων παροχών μεταξύ DVM και DSMC για ροή μίγματος Ne-Ar που οφείλεται σε βαθμίδα πίεσης ($\delta = 0.1$, $C = 0.3$)	90
Πίνακας 4.2: Σύγκριση αδιάστατων παροχών μεταξύ DVM και DSMC για ροή μίγματος He-Xe που οφείλεται σε βαθμίδα πίεσης ($\delta = 0.1$, $C = 0.3$)	90

Κατάλογος σχημάτων

Σχήμα 3.1: Γεωμετρική διαμόρφωση μεταβατικής ροής Poiseuille σε πλάκες	50
Σχήμα 3.2: Μεταβατική ροή Poiseuille σε παράλληλες πλάκες (BGK): Χρονική εξέλιξη κατανομών ταχυτήτων	51
Σχήμα 3.3: Μεταβατική ροή Poiseuille σε παράλληλες πλάκες (Shakhov): Χρονική εξέλιξη κατανομών ταχυτήτων	52
Σχήμα 3.4: Γεωμετρική διαμόρφωση μεταβατικής ροής Couette σε πλάκες	53
Σχήμα 3.5: Μεταβατική ροή Couette σε παράλληλες πλάκες (BGK): Χρονική εξέλιξη κατανομών ταχυτήτων	54
Σχήμα 3.6: Μεταβατική ροή Couette σε παράλληλες πλάκες (Shakhov): Χρονική εξέλιξη κατανομών ταχυτήτων	55
Σχήμα 3.7: Γεωμετρική διαμόρφωση μεταβατικής ροής Poiseuille σε κυλινδρικό αγωγό . . .	56
Σχήμα 3.8: Μεταβατική ροή Poiseuille σε κυλινδρικό αγωγό (BGK): Χρονική εξέλιξη κατανομών ταχυτήτων	57
Σχήμα 3.9: Μεταβατική ροή Poiseuille σε κυλινδρικό αγωγό (BGK): Χρονική εξέλιξη κατανομών ταχυτήτων	58
Σχήμα 3.10: Γεωμετρική διαμόρφωση μεταβατικής ροής Poiseuille σε αγωγό ορθογωνικής διατομής	59
Σχήμα 3.11: Μεταβατική ροή Poiseuille σε ορθογωνικό αγωγό (BGK): Χρονική εξέλιξη των κατανομών ταχυτήτων	60
Σχήμα 3.12: Χρονική εξέλιξη αδιάστατης παροχής μεταβατικής ροής Poiseuille σε παράλληλες πλάκες και σε κυλινδρικό αγωγό (BGK)	61
Σχήμα 3.13: Χρονική εξέλιξη αδιάστατης παροχής μεταβατικής ροής Poiseuille σε ορθογωνικό αγωγό (BGK)	62
Σχήμα 3.14: Χρονική εξέλιξη διατμητικής τάσης μεταβατικής ροής Couette σε παράλληλες πλάκες (BGK, Shakhov)	63

Σχήμα 3.15: Μεταβατική ροή Poiseuille σε παράλληλες πλάκες και σε κυλινδρικό αγωγό (Shakhov): Χρονική εξέλιξη μέσης αξονικής θερμορροής	64
Σχήμα 3.16: Χρόνος ισορροπίας για τις μεταβατικές ροές Poiseuille σε παράλληλες πλάκες, Poiseuille σε κυλινδρικό αγωγό, Couette σε παράλληλες πλάκες και Poiseuille σε ορθογωνικό αγωγό	65
Σχήμα 3.17: Σύγκριση μεταξύ των υπολογιστικών και των αναλυτικών κατανομών ταχυτήτων στο υδροδυναμικό όριο μεταβατικών ροών Poiseuille σε παράλληλες πλάκες, Couette σε παράλληλες πλάκες και Poiseuille σε κυλινδρικό αγωγό	66
Σχήμα 3.18: Διαστατές μαζικές παροχές για μεταβατική ροή He και Xe προς κενό σε κυλινδρικό αγωγό	67
Σχήμα 3.19: Διαστατοί χρόνοι ισορροπίας συναρτήσει της πίεσης εισόδου για μεταβατική ροή He και Xe προς κενό σε κυλινδρικό αγωγό	68
Σχήμα 4.1: Γεωμετρική διαμόρφωση ροής μίγματος δύο αερίων ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες	91
Σχήμα 4.2: Γεωμετρική διαμόρφωση ροής μίγματος δύο αερίων σε κυλινδρικό αγωγό	92
Σχήμα 4.3: Μεταβατική ροή μίγματος Ne-Ar λόγω X_P : Χρονική εξέλιξη παροχών ($\delta = 0, 0.1, 1, 10$)	93
Σχήμα 4.4: Μεταβατική ροή μίγματος He-Xe λόγω X_P : Χρονική εξέλιξη παροχών ($\delta = 0, 0.1, 1, 10$)	94
Σχήμα 4.5: Μεταβατική ροή μίγματος Ne-Ar λόγω X_P : Χρονική εξέλιξη παροχών ($C' = 0, 0.1, 0.5, 0.9, 1$)	95
Σχήμα 4.6: Μεταβατική ροή μίγματος He-Xe λόγω X_P : Χρονική εξέλιξη παροχών ($C' = 0, 0.1, 0.5, 0.9, 1$)	96
Σχήμα 4.7: Μεταβατική ροή μιγμάτων Ne-Ar και He-Xe, λόγω X_P : Χρόνος ισορροπίας κάθε συστατικού	97
Σχήμα 4.8: Μεταβατική ροή μίγματος Ne-Ar λόγω X_T : Χρονική εξέλιξη παροχών ($\delta = 0, 0.1, 1, 10$)	98
Σχήμα 4.9: Μεταβατική ροή μίγματος He-Xe λόγω X_T : Χρονική εξέλιξη παροχών ($\delta = 0, 0.1, 1, 10$)	99
Σχήμα 4.10: Μεταβατική ροή μίγματος Ne-Ar λόγω X_T : Χρονική εξέλιξη παροχών ($C' = 0, 0.01, 0.5, 0.99, 1$)	100
Σχήμα 4.11: Μεταβατική ροή μίγματος He-Xe λόγω X_T : Χρονική εξέλιξη παροχών ($C' = 0, 0.01, 0.5, 0.99, 1$)	101
Σχήμα 4.12: Μεταβατική ροή μιγμάτων Ne-Ar και He-Xe, λόγω X_T : Χρόνος ισορροπίας κάθε συστατικού	102

Σχήμα 4.13: Μεταβατική ροή μίγματος Ne-Ar λόγω X_C : Χρονική εξέλιξη παροχών ($\delta = 0, 0.1, 1, 10$)	103
Σχήμα 4.14: Μεταβατική ροή μίγματος He-Xe λόγω X_C : Χρονική εξέλιξη παροχών ($\delta = 0, 0.1, 1, 10$)	104
Σχήμα 4.15: Μεταβατική ροή μίγματος Ne-Ar λόγω X_C : Χρονική εξέλιξη παροχών ($C = 0.1, 0.5, 0.9$)	105
Σχήμα 4.16: Μεταβατική ροή μίγματος He-Xe λόγω X_C : Χρονική εξέλιξη παροχών ($C = 0.1, 0.5, 0.9$)	106
Σχήμα 4.17: Μεταβατική ροή μιγμάτων Ne-Ar και He-Xe, λόγω X_C : Χρόνος ισορροπίας κάθε συστατικού	107
Σχήμα 4.18: Διαχωρισμός αερίων μίγματος: Εξάρτηση της ποσότητας Z από την παράμετρο αραιοποίησης για ροές Ne-Ar και He-Xe που οφείλονται X_P	108
Σχήμα 5.1: Μεταβατική μεταφορά θερμότητας σε πλάκες (BGK). Μακροσκοπικές κατανομές ($\beta = 0.1, \delta_0 = 0.1$)	128
Σχήμα 5.2: Μεταβατική μεταφορά θερμότητας σε πλάκες (BGK). Μακροσκοπικές κατανομές ($\beta = 0.1, \delta_0 = 1$)	129
Σχήμα 5.3: Μεταβατική μεταφορά θερμότητας σε πλάκες (BGK). Μακροσκοπικές κατανομές ($\beta = 0.1, \delta_0 = 10$)	130
Σχήμα 5.4: Μεταβατική μεταφορά θερμότητας σε πλάκες (BGK). Μακροσκοπικές κατανομές ($\beta = 0.5, \delta_0 = 0.1$)	131
Σχήμα 5.5: Μεταβατική μεταφορά θερμότητας σε πλάκες (BGK). Μακροσκοπικές κατανομές ($\beta = 0.5, \delta_0 = 1$)	132
Σχήμα 5.6: Μεταβατική μεταφορά θερμότητας σε πλάκες (BGK). Μακροσκοπικές κατανομές ($\beta = 0.5, \delta_0 = 10$)	133
Σχήμα 5.7: Μεταβατική μεταφορά θερμότητας σε πλάκες (BGK). Μακροσκοπικές κατανομές ($\beta = 0.9, \delta_0 = 0.1$)	134
Σχήμα 5.8: Μεταβατική μεταφορά θερμότητας σε πλάκες (BGK). Μακροσκοπικές κατανομές ($\beta = 0.9, \delta_0 = 1$)	135
Σχήμα 5.9: Μεταβατική μεταφορά θερμότητας σε πλάκες (BGK). Μακροσκοπικές κατανομές ($\beta = 0.9, \delta_0 = 10$)	136
Σχήμα 5.10: Χρόνοι ισορροπίας μεταφοράς θερμότητας σε πλάκες	137
Σχήμα 5.11: Μη γραμμική μεταβατική ροή Couette σε πλάκες (BGK). Μακροσκοπικές κατανομές ($U_0 = 0.5, \beta = 0.7, \delta_0 = 0.1$)	138
Σχήμα 5.12: Μεταβατική μεταφορά θερμότητας σε πλάκες (Shakhov). Μακροσκοπικές κατανομές ($\beta = 0.5, \delta_0 = 10$)	139

Σχήμα 5.13: Μεταβατική μεταφορά θερμότητας σε πλάκες (Shakhov). Μακροσκοπικές κατανομές ($\beta = 0.9, \delta_0 = 10$)	140
Σχήμα 5.14: Μεταβατική μεταφορά θερμότητας σε πλάκες: Σύγκριση μεταξύ BGK και Shakhov	141
Σχήμα 5.15: Μεταβατική μεταφορά θερμότητας σε πλάκες: Σύγκριση με αναλυτική λύση	142
Σχήμα 5.16: Μη γραμμική μεταβατική ροή Couette σε πλάκες (BGK). Μακροσκοπικές κατανομές ($U_0 = 0.1, \beta = 0.1, \delta_0 = 0.1$)	143
Σχήμα 5.17: Μη γραμμική μεταβατική ροή Couette σε πλάκες (BGK). Μακροσκοπικές κατανομές ($U_0 = 0.1, \beta = 0.1, \delta_0 = 1$)	144
Σχήμα 5.18: Μη γραμμική μεταβατική ροή Couette σε πλάκες (BGK). Μακροσκοπικές κατανομές ($U_0 = 0.1, \beta = 0.1, \delta_0 = 10$)	145
Σχήμα 5.19: Μη γραμμική μεταβατική ροή Couette σε πλάκες (BGK). Μακροσκοπικές κατανομές ($U_0 = 0.1, \beta = 0.7, \delta_0 = 0.1$)	146
Σχήμα 5.20: Μη γραμμική μεταβατική ροή Couette σε πλάκες (BGK). Μακροσκοπικές κατανομές ($U_0 = 0.1, \beta = 0.7, \delta_0 = 1$)	147
Σχήμα 5.21: Μη γραμμική μεταβατική ροή Couette σε πλάκες (BGK). Μακροσκοπικές κατανομές ($U_0 = 0.1, \beta = 0.7, \delta_0 = 10$)	148
Σχήμα 5.22: Μη γραμμική μεταβατική ροή Couette σε πλάκες (BGK). Μακροσκοπικές κατανομές ($U_0 = 0.5, \beta = 0.1, \delta_0 = 0.1$)	149
Σχήμα 5.23: Μη γραμμική μεταβατική ροή Couette σε πλάκες (BGK). Μακροσκοπικές κατανομές ($U_0 = 0.5, \beta = 0.1, \delta_0 = 1$)	150
Σχήμα 5.24: Μη γραμμική μεταβατική ροή Couette σε πλάκες (BGK). Μακροσκοπικές κατανομές ($U_0 = 0.5, \beta = 0.1, \delta_0 = 10$)	151
Σχήμα 5.25: Μη γραμμική μεταβατική ροή Couette σε πλάκες (BGK). Μακροσκοπικές κατανομές ($U_0 = 0.5, \beta = 0.7, \delta_0 = 0.1$)	152
Σχήμα 5.26: Μη γραμμική μεταβατική ροή Couette σε πλάκες (BGK). Μακροσκοπικές κατανομές ($U_0 = 0.5, \beta = 0.7, \delta_0 = 1$)	153
Σχήμα 5.27: Μη γραμμική μεταβατική ροή Couette σε πλάκες (BGK). Μακροσκοπικές κατανομές ($U_0 = 0.5, \beta = 0.7, \delta_0 = 10$)	154
Σχήμα 5.28: Χρόνοι ισορροπίας των μη γραμμικών μεταβατικών ροής Couette σε πλάκες	155

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

1.1 Ροές αερίων εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας

Σε ένα ιδανικό αέριο η μέση ελεύθερη διαδρομή των μορίων μεταξύ δύο διαδοχικών συγκρούσεων λ , με την υπόθεση απολύτως ελαστικών μοριακών συγκρούσεων (μοντέλο σκληρών σφαιρών), δίνεται από τη σχέση [1]

$$\lambda = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\mu}{P_0} \left(\frac{2k_B T_0}{m} \right)^{1/2} \quad (1.1.1)$$

όπου P_0 , T_0 είναι μία πίεση και μία θερμοκρασία αναφοράς, αντίστοιχα, μ το ιξώδες του αερίου, m η μοριακή μάζα του και k_B η σταθερά Boltzmann. Ο λόγος μεταξύ της μέσης ελεύθερης διαδρομής των μορίων λ και της χαρακτηριστικής διάστασης του πεδίου ροής L ονομάζεται αριθμός Knudsen (Kn)

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \quad (1.1.2)$$

και η τιμή του καθορίζει το βαθμό αραιοποίησης του αερίου. Μικρές τιμές του αριθμού Kn συνεπάγονται μεγάλη συχνότητα μοριακών συγκρούσεων, ενώ το αντίθετο συμβαίνει για μεγάλες τιμές του Kn . Όταν ο αριθμός Kn είναι πολύ μικρός, βρισκόμαστε σε τοπική θερμοδυναμική ισορροπία, ενώ καθώς ο Kn αυξάνει, απομακρυνόμαστε από αυτή. Χαρακτηριστικό της τοπικής θερμοδυναμικής ισορροπίας είναι πως η κατανομή των μοριακών ταχυτήτων περιγράφεται από την κατανομή Maxwell.

Όταν $Kn < 10^{-3}$, βρισκόμαστε στη λεγόμενη “υδροδυναμική” περιοχή, όπου έχουν εφαρμογή οι εξισώσεις Euler και Navier-Stokes (N-S). Όταν $10^{-3} < Kn < 10^{-1}$, τότε βρισκόμαστε

στην περιοχή “ολίσθησης” και φαινόμενα αραιοποίησης αρχίζουν να επηρεάζουν τη ροή. Στην περιοχή αυτή η μελέτη της ροής γίνεται με τις εξισώσεις N-S με την εφαρμογή συνθηκών ολίσθησης στα τοιχώματα. Καθώς $Kn > 10^{-1}$, οι καταστατικές εξισώσεις παύουν να ισχύουν και οι εξισώσεις N-S δεν μπορούν πλέον να περιγράψουν τη ροή. Η περιοχή αυτή ονομάζεται “μεταβατική”. Η ταχύτητα, η διατμητική τάση στα τοιχώματα, η παροχή μάζας και η πίεση επηρεάζονται σε σημαντικό βαθμό από φαινόμενα ασυνέχειας και οι ενδομοριακές συγκρούσεις πρέπει να λαμβάνονται υπόψη κατά τη μελέτη τέτοιων ροών. Σε αυτή την περιοχή, η κινητική θεωρία αποτελεί τον πλέον κατάλληλο τρόπο περιγραφής της ροής. Μπορούν επίσης να εφαρμοσθούν στατιστικές τεχνικές προσομοίωσης της κίνησης των μορίων, όπως είναι η μέθοδος Direct Simulation Monte Carlo (DSMC). Τέλος, όταν $Kn > 10$, η υπόθεση του συνεχούς μέσου καταρρέει εντελώς και η περιοχή αυτή ονομάζεται “ελεύθερη μοριακή”. Στην περιοχή αυτή τα μόρια δεν συγκρούονται μεταξύ τους, αλλά, αντιθέτως, κινούνται σε ευθύγραμμες τροχιές. Για την επίλυση των ροών στην ελεύθερη μοριακή περιοχή χρησιμοποιούνται με επιτυχία τεχνικές προσομοίωσης, όπως είναι η μέθοδος Test Particle Monte Carlo (TPMC) καθώς και η κινητική θεωρία χωρίς τον όρο των μοριακών συγκρούσεων.

Για το χαρακτηρισμό μιας ροής ως αραιοποιημένης, εκτός του αριθμού Kn , χρησιμοποιείται, αντίστοιχα, και ο αριθμός δ , ο οποίος ονομάζεται παράμετρος αραιοποίησης και ορίζεται ως

$$\delta = \frac{P L}{\mu v_0} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{Kn} \quad (1.1.3)$$

όπου

$$v_0 = \sqrt{2 R T_0} \quad (1.1.4)$$

είναι η πιο πιθανή μοριακή ταχύτητα, L είναι η χαρακτηριστική διάσταση του προβλήματος, $R = k_B/m$ είναι η σταθερά του αερίου και T_0 είναι μία θερμοκρασία αναφοράς.

Η κλασική ρευστομηχανική προσέγγιση δεν μπορεί να χειριστεί με κάποιον ενιαίο τρόπο τις ροές σε ολόκληρο το εύρος του αριθμού Kn . Το κενό αυτό έρχονται να καλύψουν μεθοδολογίες δανεισμένες από την περιοχή της μοριακής δυναμικής και της στατιστικής μηχανικής. Η μοριακή δυναμική είναι μια γενικότερη μεθοδολογία αντιμετώπισης ροών. Η εφαρμογή της όμως, ειδικότερα στην περιοχή των αραιοποιημένων ροών αερίων (Rarefied Gas Dynamics), είναι ιδιαιτέρως προβληματική. Στηρίζεται στη μελέτη, ξεχωριστά, κάθε ατόμου του αερίου, για τον προσδιορι-

σμό της κίνησής του και των αλληλεπιδράσεών του με τα άλλα μόρια και με τα τοιχώματα. Από αυτή τη μελέτη προκύπτουν τα μακροσκοπικά μεγέθη της ροής, όπως η κατανομή της ταχύτητας, η παροχή και οι διατμητικές τάσεις. Η μέθοδος αυτή εφαρμόζεται κυρίως σε πυκνά (dense) αέρια. Έχει επιπλέον το μειονέκτημα ότι ο αριθμός των μορίων που πρέπει να μοντελοποιηθούν, καθώς και ο αριθμός των μεταξύ τους αλληλεπιδράσεων, είναι πολύ μεγάλος. Επομένως, η υπολογιστική ισχύς, που απαιτείται για την επίλυση κάποιας ροής χρησιμοποιώντας τη μέθοδο αυτή, γίνεται απαγορευτικά μεγάλη.

Η άλλη προσέγγιση, αυτή της στατιστικής μηχανικής, στηρίζεται στην κινητική θεωρία και την επίλυση της εξίσωσης Boltzmann από την οποία προκύπτει η συνάρτηση κατανομής των σωματιδίων, μέσω των ροπών της οποίας υπολογίζονται οι μακροσκοπικές ποσότητες της ροής, όπως η πυκνότητα, η ταχύτητα, η θερμορροή, η θερμοκρασία και η πίεση. Η συνάρτηση κατανομής περιγράφει το αναμενόμενο πλήθος των μορίων που έχουν μια καθορισμένη μοριακή ταχύτητα και βρίσκονται σε συγκεκριμένο σημείο του χώρου κάποια δεδομένη χρονική στιγμή. Η μέθοδος της κινητικής θεωρίας πλεονεκτεί σε σχέση με τη μέθοδο της μοριακής δυναμικής, επειδή, αντί να μελετούμε την κίνηση του κάθε μορίου χωριστά, μελετούμε αντιθέτως την κίνηση ομάδων που αποτελούνται από πολλά σωματίδια μαζί. Παρόλα αυτά ακόμη και η συγκεκριμένη μεθοδολογία σε περιοχές κοντά στο συνεχές όριο απαιτεί ιδιαίτερα μεγάλη υπολογιστική ισχύ, την οποία προσπαθούμε να περιορίσουμε εφαρμόζοντας ειδικές αριθμητικές τεχνικές.

Οι ροές εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας έχουν ποικίλες ενδιαφέρουσες εφαρμογές σε σύγχρονα επιστημονικά πεδία. Για παράδειγμα στην αεριοδυναμική υψηλών υψομέτρων [2], όπου, λόγω της χαμηλής πίεσης και της χαμηλής πυκνότητας, έχουμε μεγάλες τιμές της μέσης ελεύθερης διαδρομής λ και συνεπώς του αριθμού Kn , ενδιαφέρει π.χ. η μελέτη της ροής γύρω από το ρύγχος ενός διαστημοπλοίου, που εισέρχεται με μεγάλη ταχύτητα στη γήινη ατμόσφαιρα. Τέτοιες ροές εκτείνονται από τη μεταβατική περιοχή μέχρι και την υδροδυναμική περιοχή και για αυτό το λόγο παρουσιάζουν αρκετές δυσκολίες στην επίλυσή τους. Ένα ακόμη ενδιαφέρον παράδειγμα μπορούμε να βρούμε σε μικρές κλίμακες στα μικρο- ή νανο- ηλεκτρομηχανολογικά συστήματα (MEMS, NEMS) [3, 4, 5], όπου για παράδειγμα ενδιαφέρει η μελέτη της ροής μέσα σε μικροσκοπικούς αισθητήρες επιτάχυνσης ή πίεσης. Σε αυτές τις κλίμακες οι ροές είναι αραιωποιημένες – και βρίσκονται κυρίως στη μεταβατική περιοχή – επειδή το χαρακτηριστικό μέγεθος L

της ροής είναι πολύ μικρό. Ιδιαίτερη εφαρμογή των αραιοποιημένων ροών αερίων συναντάται σε ροές σε συνθήκες κενού [6]. Οι ροές σε πιέσεις χαμηλότερης της ατμοσφαιρικής σχετίζονται άμεσα με πολλά υποσυστήματα πυρηνικών αντιδραστήρων σύντηξης Δευτερίου-Τριτίου, όπως με τις αντλίες κενού που χρησιμεύουν στην εκκένωση και διατήρηση χαμηλών πιέσεων στον τόρο, στον κρυοστάτη και στο σύστημα έκχυσης δέσμης ουδέτερων ατόμων (neutral beam injector), το οποίο χρησιμοποιείται για τη θέρμανση του πλάσματος. Οι ροές σε αυτά τα υποσυστήματα πραγματοποιούνται μέσα από πολύπλοκα δίκτυα σωληνώσεων διαφόρων διατομών και μεταβάλλονται από την ελεύθερη μοριακή περιοχή μέχρι την υδροδυναμική περιοχή. Οι συγκεκριμένες ροές είναι αραιοποιημένες, λόγω της χαμηλής πυκνότητας των αερίων. Τέλος, οι ροές εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας βρίσκουν εφαρμογή και σε άλλες δύο ταχέως αναπτυσσόμενες περιοχές, αυτές των πορωδών μέσων (porous media) και της τεχνολογίας των αερολυμάτων (aerosol) [2].

Ιδιαίτερως η μελέτη των μεταβατικών αραιοποιημένων ροών έχει σημαντική πρακτική εφαρμογή στη βιομηχανία σε διάφορα πεδία που περιλαμβάνουν την κατασκευή διαστημικών εργαλείων, την κατασκευή φίλτρων, την επίστρωση μετάλλου σε CD/DVD, τους μετρητές κενού, την κατασκευή φασματογράφων μάζας, τη μετρολογία κενού, τη διαδικασία ξήρανσης κ.ά. Φυσικά σημαντική εφαρμογή βρίσκουν και στα MEMS καθώς και στην περιγραφή διεργασιών σε εγκαταστάσεις υψηλών ενεργειών και σύντηξης, όπως για παράδειγμα στην ανίχνευση διαρροών.

1.2 Περιεχόμενο και δομή διδακτορικής διατριβής

Το περιεχόμενο της παρούσας διατριβής επικεντρώνεται στη μελέτη χρονομεταβαλλόμενων αραιοποιημένων ροών αερίων και δυαδικών μιγμάτων τους σε αγωγούς μεγάλου μήκους ποικίλων διατομών. Επίσης μελετώνται τα μη γραμμικά προβλήματα της μεταφοράς θερμότητας ανάμεσα σε πλάκες και διατμητικής ροής ανάμεσα σε κινούμενες μη ισοθερμοκρασιακές πλάκες. Σε όλες τις περιπτώσεις επιλύονται αριθμητικά, κατάλληλα κινητικά μοντέλα σε όλο το εύρος της αραιοποίησης. Η διατριβή περιλαμβάνει τρεις βασικές ενότητες:

Στην πρώτη ενότητα διερευνώνται γραμμικές χρονομεταβαλλόμενες ροές ενός αερίου σε αγωγούς διαφόρων διατομών. Ειδικότερα μελετώνται μεταβατικές ροές των οποίων το αίτιο δημιουργίας είναι η απότομη εφαρμογή μικρής τοπικής βαθμίδας πίεσης κατά τη διεύθυνση της ροής.

Οι ροές αυτές λαμβάνουν χώρα ανάμεσα σε πλάκες και σε αγωγούς ορθογώνιας και κυκλικής διατομής. Επίσης εξετάζεται η διατμητική μεταβατική ροή Couette ανάμεσα σε πλάκες, η οποία δημιουργείται από την κίνησή τους με μικρή ταχύτητα. Τα κινητικά μοντέλα που εφαρμόζονται είναι τα γραμμικά χρονομεταβαλλόμενα BGK και Shakhov. Τέλος, παρουσιάζεται αναλυτικά η διαδικασία διαστατοποίησης των αδιάστατων αποτελεσμάτων καθώς αυτή είναι μη προφανής.

Στη δεύτερη ενότητα μελετώνται γραμμικές χρονομεταβαλλόμενες ροές μιγμάτων δύο αερίων. Ειδικότερα εξετάζονται μεταβατικές ροές σε πλάκες και σε κυλινδρικό αγωγό, που οφείλονται σε μικρές τοπικές κλίσεις πίεσης, θερμοκρασίας, ή συγκέντρωσης κατά τη διεύθυνση της ροής. Επιλέγονται δύο μίγματα για τη μελέτη των φαινομένων. Ένα με μικρή διαφορά μεταξύ των μοριακών μαζών των συστατικών του και ένα με μεγάλη διαφορά. Στο δεύτερο μίγμα παρατηρείται έντονο το φαινόμενο του διαχωρισμού των αερίων. Το κινητικό μοντέλο που εφαρμόζεται είναι το χρονομεταβαλλόμενο McCormack.

Στην τρίτη ενότητα εξετάζονται μη γραμμικές χρονομεταβαλλόμενες ροές ενός αερίου. Ειδικότερα εξετάζεται το μεταβατικό πρόβλημα της μη γραμμικής μεταφοράς θερμότητας ανάμεσα σε δύο πλάκες. Επίσης, μελετάται η διατμητική μεταβατική ροή που προκύπτει από την κίνηση των πλακών με ταυτόχρονη μεταφορά θερμότητας. Εφαρμόζονται τα μη γραμμικά κινητικά χρονομεταβαλλόμενα μοντέλα BGK και Shakhov.

Σε κάθε περίπτωση αναπτύσσονται αριθμητικά σχήματα επίλυσης των κινητικών εξισώσεων του χρονομεταβαλλόμενου προβλήματος σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen. Οι υπό εξέταση ροές επιλύονται με τη μέθοδο DVM και ανακτώνται οι μακροσκοπικές ποσότητές τους, των οποίων η χρονική εξέλιξη παρουσιάζεται γραφικά. Επίσης παρουσιάζεται η γραφική αναπαράσταση του συνολικού χρόνου, που απαιτείται να περάσει από την έναρξη της ροής μέχρι αυτή να φτάσει σε ισορροπία, ως προς την παράμετρο αραιοποίησης. Όπου είναι εφικτό, παρουσιάζεται η λύση στο υδροδυναμικό όριο καθώς και η λύση της χρονομεταβαλλόμενης DSMC και γίνεται σύγκρισή αυτών των λύσεων με την λύση του αντίστοιχου αριθμητικού μοντέλου.

Η δομή της διδακτορικής διατριβής είναι η ακόλουθη: Στο Κεφάλαιο 1 παρουσιάζονται γενικά στοιχεία ροών εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας, το αντικείμενο της διατριβής και επιγραμματικά η επιστημονική της συνεισφορά και πρωτοτυπία. Στο Κεφάλαιο 2 γίνεται μια λεπτομερής ανασκόπηση της υπάρχουσας διεθνούς βιβλιογραφίας, που περιλαμβάνει μία σύντομη εισαγωγή

στην κινητική θεωρία, την εξίσωση Boltzmann και τα κινητικά μοντέλα που χρησιμοποιούνται για την απλοποίησή της. Εξετάζονται τα προβλήματα μόνιμων και χρονομεταβαλλόμενων ροών, που έχουν αντιμετωπισθεί έως σήμερα, καθώς και οι μεθοδολογίες που εφαρμόστηκαν για την επίλυσή τους κατά περίπτωση. Στο Κεφάλαιο 3 παρουσιάζονται οι γραμμικές χρονομεταβαλλόμενες ροές ενός μονατομικού αερίου σε παράλληλες πλάκες και σε αγωγούς ορθογώνιας και κυκλικής διατομής. Στο Κεφάλαιο 4 πραγματοποιείται η μελέτη των γραμμικών ροών δυαδικών μίγματος αερίων σε παράλληλες πλάκες και κυλινδρικούς αγωγούς. Στο Κεφάλαιο 5 διερευνώνται η μη γραμμική μετάδοση θερμότητας ανάμεσα σε πλάκες και η μη γραμμική διατμητική ροή ανάμεσα σε κινούμενες μη ισοθερμοκρασιακές πλάκες. Τέλος, στο Κεφάλαιο 6 ανακεφαλαιώνεται συνοπτικά η διατριβή συνοψίζοντας τα κυριότερα σημεία της. Επίσης, προτείνονται συγκεκριμένα αντικείμενα για μελλοντική έρευνα ως επέκταση της παρούσας διατριβής.

1.3 Πρωτοτυπία και επιστημονική συνεισφορά διδακτορικής διατριβής

Η πρωτοτυπία της συγκεκριμένης διδακτορικής διατριβής και η συνεισφορά της στην επιστήμη επικεντρώνεται στην αριθμητική επίλυση μη μόνιμων κινητικών εξισώσεων, που περιγράφουν μεταβατικά φαινόμενα μεταφοράς. Εδραιώνεται κατ' αυτόν τον τρόπο μια γενική μεθοδολογία αντιμετώπισης μεταβατικών ροών και μετάδοσης θερμότητας. Η μεθοδολογία αυτή αποτελεί επέκταση μεθοδολογιών που εφαρμόστηκαν με επιτυχία στο παρελθόν για την επίλυση μόνιμων ροών, διακριτοποιώντας κατάλληλα και στη χρονική διάσταση. Έρχεται να συμπληρώσει τις ήδη υπάρχουσες μεθοδολογίες επίλυσης μεταβατικών ροών της διεθνούς βιβλιογραφίας, παρέχοντας επιπλέον πληροφορίες για το χρονικό διάστημα κατά το οποίο η ροή εξελίσσεται, ξεκινώντας από την ακινησία μέχρι την επίτευξη της μόνιμης κατάστασης. Χαρακτηριστικό της είναι πως δίνει λύσεις σε όλο το εύρος του αριθμού Kn , διαθέτοντας παράλληλα το πλεονέκτημα του χαμηλότερου υπολογιστικού κόστους σε σύγκριση με άλλες μεθοδολογίες. Επίσης, η αντιμετώπιση μεταβατικών ροών μιγμάτων αερίων γίνεται για πρώτη φορά, ενώ η αντιμετώπιση των μη γραμμικών μεταβατικών ροών με κινητική θεωρία είναι επίσης πολύ σημαντική, καθώς η σχετική βιβλιογραφία είναι αρκετά περιορισμένη. Αναπτύσσονται νέοι κώδικες σε γλώσσα προγραμματισμού Fortran

για την αριθμητική επίλυση των μεταβατικών ροών προσαρμοσμένοι στην γεωμετρία της κάθε ροής, καθώς λαμβάνονται υπόψη οι χωρικές διαστάσεις, η αξισυμμετρία κτλ, ώστε να επιτευχθεί βέλτιστη υπολογιστική απόδοση. Αντιμετωπίζονται οι αριθμητικές δυσκολίες που προκύπτουν και επεξηγούνται μεταβατικά φαινόμενα μεταφοράς.

Κεφάλαιο 2

Βιβλιογραφική ανασκόπηση

2.1 Στοιχεία Κινητικής Θεωρίας

Τα τελευταία χρόνια η μελέτη των αραιοποιημένων ροών αερίων (ή ροών εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας) έχει απασχολήσει ιδιαίτερος την επιστημονική κοινότητα, λόγω της πληθώρας των πρακτικών εφαρμογών τους σε κλασικές αλλά και σε νέες εξελισσόμενες περιοχές της βιομηχανίας, όπως τα μικροσυστήματα (MEMS). Η αντιμετώπιση αυτών των ροών γίνεται κατά κύριο λόγο με τις εξισώσεις N-S, με οριακές συνθήκες ολίσθησης, με τη μοριακή δυναμική και με την κινητική θεωρία μέσω της εξίσωσης Boltzmann. Η τελευταία μέθοδος είναι μια στατιστική μέθοδος αντιμετώπισης της ροής και πλεονεκτεί των υπολοίπων καθώς το πεδίο εφαρμογής της είναι ευρύτερο.

Τη θεμελίωση της κινητικής θεωρίας των αερίων έκανε ο Maxwell το 1859 [7], ο οποίος υπολόγισε την έκφραση που περιγράφει την κατανομή των ταχυτήτων των σωματιδίων ενός αερίου, καταρρίπτοντας την μέχρι τότε πεποίθηση ότι όλα τα σωματίδια κινούνται με την ίδια ταχύτητα. Στη συνέχεια ο Boltzmann το 1872 [8] παρουσίασε την ευρέως γνωστή εξίσωση μεταφοράς που φέρει το όνομά του και περιγράφει τη χρονική εξέλιξη της κατανομής των σωματιδίων του αερίου. Η εξίσωση Boltzmann, αν και αρχικά δημιουργήθηκε για την περιγραφή της κατανομής των σωματιδίων σε αραιοποιημένα αέρια, εντούτοις, κατάλληλες γενικεύσεις της βρίσκουν εφαρμογή σε πολύ περισσότερα επιστημονικά πεδία, όπως στη μελέτη της μεταφοράς ηλεκτρονίων σε στερεά σώματα και σε πλάσμα, της μεταφοράς νετρονίων σε πυρηνικούς αντιδραστήρες, της μεταφοράς φωνονίων σε υπέρρευστα και της μετάδοσης ακτινοβολίας στις ατμόσφαιρες των πλανητών και

των αστερών [9].

Η εξίσωση Boltzmann μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να προσδιοριστούν φαινόμενα μεταφοράς φυσικών ποσοτήτων ενός αερίου, όπως η θερμότητα και η ορμή του. Μέσω αυτής μπορούν επίσης να υπολογισθούν χαρακτηριστικές ιδιότητες του αερίου, όπως οι συντελεστές μεταφοράς ιξώδους, θερμικής και ηλεκτρικής αγωγιμότητας (ο τελευταίος υπολογίζεται, αν συμπεριληφθούν και δυνάμεις φορτισμένων σωματιδίων στην εξίσωση).

Η εξίσωση Boltzmann εφαρμόζεται σε αραιά (dilute) αέρια, στα οποία μπορεί να γίνει η υπόθεση της ύπαρξης αποκλειστικά δυαδικών συγκρούσεων ανάμεσα στα σωματίδιά τους. Στηρίζεται στην υπόθεση του μοριακού χάους [10] και στην πλήρη της μορφή μπορεί να γραφεί ως [8, 11, 9]

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} \right) f(t, \mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}) = Q(f), \quad (2.1.1)$$

όπου $f(t, \mathbf{r}, \boldsymbol{\xi})$ είναι η συνάρτηση κατανομής, \mathbf{r} είναι το άνωσμα θέσεως των σωματιδίων εντός $d\mathbf{r}$, $\boldsymbol{\xi}$ το άνωσμα των μοριακών ταχυτήτων εντός $d\boldsymbol{\xi}$, t η μεταβλητή του χρόνου και \mathbf{F} το πεδίο των εξωτερικών δυνάμεων και m η σωματιδιακή μάζα. Τέλος, $Q(f)$ είναι ο μη γραμμικός όρος των σωματιδιακών συγκρούσεων. Η συνάρτηση κατανομής ορίζεται κατά τρόπο, ώστε η ποσότητα $f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t)$ να εκφράζει τον αριθμό των σωματιδίων, που βρίσκονται μέσα στο φασικό χώρο $d\mathbf{r}d\boldsymbol{\xi}$ γύρω από το σημείο $(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi})$ κατά τη χρονική στιγμή t . Η εξίσωση Boltzmann περιγράφει την εξέλιξη της συνάρτησης κατανομής στο φασικό χώρο. Το αριστερό μέλος της αποτελείται από τον όρο μεταφοράς, ο οποίος περιγράφει την κίνηση των σωματιδίων κατά μήκος της τροχιάς τους στο φασικό χώρο και το δεξί μέλος της αποτελείται από τον όρο των συγκρούσεων, ο οποίος εκφράζει τις μεταβολές της ταχύτητας, λόγω των σωματιδιακών συγκρούσεων. Η συμπεριφορά των σωματιδίων κατά τις δυαδικές συγκρούσεις καθορίζεται από το ενδομοριακό δυναμικό. Υπάρχουν αρκετά μοντέλα ενδομοριακού δυναμικού που μπορούν να χρησιμοποιηθούν, όπως το απλό μοντέλο των σκληρών σφαιρών [12] και το πιο σύνθετο μοντέλο των Lennard-Jones [1]. Επίσης σε πολλές περιπτώσεις εισάγεται και το πραγματικό δυναμικό [13], το οποίο στηρίζεται σε πειραματικά δεδομένα. Στην παρούσα διατριβή χρησιμοποιείται αποκλειστικά το μοντέλο των σκληρών σφαιρών.

Μια άλλη σημαντική ιδιότητα της εξίσωσης Boltzmann είναι πως ξεκινώντας από αυτήν μπορούν να αναπαραχθούν οι μακροσκοπικές εξισώσεις διατήρησης μάζας, ορμής και ενέργειας οι οποίες καταλήγουν στις εξισώσεις N-S, αν συμπεριληφθούν οι νόμοι Newton και Fourier [1]. Επί-

σης, η συνάρτηση κατανομής της εξίσωσης Boltzmann ικανοποιεί το θεώρημα H [8, 9, 14], το οποίο είναι αντίστοιχο (και πιο γενικό) του δεύτερου θερμοδυναμικού αξιώματος, και εκφράζει τη χρονική μη αντιστρεψιμότητα των διαδικασιών, που περιγράφονται από την κινητική θεωρία.

Οι μακροσκοπικές ποσότητες της ροής προκύπτουν ως ροπές της συνάρτησης κατανομής f και οι κυριότερες παρουσιάζονται στις ακόλουθες σχέσεις:

Αριθμητική πυκνότητα

$$n(t, \mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t, \mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} \quad (2.1.2)$$

Ταχύτητα

$$\mathbf{u}(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{n(t, \mathbf{r})} \int_{-\infty}^{\infty} \boldsymbol{\xi} f(t, \mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} \quad (2.1.3)$$

Πίεση

$$P(t, \mathbf{r}) = \frac{m}{3} \int_{-\infty}^{\infty} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2 f(t, \mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} \quad (2.1.4)$$

Τανυστής τάσεων

$$P_{\alpha\beta}(t, \mathbf{r}) = m \int_{-\infty}^{\infty} (\xi_{\alpha} - u_{\alpha})(\xi_{\beta} - u_{\beta}) f(t, \mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} \quad (2.1.5)$$

Θερμοκρασία

$$T(t, \mathbf{r}) = \frac{m}{3 k_B n(t, \mathbf{r})} \int_{-\infty}^{\infty} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2 f(t, \mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.1.6)$$

Θερμορροή

$$\mathbf{q}(t, \mathbf{r}) = \frac{m}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2 (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}) f(t, \mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} \quad (2.1.7)$$

Η πυκνότητα του αερίου υπολογίζεται από τη σχέση

$$\rho(t, \mathbf{r}) = m n(t, \mathbf{r}) \quad (2.1.8)$$

ενώ η πίεση, εκτός από την σχέση (2.1.4), μπορεί εναλλακτικά να προκύψει και από την καταστατική εξίσωση των ιδανικών αερίων ως

$$P(t, \mathbf{r}) = n(t, \mathbf{r}) k_B T(t, \mathbf{r}) \quad (2.1.9)$$

Η μη γραμμικότητα του όρου $Q(f)$ των σωματιδιακών συγκρούσεων στο δεξιό μέλος της

ολοκληροδιαφορικής εξίσωσης Boltzmann καθιστά ως και σήμερα αδύνατη την αναλυτική γενική λύση της. Κατά καιρούς έχουν προταθεί και χρησιμοποιηθεί διάφορες μέθοδοι αντιμετώπισης της εξίσωσης Boltzmann, οι οποίες εξαρτώνται κυρίως από το ποσοστό αραιοποίησης της ροής. Στις μεθόδους αυτές συμπεριλαμβάνονται αναλυτικές, ημιαναλυτικές και πλήρως αριθμητικές μέθοδοι. Η μέθοδος Lattice-Boltzmann [15, 16, 17, 18, 19], για παράδειγμα, έχει αντιμετωπίσει αριθμητικά με επιτυχία μεγάλο εύρος ροών, πάντοτε όμως κοντά στο υδροδυναμικό όριο. Αριθμητικές μέθοδοι προσομοίωσης της εξίσωσης Boltzmann, όπως η μέθοδος DSMC [20, 21, 22, 23, 24, 25, 26] ή η μέθοδος TPMC, χρησιμοποιούνται με επιτυχία για μη γραμμικές ή ροές πολύ αραιοποιημένες καθώς παρακάμπτεται στην ουσία η απ' ευθείας επίλυση της εξίσωσης Boltzmann, αναπαράγοντας ωστόσο την ίδια λύση με αυτή. Παρόλα αυτά η κύρια μεθοδολογία που αντιμετωπίζει με ενιαίο τρόπο την εξίσωση Boltzmann σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen, είναι η αριθμητική μέθοδος των διακριτών ταχυτήτων (DVM) [27, 28, 29, 30, 31, 32]. Η μέθοδος DVM χρησιμοποιήθηκε αποκλειστικά στην παρούσα διατριβή.

Η αριθμητική επίλυση της πλήρους εξίσωσης Boltzmann είναι εφικτή μόνον υπό προϋποθέσεις και μάλιστα κυρίως στην ελεύθερη μοριακή περιοχή, όπου ο όρος των συγκρούσεων μηδενίζεται. Για το λόγο αυτό προτάθηκαν κατά καιρούς διάφορα κινητικά μοντέλα, τα οποία απλοποιούν τον όρο $Q(f)$ κάνοντας ορισμένες παραδοχές, καθιστώντας κατ' αυτόν τον τρόπο εφικτή την αριθμητική επίλυση της εξίσωσης Boltzmann σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen. Τα κινητικά μοντέλα θα πρέπει να ικανοποιούν τους νόμους διατηρησιμότητας και το θεώρημα H, καθώς και να οδηγούν στο σωστό υπολογισμό των συντελεστών μεταφοράς.

Το βασικότερο και απλούστερο μοντέλο προτάθηκε από τους Bhatnagar, Gross και Krook το 1954 [33] και είναι γνωστό με την ονομασία BGK. Στο μοντέλο BGK ο όρος των σωματιδιακών συγκρούσεων γράφεται ως

$$Q(f) = \nu \left(f_{loc}^M(n, T, \mathbf{u}) - f(t, \mathbf{r}, \xi) \right), \quad (2.1.10)$$

όπου ν είναι η συχνότητα των συγκρούσεων και f_{loc}^M είναι η τοπική κατανομή Maxwell, η οποία εκφράζει την κατάσταση της τοπικής θερμοδυναμικής ισορροπίας. Η σχέση (2.1.10) δηλώνει το γεγονός ότι έπειτα από κάθε σύγκρουση η συνάρτηση κατανομής “χαλαρώνει” και προσεγγίζει την τοπική κατανομή Maxwell με ρυθμό ν . Το μοντέλο BGK εφαρμόζεται κυρίως σε ισοθερμοκρασιακές ροές, καθώς το βασικό μειονέκτημά του είναι πως δεν παρέχει το σωστό αριθμό Prandtl για

μονοατομικά αέρια. Αν επιλεγεί $\nu = P/\mu$, όπως προκύπτει από την ανάπτυξη Chapman-Enskog της f [34, 9, 6], τότε το BGK δίνει τη σωστή τιμή του συντελεστού ιξώδους, αλλά όχι τη σωστή τιμή του συντελεστού θερμικής αγωγιμότητας. Το αντίθετο συμβαίνει αν επιλεγεί $\nu = \frac{2}{3} \frac{P}{\mu}$, όπου παρέχεται μεν η σωστή τιμή του συντελεστού θερμικής αγωγιμότητας, αλλά όχι και η σωστή τιμή του συντελεστού ιξώδους.

Ένα άλλο, πιο σύνθετο κινητικό μοντέλο, το οποίο όμως έχει το πλεονέκτημα ότι μπορεί να εφαρμοσθεί και σε μη ισοθερμοκρασιακές ροές, είναι αυτό που προτάθηκε από τον Shakhon το 1974 [35] και φέρει το όνομά του (ή για συντομία καλείται μοντέλο S). Στο μοντέλο αυτό ο όρος των σωματιδιακών συγκρούσεων γράφεται ως

$$Q(f) = \nu \left\{ f_{loc}^M(n, T, \mathbf{u}) \left[1 + \frac{2m}{15n(k_B T)^2} \mathbf{q} \cdot (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}) \left(\frac{m(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2}{2k_B T} - \frac{5}{2} \right) \right] - f(t, \mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}) \right\} \quad (2.1.11)$$

Σημειώνεται ότι τα μοντέλα BKG και Shakhon, όπως περιγράφονται με τις σχέσεις (2.1.10) και (2.1.11) είναι μη γραμμικά. Κάτω από συγκεκριμένες προϋποθέσεις, όταν οι μεταβολές στην κατανομή f είναι μικρές, όπως για παράδειγμα όταν έχουμε αραιοποιημένες ροές αερίων σε αγωγούς μεγάλου μήκους, οι κινητικές εξισώσεις των μοντέλων μπορούν να γραμμικοποιηθούν. Το ίδιο γίνεται, αντίστοιχα, και με τις εξισώσεις των ροπών της f (2.1.2) έως (2.1.7), που παρέχουν τις μακροσκοπικές ποσότητες της ροής. Στη συνέχεια, για την αριθμητική επίλυσή τους, οι εξισώσεις αδιαστατοποιούνται και εφαρμόζεται, ανάλογα με τη γεωμετρία της ροής, μια διαδικασία προβολής των μοριακών ταχυτήτων σε χώρο μικρότερης τάξης, με στόχο τη μείωση των διακριτοποιημένων εξισώσεων που προκύπτουν. Η διαδικασία γραμμικοποίησης, αδιαστατοποίησης και προβολής του μοντέλου BGK, καθώς και των μακροσκοπικών εξισώσεων για ροή ανάμεσα σε πλάκες, περιγράφεται στο Παράρτημα Α. Επισημαίνεται πως τα μοντέλα BGK και Shakhon στη μη γραμμική τους μορφή ικανοποιούν τους νόμους διατηρησιμότητας, καθώς και το θεώρημα H. Το ίδιο συμβαίνει και με το γραμμικοποιημένο BKG. Αντιθέτως, το μοντέλο Shakhon στη μη γραμμικοποιημένη του μορφή αποτυγχάνει να ικανοποιήσει το θεώρημα H.

Για τις γραμμικές ροές μιγμάτων αερίων σε αγωγούς το πιο αποτελεσματικό κινητικό μοντέλο που χρησιμοποιείται είναι το μοντέλο McCormack [36], όπου το κάθε συστατικό του μίγματος περιγράφεται από τη δική του κινητική εξίσωση. Οι εξισώσεις του μοντέλου McCormack παρουσιάζονται στο Κεφάλαιο 4. Σημειώνεται ότι το μοντέλο McCormack ικανοποιεί τους νόμους

διατηρησιμότητας καθώς και το θεώρημα H. Επιπλέον παρέχει τους σωστούς συντελεστές μεταφοράς.

Τέλος, πρέπει να γίνει η μοντελοποίηση των οριακών συνθηκών, που θα συνοδεύουν την εξίσωση Boltzmann. Για την περιγραφή της αλληλεπίδρασης του αερίου με τα τοιχώματα χρησιμοποιούνται κυρίως τρία μοντέλα. Το μοντέλο πλήρους διάχυσης [9], το μοντέλο Maxwell διάχυσης-ανάκλασης [37, 38] και το μοντέλο Cercignani-Lampis [39, 40, 41]. Στην παρούσα διατριβή γίνεται αποκλειστική χρήση των οριακών συνθηκών πλήρους διάχυσης, όπου τα σωματίδια που φτάνουν στο τοίχωμα απορροφώνται από αυτό, “χάνουν τη μνήμη τους”, και στην συνέχεια επανεκπέμπονται ακολουθώντας την κατανομή Maxwell με παραμέτρους τις μακροσκοπικές ποσότητες του τοιχώματος. Επίσης, στα τοιχώματα γίνεται χρήση και της συνθήκης μη-διαπερατότητας κατά την οποία η κάθετη στο τοίχωμα συνιστώσα της μακροσκοπικής ταχύτητας του αερίου μηδενίζεται πάνω σε αυτό.

2.2 Μόνιμες ροές

Με τη χρήση της κινητικής θεωρίας έχει διερευνηθεί μέχρι σήμερα μια μεγάλη γκάμα ροών. Οι ροές αυτές είναι στην πλειοψηφία τους μόνιμες ροές, όπου οι κινητικές εξισώσεις απλοποιούνται με την απαλοιφή της παραμέτρου του χρόνου. Οι μόνιμες αραιοποιημένες ροές σε αγωγούς μεγάλου και μικρού μήκους, ή οι ροές διαμέσου σχισμών ορθογώνιας ή κυκλικής διατομής έχουν μελετηθεί διεξοδικά. Έχουν χρησιμοποιηθεί διάφορες μέθοδοι επίλυσης.

Χαρακτηριστικές ροές σε αγωγούς μεγάλου μήκους περιλαμβάνουν τη ροή Poiseuille σε πλάκες [42, 43, 44] και σε κυλινδρικούς αγωγούς [45, 46, 47, 6, 48], τη ροή Couette ανάμεσα σε πλάκες και ομοαξονικούς κυλίνδρους [49, 50] και τη ροή θερμικού ερπυσμού [51, 52, 53, 54]. Η ροή μάζας από την ψυχρή προς τη θερμή περιοχή, που δημιουργείται λόγω αραιοποίησης, με την επιβολή μιας βαθμίδας θερμοκρασίας κατά μήκος του αγωγού, είναι γνωστή ως θερμικός ερπυσμός και έχει επίσης μελετηθεί. Γενικώς οι ροές σε αγωγούς μεγάλου μήκους μπορούν να γραμμικοποιηθούν. Σε αγωγούς μικρού μήκους, αντιθέτως, τα φαινόμενα στα άκρα τους δεν μπορούν να αγνοηθούν και οι ροές δεν θεωρούνται πλήρως ανεπτυγμένες. Συνήθως τέτοιες ροές είναι μη γραμμικές. Μπορούν όμως και αυτές να γραμμικοποιηθούν αν η κλίση πίεσης που τις δημιουργεί

είναι πολύ μικρή. Επίσης το υπολογιστικό πεδίο γίνεται πιο σύνθετο καθώς στην είσοδο και έξοδο του αγωγού δεν ισχύει η κατανομή Maxwell με αποτέλεσμα να είναι αναγκαίο να ληφθούν υπολογιστικά υπόψη αρκετά μεγάλες περιοχές εκατέρωθεν του αγωγού. Τέτοιες ροές που έχουν επιλυθεί αφορούν σε κυλινδρικούς αγωγούς που συνδέουν δύο δεξαμενές [55, 56, 57, 58, 59], σε σχισμές ή οπές [60, 61, 57, 62, 63] και σε ακροφύσια [64, 65, 66, 67]. Περνώντας σε πιο σύνθετες γεωμετρίες, άλλες ροές που έχουν μελετηθεί περιλαμβάνουν ροές σε κοιλότητες [68, 69, 70, 71], και σε κανάλια με αυλακώσεις [5, 72]. Επίσης συμπεριλαμβάνονται ροές με φαινόμενα συμπίκνωσης και εξάτμισης [73, 74, 75]. Τέλος, ροές μιγμάτων αερίων που έχουν αντιμετωπισθεί περιλαμβάνουν ροές σε πλάκες [76, 77, 78, 79], ροές σε κυλινδρικούς αγωγούς [80, 81, 82], ροές διαμέσου οπών [83] και ροές θερμικού ερπυσμού [84].

2.3 Μεταβατικές ροές

Στις περισσότερες περιπτώσεις, όπως αναφέρθηκε και πιο πάνω, η κινητική προσέγγιση των ροών αφορά σε μόνιμες ροές. Οι μεταβατικές ροές, ωστόσο, έχουν επίσης θεωρητικό ενδιαφέρον και συναντώνται σε διάφορα πρακτικά προβλήματα και είναι ιδιαίτερης σημασίας στη βιομηχανία. Για παράδειγμα, στην περίπτωση των ροών σε συνθήκες κενού, χρονομεταβαλλόμενες ροές εμφανίζονται λόγω μιας απότομης αλλαγής, η οποία οφείλεται σε μια επιβαλλόμενη κλίση πίεσης που δημιουργείται με το άνοιγμα ή το κλείσιμο μιας αντλίας ή βαλβίδας. Αν και οι πρώτες σχετικές εργασίες δημοσιεύθηκαν τη δεκαετία του 60, εντούτοις μόλις πρόσφατα άρχισε να αναθερμαίνεται το ενδιαφέρον της επιστημονικής κοινότητας για την διεξοδικότερη μελέτη σε θεωρητική και πειραματική βάση των χρονομεταβαλλόμενων ροών αερίων. Κάποιες μη μόνιμες ροές που έχουν επιλυθεί με τη χρήση γραμμικοποιημένων κινητικών εξισώσεων, περιλαμβάνουν τις χρονομεταβαλλόμενες ροές Couette [85], Stokes [86] και Raleigh [87]. Επίσης μεταβατικές λύσεις στην περιοχή ολίσθησης έχουν υπολογισθεί για ροές σε ορθογώνιους αγωγούς μικρής διάστασης μέσω των εξισώσεων Navier Stokes με οριακές συνθήκες ολίσθησης [88].

Το 1962 ο Nichols [89] μοντελοποίησε τη μεταβατική ροή ενός συμπιεστού ιδανικού αερίου σε κυλινδρικό αγωγό. Υπό την επίδραση ημιτονοειδούς παλμού η ταχύτητα υπολογίστηκε ως ανάπτυγμα συναρτήσεων Bessel. Αργότερα δημοσιεύθηκαν σχετικά πειραματικά δεδομένα [90], τα

οποία βρέθηκαν σε πολύ καλή συμφωνία με τα θεωρητικά. Η ροή σε αγωγούς ορθογώνιας διατομής σε αντίστοιχο πρόβλημα με αυτό που αντιμετώπισε ο Nichols, μελετήθηκε από τον Schaedel, ο οποίος δημιούργησε ένα μοντέλο υπολογισμού της ταχύτητας βασισμένου σε ανάπτυγμα Fourier [91]. Τα δύο μοντέλα, αυτά των Nichols και Schaedel, συγκρίθηκαν πειραματικά σε ροές σε αγωγούς με ισοδύναμη υδραυλική διάμετρο [92]. Τα πειραματικά δεδομένα κατέδειξαν ότι το μοντέλο του Nichols είχε κάποια απόκλιση για αγωγούς μικρού μήκους 0.5mm, ενώ για αγωγούς με μήκος 0.7mm υπήρχε καλλίτερη αντιστοιχία. Σε άλλη εργασία διατηρήθηκαν οι μη γραμμικοί όροι στις εξισώσεις συνέχειας και ορμής για μεταβατικές ροές με μεγάλη διακύμανση της πίεσης [93].

Ο Sone μελέτησε την επίδραση της μικρής και απότομης αλλαγής της θερμοκρασίας στη μετάδοση θερμότητας αραιωποιημένου αερίου. Χρησιμοποίησε το μοντέλο BGK για τον υπολογισμό της πυκνότητας και της θερμοκρασίας [94]. Στη συνέχεια οι Kassoy [95] και Radhwan [96] μελέτησαν την αντίδραση ενός αερίου σε μια αργή ή απότομη θερμική διαταραχή των τοιχωμάτων στο συνεχές όριο. Ο Collin το 1998 [88] αντιμετώπισε το πρόβλημα της ροής σε αγωγούς ορθογώνιας διατομής μικρών διαστάσεων με επιβολή ταλαντωτικών οριακών συνθηκών με την επίλυση της εξίσωσης Boltzmann με οριακές συνθήκες ολίσθησης. Μέχρι τότε η μελέτη των ροών σε κανάλια μικρών διαστάσεων αφορούσε κυρίως σε ροές κοντά στο υδροδυναμικό όριο, ενώ η μελέτη των μεταβατικών ροών στην περιοχή ολίσθησης ήταν αρκετά περιορισμένη [97, 98, 99]. Η μεταβατική ροή Couette με ταυτόχρονη μετάδοση θερμότητας ανάμεσα σε δύο ομοαξονικούς κυλίνδρους αντιμετωπίζεται στην εργασία του Abourabia [100], όπου εκτός του υπολογισμού των μακροσκοπικών ποσοτήτων γίνεται μελέτη της ροής υπό την οπτική γωνία της θερμοδυναμικής μη αντιστρεψιμότητας, με την εκτίμηση της εντροπίας και άλλων θερμοδυναμικών μεγεθών. Για την περιγραφή της ροής χρησιμοποιείται το μοντέλο BGK, το οποίο επιλύεται αναλυτικά με τη μέθοδο των ροπών.

Το πρόβλημα της κίνησης ενός αερίου, το οποίο βρίσκεται περιορισμένο σε ένα μικρής κλίμακας άνοιγμα λόγω ενός στιγμιαίου θερμοκρασιακού άλματος μικρού μεγέθους στα τοιχώματα, μελετήθηκε από τους Manela και Χατζικωνσταντίνου για την ελεύθερη μοριακή περιοχή παρέχοντας αναλυτική λύση για τη συνάρτηση κατανομής [101]. Τέτοια προβλήματα μεταφοράς θερμότητας έχουν ευρεία χρήση σε MEMS [102]. Αντίστοιχα προβλήματα επιλύθηκαν με τη χρήση ολοκληρωτικών εξισώσεων [103] και της μεθόδου DSMC [104] από άλλους ερευνητές. Επίσης

μελετήθηκε το ίδιο πρόβλημα αλλά με σταδιακή ή παλμική επιβολή θερμότητας στα τοιχώματα [105]. Σε πιο πρόσφατα άρθρα του ο Manela μελέτησε την αντίδραση ενός αερίου σε περιοδική επιβολή θερμότητας στα τοιχώματα. Η ροή επιλύεται αναλυτικά κοντά στο υδροδυναμικό όριο με τη χρήση των εξισώσεων N-S με οριακές συνθήκες ολίσθησης [106], ενώ κοντά στην περιοχή ολίσθησης παρέχονται αναλυτικά αποτελέσματα με τη χρήση του μετασχηματισμού Fourier [107]. Παράλληλα, ο Doi ασχολήθηκε με τη μεταφορά ενέργειας και ορμής σε αραιοποιημένο αέριο που βρίσκεται ανάμεσα σε πλάκες, καθώς η μια πλάκα υφίσταται ταλαντωτική θέρμανση [108]. Η λύση δίνεται βάσει της γραμμικοποιημένης εξίσωσης Boltzmann.

Οι Sharipov και Kalempa μελέτησαν το πρόβλημα της ροής σε ημιάπειρο χωρίο κοντά σε πλάκα που ταλαντεύεται κατά το μήκος της, χρησιμοποιώντας οριακές συνθήκες Cercignani-Lampis [86]. Η επίλυση γίνεται με τις μεθόδους των ολοκληρωτικών ροπών και των διακριτών ταχυτήτων. Η λύση εξαρτάται από το λόγο της συχνότητας συγκρούσεων ως προς τη συχνότητα ταλάντωσης της πλάκας, καθώς και από την αλληλεπίδραση του αερίου με το τοίχωμα. Οι ίδιοι ερευνητές μελέτησαν και τη ροή Couette που οφείλεται σε ταλαντωτικές οριακές συνθήκες χρησιμοποιώντας τη μέθοδο διακριτών ταχυτήτων [109]. Επέκτειναν την δουλειά που είχε γίνει προηγουμένως από άλλους ερευνητές και αφορούσε στο ίδιο πρόβλημα, όπου η λύση ωστόσο δινόταν με τη μέθοδο DSMC [110, 111].

Ένα άλλο ενδιαφέρον πρόβλημα, με πρακτική εφαρμογή κυρίως σε μικροδιατάξεις, είναι αυτό της μετάδοσης ηχητικών κυμάτων σε αραιοποιημένα αέρια [112, 113, 114, 115]. Για παράδειγμα τα ηχητικά κύματα μπορούν να δημιουργηθούν από τοίχωμα που πάλλεται κάθετα στο επίπεδό του. Στο πρόβλημα αυτό η ταχύτητα ταλάντωσης χαρακτηρίζεται από την παράμετρο ταλάντωσης, η οποία ορίζεται ως ο λόγος της συχνότητας των μοριακών συγκρούσεων ως προς την συχνότητα του ηχητικού κύματος. Διακρίνονται τρεις περιοχές ταλάντωσης. Η πρώτη είναι η περιοχή χαμηλών ταχυτήτων ταλάντωσης, στην οποία συμβαίνουν πολλές μοριακές συγκρούσεις κατά τη διάρκεια ενός ταλαντωτικού κύκλου. Σε αυτή την περιοχή η αντιμετώπιση του προβλήματος μπορεί να γίνει με την κλασική προσέγγιση των εξισώσεων N-S, καθώς θεωρείται συνεχής, αλλά και πάλι αυτό είναι εφικτό μόνον έξω από το οριακό στρώμα Knudsen. Η δεύτερη περιοχή είναι η περιοχή υψηλών ταχυτήτων ταλάντωσης, στην οποία συμβαίνουν ελάχιστες συγκρούσεις κατά τη διάρκεια ενός ταλαντωτικού κύκλου. Εδώ μπορεί να δοθεί αναλυτική λύση. Η τρίτη περιοχή είναι

η μεταβατική περιοχή στην οποία οι συχνότητες των συγκρούσεων και της ταλάντωσης είναι της ίδιας τάξης μεγέθους. Σε αυτή την περιοχή η λύση προκύπτει με χρονομεταβαλλόμενες κινητικές εξισώσεις [116]. Επέκταση του ίδιου προβλήματος, όπου στη διάταξη υπάρχει και ένας δέκτης των ηχητικών κυμάτων, πραγματοποιήθηκε με το χρονομεταβαλλόμενο μοντέλο Shakhon και την μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων [117].

Στην περίπτωση των αγωγών μικρού μήκους, ο Sharipov χρησιμοποίησε τη μέθοδο DSMC για την επίλυση μη μόνιμων αραιοποιημένων ροών σε κυλινδρικό αγωγό μικρού μήκους [118] και διαμέσου κυκλικής οπής [119]. Επίσης, ένα υβριδικό μοντέλο επίλυσης των κινητικών εξισώσεων χρησιμοποιήθηκε για την επίλυση ροών σε κυλινδρικούς αγωγούς μικρού μήκους [120]. Το μοντέλο χρησιμοποιεί σε κάθε χρονικό βήμα τη μέθοδο DSMC για τον υπολογισμό των παροχών μέσω των κινητικών εξισώσεων, και στη συνέχεια υπολογίζει τις μακροσκοπικές εξισώσεις χρησιμοποιώντας την εξίσωση διατήρησης της μάζας σε μακροσκοπικό επίπεδο. Με τη μεθοδολογία αυτή μειώνεται δραστικά ο υπολογιστικός χρόνος που απαιτείται για την επίλυση της ροής μόνον με κινητική θεωρία. Η χρήση του υβριδικού μοντέλου επεκτείνεται και σε ροές εκτόνωσης μιγμάτων προς κενό δια μέσου κυλινδρικού αγωγού μικρού μήκους [121]. Αντίστοιχη έρευνα έγινε και στο Physikalisch-Technische Bundesanstalt, όπου αναπτύχθηκε μια πρότυπη διάταξη για τη μελέτη απότομης εκτόνωσης αερίου από μια αρχική πίεση προς το κενό (πολύ χαμηλή πίεση), με στόχο τον έλεγχο της αντίδρασης δυναμικών αισθητήρων πίεσης [122].

Γίνεται λοιπόν φανερό, πως λίγες εργασίες αφορούν στη μελέτη χρονομεταβαλλόμενων ροών σε αγωγούς μεγάλου μήκους με τη χρήση της κινητικής θεωρίας και της αριθμητικής λύσης των κινητικών εξισώσεων σε όλο το εύρος του αριθμού Kn. Ειδικότερα, στην περίπτωση των μιγμάτων υπάρχουν ακόμη λιγότερες αναφορές. Οι συγκεκριμένες ροές θεωρούνται πρότυπες και τα αποτελέσματά τους μπορούν να αποτελέσουν μέτρο σύγκρισης για δημιουργία νέων μεθοδολογιών και τεχνικών επίλυσης των κινητικών εξισώσεων. Πρόσφατα, έχει προταθεί μια ενιαία μεθοδολογία αντιμετώπισης παρόμοιων ροών σε αγωγούς μικρών διατομών από τους Sharipov και Graur [123].

Μέρος του σχετικού κενού της βιβλιογραφίας πάνω στις συγκεκριμένες ροές, έρχεται να καλύψει και η συγκεκριμένη διατριβή, αποτελέσματα της οποίας έχουν δημοσιευθεί κατά καιρούς σε συνέδρια και περιοδικά [124, 125, 126].

Κεφάλαιο 3

Γραμμικές χρονομεταβαλλόμενες αραιοποιημένες ροές αερίων

3.1 Εισαγωγή

Εξετάζονται χρονομεταβαλλόμενες γραμμικές πλήρως ανεπτυγμένες ροές μονατομικών αερίων σε αγωγούς μεγάλου μήκους, οφειλόμενες σε βαθμίδα πίεσης κατά μήκους του πεδίου ροής, καθώς και ροές οφειλόμενες σε κίνηση των τοιχωμάτων. Οι ροές που μελετώνται είναι σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen και περιλαμβάνουν τη ροή Poiseuille ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες και σε αγωγούς κυλινδρικής και ορθογωνικής διατομής καθώς και τη ροή Couette ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες. Τα αριθμητικά αποτελέσματα προκύπτουν με την επίλυση γραμμικών κινητικών εξισώσεων και είναι έγκυρα σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen ή, αντιστοίχως, της παραμέτρου αραιοποίησης δ . Η μελέτη εστιάζεται στον υπολογισμό της συνάρτησης κατανομής, από την οποία είναι δυνατόν να προκύψουν όλα τα μακροσκοπικά μεγέθη όπως η ταχύτητα, η πυκνότητα, η θερμοκρασία, κ.τ.λ. Επίσης, βάσει των μακροσκοπικών κατανομών, υπολογίζονται η παροχή και η μέση διατμητική τάση στα τοιχώματα του αγωγού.

Η αριθμητική επίλυση πραγματοποιείται, με την εφαρμογή της μεθόδου των διακριτών ταχυτήτων (DVM) στην αντίστοιχη γραμμική κινητική εξίσωση. Ο βασικός άγνωστος στην εκάστοτε κινητική εξίσωση είναι η συνάρτηση κατανομής, η οποία στην γενική περίπτωση είναι συνάρτηση επτά ανεξάρτητων μεταβλητών: τριών χωρικών, τριών συνιστωσών της μοριακής ταχύτητας και της μεταβλητής του χρόνου. Ανάλογα με τη γεωμετρία, οι τρεις χωρικές ανεξάρτητες μεταβλητές είναι δυνατόν να μειωθούν με την εφαρμογή παραδοχών μονοδιάστατου ή δισδιάστατου

προβλήματος, αξονοσυμμετρικής ροής κ.α. Επιπλέον για τη μείωση του αριθμού των μοριακών ταχυτήτων εφαρμόζεται η διαδικασία προβολής, με αποτέλεσμα να μειώνεται σημαντικά ο αναγκαίος υπολογιστικός χρόνος.

3.2 Ροές Poiseuille ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες

Στη χρονομεταβαλλόμενη ροή Poiseuille ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες θεωρούμε ένα αραιοποιημένο αέριο, το οποίο αρχικά βρίσκεται σε ηρεμία ανάμεσα σε δύο παράλληλες πλάκες, που είναι τοποθετημένες στη θέση $y' = \pm H/2$, όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.1. Το μήκος των πλακών συμβολίζεται με L . Υποθέτουμε επίσης ότι ισχύει $H/L \ll 1$, ώστε να μπορούν να αγνοηθούν φαινόμενα εισόδου/εξόδου στα άκρα του πεδίου ροής και η ροή να θεωρηθεί πλήρως ανεπτυγμένη. Κατά συνέπεια το προφίλ της ταχύτητας δεν μεταβάλλεται κατά μήκος της ροής στη διεύθυνση x' . Αντίθετα, μεταβάλλεται στη διεύθυνση y' και ως προς το χρόνο t' . Τη χρονική στιγμή $t' = 0$, εφαρμόζεται ξαφνικά μια ομοιόμορφη βαθμίδα πίεσης στην κατεύθυνση x' παράλληλα προς τις πλάκες. Ως αποτέλεσμα, προκύπτει μια χρονικά εξελισσόμενη πλήρως ανεπτυγμένη αραιοποιημένη ροή κατά την αξονική κατεύθυνση, η οποία σιγά σιγά, καθώς $t' \rightarrow \infty$, προσεγγίζει την αντίστοιχη μόνιμη ροή Poiseuille. Η θερμοκρασία διατηρείται σταθερή κατά μήκος του πεδίου ροής. Στόχος μας είναι η επίλυση αυτού του μεταβατικού προβλήματος σε όλο το εύρος της παραμέτρου αραιοποίησης. Για τη σύγκριση των αποτελεσμάτων, υπολογίζεται και παρουσιάζεται η αναλυτική λύση του προβλήματος Poiseuille στο υδροδυναμικό όριο (παράγραφος 3.6).

Η παράμετρος αραιοποίησης που χαρακτηρίζει τη συγκεκριμένη ροή ορίζεται ως

$$\delta = \frac{P_0 H}{\mu_0 v_0} \approx \frac{1}{Kn}, \quad (3.2.1)$$

όπου P_0 είναι μια πίεση αναφοράς, μ_0 είναι το ιξώδες του αερίου στη θερμοκρασία αναφοράς T_0 και $v_0 = \sqrt{2RT_0}$ είναι η πιο πιθανή μοριακή ταχύτητα, με R να δηλώνει τη σταθερά του αερίου. Η παράμετρος αραιοποίησης είναι αντιστρόφως ανάλογη του αριθμού Knudsen (Kn). Οι τιμές $\delta = 0$ και $\delta \rightarrow \infty$ αντιστοιχούν στην ελεύθερη μοριακή ροή και στην υδροδυναμική ροή αντίστοιχα.

Η αδιαστατοποίηση των χωρικών μεταβλητών x' και y' γίνεται με την απόσταση H μεταξύ

των πλακών, ενώ της χρονικής μεταβλητής t' με τον λόγο H/v_0 :

$$y = \frac{y'}{H}, \quad x = \frac{x'}{H}, \quad t = \frac{t'v_0}{H}. \quad (3.2.2)$$

Η ποσότητα $/v_0$ είναι ο χαρακτηριστικός χρόνος μεταβολής της ροής. Η ομοιόμορφη βαθμίδα πίεσης, που εφαρμόζεται ξαφνικά στο πεδίο και προκαλεί τη ροή κατά την αξονική κατεύθυνση, ορίζεται ως

$$X_P = \frac{H}{P_0} \frac{dP}{dx'} = \frac{1}{P_0} \frac{dP}{dx}. \quad (3.2.3)$$

Στη συγκεκριμένη ροή, η μόνη συνιστώσα της μακροσκοπικής ταχύτητας, η οποία είναι διάφορη του μηδενός, είναι η συνιστώσα κατά την αξονική κατεύθυνση και συμβολίζεται με $u' = u'(t', y')$.

Η μακροσκοπική ταχύτητα αδιαστατοποιείται ως

$$u(t, y) = \frac{u'}{v_0 X_P}. \quad (3.2.4)$$

Για τη μοντελοποίηση των ροών χρησιμοποιήθηκαν τα χρονομεταβαλλόμενα γραμμικοποιημένα μοντέλα BGK και Shakhov. Το πρώτο εξ αυτών μετά τη γνωστή διαδικασία της προβολής παίρνει τη μορφή

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + c_y \frac{\partial Y}{\partial y} + \delta Y = \delta u(t, y) - \frac{1}{2}. \quad (3.2.5)$$

Η διαδικασία γραμμικοποίησης και προβολής του μοντέλου BGK για τη ροή Poiseuille σε παράλληλες πλάκες παρουσιάζεται αναλυτικά στο Παράρτημα Α. Στην εξίσωση (3.2.5) $Y = Y(t, y, c_y)$ είναι η άγνωστη συνάρτηση κατανομής και οι τρεις αδιάστατες ανεξάρτητες μεταβλητές περιλαμβάνουν τη μεταβλητή του χρόνου $t > 0$, τη χωρική μεταβλητή $-1/2 < y < 1/2$ και την y -συνιστώσα της μοριακής ταχύτητας $c_y \in (-\infty, \infty)$. Επίσης, δ είναι η παράμετρος αραιοποίησης, η οποία ορίζεται στην εξίσωση (3.2.1). Τέλος, ο τελευταίος όρος, δηλαδή το $1/2$, είναι ο όρος πηγής και οφείλεται στη βαθμίδα πίεσης X_p . Η μακροσκοπική ταχύτητα $u(t, y)$ δίνεται από την ροπή

$$u(t, y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} Y(t, y, c_y) e^{-c_y^2} dc_y. \quad (3.2.6)$$

Σημειώνεται ότι με την επίλυση του συστήματος των εξισώσεων (3.2.5) και (3.2.6) η αδιάστατη μακροσκοπική ταχύτητα προκύπτει πάντοτε με αρνητικό πρόσημο. Το πρόσημο της διαστατής μακροσκοπικής ταχύτητας καθορίζεται με βάση τη σχέση (3.2.4) από το πρόσημο του X_p και

είναι αντίθετο προς αυτό.

Αντίστοιχα το χρονομεταβαλλόμενο γραμμικοποιημένο κινητικό μοντέλο Shakhon, μετά τη διαδικασία της προβολής παίρνει τη μορφή

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + c_y \frac{\partial \Phi}{\partial y} + \delta \Phi = \delta \left\{ u + \frac{1}{15} q \cdot (2c_y^2 - 1) \right\} - \frac{1}{2} \quad (3.2.7)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} + c_y \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \delta \Psi = \delta \left(\frac{4}{15} q \right). \quad (3.2.8)$$

Εδώ, $\Phi = \Phi(t, y, c_y)$ και $\Psi = \Psi(t, y, c_y)$ είναι οι συναρτήσεις κατανομής, ενώ το μοντέλο συμπεριλαμβάνει τις μακροσκοπικές ποσότητες της ταχύτητας u και της θερμότητας q , οι οποίες ορίζονται αντίστοιχα ως:

$$u(t, y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(t, y, c_y) e^{-c_y^2} dc_y \quad (3.2.9)$$

και

$$q(t, y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\Psi(t, y, c_y) + \left(c_y^2 - \frac{1}{2} \right) \Phi(t, y, c_y) \right] e^{-c_y^2} dc_y \quad (3.2.10)$$

Η διατύπωση του προβλήματος ολοκληρώνεται με την υλοποίηση των οριακών και αρχικών συνθηκών. Οι οριακές συνθήκες πλήρους διάχυσης του Maxwell για το μοντέλο BGK δίνονται από τις σχέσεις

$$Y(t, -1/2, c_y) = 0, \quad c_y > 0, \quad Y(t, 1/2, c_y) = 0, \quad c_y < 0, \quad (3.2.11)$$

ενώ για το μοντέλο Shakhon δίνονται από τις σχέσεις

$$\Phi(t, -1/2, c_y) = 0, \quad c_y > 0, \quad \Phi(t, 1/2, c_y) = 0, \quad c_y < 0, \quad (3.2.12)$$

$$\Psi(t, -1/2, c_y) = 0, \quad c_y > 0, \quad \Psi(t, 1/2, c_y) = 0, \quad c_y < 0, \quad (3.2.13)$$

Η αρχική συνθήκη για το μοντέλο BGK διατυπώνεται ως

$$Y(0, y, c_y) = 0 \quad (3.2.14)$$

ενώ για το μοντέλο Shakhon ως

$$\Phi(0, y, c_y) = 0, \quad \Psi(0, y, c_y) = 0. \quad (3.2.15)$$

Στη ροή Poiseuille ενδιαφέρει κυρίως ο υπολογισμός της χρονικά εξελισσόμενης αδιάστατης

παροχής, η οποία ορίζεται ως

$$G(t) = 2 \int_{-1/2}^{1/2} u(t, y) dy, \quad (3.2.16)$$

Η επίλυση των ολοκληρο-διαφορικών εξισώσεων (3.2.5) και (3.2.6) με οριακές συνθήκες τις (3.2.11) και αρχική συνθήκη την (3.2.14) για το μοντέλο BGK, καθώς και των εξισώσεων (3.2.7) έως (3.2.10) με οριακές συνθήκες τις (3.2.12) και (3.2.13) και αρχική συνθήκη την (3.2.15) για το μοντέλο Shakhov, επιτυγχάνεται με ένα ντετερμινιστικό αριθμητικό σχήμα, στο οποίο όλοι οι χώροι διακριτοποιούνται κατάλληλα. Για τη διακριτοποίηση στο χώρο των μοριακών ταχυτήτων χρησιμοποιείται η μέθοδος των διακριτών ταχυτήτων (DVM), η οποία έχει χρησιμοποιηθεί εκτενώς στο παρελθόν για την επίλυση μόνιμων ροών. Κατά τη μέθοδο αυτή, το συνεχές φάσμα $c_y \in (-\infty, \infty)$ αντικαθίσταται από ένα σύνολο διακριτών ταχυτήτων c_{ym} , $m = 1, 2, \dots, M$, οι οποίες επιλέγονται να είναι οι ρίζες του πολυνύμου Legendre βαθμού M , απεικονιζόμενες κατάλληλα στο διάστημα που μας ενδιαφέρει. Στην παρούσα μελέτη δοκιμάστηκαν διάφορα αριθμητικά σχήματα διακριτοποίησης στο χρόνο και το φυσικό χώρο, τα οποία προσεγγίζουν τις παραγώγους με τη χρήση πεπερασμένων διαφορών. Αρχικά, ο φυσικός χώρος $y \in [-1/2, 1/2]$ χωρίζεται σε I ισομήκη τμήματα, τα οποία αποτελούνται από $i = 1, 2, \dots, I + 1$ κόμβους. Αναλόγως του αριθμητικού σχήματος, που χρησιμοποιείται, η διακριτοποίηση των εξισώσεων γίνεται στα άκρα ή στο κέντρο των διαστημάτων. Επίσης, τα χρονικά βήματα για $t > 0$ είναι ισαπέχοντα και δηλώνονται ως $t_k = 1, 2, \dots$

Το απλούστερο αριθμητικό σχήμα πεπερασμένων διαφορών, που μπορεί να εφαρμοστεί στη συγκεκριμένη κινητική εξίσωση, είναι αυτό που προσεγγίζει τις χρονικές παραγώγους με πρόδρομες πεπερασμένες διαφορές και τις χωρικές παραγώγους με ανάδρομες πεπερασμένες διαφορές (Forward in Time and Backward in Space ή FTBS). Το σχήμα FTBS είναι ρητό και πρώτης τάξης ως προς το χρόνο και το χώρο. Συγκεκριμένα, η διακριτοποίηση γίνεται στον κόμβο (i, m, k) , με την εμπλοκή επιπλέον των ποσοτήτων που υπολογίζονται στον κόμβο $(i - 1, m, k + 1)$. Στη συνέχεια παρουσιάζεται η διαδικασία διακριτοποίησης του σχήματος FTBS της κινητικής εξίσωσης του μοντέλου BGK. Με αντίστοιχο τρόπο γίνεται και η διακριτοποίηση της κινητικής εξίσωσης του μοντέλου Shakhov.

Αρχικά διακριτοποιείται η εξίσωση (3.2.5) στον κόμβο (i, n, m) ως

$$\left. \frac{\partial Y}{\partial t} \right|_{i,m,k} + c_{ym} \left. \frac{\partial Y}{\partial y} \right|_{i,m,k} + \delta Y|_{i,m,k} = \delta u|_{i,m,k} - \frac{1}{2} \quad (3.2.17)$$

Η χρονική παράγωγος του μοντέλου BGK στον κόμβο (i, m, k) προσεγγίζεται ως

$$\left. \frac{\partial Y}{\partial t} \right|_{i,m,k} = \frac{Y_{i,m}^{k+1} - Y_{i,m}^k}{\Delta t} + O(\Delta t) \quad (3.2.18)$$

ενώ η χωρική παράγωγος στον κόμβο (i, n, m) προσεγγίζεται ως

$$\left. \frac{\partial Y}{\partial y} \right|_{i,m,k} = \frac{Y_{i,m}^k - Y_{i-1,m}^k}{\Delta y} + O(\Delta y), \quad (3.2.19)$$

όταν κινούμαστε από το $y = -1/2$ προς το $y = 1/2$, δηλαδή για $c_{ym} > 0$ και ως

$$\left. \frac{\partial Y}{\partial y} \right|_{i,m,k} = \frac{Y_{i,m}^k - Y_{i+1,m}^k}{-\Delta y} + O(\Delta y), \quad (3.2.20)$$

όταν κινούμαστε στην αντίθετη κατεύθυνση, δηλαδή για $c_{ym} < 0$. Στις ανωτέρω εξισώσεις με $O()$ δηλώνεται η τάξη της προσέγγισης.

Αντικαθιστώντας τις εξισώσεις (3.2.18) έως (3.2.20) στην εξίσωση (3.2.17) καταλήγουμε στην τελική μορφή της διακριτοποιημένης εξίσωσης BGK:

$$\frac{Y_{i,m}^{k+1} - Y_{i,m}^k}{\Delta t} + c_{ym} \frac{Y_{i,m}^k - Y_{i-1,m}^k}{\Delta y} + \delta Y_{i,m}^k = \delta u_{i,m}^k - \frac{1}{2}, \quad c_{ym} > 0 \quad (3.2.21)$$

$$\frac{Y_{i,m}^{k+1} - Y_{i,m}^k}{\Delta t} + c_{ym} \frac{Y_{i,m}^k - Y_{i+1,m}^k}{-\Delta y} + \delta Y_{i,m}^k = \delta u_{i,m}^k - \frac{1}{2}, \quad c_{ym} < 0. \quad (3.2.22)$$

Οι παραπάνω εξισώσεις επιλύονται για $i = 1, \dots, I+1$ και $m = 1, \dots, M$. Σε κάθε χρονικό βήμα η μακροσκοπική ταχύτητα υπολογίζεται από την εξίσωση (3.2.6) με χρήση της αριθμητικής ολοκλήρωσης Gauss-Legendre

$$u_i^{k+1} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_m \left(Y_{i,m}^{k+1} w_m e^{-c_{ym}^2} \right) \quad (3.2.23)$$

όπου w_m είναι τα βάρη της αριθμητικής ολοκλήρωσης.

Είναι σημαντικό επίσης να επισημανθεί ότι το σύστημα των αλγεβρικών εξισώσεων που ορίζεται από τις (3.2.21), (3.2.22) και (3.2.23) δεν είναι συζευγμένο για κάθε χρονικό και χωρικό βήμα και επομένως επιλύεται απλά με βηματισμό στο φυσικό χώρο για κάθε μοριακή ταχύτητα. Το γεγονός αυτό έχει ως αποτέλεσμα η πολυπλοκότητα του αλγορίθμου να διατηρείται χαμηλή και επομένως το αντίστοιχο πρόγραμμα που επιλύει τη ροή να είναι υπολογιστικά πολύ αποδοτικό ως προς το χρόνο εκτέλεσής του και την αναγκαία μνήμη.

Αντίστοιχα τώρα οι διακριτοποιημένες εξισώσεις του μοντέλου Shakhon για το σχήμα FTBS δίνονται από τις εκφράσεις

$$\frac{\Phi_{i,m}^{k+1} - \Phi_{i,m}^k}{\Delta t} + c_{ym} \frac{\Phi_{i,m}^k - \Phi_{i-1,m}^k}{\Delta y} + \delta \Phi_{i,m}^k = \delta \left\{ u_{i,m}^k + \frac{1}{15} q_{i,m}^k (2c_y^2 - 1) \right\} - \frac{1}{2}, \quad c_{ym} > 0 \quad (3.2.24)$$

$$\frac{\Psi_{i,m}^{k+1} - \Psi_{i,m}^k}{\Delta t} + c_{ym} \frac{\Psi_{i,m}^k - \Psi_{i-1,m}^k}{\Delta y} + \delta \Psi_{i,m}^k = \frac{4}{15} \delta q_{i,m}^k, \quad c_{ym} > 0 \quad (3.2.25)$$

και

$$\frac{\Phi_{i,m}^{k+1} - \Phi_{i,m}^k}{\Delta t} + c_{ym} \frac{\Phi_{i,m}^k - \Phi_{i+1,m}^k}{-\Delta y} + \delta \Phi_{i,m}^k = \delta \left\{ u_{i,m}^k + \frac{1}{15} q_{i,m}^k (2c_y^2 - 1) \right\} - \frac{1}{2}, \quad c_{ym} < 0 \quad (3.2.26)$$

$$\frac{\Psi_{i,m}^{k+1} - \Psi_{i,m}^k}{\Delta t} + c_{ym} \frac{\Psi_{i,m}^k - \Psi_{i+1,m}^k}{-\Delta y} + \delta \Psi_{i,m}^k = \frac{4}{15} \delta q_{i,m}^k, \quad c_{ym} < 0. \quad (3.2.27)$$

με $i = 1, \dots, I+1$ και $m = 1, \dots, M$. Όπως γίνεται φανερό, το μοντέλο Shakhon απαιτεί την επίλυση διπλάσιου αριθμού εξισώσεων από ό,τι το μοντέλο BGK.

Επειδή το αριθμητικό σχήμα FTBS είναι ρητό, η ευστάθειά του εξαρτάται άμεσα από το μέγεθος του χρονικού βήματος Δt , το οποίο θα πρέπει να είναι αρκετά μικρό. Επιθυμητό είναι ο γνωστός αριθμός CFL, ο οποίος στη συγκεκριμένη περίπτωση ορίζεται ως $c_{ym} \Delta t / \Delta x$, να είναι μικρότερος της μονάδας. Η τιμή του c_{ym} μπορεί να γίνει αρκετά μεγάλη. Για παράδειγμα, για ένα τυπικό σχήμα 80 μοριακών ταχυτήτων ανά κατεύθυνση, η μέγιστη τιμή του c_{ym} είναι η 4481.52. Το γεγονός αυτό έχει ως αποτέλεσμα την απαίτηση μικρού χρονικού βήματος και μεγάλου χρόνου εκτέλεσης του προγράμματος που υλοποιεί τον αλγόριθμο FTBS, μέχρι να επιτευχθεί η απαιτούμενη σύγκλιση στο 99% του αντίστοιχου μόνιμου πεδίου ροής. Το πρόβλημα εντείνεται για πολύ μεγάλες ή πολύ μικρές τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ , όπως παρουσιάζεται αργότερα στο σχολιασμό των αποτελεσμάτων.

Γι' αυτόν το λόγο εφαρμόζεται ένα δεύτερο αριθμητικό σχήμα, το οποίο είναι ημιπεπλεγμένο ως προς το χρονικό βήμα και έτσι επιτρέπει τη χρήση μεγαλύτερων χρονικών βημάτων χωρίς να προκύπτει πρόβλημα ευστάθειας. Στο συγκεκριμένο σχήμα το διάστημα $[-1/2, 1/2]$ χωρίζεται σε I ισομήκη τμήματα και καθορίζεται το μέσον κάθε τμήματος, το οποίο συμβολίζουμε με i . Οι κόμβοι το χωρικού πλέγματος βρίσκονται στις θέσεις $i \pm \frac{1}{2}$ για $i = 1, \dots, I$. Στη συνέχεια χρησιμοποιούνται οι συμβολισμοί $i+$ και $i-$ για να δηλώσουν τους κόμβους $i + \frac{1}{2}$ και $i - \frac{1}{2}$

αντίστοιχα. Όλες τις ποσότητες της κινητικής εξίσωσης διακριτοποιούνται στο σημείο $(i, m, k+1)$ δηλαδή στο χρονικό βήμα $k+1$ και στο μέσο του χωρικού διαστήματος $(i-, i+)$, εκτός από τις μακροσκοπικές ποσότητες, οι οποίες διακριτοποιούνται στο σημείο (i, m, k) , δηλαδή στο χρονικό βήμα k . Οι χρονικές παράγωγοι προσεγγίζονται με ανάδρομες πεπερασμένες διαφορές πρώτης τάξης, ενώ οι χωρικές παράγωγοι με κεντρώες πεπερασμένες διαφορές δεύτερης τάξης (Backward in Time and Central in Space ή BTCS). Επιπλέον, όλες οι ποσότητες που υπολογίζονται στο σημείο i προσεγγίζονται με γραμμική παρεμβολή ανάμεσα στην τιμή τους στους κόμβους $i+$ και $i-$. Παρουσιάζεται η διακριτοποίηση μόνο για το μοντέλο BGK, ενώ με αντίστοιχο τρόπο γίνεται και η διακριτοποίηση του μοντέλου Shakhov.

Η εξίσωση (3.2.5) γράφεται ως

$$\left. \frac{\partial Y}{\partial t} \right|_{i,m,k+1} + c_{ym} \left. \frac{\partial Y}{\partial y} \right|_{i,m,k+1} + \delta Y|_{i,m,k+1} = \delta u|_{i,m,k} - \frac{1}{2} \quad (3.2.28)$$

Η χρονική παράγωγος προσεγγίζεται ως

$$\left. \frac{\partial Y}{\partial t} \right|_{i,m,k+1} = \frac{Y_{i+,m}^{k+1} + Y_{i-,m}^{k+1} - Y_{i+,m}^k - Y_{i-,m}^k}{2\Delta t} + O(\Delta t) \quad (3.2.29)$$

και η χωρική ως

$$\left. \frac{\partial Y}{\partial y} \right|_{i,m,k+1} = \frac{Y_{i+,m}^{k+1} - Y_{i-,m}^{k+1}}{\Delta y} + O(\Delta y^2) \quad (3.2.30)$$

Τέλος για τις ποσότητες $Y|_{i,m,k+1}$ και $u|_{i,m,k}$ έχουμε αντίστοιχα

$$Y|_{i,m,k+1} \simeq \frac{1}{2} (Y_{i+,m}^{k+1} + Y_{i-,m}^{k+1}) \quad \text{και} \quad u|_{i,m,k} \simeq \frac{1}{2} (u_{i+,m}^k + u_{i-,m}^k) \quad (3.2.31)$$

Αντικαθιστώντας τις εξισώσεις (3.2.29) έως (3.2.31) στην εξίσωση (3.2.28) προκύπτει η τελική διακριτοποιημένη εξίσωση BGK

$$\begin{aligned} \frac{Y_{i+,m}^{k+1} + Y_{i-,m}^{k+1} - Y_{i+,m}^k - Y_{i-,m}^k}{2\Delta t} + c_{ym} \frac{Y_{i+,m}^{k+1} - Y_{i-,m}^{k+1}}{\Delta y} + \frac{\delta}{2} (Y_{i+,m}^{k+1} + Y_{i-,m}^{k+1}) \\ = \frac{\delta}{2} (u_{i+,m}^k + u_{i-,m}^k) - \frac{1}{2}, \end{aligned} \quad (3.2.32)$$

όπου Δt και Δy είναι το χρονικό και χωρικό διάστημα αντίστοιχα. Σε κάθε χρονικό βήμα η μακροσκοπική ταχύτητα υπολογίζεται από την εξίσωση (3.2.23), όπως και στο σχήμα FTBS. Ισχύει και εδώ η παρατήρηση που έγινε πιο πάνω για τη δημιουργία ενός συστήματος μη συζευγμένων αλγεβρικών εξισώσεων, το οποίο επιλύεται με βηματισμό στο φυσικό χώρο. Συγκεκριμένα, η εξίσωση (3.2.32) επιλύεται ως προς $Y_{i+,m}^{k+1}$, με $i = 2, 3, \dots, I+1$ όταν $c_{ym} > 0$ και ως προς $Y_{i-,m}^{k+1}$, με

$i = I, I - 1, \dots, 1$ όταν $c_{ym} < 0$, δίνοντας, αντίστοιχα, τις ακόλουθες σχέσεις:

$$Y_{i+,m}^{k+1} = \left\{ - \left(\frac{1}{2\Delta t} - \frac{c_{ym}}{\Delta y} + \frac{\delta}{2} \right) Y_{i-,m}^{k+1} + \frac{1}{2\Delta t} (Y_{i+,m}^k + Y_{i-,m}^k) + \frac{\delta}{2} (u_{i+}^{k+1} + u_{i-}^{k+1}) - \frac{1}{2} \right\} \\ \times \left(\frac{1}{2\Delta t} + \frac{c_{ym}}{\Delta y} + \frac{\delta}{2} \right)^{-1}, \quad c_{ym} > 0 \quad (3.2.33)$$

και

$$Y_{i-,m}^{k+1} = \left\{ - \left(\frac{1}{2\Delta t} + \frac{c_{ym}}{\Delta y} + \frac{\delta}{2} \right) Y_{i+,m}^{k+1} + \frac{1}{2\Delta t} (Y_{i+,m}^k + Y_{i-,m}^k) + \frac{\delta}{2} (u_{i+}^{k+1} + u_{i-}^{k+1}) - \frac{1}{2} \right\} \\ \times \left(\frac{1}{2\Delta t} - \frac{c_{ym}}{\Delta y} + \frac{\delta}{2} \right)^{-1}, \quad c_{ym} < 0 \quad (3.2.34)$$

για $i = 1, \dots, I$ και $m = 1, \dots, M$.

Περνώντας τώρα στο μοντέλο Shakhon, το ημιπεπλεγμένο σχήμα BTCS δίνει τελικά τις διακριτοποιημένες εξισώσεις

$$\frac{\Phi_{i+,m}^{k+1} + \Phi_{i-,m}^{k+1} - \Phi_{i+,m}^k - \Phi_{i-,m}^k}{2\Delta t} + c_{ym} \frac{\Phi_{i+,m}^{k+1} - \Phi_{i-,m}^{k+1}}{\Delta y} + \frac{\delta}{2} (\Phi_{i+,m}^{k+1} + \Phi_{i-,m}^{k+1}) = \\ \frac{\delta}{2} \left\{ (u_{i+,m}^k + u_{i-,m}^k) + \frac{1}{15} (q_{i+,m}^k + q_{i-,m}^k) (2c_{ym}^2 - 1) \right\} - \frac{1}{2} \quad (3.2.35)$$

$$\frac{\Psi_{i+,m}^{k+1} + \Psi_{i-,m}^{k+1} - \Psi_{i+,m}^k - \Psi_{i-,m}^k}{2\Delta t} + c_{ym} \frac{\Psi_{i+,m}^{k+1} - \Psi_{i-,m}^{k+1}}{\Delta y} + \frac{\delta}{2} (\Psi_{i+,m}^{k+1} + \Psi_{i-,m}^{k+1}) = \\ \frac{2}{15} \delta (q_{i+,m}^k + q_{i-,m}^k) \quad (3.2.36)$$

και

$$u_{i\pm}^{k+1} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_m \left(\Phi_{i\pm,m}^{k+1} w_m e^{-c_{ym}^2} \right) \quad (3.2.37)$$

$$q_{i\pm}^{k+1} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_m \left\{ \left[\Psi_{i\pm,m}^{k+1} + \left(c_{ym}^2 - \frac{1}{2} \right) \Phi_{i\pm,m}^{k+1} \right] w_m e^{-c_{ym}^2} \right\} \quad (3.2.38)$$

Ένα τρίτο αριθμητικό σχήμα που δοκιμάστηκε για τη διακριτοποίηση της εξίσωσης (3.2.5) είναι το ημιπεπλεγμένο σχήμα που προσεγγίζει τόσο τις χρονικές όσο και τις χωρικές παραγώγους με κεντρώες πεπερασμένες διαφορές δεύτερης τάξης (Central in Time and Central in Space ή CTCS). Η διακριτοποίηση των κινητικών εξισώσεων γίνεται στο σημείο $(i, m, k + 1/2)$, όπου i είναι το μέσο του διαστήματος $(i - 1/2, i + 1/2)$. Οι μακροσκοπικές ποσότητες διακριτοποιούνται πάντοτε στο προηγούμενο χρονικό βήμα (k) . Οι τελικές εξισώσεις που προκύπτουν για το μοντέλο

BGK είναι

$$\begin{aligned} & \frac{Y_{i+,m}^{k+1} + Y_{i-,m}^{k+1} - Y_{i+,m}^k - Y_{i-,m}^k}{2\Delta t} + c_{ym} \frac{Y_{i+,m}^{k+1} + Y_{i+,m}^k - Y_{i-,m}^{k+1} - Y_{i-,m}^k}{2\Delta y} + \\ & \delta \frac{Y_{i+,m}^{k+1} + Y_{i-,m}^{k+1} + Y_{i+,m}^k + Y_{i-,m}^k}{4} = \delta \frac{u_{i+}^k + u_{i-}^k}{2} - \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (3.2.39)$$

και

$$u_i^{k+1} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_m \left[(Y_{i,m}^{k+1} + Y_{i,m}^k) w_m e^{-c_{ym}^2} \right]. \quad (3.2.40)$$

Η εξίσωση (3.2.39) επιλύεται ακολουθώντας τις τροχιές των μοριακών ταχυτήτων ως προς $Y_{i+,m}^{k+1}$, με $i = 2, 3, \dots, I + 1$ για $c_{ym} > 0$ και ως προς $Y_{i-,m}^{k+1}$, με $i = I, I - 1, \dots, 1$ για $c_{ym} < 0$ δίνοντας αντίστοιχα τις ακόλουθες σχέσεις:

$$Y_{i+,m}^{k+1} = \left[-T_{01} Y_{i-,m}^{k+1} - T_{10} Y_{i+,m}^k - T_{11} Y_{i-,m}^k + \frac{\delta}{2} (u_{i+}^k + u_{i-}^k) - \frac{1}{2} \right] / T_{00}, \quad c_{ym} > 0 \quad (3.2.41)$$

και

$$Y_{i-,m}^{k+1} = \left[-T_{00} Y_{i+,m}^{k+1} - T_{10} Y_{i+,m}^k - T_{11} Y_{i-,m}^k + \frac{\delta}{2} (u_{i+}^k + u_{i-}^k) - \frac{1}{2} \right] / T_{01}, \quad c_{ym} > 0 \quad (3.2.42)$$

όπου με T_{ab} , $a, b = 0, 1$ δηλώνονται οι ποσότητες:

$$T_{00} = \frac{1}{2\Delta t} + \frac{c_{ym}}{2\Delta y} + \frac{\delta}{4} \quad (3.2.43)$$

$$T_{01} = \frac{1}{2\Delta t} - \frac{c_{ym}}{2\Delta y} + \frac{\delta}{4} \quad (3.2.44)$$

$$T_{10} = -\frac{1}{2\Delta t} + \frac{c_{ym}}{2\Delta y} + \frac{\delta}{4} \quad (3.2.45)$$

$$T_{11} = -\frac{1}{2\Delta t} - \frac{c_{ym}}{2\Delta y} + \frac{\delta}{4} \quad (3.2.46)$$

Για το μοντέλο Shakhon το σχήμα CTCS γράφεται ως

$$\begin{aligned} & \frac{\Phi_{i+,m}^{k+1} + \Phi_{i-,m}^{k+1} - \Phi_{i+,m}^k - \Phi_{i-,m}^k}{2\Delta t} + c_{ym} \frac{\Phi_{i+,m}^{k+1} + \Phi_{i+,m}^k - \Phi_{i-,m}^{k+1} - \Phi_{i-,m}^k}{2\Delta y} + \\ & \delta \frac{\Phi_{i+,m}^{k+1} + \Phi_{i-,m}^{k+1} + \Phi_{i+,m}^k + \Phi_{i-,m}^k}{4} = \delta \left\{ \frac{u_{i+}^k + u_{i-}^k}{2} + \frac{1}{15} \frac{q_{i+}^k + q_{i-}^k}{2} (2c_{ym}^2 - 1) \right\} - \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (3.2.47)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\Psi_{i+,m}^{k+1} + \Psi_{i-,m}^{k+1} - \Psi_{i+,m}^k - \Psi_{i-,m}^k}{2\Delta t} + c_{ym} \frac{\Psi_{i+,m}^{k+1} + \Psi_{i+,m}^k - \Psi_{i-,m}^{k+1} - \Psi_{i-,m}^k}{2\Delta y} + \\ & \delta \frac{\Psi_{i+,m}^{k+1} + \Psi_{i-,m}^{k+1} + \Psi_{i+,m}^k + \Psi_{i-,m}^k}{4} = \delta \left(\frac{4}{15} \frac{q_{i+}^k + q_{i-}^k}{2} \right) \end{aligned} \quad (3.2.48)$$

και

$$u_{i\pm}^{k+1} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_m \left[(\Phi_{i\pm,m}^{k+1} + \Phi_{i\pm,m}^k) w_m e^{-c_{ym}^2} \right] \quad (3.2.49)$$

$$q_{i\pm}^{k+1} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_m \left\{ \left[(\Psi_{i\pm,m}^{k+1} + \Psi_{i\pm,m}^k) + \left(c_{ym}^2 - \frac{1}{2} \right) (\Phi_{i\pm,m}^{k+1} + \Phi_{i\pm,m}^k) \right] w_m e^{-c_{ym}^2} \right\} \quad (3.2.50)$$

Στο σημείο αυτό θα ήταν χρήσιμο να γίνει ένα σχόλιο σχετικά με το χρονικό βήμα Δt . Επειδή, όπως αναφέρθηκε προηγουμένως, η συγκεκριμένη διακριτοποίηση που εφαρμόζουμε δημιουργεί ημιπεπλεγμένα σχήματα, οποιοδήποτε χρονικό βήμα αναμένεται να οδηγήσει σε ευσταθή αποτελέσματα, τα οποία όμως δεν είναι απαραίτητα και αρκετά ακριβή. Για την ανάκτηση των σωστών μεταβατικών μακροσκοπικών ποσοτήτων είναι απαραίτητο για το διαστατό χρονικό βήμα $\Delta t'$ να ισχύει $\Delta t' < \tau_\sigma$, όπου τ_σ δηλώνεται ο χρόνος των συγκρούσεων. Για τη συγκεκριμένη ροή ο χρόνος των συγκρούσεων δίνεται από τη σχέση $\tau_\sigma = \mu_0/P_0$. Εισάγοντας το αδιάστατο χρονικό βήμα $\Delta t = \Delta t' v_0/H$ έχουμε διαδοχικά

$$\Delta t' < \tau_\sigma \Rightarrow \frac{H}{v_0} \Delta t < \frac{\mu_0}{P_0} \Rightarrow \Delta t \frac{P_0 H}{\mu_0 v_0} < 1. \quad (3.2.51)$$

Γίνεται επομένως φανερό ότι για να είναι τα αποτελέσματα ακριβή θα πρέπει να ικανοποιείται η ακόλουθη σχέση

$$\Delta t \times \delta < 1. \quad (3.2.52)$$

Στηριζόμενοι στο παραπάνω αποτέλεσμα, μπορούμε να συμπεράνουμε ότι καθώς η ατμόσφαιρα γίνεται ολοένα και πιο πυκνή ($\delta \rightarrow \infty$), το χρονικό βήμα πρέπει να ελαττώνεται αντίστοιχα. Θα πρέπει να παρατηρήσουμε εδώ ότι η συνθήκη (3.2.52) είναι λιγότερο αυστηρή από την απαίτηση ο αριθμός CFL να είναι μικρότερος της μονάδας.

Για την αριθμητική επίλυση της υπό εξέτασης ροής, δημιουργήθηκαν κατάλληλοι κώδικες οι οποίοι υλοποιήθηκαν με την γλώσσα προγραμματισμού Fortran. Οι αριθμητικές παράμετροι που σχετίζονται με το χρονικό και χωρικό βήμα καθώς και το πλήθος των μοριακών ταχυτήτων επιλέχθηκαν ώστε να αποδίδουν αποτελέσματα ανεξαρτήτου πλέγματος με ακρίβεια τουλάχιστον δύο σημαντικών ψηφίων. Και για τα δύο κινητικά μοντέλα BKG και S, τα αποτελέσματα αποκτήθηκαν με $M = 80$ (πλήθος θετικών μοριακών ταχυτήτων), $I = 100$ (πλήθος χωρικών διαστημάτων) και $\Delta t = 10^{-5}$. Η χρονική εξέλιξη ολοκληρώνεται σε κάποιο συνολικό χρόνο t , στο σημείο, όπου η υπολογιζόμενη παροχή ανακτά το 99% της κατανομής της στο αντίστοιχο μόνιμο πρόβλημα. Τα

αποτελέσματα δίνονται για τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης $\delta = 0.1, 1$ και 10 , οι οποίες κατά προσέγγιση αντιστοιχούν στην αρχή το μέσο και το τέλος της μεταβατικής περιοχής.

Στα Σχήματα 3.2 και 3.3 παρουσιάζονται τα προφίλ των μακροσκοπικών ταχυτήτων για τα κινητικά μοντέλα BGK και Shakhon, αντίστοιχα, σε διάφορες χρονικές στιγμές. Λόγω συμμετρίας, εμφανίζονται μόνο οι θετικές τιμές του άξονα y . Παράλληλα, με διακεκομμένη γραμμή, εμφανίζεται σε κάθε περίπτωση η αντίστοιχη κατανομή του μόνιμου αριθμητικού προβλήματος. Την καμπύλη αυτή προσεγγίζει το μεταβατικό πρόβλημα καθώς $t \rightarrow \infty$. Οι ταχύτητες κανονικοποιούνται σε σχέση με την αντίστοιχη ταχύτητα του μόνιμου προβλήματος στο $y = 0$, την οποία συμβολίζουμε με u_{\max} . Για το μοντέλο BGK το μέτρο της u_{\max} είναι: 1.079 για $\delta = 0.1$, 0.8719 για $\delta = 1$ και 1.8277 για $\delta = 10$, ενώ για το μοντέλο Shakhon είναι 1.083 για $\delta = 0.1$, 0.8811 για $\delta = 1$ και 1.8358 για $\delta = 10$. Η χρονική εξέλιξη ολοκληρώνεται σε κάποιο συνολικό χρόνο t_E , στο σημείο, όπου η υπολογιζόμενη παροχή ανακτά το 99% της κατανομής της στο αντίστοιχο μόνιμο πρόβλημα. Παρατηρώντας τα παραπάνω γραφήματα, αποκτούμε μία πρώτη εικόνα της χρονικής εξέλιξης της ροής. Σε χρόνο $t = 0$ το αέριο βρίσκεται σε ηρεμία και στη συνέχεια λόγω ενός εξωτερικού αιτίου (επιβολή βαθμίδας πίεσης) αρχίζει να κινείται. Καθώς ο χρόνος περνά το αέριο κινείται προοδευτικά όλο και πιο γρήγορα μέχρι να φτάσει ασυμπτωτικά το μόνιμο πεδίο ροής.

3.3 Ροή Couette ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες

Στη χρονομεταβαλλόμενη ροή Couette ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες, θεωρούμε ένα αραιοποιημένο αέριο, το οποίο αρχικά βρίσκεται σε ηρεμία ανάμεσα σε δύο παράλληλες πλάκες. Η γεωμετρία της ροής φαίνεται στο Σχήμα 3.4. Οι πλάκες είναι αρχικά ακίνητες και στη συνέχεια, κατά τη χρονική στιγμή $t' = 0$, αρχίζουν να κινούνται με την ίδια ταχύτητα προς αντίθετες κατευθύνσεις, με την πάνω πλάκα να κινείται προς τα δεξιά με ταχύτητα $+U_0/2$ και την κάτω πλάκα προς τα αριστερά με ταχύτητα $-U_0/2$. Ως αποτέλεσμα, προκύπτει μια χρονικά εξελισσόμενη αραιοποιημένη ροή, η οποία σιγά σιγά, καθώς $t' \rightarrow \infty$, προσεγγίζει την αντίστοιχη μόνιμη ροή Couette. Η θερμοκρασία διατηρείται σταθερή κατά μήκος του πεδίου ροής. Στόχος μας είναι η επίλυση αυτού του μεταβατικού προβλήματος σε όλο το εύρος της παραμέτρου αραιοποίησης. Για τη σύ-

γκριση των αποτελεσμάτων, υπολογίζεται και παρουσιάζεται η αναλυτική λύση του προβλήματος Couette στο υδροδυναμικό όριο (Παράγραφος 3.6).

Η αντιμετώπιση της ροής Couette, είναι παρόμοια με αυτή της ροής Poiseuille, με τρεις σημαντικές διαφορές: α) Η αδιαστατοποίηση της μακροσκοπικής ταχύτητας γίνεται με την ταχύτητα των πλακών U_0 , β) από τις εξισώσεις κίνησης απουσιάζει ο όρος πηγής δηλαδή οι εξισώσεις κίνησης είναι ομογενείς και γ) εμπλέκονται μη ομογενείς οριακές συνθήκες.

Ξεκινώντας με την αδιαστατοποίηση των μεταβλητών, ισχύουν οι εξισώσεις (3.2.2), αλλά ειδικά για τη μακροσκοπική ταχύτητα έχουμε

$$u(t, y) = \frac{u'}{U_0}. \quad (3.3.1)$$

Η κινητική εξίσωση BGK είναι η

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + c_y \frac{\partial Y}{\partial y} + \delta Y = \delta u(t, y). \quad (3.3.2)$$

ενώ η μακροσκοπική ταχύτητα u δίνεται, από την εξίσωση (3.2.6). Αντίστοιχα για το μοντέλο Shakhon, οι εξισώσεις είναι ίδιες με αυτές της προηγούμενης ενότητας, από τις οποίες απουσιάζει ο όρος πηγής. Οι οριακές συνθήκες, για τη συγκεκριμένη ροή Couette είναι για το μοντέλο BGK

$$Y(t, -1/2, c_y) = -\frac{1}{2}, \quad c_y > 0, \quad Y(t, 1/2, c_y) = +\frac{1}{2}, \quad c_y < 0, \quad (3.3.3)$$

ενώ για το μοντέλο Shakhon είναι

$$\Phi(t, -1/2, c_y) = -\frac{1}{2}, \quad c_y > 0 \quad \Phi(t, 1/2, c_y) = +\frac{1}{2}, \quad c_y < 0, \quad (3.3.4)$$

$$\Psi(t, -1/2, c_y) = 0, \quad c_y > 0 \quad \Psi(t, 1/2, c_y) = 0, \quad c_y < 0. \quad (3.3.5)$$

Όλα τα αριθμητικά σχήματα που παρουσιάστηκαν στην προηγούμενη ενότητα, δηλαδή τα FTBS, BTCS και CTCS, μπορούν να εφαρμοστούν και στη ροή Couette, αφαιρώντας τον όρο πηγής $1/2$ από τους τύπους, και εφαρμόζοντας τις οριακές συνθήκες (3.3.3) ή (3.3.4) και (3.3.5) αναλόγως του κινητικού μοντέλου.

Στη ροή Couette η ποσότητα που ενδιαφέρει κυρίως δεν είναι η αδιάστατη παροχή, η οποία στη συγκεκριμένη γεωμετρική διαμόρφωση ισούται με μηδέν, αλλά η αδιάστατη διατμητική τάση, η οποία δίνεται από τη σχέση

$$S(t, y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} Y(t, y, c_y) c_y e^{-c_y^2} dc_y = S(t) \quad (3.3.6)$$

για το μοντέλο BGK, ενώ για το μοντέλο Shakhon δίνεται αντίστοιχα από τη σχέση

$$S(t, y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(t, y, c_y) c_y e^{-c_y^2} dc_y = S(t) \quad (3.3.7)$$

και υπολογίζεται, όπως και η μακροσκοπική ταχύτητα, με ολοκλήρωση Gauss-Legendre Quadrature. Αποδεικνύεται ότι η διατμητική τάση στη συγκεκριμένη ροή παραμένει σταθερή σε κάθε θέση y και εξαρτάται μόνον από το χρόνο t .

Στα Σχήματα 3.5 και 3.6 παρουσιάζονται τα προφίλ των μακροσκοπικών ταχυτήτων για τα κινητικά μοντέλα BGK και Shakhon σε διάφορες χρονικές στιγμές. Και για τα δύο κινητικά μοντέλα τα αποτελέσματα αποκτήθηκαν με το αριθμητικό σχήμα CTCS με $M = 80$ (πλήθος θετικών μοριακών ταχυτήτων), $I = 100$ (πλήθος χωρικών διαστημάτων) και $\Delta t = 10^{-5}$. Η χρονική εξέλιξη ολοκληρώνεται σε κάποιο συνολικό χρόνο t_E , στο σημείο, όπου η υπολογιζόμενη διατμητική τάση ανακτά το 99% της κατανομής της στο αντίστοιχο μόνιμο πρόβλημα. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται σε όλο το εύρος της παραμέτρου αραιοποίησης. Στα σχήματα με διακεκομμένη γραμμή εμφανίζεται σε κάθε περίπτωση η αντίστοιχη κατανομή του μόνιμου αριθμητικού προβλήματος. Την καμπύλη αυτή προσεγγίζει το μεταβατικό πρόβλημα καθώς $t \rightarrow \infty$. Τα αποτελέσματα δίνονται για τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης $\delta = 0.1, 1$ και 10 . Παρατηρούμε ότι υπάρχει πολύ καλή συμφωνία μεταξύ των δύο κινητικών μοντέλων BGK και Shakhon. Επίσης για $\delta = 0.1$ γίνεται έντονα εμφανής η ολίσθηση της ταχύτητας στα τοιχώματα.

3.4 Ροή Poiseuille σε κυλινδρικό αγωγό

Εξετάζεται η χρονομεταβαλλόμενη ροή Poiseuille διαμέσου κυλινδρικού αγωγού. Η αξονο-συμμετρική γεωμετρία, που συναντάται στη συγκεκριμένη ροή, απαιτεί ειδική διακριτοποίηση των αντίστοιχων κινητικών εξισώσεων. Ένα αραιοποιημένο αέριο βρίσκεται σε ηρεμία εντός κυλινδρικού αγωγού μήκους L και ακτίνας R όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.7. Ισχύει ότι ο λόγος $R/L \ll 1$ και κατά συνέπεια τα φαινόμενα εισόδου/εξόδου στα άκρα μπορούν να αγνοηθούν και η ροή μπορεί να θεωρηθεί πλήρως ανεπτυγμένη. Κατά τη χρονική στιγμή $t' = 0$, εφαρμόζεται μία απότομη και ομοιόμορφη σταθερή βαθμίδα πίεσης κατά μήκος του αγωγού στην κατεύθυνση z' , με r' να δηλώνει την ακτινική διεύθυνση. Ως αποτέλεσμα παρατηρείται μία μεταβατική αραιοποιημένη πλήρως ανεπτυγμένη ροή, η οποία, καθώς το $t' \rightarrow \infty$, προσεγγίζει την αντίστοιχη μόνιμη

ροή Poiseuille. Η ροή είναι αξονοσυμμετρική και περιγράφεται με τέσσερις ανεξάρτητες μεταβλητές που περιλαμβάνουν τις μεταβλητές του χώρου και του χρόνου και τις δύο συνιστώσες της μοριακής ταχύτητας.

Η παράμετρος αραιοποίησης που χαρακτηρίζει τη ροή ορίζεται ως

$$\delta = \frac{P_0 R}{\mu_0 v_0}. \quad (3.4.1)$$

Η αδιαστατοποίηση των μεταβλητών γίνεται ως εξής:

$$r = \frac{r'}{R}, \quad z = \frac{z'}{R}, \quad t = \frac{t' v_0}{R}. \quad (3.4.2)$$

Επίσης, η ομοιόμορφη βαθμίδα πίεσης, που εφαρμόζεται ξαφνικά και προκαλεί τη ροή στην αξονική κατεύθυνση, ορίζεται ως

$$X_P = \frac{R}{P_0} \frac{dP}{dz'} = \frac{1}{P_0} \frac{dP}{dz}. \quad (3.4.3)$$

Στη συγκεκριμένη ροή η μόνη συνιστώσα της μακροσκοπικής (bulk) ταχύτητας, η οποία είναι διάφορη του μηδενός, είναι η συνιστώσα κατά την αξονική κατεύθυνση και συμβολίζεται $u' = u'(t', r')$. Αδιαστατοποιείται ως

$$u(t, r) = \frac{u'}{v_0 X_P}. \quad (3.4.4)$$

Η ροή θεωρείται ισοθερμοκρασιακή και για τη μοντελοποίησή της χρησιμοποιήθηκαν τα χρονο-μεταβαλλόμενα γραμμικοποιημένα κινητικά μοντέλα BGK και Shakhov.

Παρουσιάζεται η αδιάστατη κινητική εξίσωση για το BGK, όπως αυτή προκύπτει ύστερα από τη διαδικασία της προβολής

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + \zeta \cos \theta \frac{\partial Y}{\partial r} - \frac{\zeta \sin \theta}{r} \frac{\partial Y}{\partial \theta} + \delta Y = \delta u - \frac{1}{2}. \quad (3.4.5)$$

Στον προηγούμενο τύπο, $Y = Y(t, r, \zeta, \theta)$ είναι η άγνωστη συνάρτηση κατανομής και οι τέσσερις αδιάστατες ανεξάρτητες μεταβλητές περιλαμβάνουν τη μεταβλητή του χρόνου t , τη χωρική μεταβλητή $r \in [0, 1]$ και το διάνυσμα της μοριακής ταχύτητας, το οποίο σε πολικές συντεταγμένες ορίζεται από το μέτρο του $\zeta \in (0, \infty)$ και την πολική γωνία $\theta \in [0, 2\pi]$. Επίσης, δ είναι η παράμετρος αραιοποίησης που ορίζεται στην εξίσωση (3.4.1). Η μακροσκοπική ταχύτητα $u(t, r)$ δίνεται από το διπλό ολοκλήρωμα

$$u(t, r) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty Y(t, r, \zeta, \theta) e^{-\zeta^2} \zeta d\zeta d\theta. \quad (3.4.6)$$

Αντίστοιχα, για το μοντέλο Shakhon οι κινητικές εξισώσεις, έπειτα από τη διαδικασία της προβολής, γράφονται σε αδιάστατη μορφή ως

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \zeta \cos \theta \frac{\partial \Phi}{\partial r} - \frac{\zeta \sin \theta}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} + \delta \Phi = \delta \left[u + \frac{2}{15} q(\zeta^2 - 1) \right] - \frac{1}{2} \quad (3.4.7)$$

και

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \zeta \cos \theta \frac{\partial \Psi}{\partial r} - \frac{\zeta \sin \theta}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} + \delta \Psi = \delta \left[\frac{3}{2} u + \frac{1}{5} q \zeta^2 \right] - \frac{3}{4} \quad (3.4.8)$$

Οι μακροσκοπικές ποσότητες, δηλαδή η ταχύτητα u και η θερμορροή q δίνονται από τις σχέσεις

$$u(t, r) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \Phi(t, r, \zeta, \theta) e^{-\zeta^2} \zeta d\zeta d\theta \quad (3.4.9)$$

και

$$q(t, r) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \left[\Phi(t, r, \zeta, \theta) \left(\zeta^2 - \frac{5}{2} \right) + \Psi(t, r, \zeta, \theta) \right] e^{-\zeta^2} \zeta d\zeta d\theta, \quad (3.4.10)$$

αντίστοιχα.

Περνώντας τώρα στις οριακές συνθήκες, οι οποίες συμπεριλαμβάνουν τις συνθήκες πλήρως διάχυσης Maxwell στο $r = 1$ και τη συνθήκη συμμετρίας στο $r = 0$, για το μοντέλο BGK θα έχουμε

$$Y(t, 1, \zeta, \theta) = 0, \quad \frac{\pi}{2} < \theta < \frac{3\pi}{2} \quad (3.4.11)$$

και

$$Y(t, 0, \zeta, \theta) = Y(t, 0, \zeta, \theta - \pi), \quad -\frac{\pi}{2} < \theta < \frac{\pi}{2}, \quad (3.4.12)$$

ενώ για το μοντέλο Shakhon θα έχουμε, αντίστοιχα,

$$\Phi(t, 1, \zeta, \theta) = 0, \quad \Psi(t, 1, \zeta, \theta) = 0, \quad \frac{\pi}{2} < \theta < \frac{3\pi}{2} \quad (3.4.13)$$

και

$$\Phi(t, 0, \zeta, \theta) = \Phi(t, 0, \zeta, \theta - \pi), \quad \Psi(t, 0, \zeta, \theta) = \Psi(t, 0, \zeta, \theta - \pi), \quad -\frac{\pi}{2} < \theta < \frac{\pi}{2}. \quad (3.4.14)$$

Τέλος, η αρχική συνθήκη στο $t = 0$ για το μοντέλο BGK γράφεται ως

$$Y(0, r, \zeta, \theta) = 0, \quad (3.4.15)$$

ενώ για το μοντέλο Shakhon ως

$$\Phi(0, r, \zeta, \theta) = 0, \quad \Psi(0, r, \zeta, \theta) = 0. \quad (3.4.16)$$

Η αδιάστατη χρονοεξαρτώμενη παροχή υπολογίζεται ως

$$G(t) = 4 \int_0^1 u(t, r) r dr. \quad (3.4.17)$$

Οι αδιάστατες ποσότητες $u(t, r)$ and $G(t)$ μπορούν να διαστατοποιηθούν, αν οριστούν η ακτίνα του κυλίνδρου, η πίεση εισόδου και εξόδου, καθώς και αν προσδιοριστεί το συγκεκριμένο αέριο που μελετάται.

Για την αριθμητική επίλυση του προβλήματος που περιγράφεται από τις εξισώσεις (3.4.5) και (3.4.6) και τις συνθήκες (3.4.11), (3.4.12) και (3.4.15) για το μοντέλο BGK και από τις εξισώσεις (3.4.7) έως (3.4.10) και τις συνθήκες (3.4.13), (3.4.14) και (3.4.16) για το μοντέλο Shakhon χρησιμοποιείται ένα ντετερμινιστικό αριθμητικό σχήμα. Η διακριτοποίηση στο χώρο των μοριακών ταχυτήτων γίνεται με τη μέθοδος των διακριτών ταχυτήτων (DVM). Το συνεχές φάσμα $\zeta \in [0, \infty)$ αντικαθίσταται από ένα σύνολο διακριτών ταχυτήτων ζ_m , $m = 1, 2, \dots, M$, οι οποίες επιλέγονται να είναι οι ρίζες του πολωνύμου Legendre βαθμού M , απεικονιζόμενες κατάλληλα στο διάστημα $[-1, 1]$ to $[0, \infty)$. Επίσης, ορίζεται ένα σύνολο διακριτών γωνιών θ_n , $n = 1, 2, \dots, N$ ισοκατανεμημένων στο διάστημα $[0, 2\pi]$. Η διακριτοποίηση στο φυσικό χώρο στηρίζεται σε ένα σχήμα κεντρώων πεπερασμένων διαφορών δεύτερης τάξης. Η απόσταση $r \in [0, 1]$ χωρίζεται σε I ισαπέχοντα διαστήματα. Με $i = 1, 2, \dots, I + 1$ δηλώνουμε τους κόμβους του πλέγματος και με Δr τη μεταξύ τους απόσταση. Η συγκεκριμένη διακριτοποίηση στο χώρο των μοριακών ταχυτήτων και στο φυσικό χώρο, έχει χρησιμοποιηθεί εκτενώς στο παρελθόν για επίλυση μόνιμων ροών σε κυλινδρικούς αγωγούς. Η διακριτοποίηση, τέλος, στο χρόνο $t > 0$, γίνεται είτε με ανάδρομες πεπερασμένες διαφορές πρώτης τάξης, είτε με κεντρώες διαφορές δεύτερης τάξης, όπου όμως όλες οι μακροσκοπικές ποσότητες υπολογίζονται στο προηγούμενο χρονικό βήμα, δημιουργώντας έτσι ημιπεπλεγμένα αριθμητικά σχήματα, με $t_k = 1, 2, \dots$ να δηλώνονται οι διακριτές τιμές του χρόνου και με Δt το χρονικό βήμα. Η διακριτοποιημένη εξίσωση σύμφωνα με το ημιπεπλεγμένο σχήμα

BTCS είναι η

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{4\Delta t} (Y_{i+,m,n+}^{k+1} + Y_{i-,m,n+}^{k+1} + Y_{i+,m,n-}^{k+1} + Y_{i-,m,n-}^{k+1}) - \\
& \frac{1}{4\Delta t} (Y_{i+,m,n+}^k + Y_{i-,m,n+}^k + Y_{i+,m,n-}^k + Y_{i-,m,n-}^k) + \\
& \frac{\zeta_m \cos\theta_n}{2\Delta r} (Y_{i+,m,n+}^{k+1} + Y_{i+,m,n-}^{k+1} - Y_{i-,m,n+}^{k+1} - Y_{i-,m,n-}^{k+1}) - \\
& \frac{\zeta_m \sin\theta_n}{\Delta\theta (r_{i+} + r_{i-})} (Y_{i+,m,n+}^{k+1} + Y_{i-,m,n+}^{k+1} - Y_{i+,m,n-}^{k+1} - Y_{i-,m,n-}^{k+1}) + \\
& \frac{\delta}{4} (Y_{i+,m,n+}^{k+1} + Y_{i-,m,n+}^{k+1} + Y_{i+,m,n-}^{k+1} + Y_{i-,m,n-}^{k+1}) = \\
& \frac{\delta}{2} (u_{i+}^{k+1} + u_{i-}^{k+1}) - \frac{1}{2}
\end{aligned} \tag{3.4.18}$$

Σε κάθε χρονικό βήμα η εξίσωση (3.4.18) επιλύεται για την εύρεση της άγνωστης συνάρτησης κατανομής. Στη συνέχεια η μακροσκοπική ταχύτητα βρίσκεται με ολοκλήρωση Gauss-Legendre quadrature ως προς ζ και με κανόνα τραπεζίου ως προς θ σύμφωνα με τη σχέση

$$u_i^{k+1} = \frac{1}{\pi} \sum_m \sum_n \left(Y_{i,m,n}^{k+1} e^{-\zeta_m^2} \zeta_m w_m w_n \right) \tag{3.4.19}$$

όπου w_m και w_n είναι τα αντίστοιχα βάρη.

Στα Σχήματα 3.8 και 3.9 παρουσιάζονται τα προφίλ των μακροσκοπικών ταχυτήτων για τα κινητικά μοντέλα BGK και S σε διάφορες χρονικές στιγμές. Και για τα δύο κινητικά μοντέλα BKG και S, τα αποτελέσματα αποκτήθηκαν με το αριθμητικό σχήμα CTCS, με $M = 80$ (πλήθος μέτρων μοριακών ταχυτήτων), $N = 160$ (πλήθος γωνιών μοριακών ταχυτήτων στο 2π), $I = 150$ (πλήθος χωρικών διαστημάτων) και $\Delta t = 10^{-5}$. Η χρονική εξέλιξη ολοκληρώνεται σε κάποιο συνολικό χρόνο t_E , στο σημείο, όπου η υπολογιζόμενη παροχή ανακτά το 99% της κατανομής της στο αντίστοιχο μόνιμο πρόβλημα. Οι ταχύτητες κανονικοποιούνται σε σχέση με την αντίστοιχη ταχύτητα του μόνιμου προβλήματος στο $y = 0$ (u_{\max}). Για το μοντέλο BGK το μέτρο της u_{\max} είναι: 0.849 για $\delta = 0.1$, 0.972 για $\delta = 1$, και 3.062 για $\delta = 10$, ενώ για το μοντέλο Shakhon αντίστοιχα είναι: 0.852 για $\delta = 0.1$, 0.986 για $\delta = 1$, και 3.071 για $\delta = 10$. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται για τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης $\delta = 0.1, 1$ και 10 , οι οποίες κατά προσέγγιση αντιστοιχούν στην αρχή, το μέσο και το τέλος της μεταβατικής περιοχής. Στα σχήματα με διακεκομμένη γραμμή, εμφανίζεται σε κάθε περίπτωση η αντίστοιχη κατανομή του μόνιμου αριθμητικού προβλήματος. Την καμπύλη αυτή προσεγγίζει το μεταβατικό πρόβλημα καθώς $t \rightarrow \infty$. Παρατηρούμε ότι τα δύο κινητικά μοντέλα, BGK και Shakhon, ποιοτικά συμφωνούν άριστα και ποσοτικά βρίσκονται πάρα

πολύ κοντά. Το γεγονός αυτό είναι αναμενόμενο σε ροές οφειλόμενες σε διαφορά πίεσης.

3.5 Ροή Poiseuille σε αγωγό ορθογωνικής διατομής

Παρουσιάζεται η χρονομεταβαλλόμενη ροή Poiseuille διαμέσου αγωγού ορθογωνικής διατομής. Ένα αραιοποιημένο αέριο περιέχεται μέσα σε ένα αγωγό ορθογωνικής διατομής μήκους L , ύψους H και πλάτους W με $H < W$, όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.10. Ισχύει ότι ο λόγος $H/L \ll 1$ και κατά συνέπεια τα φαινόμενα εισόδου/εξόδου στα άκρα μπορούν να αγνοηθούν και η ροή μπορεί να θεωρηθεί πλήρως ανεπτυγμένη. Κατά τη χρονική στιγμή $t' = 0$, εφαρμόζεται μια απότομη και ομοιόμορφη σταθερή βαθμίδα πίεσης κατά μήκος του αγωγού στην κατεύθυνση z' . Ως αποτέλεσμα, προκύπτει μια μεταβατική αραιοποιημένη πλήρως ανεπτυγμένη ροή, η οποία, καθώς το $t' \rightarrow \infty$, θα προσεγγίζει τη μόνιμη ροή Poiseuille. Η θερμοκρασία διατηρείται σταθερή κατά μήκος του πεδίου ροής. Το μεταβατικό πρόβλημα επιλύεται σε όλο το εύρος της παραμέτρου αραιοποίησης.

Η παράμετρος αραιοποίησης που χαρακτηρίζει τη συγκεκριμένη ροή ορίζεται ως

$$\delta = \frac{P_0 H}{\mu_0 v_0}, \quad (3.5.1)$$

Εισάγονται οι αδιάστατες μεταβλητές

$$x = \frac{x'}{H}, \quad y = \frac{y'}{H}, \quad z = \frac{z'}{H}, \quad t = \frac{t' v_0}{H}. \quad (3.5.2)$$

Η βαθμίδα πίεσης που προκαλεί τη ροή αδιαστατοποιείται ως

$$X_P = \frac{H}{P_0} \frac{dP}{dz'} = \frac{1}{P_0} \frac{dP}{dz}. \quad (3.5.3)$$

Η μόνη συνιστώσα της μακροσκοπικής ταχύτητας που είναι διάφορη του μηδενός είναι με διεύθυνση κατά μήκος του αγωγού και γράφεται ως $u' = u'(t', x', y')$. Αδιαστατοποιείται ως εξής

$$u(t, x, y) = \frac{u'}{v_0 X_P}. \quad (3.5.4)$$

Για την επίλυση της ροής χρησιμοποιείται το γραμμικοποιημένο κινητικό μοντέλο BGK

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + c_x \frac{\partial Y}{\partial x} + c_y \frac{\partial Y}{\partial y} + \delta Y = \delta u - \frac{1}{2} \quad (3.5.5)$$

όπου, $Y = Y(t, x, y, c_x, c_y)$ η άγνωστη συνάρτηση κατανομής και οι πέντε αδιάστατες μεταβλητές περιλαμβάνουν τη μεταβλητή του χρόνου t , τις χωρικές μεταβλητές $x \in [-W/2H, W/2H]$

και $-1/2 < y < 1/2$, και δύο συνιστώσες της μοριακής ταχύτητας $c_x \in (-\infty, \infty)$ και $c_y \in (-\infty, \infty)$. Με τη μετατροπή του χώρου των μοριακών ταχυτήτων σε πολικές συντεταγμένες, η κινητική εξίσωση γράφεται ως

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + \zeta \cos \theta \frac{\partial Y}{\partial x} + \zeta \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial y} + \delta Y = \delta u - \frac{1}{2}, \quad (3.5.6)$$

όπου $Y = Y(t, x, y, \zeta, \theta)$ με $\zeta = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$ να είναι το μέτρο και $\theta = \arctan(v_y/v_x)$ η γωνία του διανύσματος της μοριακής ταχύτητας. Σημειώνεται ότι $\zeta \in (0, \infty)$ και $\theta \in [0, 2\pi]$.

Η μακροσκοπική ταχύτητα $u(t, x, y)$ δίνεται από τη σχέση

$$u(t, x, y) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty Y(t, x, y, \zeta, \theta) e^{-\zeta^2} \zeta d\zeta d\theta. \quad (3.5.7)$$

Οι οριακές συνθήκες πλήρους διάχυσης Maxwell γράφονται ως

$$Y(t, -W/2H, y, \zeta, \theta) = 0, \quad \zeta > 0, \quad -\frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \frac{\pi}{2} \quad (3.5.8)$$

$$Y(t, W/2H, y, \zeta, \theta) = 0, \quad \zeta > 0, \quad \frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \frac{3\pi}{2} \quad (3.5.9)$$

$$Y\left(t, x, -\frac{1}{2}, \zeta, \theta\right) = 0, \quad \zeta > 0, \quad 0 \leq \theta \leq \pi \quad (3.5.10)$$

$$Y\left(t, x, \frac{1}{2}, \zeta, \theta\right) = 0, \quad \zeta > 0, \quad \pi \leq \theta \leq 2\pi \quad (3.5.11)$$

και η αρχική συνθήκη ως

$$Y(0, x, y, \zeta, \theta) = 0. \quad (3.5.12)$$

Η αδιάστατη παροχή, τέλος, υπολογίζεται από τη σχέση

$$G(t) = 2 \frac{H}{W} \int_{-1/2}^{1/2} \int_{-W/2H}^{W/2H} u(t, x, y) dx dy. \quad (3.5.13)$$

Για τη διακριτοποίηση των εξισώσεων, χρησιμοποιείται η μέθοδος DVM. Το συνεχές φάσμα $\zeta \in (0, \infty)$ αντικαθίσταται με ένα διακριτό σύνολο $\zeta_m, m = 1, 2, \dots, M$, προερχόμενο από τις ρίζες του πολωνύμου Legendre βαθμού M , οι οποίες μετασχηματίζονται κατάλληλα από το διάστημα $[-1, 1]$ στο $[0, \infty)$. Επίσης επιλέγεται ένα σύνολο διακριτών γωνιών $\theta_n, n = 1, 2, \dots, N$ στο διάστημα $[0, 2\pi]$. Ο φυσικός χώρος $x \in [-W/2H, W/2H]$, $y \in [-1/2, 1/2]$ χωρίζεται σε I ισομήκη διαστήματα κατά τη x διεύθυνση και J ισομήκη διαστήματα κατά τη y διεύθυνση, με αποτέλεσμα να δημιουργείται ένα πλέγμα αποτελούμενο από $i \times j$ κόμβους, $i = 1, 2, \dots, I + 1$, $j = 1, 2, \dots, J + 1$.

Όπως και στις ροές που περιγράφηκαν στις προηγούμενες ενότητες, έτσι κι εδώ μπορούν να εφαρμοσθούν τα τρία αριθμητικά σχήματα επίλυσης της κινητικής εξίσωσης, δηλαδή τα FTBS, BTCS και CTCS. Στη συνέχεια παρουσιάζουμε ενδεικτικά την τελική εξίσωση του ημιπεπλεγμένου σχήματος BTCS.

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{4\Delta t} (Y_{i+,j+,m,n}^{k+1} + Y_{i-,j+,m,n}^{k+1} + Y_{i+,j-,m,n}^{k+1} + Y_{i-,j-,m,n}^{k+1}) - \\
& \frac{1}{4\Delta t} (Y_{i+,j+,m,n}^k + Y_{i-,j+,m,n}^k + Y_{i+,j-,m,n}^k + Y_{i-,j-,m,n}^k) + \\
& \frac{\xi_m \cos\theta_n}{2h_x} (Y_{i+,j+,m,n}^{k+1} + Y_{i+,j-,m,n}^{k+1} - Y_{i-,j+,m,n}^{k+1} - Y_{i-,j-,m,n}^{k+1}) + \\
& \frac{\xi_m \sin\theta_n}{2h_y} (Y_{i+,j+,m,n}^{k+1} + Y_{i-,j+,m,n}^{k+1} - Y_{i+,j-,m,n}^{k+1} - Y_{i-,j-,m,n}^{k+1}) + \\
& \frac{\delta}{4} (Y_{i+,j+,m,n}^{k+1} + Y_{i-,j+,m,n}^{k+1} + Y_{i+,j-,m,n}^{k+1} + Y_{i-,j-,m,n}^{k+1}) = \\
& \frac{\delta}{4} (u_{i+,j+}^{k+1} + u_{i-,j+}^{k+1} + u_{i+,j-}^{k+1} + u_{i-,j-}^{k+1}) - \frac{1}{2}
\end{aligned} \tag{3.5.14}$$

Η μακροσκοπική ταχύτητα υπολογίζεται σε κάθε χρονικό βήμα με αριθμητική ολοκλήρωση Gauss-Legendre, ως προς τα μέτρα των μοριακών ταχυτήτων, και με κανόνα τραπεζίου, ως προς τις γωνίες τους

$$u_{i,j}^{k+1} = \frac{1}{\pi} \sum_m \sum_n \left(Y_{i,j,m,n}^{k+1} e^{-\zeta_m^2} \zeta_m w_m w_n \right) \tag{3.5.15}$$

με w_m και w_n να είναι τα αντίστοιχα βάρη ολοκλήρωσης των δύο μεθόδων. Αντίστοιχες εκφράσεις προκύπτουν και για τα άλλα δύο σχήματα.

Στο Σχήμα 3.11 παρουσιάζεται το προφίλ της μακροσκοπικής ταχυτήτας για το κινητικό μοντέλο BGK σε διάφορες χρονικές στιγμές. Τα αποτελέσματα αποκτήθηκαν με το αριθμητικό σχήμα CTCS, με $M = 80$ (πλήθος μέτρων μοριακών ταχυτήτων), $N = 160$ (πλήθος γωνιών μοριακών ταχυτήτων στο 2π), $I = 100$, $J = 100$ (πλήθος χωρικών διαστημάτων $I \times J$) και $\Delta t = 10^{-4}$. Η χρονική εξέλιξη ολοκληρώνεται σε κάποιο συνολικό χρόνο t_E , στο σημείο, όπου η υπολογιζόμενη παροχή ανακτά το 99% της κατανομής της στο αντίστοιχο μόνιμο πρόβλημα. Οι ταχύτητες κανονικοποιούνται σε σχέση με την αντίστοιχη ταχύτητα του μόνιμου προβλήματος στο $y = 0$ (u_{\max}). Το μέτρο της u_{\max} για $H/W = 1$ είναι: 0.479 για $\delta = 0.1$, 0.498 για $\delta = 1$ και 1.084 για $\delta = 10$, ενώ για $H/W = 0.01$ είναι: 1.090 για $\delta = 0.1$, 0.890 για $\delta = 1$ και 1.813 για $\delta = 10$. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται για $\delta = 0.1, 1$ και 10 , και για διάφορους λόγους H/W . Στα σχήματα με διακεκομμένη γραμμή εμφανίζεται σε κάθε περίπτωση η αντίστοιχη κατανομή του μόνιμου αριθμητικού

προβλήματος. Την καμπύλη αυτή προσεγγίζει το μεταβατικό πρόβλημα καθώς $t \rightarrow \infty$. Παρατηρούμε ότι, όπως είναι αναμενόμενο, καθώς ο λόγος $H/W \rightarrow 0$ τα αποτελέσματα προσεγγίζουν τα αντίστοιχα του προβλήματος της ροής Poiseuille ανάμεσα σε πλάκες.

3.6 Αδιάστατες παροχές, διατμητικές τάσεις, θερμοροές και συνολικοί χρόνοι ισορροπίας

Οι ποσότητες που έχουν μεγάλο πρακτικό και θεωρητικό ενδιαφέρον είναι οι αδιάστατες παροχές για τις ροές Poiseuille, οι διατμητικές τάσεις για τη ροή Couette καθώς και οι αξονικές θερμοροές για την περίπτωση που χρησιμοποιείται το μοντέλο Shakhov. Στην ενότητα αυτή παρουσιάζονται και σχολιάζονται τα αποτελέσματα αυτών των ποσοτήτων, καθώς και οι συνολικοί χρόνοι ισορροπίας.

Στα Σχήματα 3.12 και 3.13 παρουσιάζονται οι αδιάστατες παροχές $G(t)$ για τις ροές Poiseuille σε παράλληλες πλάκες, σε κυλινδρικό και ορθογωνικό αγωγό ως προς το χρόνο t για συγκεκριμένες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης. Στο Σχήμα 3.14 παρουσιάζεται η χρονική εξέλιξη της διατμητικής τάσης για τη ροή Couette σε παράλληλες πλάκες για τα μοντέλα BGK και Shakhov, ενώ στο Σχήμα 3.15 παρουσιάζεται η χρονική εξέλιξη της μέσης αξονικής θερμοροής για τη ροή Poiseuille σε πλάκες (πάνω) και σε κυλινδρικό αγωγό (κάτω) για το μοντέλο Shakhov. Παρατηρώντας τις κατανομές των παροχών, των διατμητικών τάσεων και των θερμοροών καθώς και τον τρόπο που αυτές εξελίσσονται συναρτήσει του χρόνου, μπορεί κανείς να συμπεράνει ότι η εξέλιξη τους δεν είναι εκθετική.

Στο Σχήμα 3.16 παρουσιάζεται μια συγκεντρωτική εικόνα των συνολικών χρόνων ισορροπίας t , σε σχέση με την παράμετρο αραιοποίησης δ . Παρατηρούμε ότι ο συνολικός χρόνος για $\delta = 0.1$ και 10 είναι μεγαλύτερος από τον αντίστοιχο χρόνο για $\delta = 1$. Επομένως δεν υπάρχει μονότονη συμπεριφορά του απαιτούμενου συνολικού χρόνου για την ανάκτηση των μόνιμων συνθηκών σε σχέση με την παράμετρο αραιοποίησης. Επίσης, οι καμπύλες που προκύπτουν είναι ποιοτικά ίδιες με τις καμπύλες, που στις αντίστοιχες μόνιμες ροές περιγράφουν την αδιάστατη παροχή συναρτήσει του δ , συμπεριλαμβανομένου και του ελαχίστου σημείου Knudsen [127, 128]. Καθώς προχωρούμε από την ελεύθερη μοριακή περιοχή προς την μεταβατική περιοχή, ο απαιτούμενος χρόνος

ισορροπίας μειώνεται συνεχώς φτάνοντας σε μία ελάχιστη τιμή κάπου μέσα στη μεταβατική περιοχή, κοντά στο ελάχιστο σημείο Knudsen και στη συνέχεια καθώς προχωρούμε προς πιο πυκνές ατμόσφαιρες, αυξάνει συνεχώς μέχρι το υδροδυναμικό όριο. Ειδικότερα για τη ροή σε ορθογώνιο αγωγό, στο Σχήμα 3.16 κάτω δεξιά, γίνεται φανερό πως, καθώς ο λόγος H/W μικραίνει, δηλαδή όταν τα πλάγια τοιχώματα τείνουν να εκλείψουν, ο αντίστοιχος χρόνος ισορροπίας αυξάνει. Ο λόγος είναι πως τα κάθετα τοιχώματα βοηθούν στην πιο γρήγορη ανάπτυξη της ροής και η απουσία τους προκαλεί μια μεγαλύτερη καθυστέρηση.

3.7 Αναλυτικές λύσεις στο υδροδυναμικό όριο

Στο υδροδυναμικό όριο ($\delta \rightarrow \infty$) η λύση του προβλήματος της ροής Poiseuille σε πλάκες μπορεί να γίνει εύκολα με αναλυτικό τρόπο. Η εξίσωση ορμής για τη συγκεκριμένη ροή γράφεται με τη μορφή

$$\rho \frac{\partial u'}{\partial t'} = -\frac{dP}{dx'} + \mu \frac{\partial^2 u'}{\partial y'^2}, \quad (3.7.1)$$

όπου ρ είναι η πυκνότητα μάζας, ενώ οι άλλες μεταβλητές έχουν ήδη ορισθεί σε προηγούμενη ενότητα. Οι αντίστοιχες οριακές συνθήκες μη ολίσθησης δίνονται από την $u'(t, \pm H/2) = 0$, και η αρχική συνθήκη από την $u'(0, y') = 0$. Χρησιμοποιώντας στην εξίσωση (3.7.1) τις αδιάστατες ποσότητες (3.2.2), προκύπτει ότι

$$2\delta \frac{\partial u}{\partial t} = -\delta + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad (3.7.2)$$

με $u(t, \pm 1/2) = 0$ και $u(0, y) = 0$. Για την επίλυση της διαφορικής εξίσωσης μερικών παραγώγων (3.7.2) μπορεί να χρησιμοποιηθεί η γενική μέθοδος του χωρισμού των μεταβλητών, αν από την εξίσωση αφαιρεθεί η μόνιμη ροή Poiseuille και εργαστούμε μόνο με την απόκλιση από την παραβολική λύση της ροής αυτής. Ακολουθώντας τη γνωστή διαδικασία, καταλήγουμε στη λύση

$$u_H(t, y) = \delta \left[\frac{1}{8} - \frac{y^2}{2} - 4 \sum_{n=1,3,5}^{\infty} \frac{\sin(\pi n/2)}{(\pi n)^3} \cos(\pi n y) \exp\left(-\frac{(\pi n)^2}{2\delta} t\right) \right] \quad (3.7.3)$$

Για την εύρεση της αδιάστατης παροχής στο υδροδυναμικό όριο, η εξίσωση (3.7.3) ολοκληρώνεται πάνω στο $y \in [-1/2, 1/2]$ σύμφωνα με την εξίσωση (3.2.16) και δίνει

$$G_H(t) = \frac{\delta}{6} - 16\delta \sum_{n=1,3,5}^{\infty} \left[\frac{\sin^2(\pi n/2)}{(\pi n)^4} \exp\left(-\frac{(\pi n)^2}{2\delta} t\right) \right]. \quad (3.7.4)$$

Στις προηγούμενες εξισώσεις ο δείκτης H δηλώνει την υδροδυναμική λύση. Οι εξισώσεις (3.7.3) και (3.7.4) χρησιμοποιούνται στην ενότητα των αποτελεσμάτων για την επικαιροποίηση των κινητικών λύσεων για μεγάλες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης.

Για τη ροή Poiseuille σε κυλινδρικό αγωγό η αναλυτική λύση γράφεται ως εξής

$$u_H(t, r) = \frac{\delta}{4} \left[(1 - r^2) - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{8J_0(k_n r)}{k_n^3 J_1(k_n)} \exp\left(-k_n^2 \frac{t}{2\delta}\right) \right], \quad (3.7.5)$$

όπου J_0 , J_1 είναι οι συναρτήσεις Bessel πρώτου είδους μηδενικής και πρώτης τάξης, αντίστοιχα, και k_n είναι οι ρίζες της συνάρτησης J_0 . Για την εύρεση της αδιάστατης παροχής στο υδροδυναμικό όριο ολοκληρώνουμε την προηγούμενη εξίσωση και παίρνουμε

$$G_H(t) = \delta \left[\frac{1}{4} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{8}{k_n^4} \exp\left(-k_n^2 \frac{t}{2\delta}\right) \right]. \quad (3.7.6)$$

Τέλος, για τη ροή Couette ανάμεσα σε πλάκες η αναλυτική λύση δίνεται από τη σχέση

$$u_H(t, y) = y + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos(n\pi)}{n\pi} \sin(2n\pi y) \exp\left(-\frac{2n^2\pi^2}{\delta_0} t\right) \quad (3.7.7)$$

Στο Σχήμα 3.17 γίνεται μια σύγκριση μεταξύ της αναλυτικής λύσης στο υδροδυναμικό όριο και της αριθμητικής λύσης, ως προς τη μακροσκοπική ταχύτητα, για μια μεγάλη τιμή του δ ($\delta = 100$). Οι αριθμητικές τιμές παρουσιάζονται με συμπαγείς γραμμές, ενώ οι αναλυτικές με διακεκομμένες γραμμές. Είναι φανερό πως η συμφωνία των δύο λύσεων είναι πολύ καλή και επεκτείνεται σε όλο το χρονικό πεδίο. Με αυτόν τον τρόπο επικυρώνονται σε σημαντικό βαθμό τα αποτελέσματα σε όλο το εύρος της αραιοποίησης του αερίου. Σημειώνεται ότι ακόμη καλύτερη ταύτιση των δύο λύσεων προκύπτει, αν η σύγκριση γίνει για μεγαλύτερες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ ή, εναλλακτικά, αν για τον υπολογισμό της αναλυτικής λύσης χρησιμοποιηθούν οριακές συνθήκες ολίσθησης στα τοιχώματα.

3.8 Διαστατοποίηση αποτελεσμάτων

Οι αδιάστατες ποσότητες $u(t, y)$ and $G(t)$, οι οποίες υπολογίζονται για κάθε τιμή της παραμέτρου αραιοποίησης δ και οι οποίες είναι ιδιαίτερης πρακτικής σημασίας, διαστατοποιούνται με μια διαδικασία, η οποία δεν είναι προφανής και για το λόγο αυτό περιγράφεται με λεπτομέρεια. Αρχικά ορίζονται το μήκος L και η απόσταση μεταξύ των πλακών H , ή η ακτίνα του κυλινδρικού αγωγού R ή ο λόγος των πλευρών H/W αν πρόκειται για αγωγό ορθογωνικής διατομής, καθώς

και η πίεση εισόδου P_{in} και εξόδου P_{out} . Επίσης προσδιορίζεται το συγκεκριμένο αέριο που μελετάται. Στη συνέχεια παρουσιάζεται η διαστατοποίηση της χρονομεταβαλλόμενης παροχής σε κυλινδρικό αγωγό.

Ξεκινώντας από τον ορισμό της διαστατής παροχής σε κυλινδρικό αγωγό, έχουμε

$$\dot{M}(t') = \frac{dM(t')}{dt'} = 2\pi \int_0^R \rho(t', z') u'(t', r') r' dr' = 2\pi \rho \int_0^R u' r' dr' \quad (3.8.1)$$

Εισάγοντας τις αδιάστατες μεταβλητές

$$r = \frac{r'}{R}, \quad u = \frac{u'}{v_0 X_P} \quad \text{και} \quad X_P = \frac{R}{P} \frac{dP}{dz'} = \frac{1}{P_0} \frac{dP}{dz} \quad (3.8.2)$$

και χρησιμοποιώντας επίσης τη σχέση

$$\rho = \frac{2P}{v_0^2} \quad (3.8.3)$$

παίρνουμε διαδοχικά τη

$$\dot{M}(t') = 2\pi \rho v_0 X_P R^2 \int_0^1 u r dr = 2\pi \frac{2P}{v_0^2} v_0 X_P R^2 \int_0^1 u r dr = \frac{4\pi P}{v_0} X_P R^2 \int_0^1 u r dr \quad (3.8.4)$$

Ορίζοντας την αδιάστατη παροχή ως

$$G(t) = \frac{\dot{M}(t') v_0}{\pi R^2 P X_P} = \frac{\dot{M} v_0}{\pi R^2 P \frac{R}{P} \frac{dP}{dz'}} = \frac{\dot{M} v_0}{\pi R^2 \frac{dP}{dz'}} = 4 \int_0^1 u r dr, \quad (3.8.5)$$

οδηγούμεστε στη σχέση μεταξύ διαστατής και αδιάστατης παροχής

$$\dot{M}(t') = G \frac{\pi R^3}{v_0} \frac{dP}{dz'} = G(t) \frac{\pi R^2}{v_0} \frac{dP}{dz} \quad (3.8.6)$$

Επειδή η ποσότητα dP/dz' είναι δύσκολο να υπολογισθεί, ορίζουμε (με αυθαίρετο τρόπο) μια ποσότητα $G^*(t)$ έτσι ώστε να ισχύει

$$\dot{M}(t') = G^*(t) \frac{\pi R^3}{v_0} \frac{P_{out} - P_{in}}{L}. \quad (3.8.7)$$

Εξισώνοντας τις δύο εκφράσεις για το \dot{M} έχουμε διαδοχικά

$$G \frac{\pi R^3}{v_0} \frac{dP}{dz'} = G^* \frac{\pi R^3}{v_0 L} (P_{out} - P_{in}) \Rightarrow G \frac{dP}{dz'} = G^* \frac{P_{out} - P_{in}}{L} \Rightarrow G \frac{dP}{P_{out} - P_{in}} = G^* \frac{dz'}{L}, \quad (3.8.8)$$

όπου οι δείκτες in και out δηλώνουν την είσοδο και την έξοδο του αγωγού αντίστοιχα. Ισχύει όμως

$$\frac{dP}{P_{out} - P_{in}} = \frac{d\delta}{\delta_{out} - \delta_{in}}, \quad (3.8.9)$$

και επομένως, ξαναγράφοντας την προηγούμενη σχέση, παίρνουμε

$$G \frac{d\delta}{\delta_{out} - \delta_{in}} = G^* \frac{dz'}{L} \Rightarrow \frac{1}{\delta_{out} - \delta_{in}} \int_{\delta_{in}}^{\delta_{out}} G d\delta = \frac{G^*}{L} \int_0^L dz',$$

και καταλήγουμε στην τελική έκφραση του G^*

$$G^*(t) = \frac{1}{\delta_{out} - \delta_{in}} \int_{\delta_{in}}^{\delta_{out}} G(t) d\delta. \quad (3.8.10)$$

Η διαδικασία διαστατοποίησης των αποτελεσμάτων συνοψίζεται επομένως στα ακόλουθα βήματα: Με δεδομένα την ακτίνα R και το μήκος L του αγωγού, τις πιέσεις στα δύο άκρα του P_{in} και P_{out} , τη θερμοκρασία αναφοράς T_0 , το ιξώδες, τη μάζα και την πυκνότητα του αερίου μ_0 , m και ρ , υπολογίζουμε αρχικά τα δ_{in} και δ_{out} από τη σχέση

$$\delta_a = \frac{P_a R}{\mu_0 v_0}, \quad a = in, out. \quad (3.8.11)$$

Στη συνέχεια από την εξ (3.8.10) υπολογίζουμε το $G^*(t)$ για κάθε χρονική στιγμή, κάνοντας χρήση της κινητικής βάσης δεδομένων, που παρουσιάζεται στον Πίνακα 3.1. Τέλος, χρησιμοποιώντας την εξ (3.8.7), παίρνουμε την καμπύλη της διαστατής παροχής $\dot{M}(t')$, όπου $t' = tR/v_0$.

Στα Σχήματα 3.18 και 3.19 παρουσιάζονται διαστατά αποτελέσματα για τη ροή Poiseuille σε κυλινδρικό αγωγό για μαζικές παροχές (πάνω) σε kg/sec και χρόνους ισορροπίας (κάτω) σε sec . Ειδικότερα, εξετάζονται οι ροές δύο αερίων, ενός ελαφρού (He) και ενός πολύ βαρύτερου (Xe) σε σταθερή θερμοκρασία $T = 20^\circ C$. Οι μοριακές μάζες αυτών των αερίων είναι $m = 6.64 \times 10^{-27} Kg$ για το He και $m = 218.01 \times 10^{-27} Kg$ για το Xe, ενώ το ιξώδες τους στη συγκεκριμένη θερμοκρασία είναι $\mu = 1.96 \times 10^{-5} Pa \cdot s$ για το He και $\mu = 2.34 \times 10^{-5} Pa \cdot s$ για το Xe. Υποθέτουμε ότι η ροή γίνεται πάντοτε προς το κενό.

Οι περιπτώσεις που παρουσιάζονται και εμφανίζονται ως δείκτες (1) έως (3) στο Σχήμα 3.18 δίνονται στον Πίνακα 3.2. Σε κάθε περίπτωση η πίεση εξόδου είναι $P_{out} = 0 Pa$, ενώ μεταβάλλονται το μήκος L και η διάμετρος του αγωγού D καθώς και η πίεση εισόδου P_{in} . Από την παρατήρηση των καμπυλών του γραφήματος γίνεται φανερό ότι σε κάθε περίπτωση η ροή του Xe δίνει μεγαλύτερη μαζική παροχή από την αντίστοιχη ροή του He. Επίσης, καθώς η διάμετρος του αγωγού μεγαλώνει, ενώ το μήκος του και η πίεση εισόδου διατηρούνται σταθερά, η μαζική παροχή αυξάνει και για τα δύο αέρια. Το ίδιο ισχύει και στην περίπτωση που διατηρούνται σταθερά το μήκος και η διάμετρος του αγωγού, αλλά αυξάνει η πίεση εισόδου.

Περνώντας τώρα στο Σχήμα 3.19, οι περιπτώσεις που παρουσιάζονται και εμφανίζονται ως δείκτες (1) έως (6) δίνονται στον Πίνακα 3.3. Σε κάθε περίπτωση, η πίεση εξόδου είναι $P_{out} = 0 Pa$, η δε πίεση εισόδου P_{in} παίρνει τιμές από $10^{-2} Pa$ έως $10^2 Pa$, ενώ μεταβάλλονται το μήκος L και η διάμετρος του αγωγού D . Στο γράφημα αρχικά παρατηρούμε ότι οι καμπύλες των περιπτώσεων 1 και 4 καθώς και των περιπτώσεων 2 και 5 ταυτίζονται μεταξύ τους. Και στα δύο ζεύγη περιπτώσεων η διάμετρος του αγωγού διατηρήθηκε σταθερή και μεταβλήθηκε το μήκος του αγωγού. Επομένως η μεταβολή μόνον του μήκους του αγωγού δεν επηρεάζει τα αποτελέσματα (αρκεί βέβαια ο λόγος της διαμέτρου προς το μήκος του αγωγού να είναι αρκετά μικρός, ώστε η ροή να παραμένει πλήρως ανεπτυγμένη). Αν κρατηθεί σταθερό το μήκος του αγωγού και μεταβληθεί η διάμετρός του (σύγκριση μεταξύ περίπτωσης 1, 2 και 3), τότε μεγαλύτερη διάμετρος δίνει και μεγαλύτερους χρόνους ισορροπίας. Παρατηρούμε επίσης, όπως ήταν αναμενόμενο, ότι σε όλες τις περιπτώσεις οι χρόνοι ισορροπίας του βαρύτερου αερίου (Xe) είναι μεγαλύτεροι από τους αντίστοιχους χρόνους ισορροπίας του ελαφρύτερου αερίου (He). Τέλος, συγκρίνοντας τις περιπτώσεις 1 και 6, διαπιστώνουμε ότι, αν διατηρηθεί σταθερός ο λόγος μεταξύ διαμέτρου και μήκους του αγωγού, αλλά μικρύνει η κλίμακα του αγωγού, οι χρόνοι ισορροπίας ελαττώνονται.

3.9 Σύγκριση με DSMC

Μια εναλλακτική μεθοδολογία στην επίλυση αραιοποιημένων ροών αερίων αποτελεί η μέθοδος Direct Simulation Monte-Carlo (DSMC), η οποία υλοποιήθηκε αρχικά από τον Bird. Η μέθοδος αυτή στηρίζεται στη στατιστική προσομοίωση των αέριων ροών και τα αποτελέσματά της είναι συνεπή με αυτά που προκύπτουν από την επίλυση της εξίσωσης Boltzmann. Η μέθοδος DSMC χρησιμοποιείται ευρέως κυρίως σε πολύπλοκες γεωμετρίες και γρήγορες ροές, ενώ αντίθετα παρουσιάζει υπολογιστική δυσκολία σε απλές γεωμετρίες και αργές ροές, σαν αυτές που εξετάζονται εδώ. Η μέθοδος DSMC στηρίζεται στη στατιστική προσομοίωση της κίνησης και των συγκρούσεων “αριθμητικών μορίων” μεταξύ τους και με τα τοιχώματα του αγωγού, καθώς η ροή εξελίσσεται στο χρόνο. Ως “αριθμητικό μόριο” θεωρείται ένα σύνολο αποτελούμενο από ένα αρκετά μεγάλο πλήθος γειτονικών πραγματικών μορίων του αερίου. Η εγγενής χρονική εξάρτηση της μεθόδου την καθιστά ιδανική για εφαρμογή σε χρονομεταβαλλόμενες ροές. Βασική υπόθεση

της μεθόδου DSMC είναι πως η κίνηση των μορίων μπορεί να αποσυζευχθεί από τις συγκρούσεις τους σε χρονικές περιόδους μικρότερες από το μέσο χρόνο συγκρούσεων.

Για να γίνει σύγκριση των αποτελεσμάτων που αποκτήθηκαν με την χρονομεταβαλλόμενη μέθοδο DVM και με την μέθοδο DSMC, πραγματοποιήθηκε επίλυση του προβλήματος της ροής Poiseuille σε αγωγό κυλινδρικής διατομής και με τις δύο μεθόδους. Τα αποτελέσματα συνοψίζονται στους Πίνακες 3.4 έως 3.6, όπου παρουσιάζονται οι τιμές της αδιάστατης παροχής $G(t)$ σε διάφορες χρονικές στιγμές ξεκινώντας από τη στιγμή 0 και φτάνοντας, με μοναδιαίο χρονικό βήμα, μέχρι το χρόνο ισορροπίας (υπολογιζόμενο με μία 99% σύγκλιση στην τιμή της αντίστοιχης μόνιμης ροής) για τρεις τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης: $\delta = 0.1$ (πίνακας 3.4), $\delta = 1$ (πίνακας 3.5) και $\delta = 10$ (πίνακας 3.6). Για τη μέθοδο DVM χρησιμοποιήθηκε το αριθμητικό σχήμα CTCS με παραμέτρους $M = 80$ (πλήθος μέτρων μοριακών ταχυτήτων), $N = 160$ (πλήθος γωνιών μοριακών ταχυτήτων στο 2π) και $I = 150$ (αριθμός κόμβων), ενώ για τη μέθοδο DSMC χρησιμοποιήθηκε ένα πλέγμα 50 κελιών προσομοιώνοντας 5000 αριθμητικά μόρια σε κάθε κελί. Διαπιστώνουμε ότι υπάρχει πολύ καλή συμφωνία των αποτελεσμάτων καθώς το σχετικό σφάλμα μεταξύ των δύο μεθόδων είναι πολύ μικρό. Αποδεικνύεται έτσι η ορθότητα της υπολογιστικής προσέγγισης που ακολουθήθηκε. Παρόλο όμως που και οι δύο μέθοδοι δίνουν το ίδιο αποτέλεσμα, η DVM πλεονεκτεί καθώς είναι απλούστερη και παρατηρήθηκε πως παρουσιάζει σαφώς γρηγορότερη σύγκλιση σε σχέση με την DSMC για τις ροές που εξετάστηκαν.

Πίνακας 3.1: Τμήμα της κινητικής βάσης δεδομένων όπου εμφανίζονται οι τιμές της αδιάστατης παροχής G (απόλυτες τιμές) του μοντέλου BGK, για μοναδιαίο αδιάστατο χρονικό βήμα t και για διάφορες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ , για ροή Poiseuille σε κυλινδρικό αγωγό. Η τιμή της παροχής στο $t \rightarrow \infty$ αντιστοιχεί στη μόνιμη κατάσταση

δ	t							
	0	1	2	3	4	5	...	∞
0	0	0.725	1.040	1.182	1.256	1.307	...	1.504
10^{-6}	0	0.725	1.040	1.182	1.259	1.307	...	1.504
10^{-4}	0	0.725	1.040	1.182	1.259	1.307	...	1.504
10^{-2}	0	0.728	1.042	1.184	1.260	1.307	...	1.476
1	0	0.743	1.110	1.287	1.374	1.417	...	1.458
10	0	0.814	1.407	1.863	2.220	2.501	...	3.564
30	0	0.864	1.587	2.220	2.784	3.292	...	8.508
50	0	0.886	1.659	2.361	3.006	3.605	...	13.421
80	0	0.905	1.718	2.473	3.182	3.852	...	20.618
150	0	0.915	1.761	2.564	3.332	4.071	...	36.084

Πίνακας 3.2: Περιπτώσεις ροών που παρουσιάζονται στο γράφημα 3.18. Δίνονται η διάμετρος του αγωγού D , το μήκος του αγωγού L , η πίεση εισόδου P_{in} , καθώς και η παράμετρος αραιοποίησης εισόδου που αντιστοιχεί στην P_{in} για τα αέρια He και Xe. Σε κάθε περίπτωση η πίεση εξόδου είναι $P_{out} = 0Pa$.

Περίπτωση	D	L	P_{in}	$\delta_{in He}$	$\delta_{in Xe}$
1	1cm	100cm	100Pa	23.1	111
2	2cm	100cm	100Pa	46.2	222
3	1cm	100cm	50Pa	11.6	55.4

Πίνακας 3.3: Περιπτώσεις ροών που παρουσιάζονται στο γράφημα 3.19. Σε κάθε περίπτωση η πίεση εξόδου είναι $P_{out} = 0Pa$ και η πίεση εισόδου P_{in} παίρνει τιμές από $10^{-2}Pa$ έως 10^2Pa . Δίνονται η διάμετρος του αγωγού D , το μήκος του αγωγού L , καθώς και το εύρος της παραμέτρου αραιοποίησης εισόδου, που αντιστοιχεί στην P_{in} για τα αέρια He και Xe. .

Περίπτωση	D	L	$\delta_{in He}$	$\delta_{in Xe}$
1	1cm	100cm	$2.31 \times 10^{-3} - 23.1$	$1.11 \times 10^{-2} - 111$
2	2cm	100cm	$4.62 \times 10^{-3} - 46.2$	$2.22 \times 10^{-2} - 222$
3	10cm	100cm	$2.31 \times 10^{-2} - 231$	$1.11 \times 10^{-1} - 1110$
4	1cm	50cm	$2.31 \times 10^{-3} - 23.1$	$1.11 \times 10^{-2} - 111$
5	2cm	50cm	$4.62 \times 10^{-3} - 46.2$	$2.22 \times 10^{-2} - 222$
6	10 μm	1000 μm	$2.31 \times 10^{-6} - 2.31 \times 10^{-2}$	$1.11 \times 10^{-5} - 1.11 \times 10^{-1}$

Πίνακας 3.4: Μεταβατική ροή Poiseuille σε κυλινδρικό αγωγό: Σύγκριση αδιάστατων παροχών $G(t)$ μεταξύ DVM και DSMC για $\delta = 0.1$

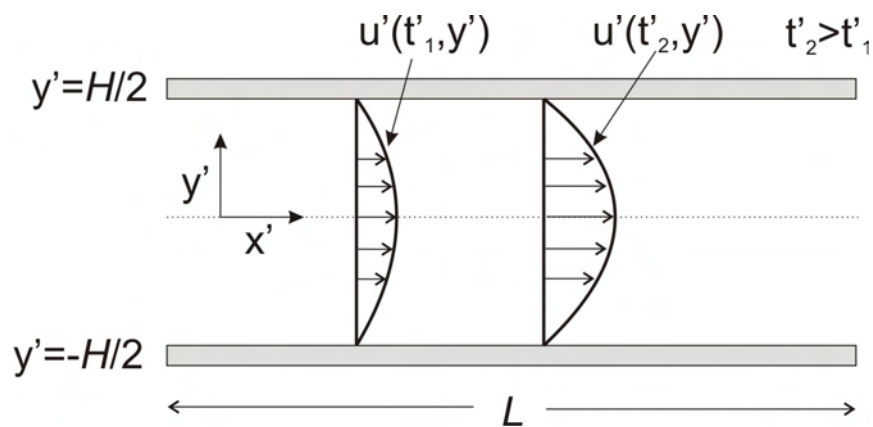
t	G_{DVM}	G_{DSMC}	Σχετικό Σφάλμα
0	0.000	0.000	-
1	0.732	0.737	0.7%
2	1.048	1.052	0.4%
3	1.192	1.192	0.0%
4	1.267	1.260	0.6%
5	1.310	1.311	0.1%
6	1.337	1.339	0.1%
7	1.355	1.352	0.2%
8	1.367	1.362	0.4%
9	1.382	1.364	1.3%
10	1.387	1.372	1.1%
11	1.404	1.378	1.9%
12	1.404	1.388	1.1%

Πίνακας 3.5: Μεταβατική ροή Poiseuille σε κυλινδρικό αγωγό: Σύγκριση αδιάστατων παροχών $G(t)$ μεταξύ DVM και DSMC για $\delta = 1$

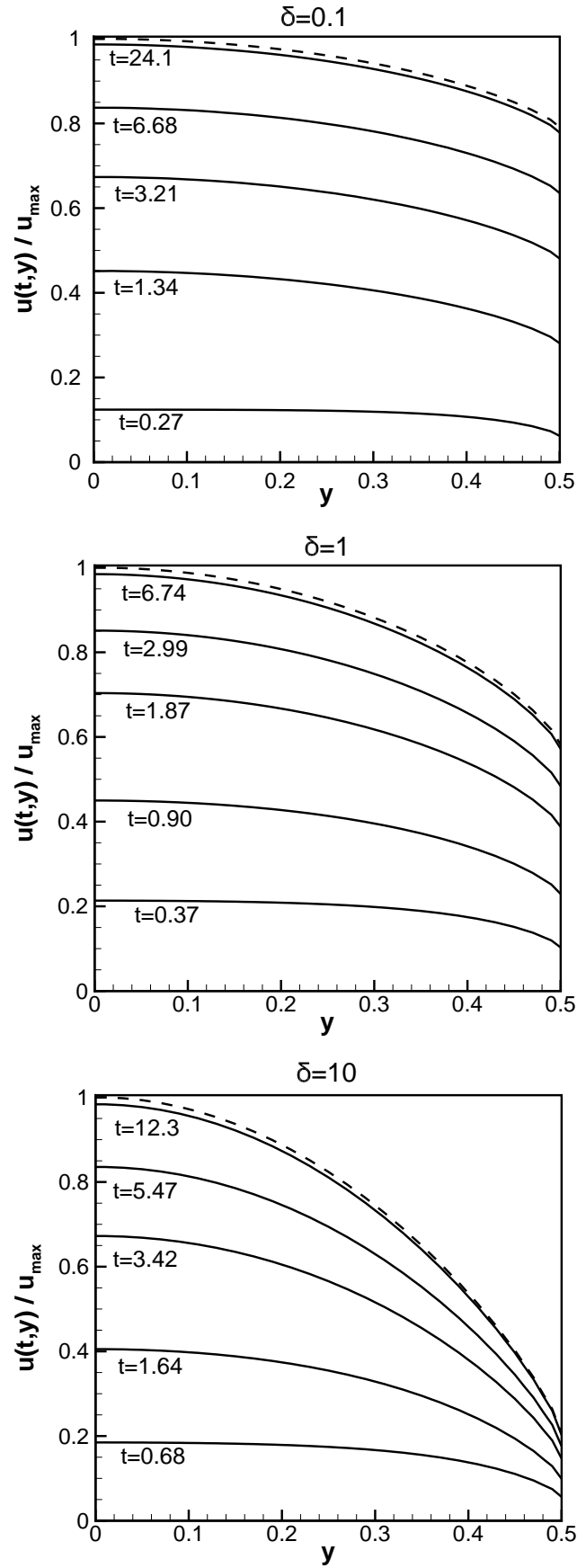
t	G_{DVM}	G_{DSMC}	Σχετικό Σφάλμα
0	0.000	0.000	-
1	0.743	0.740	0.4%
2	1.110	1.098	1.1%
3	1.287	1.282	0.4%
4	1.374	1.358	1.2%
5	1.417	1.403	1.0%
6	1.438	1.426	0.8%
7	1.444	1.444	0.0%

Πίνακας 3.6: Μεταβατική ροή Poiseuille σε κυλινδρικό αγωγό: Σύγκριση αδιάστατων παροχών $G(t)$ μεταξύ DVM και DSMC για $\delta = 10$

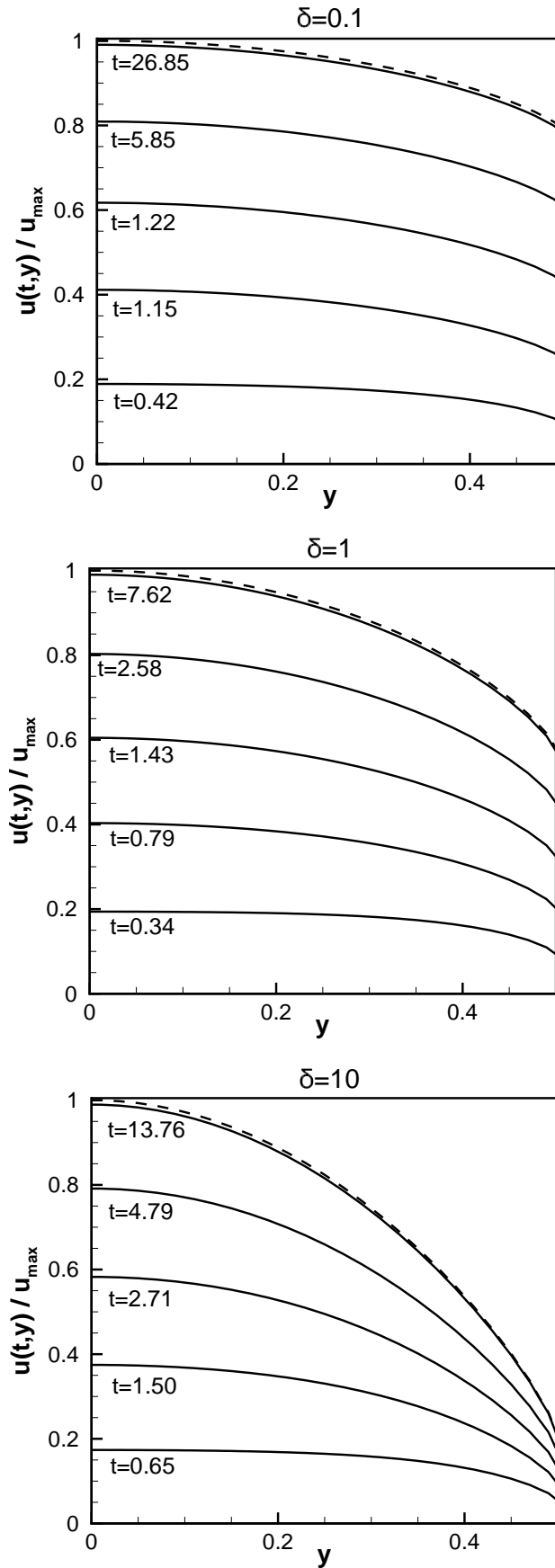
t	G_{DVM}	G_{DSMC}	Σχετικό Σφάλμα
0	0.000	0.000	-
1	0.814	0.791	2.8%
2	1.407	1.383	1.7%
3	1.862	1.841	1.1%
4	2.220	2.216	0.2%
5	2.501	2.545	1.8%
6	2.723	2.747	0.9%
7	2.899	2.912	0.4%
8	3.038	3.071	1.1%
9	3.148	3.158	0.3%
10	3.235	3.266	1.0%
11	3.303	3.305	0.1%
12	3.358	3.378	0.6%
13	3.401	3.404	0.1%
14	3.435	3.454	0.6%
15	3.462	3.495	1.0%
16	3.483	3.469	0.4%
17	3.500	3.512	0.3%
18	3.513	3.530	0.5%
19	3.524	3.542	0.5%
20	3.564	3.548	0.4%
21	3.564	3.551	0.4%
22	3.564	3.550	0.4%



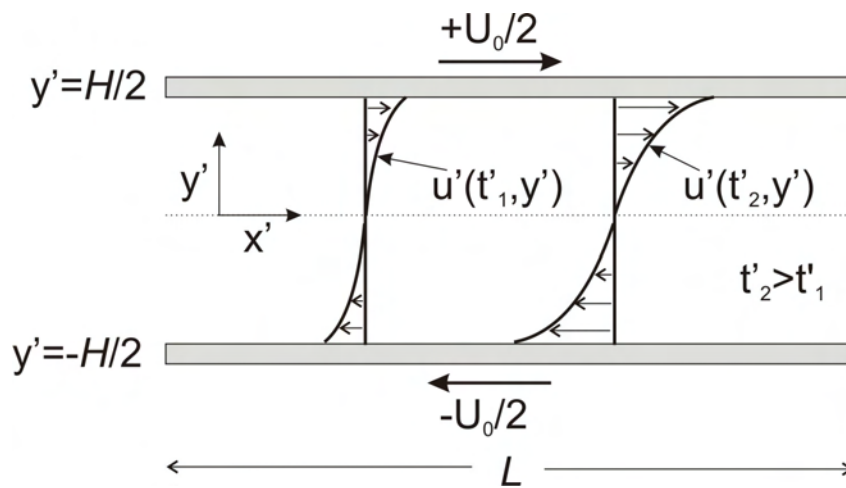
Σχήμα 3.1: Γεωμετρική διαμόρφωση ροής Poiseuille σε παράλληλες πλάκες και ποιοτική εικόνα χρονικής εξέλιξης της ταχύτητας



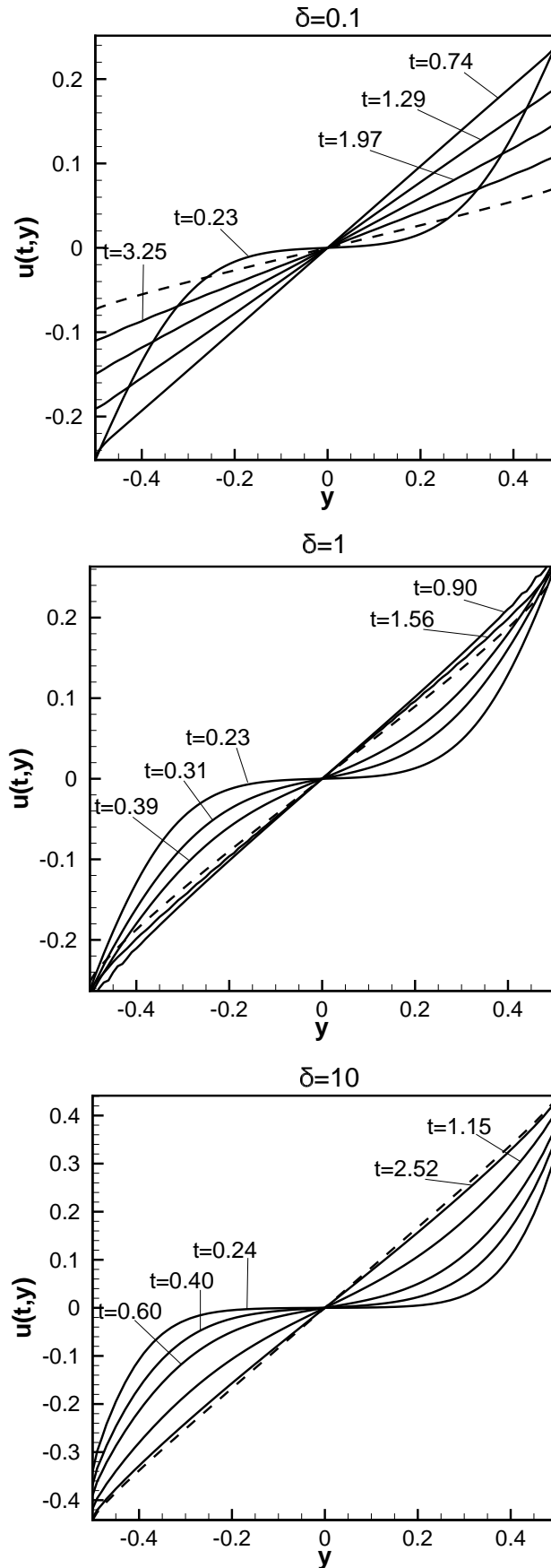
Σχήμα 3.2: Χρονομεταβαλλόμενη ροή Poiseuille σε παράλληλες πλάκες - Μοντέλο BGK: Χρονική εξέλιξη κανονικοποιημένων κατανομών ταχυτήτων για συγκεκριμένες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ (οι διακεκομμένες γραμμές αναφέρονται στην αντίστοιχη λύση της μόνιμης ροής Poiseuille).



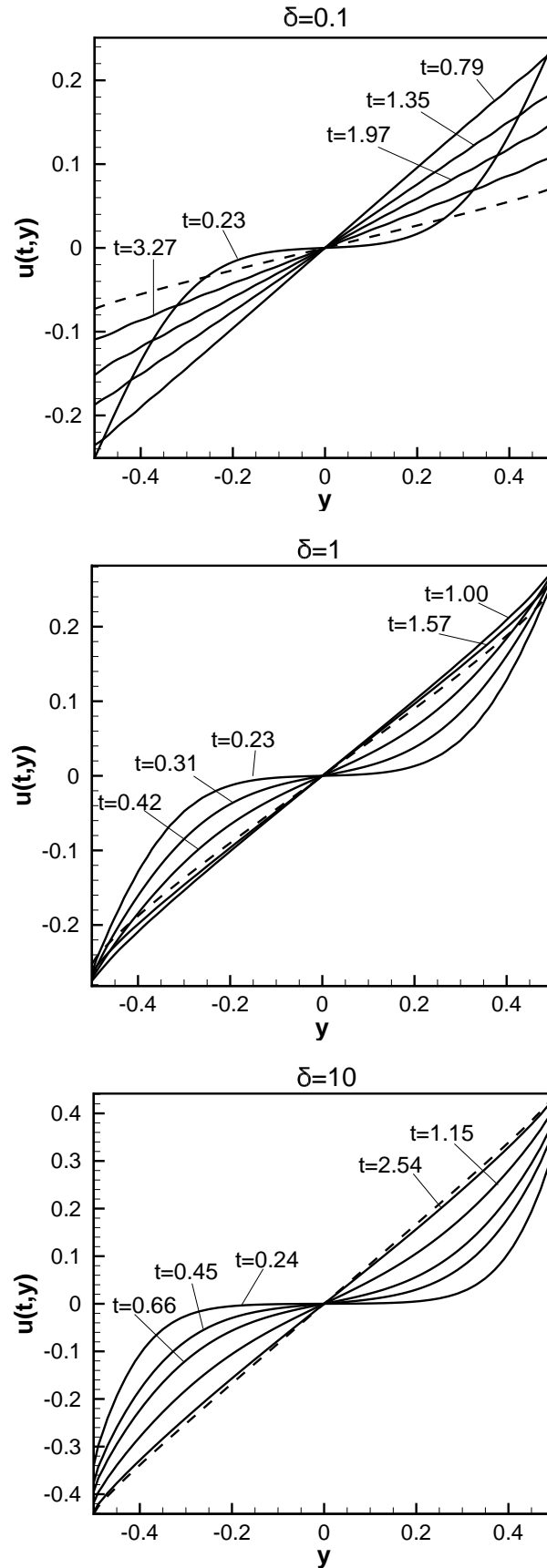
Σχήμα 3.3: Χρονομεταβαλλόμενη ροή Poiseuille σε παράλληλες πλάκες - Μοντέλο Shakhov: Χρονική εξέλιξη κανονικοποιημένων κατανομών ταχυτήτων για συγκεκριμένες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ (οι διακεκομμένες γραμμές αναφέρονται στην αντίστοιχη λύση της μόνιμης ροής Poiseuille).



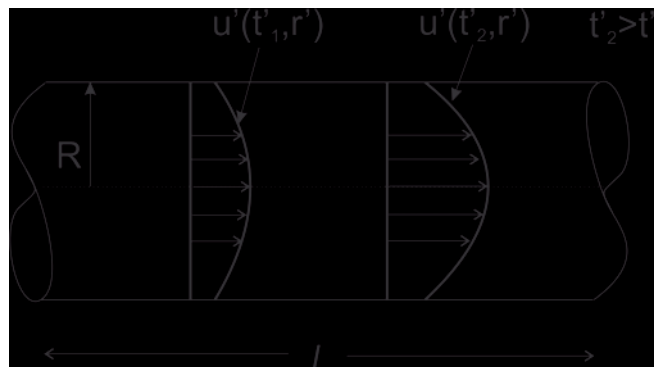
Σχήμα 3.4: Γεωμετρική διαμόρφωση ροής Couette σε παράλληλες πλάκες και ποιοτική εικόνα χρονικής εξέλιξης της ταχύτητας



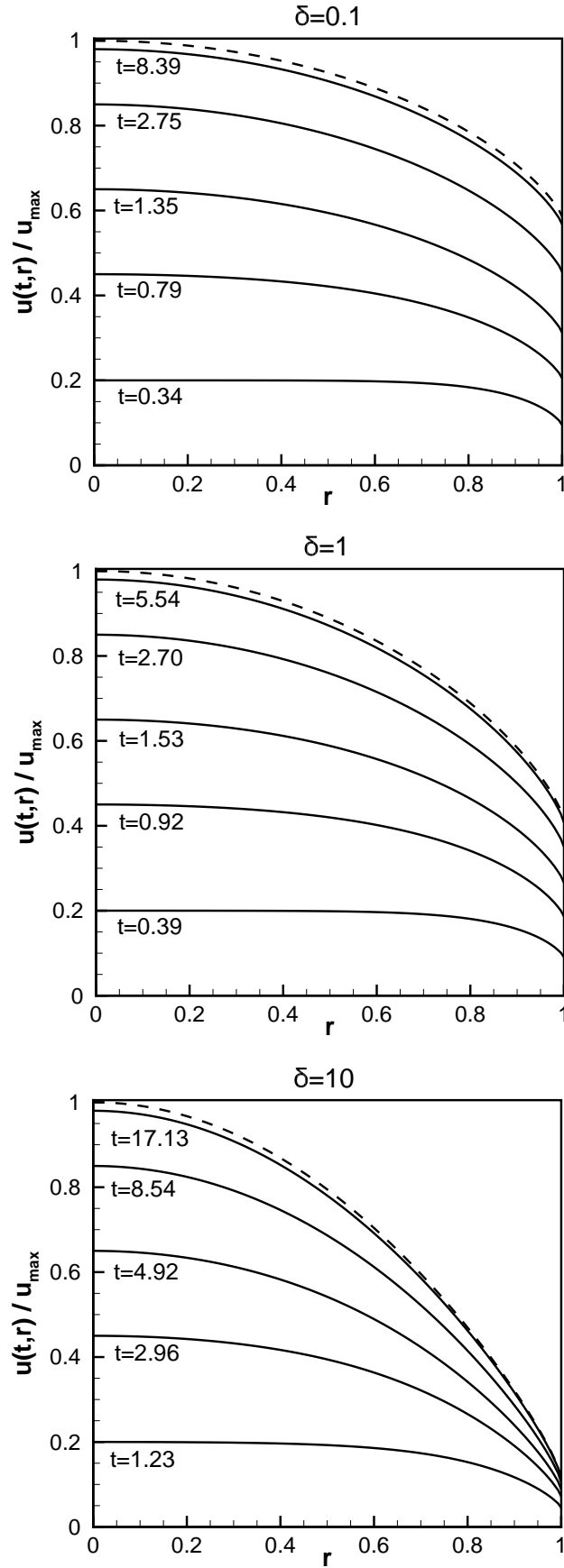
Σχήμα 3.5: Χρονομεταβαλλόμενη ροή Couette σε παράλληλες πλάκες - Μοντέλο BGK: Χρονική εξέλιξη κατανομών ταχυτήτων για συγκεκριμένες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ (οι διακεκομμένες γραμμές αναφέρονται στην αντίστοιχη λύση της μόνιμης ροής Couette).



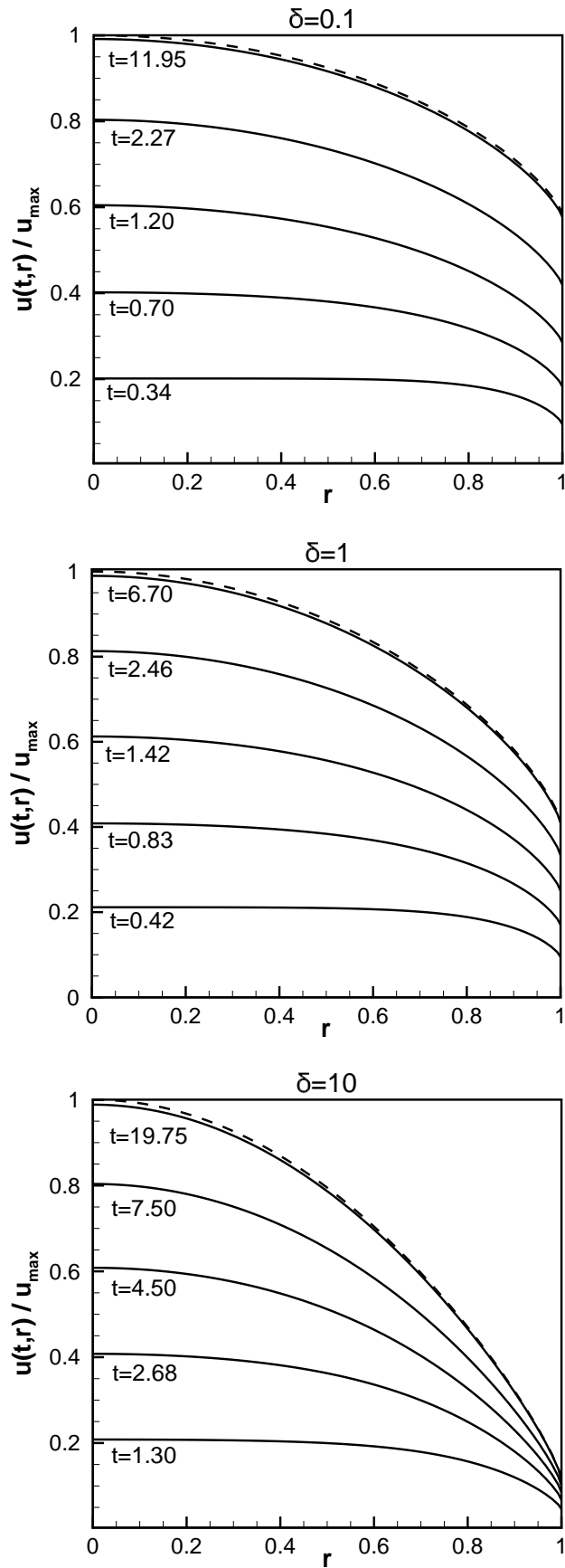
Σχήμα 3.6: Χρονομεταβαλλόμενη ροή Couette σε παράλληλες πλάκες - Μοντέλο Shakhov: Χρονική εξέλιξη κατανομών ταχυτήτων για συγκεκριμένες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ (οι διακεκομμένες γραμμές αναφέρονται στην λύση του αντίστοιχου προβλήματος μόνιμης ροής Couette).



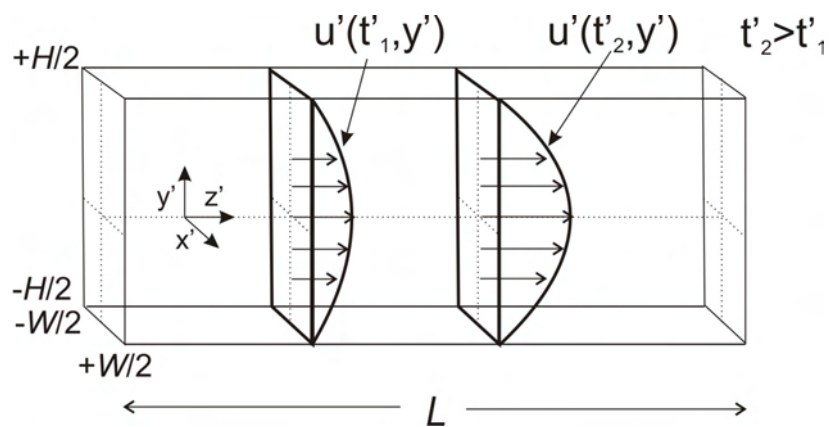
Σχήμα 3.7: Γεωμετρική διαμόρφωση ροής Poiseuille σε κυλινδρικό αγωγό και ποιοτική εικόνα χρονικής εξέλιξης της ταχύτητας



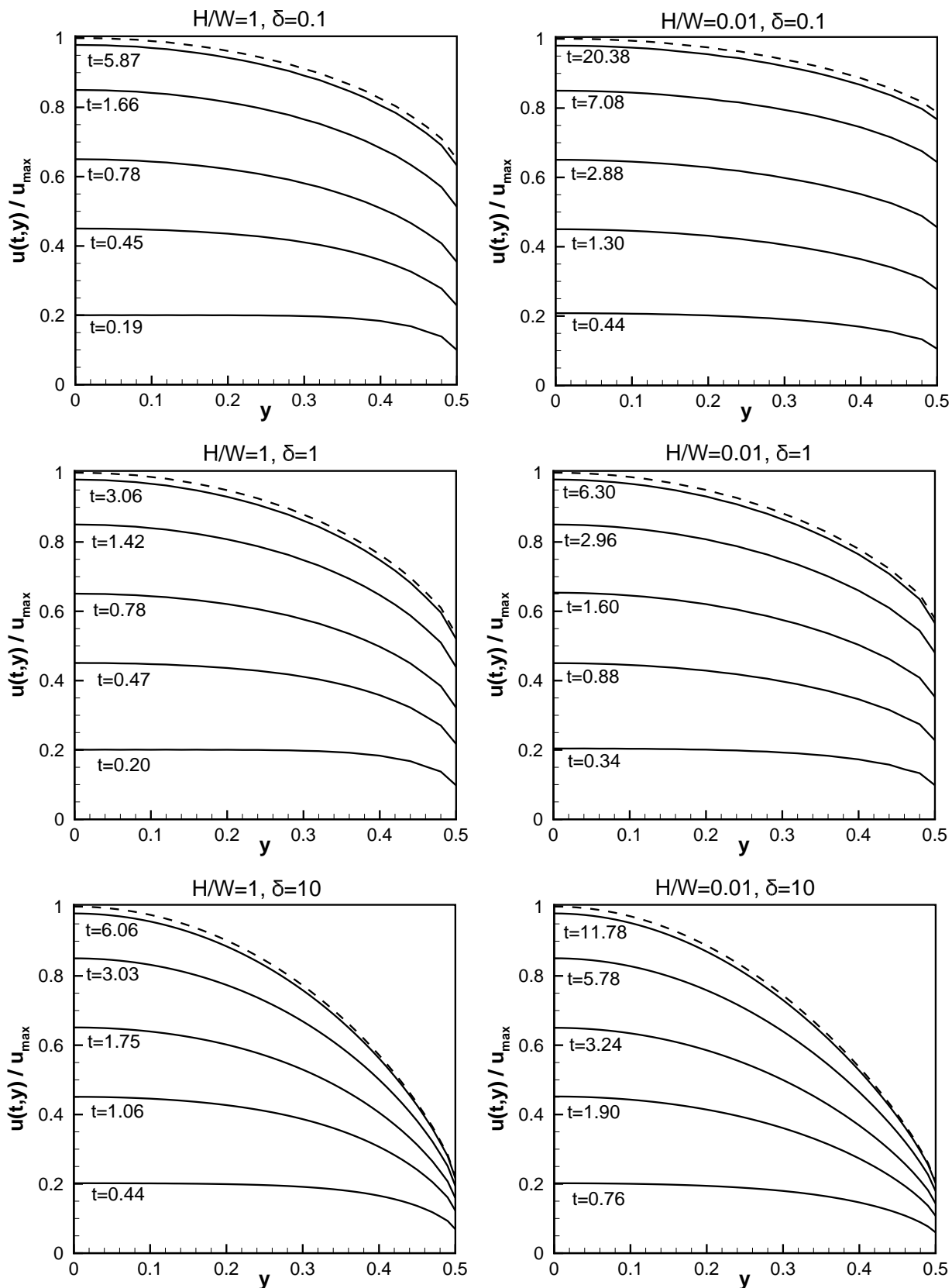
Σχήμα 3.8: Χρονομεταβαλλόμενη ροή Poiseuille σε κυλινδρικό αγωγό - Μοντέλο BGK: Χρονική εξέλιξη κανονικοποιημένων κατανομών ταχυτήτων για συγκεκριμένες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ (οι διακεκομμένες γραμμές αναφέρονται στην αντίστοιχη λύση της μόνιμης ροής Poiseuille).



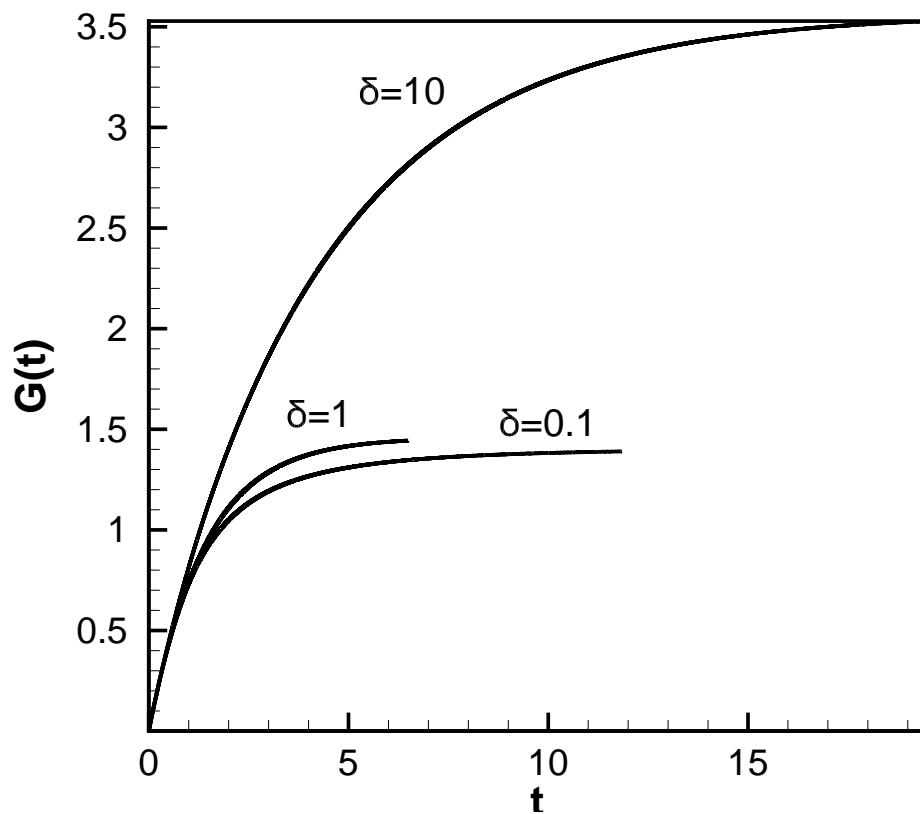
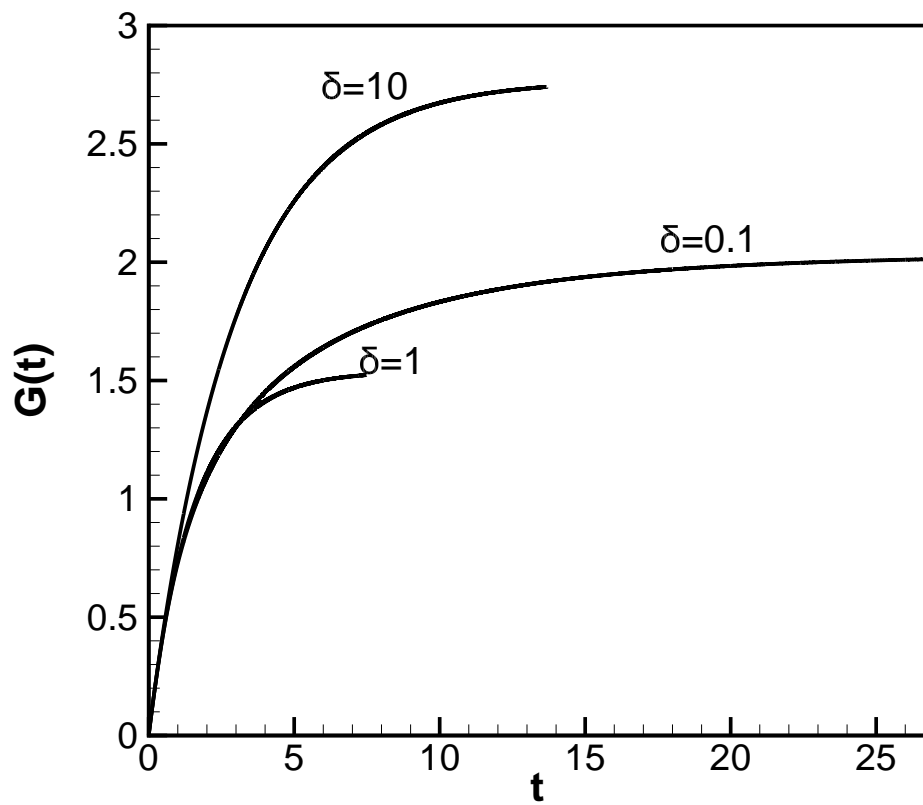
Σχήμα 3.9: Χρονομεταβαλλόμενη ροή Poiseuille σε κυλινδρικό αγωγό - Μοντέλο Shakhov: Χρονική εξέλιξη κατανομών ταχυτήτων για συγκεκριμένες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης (οι διακεκομμένες γραμμές αναφέρονται στην λύση του αντίστοιχου προβλήματος μόνιμης ροής Poiseuille).



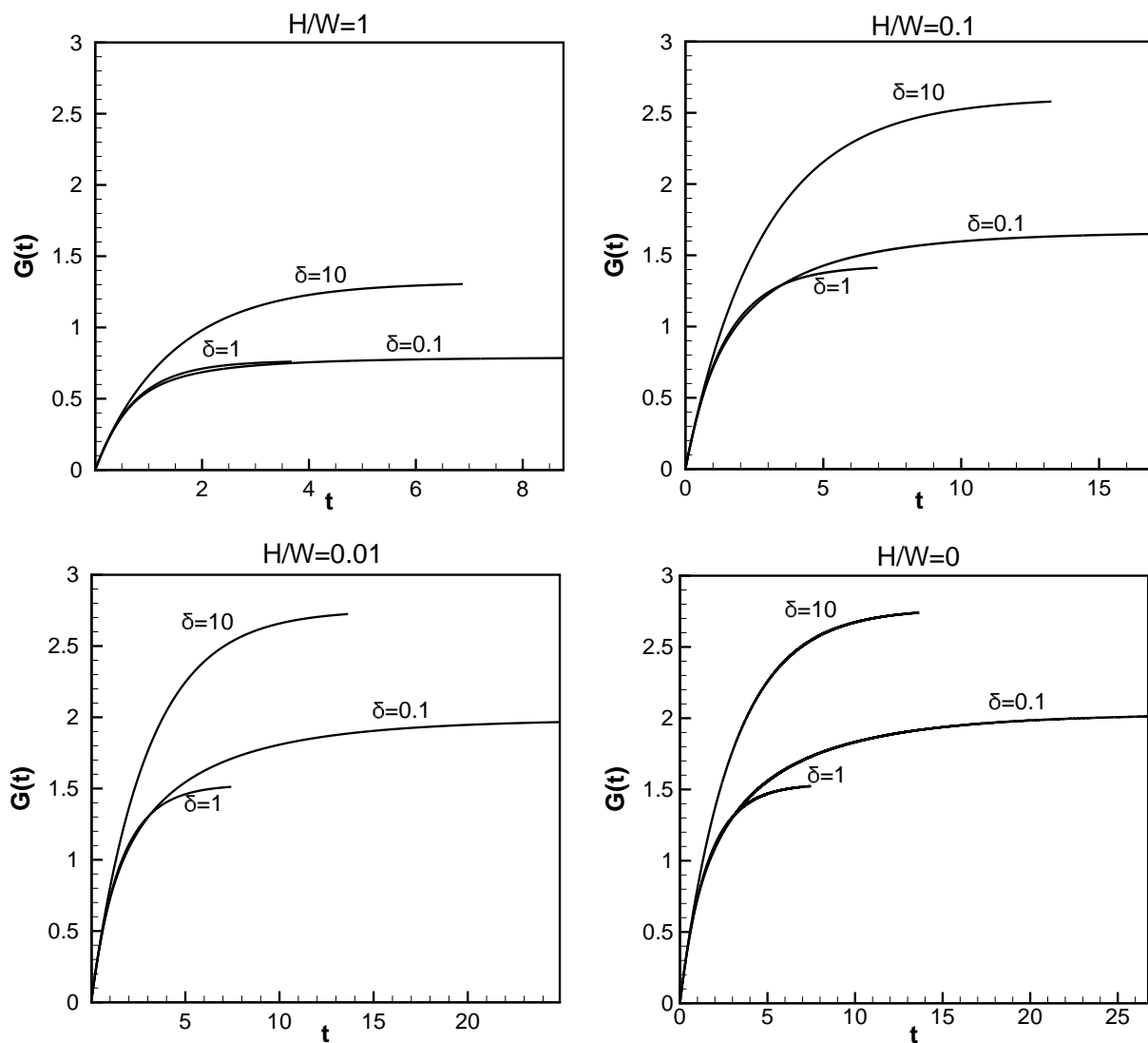
Σχήμα 3.10: Γεωμετρική διαμόρφωση ροής Poiseuille σε αγωγό ορθογωνικής διατομής και ποιοτική εικόνα χρονικής εξέλιξης της ταχύτητας



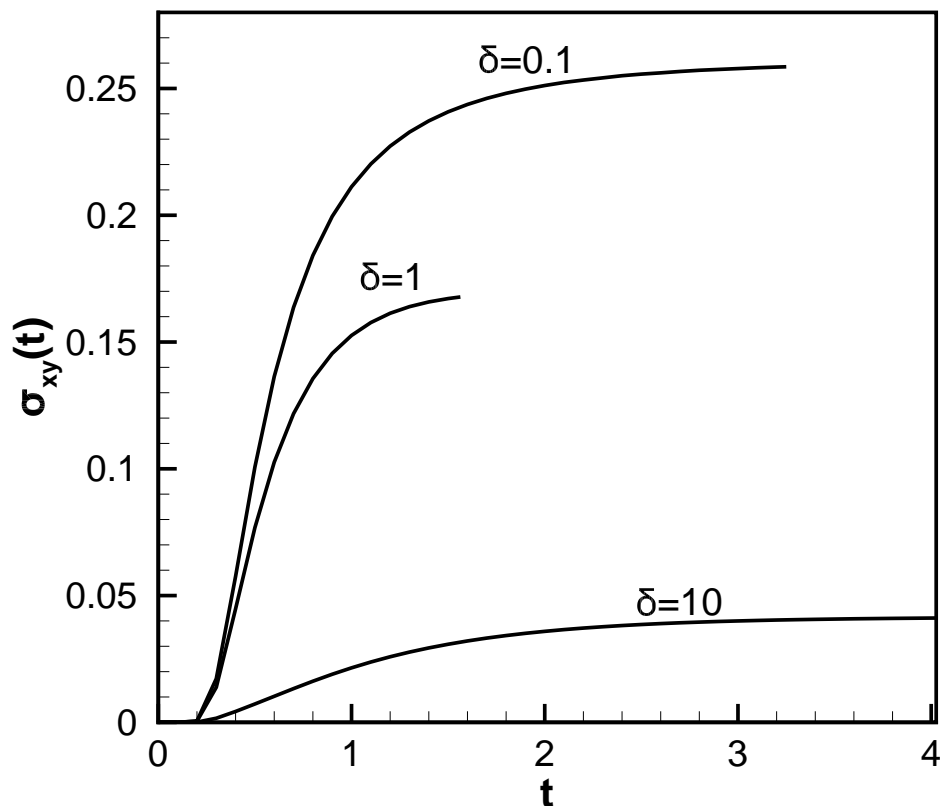
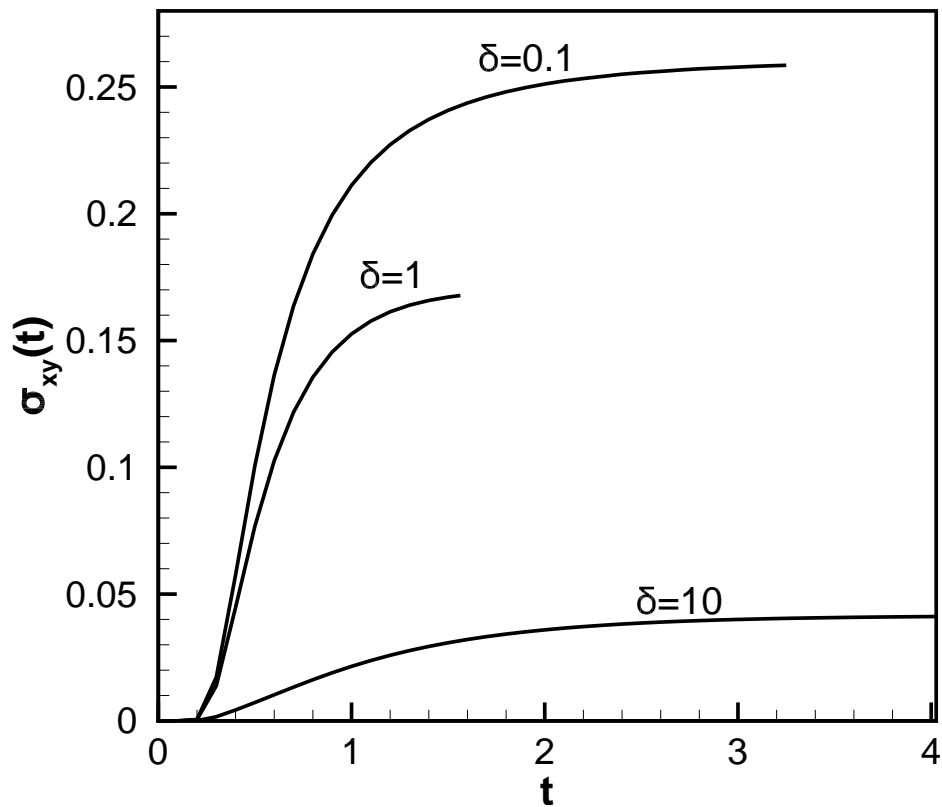
Σχήμα 3.11: Χρονομεταβαλλόμενη ροή Poiseuille σε ορθογωνικό αγωγό - Μοντέλο BGK: Χρονική εξέλιξη των κανονικοποιημένων κατανομών ταχυτήτων για συγκεκριμένες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ με $H/W = 1$ (αριστερά) και $H/W = 0.01$ (δεξιά) (οι διακεκομμένες γραμμές αναφέρονται στην αντίστοιχη λύση της μόνιμης ροής).



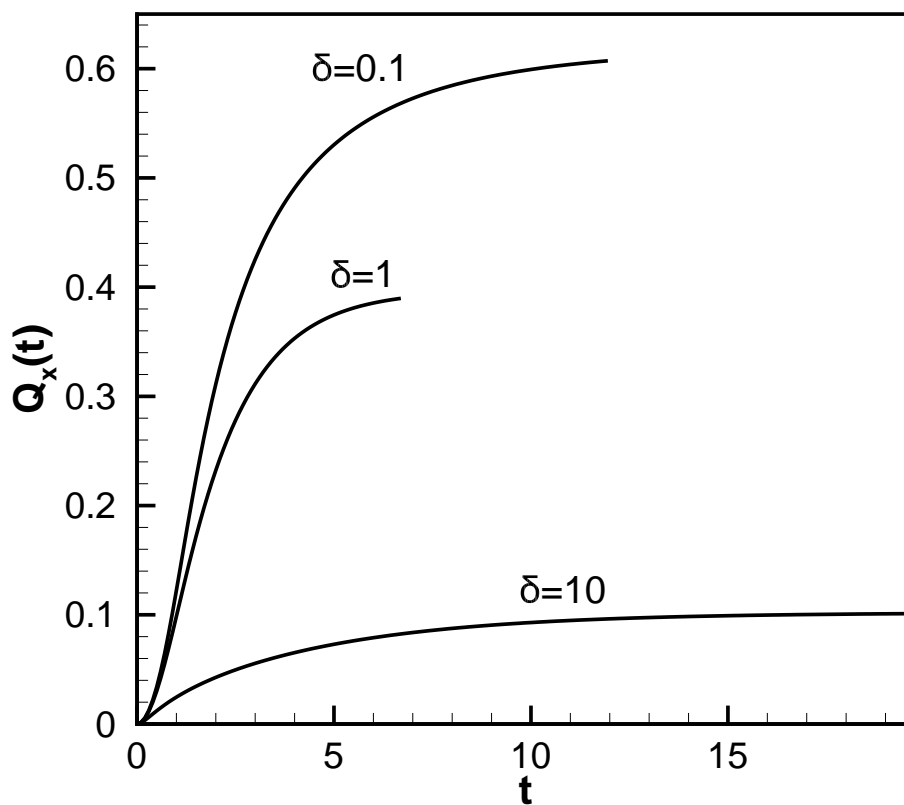
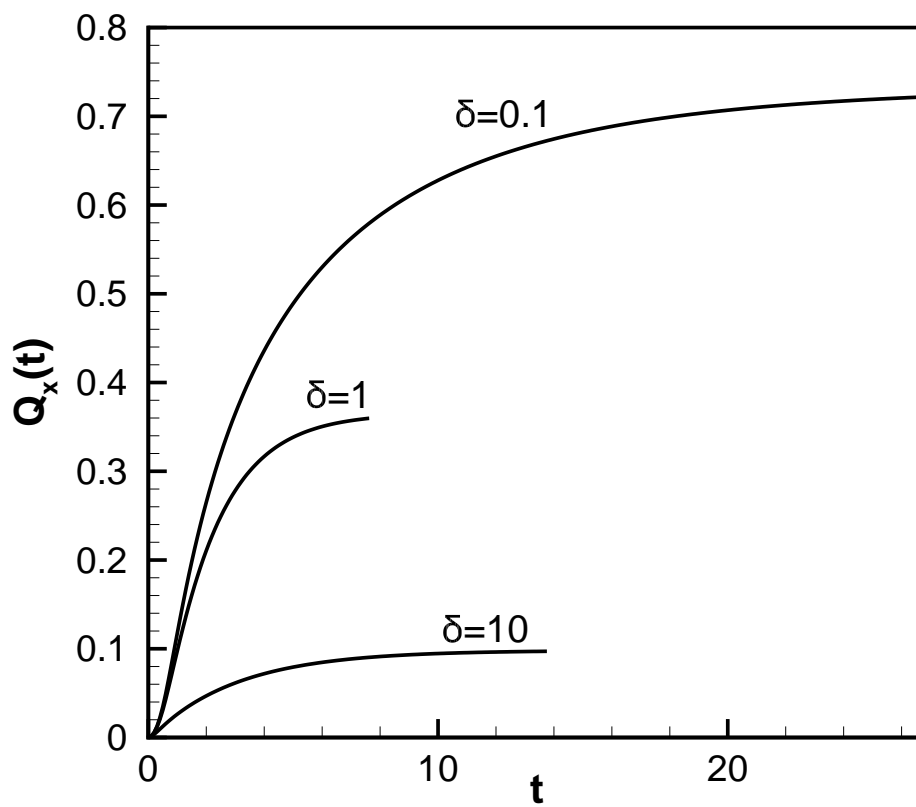
Σχήμα 3.12: Χρονική εξέλιξη αδιάστατης παροχής $G(t)$ (απόλυτες τιμές) για χρονομεταβαλλόμενη ροή Poiseuille σε παράλληλες πλάκες (πάνω) και ροή Poiseuille σε κυλινδρικό αγωγό (κάτω) (Μοντέλο BGK).



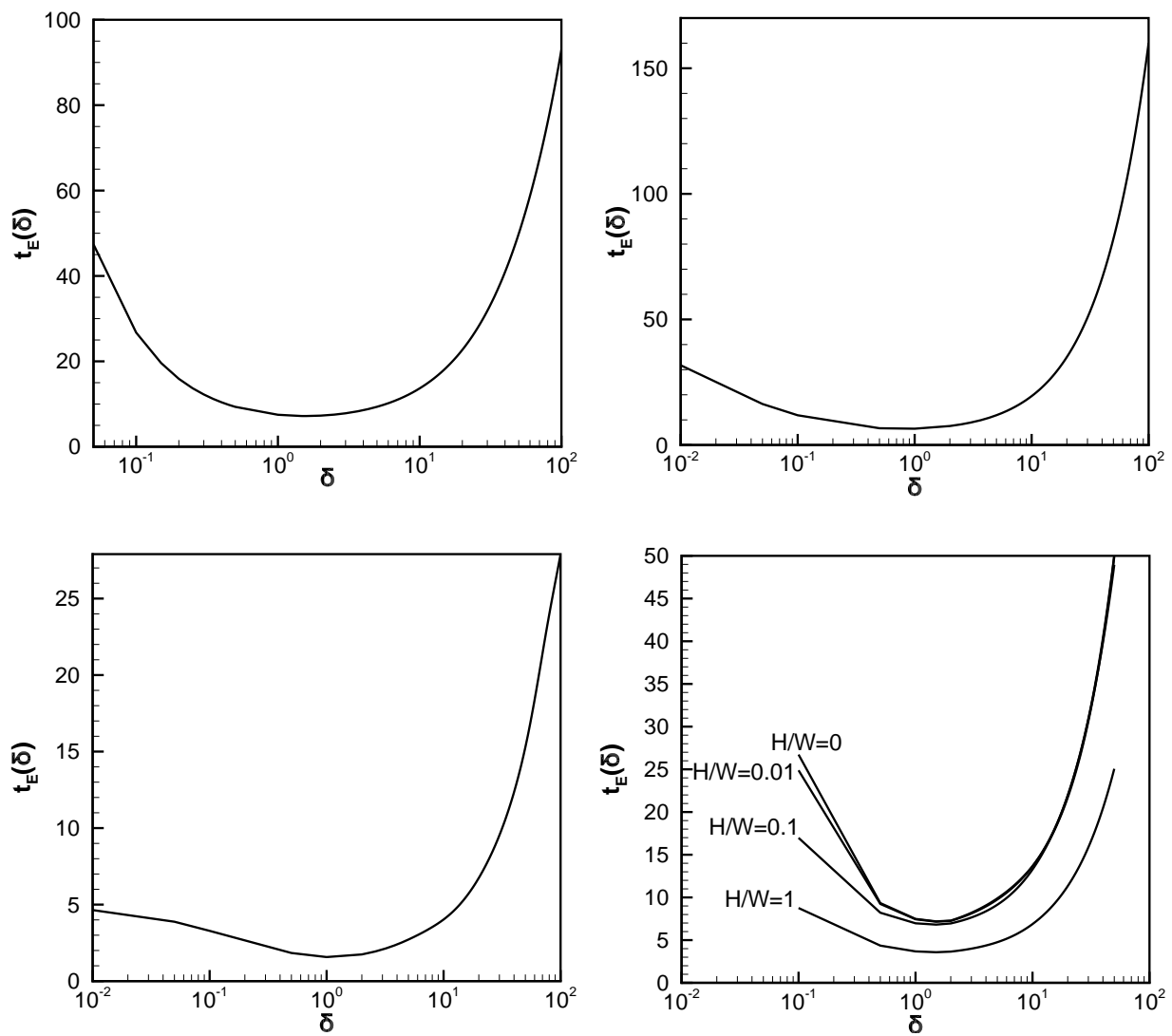
Σχήμα 3.13: Χρονική εξέλιξη αδιάστατης παροχής $G(t)$ (απόλυτες τιμές) για χρονομεταβαλλόμενη ροή Poiseuille σε ορθογωνικό αγωγό, για συγκεκριμένες τιμές τις παραμέτρου αραιοποίησης δ και διάφορους λόγους H/W (Μοντέλο BGK)



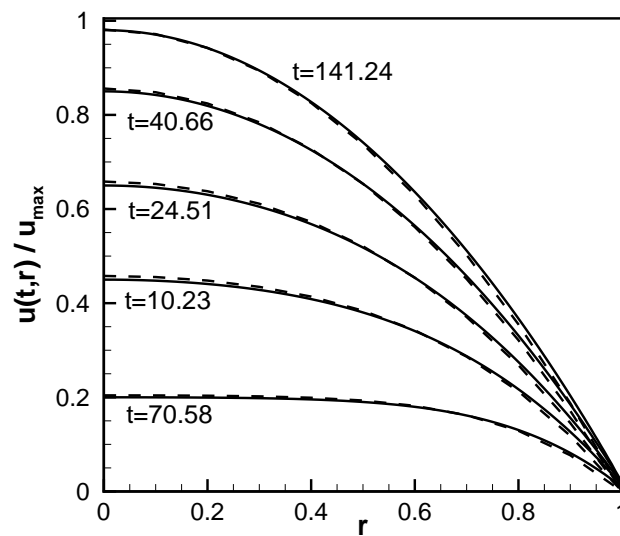
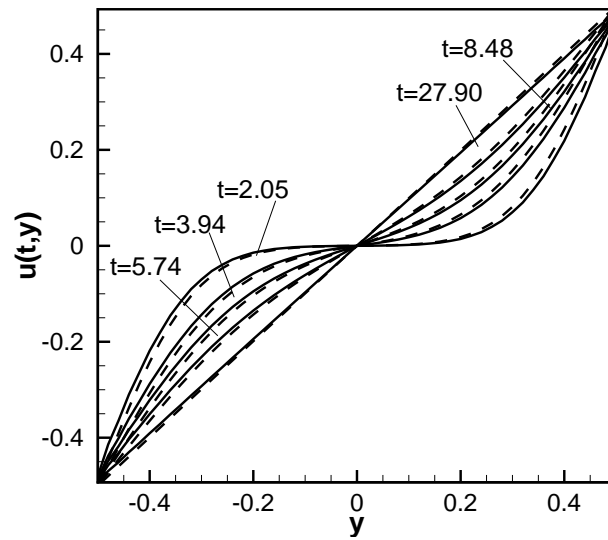
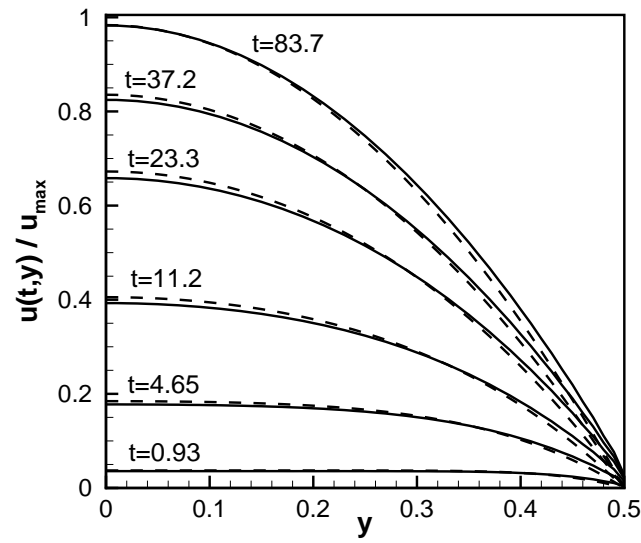
Σχήμα 3.14: Χρονική εξέλιξη διατμητικής τάσης $\sigma_{xy}(t)$ (απόλυτες τιμές) για ροή Couette σε παράλληλες πλάκες. Μοντέλο BGK (πάνω) και Shakhov (κάτω).



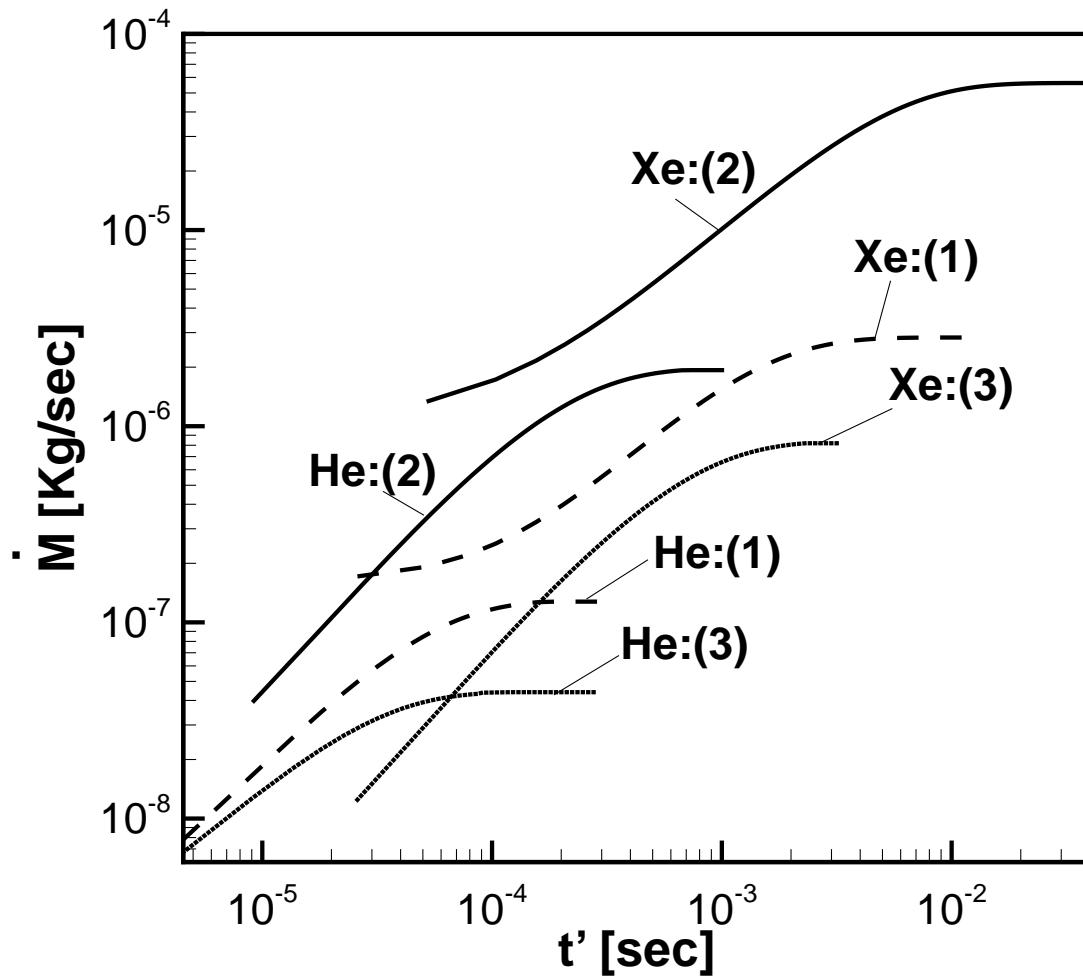
Σχήμα 3.15: Χρονομεταβαλλόμενη ροή Poiseuille σε παράλληλες πλάκες (πάνω) και κυλινδρικό αγωγό (κάτω)- Μοντέλο Shakhon: Χρονική εξέλιξη μέσης αξονικής θερμορροής Q_x για συγκεκριμένες τιμές τις παραμέτρου αραιοποίησης.



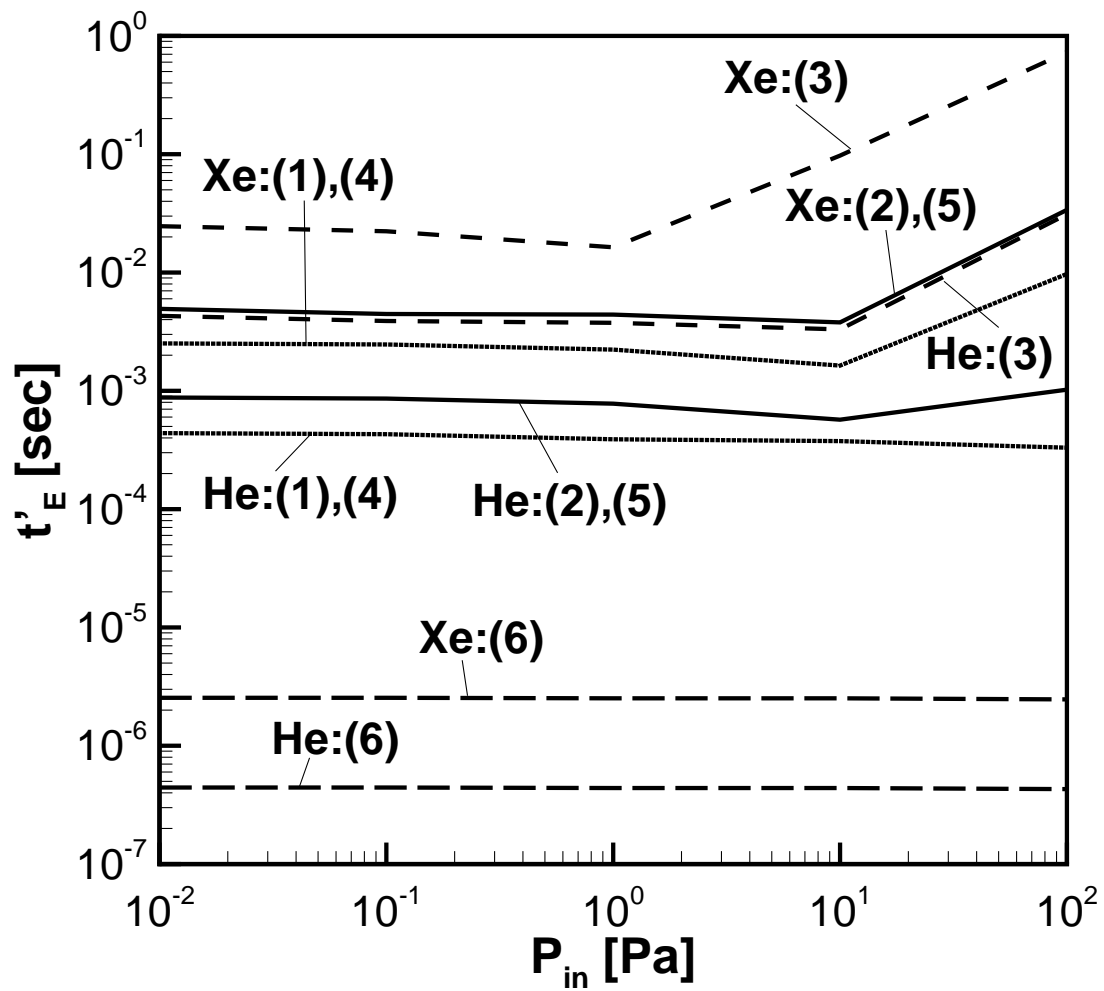
Σχήμα 3.16: Αδιάστατος συνολικός χρόνος ισορροπίας t_E , συναρτήσει της παραμέτρου αραιοποίησης δ στις χρονομεταβαλλόμενες ροές Poiseuille σε παράλληλες πλάκες (πάνω αριστερά), Poiseuille σε κυλινδρικό αγωγό (πάνω δεξιά), Couette σε παράλληλες πλάκες (κάτω αριστερά) και Poiseuille σε ορθογωνικό αγωγό (κάτω δεξιά)



Σχήμα 3.17: Σύγκριση μεταξύ των υπολογιστικών (διακεκομμένες γραμμές) και των αναλυτικών (συμπαγείς γραμμές) κατανομών ταχυτήτων για $\delta = 100$ σε χρονομεταβαλλόμενες ροές Poiseuille σε παράλληλες πλάκες (πάνω), Couette σε παράλληλες πλάκες (μέση) και Poiseuille σε κυλινδρικό αγωγό (κάτω).



Σχήμα 3.18: Διαστατές μαζικές παροχές $\dot{M} [Kg/sec]$ για ροή He και Xe προς κενό σε κυλινδρικό αγωγό για διάφορους συνδυασμούς διαμέτρου, μήκους αγωγού και πίεσης εισόδου. Οι αριθμοί στις παρενθέσεις δηλώνουν την περίπτωση (βλέπε Πίνακα 3.2).



Σχήμα 3.19: Διαστατοί συνολικοί χρόνοι ισορροπίας $t' [sec]$ συναρτήσει της πίεσης εισόδου $P_{in} [Pa]$ για ροή He και Xe προς κενό σε κυλινδρικό αγωγό για διάφορους συνδυασμούς διαμέτρου, μήκους αγωγού και πίεσης εισόδου. Οι αριθμοί στις παρενθέσεις δηλώνουν την περίπτωση (βλέπε Πίνακα 3.3).

Κεφάλαιο 4

Γραμμικές χρονομεταβαλλόμενες ροές μιγμάτων αερίων

4.1 Βασικοί ορισμοί

Η μεθοδολογία επίλυσης μη μόνιμων κινητικών εξισώσεων για μονοατομικά αέρια επεκτείνεται σε ροές μιγμάτων δύο αερίων συστατικών, μοριακών μαζών m_1 και m_2 . Εξετάζονται οι ροές ανάμεσα σε πλάκες και σε κυλινδρικούς αγωγούς. Τώρα οι συναρτήσεις κατανομής είναι δύο, μία για κάθε συστατικό του μίγματος, διπλασιάζεται δε ο αριθμός των κινητικών εξισώσεων. Χρησιμοποιείται ο δείκτης 1 για το ελαφρύτερο συστατικό και ο δείκτης 2 για το βαρύτερο. Επίσης, οι ποσότητες ορίζονται για ολόκληρο το μίγμα σε σχέση με τις αντίστοιχες ποσότητες των συστατικών του.

Η μοριακή συγκέντρωση του μίγματος ορίζεται ως

$$C = \frac{n_1}{n_1 + n_2}, \quad (4.1.1)$$

όπου n_a ($a = 1, 2$) η αριθμητική πυκνότητα κάθε συστατικού. Η αριθμητική πυκνότητα του μίγματος είναι το άθροισμα των αριθμητικών πυκνοτήτων των συστατικών του

$$n = n_1 + n_2. \quad (4.1.2)$$

Αντίστοιχα, η πυκνότητα του μίγματος ισούται με

$$\rho = \rho_1 + \rho_2 \quad (4.1.3)$$

όπου $\rho_a = n_a m_a$, ($a = 1, 2$). Επίσης, η πίεση του μίγματος ισούται με το άθροισμα των πιέσεων

των συστατικών του

$$P = P_1 + P_2. \quad (4.1.4)$$

Για το ιξώδες του μίγματος ισχύει η σχέση

$$\mu = \mu_1 + \mu_2, \quad (4.1.5)$$

όπου

$$\mu_a = P_a \frac{S_\beta + \nu_{\alpha\beta}^{(4)}}{S_a S_\beta - \nu_{a\beta}^{(4)} \nu_{\beta a}^{(4)}}, \quad a = 1, 2, \beta \neq a. \quad (4.1.6)$$

Οι ποσότητες S_a και $\nu_{a\beta}^{(4)}$ ορίζονται στην επόμενη ενότητα με τις εξισώσεις (4.2.9) και (4.2.15) αντίστοιχα. Η μέση μοριακή μάζα του μίγματος ορίζεται ως

$$m = C m_1 + (1 - C) m_2. \quad (4.1.7)$$

Οι ροές ενός αερίου χαρακτηρίζονται από το γεγονός πως η μέση μοριακή ταχύτητα $\bar{\xi}$ ταυτίζεται με τη μακροσκοπική (υδροδυναμική ταχύτητα) του αερίου \mathbf{u}' . Στις ροές μιγμάτων αυτό δεν ισχύει αφού η μέση μοριακή ταχύτητα του μίγματος γράφεται ως

$$\bar{\xi} = \frac{1}{n} (n_1 \bar{\xi}_1 + n_2 \bar{\xi}_2), \quad (4.1.8)$$

όπου $\bar{\xi}_a$, ($a = 1, 2$) είναι η μέση μοριακή ταχύτητα κάθε συστατικού, ενώ η υδροδυναμική ταχύτητα του μίγματος ορίζεται ως

$$\mathbf{u}' = \frac{1}{\rho} (\rho_1 \mathbf{u}'_1 + \rho_2 \mathbf{u}'_2) \quad (4.1.9)$$

όπου \mathbf{u}'_a , ($a = 1, 2$) είναι οι μακροσκοπικές ταχύτητες κάθε συστατικού. Επειδή, όπως αναφέρθηκε προηγουμένως, στις ροές μιγμάτων αερίων είναι γενικά $\bar{\xi} \neq \mathbf{u}'$, μπορεί να παρατηρηθεί μια σχετική κίνηση του ενός συστατικού ως προς το άλλο και του κάθε συστατικού ως προς το μίγμα. Δημιουργείται κατ' αυτόν τον τρόπο το φαινόμενο του διαχωρισμού των δύο αερίων του μίγματος, το οποίο έχει ως αποτέλεσμα να μετατρέπεται η μοριακή συγκέντρωση του μίγματος. Ορίζονται δύο ταχύτητες διάχυσης των συστατικών του μίγματος. Η σχετική ταχύτητα διάχυσης ενός συστατικού ως προς την \mathbf{u} : $\bar{\xi}_i - \mathbf{u}$ και η σχετική ταχύτητα διάχυσης ενός συστατικού ως προς την $\bar{\xi}$: $\bar{\xi}_i - \bar{\xi}$. Γενικά, η πρώτη εξ αυτών είναι κατάλληλη για την περιγραφή της επιτάχυνσης και φαινομένων τριβής, ενώ η δεύτερη είναι περισσότερο κατάλληλη για την περιγραφή της διάχυσης και της μεταφοράς θερμότητας με αγωγή σε αργά κινούμενα αέρια. Μια άλλη χρήσιμη ποσότητα

είναι η μέση ταχύτητα του μίγματος, η οποία ορίζεται ως

$$\mathbf{w} = \frac{1}{n} (n_1 \mathbf{u}'_1 + n_2 \mathbf{u}'_2). \quad (4.1.10)$$

Η παράμετρος αραιοποίησης που χαρακτηρίζει τη συγκεκριμένη ροή δίνεται από τη σχέση

$$\delta = \frac{H P_0}{\mu v_0}, \quad (4.1.11)$$

ενώ η παράμετρος αραιοποίησης κάθε συστατικού γράφεται, αντίστοιχα, ως

$$\delta_a = \frac{H P_{0a}}{\mu_a v_{0a}}, \quad (a = 1, 2) \quad (4.1.12)$$

Μελετώνται τρία είδη ροών: Ροές που οφείλονται σε τοπικές βαθμίδες πίεσης, θερμοκρασίας ή συγκέντρωσης κατά την κατεύθυνση του x' , παράλληλα προς τις πλάκες. Ως αποτέλεσμα, προκύπτουν πλήρως ανεπτυγμένες, χρονικά εξελισσόμενες, αραιοποιημένες ροές κατά την αξονική κατεύθυνση, οι οποίες σιγά σιγά, καθώς $t' \rightarrow \infty$, προσεγγίζουν τις αντίστοιχες μόνιμες ροές. Θεωρούμε ότι οι βαθμίδες είναι πολύ μικρές και κατά συνέπεια οι κινητικές εξισώσεις μπορούν να γραμμικοποιηθούν και μπορεί να χρησιμοποιηθεί το κινητικό μοντέλο McCormack για τη μοντελοποίηση του όρου των συγκρούσεων. Το μεταβατικό πρόβλημα επιλύεται σε όλο το εύρος της παραμέτρου αραιοποίησης. Οι ομοιόμορφες βαθμίδες, που εφαρμόζονται ξαφνικά στο πεδίο και προκαλούν τη ροή κατά την αξονική κατεύθυνση, ορίζονται ως

$$X_P = \frac{H}{P} \frac{dP}{dx'} = \frac{1}{P} \frac{dP}{dx}, \quad X_T = \frac{H}{T} \frac{dT}{dx'} = \frac{1}{T} \frac{dT}{dx}, \quad X_C = \frac{H}{C} \frac{dC}{dx'} = \frac{1}{C} \frac{dC}{dx} \quad (4.1.13)$$

Οι μακροσκοπικές ταχύτητες αδιαστατοποιούνται με την πλέον πιθανή μοριακή ταχύτητα v_0 του μίγματος.

4.2 Ροή ανάμεσα σε πλάκες

Γίνεται μελέτη της χρονομεταβαλλόμενης ροής ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες δυαδικών μιγμάτων μονοατομικών αερίων. Η γεωμετρία της ροής είναι αντίστοιχη με αυτή της ροής Poiseuille ενός απλού αερίου, που μελετήθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο και παρουσιάζεται στο Σχήμα 4.1, όπου με u_1 δηλώνεται η ταχύτητα του ελαφρύτερου συστατικού και με u_2 η ταχύτητα του βαρύτερου ($u_1 > u_2$). Στη συγκεκριμένη ροή, εξετάζονται αραιοποιημένα μίγματα δύο αερίων, τα οποία έχουν μοριακές μάζες m_1 και m_2 και μοριακές διαμέτρους d_1 και d_2 με $0 \leq C \leq 1$. Το

μίγμα, αρχικά, βρίσκεται σε ηρεμία και περιέχεται ανάμεσα σε δύο παράλληλες πλάκες, που είναι τοποθετημένες στο $y' = \pm H/2$. Το μήκος των πλακών συμβολίζεται με L ($H/L \ll 1$).

Η αδιαστατοποίηση των χωρικών μεταβλητών x' και y' γίνεται με την απόσταση H μεταξύ των πλακών, ενώ της χρονικής μεταβλητής t' με το λόγο H/v_0

$$y = \frac{y'}{H}, \quad x = \frac{x'}{H}, \quad t = \frac{t'v_0}{H}. \quad (4.2.1)$$

Η ποσότητα H/v_0 είναι ο χαρακτηριστικός χρόνος μεταβολής της ροής του μίγματος. Για τη μοντελοποίηση των υπό εξέταση ροών δυαδικών μιγμάτων χρησιμοποιείται το χρονομεταβαλλόμενο μοντέλο McCormack, το οποίο, έπειτα από τη διαδικασία της προβολής στο χώρο των μοριακών ταχυτήτων, αποτελείται από ένα ζεύγος κινητικών εξισώσεων για κάθε συστατικό δίνοντας έτσι ένα σύνολο τεσσάρων εξισώσεων που πρέπει να επιλυθούν ταυτόχρονα. Οι κινητικές εξισώσεις γράφονται ως

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{m_a}{m}} \frac{\partial \Phi_a}{\partial t} + c_y \frac{\partial \Phi_a}{\partial y} + \omega_a \gamma_a \Phi_a = & \\ & - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{m}{m_a}} \left[X_P + \eta_a X_C + \left(c_y^2 - \frac{1}{2} \right) X_T \right] \\ & + u_a \left[\omega_a \gamma_a - \omega_a \nu_{a\beta}^{(1)} - \frac{1}{2} \omega_a \nu_{a\beta}^{(2)} \left(c_y^2 - \frac{1}{2} \right) \right] \\ & + u_\beta \left[\omega_a \nu_{a\beta}^{(1)} + \frac{1}{2} \omega_a \nu_{a\beta}^{(2)} \left(c_y^2 - \frac{1}{2} \right) \right] \\ & + q_a \left[-\frac{1}{2} \omega_a \nu_{a\beta}^{(2)} + \frac{2}{5} \omega_a \left(\gamma_a - \nu_{aa}^{(5)} + \nu_{aa}^{(6)} - \nu_{a\beta}^{(5)} \right) \left(c_y^2 - \frac{1}{2} \right) \right] \\ & + q_\beta \left[\frac{1}{2} \omega_a \nu_{a\beta}^{(2)} \frac{m_a}{m_\beta} q_\beta + \frac{2}{5} \omega_a \nu_{a\beta}^{(6)} \sqrt{\frac{m_\beta}{m_a}} \left(c_y^2 - \frac{1}{2} \right) \right] \\ & + \Pi_a \left[2\omega_a \sqrt{\frac{m}{m_a}} \left(\gamma_a - \nu_{aa}^{(3)} + \nu_{aa}^{(4)} - \nu_{a\beta}^{(3)} \right) c_y \right] \\ & + \Pi_\beta \left[2\omega_a \sqrt{\frac{m}{m_a}} \nu_{a\beta}^{(4)} c_y \right], \quad a = 1, 2, \quad \beta \neq a \end{aligned} \quad (4.2.2)$$

και

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{m_a}{m}} \frac{\partial \Psi_a}{\partial t} + c_y \frac{\partial \Psi_a}{\partial h} + \omega_a \gamma_a \Psi_a = & - \sqrt{\frac{m}{m_a}} X_T \\ & + u_a \left[-\omega_a \nu_{a\beta}^{(2)} \right] + u_\beta \left[\omega_a \nu_{a\beta}^{(2)} \right] \\ & + q_a \left[\frac{4}{5} \omega_a \left(\gamma_a - \nu_{aa}^{(5)} + \nu_{aa}^{(6)} - \nu_{a\beta}^{(5)} \right) \right] \\ & + q_\beta \left[\frac{4}{5} \omega_a \nu_{a\beta}^{(6)} \sqrt{\frac{m_\beta}{m_a}} \right], \quad a = 1, 2, \quad \beta \neq a \end{aligned} \quad (4.2.3)$$

Οι $\Phi_a = \Phi_a(t, y, c_{ay})$ και $\Psi_a = \Psi_a(t, y, c_{ay})$ με $a = 1, 2$ είναι οι συναρτήσεις κατανομής. Οι μακροσκοπικές ποσότητες, δηλαδή η μακροσκοπική ταχύτητα, η θερμορροή και η διατμητική τάση υπολογίζονται από τις ακόλουθες σχέσεις

$$u_a(t, y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_a e^{-c_y^2} dc_y \quad (4.2.4)$$

$$q_a(t, y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\Psi_a + \left(c_y^2 - \frac{1}{2} \right) \Phi_a \right] e^{-c_y^2} dc_y \quad (4.2.5)$$

$$\Pi_a(t, y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{m_a}{m}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_a c_y e^{-c_y^2} dc_y \quad (4.2.6)$$

Οι ποσότητες η_a, ω_a , που χρησιμοποιήθηκαν στους προηγούμενους τύπους δίνονται στη συνέχεια με τους τύπους

$$\eta_1 = 1, \quad \eta_2 = -\frac{C_0}{1 - C_0}$$

$$\omega_a = \frac{\delta_a}{\gamma_a} = \delta \left(\frac{C_0}{\gamma_1} + \frac{1 - C_0}{\gamma_2} \right) \sqrt{\frac{m_a}{m}}, \quad a = 1, 2, \quad (4.2.7)$$

όπου γ_a είναι οι συχνότητες συγκρούσεων και ορίζονται ως

$$\gamma_a = \frac{S_a S_\beta - \nu_{a\beta}^{(4)} \nu_{\beta a}^{(4)}}{S_2 + \nu_{a\beta}^{(4)}} \quad (4.2.8)$$

με

$$S_a = \nu_{aa}^{(3)} - \nu_{aa}^{(4)} + \nu_{a\beta}^{(3)} \quad (4.2.9)$$

Οι ποσότητες $\nu_{aa}^{(k)}, k = 1, \dots, 6$ ορίζονται μέσα από τα Omega-ολοκληρώματα $\Omega_{a\beta}^{(ij)}$ Chapman-Cowling, τα οποία για το ενδομοριακό μοντέλο των σκληρών σφαιρών, το οποίο χρησιμοποιούμε στη συγκεκριμένη μελέτη, δίνονται από την ακόλουθη σχέση

$$\Omega_{a\beta}^{(ij)} = \frac{(j+1)!}{8} \left[1 - \frac{1 + (-1)^i}{2(i+1)} \right] \left(\frac{\pi k T}{2m_{a\beta}} \right)^{1/2} (d_a + d_\beta)^2 \quad (4.2.10)$$

όπου

$$m_{a\beta} = \frac{m_a m_\beta}{m_\beta + m_a}. \quad (4.2.11)$$

Έχουμε λοιπόν

$$\nu_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{16}{3} \frac{m_{\alpha\beta}}{m_a} n_\beta \Omega_{\alpha\beta}^{11} \quad (4.2.12)$$

$$\nu_{\alpha\beta}^{(2)} = \frac{64}{15} \left(\frac{m_{\alpha\beta}}{m_a} \right)^2 n_\beta \left(\Omega_{\alpha\beta}^{12} - \frac{5}{2} \Omega_{\alpha\beta}^{11} \right) \quad (4.2.13)$$

$$\nu_{\alpha\beta}^{(3)} = \frac{16}{5} \frac{(m_{\alpha\beta})^2}{m_a m_\beta} n_\beta \left(\frac{10}{3} \Omega_{\alpha\beta}^{11} + \frac{m_\beta}{m_\alpha} \Omega_{\alpha\beta}^{22} \right) \quad (4.2.14)$$

$$\nu_{\alpha\beta}^{(4)} = \frac{16}{5} \frac{(m_{\alpha\beta})^2}{m_a m_\beta} n_\beta \left(\frac{10}{3} \Omega_{\alpha\beta}^{11} - \Omega_{\alpha\beta}^{22} \right) \quad (4.2.15)$$

$$\nu_{\alpha\beta}^{(5)} = \frac{64}{15} \left(\frac{m_{\alpha\beta}}{m_a} \right)^3 \left(\frac{m_\alpha}{m_\beta} \right) n_\beta \left[\Omega_{\alpha\beta}^{22} + \left(\frac{15m_a}{4m_\beta} + \frac{25}{8} \frac{m_\beta}{m_a} \right) \Omega_{\alpha\beta}^{11} - \frac{1}{2} \frac{m_\beta}{m_a} \left(5\Omega_{\alpha\beta}^{12} - \Omega_{\alpha\beta}^{13} \right) \right] \quad (4.2.16)$$

$$\nu_{\alpha\beta}^{(6)} = \frac{64}{15} \left(\frac{m_{\alpha\beta}}{m_a} \right)^3 \left(\frac{m_\alpha}{m_\beta} \right)^{3/2} n_\beta \left(-\Omega_{\alpha\beta}^{22} + \frac{55}{8} \Omega_{\alpha\beta}^{11} - \frac{5}{2} \Omega_{\alpha\beta}^{12} - \frac{1}{2} \Omega_{\alpha\beta}^{13} \right) \quad (4.2.17)$$

Η διατύπωση του προβλήματος ολοκληρώνεται με την υλοποίηση των οριακών και αρχικών συνθηκών. Οι οριακές συνθήκες πλήρους διάχυσης του Maxwell για το μοντέλο McCormack δίνονται από τις σχέσεις

$$\Phi_a(t, -1/2, c_y) = 0, \quad c_y > 0, \quad \Phi_a(t, 1/2, c_y) = 0, \quad c_y < 0, \quad (4.2.18)$$

$$\Psi_a(t, -1/2, c_y) = 0, \quad c_y > 0, \quad \Psi_a(t, 1/2, c_y) = 0, \quad c_y < 0, \quad (4.2.19)$$

Οι αρχικές συνθήκες διατυπώνονται ως

$$\Phi_a(0, y, c_y) = 0, \quad \Psi(0, y, c_y) = 0. \quad (4.2.20)$$

Στις ροές μιγμάτων ενδιαφέρει κυρίως ο υπολογισμός των κινητικών συντελεστών Λ_{ij} , οι οποίοι δίνονται από τις ακόλουθες σχέσεις

$$\Lambda_{Pi} = C_0 G_1^{(i)} + (1 - C_0) G_2^{(i)} \quad (4.2.21)$$

$$\Lambda_{Ti} = C_0 Q_1^{(i)} + (1 - C_0) Q_2^{(i)} \quad (4.2.22)$$

$$\Lambda_{Ci} = C_0 \left(G_1^{(i)} - G_2^{(i)} \right), \quad (4.2.23)$$

με $i = P, T, C$, όπου $G_a^{(i)}$ και $Q_a^{(i)}$ η ολική παροχή και ολική θερμοροή αντίστοιχα, οι οποίες ορίζονται από τα ολοκληρώματα

$$G_a^{(i)}(t) = 2 \int_{-1/2}^{1/2} u_a^{(i)}(t, y) dy \quad (4.2.24)$$

και

$$Q_a^{(i)}(t) = 2 \int_{-1/2}^{1/2} q_a^{(i)}(t, y) dy \quad (4.2.25)$$

για $a = 1, 2$ και $i = P, T, C$.

Σε κάθε περίπτωση ροής μίγματος αερίων, αναλόγως αν η ροή δημιουργείται από βαθμίδα πίεσης, θερμοκρασίας ή συγκέντρωσης, συμβαίνουν δύο κατηγορίες φαινομένων μεταφοράς. Αυτά που σχετίζονται με τις κύριες ροές και αυτά που σχετίζονται με τις δευτερεύουσες ροές, οι οποίες οφείλονται στην αραιοποίηση. Η ερμηνεία των κινητικών συντελεστών, επομένως, σχετίζεται με τις κύριες ή δευτερεύουσες ροές και είναι η εξής:

Συντελεστής	Φαινόμενο που περιγράφει
Λ_{PP}	Ροή μάζας που οφείλεται στη βαθμίδα X_P
Λ_{TT}	Θερμοροή που οφείλεται στη βαθμίδα X
Λ_{CC}	Διάχυση που οφείλεται στη βαθμίδα X_C
Λ_{PT}	Ροή μάζας που οφείλεται στη βαθμίδα X (Thermal creep)
Λ_{TP}	Θερμοροή που οφείλεται στη βαθμίδα X_P (Mechanocaloric effect)
Λ_{PC}	Ροή μάζας που οφείλεται στη βαθμίδα X_C (Diffusion baroeffect)
Λ_{CP}	Διάχυση που οφείλεται στη βαθμίδα X_P (Barodiffusion)
Λ_{TC}	Θερμοροή που οφείλεται στη βαθμίδα X_C (Dufour effect)
Λ_{CT}	Διάχυση που οφείλεται στη βαθμίδα X_T (Soret effect)

Στο σημείο αυτό θα πρέπει να επισημανθεί ότι οι συνολικοί κινητικοί συντελεστές που πρέπει να υπολογιστούν είναι έξι και όχι εννέα, αφού ισχύουν οι ακόλουθες σχέσεις των Onsager-Casimir [129]:

$$\Lambda_{PT} = \Lambda_{TP}, \quad \Lambda_{PC} = \Lambda_{CP}, \quad \Lambda_{TC} = \Lambda_{CT}, \quad (4.2.26)$$

Η επίλυση των ολοκληρο-διαφορικών εξ. (4.2.2) και (4.2.3) με οριακές συνθήκες τις (4.2.18), (4.2.19) και αρχική συνθήκη την (4.2.20) για το μοντέλο McCormack, πραγματοποιείται με τη μέθοδο DVM. Έτσι, αντίστοιχα με τη ροή ενός μονοατομικού αερίου ανάμεσα σε πλάκες, το συνεχές φάσμα $c_y \in (-\infty, \infty)$ αντικαθίσταται από ένα σύνολο διακριτών ταχυτήτων c_{ym} , $m =$

$1, 2, \dots, M$, οι οποίες επιλέγονται να είναι οι ρίζες του πολυωνύμου Legendre, βαθμού M , απεικονιζόμενες κατάλληλα στο διάστημα που μας ενδιαφέρει. Ο φυσικός χώρος $y \in [-1/2, 1/2]$ χωρίζεται σε I ισομήκη τμήματα, τα οποία αποτελούνται από $i = 1, 2, \dots, I + 1$ κόμβους. Επίσης, τα χρονικά βήματα για $t > 0$ δηλώνονται ως $t_k = 1, 2, \dots$. Η διακριτοποίηση στο χρόνο $t > 0$ γίνεται είτε με ανάδρομες πεπερασμένες διαφορές πρώτης τάξης, είτε με κεντρώες διαφορές δεύτερης τάξης, όπου όμως όλες οι μακροσκοπικές ποσότητες υπολογίζονται στο προηγούμενο χρονικό βήμα, δημιουργώντας έτσι ημιπεπλεγμένα αριθμητικά σχήματα, με $t_k = 1, 2, \dots$ να δηλώνονται οι διακριτές τιμές του χρόνου και με Δt το χρονικό βήμα.

Στη συνέχεια, δίνονται οι διακριτοποιημένες εξισώσεις σύμφωνα με το ημιπεπλεγμένο σχήμα CTCS, το οποίο, όπως περιγράφηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο, χρησιμοποιεί κεντρώες πεπερασμένες διαφορές για τη προσέγγιση των χωρικών και των χρονικών παραγώγων.

Αρχικά ορίζουμε τις βοηθητικές μεταβλητές

$$T_{00a} = \sqrt{\frac{m_a}{m}} \frac{1}{2\Delta t} + \frac{c_{ym}}{2\Delta y} + \frac{\omega_a \gamma_a}{4} \quad (4.2.27)$$

$$T_{01a} = \sqrt{\frac{m_a}{m}} \frac{1}{2\Delta t} - \frac{c_{ym}}{2\Delta y} + \frac{\omega_a \gamma_a}{4} \quad (4.2.28)$$

$$T_{10a} = -\sqrt{\frac{m_a}{m}} \frac{1}{2\Delta t} + \frac{c_{ym}}{2\Delta y} + \frac{\omega_a \gamma_a}{4} \quad (4.2.29)$$

$$T_{11a} = -\sqrt{\frac{m_a}{m}} \frac{1}{2\Delta t} - \frac{c_{ym}}{2\Delta y} + \frac{\omega_a \gamma_a}{4} \quad (4.2.30)$$

$$\begin{aligned} T_{\Phi a\beta} = & -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{m}{m_a}} \left[X_P + \eta_a X_C + \left(c_{ym}^2 - \frac{1}{2} \right) X_T \right] \\ & + \omega_a \left\{ \gamma_a \frac{1}{2} (u_{a i+,m}^k + u_{a i-}^k) - \frac{1}{2} \nu_{\alpha\beta}^{(1)} (u_{a i+}^k + u_{a i-}^k - u_{\beta i+}^k - u_{\beta i-}^k) \right. \\ & - \frac{1}{4} \nu_{\alpha\beta}^{(2)} \left(q_{a i+}^k + q_{a i-}^k - \frac{m_\alpha}{m_\beta} (q_{\beta i+}^k + q_{\beta i-}^k) \right) \\ & + \left[\left(\gamma_\alpha - \nu_{\alpha\alpha}^{(3)} + \nu_{\alpha\alpha}^{(4)} - \nu_{\alpha\beta}^{(3)} \right) (\Pi_{a i+}^k + \Pi_{a i-}^k) + \nu_{\alpha\beta}^{(4)} \sqrt{\frac{m_\beta}{m_\alpha}} (\Pi_{\beta i+}^k + \Pi_{\beta i-}^k) \right] c_{ym} \\ & + \frac{2}{5} \left[\frac{1}{2} \left(\gamma_\alpha - \nu_{\alpha\alpha}^{(5)} + \nu_{\alpha\alpha}^{(6)} - \nu_{\alpha\beta}^{(5)} \right) (q_{a i+}^k + q_{a i-}^k) + \frac{1}{2} \nu_{\alpha\beta}^{(6)} \sqrt{\frac{m_\beta}{m_\alpha}} (q_{\beta i+}^k + q_{\beta i-}^k) \right. \\ & \left. \left. - \frac{5}{8} \nu_{\alpha\beta}^{(2)} (u_{a i+}^k + u_{a i-}^k - u_{\beta i+}^k - u_{\beta i-}^k) \right] \left(c_{ym}^2 - \frac{1}{2} \right) \right\} \end{aligned} \quad (4.2.31)$$

και

$$\begin{aligned}
T_{\Psi a\beta} = & -\sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} X_T \\
& + \omega_\alpha \frac{4}{5} \left[\left(\gamma_\alpha - \nu_{\alpha\alpha}^{(5)} + \nu_{\alpha\alpha}^{(6)} - \nu_{\alpha\beta}^{(5)} \right) (q_{a i+}^k + q_{a i-}^k) + \nu_{\alpha\beta}^{(6)} \sqrt{\frac{m_\beta}{m_\alpha}} (q_{\beta i+}^k + q_{\beta i-}^k) \right. \\
& \left. - \frac{5}{8} \nu_{\alpha\beta}^{(2)} (u_{a i+}^k + u_{a i-}^k - u_{\beta i+}^k - u_{\beta i-}^k) \left(c_{ym}^2 - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (4.2.32)
\end{aligned}$$

Τότε οι διακριτοποιημένες κινητικές εξισώσεις γράφονται συνοπτικά ως

$$T_{00a} \Phi_{\alpha i+,m}^{k+1} + T_{01a} \Phi_{\alpha i-,m}^{k+1} + T_{10a} \Phi_{\alpha i+,m}^k + T_{11a} \Phi_{\alpha i-,m}^k = T_{\Phi a\beta}, \quad a = 1, 2, \quad \beta \neq a \quad (4.2.33)$$

και

$$T_{00a} \Psi_{\alpha i+,m}^{k+1} + T_{01a} \Psi_{\alpha i-,m}^{k+1} + T_{10a} \Psi_{\alpha i+,m}^k + T_{11a} \Psi_{\alpha i-,m}^k = T_{\Psi a\beta}, \quad a = 1, 2, \quad \beta \neq a \quad (4.2.34)$$

Οι εξισώσεις (4.2.33) και (4.2.34) επιλύονται μαζί με τις οριακές και αρχικές συνθήκες (4.2.18) έως (4.2.20) ακολουθώντας τις τροχιές των σωματιδίων, βηματίζοντας κινούμενοι από την κάτω πλάκα προς την επάνω και αντίστροφα. Η επίλυσή τους δίνει την τιμή των ανηγμένων συναρτήσεων κατανομών Φ και Ψ σε κάθε χρονικό βήμα και σε κάθε κόμβο του χωρικού πλέγματος, από τις οποίες προκύπτουν οι μακροσκοπικές ποσότητες του κάθε συστατικού του μίγματος με ολοκλήρωση Gauss-Legendre, μέσω των ακόλουθων αθροισμάτων

$$u_{a i\pm}^{k+1} = \frac{1}{2} \sum_m \left[(\Phi_{\alpha i\pm,m}^{k+1} + \Phi_{\alpha i\pm,m}^k) w_m e^{-c_{ym}^2} \right] \quad (4.2.35)$$

$$q_{a i\pm}^{k+1} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_m \left\{ \left[(\Psi_{\alpha i\pm,m}^{k+1} + \Psi_{\alpha i\pm,m}^k) + \left(c_{ym}^2 - \frac{1}{2} \right) (\Phi_{\alpha i\pm,m}^{k+1} + \Phi_{\alpha i\pm,m}^k) \right] w_m e^{-c_{ym}^2} \right\} \quad (4.2.36)$$

και

$$\Pi_{a i\pm}^{k+1} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{m_a}{m}} \sum_m \left[(\Phi_{\alpha i\pm,m}^{k+1} + \Phi_{\alpha i\pm,m}^k) c_{ym} w_m e^{-c_{ym}^2} \right]. \quad (4.2.37)$$

Στη συνέχεια, με μια ολοκλήρωση τραπεζίου πάνω στην ταχύτητα $u_a(t, y)$ και στη θερμορροή $q_a(t, y)$ υπολογίζονται οι ποσότητες $G_a(t)$ και $Q_a(t)$ αντίστοιχα, από τις σχέσεις (4.2.24) και (4.2.25). Οι συντελεστές Λ_{ij} υπολογίζονται εύκολα από τις σχέσεις (4.2.21) έως (4.2.23).

4.3 Ροή σε κυλινδρικό αγωγό

Παρουσιάζεται η χρονομεταβαλλόμενη ροή δυαδικού μίγματος μονοατομικών αερίων διαμέσου κυλινδρικού αγωγού. Η γεωμετρία της ροής είναι αντίστοιχη με αυτή της ροής Poiseuille ενός απλού αερίου σε κυλινδρικό αγωγό, η οποία μελετήθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο και φαίνεται στο Σχήμα 4.2. Τα u_1 και u_2 αντιστοιχούν στο ελαφρύ και βαρύ συστατικό του μίγματος. Στη συγκεκριμένη ροή, θεωρείται ένα αραιοποιημένο μίγμα δύο αερίων, τα οποία έχουν μοριακές μάζες m_1 και m_2 και μοριακές διαμέτρους d_1 και d_2 . Το μίγμα αρχικά βρίσκεται σε ηρεμία και περιέχεται μέσα σε ένα κυλινδρικό αγωγό μήκους L και ακτίνας R ($R/L \ll 1$). Η ροή προκύπτει λόγω μιας απότομης εφαρμογής τοπικής βαθμίδας πίεσης ή θερμοκρασίας ή συγκέντρωσης κατά την κατεύθυνση z της ροής. Ως αποτέλεσμα θα έχουμε μία μεταβατική αραιοποιημένη ροή, η οποία, καθώς το $t' \rightarrow \infty$, θα προσεγγίζει την αντίστοιχη μόνιμη ροή. Οι βαθμίδες αυτές θεωρούνται πολύ μικρές έτσι ώστε να μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την μοντελοποίησή του το γραμμικό χρονομεταβαλλόμενο μοντέλο McCormack.

Η αδιαστατοποίηση των χωρικών μεταβλητών r' και z' γίνεται με την ακτίνα R του κυλίνδρου, ενώ της χρονικής μεταβλητής t' με το λόγο R/v_0

$$r = \frac{r'}{R}, \quad z = \frac{z'}{R}, \quad t = \frac{t'v_0}{R}. \quad (4.3.1)$$

Η ποσότητα R/v_0 είναι ο χαρακτηριστικός χρόνος μεταβολής της ροής. Οι μακροσκοπικές ταχύτητες αδιαστατοποιούνται με την πλέον πιθανή μοριακή ταχύτητα v_0 του μίγματος. Οι κινητικές εξισώσεις του μοντέλου McCormack που περιγράφουν τη συγκεκριμένη ροή είναι οι ακόλουθες

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi_a}{\partial t} + c_r \frac{\partial \Phi_a}{\partial r} - \frac{c_\varphi}{r} \frac{\partial \Phi_a}{\partial \theta} + \omega_a \gamma_a \Phi_a = \\ - \frac{1}{2} \left[X_P + \eta_\alpha X_C + \left(c_y^2 - \frac{1}{2} \right) X_T \right] \\ + u_a \sqrt{\frac{m_a}{m}} \left[\omega_a \left(\gamma_a - \nu_{\alpha\beta}^{(1)} \right) - \frac{1}{2} \omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(2)} (\zeta^2 - 1) \right] \\ + u_\beta \sqrt{\frac{m_a}{m}} \left[\omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(1)} + \frac{1}{2} \omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(2)} (\zeta^2 - 1) \right] \\ + q_\alpha \sqrt{\frac{m_a}{m}} \left[-\frac{1}{2} \omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(2)} + \frac{2}{5} \omega_a \left(\gamma_\alpha - \nu_{\alpha\alpha}^{(5)} + \nu_{\alpha\alpha}^{(6)} - \nu_{\alpha\beta}^{(5)} \right) (\zeta^2 - 1) \right] \\ + q_\beta \sqrt{\frac{m_a}{m}} \left[\frac{1}{2} \omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(2)} \frac{m_\alpha}{m_\beta} + \frac{2}{5} \omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(6)} \sqrt{\frac{m_\beta}{m_\alpha}} (\zeta^2 - 1) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \Pi_\alpha \left[2\omega_a \left(\gamma_\alpha - \nu_{\alpha\alpha}^{(3)} + \nu_{\alpha\alpha}^{(4)} - \nu_{\alpha\beta}^{(3)} \right) c_r \right] + \\
& + \Pi_\beta \left[2\omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(4)} c_r \right]
\end{aligned} \tag{4.3.2}$$

και

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \Psi_a}{\partial t} + c_r \frac{\partial \Psi_a}{\partial r} - \frac{c_\varphi}{r} \frac{\partial \Psi_a}{\partial \theta} + \omega_a \gamma_a \Psi_a = \\
& - \frac{3}{4} (X_P + \eta_\alpha X_C + c_y^2 X_T) \\
& + u_a \sqrt{\frac{m_a}{m}} \frac{3}{2} \left[\omega_a \left(\gamma_a - \nu_{\alpha\beta}^{(1)} \right) - \frac{1}{2} \omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(2)} \zeta^2 \right] \\
& + u_\beta \sqrt{\frac{m_a}{m}} \frac{3}{2} \left[\omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(1)} + \frac{1}{2} \omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(2)} \zeta^2 \right] \\
& + q_\alpha \sqrt{\frac{m_a}{m}} \frac{3}{2} \left[-\frac{1}{2} \omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(2)} + \frac{2}{5} \omega_a \left(\gamma_\alpha - \nu_{\alpha\alpha}^{(5)} + \nu_{\alpha\alpha}^{(6)} - \nu_{\alpha\beta}^{(5)} \right) \zeta^2 \right] \\
& + q_\beta \sqrt{\frac{m_a}{m}} \frac{3}{2} \left[\frac{1}{2} \omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(2)} \frac{m_\alpha}{m_\beta} + \frac{2}{5} \omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(6)} \sqrt{\frac{m_\beta}{m_\alpha}} \zeta^2 \right] \\
& + \Pi_\alpha \frac{3}{2} \left[2\omega_a \left(\gamma_\alpha - \nu_{\alpha\alpha}^{(3)} + \nu_{\alpha\alpha}^{(4)} - \nu_{\alpha\beta}^{(3)} \right) c_r \right] \\
& + \Pi_\beta \frac{3}{2} \left[2\omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(4)} c_r \right]
\end{aligned} \tag{4.3.3}$$

Οι μακροσκοπικές ποσότητες της ταχύτητας, της θερμορροής και της πίεσης γράφονται, αντίστοιχα, ως

$$u_a(t, r) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{m}{m_a}} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \Phi_a(t, r, \zeta, \theta) e^{-\zeta^2} \zeta d\zeta d\theta \tag{4.3.4}$$

$$q_a(t, r) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \left[\Psi_a + \left(\zeta^2 - \frac{5}{2} \right) \Phi_a \right] e^{-\zeta^2} \zeta d\zeta d\theta \tag{4.3.5}$$

$$\Pi_a(t, r) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \Phi_a e^{-\zeta^2} \cos \theta \zeta^2 d\zeta d\theta \tag{4.3.6}$$

Οι οριακές συνθήκες πλήρους διάχυσης στα τοιχώματα και συμμετρίας στο κέντρο διατυπώνονται ως

$$\Phi_a(t, 1, \zeta, \theta) = 0, \quad \Psi_a(t, 1, \zeta, \theta) = 0, \quad \frac{\pi}{2} < \theta < \frac{3\pi}{2} \tag{4.3.7}$$

και

$$\Phi_a(t, 0, \zeta, \theta) = \Phi_a(t, 0, \zeta, \theta - \pi), \quad \Psi_a(t, 0, \zeta, \theta) = \Psi_a(t, 0, \zeta, \theta - \pi), \quad -\frac{\pi}{2} < \theta < \frac{\pi}{2} \tag{4.3.8}$$

ενώ οι αρχικές συνθήκες ως

$$\Phi_a(0, r, \zeta, \theta) = 0, \quad \Psi_a(0, r, \zeta, \theta) = 0. \quad (4.3.9)$$

Οι συντελεστές Λ_{ij} , που μας ενδιαφέρουν, δίνονται από τις σχέσεις (4.2.21) έως (4.2.23), όπως και στη ροή ανάμεσα σε πλάκες. Διαφοροποιούνται όμως οι ορισμοί των $G_a(t)$ και $Q_a(t)$, οι οποίοι είναι οι ακόλουθοι:

$$G_a^{(i)}(t) = 4 \int_0^1 u_a^{(i)}(t, r) r dr \quad (4.3.10)$$

και

$$Q_a^{(i)}(t) = 4 \int_0^1 q_a^{(i)}(t, r) r dr \quad (4.3.11)$$

Το πρόβλημα που περιγράφεται από τις εξ. (4.3.2) και (4.3.3) και τις συνθήκες (4.3.7) έως (4.3.9), επιλύεται αριθμητικά με τη μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων (DVM). Η διαδικασία που ακολουθείται είναι παρόμοια με την αντίστοιχη διαδικασία που παρουσιάστηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο για τη ροή ενός αερίου σε κυλινδρικό αγωγό. Το συνεχές φάσμα $\zeta \in [0, \infty)$ αντικαθίσταται από ένα σύνολο διακριτών ταχυτήτων ζ_m , $m = 1, 2, \dots, M$, οι οποίες επιλέγονται να είναι οι ρίζες του πολωνύμου Legendre βαθμού M , απεικονιζόμενες κατάλληλα από το διάστημα $[-1, 1]$ στο $[0, \infty)$. Επίσης, ορίζουμε ένα σύνολο διακριτών γωνιών θ_n , $n = 1, 2, \dots, N$ ισοκατανεμημένων στο διάστημα $[0, 2\pi]$. Η διακριτοποίηση στο φυσικό χώρο στηρίζεται σε ένα σχήμα κεντρώων πεπερασμένων διαφορών δεύτερης τάξης. Η απόσταση $r \in [0, 1]$ χωρίζεται σε I ισαπέχοντα διαστήματα. Με $i = 1, 2, \dots, I + 1$ δηλώνουμε τους κόμβους του πλέγματος και με Δr την μεταξύ τους απόσταση. Η συγκεκριμένη διακριτοποίηση στο χώρο των μοριακών ταχυτήτων και στο φυσικό χώρο, έχει χρησιμοποιηθεί εκτενώς στο παρελθόν για επίλυση μόνιμων ροών σε κυλινδρικούς αγωγούς. Η διακριτοποίηση, τέλος, στο χρόνο $t > 0$, γίνεται είτε με ανάδρομες πεπερασμένες διαφορές πρώτης τάξης, είτε με κεντρώες διαφορές δεύτερης τάξης, όπου όμως όλες οι μακροσκοπικές ποσότητες υπολογίζονται στο προηγούμενο χρονικό βήμα, ώστε να δημιουργούνται ημιπεπλεγμένα αριθμητικά σχήματα, με $t_k = 1, 2, \dots$ να δηλώνονται οι διακριτές τιμές του χρόνου και με Δt το χρονικό βήμα.

Στη συνέχεια, δίνεται η διακριτοποιημένη εξίσωση σύμφωνα με το ημιπεπλεγμένο σχήμα CTCS, όπου όλες οι παράγωγοι προσεγγίζονται με κεντρώες διαφορές. Ορίζοντας τις βοηθητι-

κές μεταβλητές

$$T_{000a} = -\sqrt{\frac{m_a}{m}} \frac{1}{4\Delta t} - \frac{\zeta_m \cos \theta_n}{4\Delta r} - \frac{\zeta_m \sin \theta_n}{2\Delta\theta (r_{i+} + r_{i-})} + \frac{\omega_\alpha \gamma_\alpha}{8} \quad (4.3.12)$$

$$T_{001a} = -\sqrt{\frac{m_a}{m}} \frac{1}{4\Delta t} - \frac{\zeta_m \cos \theta_n}{4\Delta r} + \frac{\zeta_m \sin \theta_n}{2\Delta\theta (r_{i+} + r_{i-})} + \frac{\omega_\alpha \gamma_\alpha}{8} \quad (4.3.13)$$

$$T_{010a} = -\sqrt{\frac{m_a}{m}} \frac{1}{4\Delta t} + \frac{\zeta_m \cos \theta_n}{4\Delta r} - \frac{\zeta_m \sin \theta_n}{2\Delta\theta (r_{i+} + r_{i-})} + \frac{\omega_\alpha \gamma_\alpha}{8} \quad (4.3.14)$$

$$T_{011a} = -\sqrt{\frac{m_a}{m}} \frac{1}{4\Delta t} + \frac{\zeta_m \cos \theta_n}{4\Delta r} + \frac{\zeta_m \sin \theta_n}{2\Delta\theta (r_{i+} + r_{i-})} + \frac{\omega_\alpha \gamma_\alpha}{8} \quad (4.3.15)$$

$$T_{100a} = \sqrt{\frac{m_a}{m}} \frac{1}{4\Delta t} - \frac{\zeta_m \cos \theta_n}{4\Delta r} - \frac{\zeta_m \sin \theta_n}{2\Delta\theta (r_{i+} + r_{i-})} + \frac{\omega_\alpha \gamma_\alpha}{8} \quad (4.3.16)$$

$$T_{101a} = \sqrt{\frac{m_a}{m}} \frac{1}{4\Delta t} - \frac{\zeta_m \cos \theta_n}{4\Delta r} + \frac{\zeta_m \sin \theta_n}{2\Delta\theta (r_{i+} + r_{i-})} + \frac{\omega_\alpha \gamma_\alpha}{8} \quad (4.3.17)$$

$$T_{110a} = \sqrt{\frac{m_a}{m}} \frac{1}{4\Delta t} + \frac{\zeta_m \cos \theta_n}{4\Delta r} - \frac{\zeta_m \sin \theta_n}{2\Delta\theta (r_{i+} + r_{i-})} + \frac{\omega_\alpha \gamma_\alpha}{8} \quad (4.3.18)$$

$$T_{111a} = \sqrt{\frac{m_a}{m}} \frac{1}{4\Delta t} + \frac{\zeta_m \cos \theta_n}{4\Delta r} + \frac{\zeta_m \sin \theta_n}{2\Delta\theta (r_{i+} + r_{i-})} + \frac{\omega_\alpha \gamma_\alpha}{8} \quad (4.3.19)$$

$$\begin{aligned} T_{\Phi\alpha\beta} = & -\frac{1}{2} \left[X_P + \eta_\alpha X_C + \left(\zeta_m^2 - \frac{1}{2} \right) X_T \right] \\ & + \frac{1}{2} (u_{a\ i+}^k + u_{a\ i-}^k) \sqrt{\frac{m_a}{m}} \left[\omega_a \left(\gamma_a - \nu_{\alpha\beta}^{(1)} \right) - \frac{1}{2} \omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(2)} (\zeta_m^2 - 1) \right] \\ & + \frac{1}{2} (u_{\beta\ i+}^k + u_{\beta\ i-}^k) \sqrt{\frac{m_a}{m}} \left[\omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(1)} + \frac{1}{2} \omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(2)} (\zeta_m^2 - 1) \right] \\ & + \frac{1}{2} (q_{a\ i+}^k + q_{a\ i-}^k) \sqrt{\frac{m_a}{m}} \left[-\frac{1}{2} \omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(2)} + \frac{2}{5} \omega_a \left(\gamma_\alpha - \nu_{\alpha\alpha}^{(5)} + \nu_{\alpha\alpha}^{(6)} - \nu_{\alpha\beta}^{(5)} \right) (\zeta_m^2 - 1) \right] \\ & + \frac{1}{2} (q_{\beta\ i+}^k + q_{\beta\ i-}^k) \sqrt{\frac{m_a}{m}} \left[\frac{1}{2} \omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(2)} \frac{m_\alpha}{m_\beta} + \frac{2}{5} \omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(6)} \sqrt{\frac{m_\beta}{m_\alpha}} (\zeta_m^2 - 1) \right] \\ & + (\Pi_{a\ i+}^k + \Pi_{a\ i-}^k) \left[\omega_a \left(\gamma_\alpha - \nu_{\alpha\alpha}^{(3)} + \nu_{\alpha\alpha}^{(4)} - \nu_{\alpha\beta}^{(3)} \right) (\zeta_m \cos \theta_n) \right] \\ & + (\Pi_{\beta\ i+}^k + \Pi_{\beta\ i-}^k) \left[\omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(4)} (\zeta_m \cos \theta_n) \right] \end{aligned} \quad (4.3.20)$$

και

$$\begin{aligned} T_{\Psi\alpha\beta} = & -\frac{3}{4} (X_P + \eta_\alpha X_C + \zeta_m^2) \\ & + \frac{3}{4} (u_{a\ i+}^k + u_{a\ i-}^k) \sqrt{\frac{m_a}{m}} \left[\omega_a \left(\gamma_a - \nu_{\alpha\beta}^{(1)} \right) - \frac{1}{2} \omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(2)} \zeta_m^2 \right] \\ & + \frac{3}{4} (u_{\beta\ i+}^k + u_{\beta\ i-}^k) \sqrt{\frac{m_a}{m}} \left[\omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(1)} + \frac{1}{2} \omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(2)} \zeta_m^2 \right] \\ & + \frac{3}{4} (q_{a\ i+}^k + q_{a\ i-}^k) \sqrt{\frac{m_a}{m}} \left[-\frac{1}{2} \omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(2)} + \frac{2}{5} \omega_a \left(\gamma_\alpha - \nu_{\alpha\alpha}^{(5)} + \nu_{\alpha\alpha}^{(6)} - \nu_{\alpha\beta}^{(5)} \right) \zeta_m^2 \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{3}{4} (q_{\beta i+}^k + q_{\beta i-}^k) \sqrt{\frac{m_a}{m}} \left[\frac{1}{2} \omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(2)} \frac{m_\alpha}{m_\beta} + \frac{2}{5} \omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(6)} \sqrt{\frac{m_\beta}{m_\alpha}} \zeta_m^2 \right] \\
& + \frac{3}{2} (\Pi_{\alpha i+}^k + \Pi_{\alpha i-}^k) \left[\omega_a \left(\gamma_\alpha - \nu_{\alpha\alpha}^{(3)} + \nu_{\alpha\alpha}^{(4)} - \nu_{\alpha\beta}^{(3)} \right) (\zeta_m \cos \theta_n) \right] \\
& + \frac{3}{2} (\Pi_{\beta i+}^k + \Pi_{\beta i-}^k) \left[\omega_a \nu_{\alpha\beta}^{(4)} (\zeta_m \cos \theta_n) \right], \tag{4.3.21}
\end{aligned}$$

οι διακριτοποιημένες κινητικές εξισώσεις του σχήματος CTCS γράφονται συνοπτικά ως

$$\begin{aligned}
& T_{110a} \Phi_{\alpha i+,m,n+}^{k+1} + T_{111a} \Phi_{\alpha i+,m,n-}^{k+1} + T_{100a} \Phi_{\alpha i-,m,n+}^{k+1} + T_{101a} \Phi_{\alpha i-,m,n-}^{k+1} + \\
& T_{010a} \Phi_{\alpha i+,m,n+}^k + T_{011a} \Phi_{\alpha i+,m,n-}^k + T_{000a} \Phi_{\alpha i-,m,n+}^k + T_{001a} \Phi_{\alpha i-,m,n-}^k = T_{\Phi\alpha\beta} \tag{4.3.22}
\end{aligned}$$

και

$$\begin{aligned}
& T_{110a} \Psi_{\alpha i+,m,n+}^{k+1} + T_{111a} \Psi_{\alpha i+,m,n-}^{k+1} + T_{100a} \Psi_{\alpha i-,m,n+}^{k+1} + T_{101a} \Psi_{\alpha i-,m,n-}^{k+1} + \\
& T_{010a} \Psi_{\alpha i+,m,n+}^k + T_{011a} \Psi_{\alpha i+,m,n-}^k + T_{000a} \Psi_{\alpha i-,m,n+}^k + T_{001a} \Psi_{\alpha i-,m,n-}^k = T_{\Psi\alpha\beta} \tag{4.3.23}
\end{aligned}$$

Η επίλυση των εξισώσεων (4.3.22) και (4.3.23) μαζί με τις οριακές και αρχικές συνθήκες δίνει την τιμή των συναρτήσεων κατανομών Φ και Ψ σε κάθε χρονικό βήμα και σε κάθε κόμβο του χωρικού πλέγματος, από τις οποίες προκύπτουν οι μακροσκοπικές ποσότητες του κάθε συστατικού του μίγματος με ολοκλήρωση Gauss-Legendre ως προς τα μέτρα των μοριακών ταχυτήτων και ολοκλήρωση τραπεζίου ως προς τις γωνίες των μοριακών ταχυτήτων, μέσω των ακόλουθων αθροισμάτων

$$u_{a_i}^{k+1} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{m}{m_a}} \sum_m \sum_n \left[(\Phi_{a_i}^{k+1} + \Phi_{a_i}^k) e^{-\zeta_m^2} \zeta_m w_m w_n \right] \tag{4.3.24}$$

$$q_{a_i}^{k+1} = \frac{1}{2\pi} \sum_m \sum_n \left\{ \left[(\Psi_{a_i}^{k+1} + \Psi_{a_i}^k) + \left(\zeta_m^2 - \frac{5}{2} \right) (\Phi_{a_i}^{k+1} + \Phi_{a_i}^k) \right] e^{-\zeta_m^2} \zeta_m w_m w_n \right\} \tag{4.3.25}$$

και

$$\Pi_{a_i}^{k+1} = -\frac{1}{2\pi} \sum_m \sum_n \left[(\Phi_{a_i}^{k+1} + \Phi_{a_i}^k) e^{-\zeta_m^2} \zeta_m \cos \theta_n w_m w_n \right]. \tag{4.3.26}$$

Στη συνέχεια, με αριθμητική ολοκλήρωση της ταχύτητας $u_a(t, r)$ και της θερμορροής $q_a(t, r)$ υπολογίζονται οι ποσότητες $G_a(t)$ και $Q_a(t)$ αντίστοιχα, από τις σχέσεις (4.3.10) και (4.3.11), οι οποίες με τη σειρά τους δίνουν τους συντελεστές Λ_{ij} από τις σχέσεις (4.2.21) έως (4.2.23).

4.4 Χρονική εξέλιξη αδιάστατων παροχών και θερμοροών

Για τη μελέτη της χρονικής εξέλιξης των αδιάστατων παροχών $G(t)$ και θερμοροών $Q(t)$ δημιουργήθηκαν κατάλληλοι κώδικες σε γλώσσα προγραμματισμού Fortran, οι οποίοι επιλύουν όλα τα είδη των προαναφερθέντων ροών με τη χρήση των διαφόρων αριθμητικών σχημάτων. Η συμπεριφορά των ροών ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες είναι ανάλογη με αυτή των ροών σε κυλινδρικό αγωγό. Για το λόγο αυτό επιλέχθηκε να παρουσιαστεί μόνον η δεύτερη περίπτωση, η οποία είναι και αυτή που έχει περισσότερο πρακτικό ενδιαφέρον στη βιομηχανία. Επομένως σε αυτή την ενότητα, στα Σχήματα 4.3 έως 4.17, παρουσιάζονται τα αποτελέσματα επίλυσης ροών δυαδικών μιγμάτων αερίων σε κυλινδρικό αγωγό. Οι ροές οφείλονται σε βαθμίδα πίεσης, θερμοκρασίας ή συγκέντρωσης. Το αριθμητικό σχήμα που χρησιμοποιήθηκε είναι το CTCS. Μελετήθηκε η συμπεριφορά δύο μιγμάτων αερίων. Του μίγματος Ne-Ar με μάζες $m_1 = 20.1797g/mol$ και $m_2 = 39.948g/mol$ και του μίγματος He-Xe με μάζες $m_1 = 4.0026g/mol$ και $m_2 = 131.29g/mol$. Τα συγκεκριμένα μίγματα επιλέχθηκαν επειδή στο πρώτο εξ αυτών οι μάζες των συστατικών του είναι κοντά η μια στην άλλη, με αποτέλεσμα αυτό να διατηρεί τα χαρακτηριστικά του μίγματος, ενώ στο δεύτερο οι μάζες των συστατικών του είναι πολύ διαφορετικές μεταξύ τους με αποτέλεσμα να παρατηρείται έντονο το φαινόμενο του διαχωρισμού των αερίων του.

Οι ροές ξεκινούν τη χρονική στιγμή $t = 0$, λόγω της απότομης εφαρμογής βαθμίδας πίεσης, θερμοκρασίας ή συγκέντρωσης και εξελίσσονται μέχρι να επέλθει ο χρόνος ισορροπίας, ο οποίος είναι διαφορετικός για κάθε συστατικό του μίγματος. Ο χρόνος ισορροπίας στα γραφήματα αντιστοιχεί στο τέλος της κάθε καμπύλης. Ως χρόνο ισορροπίας του συστατικού θεωρούμε το χρόνο που απαιτείται ώστε οι τιμές των $G_a(t)$ και $Q_a(t)$ που αφορούν στο συγκεκριμένο συστατικό της χρονομεταβαλλόμενης ροής να ξεπεράσουν το 99% των αντίστοιχων τιμών της μόνιμης ροής. Γενικά, οι δύο αυτές ποσότητες δεν ξεπερνούν ταυτόχρονα το 99% της μόνιμης ροής, επομένως αυτή που καθυστερεί περισσότερο καθορίζει και το χρόνο ισορροπίας του κάθε συστατικού. Στα γραφήματα, που παρουσιάζονται, επιλέξαμε για κάθε ροή να εμφανίσουμε μόνο μία από τις δύο ποσότητες εκ των $G_a(t)$ και $Q_a(t)$ αναλόγως με το αίτιο της ροής, επομένως παρατηρείται ορισμένες φορές το φαινόμενο η καμπύλη της ποσότητας που εμφανίζεται στο γράφημα να εκτείνεται πιο πέρα από το σημείο που αυτή κανονικά φτάνει στο 99% της μόνιμης ροής. Αυτό συμβαίνει διότι ο χρόνος ισορροπίας καθορίζεται από την άλλη ποσότητα, η οποία όμως δεν παρουσιάζεται

στο γράφημα. Γενικά, όπως προκύπτει, ο χρόνος ισορροπίας εξαρτάται από τη μοριακή μάζα του συστατικού, με αυτόν του ελαφρύτερου συστατικού να είναι μικρότερος.

Παρουσιάζονται πέντε σχήματα ανά αίτιο της ροής (X_P, X_T, X_C). Τα δύο πρώτα σχήματα εκ των πέντε, δείχνουν για τα δύο υπό εξέταση μίγματα, την επίδραση στη ροή της συγκέντρωσης του μίγματος C για συγκεκριμένες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ . Τα επόμενα δύο δείχνουν για τα ίδια μίγματα, την επίδραση στη ροή της παραμέτρου αραιοποίησης για συγκεκριμένες τιμές της συγκέντρωσης του μίγματος. Το τελευταίο σχήμα της κάθε πεντάδας δείχνει τους συνολικούς χρόνους ισορροπίας για το κάθε συστατικό των δύο μιγμάτων. Ο χρόνος ισορροπίας του μίγματος ισούται με το μεγαλύτερο από τους δύο χρόνους ισορροπίας των συστατικών του και δεν παρουσιάζεται ξεχωριστά.

Σε όλες τις περιπτώσεις, επιλέχτηκε να παρουσιαστεί το αποτέλεσμα της κύριας ροής, το οποίο είναι η αδιάστατη παροχή $G(t)$ για τις ροές που οφείλονται σε βαθμίδα πίεσης ή συγκέντρωσης και η αδιάστατη ολική θερμοροή $Q(t)$ για τις ροές που οφείλονται σε βαθμίδα θερμοκρασίας. Οι καμπύλες που αφορούν στο ελαφρύτερο συστατικό εμφανίζονται ως συμπαγείς, ενώ οι αντίστοιχες καμπύλες για το βαρύτερο συστατικό εμφανίζονται ως διακεκομμένες.

Οι παράμετροι που χρησιμοποιήθηκαν εξαρτώνται από την παράμετρο αραιοποίησης του μίγματος δ . Γενικά, ισχύει η παρατήρηση ότι, σε μικρές τιμές του δ για τη σύγκλιση του σχήματος, απαιτείται μεγαλύτερος αριθμός μοριακών γωνιών και λιγότεροι χωρικοί κόμβοι απ' ό,τι σε μεγάλες τιμές του δ . Επίσης, στη δεύτερη περίπτωση απαιτείται μικρότερο χρονικό βήμα. Συγκεκριμένα, για τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται σε αυτή την ενότητα για $\delta < 10$ η διακριτοποίηση στο χώρο των μοριακών ταχυτήτων γίνεται με $M = 32$ μέτρα και $N = 201$ γωνίες στο διάστημα $[0, \pi]$. Το χωρικό πλέγμα αποτελείται από $I = 101$ κόμβους, και το χρονικό βήμα είναι $\Delta t = 10^{-2}$. Αντίστοιχα, για $\delta \leq 10$ η διακριτοποίηση στο χώρο των μοριακών ταχυτήτων γίνεται με $M = 32$ μέτρα και $N = 41$ γωνίες στο π . Το χωρικό πλέγμα αποτελείται από $I = 201$ κόμβους, και το χρονικό βήμα είναι $\Delta t = 10^{-3}$.

Τα Σχήματα 4.3 έως 4.7 αφορούν στις ροές που οφείλονται σε βαθμίδα πίεσης. Ειδικότερα, στα Σχήματα 4.3 και 4.4 παρουσιάζεται η χρονική εξέλιξη των αδιάστατων παροχών $G^{(P)}(t)$ για $\delta = 0, 0.1, 1$ και 10 για συγκεντρώσεις $C = 0.3$ (πάνω), 0.5 (κέντρο) και 0.7 (κάτω) για τα δύο υπό εξέταση μίγματα. Το μίγμα Ne-Ar εμφανίζεται στο Σχήμα 4.3 και το μίγμα He-Xe στο γράφημα

4.4. Στα γραφήματα αυτά ο άξονας του χρόνου περιορίστηκε μέχρι την τιμή $t = 25$ για να είναι δυνατή η καλύτερη σύγκριση των καμπυλών. Στην πραγματικότητα, ο άξονας t εκτείνεται μέχρι την τιμή $t = 146$ για το μίγμα Ne-Ar και $t = 160$ για το μίγμα He-Xe και αυτό οφείλεται στην πολύ αργή σύγκλιση για $\delta = 0$, ιδίως του βαρύτερου συστατικού των μιγμάτων. Παρατηρούμε ότι η επίδραση της συγκέντρωσης στην εικόνα των διαφόρων γραφημάτων είναι μικρή για το μίγμα Ne-Ar, ενώ είναι σημαντικότερη στο μίγμα He-Xe. Όλες οι καμπύλες ξεκινούν από την τιμή 0 και αυξάνονται, στην αρχή με γρηγορότερο ρυθμό και με αργότερο στη συνέχεια, μέχρι να προσεγγίσουν το 99% της μόνιμης ροής. Ειδικότερα στο μίγμα He-Xe οι καμπύλες του He ανεβαίνουν απότομα και προσεγγίζουν τη μόνιμη ροή πολύ γρηγορότερα από ό,τι οι αντίστοιχες καμπύλες του Xe.

Στα Σχήματα 4.5 και 4.6 παρουσιάζεται η χρονική εξέλιξη των αδιάστατων παροχών $G^{(P)}(t)$ για συγκεντρώσεις $C = 0, 0.1, 0.5, 0.9, 1$ και $\delta = 0.1$ (πάνω), 1 (κέντρο) και 10 (κάτω). Οι τιμές $C = 0$ και $C = 1$ αντιστοιχούν σε ροή απλού αερίου (το βαρύτερο για $C = 0$, ή το ελαφρύτερο για $C = 1$). Τα αποτελέσματα που παίρνουμε σε αυτές τις περιπτώσεις, συμπίπτουν με αυτά που παίρνουμε για τις ροές ενός απλού μονοατομικού αερίου σε κυλινδρικό αγωγό και τα οποία παρουσιάστηκαν στο προηγούμενο κεφάλαιο. Γενικότερα τώρα, παρατηρούμε ότι για μικρές τιμές του δ οι καμπύλες των δύο συστατικών διαχωρίζονται μεταξύ τους, ιδίως στο μίγμα He-Xe, ενώ για $\delta = 10$ αυτές οι καμπύλες πλησιάζουν περισσότερο μεταξύ τους και στο μίγμα Ne-Ar σχεδόν ταυτίζονται. Το φαινόμενο του διαχωρισμού των συστατικών του μίγματος θα συζητηθεί αναλυτικότερα στην επόμενη ενότητα. Επίσης, μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι οι καμπύλες με τις διακεκομμένες γραμμές εκτείνονται πιο δεξιά στον άξονα του χρόνου t από τις αντίστοιχες συμπαγείς καμπύλες, γεγονός που δείχνει πως οι χρόνοι ισορροπίας του βαρύτερου συστατικού είναι μεγαλύτεροι από τους αντίστοιχους χρόνους του ελαφρύτερου συστατικού. Η διαφορά αυτή είναι σημαντικότερη στο μίγμα He-Xe.

Στο Σχήμα 4.7 παρουσιάζεται ο συνολικός χρόνος ισορροπίας t_E κάθε συστατικού των δύο μιγμάτων συναρτήσει της παραμέτρου αραιοποίησης δ για συγκεντρώσεις $C = 0, 0.1, 0.5, 0.9$ και 1. Από τις καμπύλες που αφορούν στο ελαφρύτερο συστατικό απουσιάζει η καμπύλη που αντιστοιχεί σε συγκέντρωση $C = 0$ και από τις καμπύλες που αφορούν στο βαρύτερο συστατικό απουσιάζει η καμπύλη που αντιστοιχεί σε συγκέντρωση $C = 1$. Παρατηρούμε, όπως είδαμε και

στις ροές απλών αερίων, ότι οι χρόνοι ισορροπίας ξεκινούν με μια μεγάλη τιμή για μικρά δ , στη συνέχεια μειώνονται σταδιακά παίρνοντας την ελάχιστη τιμή τους κοντά στο $\delta = 1$ και στη συνέχεια αυξάνονται και πάλι καθώς το δ μεγαλώνει. Η ίδια παρατήρηση ισχύει και για τα δύο μίγματα. Επίσης παρατηρούμε ότι καθώς η συγκέντρωση αυξάνει, οι απαιτούμενοι χρόνοι ισορροπίας είναι μεγαλύτεροι για κάθε συστατικό του μίγματος. Σε μικρά δ υπάρχει μεγαλύτερη επίδραση της συγκέντρωσης στους συνολικούς χρόνους του κάθε συστατικού, ιδίως για το μίγμα He-Xe. Στα μεγαλύτερα δ στο μίγμα Ne-Ar οι συνολικοί χρόνοι είναι σχεδόν ανεξάρτητοι από την επίδραση της συγκέντρωσης, καθώς οι σχετικές καμπύλες σχεδόν συμπίπτουν.

Τα Σχήματα 4.8 έως 4.12 αφορούν στις ροές που οφείλονται σε βαθμίδα θερμοκρασίας. Ειδικότερα, στα Σχήματα 4.8 και 4.9 παρουσιάζεται η χρονική εξέλιξη των αδιάστατων ολικών θερμοροών $Q^{(T)}(t)$ για $\delta = 0, 0.1, 1$ και 10 για συγκεντρώσεις $C = 0.3$ (πάνω), 0.5 (κέντρο) και 0.7 (κάτω) για τα δύο υπό εξέταση μίγματα. Στα γραφήματα αυτά ο άξονας του χρόνου περιορίστηκε μέχρι την τιμή $t = 25$ για να είναι δυνατή η καλύτερη σύγκριση των καμπυλών. Στα Σχήματα 4.10 και 4.11 παρουσιάζεται για τα δύο μίγματα η χρονική εξέλιξη των αδιάστατων ολικών θερμοροών $Q^{(T)}(t)$ για συγκεντρώσεις $C = 0, 0.1, 0.5, 0.9, 1$ και $\delta = 0.1$ (πάνω), 1 (κέντρο) και 10 (κάτω). Για μεγάλα δ οι καμπύλες της θερμοροής γίνονται πολύ γρήγορα παράλληλες προς τον άξονα του χρόνου t , ωστόσο εκτείνονται αρκετά μακρύτερα από αυτό το σημείο, γεγονός που, όπως αναφέραμε πιο πάνω, σημαίνει ότι ο χρόνος ισορροπίας του συστατικού καθορίζεται από τη σύγκλιση της παροχής $G(t)$. Επίσης το βαρύτερο συστατικό καθορίζει το χρόνο ισορροπίας του μίγματος. Στο Σχήμα 4.12 παρουσιάζεται ο συνολικός χρόνος ισορροπίας t_E κάθε συστατικού των δύο μιγμάτων συναρτήσει της παραμέτρου αραιοποίησης δ για συγκεντρώσεις $C = 0, 0.1, 0.5, 0.9$ και 1. Γενικά οι παρατηρήσεις που έχουμε να κάνουμε είναι ανάλογες με αυτές για την περίπτωση που η ροή οφείλεται σε βαθμίδα πίεσης. Επίσης οι χρόνοι ισορροπίας είναι σχεδόν ταυτόσημοι για όλα τα συστατικά και στις δύο περιπτώσεις.

Τα Σχήματα 4.13 έως 4.17 αφορούν στις ροές που οφείλονται σε βαθμίδα συγκέντρωσης. Επειδή οι ροές που οφείλονται σε βαθμίδα συγκέντρωσης δεν υφίστανται για $C = 1$ ή $C = 0$, οι συγκεκριμένες καμπύλες δεν συμπεριλαμβάνονται στα γραφήματα. Ειδικότερα, στα Σχήματα 4.13 και 4.14 παρουσιάζεται η χρονική εξέλιξη των αδιάστατων παροχών $G^{(C)}(t)$ για $\delta = 0, 0.1, 1$ και 10 για συγκεντρώσεις $C = 0.3$ (πάνω), 0.5 (κέντρο) και 0.7 (κάτω) για τα δύο υπό εξέταση

μίγματα. Στα γραφήματα αυτά ο άξονας του χρόνου περιορίστηκε μέχρι την τιμή $t = 25$ για να είναι δυνατή η καλύτερη σύγκριση των καμπυλών. Παρατηρούμε ότι οι καμπύλες της παροχής του ελαφρύτερου και του βαρύτερου συστατικού έχουν αντίθετα πρόσημα. Ο λόγος είναι πως στις ροές μιγμάτων που οφείλονται σε βαθμίδα συγκέντρωσης, τα δύο συστατικά κινούνται με αντίθετες σχετικές ταχύτητες. Επίσης παρατηρούμε ότι για δ μεγαλύτερα ή ίσα του 1 η καμπύλη του ελαφρύτερου συστατικού ξεπερνά στιγμιαία το όριο που θέτει η τιμή της παροχής στη μόνη ροή, και στη συνέχεια επανέρχεται σε αυτή επιδεικνύοντας μια ταλαντωτική με ισχυρή απόσβεση συμπεριφορά. Το φαινόμενο είναι εντονότερο στο μίγμα He-Xe. Στα Σχήματα 4.15 και 4.16 παρουσιάζεται για τα δύο μίγματα η χρονική εξέλιξη των αδιάστατων παροχών $G^{(P)}(t)$ για συγκεντρώσεις $C = 0.1, 0.5, 0.9$ και $\delta = 0.1$ (πάνω), 1 (κέντρο) και 10 (κάτω). Στο Σχήμα 4.17 παρουσιάζεται ο συνολικός χρόνος ισορροπίας t_E κάθε συστατικού των δύο μιγμάτων συναρτήσει της παραμέτρου αραιοποίησης δ για συγκεντρώσεις $C = 0.1, 0.5$ και 0.9 . Και σε αυτή την περίπτωση οι καμπύλες είναι ανάλογες με αυτές των ροών που οφείλονται σε βαθμίδες πίεσης και θερμοκρασίας για μικρές τιμές του δ . Καθώς το δ αυξάνει, παρατηρείται μία απόκλιση από την αναμενόμενη συμπεριφορά με ορισμένες περιπτώσεις να συγκλίνουν πολύ γρηγορότερα από την αντίστοιχη περίπτωση των ροών που οφείλονται σε βαθμίδες πίεσης ή θερμοκρασίας.

4.5 Φαινόμενο διαχωρισμού συστατικών σε ροές μιγμάτων

Εξετάζεται το φαινόμενο του διαχωρισμού των συστατικών του μίγματος, το οποίο παρατηρήθηκε στην ανάλυση των γραφημάτων της προηγούμενης ενότητας. Διαχωρισμός των συστατικών σημαίνει ότι τα δύο συστατικά του μίγματος συμπεριφέρονται με διαφορετικό τρόπο το ένα από το άλλο και αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι, όπως είδαμε στην ενότητα των βασικών ορισμών του κεφαλαίου, μακριά από την θερμοδυναμική ισορροπία η μέση μοριακή ταχύτητα του κάθε συστατικού είναι διαφορετική από την υδροδυναμική ταχύτητα του μίγματος. Ο διαχωρισμός των συστατικών χαρακτηρίζεται από το λόγο $G1/G2$ της αδιάστατης παροχής του ελαφρύτερου ως προς του βαρύτερου συστατικού. Καθώς αυτός ο λόγος μεγαλώνει, το φαινόμενο γίνεται πιο έντονο. Στην υδροδυναμική περιοχή, δηλαδή καθώς $\delta \rightarrow \infty$, το φαινόμενο παύει να υφίσταται και ο λόγος

προσεγγίζει την τιμή

$$\frac{G_1}{G_2} \rightarrow \frac{C}{1-C}. \quad (4.5.1)$$

Στην ελεύθερη μοριακή περιοχή, δηλαδή όταν $\delta \rightarrow 0$, η ροή του κάθε συστατικού είναι ανεξάρτητη από τη ροή του άλλου και ο λόγος των παροχών σε αυτή την περίπτωση γίνεται

$$\frac{G_1}{G_2} \rightarrow \frac{C}{1-C} \sqrt{\frac{m_2}{m_1}}. \quad (4.5.2)$$

Αν ορίσουμε την ποσότητα

$$Z = \frac{G_1}{G_2} \frac{1-C}{C}, \quad (4.5.3)$$

τότε αυτή γίνεται ίση με τη μονάδα για $\delta \rightarrow \infty$ και αυξάνει μονότονα καθώς το δ ελαττώνεται, προσεγγίζοντας τη μέγιστη τιμή της $\sqrt{m_2/m_1}$. Επομένως, ισχύει ό,τι

$$1 \leq Z \leq \sqrt{m_2/m_1}. \quad (4.5.4)$$

Η ποσότητα είναι χαρακτηριστική του φαινομένου διαχωρισμού των συστατικών του μίγματος, παίρνοντας την ελάχιστη τιμή της, όταν το φαινόμενο παύει να υφίσταται, και την μεγαλύτερη τιμή της όταν το φαινόμενο είναι ιδιαίτερα έντονο. Μία γραφική αναπαράσταση της συμπεριφοράς του Z δίνεται στο Σχήμα 4.18, όπου παρουσιάζεται η εξάρτηση της ποσότητας Z από την παράμετρο αραιοποίησης δ για ροές μιγμάτων Ne-Ar και He-Xe, που οφείλονται σε βαθμίδα πίεσης σε συγκέντρωση $C = 0.5$. Παρατηρούμε ότι η ποσότητα Z αυξάνει με αργό ρυθμό για μεγάλες ή μικρές τιμές του δ , και πιο απότομα για τιμές του $\delta \in [0.5, 10]$, όπου η ροή βρίσκεται στη μεταβατική περιοχή. Επίσης, για το μίγμα He-Xe, η τιμή της ποσότητας Z σε κάθε δ είναι πολύ μεγαλύτερη από την αντίστοιχη τιμή του μίγματος Ne-Ar, γεγονός που δηλώνει ότι στο μίγμα He-Xe το φαινόμενο του διαχωρισμού των συστατικών του είναι ιδιαιτέρως έντονο.

4.6 Σύγκριση με DSMC

Η επικαιροποίηση των αποτελεσμάτων που αποκτήθηκαν με το μοντέλο McCormack και το σχήμα CTCS μέσω της μεθόδου DVM, πραγματοποιείτε με την επίλυση αντίστοιχων προβλημάτων με τη μέθοδο DSMC. Τα αποτελέσματα των δύο μεθόδων δείχνουν μία πολύ καλή ταύτιση μεταξύ τους. Στους πίνακες 4.1 και 4.2 παρουσιάζονται ενδεικτικά τα αποτελέσματα που αφορούν

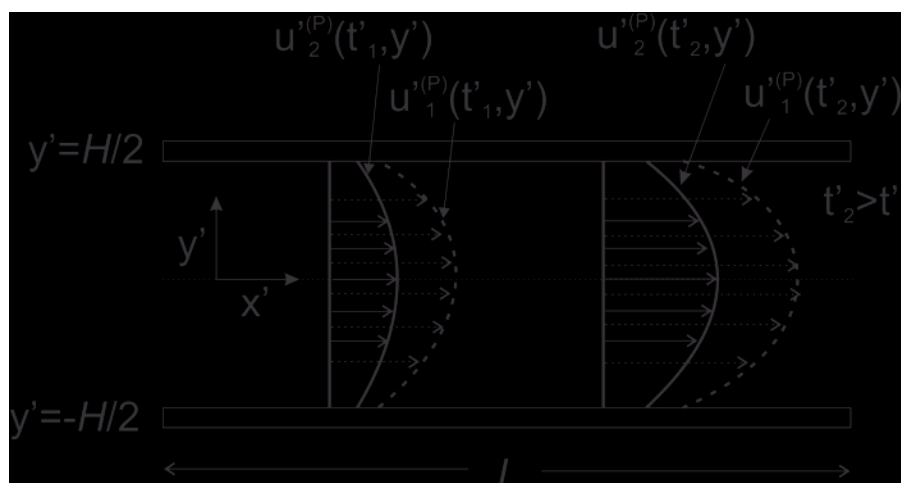
στην ροή που προκύπτει λόγω βαθμίδας πίεσης. Οι πίνακες εμφανίζουν τις τιμές της αδιάστατης παροχής $G_a(t)$, $a = 1, 2$ σε διάφορες χρονικές στιγμές ξεκινώντας από τη στιγμή 0 και φτάνοντας, με μοναδιαίο χρονικό βήμα, μέχρι το χρόνο ισορροπίας (υπολογιζόμενο με μία 99% σύγκλιση στην τιμή της αντίστοιχης μόνιμης ροής) για δύο τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης: $\delta = 0.1, 10$ και δύο τιμές της συγκέντρωσης $C = 0.3, 0.5$ για τα μίγματα Ne-Ar και He-Xe. Για τη μέθοδο DVM χρησιμοποιήθηκε το αριθμητικό σχήμα CTCS με παραμέτρους $M = 32$ (πλήθος μέτρων μοριακών ταχυτήτων), $N = 201$ (πλήθος γωνιών μοριακών ταχυτήτων στο π), $I = 101$ (αριθμός κόμβων) και χρονικό βήμα είναι $\Delta t = 10^{-2}$ για $\delta = 0.1$, ενώ για το $\delta = 10$ χρησιμοποιήθηκαν αντίστοιχα $M = 32$ μέτρα και $N = 41$ γωνίες στο π , $I = 201$ κόμβους και $\Delta t = 10^{-3}$. Για τη μέθοδο DSMC χρησιμοποιήθηκε ένα πλέγμα 50 κελιών προσομοιώνοντας 5000 αριθμητικά μόρια σε κάθε κελί.

Πίνακας 4.1: Σύγκριση μεταξύ DVM και DSMC των αδιάστατων παροχών $G_a(t)$, $a = 1, 2$ για ροή μίγματος Ne-Ar που οφείλεται σε βαθμίδα πίεσης για $\delta = 0.1$ και $C = 0.3$

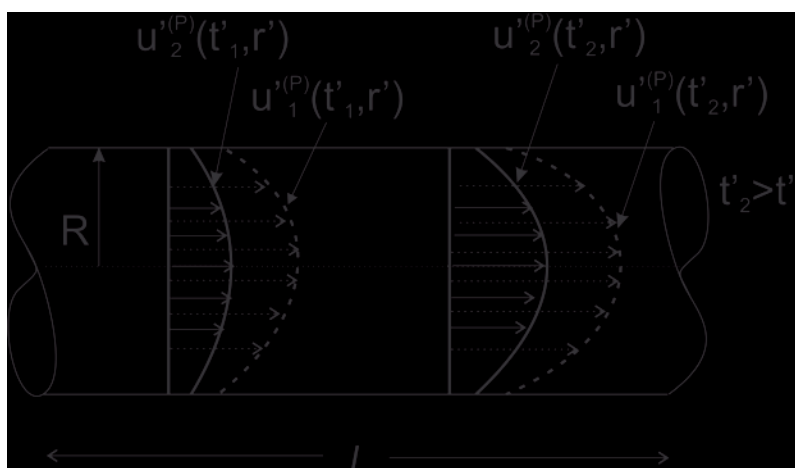
t	$G1_{DVM}$	$G1_{DSMC}$	Σχετικό Σφάλμα	$G2_{DVM}$	$G2_{DSMC}$	Απ. Σχετ. Σφάλμα
0	0.000	0.000	-	0.000	0.000	-
1	1.091	1.073	1.6%	0.638	0.648	1.6%
2	1.459	1.458	0.0%	0.943	0.951	0.8%
3	1.606	1.595	0.6%	1.087	1.080	0.6%
4	1.678	1.670	0.5%	1.163	1.157	0.5%
5	1.719	1.728	0.5%	1.208	1.204	0.3%
6	1.744	1.768	1.3%	1.237	1.236	0.0%
7	1.761	1.774	0.8%	1.255	1.250	0.4%
8	1.772	1.782	0.6%	1.269	1.278	0.7%
9	1.780	1.802	1.3%	1.278	1.282	0.4%
10	1.785	1.798	0.7%	1.285	1.286	0.1%
11	1.789	1.790	0.1%	1.290	1.292	0.2%
12	1.792	1.798	0.3%	1.294	1.285	0.7%
13	1.795	1.790	0.3%	1.297	1.283	1.1%
14				1.299	1.295	0.3%
15				1.301	1.283	1.4%
16				1.302	1.277	1.9%

Πίνακας 4.2: Σύγκριση μεταξύ DVM και DSMC των αδιάστατων παροχών $G_a(t)$, $a = 1, 2$ για ροή μίγματος He-Xe που οφείλεται σε βαθμίδα πίεσης για $\delta = 0.1$ και $C = 0.3$

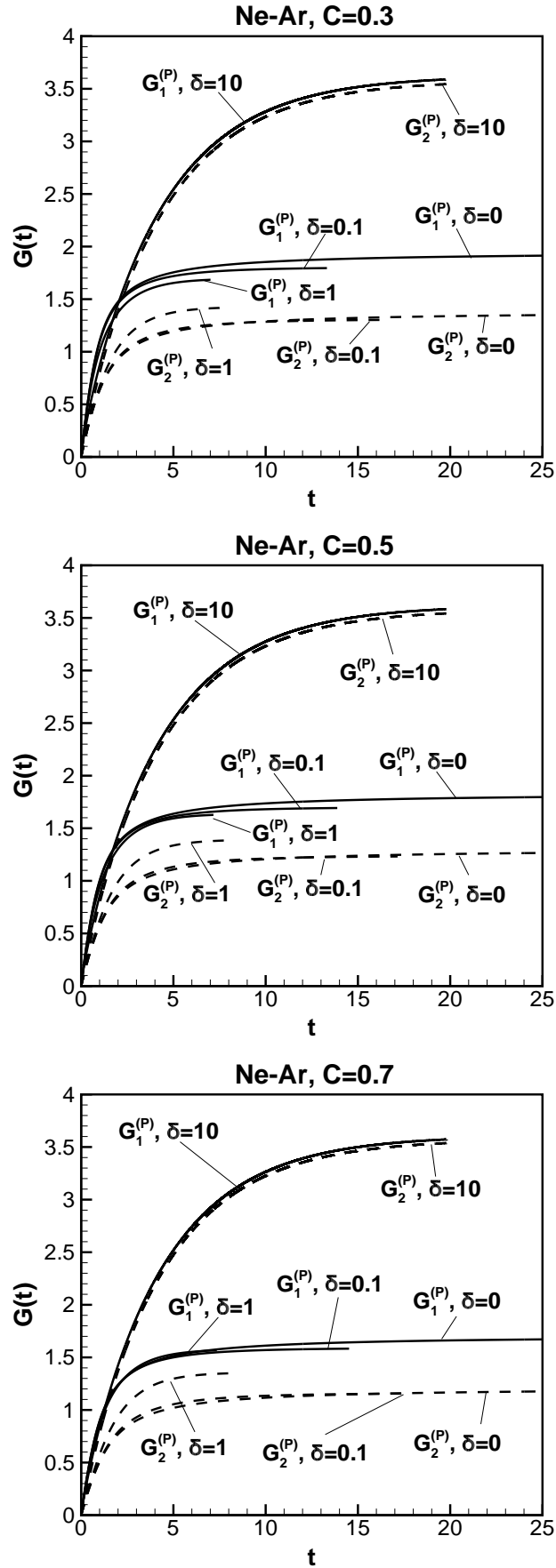
t	$G1_{DVM}$	$G1_{DSMC}$	Απ. Σχετ. Σφάλμα	$G2_{DVM}$	$G2_{DSMC}$	Απ. Σχετ. Σφάλμα
0	0.0000	0.0000	-	0.000	0.000	-
1	5.9830	5.9545	0.5%	0.5535	0.5609	1.3%
2	6.3566	6.3273	0.5%	0.8379	0.8447	0.8%
3	6.4536	6.4730	0.3%	0.9778	0.9795	0.2%
4	6.4908	6.5455	0.8%	1.0545	1.0543	0.0%
5				1.1008	1.1012	0.0%
6				1.1306	1.1306	0.0%
7				1.1510	1.1535	0.2%
8				1.1653	1.1664	0.1%
9				1.1757	1.1781	0.2%
10				1.1835	1.1835	0.0%
11				1.1894	1.1859	0.3%
12				1.1939	1.1894	0.4%
13				1.1975	1.1910	0.5%
14				1.2004	1.1918	0.7%
15				1.2027	1.1972	0.5%
16				1.2045	1.1951	0.8%
17				1.2060	1.1957	0.9%
18				1.2073	1.1993	0.7%



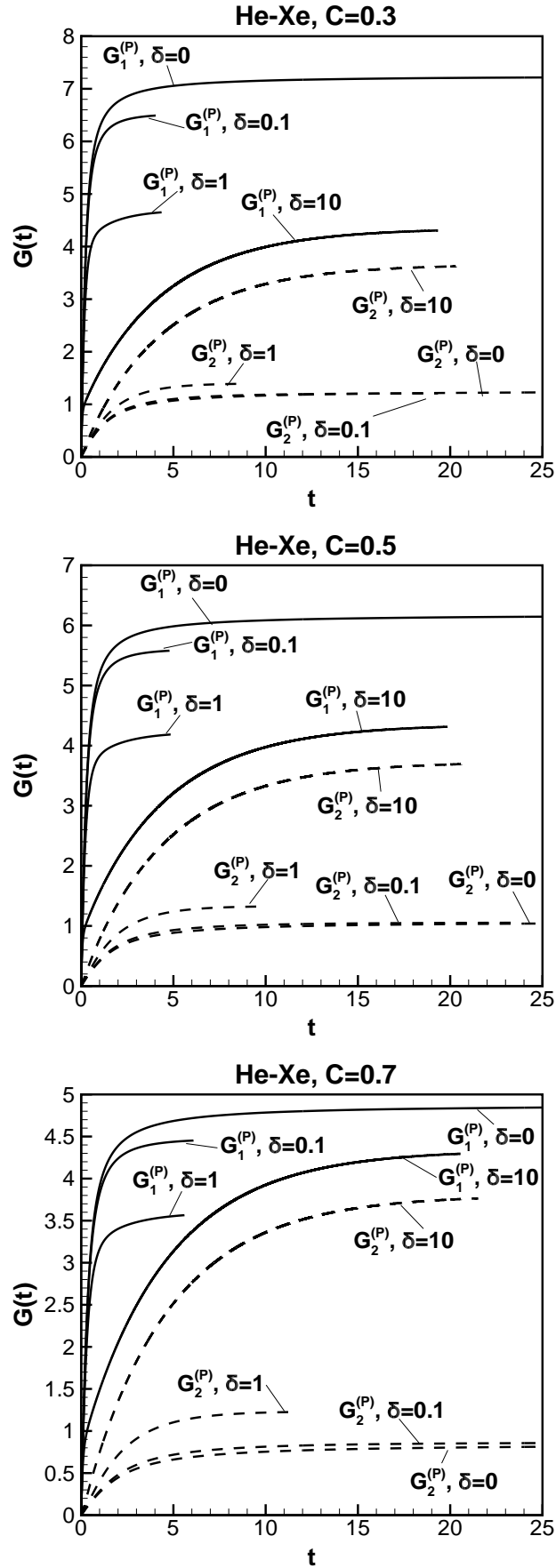
Σχήμα 4.1: Γεωμετρική διαμόρφωση ροής μίγματος δύο αερίων ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες και ποιοτική εικόνα χρονικής εξέλιξης των ταχυτήτων των συστατικών του



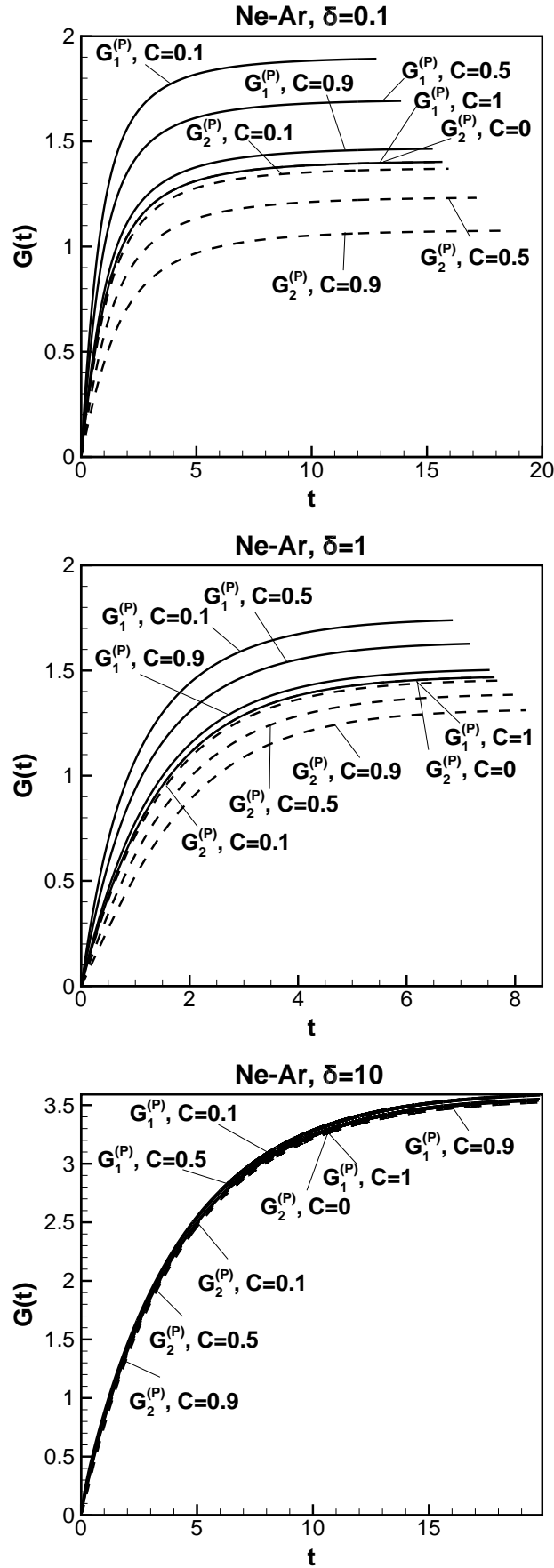
Σχήμα 4.2: Γεωμετρική διαμόρφωση ροής μίγματος δύο αερίων σε κυλινδρικό αγωγό και ποιοτική εικόνα χρονικής εξέλιξης των ταχυτήτων των συστατικών του



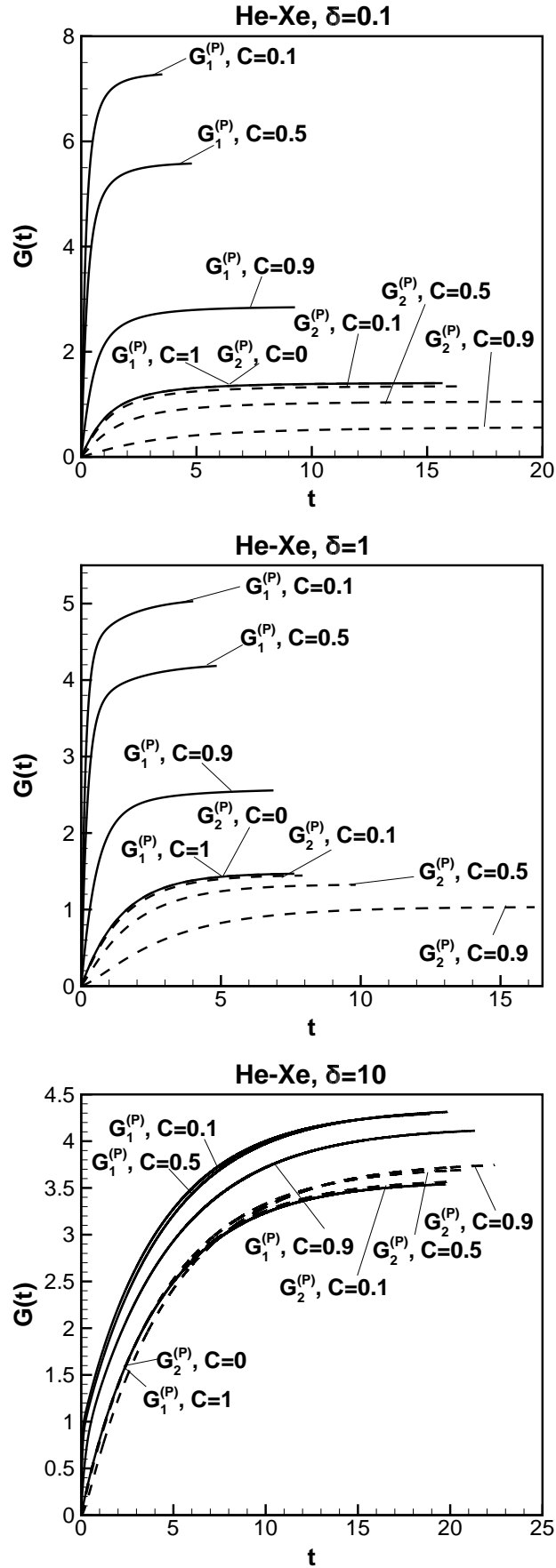
Σχήμα 4.3: Χρονομεταβαλλόμενη ροή μίγματος Ne-Ar λόγω βαθμίδας πίεσης: Χρονική εξέλιξη αδιάστατων παροχών $G^{(P)}(t)$ για $\delta = 0, 0.1, 1$ και 10 για συγκεντρώσεις $C = 0.3$ (πάνω), 0.5 (κέντρο) και 0.7 (κάτω).



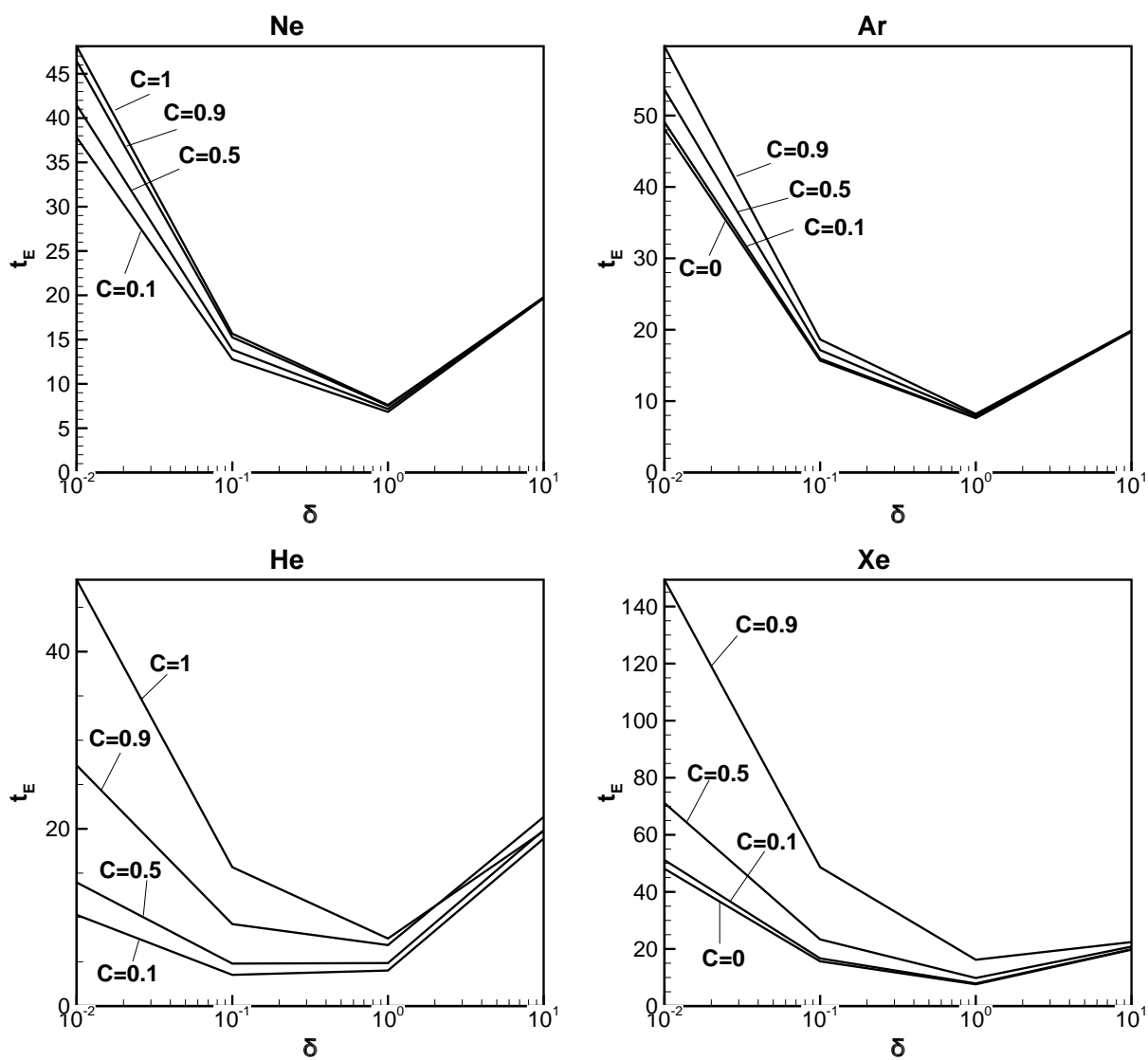
Σχήμα 4.4: Χρονομεταβαλλόμενη ροή μίγματος He-Xe, λόγω βαθμίδας πίεσης: Χρονική εξέλιξη αδιάστατων παροχών $G^{(P)}(t)$ για $\delta = 0, 0.1, 1$ και 10 για συγκεντρώσεις $C = 0.3$ (πάνω), 0.5 (κέντρο) και 0.7 (κάτω).



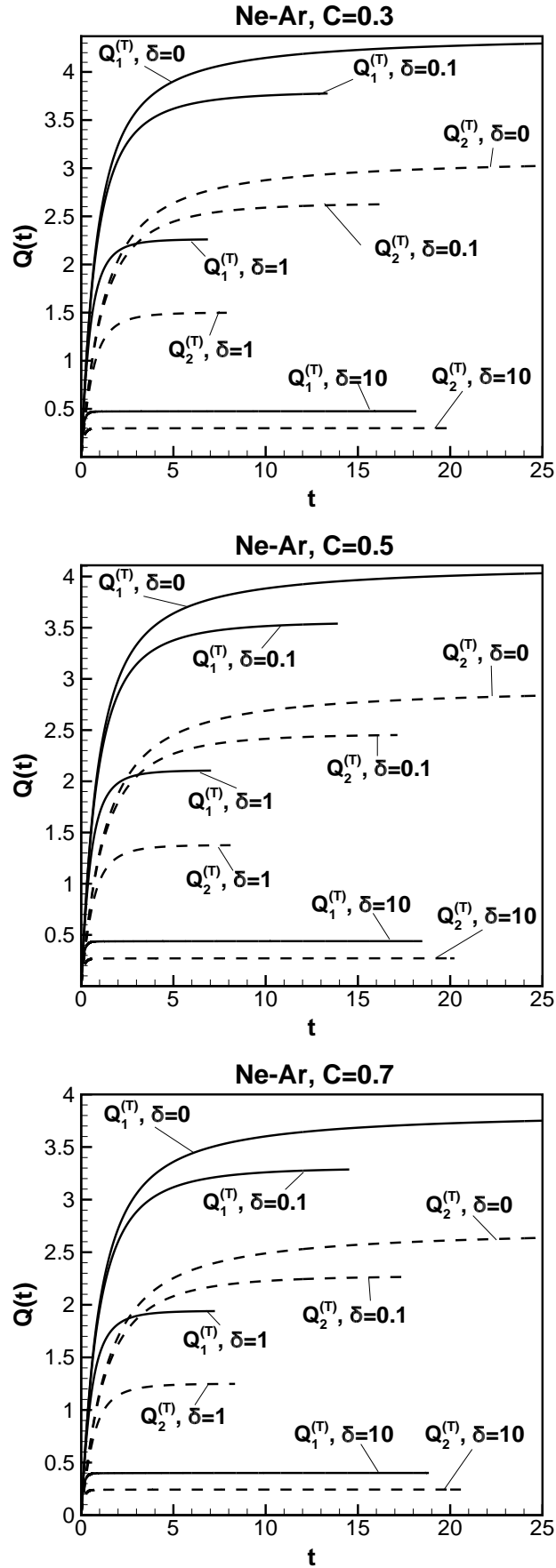
Σχήμα 4.5: Χρονομεταβαλλόμενη ροή μίγματος Ne-Ar, λόγω βαθμίδας πίεσης: Χρονική εξέλιξη αδιάστατων παροχών $G^{(P)}(t)$ για $C = 0, 0.1, 0.5, 0.9, 1$ και $\delta = 0.1$ (πάνω), 1 (κέντρο) και 10 (κάτω).



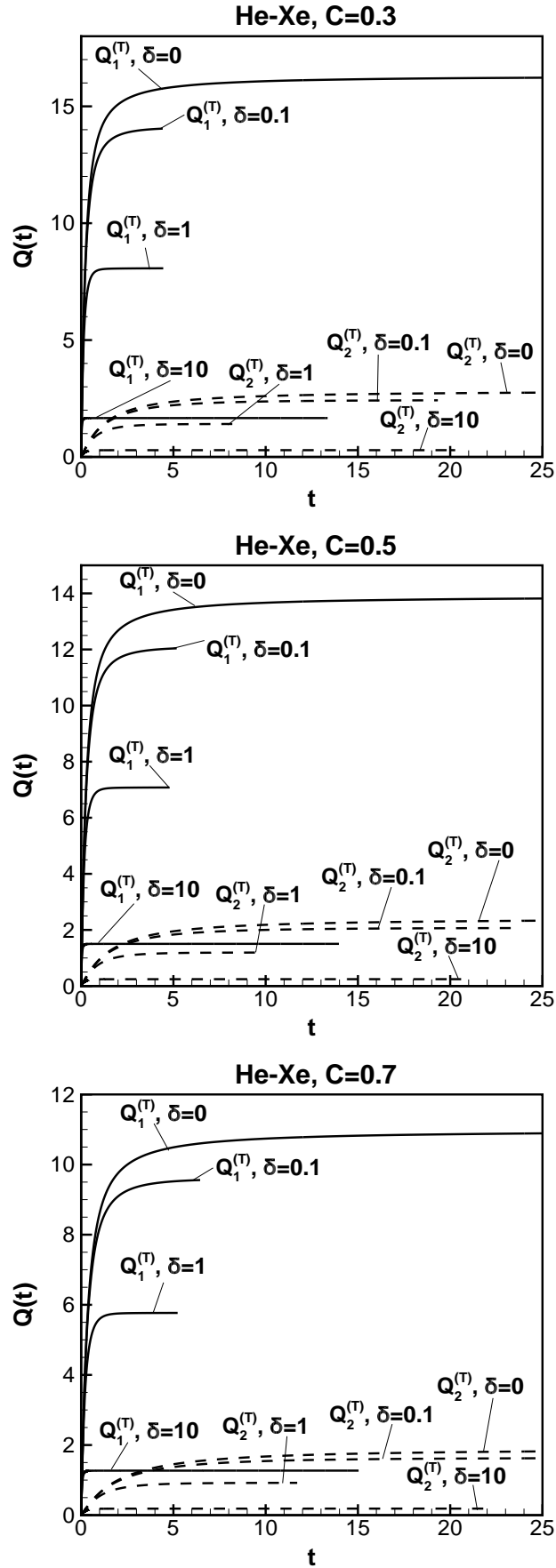
Σχήμα 4.6: Χρονομεταβαλλόμενη ροή μίγματος He-Xe, λόγω βαθμίδας πίεσης: Χρονική εξέλιξη αδιάστατων παροχών $G^{(P)}(t)$ για $C = 0, 0.1, 0.5, 0.9, 1$ και $\delta = 0.1$ (πάνω), 1 (κέντρο) και 10 (κάτω).



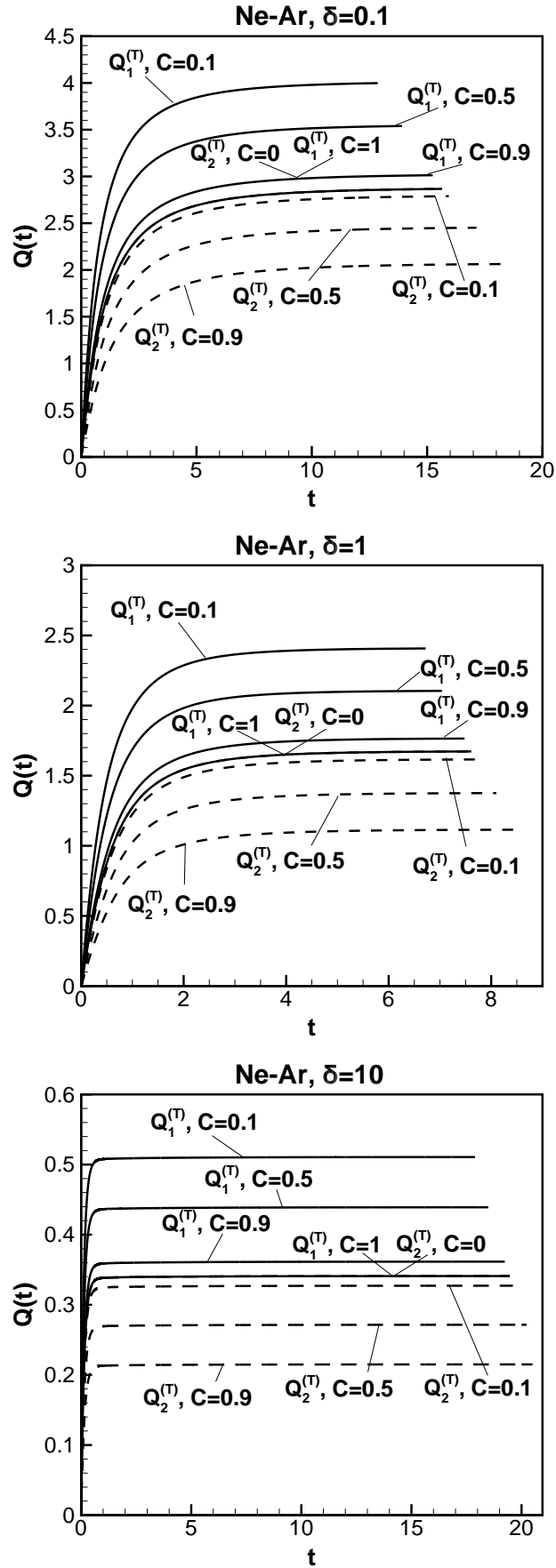
Σχήμα 4.7: Χρονομεταβαλλόμενη ροή μίγματος, λόγω βαθμίδας πίεσης: Αδιάστατος συνολικός χρόνος ισορροπίας t_E κάθε συστατικού συναρτήσει της παραμέτρου αραιοποίησης δ για συγκεντρώσεις $C = 0, 0.1, 0.5, 0.9$ και 1, για το μίγμα Ne-Ar (πάνω) και το μίγμα He-Xe (κάτω)



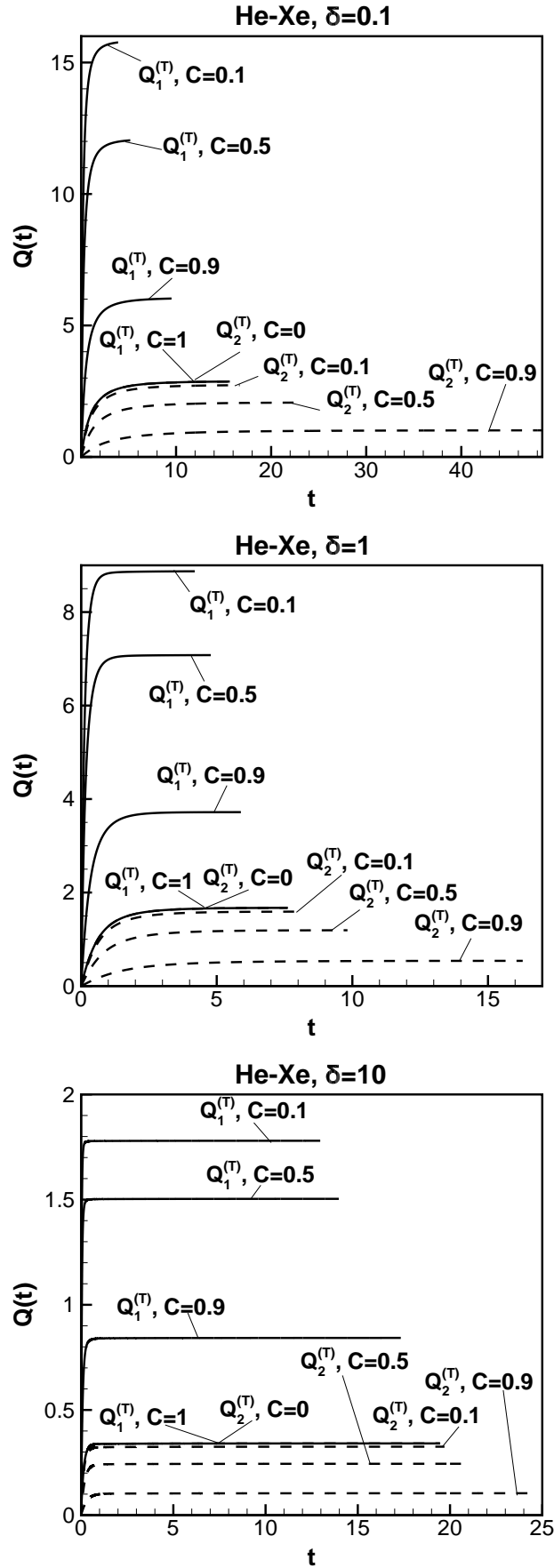
Σχήμα 4.8: Χρονομεταβαλλόμενη ροή μίγματος Ne-Ar, λόγω βαθμίδας θερμοκρασίας: Χρονική εξέλιξη ολικής θερμορροής $Q^{(T)}(t)$ για $\delta = 0, 0.1, 1$ και 10 για συγκεντρώσεις $C = 0.3$ (πάνω), 0.5 (κέντρο) και 0.7 (κάτω).



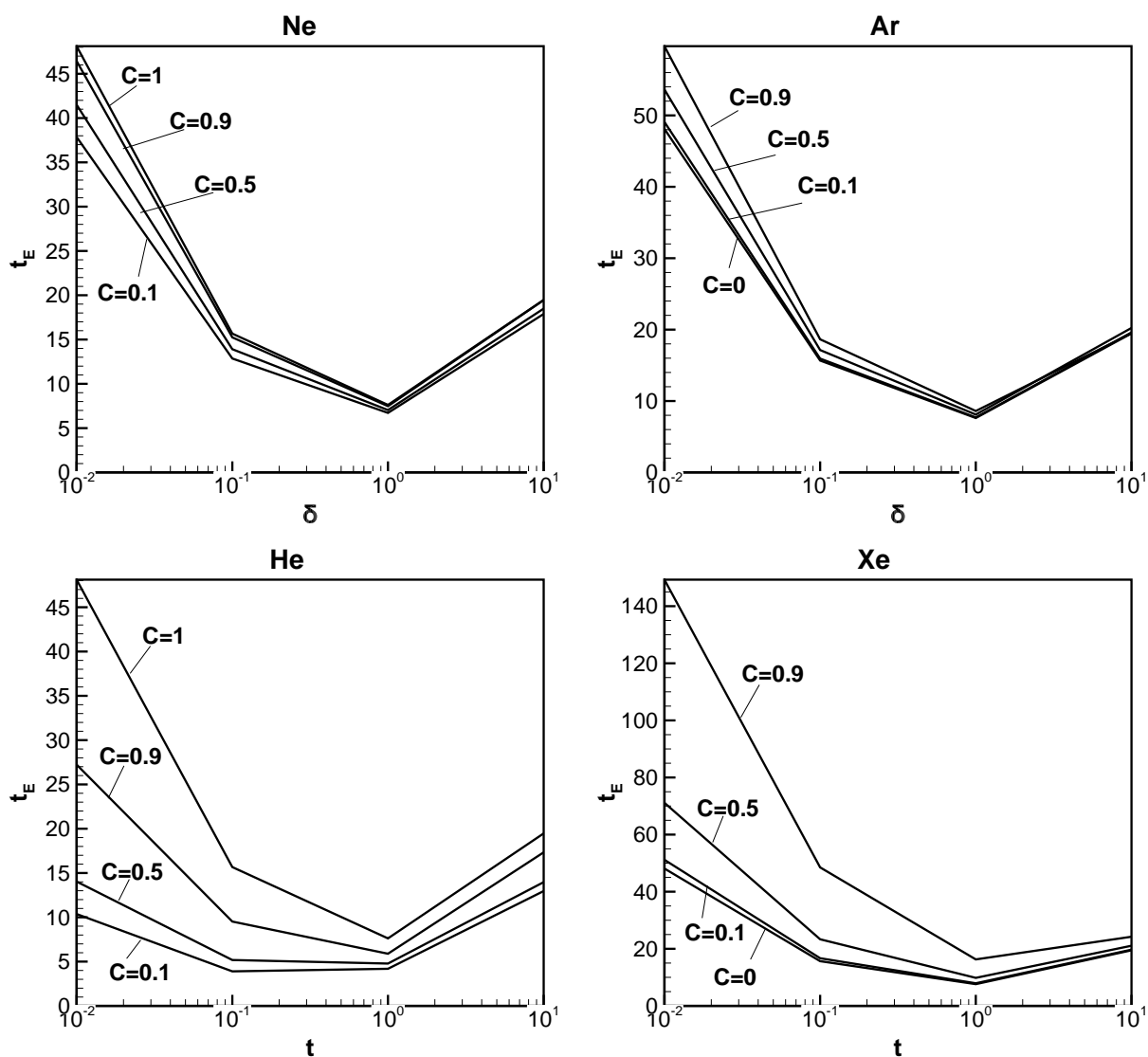
Σχήμα 4.9: Χρονομεταβαλλόμενη ροή μίγματος He-Xe, λόγω βαθμίδας θερμοκρασίας: Χρονική εξέλιξη ολικής θερμορροής $Q^{(T)}(t)$ για $\delta = 0, 0.1, 1$ και 10 για συγκεντρώσεις $C = 0.3$ (πάνω), 0.5 (κέντρο) και 0.7 (κάτω).



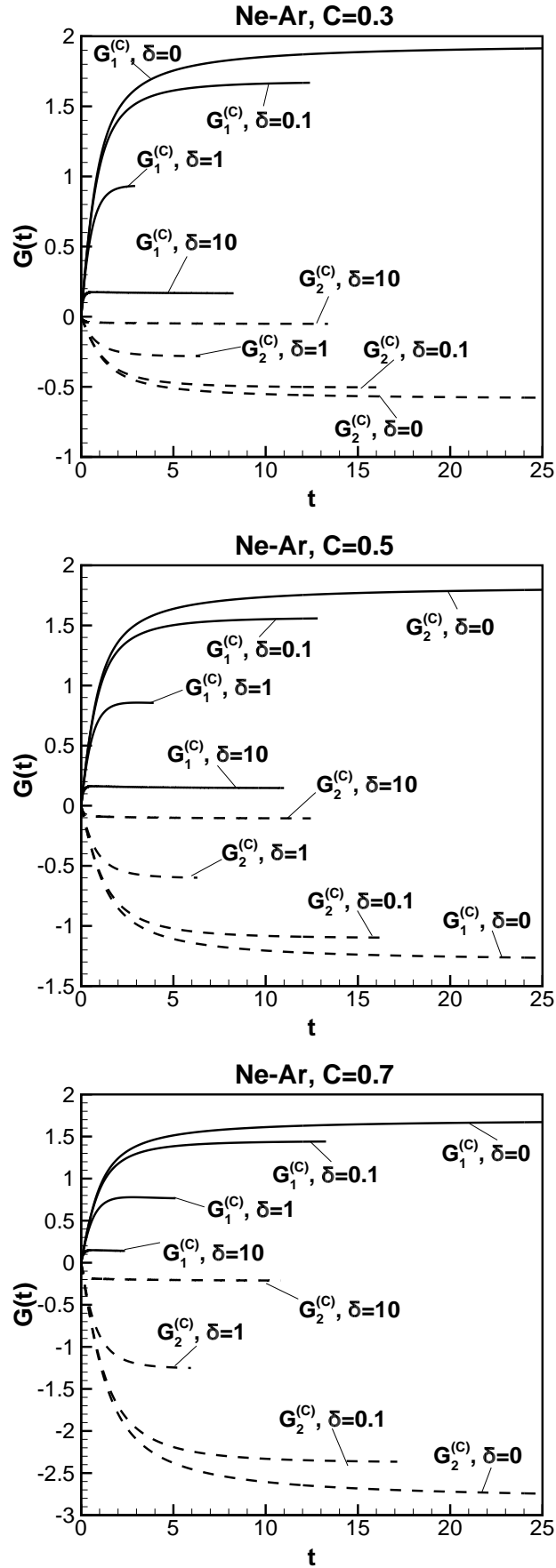
Σχήμα 4.10: Χρονομεταβαλλόμενη ροή μίγματος Ne-Ar, λόγω βαθμίδας θερμοκρασίας: Χρονική εξέλιξη ολικής θερμορροής $Q^{(T)}(t)$ για $C = 0, 0.01, 0.5, 0.99, 1$ και $\delta = 0.1$ (πάνω) και για $C = 0, 0.1, 0.5, 0.9, 1$ και $\delta = 1$ (κέντρο) και 10 (κάτω).



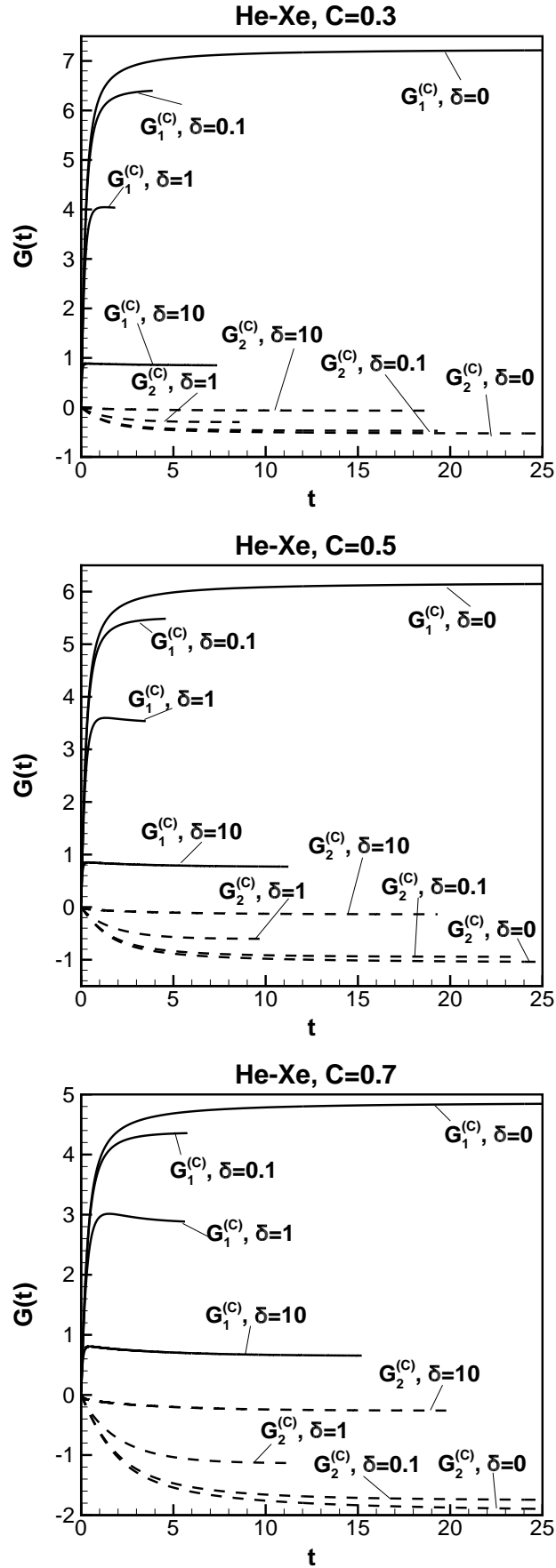
Σχήμα 4.11: Χρονομεταβαλλόμενη ροή μίγματος He-Xe, λόγω βαθμίδας θερμοκρασίας: Χρονική εξέλιξη ολικής θερμορροής $Q^{(T)}(t)$ για $C = 0, 0.1, 0.5, 0.9, 1$ και $\delta = 0.1$ (πάνω), 1 (κέντρο) και 10 (κάτω).



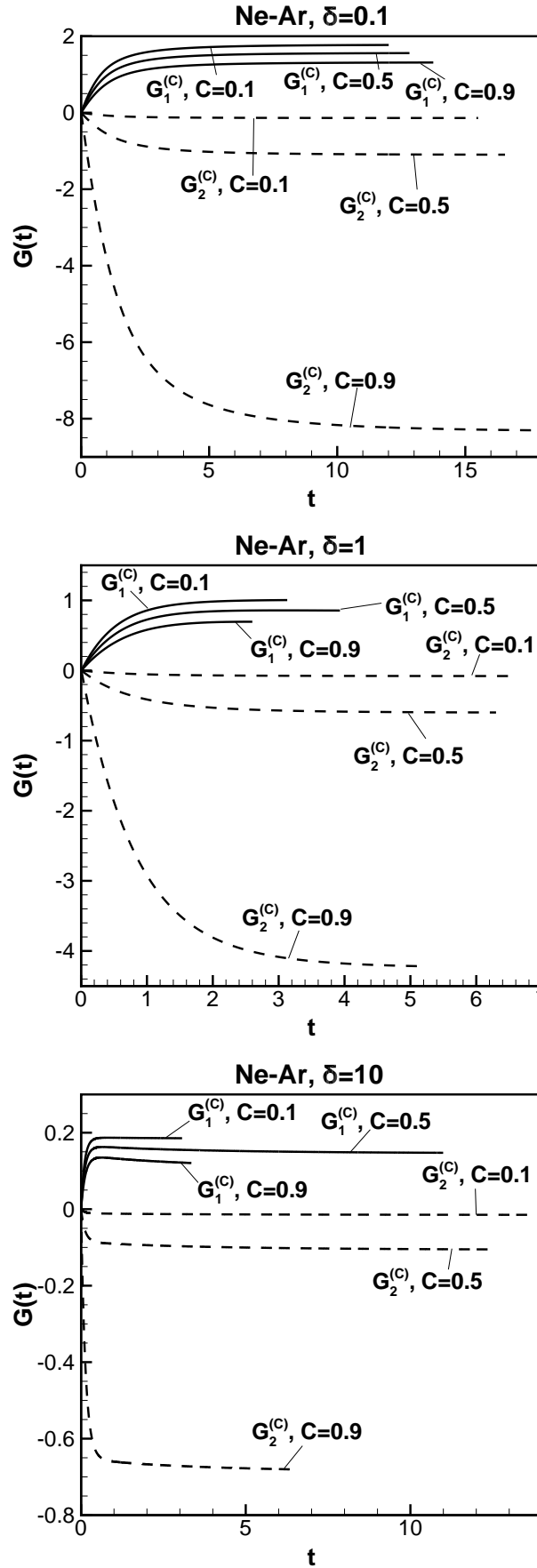
Σχήμα 4.12: Χρονομεταβαλλόμενη ροή μίγματος, λόγω βαθμίδας θερμοκρασίας: Αδιάστατος συνολικός χρόνος ισορροπίας t_E κάθε συστατικού συναρτήσει της παραμέτρου αριοποίησης δ για συγκεντρώσεις $C = 0, 0.1, 0.5, 0.9$ και 1 , για το μίγμα Ne-Ar (πάνω) και το μίγμα He-Xe (κάτω)



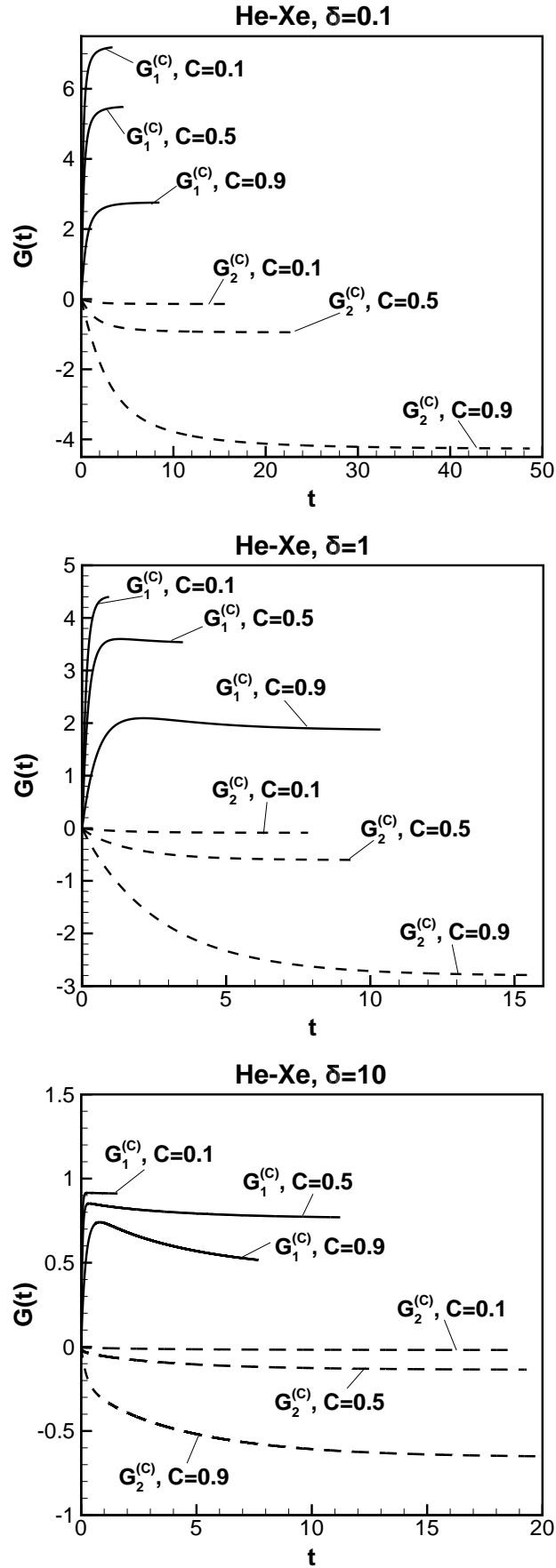
Σχήμα 4.13: Χρονομεταβαλλόμενη ροή μίγματος Ne-Ar, λόγω βαθμίδας συγκέντρωσης: Χρονική εξέλιξη αδιάστατων παροχών $G^{(C)}(t)$ για $\delta = 0, 0.1, 1$ και 10 για συγκεντρώσεις $C = 0.3$ (πάνω), 0.5 (κέντρο) και 0.7 (κάτω).



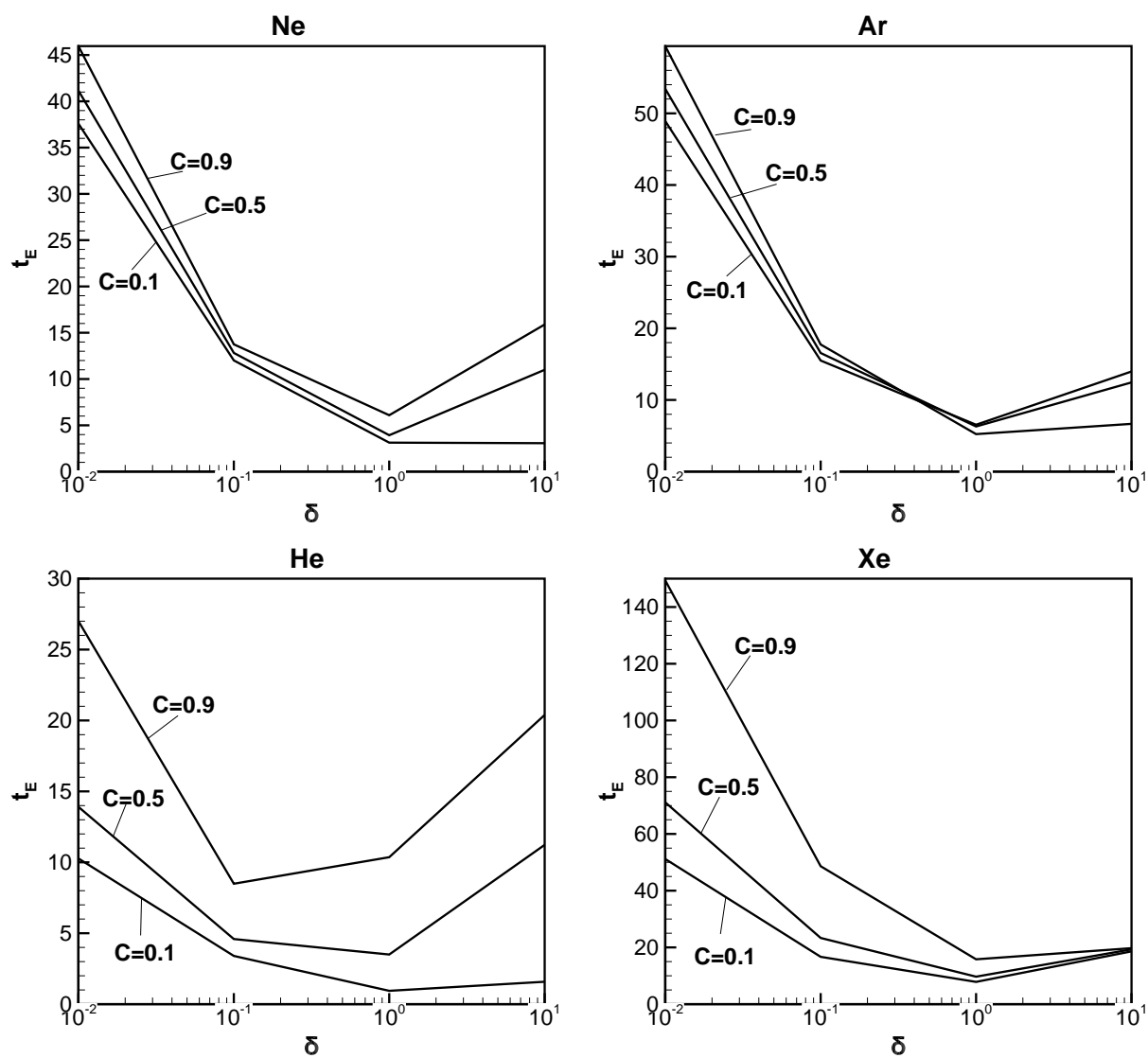
Σχήμα 4.14: Χρονομεταβαλλόμενη ροή μίγματος He-Xe, λόγω βαθμίδας συγκέντρωσης: Χρονική εξέλιξη αδιάστατων παροχών $G^{(C)}(t)$ για $\delta = 0, 0.1, 1$ και 10 για συγκεντρώσεις $C = 0.3$ (πάνω), 0.5 (κέντρο) και 0.7 (κάτω).



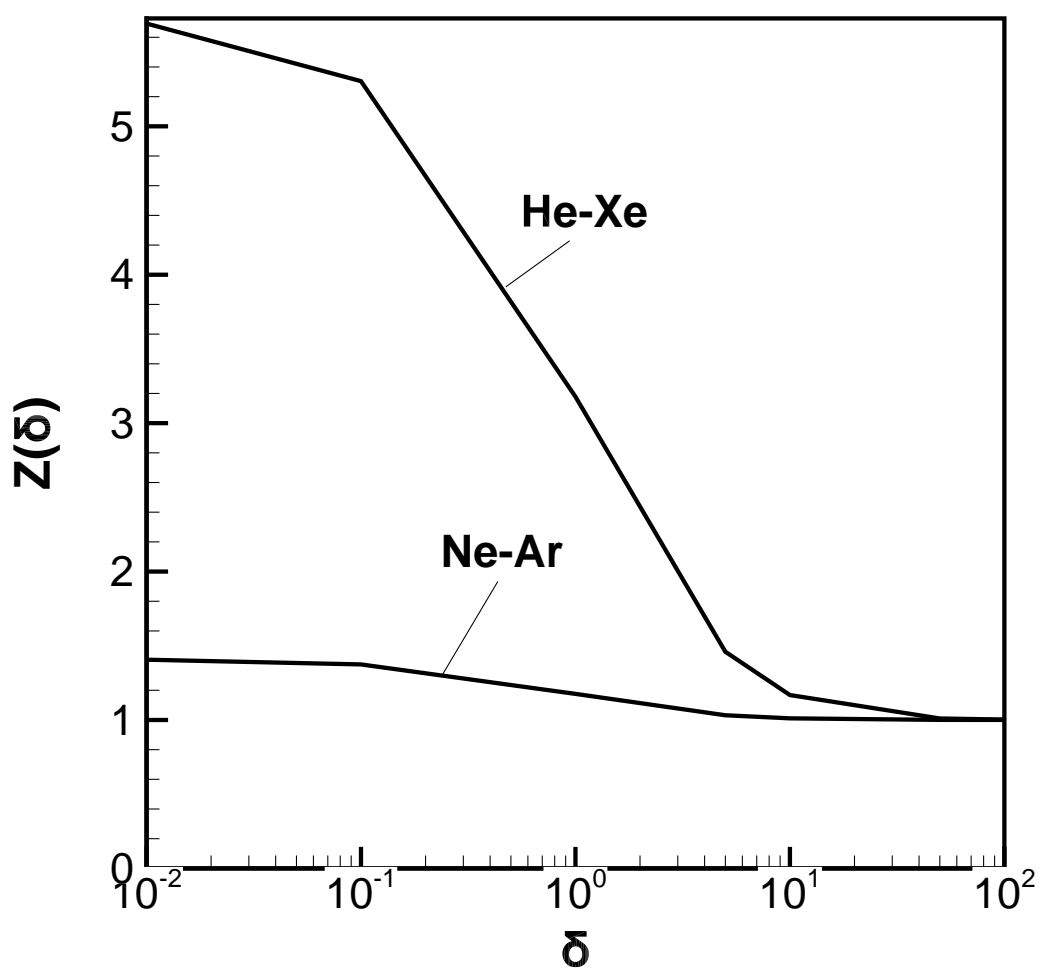
Σχήμα 4.15: Χρονομεταβαλλόμενη ροή μίγματος Ne-Ar, λόγω βαθμίδας συγκέντρωσης: Χρονική εξέλιξη αδιάστατων παροχών $G^{(C)}(t)$ για $C = 0.1, 0.5, 0.9$ και $\delta = 0.1$ (πάνω), $\delta = 1$ (κέντρο) και 10 (κάτω).



Σχήμα 4.16: Χρονομεταβαλλόμενη ροή μίγματος He-Xe, λόγω βαθμίδας συγκέντρωσης: Χρονική εξέλιξη αδιάστατων παροχών $G^{(C)}(t)$ για $C = 0.1, 0.5, 0.9$ και $\delta = 0.1$ (πάνω), 1 (κέντρο) και 10 (κάτω).



Σχήμα 4.17: Χρονομεταβαλλόμενη ροή μίγματος, λόγω βαθμίδας συγκέντρωσης: Αδιάστατος συνολικός χρόνος ισορροπίας t_E κάθε συστατικού συναρτήσει της παραμέτρου αριοποίησης δ για συγκεντρώσεις $C = 0, 0.1, 0.5, 0.9$ και 1 , για το μίγμα Ne-Ar (πάνω) και το μίγμα He-Xe (κάτω)



Σχήμα 4.18: Εξάρτηση της ποσότητας $Z = \frac{G_1}{G_2} \frac{1-C}{C}$ από την παράμετρο αραιοποίησης δ για ροές μίγματος Ne-Ar και He-Xe που οφείλονται σε βαθμίδα πίεσης σε συγκέντρωση $C = 0.5$.

Κεφάλαιο 5

Μη γραμμικά χρονομεταβαλλόμενα φαινόμενα μεταφοράς

5.1 Εισαγωγή

Χαρακτηριστικό στοιχείο των χρονομεταβαλλόμενων ροών που μελετήθηκαν στα προηγούμενα δύο κεφάλαια ήταν το μικρό απόλυτο μέγεθος της θερμοδυναμικής δύναμης, που δρούσε στη ροή, επιτρέποντας τη γραμμικοποίηση των κινητικών εξισώσεων (BGK, Shakhov, McCormack). Σε αυτή την ενότητα μελετούμε μη γραμμικά χρονομεταβαλλόμενα φαινόμενα μεταφοράς. Συγκεκριμένα παρουσιάζονται η χρονομεταβαλλόμενη μεταφορά θερμότητας και η χρονομεταβαλλόμενη ροή Couette με ταυτόχρονη μεταφορά θερμότητας ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες. Στην πρώτη περίπτωση επιβάλλεται μια σταθερή διαφορά θερμοκρασίας ανάμεσα στις δύο πλάκες και μελετάται η εξέλιξη της μεταφοράς θερμότητας ως προς το χρόνο, ενώ στη δεύτερη περίπτωση, ταυτόχρονα με την επιβολή της σταθερής διαφοράς θερμοκρασίας, επιβάλλεται και η κίνηση των πλακών σε αντίθετη κατεύθυνση. Τα κινητικά μοντέλα που χρησιμοποιούνται είναι τα μη γραμμικά BGK και Shakhov. Οι μη γραμμικές κινητικές εξισώσεις, που προκύπτουν, επιλύονται αριθμητικά με τη μέθοδο DVM σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen. Οι κατανομές των μακροσκοπικών ποσοτήτων, που υπολογίζονται, παρουσιάζουν μια ταλαντωτική συμπεριφορά ως προς τον χρόνο.

5.2 Μεταφορά θερμότητας ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες - Μοντέλο BGK

Παρουσιάζεται η μεταφορά θερμότητας ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες. Θεωρείται ένα αραιοποιημένο μονατομικό αέριο, το οποίο αρχικά βρίσκεται σε ηρεμία και περιέχεται ανάμεσα σε δύο παράλληλες πλάκες μήκους L , που είναι τοποθετημένες στο $y' = \pm H/2$ ($H/L \ll 1$). Αρχικά δεν υπάρχει διαφορά θερμοκρασίας μεταξύ των δύο πλακών. Στη συνέχεια, κατά τη χρονική στιγμή $t' = 0$ δημιουργείται απότομα μια διαφορά θερμοκρασίας ανάμεσα στις δύο πλάκες, η οποία διατηρείται σταθερή για όλη τη χρονική διάρκεια της μεταφοράς θερμότητας. Ως αποτέλεσμα παρατηρείται μια χρονικά εξελισσόμενη μεταφορά θερμότητας, που συνοδεύεται από ροϊκά φαινόμενα και η οποία σιγά σιγά, καθώς $t' \rightarrow \infty$, προσεγγίζει την αντίστοιχη μόνιμη μεταφοράς θερμότητας.

Ονομάζοντας T_1 τη θερμοκρασία της κάτω πλάκας και T_2 τη θερμοκρασία της άνω πλάκας με $T_1 > T_2$, ο λόγος των θερμοκρασιών ορίζεται ως

$$\frac{T_1}{T_2} = \frac{1 + \beta}{1 - \beta}, \quad (5.2.1)$$

όπου

$$\beta = \frac{\Delta T}{2T_0}, \quad \Delta T = T_1 - T_2 > 0 \quad (5.2.2)$$

με

$$T_0 = \frac{T_1 + T_2}{2} \quad (5.2.3)$$

να δηλώνει μία θερμοκρασία αναφοράς. Ο λόγος β παίρνει την τιμή 0, όταν $T_2 = T_1$, ενώ μπορεί να πάρει μια τιμή πολύ κοντά στη μονάδα αν η διαφορά $T_1 - T_2$ γίνει μεγάλη.

Το μοντέλο που χρησιμοποιείται για τις κινητικές εξισώσεις είναι το μη γραμμικό χρονομεταβαλλόμενο BGK. Για την αδιαστατοποίηση των εξισώσεων εισάγουμε τις ακόλουθες αδιάστατες ποσότητες

$$t = \frac{t'v_0}{H}, \quad \rho = \frac{n}{n_0}, \quad u_y = \frac{u'_y}{v_0}, \quad \tau = \frac{T}{T_0}, \quad \text{και} \quad q_y = \frac{q'_y}{P_0v_0}, \quad (5.2.4)$$

όπου n_0 και P_0 είναι μια αριθμητική πυκνότητα αναφοράς και μια πίεση αναφοράς, αντίστοιχα.

Αν υποθεθεί ένα ενδομοριακό μοντέλο σκληρών σφαιρών, οι αδιάστατες κινητικές εξισώσεις του μη γραμμικού BGK, που περιγράφουν τη μεταφορά θερμότητας, ύστερα από τη διαδικασία

της προβολής, δίνονται από τις σχέσεις

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + c_y \frac{\partial Y}{\partial y} = \delta_0 \rho \sqrt{\tau} (Y^M - Y) \quad (5.2.5)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + c_y \frac{\partial \Phi}{\partial y} = \delta_0 \rho \sqrt{\tau} (\Phi^M - \Phi) \quad (5.2.6)$$

$$\frac{\partial X}{\partial t} + c_y \frac{\partial X}{\partial y} = \delta_0 \rho \sqrt{\tau} (X^M - X), \quad (5.2.7)$$

όπου

$$\delta_0 = \frac{P_0 H}{\mu_0 \nu_0} \quad (5.2.8)$$

είναι η παράμετρος αραιοποίησης αναφοράς, με μ_0 το ιξώδες του αερίου στη θερμοκρασία αναφοράς T_0 . Επισημαίνεται ότι η παράμετρος αραιοποίησης αναφοράς είναι διαφορετική από την τοπική παράμετρο αραιοποίησης, η οποία ορίζεται ως

$$\delta = \frac{P H}{\mu \nu_0}. \quad (5.2.9)$$

Η σχέση που συνδέει μεταξύ τους τις δύο παραμέτρους αραιοποίησης για το ενδομοριακό μοντέλο των σκληρών σφαιρών είναι

$$\delta = \delta_0 \rho. \quad (5.2.10)$$

Οι τοπικές κατανομές Maxwell γράφονται ως

$$Y^M = \frac{\rho}{\sqrt{\pi \tau}} \exp \left(-\frac{(c_y - u_y)^2}{\tau} \right) \quad (5.2.11)$$

$$\Phi^M = \frac{\rho}{\sqrt{\pi \tau}} u_x \exp \left(-\frac{(c_y - u_y)^2}{\tau} \right) = Y^M u_x = 0 \quad (5.2.12)$$

και

$$X^M = \frac{\rho}{\sqrt{\pi \tau}} (u_x^2 + \tau) \exp \left(-\frac{(c_y - u_y)^2}{\tau} \right) = \frac{\rho}{\sqrt{\pi \tau}} \tau \exp \left(-\frac{(c_y - u_y)^2}{\tau} \right) \quad (5.2.13)$$

Οι μακροσκοπικές ποσότητες, έπειτα από τη διαδικασία της προβολής, δίνονται από τα ακόλουθα ολοκληρώματα

$$\rho(t, y) = \int_{-\infty}^{+\infty} Y(t, y, c_y) dc_y \quad (5.2.14)$$

$$u_x(t, y) = \frac{1}{\rho} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(t, y, c_y) dc_y = 0 \quad (5.2.15)$$

$$u_y(t, y) = \frac{1}{\rho} \int_{-\infty}^{+\infty} c_y Y(t, y, c_y) dc_y \quad (5.2.16)$$

$$\tau(t, y) = \frac{2}{3\rho} \int_{-\infty}^{+\infty} (c_y^2 Y + X) dc_y - \frac{2}{3} u_y^2 \quad (5.2.17)$$

$$q_y(t, y) = \int_{-\infty}^{+\infty} [c_y^3 Y + (c_y - u_y) X - 3u_y c_y^2 Y] dc_y + 2\rho u_y^3 \quad (5.2.18)$$

Επισημαίνεται ότι η συνιστώσα της ταχύτητας παράλληλη προς τις πλάκες είναι μηδέν ($u_x = 0$). Ωστόσο στη διατύπωση των κατανομών Maxwell και των μακροσκοπικών ποσοτήτων διατηρείται η συνιστώσα u_y της ταχύτητας που είναι κάθετη στις πλάκες. Αυτό συμβαίνει επειδή, καθώς η μεταφορά θερμότητας εξελίσσεται χρονικά, η συνιστώσα u_y είναι διάφορη του μηδενός, ενώ αυτή μηδενίζεται τελικά όταν επιτευχθεί η μόνιμη κατάσταση (για $t \rightarrow \infty$, $u_y \rightarrow 0$).

Η διατύπωση των οριακών συνθηκών πλήρους διάχυσης, στο τοίχωμα $y = -1/2$ είναι

$$Y\left(t, -\frac{1}{2}, c_y\right) = \frac{\rho_{wL}}{\sqrt{\pi(1+\beta)}} \exp\left(-\frac{c_y^2}{1+\beta}\right), \quad c_y > 0 \quad (5.2.19)$$

$$\Phi\left(t, -\frac{1}{2}, c_y\right) = 0, \quad c_y > 0 \quad (5.2.20)$$

και

$$X\left(t, -\frac{1}{2}, c_y\right) = \rho_{wL} \frac{\sqrt{(1+\beta)}}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{c_y^2}{1+\beta}\right), \quad c_y > 0, \quad (5.2.21)$$

ενώ στο τοίχωμα $y = 1/2$ είναι

$$Y\left(t, \frac{1}{2}, c_y\right) = \frac{\rho_{wR}}{\sqrt{\pi(1-\beta)}} \exp\left(-\frac{c_y^2}{1-\beta}\right), \quad c_y < 0 \quad (5.2.22)$$

$$\Phi\left(t, \frac{1}{2}, c_y\right) = 0, \quad c_y < 0 \quad (5.2.23)$$

και

$$X\left(t, \frac{1}{2}, c_y\right) = \rho_{wR} \frac{\sqrt{(1-\beta)}}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{c_y^2}{1-\beta}\right), \quad c_y < 0. \quad (5.2.24)$$

Οι ρ_{wL} και ρ_{wR} , είναι δύο παράμετροι, οι οποίες προσδιορίζονται από τη συνθήκη μη διαπερατότητας στο κάθε τοίχωμα. Η συνθήκη αυτή απαιτεί η συνιστώσα της μακροσκοπικής ταχύτητας

που είναι κάθετη στα τοιχώματα να ισούται με μηδέν πάνω σε αυτά, δηλαδή

$$u_y \left(t, \pm \frac{1}{2} \right) = 0. \quad (5.2.25)$$

Οι συνθήκες μη διαπερατότητας στα τοιχώματα δίνουν

$$\rho_{wL} = 2 \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{1+\beta}} \int_0^{+\infty} c_y' Y \left(t, -\frac{1}{2}, -c_y' \right) dc_y', \quad c_y > 0 \quad (5.2.26)$$

ενώ στο άνω τοίχωμα δίνει

$$\rho_{wR} = 2 \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{1-\beta}} \int_0^{+\infty} c_y Y \left(t, \frac{1}{2}, c_y \right) dc_y, \quad c_y > 0. \quad (5.2.27)$$

Η μαθηματική διατύπωση του προβλήματος ολοκληρώνεται με τον ορισμό των αρχικών συνθηκών. Αρχικά ανάμεσα στις δύο πλάκες η κατανομή των μορίων του αερίου ακολουθεί την κατανομή Maxwell με τις ακόλουθες αρχικές τιμές για την πυκνότητα, τη θερμορροή και τη θερμοκρασία

$$\rho^0 = 1, \quad q^0 = 0, \quad \tau^0 = 1. \quad (5.2.28)$$

Αν εφαρμοστούν τα παραπάνω, οι αρχικές τιμές των παραμέτρων ρ_{wL} και ρ_{wR} γίνονται

$$\rho_{wL}^0 = 1/\sqrt{1+\beta}, \quad \rho_{wR}^0 = 1/\sqrt{1-\beta}. \quad (5.2.29)$$

Επίσης, η αρχική συνιστώσα της ταχύτητας u_y είναι μηδέν

$$u_y^0 = 0. \quad (5.2.30)$$

Τέλος, για τις κατανομές Y , Φ και X ισχύει αρχικά ότι

$$Y^0 = Y^M(t=0) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-c_y^2}, \quad (5.2.31)$$

$$\Phi^0 = \Phi^M(t=0) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-c_y^2} u_x = 0 \quad (5.2.32)$$

$$X^0 = X^M(t=0) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-c_y^2} \quad (5.2.33)$$

Η επίλυση των ολοκληρο-διαφορικών εξισώσεων (5.2.5) έως (5.2.7) και (5.2.11) έως (5.2.18) με οριακές συνθήκες τις (5.2.19) έως (5.2.24) και αρχικές συνθήκες τις (5.2.28) έως (5.2.33), επιτυγχάνεται με ένα ντετερμινιστικό αριθμητικό σχήμα. Η διακριτοποίηση στο χρόνο, στο φυσικό χώρο και στο χώρο των μοριακών ταχυτήτων, όπου χρησιμοποιείται η μέθοδος DVM, γίνεται με τρόπο αντίστοιχο με αυτόν που παρουσιάστηκε στο κεφάλαιο 3 για τη ροή Poiseuille ανάμεσα σε

πλάκες.

Για την αριθμητική επίλυση των κινητικών εξισώσεων μπορούν να χρησιμοποιηθούν και εδώ τα τρία αριθμητικά σχήματα που αναλύθηκαν στα προηγούμενα κεφάλαια, δηλαδή τα σχήματα FTBS, BTCS και CTCS. Η αντιμετώπιση των μη γραμμικών όρων φαίνεται στη συνέχεια, όπου παρουσιάζεται ενδεικτικά η διακριτοποίηση του σχήματος CTCS. Η διακριτοποίηση των κινητικών εξισώσεων γίνεται στο σημείο $(i, m, k+1/2)$ το οποίο δηλώνει το κέντρο του χωρικού και χρονικού διαστήματος. Όλες οι μακροσκοπικές ποσότητες υπολογίζονται στο σημείο (i, k) . Στο σημείο αυτό είναι σκόπιμο να εισαχθούν οι ακόλουθοι συμβολισμοί

$$\mathfrak{R}(t, y, c_y)|_{i,m,k} = \mathfrak{R}(t_k, y_i, c_{y_m}) = \mathfrak{R}_{i,m}^k, \quad \mathfrak{R} = Y, \Phi, X \quad (5.2.34)$$

$$\mathfrak{R}^M(t, y, c_y)|_{i,m,k} = \mathfrak{R}^M(t_k, y_i, c_{y_m}) = \mathfrak{R}_{i,m}^{M^k}, \quad \mathfrak{R} = Y, \Phi, X \quad (5.2.35)$$

και

$$\rho(t, y) = \rho(t_n, y_i) = \rho_i^n, \quad u_y(t, y) = u_y(t_n, y_i) = u_{y_i}^n, \quad \tau(t, y) = \tau(t_n, y_i) = \tau_i^n \quad (5.2.36)$$

Η χρονική παράγωγος προσεγγίζεται με κεντρώες πεπερασμένες διαφορές

$$\left. \frac{\partial \mathfrak{R}^{k+1/2}}{\partial t} \right|_{i,m} = \frac{1}{\Delta t} (\mathfrak{R}_{i,m}^{k+1} - \mathfrak{R}_{i,m}^k) = \frac{1}{2\Delta t} (\mathfrak{R}_{i-,m}^{k+1} + \mathfrak{R}_{i+,m}^{k+1} - \mathfrak{R}_{i-,m}^k - \mathfrak{R}_{i+,m}^k). \quad (5.2.37)$$

Με τον ίδιο τρόπο προσεγγίζεται και η χωρική παράγωγος

$$\left. \frac{\partial \mathfrak{R}^{k+1/2}}{\partial y} \right|_{i,m} = \frac{1}{2} \left. \frac{\partial \mathfrak{R}^{k+1}}{\partial y} \right|_{i,m} + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial \mathfrak{R}^k}{\partial y} \right|_{i,m} = \frac{1}{2\Delta y} (\mathfrak{R}_{i+,m}^{k+1} - \mathfrak{R}_{i-,m}^{k+1}) + \frac{1}{2\Delta y} (\mathfrak{R}_{i+,m}^k - \mathfrak{R}_{i-,m}^k) \quad (5.2.38)$$

Για τους μη γραμμικούς όρους $\rho\sqrt{\tau}\mathfrak{R}$ και $\rho\sqrt{\tau}\mathfrak{R}^M$ έχουμε, αντίστοιχα,

$$\rho_i^k \sqrt{\tau_i^k} \mathfrak{R}_{i,m}^{k+1/2} = \frac{1}{2} \left(\rho_i^k \sqrt{\tau_i^k} \mathfrak{R}_{i,m}^{k+1} + \rho_i^k \sqrt{\tau_i^k} \mathfrak{R}_{i,m}^k \right) = \quad (5.2.39)$$

$$\frac{1}{4} \left(\rho_{i+}^k \sqrt{\tau_{i+}^k} \mathfrak{R}_{i+,m}^{k+1} + \rho_{i-}^k \sqrt{\tau_{i-}^k} \mathfrak{R}_{i-,m}^{k+1} + \rho_{i+}^k \sqrt{\tau_{i+}^k} \mathfrak{R}_{i+,m}^k + \rho_{i-}^k \sqrt{\tau_{i-}^k} \mathfrak{R}_{i-,m}^k \right) \quad (5.2.40)$$

και

$$\rho_i^k \sqrt{\tau_i^k} \mathfrak{R}_{i,m}^{M^k} = \frac{1}{2} \left(\rho_{i+}^k \sqrt{\tau_{i+}^k} \mathfrak{R}_{i+,m}^{M^k} + \rho_{i-}^k \sqrt{\tau_{i-}^k} \mathfrak{R}_{i-,m}^{M^k} \right) \quad (5.2.41)$$

Τελικά, το σχήμα CTCS μπορεί να γραφεί ως

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{2\Delta t} + \frac{c_{ym}}{2\Delta y} + \frac{\delta_0}{4} \rho_{i+}^k \sqrt{\tau_{i+}^k} \right) \mathfrak{R}_{i+,m}^{k+1} + \left(\frac{1}{2\Delta t} - \frac{c_{ym}}{2\Delta y} + \frac{\delta_0}{4} \rho_{i-}^k \sqrt{\tau_{i-}^k} \right) \mathfrak{R}_{i-,m}^{k+1} + \\ & \left(-\frac{1}{2\Delta t} + \frac{c_{ym}}{2\Delta y} + \frac{\delta_0}{4} \rho_{i+}^k \sqrt{\tau_{i+}^k} \right) \mathfrak{R}_{i+,m}^k + \left(-\frac{1}{2\Delta t} - \frac{c_{ym}}{2\Delta y} + \frac{\delta_0}{4} \rho_{i-}^k \sqrt{\tau_{i-}^k} \right) \mathfrak{R}_{i-,m}^k = \\ & = \frac{\delta_0}{2} \left(\rho_{i+}^k \sqrt{\tau_{i+}^k} \mathfrak{R}_{i+,m}^{M^k} + \rho_{i-}^k \sqrt{\tau_{i-}^k} \mathfrak{R}_{i-,m}^{M^k} \right), \quad \mathfrak{R} = Y, \Phi, X \end{aligned} \quad (5.2.42)$$

οι εξισώσεις του οποίου επιλύονται με βηματισμό στο φυσικό χώρο αν ακολουθήσουμε τις τροχιές των μοριακών ταχυτήτων και κινηθούμε από την κάτω προς την άνω πλάκα με $c_{ym} > 0$ και στη συνέχεια αντίστροφα με $c_{ym} < 0$. Οι μακροσκοπικές ποσότητες να δίνονται από τις ακόλουθες διακριτοποιημένες σχέσεις

$$\rho_{i\pm}^{k+1} = \sum_m \left(w_m \frac{Y_{i\pm,m}^{k+1} + Y_{i\pm,m}^k}{2} \right) \quad (5.2.43)$$

$$u_{y\ i\pm}^{k+1} = \frac{1}{\rho_{i\pm}^{k+1}} \sum_m \left(w_m c_{ym} \frac{Y_{i\pm,m}^{k+1} + Y_{i\pm,m}^k}{2} \right) \quad (5.2.44)$$

$$\tau_{i\pm}^{k+1} = \frac{2}{3\rho_{i\pm}^{k+1}} \sum_m \left[w_m \frac{1}{2} (c_{ym}^2 Y_{i\pm,m}^{k+1} + c_{ym}^2 Y_{i\pm,m}^k + X_{i\pm,m}^{k+1} + X_{i\pm,m}^k) \right] - \frac{2}{3} (u_{y\ i\pm}^{k+1})^2 \quad (5.2.45)$$

και

$$\begin{aligned} q_{y\ i\pm}^{k+1} = & \sum_m w_m \frac{1}{2} [c_{ym}^3 Y_{i\pm,m}^{k+1} + (c_{ym} - u_{y\ i\pm}^{k+1}) X_{i\pm,m}^{k+1} - 3c_{ym}^2 u_{y\ i\pm}^{k+1} Y_{i\pm,m}^{k+1}] + \\ & \sum_m w_m \frac{1}{2} [c_{ym}^3 Y_{i\pm,m}^k + (c_{ym} - u_{y\ i\pm}^{k+1}) X_{i\pm,m}^k - 3c_{ym}^2 u_{y\ i\pm}^{k+1} Y_{i\pm,m}^k] + 2\rho_{i\pm}^{k+1} (u_{y\ i\pm}^{k+1})^3 \end{aligned} \quad (5.2.46)$$

Η επίλυση των αριθμητικών σχημάτων έγινε με κατάλληλα διαμορφωμένους κώδικες σε Fortran. Για τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στη συνέχεια χρησιμοποιήθηκαν $M = 80$ ρίζες των πολωνύμων Legendre για τη διακριτοποίηση στο χώρο των μοριακών ταχυτήτων, ενώ στο φυσικό χώρο χρησιμοποιήθηκαν $I = 1000$ διαστήματα. Το χρονικό βήμα ήταν $\Delta t = 10^{-4}$. Ο συνολικός χρόνος ισορροπίας καθορίστηκε από το χρονικό σημείο όπου όλες οι εμπλεκόμενες μακροσκοπικές ποσότητες (u_y, ρ, τ, q_y) ανακτούν το 99% των κατανομών τους στο αντίστοιχο μόνιμο πρόβλημα.

Στα Σχήματα 5.1 έως 5.9 παρουσιάζεται η χρονική εξέλιξη των κατανομών της ταχύτητας u_y , της πυκνότητας ρ , της θερμοκρασίας τ και της θερμορροής q_y για διάφορες τιμές του λόγου

θερμοκρασιών β και της παραμέτρου αραιοποίησης δ_0 . Οι τιμές της παραμέτρου β που επιλέχθηκαν είναι οι 0.1, 0.5 και 0.9 και δηλώνουν τρεις περιπτώσεις ροών με μικρή, μεσαία και μεγάλη διαφορά θερμοκρασίας μεταξύ των πλακών αντίστοιχα. Για την παράμετρο αραιοποίησης δ_0 επιλέχθηκαν οι τιμές 0.1, 1 και 10, που αντιστοιχούν κατά προσέγγιση στην αρχή, μέσο και τέλος της μεταβατικής περιοχής. Ειδικότερα οι συνδυασμοί των β και δ_0 , που παρουσιάζονται σε κάθε σχήμα, φαίνονται στη συνέχεια:

Σχήμα									
	5.1	5.2	5.3	5.4	5.5	5.6	5.7	5.8	5.9
β	0.1	0.1	0.1	0.5	0.5	0.5	0.9	0.9	0.9
δ_0	0.1	1	10	0.1	1	10	0.1	1	10

Επισημαίνεται ότι τα αποτελέσματα σε όλα τα σχήματα του παρόντος κεφαλαίου έχουν υποστεί μια αριθμητική επεξεργασία, ώστε να εξομαλυνθούν τα φαινόμενα ρυτιδώσεων στις καμπύλες των κατανομών, τα οποία κάνουν την εμφάνισή τους κυρίως σε μικρές τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης και οφείλονται στη μετάδοση ασυνεχειών από τα τοιχώματα προς το εσωτερικό του πεδίου ροής.

Αρχικά παρατηρούμε την ύπαρξη ταλαντωτικής συμπεριφοράς σε όλες τις κατανομές των μακροσκοπικών ποσοτήτων. Το γεγονός αυτό οφείλεται στην απότομη αλλαγή της θερμοκρασίας στα τοιχώματα, η οποία συνοδεύεται από αντίστοιχη αλλαγή στην πυκνότητα λόγω της κίνησης των μορίων. Η μεταβολή της πυκνότητας δημιουργεί κυματισμούς στα μακροσκοπικά μεγέθη. Στην πλάκα με την υψηλότερη θερμοκρασία η πυκνότητα ελαττώνεται, ενώ συμβαίνει το αντίθετο στην πλάκα με την χαμηλότερη θερμοκρασία.

Επισημαίνεται ότι τα γραφήματα που παρουσιάζονται στην ενότητα αυτή παρέχουν μία ένδειξη μόνο, των φαινομένων που λαμβάνουν χώρα κατά τη μεταφορά θερμότητας. Ο λόγος είναι πως η ταλαντωτική συμπεριφορά των κατανομών δεν μπορεί να αναπαρασταθεί με ακρίβεια σε ένα στατικό γράφημα. Στην περιγραφή που ακολουθεί επιχειρείται να δοθεί μια πιο ολοκληρωμένη εικόνα της χρονικής εξέλιξης των κατανομών. Γενικά, η συμπεριφορά της ταχύτητας u_y και της θερμορροής q_y είναι περίπου συμμετρική γύρω από το κατακόρυφο άξονα $x = 0$ για μικρές τιμές του λόγου θερμοκρασιών β και μεγάλες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ_0 . Η u_y ξεκινά με δύο κυματισμούς που προέρχονται από τα τοιχώματα και έχουν και τα δύο θετικές τιμές, γεγονός

που υποδηλώνει μία κίνηση από τη θερμή προς την ψυχρή πλάκα. Οι κυματισμοί αυτοί συγκλίνουν μεταξύ τους δημιουργώντας ένα θετικό μέγιστο κοντά στο κέντρο του άξονα y . Το προφίλ της κατανομής ελαττώνεται σε ύψος καθώς η μεταφορά θερμότητας εξελίσσεται χρονικά και κάποια στιγμή μηδενίζεται και αρχίζει να παίρνει αρνητικές τιμές φτάνοντας περίπου στο $1/3$ του θετικού μέγιστου δημιουργώντας ένα αρνητικό προφίλ, το οποίο στη συνέχεια αρχίζει και πάλι να μικραίνει μέχρι που μηδενίζεται. Η ταλαντωτική αυτή συμπεριφορά συνεχίζεται παρουσιάζοντας όμως μια ισχυρή απόσβεση μέχρι τελικά να φτάσει στη μηδενική τιμή, η οποία χαρακτηρίζει την μόνιμη κατάσταση.

Η κατανομή της θερμορροής q_y είναι σε όλες τις περιπτώσεις θετική υποδηλώνοντας ότι κατευθύνεται από τη ζεστή προς την κρύα πλάκα. Ξεκινά με μηδενική αρχική τιμή και καθώς το φαινόμενο εξελίσσεται η τιμή της πάνω στα τοιχώματα αυξάνει ταχύτερα από την τιμή της στο χώρο μεταξύ των πλακών. Στη συνέχεια παρατηρείται μια συνολική ανοδική κίνηση του προφίλ της θερμορροής καθώς αυτό προσεγγίζει το αντίστοιχο προφίλ της μόνιμης κατάστασης. Εκεί η q_y συνεχίζει με μια μικρή ταλάντωση γύρω από τη μόνιμη κατάσταση, μέχρι τελικά να καταλήξει σε αυτή. Σε πολύ αραιωποιημένες ροές και για μεγάλη διαφορά θερμοκρασίας των πλακών, η τιμή της q_y στο τοίχωμα με τη χαμηλότερη θερμοκρασία παρουσιάζει κατά την μεταβατική φάση μια σαφώς μεγαλύτερη απόκλιση από τη μόνιμη κατάσταση σε σχέση με την τιμή της q_y στο θερμό τοίχωμα.

Οι κατανομές της θερμοκρασίας τ και της πυκνότητας ρ είναι περίπου αντισυμμετρικές ως προς την αρχή των αξόνων για μεγάλες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης και μικρή τιμή του λόγου θερμοκρασιών των πλακών. Και οι δύο παρουσιάζουν ένα άλμα στα τοιχώματα για πολύ αραιωποιημένες ροές. Το άλμα αυτό δεν είναι συμμετρικό, αλλά για τη θερμοκρασία έχει μεγαλύτερη τιμή πάνω στο θερμό τοίχωμα και μικρότερη τιμή πάνω στο ψυχρό τοίχωμα. Το αντίθετο συμβαίνει με την πυκνότητα. Η κατανομή της θερμοκρασίας ξεκινά με τιμή ίση με τη μονάδα και στη συνέχεια αποκτά για λίγο τη γνωστή μορφή S. Στη συνέχεια αρχίζει να ομαλοποιείται παρουσιάζοντας μικρές ταλαντώσεις μέχρι που να γίνει σχεδόν ευθεία. Για μικρές τιμές του δ_0 όπου το άλμα στα τοιχώματα είναι ιδιαίτερα έντονο, συνεχίζει να μεταβάλλει την τιμή της στα άκρα διατηρώντας την γραμμική μορφή της μέχρι να καταλήξει στη μόνιμη κατάσταση. Η κατανομή της πυκνότητας ξεκινά με την τιμή 1. Στα αρχικά χρονικά βήματα δημιουργούνται δύο αντίθετοι

κυματισμοί καθώς η τιμή της πέφτει στο ζεστό τοίχωμα και αυξάνει στο ψυχρό. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα τη δημιουργία μιας μορφής τύπου S, η οποία όμως στη συνέχεια ομαλοποιείται δίνοντας μια σχεδόν γραμμική μορφή που με τη σειρά της ταλαντευόμενη καμπυλώνεται ξανά πάνω στα τοιχώματα μέχρι να επιτευχθεί η μόνιμη κατάσταση. Καθώς ο λόγος β μεγαλώνει και για μεγάλες τιμές του δ_0 , η κατανομή της πυκνότητας γίνεται μη γραμμική και καμπυλώνεται απότομα προς τις θετικές τιμές του άξονα y κοντά στο ψυχρό τοίχωμα.

Στο Σχήμα 5.10 παρουσιάζονται οι συνολικοί χρόνοι ισορροπίας για τη μεταφορά θερμότητας σε πλάκες για διάφορες τιμές του λόγου β . Παρατηρούμε ότι ακολουθούν τη γνωστή μη μονότονη μορφή εμφανίζοντας ένα ελάχιστο κοντά στο $\delta_0 = 1$. Επίσης καθώς γίνεται φανερό ότι σε πολυαριθμοποιημένες ροές, όσο μεγαλύτερη είναι η διαφορά θερμοκρασίας ανάμεσα στις πλάκες, τόσο περισσότερο αυξάνει και ο χρόνος ισορροπίας.

5.3 Μεταφορά θερμότητας ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες - Μοντέλο Shakhov

Ένα καταλληλότερο κινητικό μοντέλο για τη μεταφορά θερμότητας αποτελεί το μη γραμμικό μοντέλο Shakhov, καθώς όπως σχολιάστηκε σε προηγούμενο κεφάλαιο, αυτό παρέχει το σωστό αριθμό Prandtl για την περίπτωση μονατομικών αερίων. Οι κινητικές εξισώσεις του μοντέλου μετά τη διαδικασία προβολής γράφονται ως εξής

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + c_y \frac{\partial Y}{\partial y} = \delta_0 \rho \sqrt{\tau} (Y_S^M - Y) \quad (5.3.1)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + c_y \frac{\partial \Phi}{\partial y} = \delta_0 \rho \sqrt{\tau} (\Phi_S^M - \Phi) \quad (5.3.2)$$

$$\frac{\partial X}{\partial t} + c_y \frac{\partial X}{\partial y} = \delta_0 \rho \sqrt{\tau} (X_S^M - X), \quad (5.3.3)$$

όπου οι κατανομές Maxwell του μοντέλου δίνονται από τις σχέσεις:

$$Y_S^M = \frac{4q_y(c_y - u_y)^3 - 6q_y(c_y - u_y)\tau + 15\rho\tau^3}{15\sqrt{\pi}\tau^{7/2}} \exp\left(-\frac{(c_y - u_y)^2}{\tau}\right) \quad (5.3.4)$$

$$\Phi_S^M = 0 \quad (5.3.5)$$

$$X_S^M = \frac{4q_y(c_y - u_y)^3 - 2q_y(c_y - u_y)\tau + 15\rho\tau^3}{15\sqrt{\pi}\tau^{5/2}} \exp\left(-\frac{(c_y - u_y)^2}{\tau}\right) \quad (5.3.6)$$

Οι οριακές και αρχικές συνθήκες δεν επηρεάζονται από το κινητικό μοντέλο και επομένως δίνονται οι μεν πρώτες από τις σχέσεις (5.2.19) έως (5.2.24) με ρ_{wL} και ρ_{wR} τις (5.2.26) και (5.2.27), αντίστοιχα, και οι δεύτερες από τις σχέσεις (5.2.28) έως (5.2.33).

Η διαδικασία επίλυσης των κινητικών εξισώσεων του μοντέλου Shakhon είναι αντίστοιχη με αυτή που παρουσιάστηκε στην προηγούμενη ενότητα για το μοντέλο BGK. Ο φασικός χώρος διακριτοποιείται με τον ίδιο τρόπο και εφαρμόζονται τα ίδια αριθμητικά σχήματα. Η μόνη διαφορά είναι πως στις διακριτοποιημένες κινητικές εξισώσεις εμπλέκονται οι νέες κατανομές Y_S^M , Φ_S^M , X_S^M αντί των Y^M , Φ^M , X^M .

Στα Σχήματα 5.11 έως 5.13 παρουσιάζονται αποτελέσματα, που αποκτήθηκαν για τη μεταφορά θερμότητας ανάμεσα σε πλάκες, με το μη γραμμικό μοντέλο Shakhon. Εμφανίζεται η χρονική εξέλιξη των κατανομών της ταχύτητας u_y , της πυκνότητας ρ , της θερμοκρασίας τ και της θερμορροής q_y ενδεικτικά για μεταφορά θερμότητας με $\delta_0 = 10$ και τρεις διαφορετικούς λόγους θερμοκρασιών: $\beta = 0.1$ (Σχήμα 5.11), $\beta = 0.5$ (Σχήμα 5.12) και $\beta = 0.9$ (Σχήμα 5.13). Η συμπεριφορά των κατανομών είναι ανάλογη με αυτή που παρουσιάστηκε και σχολιάστηκε στην προηγούμενη ενότητα.

Επισημαίνεται πως τα αποτελέσματα που δίνει το κινητικό μοντέλο Shakhon κοντά στο υδροδυναμικό όριο βρίσκονται πολύ κοντά σε αυτά που δίνει το μοντέλο BGK. Για να είναι όμως εφικτή η σύγκριση των δύο μοντέλων πρέπει η παράμετρος αραιοποίησης, που χρησιμοποιείται στο BGK να ισούται με τα $2/3$ της παραμέτρου αραιοποίησης, που χρησιμοποιείται στο Shakhon. Μια τέτοια σύγκριση, ενδεικτικά για $\beta = 0.9$, παρουσιάζεται στο Σχήμα 5.14, όπου εμφανίζεται, και για τα δύο μοντέλα, η χρονική εξέλιξη των κατανομών της ταχύτητας u_y , της πυκνότητας ρ , της θερμοκρασίας τ και της θερμορροής q_y για ροή με $\delta_0 = 6.66$ για το BGK και $\delta_0 = 10$ για το Shakhon. Παρατηρούμε ότι υπάρχει πολύ καλή συμφωνία μεταξύ των δύο μοντέλων.

5.4 Μεταφορά θερμότητας ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες - Αναλυτική λύση

Στο υδροδυναμικό όριο ($\delta \rightarrow \infty$) η λύση του προβλήματος που εξετάζουμε μπορεί να γίνει με αναλυτικό τρόπο. Όπως θα δούμε όμως στη συνέχεια η λύση που μας δίνει η εξίσωση μεταφοράς

θερμότητας δεν περιέχει όλη την πληροφορία που παίρνουμε μέσα από τις κινητικές εξισώσεις. Η διαστατή εξίσωση μεταφοράς θερμότητας σε μία διάσταση γράφεται ως

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t'} = \frac{\partial}{\partial y'} \left(k \frac{\partial T}{\partial y'} \right), \quad (5.4.1)$$

όπου c_p είναι η ειδική θερμοχωρητικότητα, και k ο συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας. Υποθέτοντας ότι υπάρχει μικρή μεταβολή της θερμοκρασίας μεταξύ των πλακών, δηλαδή για μικρές τιμές του β , το k είναι σχεδόν σταθερό και μπορεί να βγει έξω από την παράγωγο. Επομένως η εξίσωση (5.4.1) μπορεί να γραφεί ως

$$\frac{\partial T}{\partial t'} = a \frac{\partial^2 T}{\partial y'^2}, \quad (5.4.2)$$

όπου

$$a = \frac{k}{\rho c_p} \quad (5.4.3)$$

είναι ο συντελεστής θερμικής διαχυτότητας. Αν χρησιμοποιηθούν οι αδιάστατες ποσότητες (5.2.4), προκύπτει η αδιάστατη εξίσωση μεταφοράς θερμότητας

$$\frac{\partial \tau}{\partial t} = \frac{3}{4\delta} \frac{\partial^2 \tau}{\partial y^2}. \quad (5.4.4)$$

Οι οριακές συνθήκες γράφονται ως

$$\tau(t, -1/2) = \tau_1 = 1 + \beta \quad (5.4.5)$$

$$\tau(t, 1/2) = \tau_2 = 1 - \beta \quad (5.4.6)$$

και η αρχική συνθήκη ως

$$\tau(0, y) = 1. \quad (5.4.7)$$

Η διαφορική εξίσωση (5.4.4) είναι ομογενής με μη ομογενείς οριακές συνθήκες τύπου Dirichlet. Για την επίλυσή της με τη μέθοδο των χωριζόμενων μεταβλητών απαιτείται η μετατροπή της σε πρόβλημα ιδιοτιμών (ομογενείς οριακές συνθήκες) γεγονός που επιτυγχάνεται θέτοντας $v = \tau - w$ και απαιτώντας $w(t, -1/2) = \tau_1$ και $w(t, 1/2) = \tau_2$. Η w επιλέγεται τελικά να είναι ανεξάρτητη του χρόνου t και δίνεται από τη σχέση

$$w(y) = \tau_1 + (\tau_2 - \tau_1)(y + 0.5) \quad (5.4.8)$$

Επομένως το πρόβλημα που πρέπει να επιλυθεί με τη μέθοδο των χωριζόμενων μεταβλητών είναι το ακόλουθο

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{3}{4\delta} \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \quad (5.4.9)$$

με οριακές συνθήκες

$$v(t, -1/2) = 0, \quad v(t, 1/2) = 0 \quad (5.4.10)$$

και αρχική συνθήκη την

$$v(0, y) = 1 - [\tau_1 + (\tau_2 - \tau_1)(y + 0.5)] \quad (5.4.11)$$

Αφού υπολογισθεί η v , η λύση της εξίσωσης (5.4.4) προκύπτει ως

$$\tau(t, y) = v(t, y) + [\tau_1 + (\tau_2 - \tau_1)(y + 0.5)] \quad (5.4.12)$$

Ακολουθώντας τη γνωστή διαδικασία επίλυσης για το πρόβλημα οριακών-αρχικών τιμών (5.4.9)-(5.4.11), καταλήγουμε στην υδροδυναμική αναλυτική λύση του προβλήματος της μεταφοράς θερμότητας σε πλάκες, η οποία γράφεται ως

$$\tau_H(t, y) = \tau_1 + (\tau_2 - \tau_1)(y + 0.5) + \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ c_k \sin[k\pi(y + 0.5)] \exp\left(-\frac{3}{4\delta} k^2 \pi^2 t\right) \right\} \quad (5.4.13)$$

όπου

$$c_k = 2 \int_0^1 (1 - [\tau_1 + (\tau_2 - \tau_1)y]) \sin(k\pi y) dy \quad (5.4.14)$$

Ο δείκτης H δηλώνει την υδροδυναμική λύση.

Στο Σχήμα 5.15 επιχειρείται μια σύγκριση μεταξύ της αριθμητικής λύσης για $\delta_0 = 100$ και της αναλυτικής λύσης (5.4.13). Παρατηρούμε ότι αν και ποιοτικά οι δύο λύσεις μοιάζουν, εντούτοις οι τιμές τους απέχουν πολύ μεταξύ τους. Επίσης παρατηρούμε ότι η αναλυτική λύση συγκλίνει πολύ γρηγορότερα στη λύση της μόνιμης κατάσταση σε $t \approx 1.50$, χωρίς οι καμπύλες που προκύπτουν να παρουσιάζουν ταλαντωτική συμπεριφορά, ενώ αντιθέτως η αριθμητική λύση συγκλίνει στη μόνιμη κατάσταση σε $t \approx 12.50$ και οι καμπύλες της παρουσιάζουν την ταλαντωτική συμπεριφορά, που σχολιάστηκε σε προηγούμενη ενότητα. Ο λόγος είναι πως η αναλυτική εξίσωση μεταφοράς θερμότητας περιέχει λιγότερες πληροφορίες για τη ροή από αυτές που παρέχονται με τις κινητικές εξισώσεις. Για παράδειγμα δεν περιέχεται σε αυτήν η μακροσκοπική ταχύτητα, της οποίας η συνι-

στώσα u_y , όπως είδαμε, κατά την εξέλιξη του φαινομένου έχει μη μηδενική τιμή και παρουσιάζει ταλαντωτική συμπεριφορά. Επομένως αδυνατεί να προβλέψει την πραγματική μεταβατική συμπεριφορά της θερμοκρασιακής κατανομής. Επίσης για τη σύγκλιση στη μόνιμη κατάσταση του αριθμητικού σχήματος απαιτείται η σύγκλιση όλων των μακροσκοπικών ποσοτήτων (u_y, ρ, τ, q_y), γεγονός που δεν μπορεί να μιμηθεί η αναλυτική εξίσωση, καθώς αυτή δεν συμπεριλαμβάνει το σύνολο των ποσοτήτων αυτών.

5.5 Ροή Couette με ταυτόχρονη μεταφορά θερμότητας ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες - Μοντέλο BGK

Παρουσιάζεται η ροή Couette με ταυτόχρονη μεταφορά θερμότητας ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες. Στη ροή αυτή θεωρούμε ένα αραιοποιημένο μονατομικό αέριο, το οποίο αρχικά βρίσκεται σε ηρεμία. Το αέριο περιέχεται ανάμεσα σε δύο παράλληλες πλάκες που είναι τοποθετημένες στο $y' = \pm H/2$. Το μήκος των πλακών συμβολίζεται με L . Ισχύει $H/L \ll 1$, και η ροή θεωρείται πλήρως ανεπτυγμένη. Αρχικά, δεν υπάρχει διαφορά θερμοκρασίας μεταξύ των δύο πλακών. Κατά τη χρονική στιγμή $t' = 0$, οι δύο πλάκες αρχίζουν ξαφνικά να κινούνται με την ίδια ταχύτητα προς αντίθετες κατευθύνσεις, με την πάνω πλάκα να κινείται προς τα δεξιά με ταχύτητα $+U_0$ και την κάτω πλάκα προς τα αριστερά με ταχύτητα $-U_0$. Επίσης την ίδια χρονική στιγμή δημιουργείται και διατηρείται για όλη τη χρονική διάρκεια της ροής, μια σταθερή διαφορά θερμοκρασίας ανάμεσα στις δύο πλάκες. Ως αποτέλεσμα, προκύπτει μια χρονικά εξελισσόμενη, πλήρως ανεπτυγμένη, αραιοποιημένη, ροή κατά την αξονική κατεύθυνση, η οποία σιγά σιγά, καθώς $t' \rightarrow \infty$, προσεγγίζει την αντίστοιχη μόνιμη ροή Couette με ταυτόχρονη μεταφοράς θερμότητας.

Σημειώνεται ότι η παράμετρος U_0 μπορεί να πάρει τιμές μεταξύ 0 και 0.5. Αν θέσουμε $U_0 = 0$, τότε, διατηρώντας την ίδια μαθηματική διατύπωση, επιλύουμε το μη γραμμικό πρόβλημα μεταφοράς θερμότητας ανάμεσα σε δύο παράλληλες πλάκες. Επομένως η περίπτωση της ροής Couette με μεταφορά θερμότητας, αποτελεί γενίκευση της απλής μεταφοράς θερμότητας που αναπτύχθηκε σε προηγούμενη ενότητα. Η βασική διαφορά είναι η ύπαρξη συνιστώσας μακροσκοπικής ταχύτητας κατά το μήκος των πλακών (u_x), καθώς και η συμμετοχή της παραμέτρου U_0 στις οριακές συνθήκες. Συνεπώς πολλές σχέσεις που αφορούν στην διατύπωση του προβλήματος Couette είναι ίδιες

με αυτές που έχουμε ήδη μελετήσει. Στα επόμενα θα δοθούν οι επιπλέον εξισώσεις που αφορούν ειδικά στη ροή Couette και θα γίνει απλή αναφορά στις υπόλοιπες σχέσεις.

Αν ονομάσουμε T_1 τη θερμοκρασία της κάτω πλάκας και T_2 τη θερμοκρασία της άνω πλάκας, τότε για το λόγο β ισχύουν οι σχέσεις (5.2.1) έως (5.2.3). Αν υποτεθεί ότι η ταχύτητα με την οποία κινούνται οι δύο πλάκες καθώς και η διαφορά της θερμοκρασίας τους είναι μικρή, τότε οι δύο ροές μπορούν να γραμμικοποιηθούν και να επιλυθούν ανεξάρτητα η μία από την άλλη. Ωστόσο, στη συγκεκριμένη περίπτωση που μελετάμε, δεχόμαστε ότι το αίτιο της ροής μπορεί να είναι αυθαίρετα μεγάλο, επομένως οι δύο ροές είναι αλληλοεξαρτώμενες και η μοντελοποίησή τους πρέπει να γίνει με μη γραμμικά κινητικά μοντέλα. Το μοντέλο που επιλέχτηκε να χρησιμοποιηθεί για την επίλυση της ροής είναι το μη γραμμικό χρονομεταβαλλόμενο BGK. Οι κινητικές εξισώσεις που περιγράφουν τη συνδυασμένη ροή Couette και μεταφοράς θερμότητας, υποθέτοντας ενδομοριακό μοντέλο σκληρών σφαιρών, ύστερα από τη διαδικασία της προβολής είναι οι ίδιες με αυτές που δόθηκαν για τη μεταφορά θερμότητας σε πλάκες και περιγράφονται από τις σχέσεις (5.2.5) - (5.2.7).

Οι τοπικές κατανομές Maxwell γράφονται ως

$$Y^M = \frac{\rho}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{c_y^2}{\tau}\right) \quad (5.5.1)$$

$$\Phi^M = \frac{\rho}{\sqrt{\pi}} u_x \exp\left(-\frac{c_y^2}{\tau}\right) = Y^M u_x \quad (5.5.2)$$

και

$$X^M = \frac{\rho}{\sqrt{\pi}} (u_x^2 + \tau) \exp\left(-\frac{c_y^2}{\tau}\right) = Y^M (u_x^2 + \tau) \quad (5.5.3)$$

Για την αδιαστατοποίηση των εξισώσεων επεκτείνουμε τις σχέσεις (5.2.4) προσθέτοντας την αδιαστατοποίηση της u'_x συνιστώσας της ταχύτητας και της διατμητικής τάσης σ'_{xy}

$$u_x = \frac{u'_x}{v_0}, \quad \sigma_{xy} = \frac{\sigma'_{xy}}{2P_0} \quad (5.5.4)$$

Οι μακροσκοπικές ποσότητες, έπειτα από τη διαδικασία της προβολής, δίνονται από τις ακόλουθες εξισώσεις

$$\rho(t, y) = \int_{-\infty}^{+\infty} Y(t, y, c_y) dc_y \quad (5.5.5)$$

$$u_x(t, y) = \frac{1}{\rho} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(t, y, c_y) dc_y \quad (5.5.6)$$

$$u_y(t, y) = \frac{1}{\rho} \int_{-\infty}^{+\infty} c_y Y(t, y, c_y) dc_y \quad (5.5.7)$$

$$\tau(t, y) = \frac{2}{3\rho} \int_{-\infty}^{+\infty} (c_y^2 Y + X) dc_y - \frac{2}{3} (u_x^2 + u_y^2) \quad (5.5.8)$$

$$q_y(t, y) = \int_{-\infty}^{+\infty} [c_y^3 Y + (c_y - u_y) X - 2u_x c_y \Phi - 3u_y c_y^2 Y] dc_y + 2\rho u_y (u_x^2 + u_y^2) \quad (5.5.9)$$

$$\sigma_{xy}(t, y) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi c_y dc_y - \rho u_x u_y \quad (5.5.10)$$

Η πίεση, τέλος, μπορεί να υπολογισθεί ως

$$P(t, y) = \rho(t, y) \tau(t, y) \quad (5.5.11)$$

Με τη διατύπωση των οριακών συνθηκών, στο τοίχωμα $y = -1/2$ παίρνουμε

$$Y\left(t, -\frac{1}{2}, c_y\right) = \frac{\rho_{wL}}{\sqrt{\pi(1+\beta)}} \exp\left(-\frac{c_y^2}{(1+\beta)}\right), \quad c_y > 0 \quad (5.5.12)$$

$$\Phi\left(t, -\frac{1}{2}, c_y\right) = \frac{\rho_{wL}}{\sqrt{\pi(1+\beta)}} (-U_0) \exp\left(-\frac{c_y^2}{(1+\beta)}\right), \quad c_y > 0 \quad (5.5.13)$$

και

$$X\left(t, -\frac{1}{2}, c_y\right) = \frac{\rho_{wL}}{\sqrt{\pi(1+\beta)}} [(-U_0)^2 + (1+\beta)] \exp\left(-\frac{c_y^2}{(1+\beta)}\right), \quad c_y > 0, \quad (5.5.14)$$

ενώ στο τοίχωμα $y = 1/2$ παίρνουμε

$$Y\left(t, \frac{1}{2}, c_y\right) = \frac{\rho_{wR}}{\sqrt{\pi(1-\beta)}} \exp\left(-\frac{c_y^2}{(1-\beta)}\right), \quad c_y < 0 \quad (5.5.15)$$

$$\Phi\left(t, \frac{1}{2}, c_y\right) = \frac{\rho_{wR}}{\sqrt{\pi(1-\beta)}} (+U_0) \exp\left(-\frac{c_y^2}{(1-\beta)}\right), \quad c_y < 0 \quad (5.5.16)$$

και

$$X\left(t, \frac{1}{2}, c_y\right) = \frac{\rho_{wR}}{\sqrt{\pi(1-\beta)}} [(+U_0)^2 + (1-\beta)] \exp\left(-\frac{c_y^2}{(1-\beta)}\right), \quad c_y < 0. \quad (5.5.17)$$

Οι ρ_{wL} και ρ_{wR} , είναι δύο παράμετροι, οι οποίες προσδιορίζονται από τη συνθήκη μη διαπε-

ρατότητας στο κάθε τοίχωμα και δίνονται από τις σχέσεις (5.2.26) και (5.2.27).

Αρχικά, ανάμεσα στις δύο πλάκες η κατανομή των μορίων του αερίου ακολουθεί την κατανομή Maxwell. Οι αρχικές συνθήκες είναι ίδιες με τις (5.2.28) έως (5.2.33) με τη μόνη διαφορά ότι η κατανομή Φ δεν μηδενίζεται στη συγκεκριμένη ροή που μελετάμε.

Για την αριθμητική επίλυση των κινητικών εξισώσεων μπορούν να χρησιμοποιηθούν και εδώ τα τρία αριθμητικά σχήματα που αναλύθηκαν στις προηγούμενες ενότητες, δηλαδή τα FTBS, BTCS και CTCS. Οι διακριτοποιημένες κινητικές εξισώσεις είναι αντίστοιχες με αυτές που παρουσιάστηκαν στη μεταφορά θερμότητας σε πλάκες, όπου δόθηκαν οι εξισώσεις του σχήματος CTCS. Για τη ροή Couette επιλέγουμε να παρουσιάσουμε τις εξισώσεις του δεύτερου ημιπεπλεγμένου σχήματος, δηλαδή του BTCS. Οι κινητικές εξισώσεις γράφονται συνοπτικά σε διακριτοποιημένη μορφή ως

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{2\Delta t} + \frac{c_{ym}}{\Delta y} + \frac{\delta_0}{2} \rho_{i+}^k \sqrt{\tau_{i+}^k} \right) \mathfrak{R}_{i+,m}^{k+1} + \left(\frac{1}{2\Delta t} - \frac{c_{ym}}{\Delta y} + \frac{\delta_0}{2} \rho_{i-}^k \sqrt{\tau_{i-}^k} \right) \mathfrak{R}_{i-,m}^{k+1} + \\ & \left(-\frac{1}{2\Delta t} \right) \mathfrak{R}_{i+,m}^k + \left(-\frac{1}{2\Delta t} \right) \mathfrak{R}_{i-,m}^k = \\ & = \frac{\delta_0}{2} \left(\rho_{i+}^k \sqrt{\tau_{i+}^k} \mathfrak{R}_{i+,m}^{M^k} + \rho_{i-}^k \sqrt{\tau_{i-}^k} \mathfrak{R}_{i-,m}^{M^k} \right), \quad \mathfrak{R} = Y, \Phi, X. \end{aligned} \quad (5.5.18)$$

Το σύστημα των εξισώσεων (5.5.18) επιλύεται με βηματισμό στο φυσικό χώρο αν ακολουθήσουμε τις τροχιές των μοριακών ταχυτήτων και κινηθούμε από την κάτω προς την άνω πλάκα με $c_{ym} > 0$ και στη συνέχεια αντίστροφα με $c_{ym} < 0$.

Οι διακριτοποιημένες μακροσκοπικές ποσότητες δίνονται από τις ακόλουθες σχέσεις

$$\rho_{i\pm}^{k+1} = \sum_m (w_m Y_{i\pm,m}^{k+1}) \quad (5.5.19)$$

$$u_{x\ i\pm}^{k+1} = \frac{1}{\rho_{i\pm}^{k+1}} \sum_m (w_m \Phi_{i\pm,m}^{k+1}) \quad (5.5.20)$$

$$u_{y\ i\pm}^{k+1} = \frac{1}{\rho_{i\pm}^{k+1}} \sum_m (w_m c_{ym} Y_{i\pm,m}^{k+1}) \quad (5.5.21)$$

$$\tau_{i\pm}^{k+1} = \frac{2}{3\rho_{i\pm}^{k+1}} \sum_m [w_m (c_{ym}^2 Y_{i\pm,m}^{k+1} + X_{i\pm,m}^{k+1})] - \frac{2}{3} [(u_{x\ i\pm}^{k+1})^2 + (u_{y\ i\pm}^{k+1})^2] \quad (5.5.22)$$

$$q_{y_{i\pm}}^{k+1} = \sum_m w_m [c_{ym}^3 Y_{i\pm,m}^{k+1} + (c_{ym} - u_{y_{i\pm}}^{k+1}) X_{i\pm,m}^{k+1} - 2c_{ym} u_{x_{i\pm}}^{k+1} \Phi_{i\pm,m}^{k+1} - 3c_{ym}^2 u_{y_{i\pm}}^{k+1} Y_{i\pm,m}^{k+1}] + \\ + 2\rho_{i\pm}^{k+1} u_{y_{i\pm}}^{k+1} [(u_{x_{i\pm}}^{k+1})^2 + (u_{y_{i\pm}}^{k+1})^2] \quad (5.5.23)$$

$$\sigma_{xy_{i\pm}}^{k+1} = \sum_m (w_m c_{ym} \Phi_{i\pm,m}^{k+1}) - \rho_{i\pm}^{k+1} u_{x_{i\pm}}^{k+1} u_{y_{i\pm}}^{k+1} \quad (5.5.24)$$

και

$$P_{i\pm}^{k+1} = \rho_{i\pm}^{k+1} \tau_{i\pm}^{k+1} \quad (5.5.25)$$

Για τον υπολογισμό των αποτελεσμάτων που παρουσιάζονται στη συνέχεια, χρησιμοποιήθηκαν οι ίδιες παράμετροι όπως και στο απλό πρόβλημα της μεταφοράς θερμότητας σε πλάκες, δηλαδή $M = 80$ ρίζες των πολυωνύμων Legendre για τη διακριτοποίηση στο χώρο των μοριακών ταχυτήτων και $I = 1000$ διαστήματα στο φυσικό χώρο. Το χρονικό βήμα ήταν $\Delta t = 10^{-4}$. Ο συνολικός χρόνος ισορροπίας καθορίστηκε από το χρονικό σημείο όπου οι μακροσκοπικές ποσότητες u_y, ρ, τ, q_y ανακτούν το 99% των κατανομών τους στο αντίστοιχο μόνιμο πρόβλημα.

Στα Σχήματα 5.16 έως 5.27 παρουσιάζεται η χρονική εξέλιξη των κατανομών των ταχυτήτων u_x και u_y , της πυκνότητας ρ , της θερμοκρασίας τ , της θερμορροής q_y και της πίεσης P για διάφορες τιμές της ταχύτητας κίνησης των πλακών U_0 , του λόγου θερμοκρασιών β και της παραμέτρου αραιοποίησης δ_0 . Οι τιμές της U_0 που επιλέχθηκαν να παρουσιαστούν είναι οι 0.1 και 0.5 που αντιστοιχούν σε μια μικρή και μια μεγάλη ταχύτητα κίνησης των πλακών. Οι τιμές του λόγου β είναι οι 0.1 και 0.7 και δηλώνουν μια μικρή και μια σχετικά μεγάλη διαφορά θερμοκρασίας μεταξύ των πλακών. Οι τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ_0 , τέλος, είναι οι 0.1, 1 και 10, που αντιστοιχούν κατά προσέγγιση στην αρχή, μέσο και τέλος της μεταβατικής περιοχής. Ειδικότερα οι συνδυασμοί των U_0, β και δ_0 , που παρουσιάζονται σε κάθε σχήμα, φαίνονται στη συνέχεια:

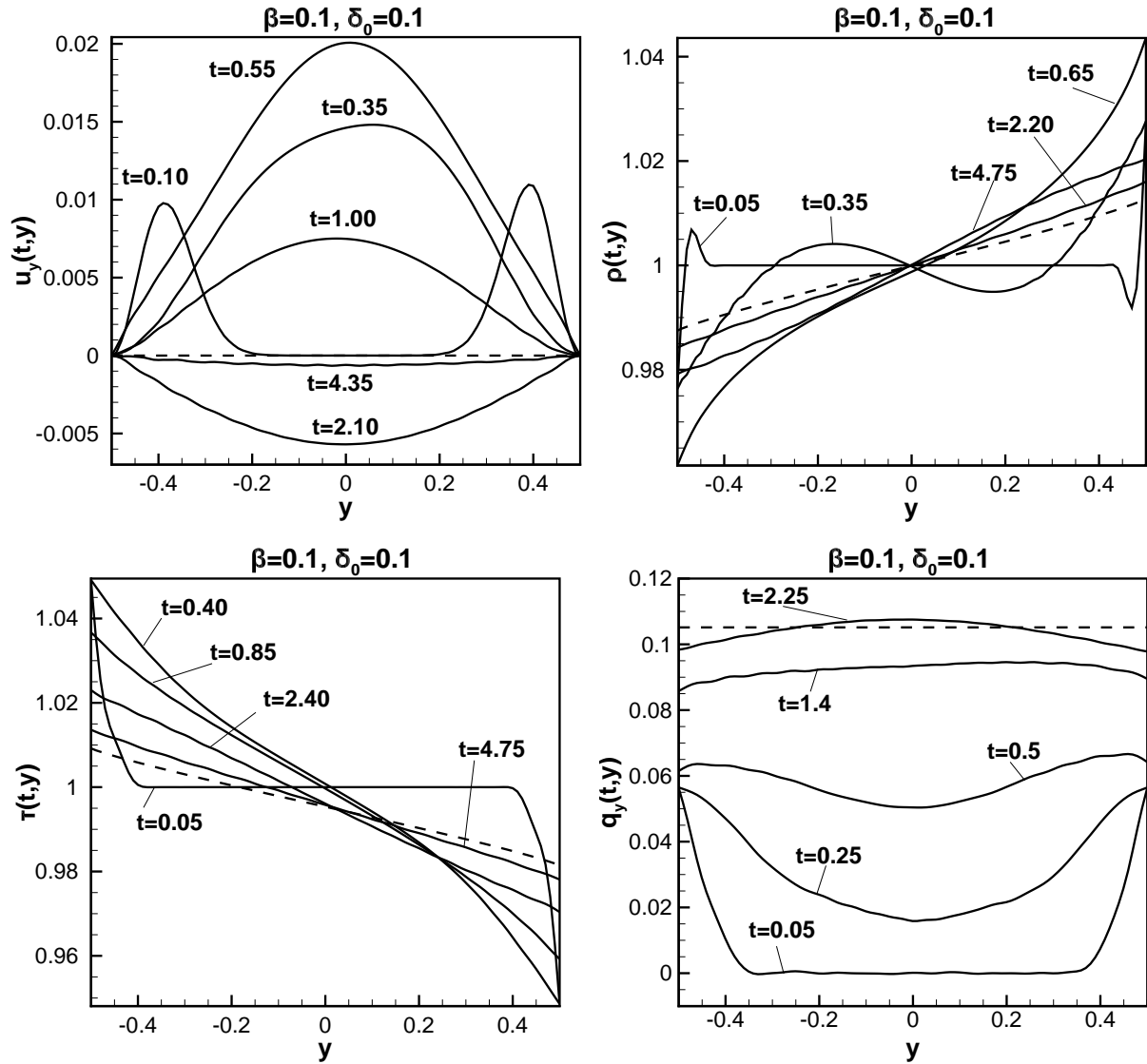
	Σχήμα											
	5.16	5.17	5.18	5.19	5.20	5.21	5.22	5.23	5.24	5.25	5.26	5.27
U_0	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
β	0.1	0.1	0.1	0.7	0.7	0.7	0.1	0.1	0.1	0.7	0.7	0.7
δ_0	0.1	1	10	0.1	1	10	0.1	1	10	0.1	1	10

Οι παρατηρήσεις σχετικά με την ταλαντωτική συμπεριφορά των κατανομών είναι αντίστοιχες με αυτές που έγιναν στην ενότητα που μελετήθηκε η απλή μεταφορά θερμότητας σε πλάκες.

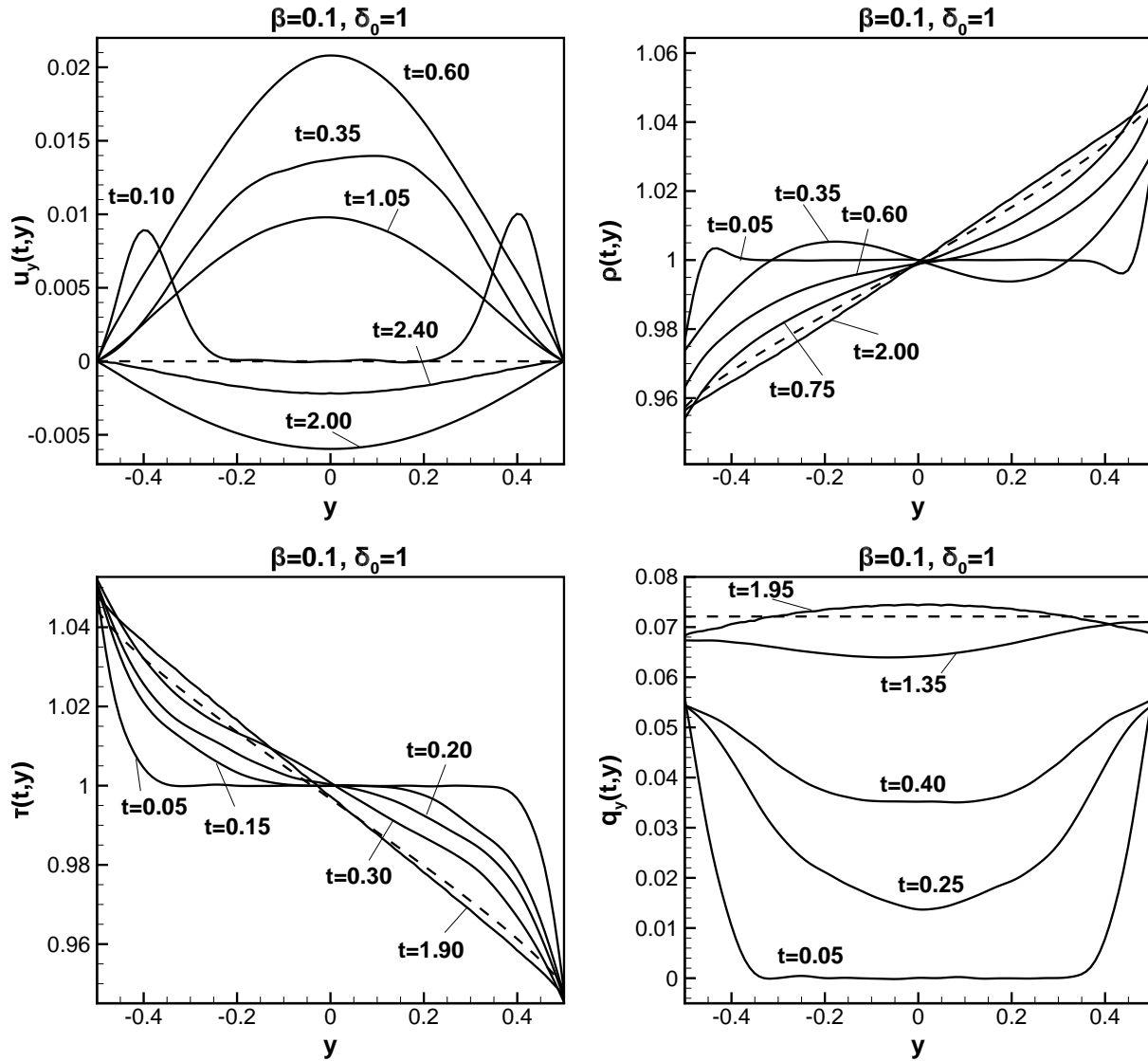
Επίσης ο σχολιασμός των κατανομών της ταχύτητας u_y , της θερμορροής q_y , της θερμοκρασίας τ και της πυκνότητας ρ είναι σε γενικές γραμμές παρόμοιος με αυτόν που αφορούσε στην απλή μεταφορά θερμότητας. Η ύπαρξη όμως της κίνησης των πλακών επηρεάζει το τελικό προφίλ των κατανομών. Για παράδειγμα η κατανομή της θερμοκρασίας και της πυκνότητας γίνεται περισσότερο μη γραμμική καθώς αυξάνει η ταχύτητα U_0 και η παράμετρος αραιοποίησης δ_0 . Μπορεί μάλιστα να εμφανισθεί το φαινόμενο κατά το οποίο το εσωτερικό πεδίο της ροής να έχει μεγαλύτερη θερμοκρασία από το θερμό τοίχωμα. Αντίστροφη συμπεριφορά παρατηρείται στην κατανομή της πυκνότητας.

Οι νέες κατανομές που παρουσιάζονται στην ενότητα αυτή είναι η κατανομή της ταχύτητας u_x και η κατανομή της πίεσης. Και οι δύο εμφανίζουν ποιοτικά μια αντισυμμετρική μορφή. Η u_x παρουσιάζει ολίσθηση στα τοιχώματα για μικρές τιμές του δ_0 . Η ολίσθηση είναι μεγαλύτερη στο θερμό τοίχωμα. Αρχικά, η κατανομή έχει την τιμή μηδέν και κατά τις πρώτες χρονικές στιγμές παίρνει τη μορφή S, η οποία γρήγορα αλλάζει δίνοντας στη θέση της το γραμμικό προφίλ της μόνιμης κατάστασης. Η κατανομή της πίεσης, τέλος, ξεκινά και αυτή από μια κατανομή με μορφή S, αλλά στη συνέχεια η μεταβολή στα άκρα της είναι ιδιαιτέρως έντονη και δημιουργεί κυματική συμπεριφορά καθώς ταλαντεύεται.

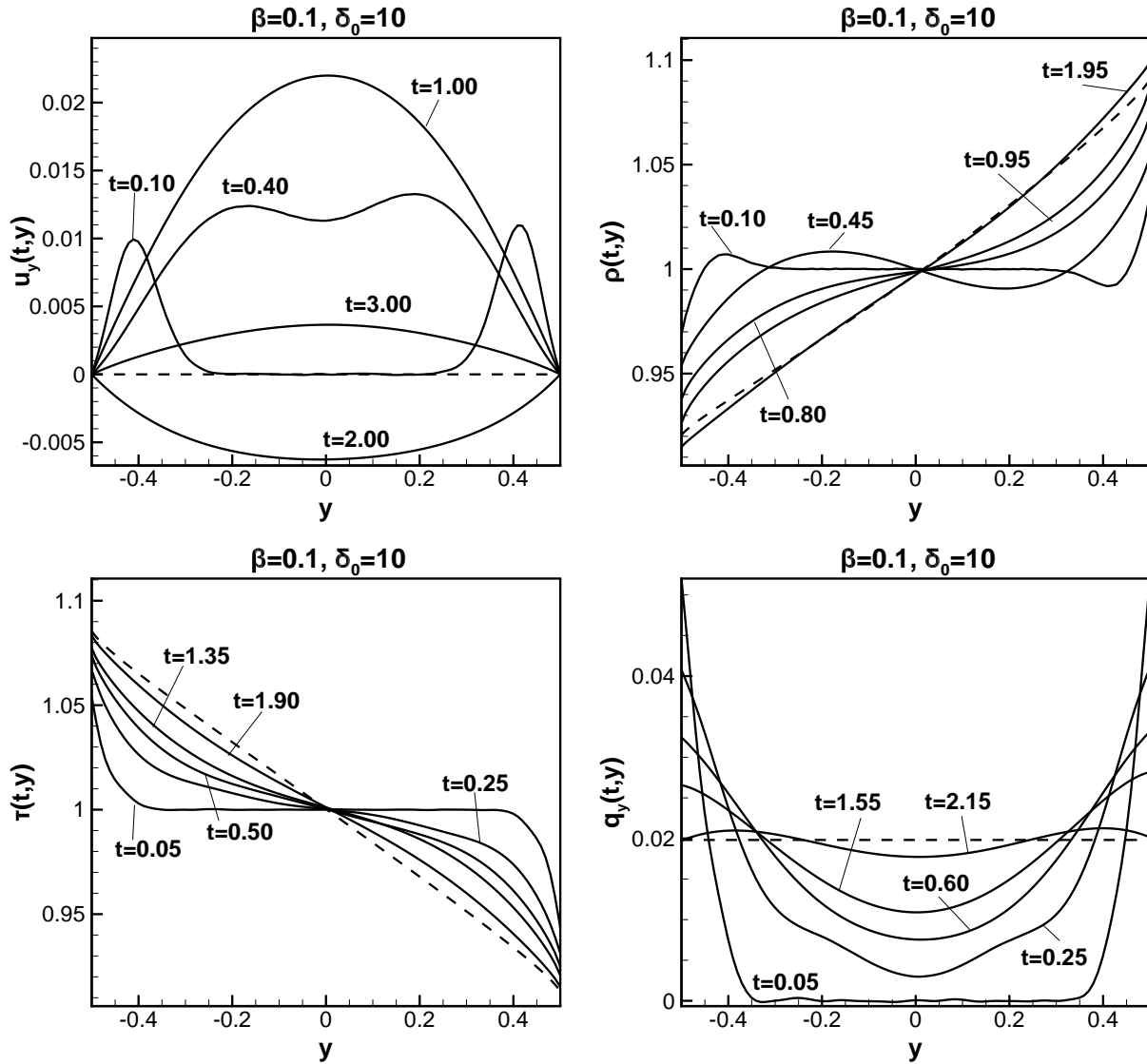
Στο Σχήμα 5.28 παρουσιάζονται οι συνολικοί χρόνοι ισορροπίας για τη ροή Couette με μεταφορά θερμότητας σε πλάκες για διάφορες τιμές της ταχύτητας των πλακών U_0 και του λόγου θερμοκρασιών β . Παρατηρούμε ότι ακολουθούν τη γνωστή μη μονότονη μορφή εμφανίζοντας ένα ελάχιστο κοντά στο $\delta_0 = 1$. Επίσης, γίνεται φανερό ότι η επίδραση της ταχύτητας U_0 στο χρόνο ισορροπίας είναι μικρή, ενώ αντίθετα η αλλαγή της τιμής του λόγου β επηρεάζει σημαντικά το χρόνο ισορροπίας για πολύ αραιοποιημένες ροές.



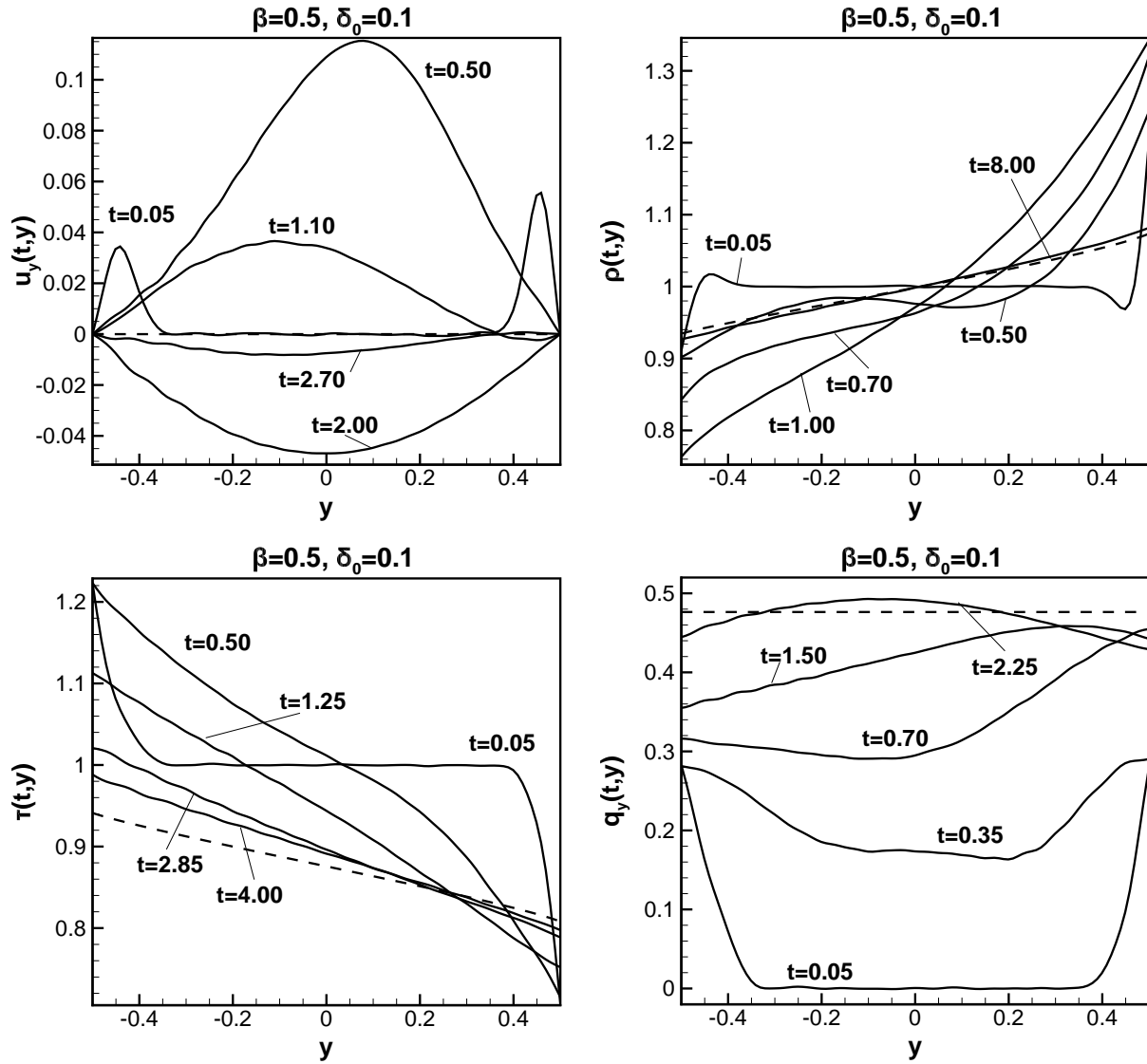
Σχήμα 5.1: Χρονομεταβαλλόμενη μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες (Μοντέλο: Μη γραμμικό BGK). Κατανομές ταχύτητας $u_y(t,y)$ (πάνω αριστερά), πυκνότητας $\rho(t,y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t,y)$ (κάτω αριστερά) και θερμορροής $q_y(t,y)$ (κάτω δεξιά) για λόγο θερμοκρασιών $\beta = 0.1$ και παράμετρο αραιοποίησης $\delta_0 = 0.1$.



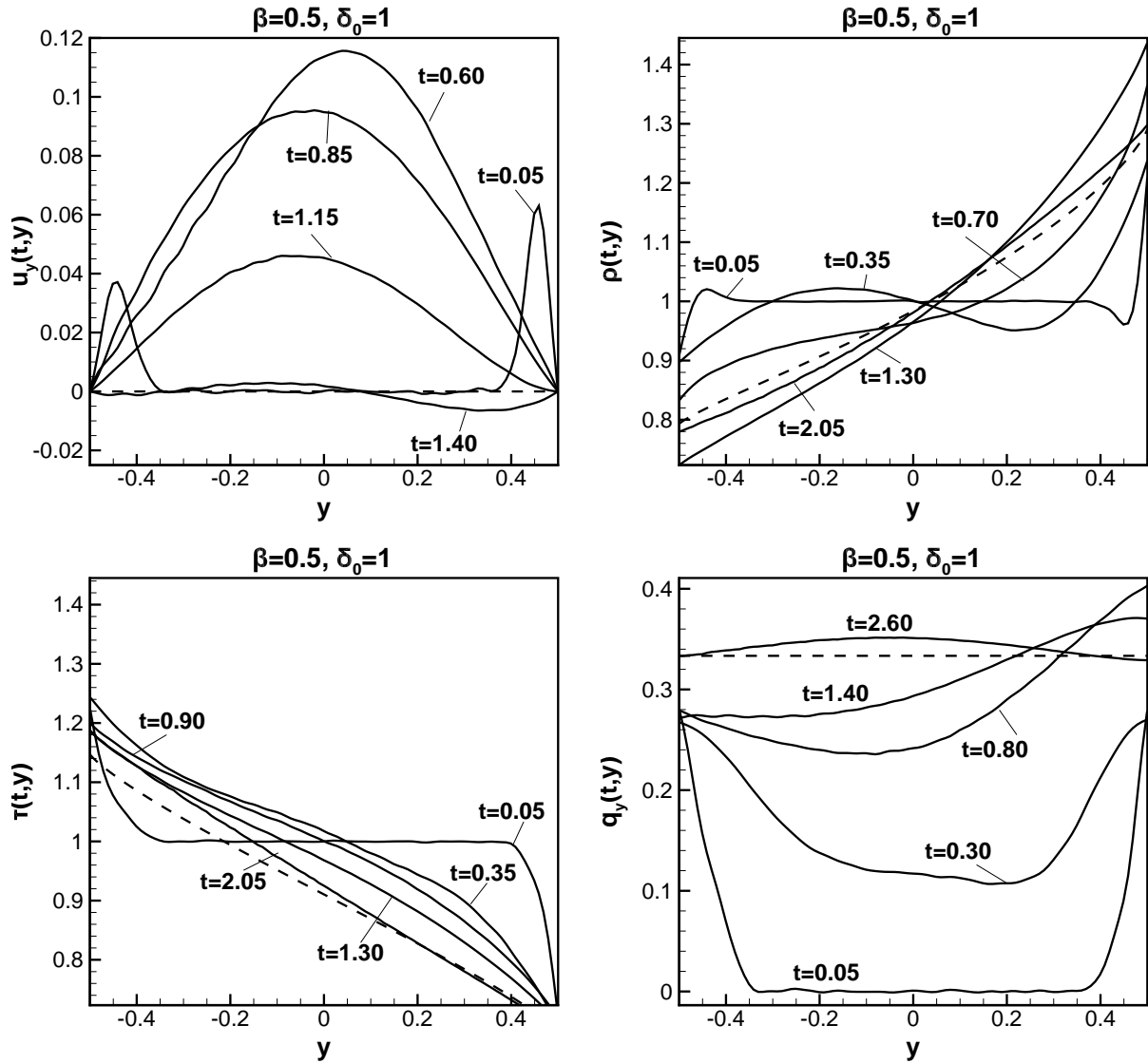
Σχήμα 5.2: Χρονομεταβαλλόμενη μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες (Μοντέλο: Μη γραμμικό BGK). Κατανομές ταχύτητας $u_y(t, y)$ (πάνω αριστερά), πυκνότητας $\rho(t, y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t, y)$ (κάτω αριστερά) και θερμορροής $q_y(t, y)$ (κάτω δεξιά) για λόγο θερμοκρασιών $\beta = 0.1$ και παράμετρο αραιοποίησης $\delta_0 = 1$.



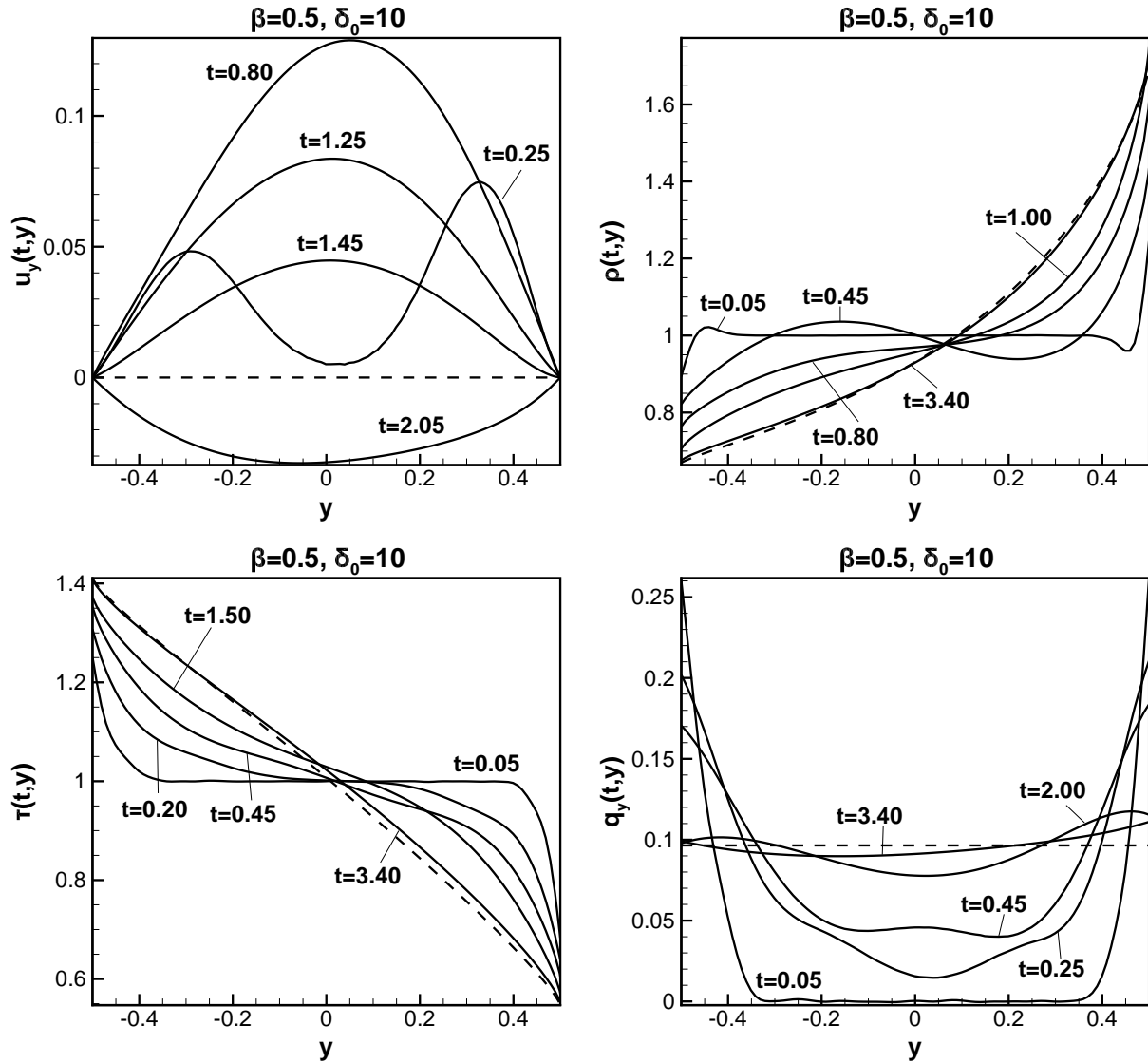
Σχήμα 5.3: Χρονομεταβαλλόμενη μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες (Μοντέλο: Μη γραμμικό BGK). Κατανομές ταχύτητας $u_y(t, y)$ (πάνω αριστερά), πυκνότητας $\rho(t, y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t, y)$ (κάτω αριστερά) και θερμορροής $q_y(t, y)$ (κάτω δεξιά) για λόγο θερμοκρασιών $\beta = 0.1$ και παράμετρο αραιοποίησης $\delta_0 = 10$.



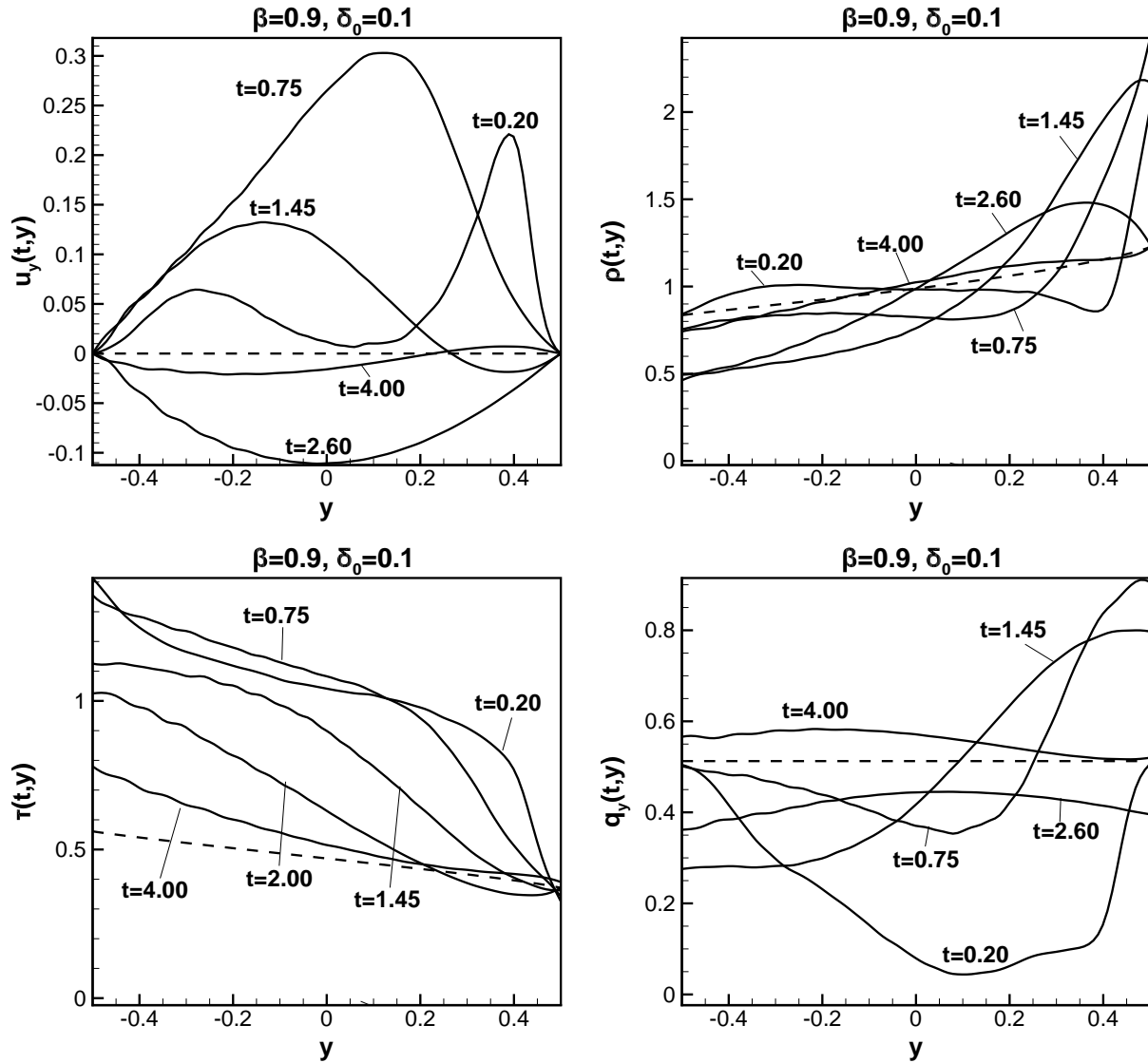
Σχήμα 5.4: Χρονομεταβαλλόμενη μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες (Μοντέλο: Μη γραμμικό BGK). Κατανομές ταχύτητας $u_y(t,y)$ (πάνω αριστερά), πυκνότητας $\rho(t,y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t,y)$ (κάτω αριστερά) και θερμορροής $q_y(t,y)$ (κάτω δεξιά) για λόγο θερμοκρασιών $\beta = 0.5$ και παράμετρο αραιοποίησης $\delta_0 = 0.1$.



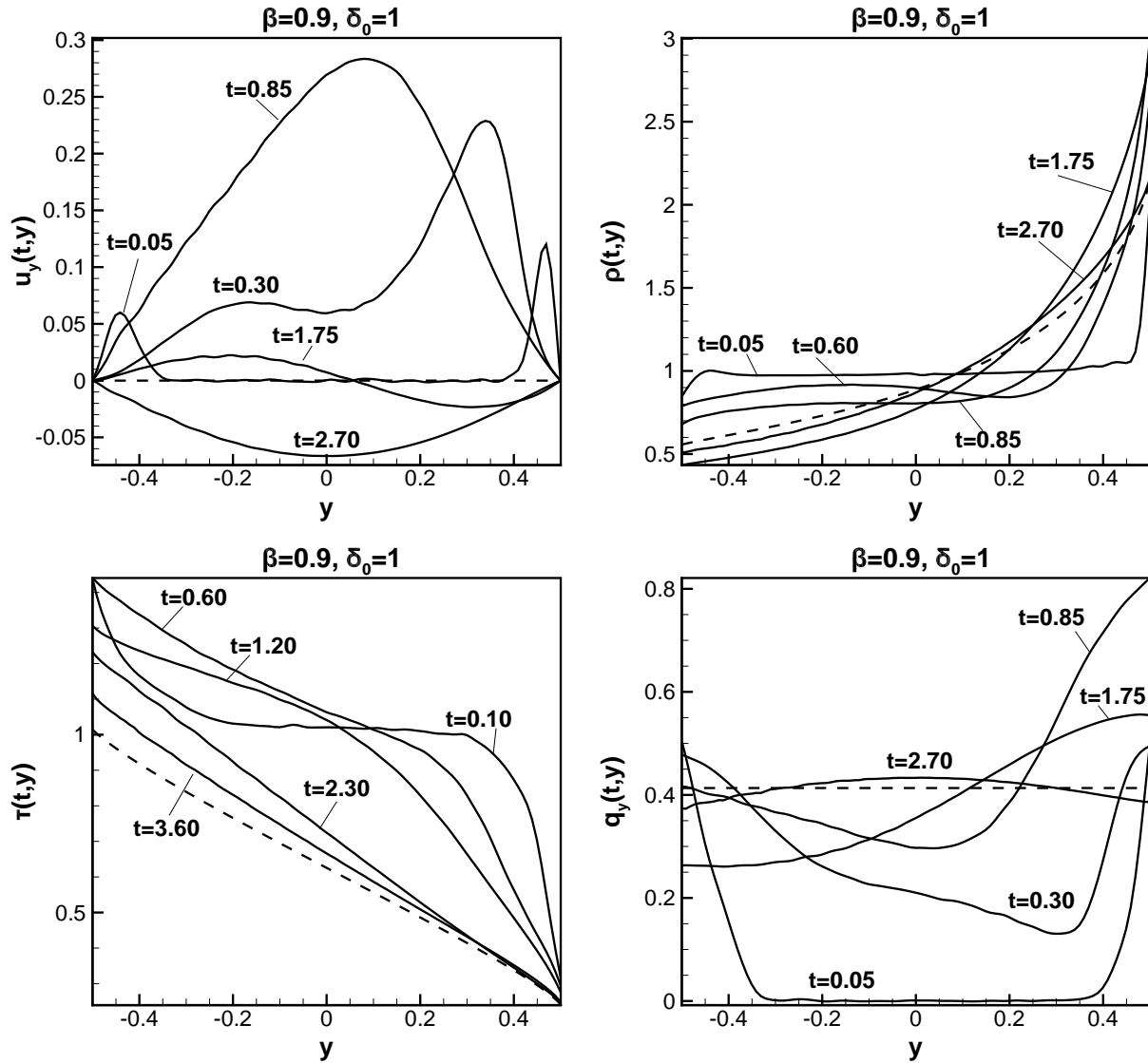
Σχήμα 5.5: Χρονομεταβαλλόμενη μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες (Μοντέλο: Μη γραμμικό BGK). Κατανομές ταχύτητας $u_y(t,y)$ (πάνω αριστερά), πυκνότητας $\rho(t,y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t,y)$ (κάτω αριστερά) και θερμορροής $q_y(t,y)$ (κάτω δεξιά) για λόγο θερμοκρασιών $\beta = 0.5$ και παράμετρο αραιοποίησης $\delta_0 = 1$.



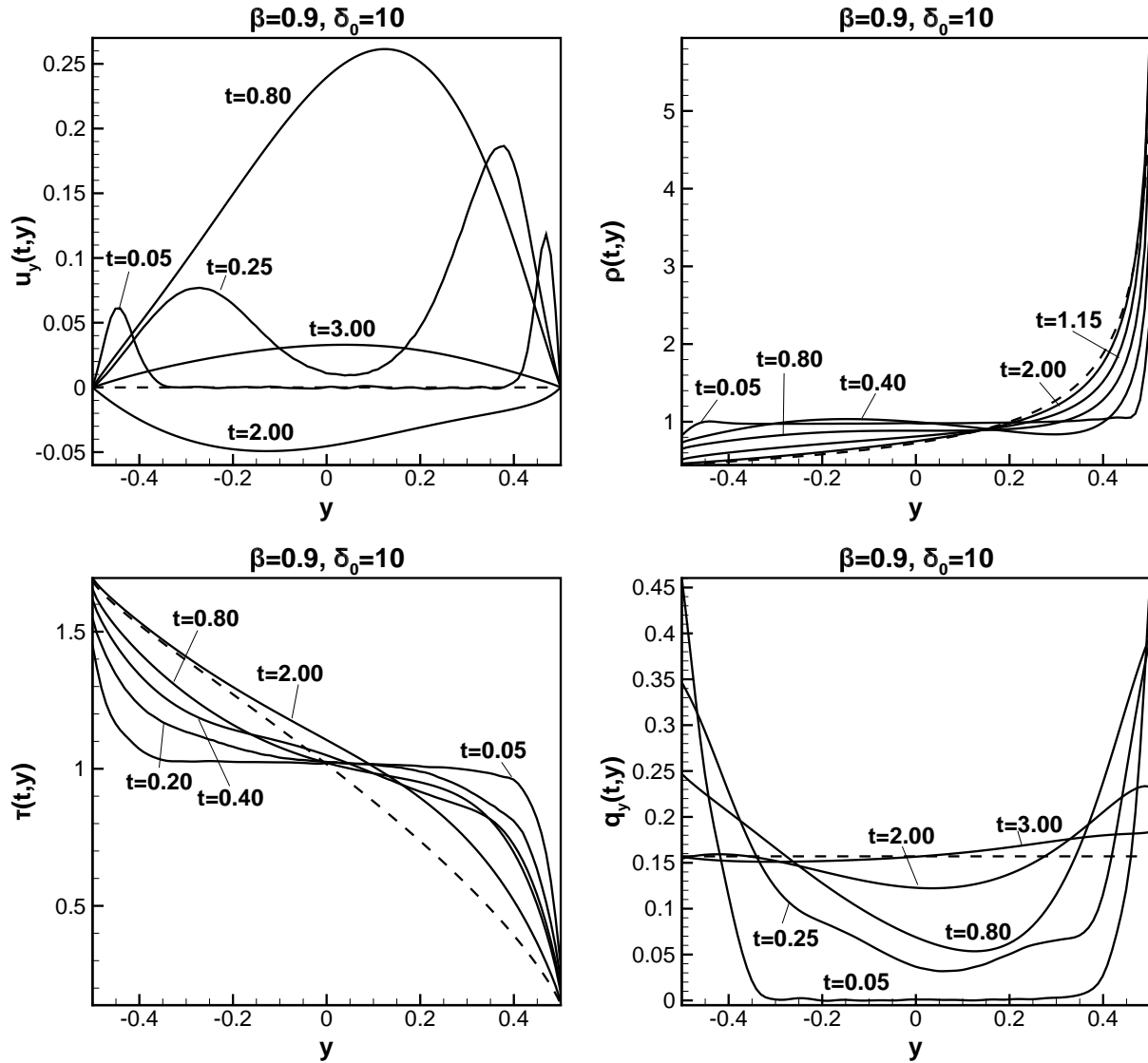
Σχήμα 5.6: Χρονομεταβαλλόμενη μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες (Μοντέλο: Μη γραμμικό BGK). Κατανομές ταχύτητας $u_y(t, y)$ (πάνω αριστερά), πυκνότητας $\rho(t, y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t, y)$ (κάτω αριστερά) και θερμορροής $q_y(t, y)$ (κάτω δεξιά) για λόγο θερμοκρασιών $\beta = 0.5$ και παράμετρο αραιοποίησης $\delta_0 = 10$.



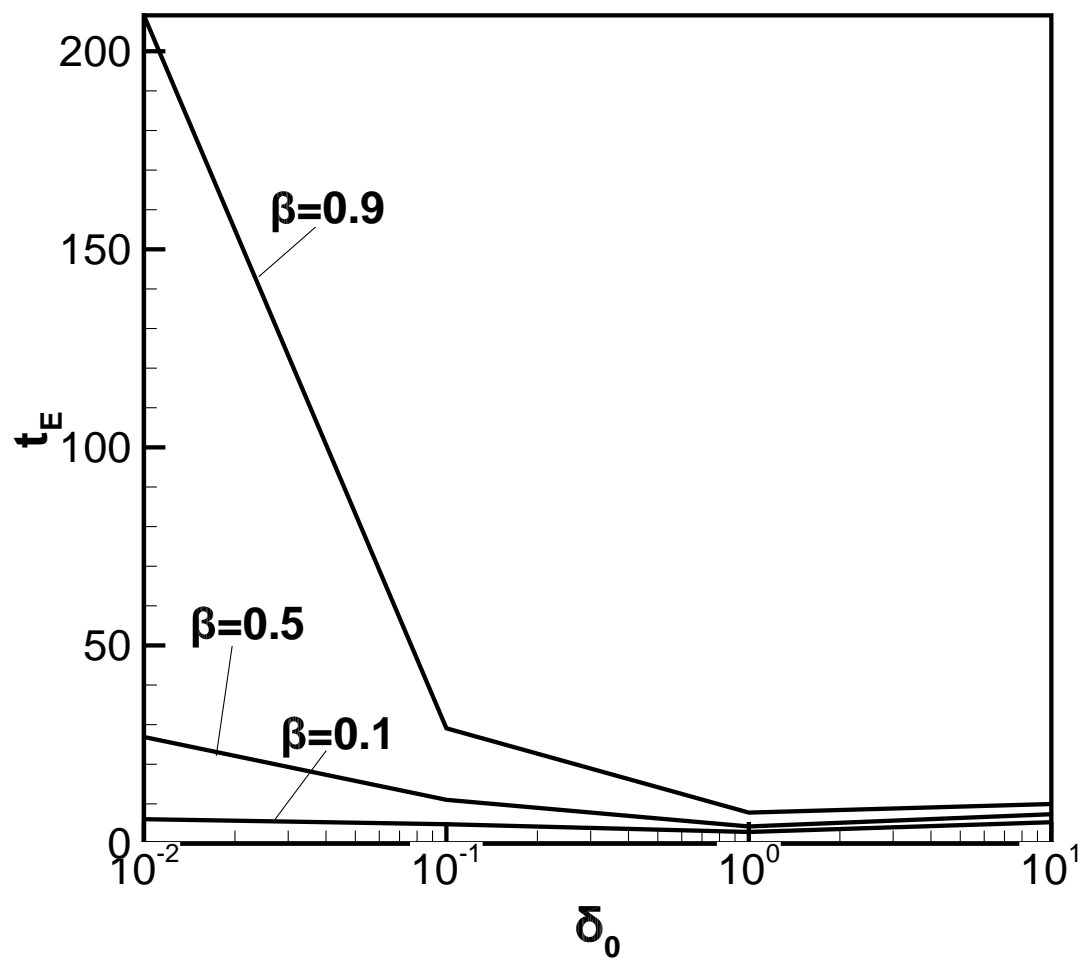
Σχήμα 5.7: Χρονομεταβαλλόμενη μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες (Μοντέλο: Μη γραμμικό BGK). Κατανομές ταχύτητας $u_y(t,y)$ (πάνω αριστερά), πυκνότητας $\rho(t,y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t,y)$ (κάτω αριστερά) και θερμορροής $q_y(t,y)$ (κάτω δεξιά) για λόγο θερμοκρασιών $\beta = 0.9$ και παράμετρο αραιοποίησης $\delta_0 = 0.1$.



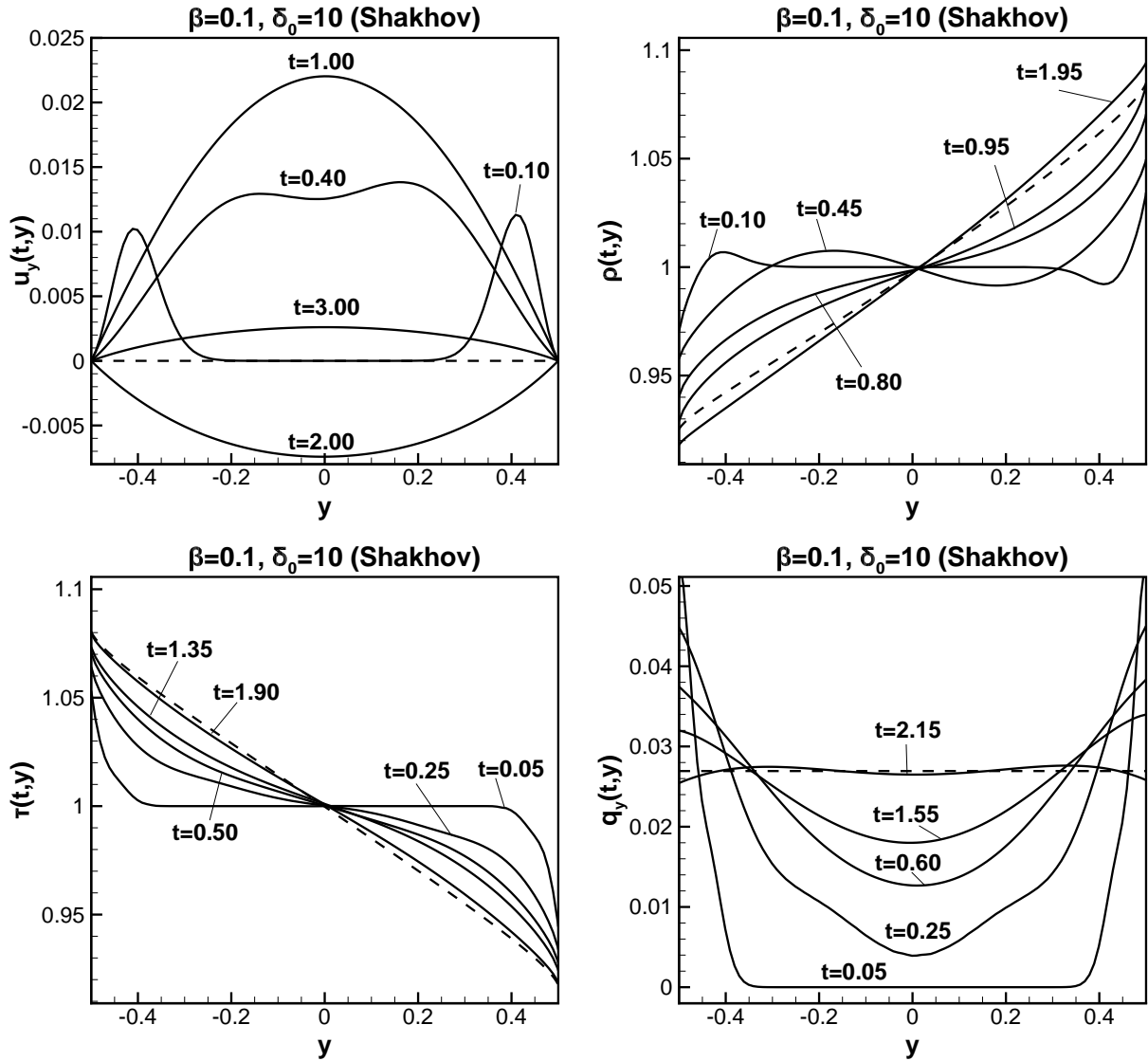
Σχήμα 5.8: Χρονομεταβαλλόμενη μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες (Μοντέλο: Μη γραμμικό BGK). Κατανομές ταχύτητας $u_y(t,y)$ (πάνω αριστερά), πυκνότητας $\rho(t,y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t,y)$ (κάτω αριστερά) και θερμορροής $q_y(t,y)$ (κάτω δεξιά) για λόγο θερμοκρασιών $\beta = 0.9$ και παράμετρο αραιοποίησης $\delta_0 = 1$.



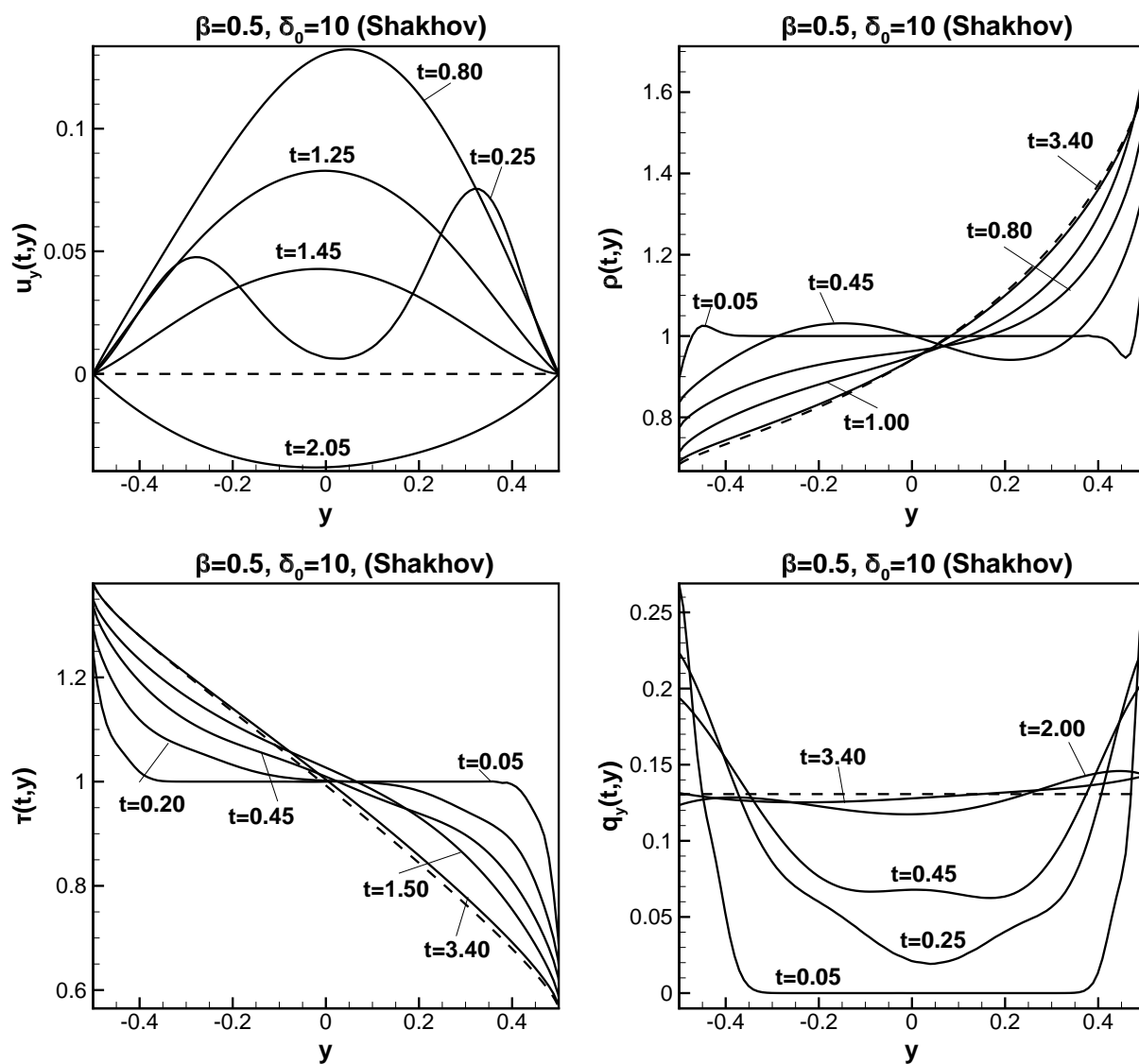
Σχήμα 5.9: Χρονομεταβαλλόμενη μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες (Μοντέλο: Μη γραμμικό BGK). Κατανομές ταχύτητας $u_y(t,y)$ (πάνω αριστερά), πυκνότητας $\rho(t,y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t,y)$ (κάτω αριστερά) και θερμορροής $q_y(t,y)$ (κάτω δεξιά) για λόγο θερμοκρασιών $\beta = 0.9$ και παράμετρο αραιοποίησης $\delta_0 = 10$.



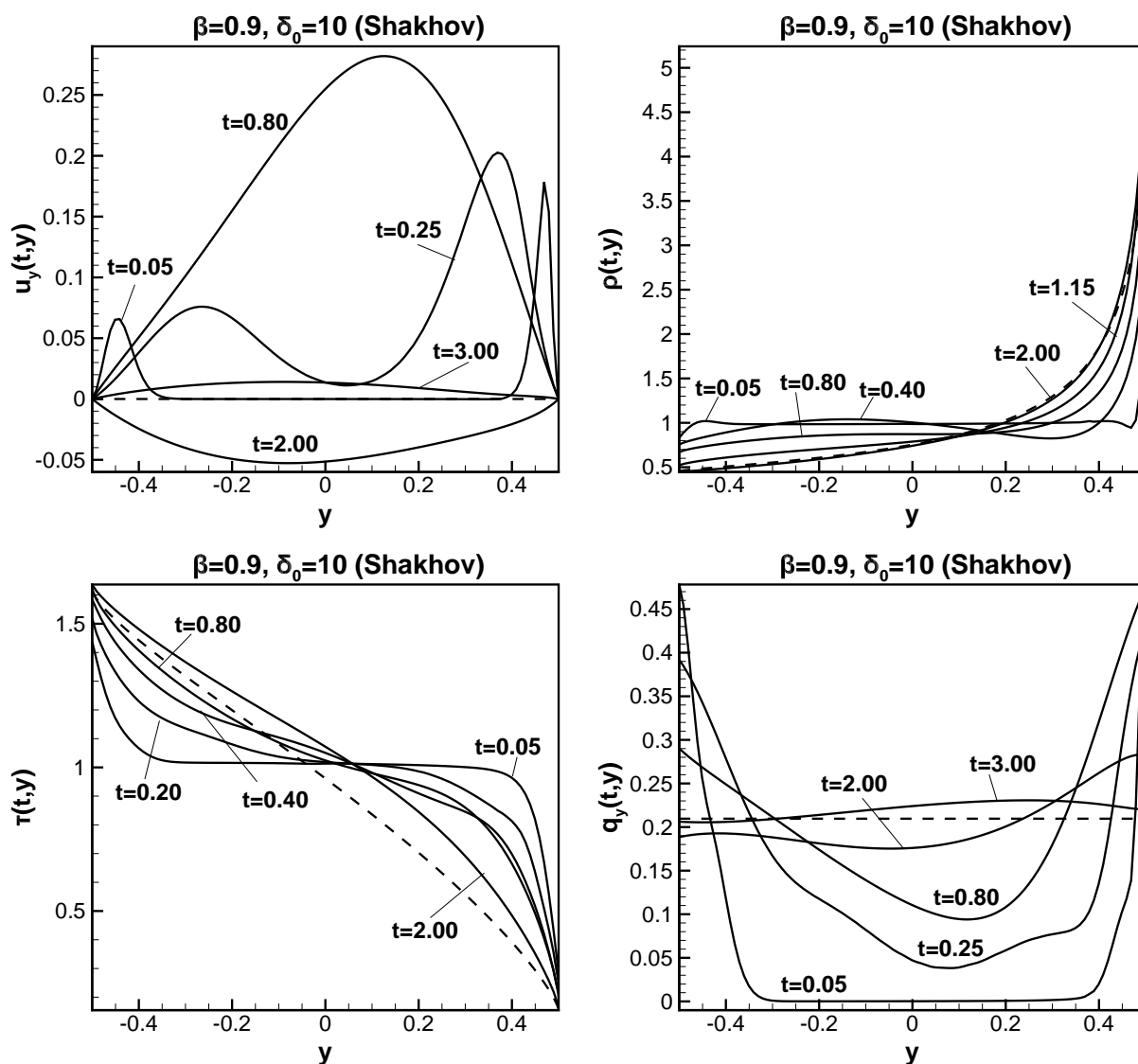
Σχήμα 5.10: Αδιάστατος συνολικός χρόνος ισορροπίας t_E συναρτήσει της παραμέτρου αραιοποίησης δ_0 στη χρονομεταβαλλόμενη μεταφορά θερμότητας



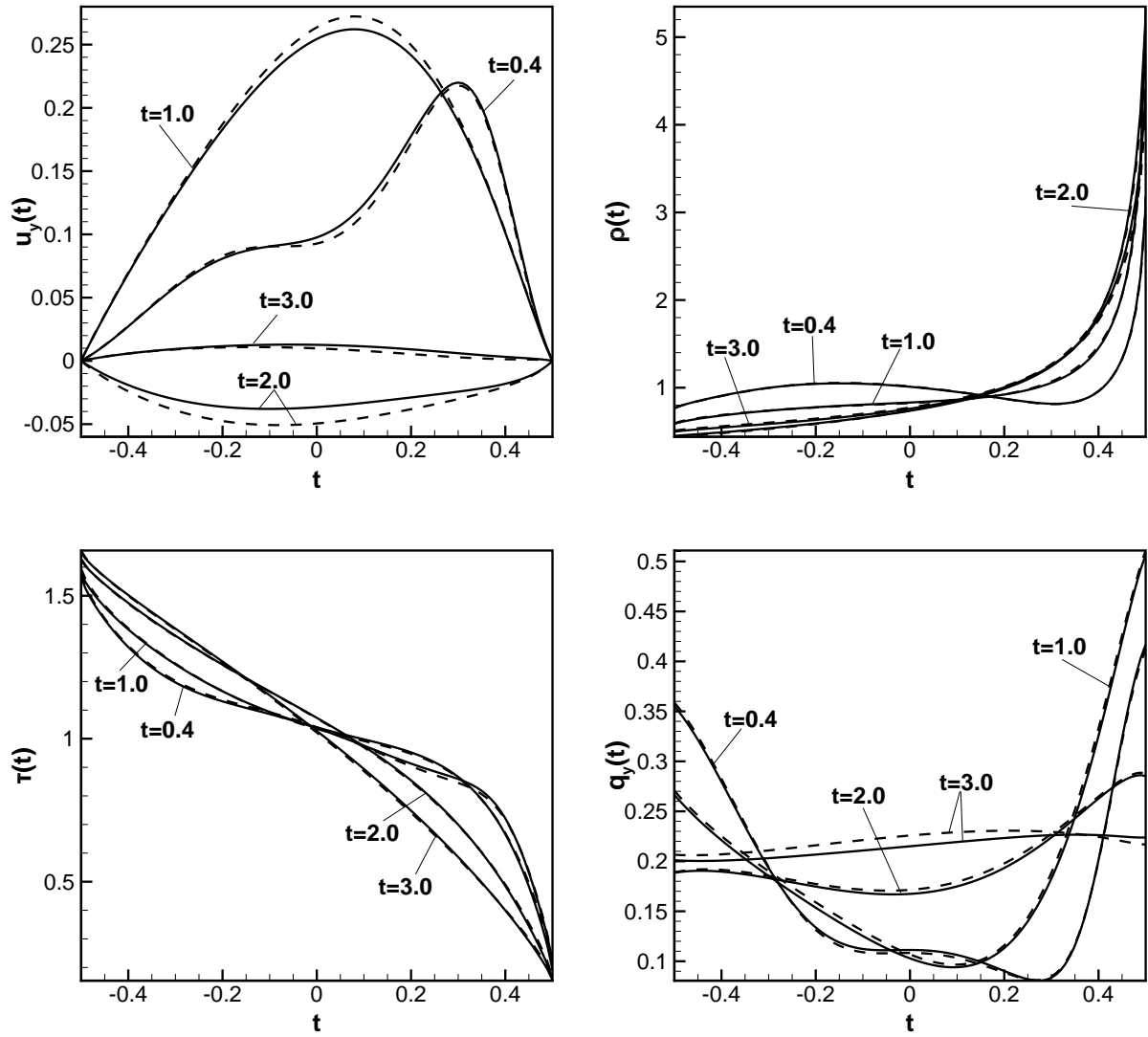
Σχήμα 5.11: Χρονομεταβαλλόμενη μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες (Μοντέλο: Μη γραμμικό Shakhov). Κατανομές ταχύτητας $u_y(t, y)$ (πάνω αριστερά), πυκνότητας $\rho(t, y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t, y)$ (κάτω αριστερά) και θερμορροής $q_y(t, y)$ (κάτω δεξιά) για λόγο θερμοκρασιών $\beta = 0.1$ και παράμετρο αραιοποίησης $\delta_0 = 10$.



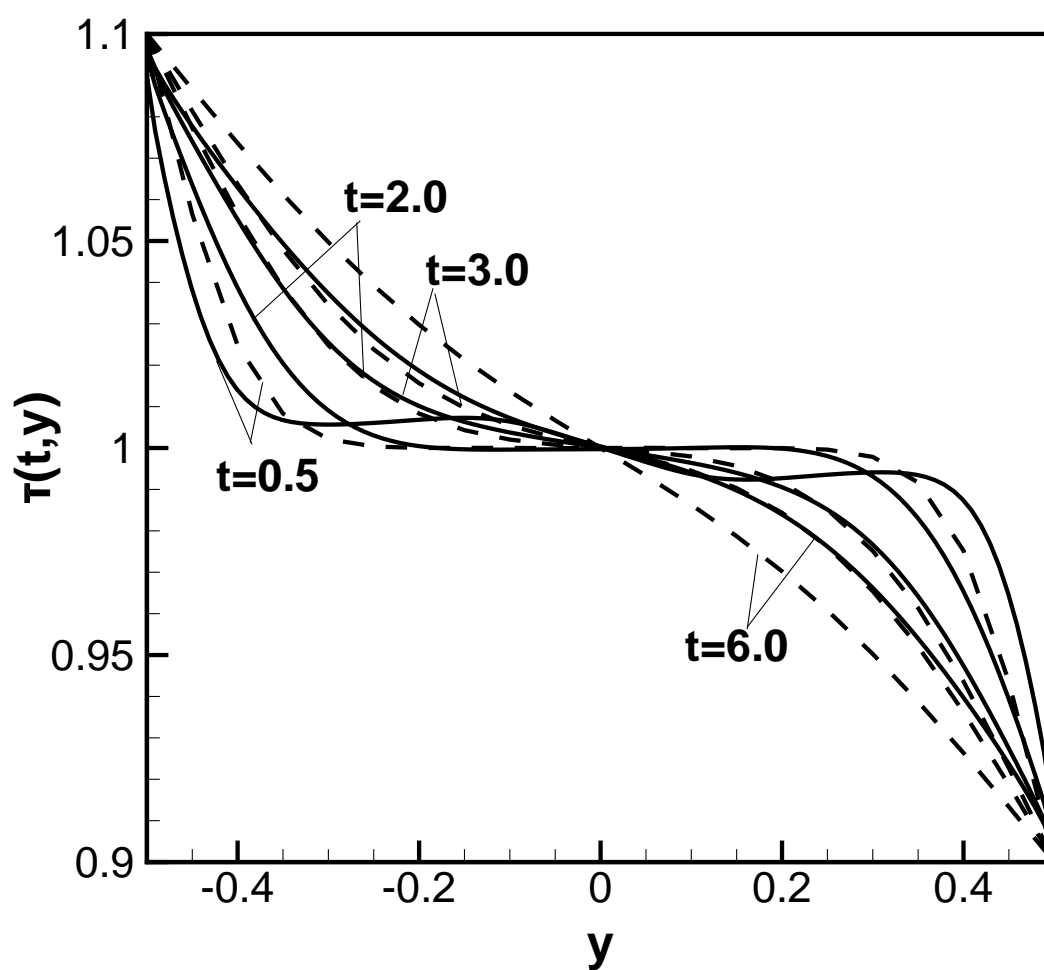
Σχήμα 5.12: Χρονομεταβαλλόμενη μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες (Μοντέλο: Μη γραμμικό Shakhov). Κατανομές ταχύτητας $u_y(t, y)$ (πάνω αριστερά), πυκνότητας $\rho(t, y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t, y)$ (κάτω αριστερά) και θερμορροής $q_y(t, y)$ (κάτω δεξιά) για λόγο θερμοκρασιών $\beta = 0.5$ και παράμετρο αραιοποίησης $\delta_0 = 10$.



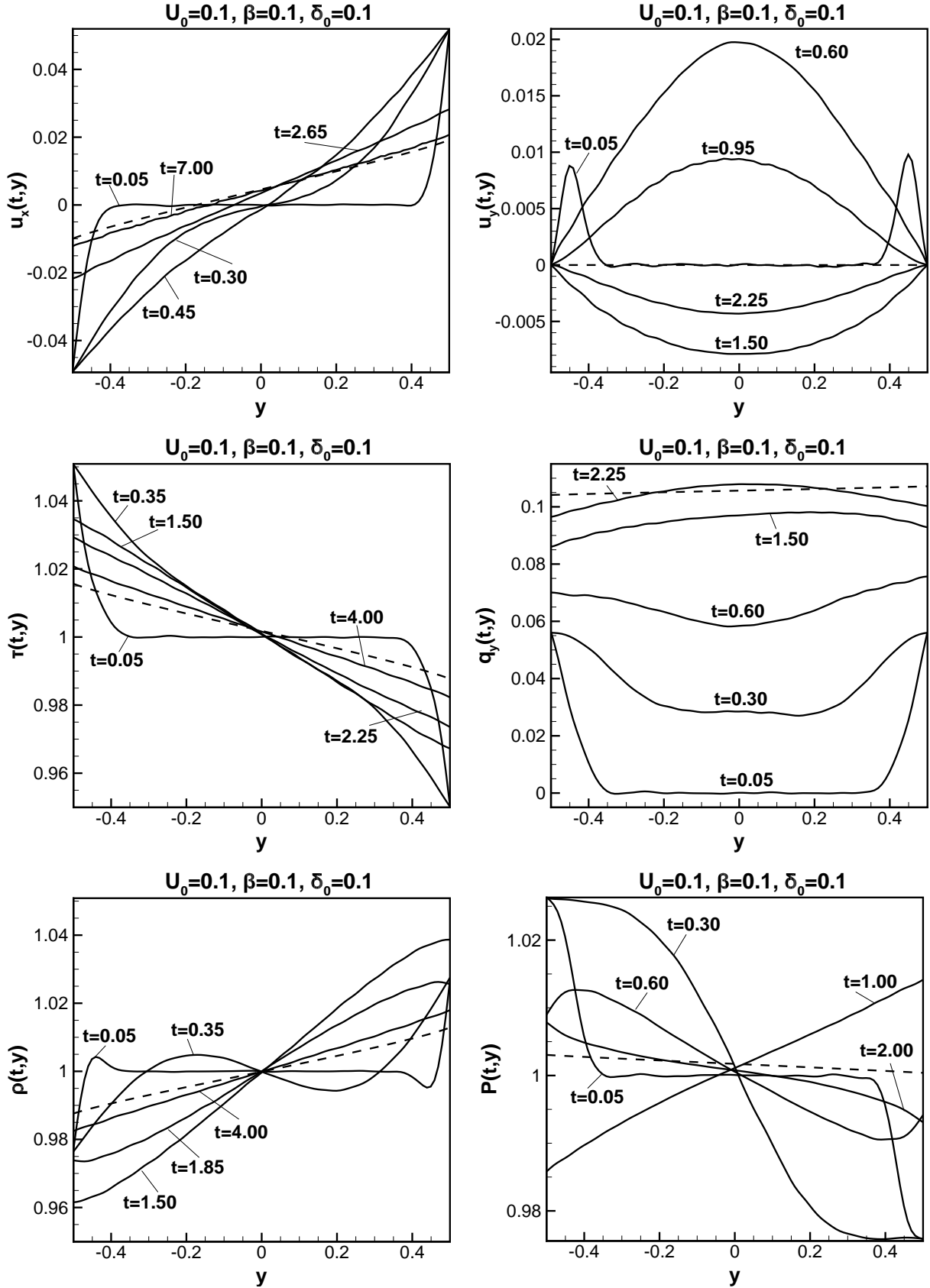
Σχήμα 5.13: Χρονομεταβαλλόμενη μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες (Μοντέλο: Μη γραμμικό Shakhov). Κατανομές ταχύτητας $u_y(t, y)$ (πάνω αριστερά), πυκνότητας $\rho(t, y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t, y)$ (κάτω αριστερά) και θερμορροής $q_y(t, y)$ (κάτω δεξιά) για λόγο θερμοκρασιών $\beta = 0.9$ και παράμετρο αραιοποίησης $\delta_0 = 10$.



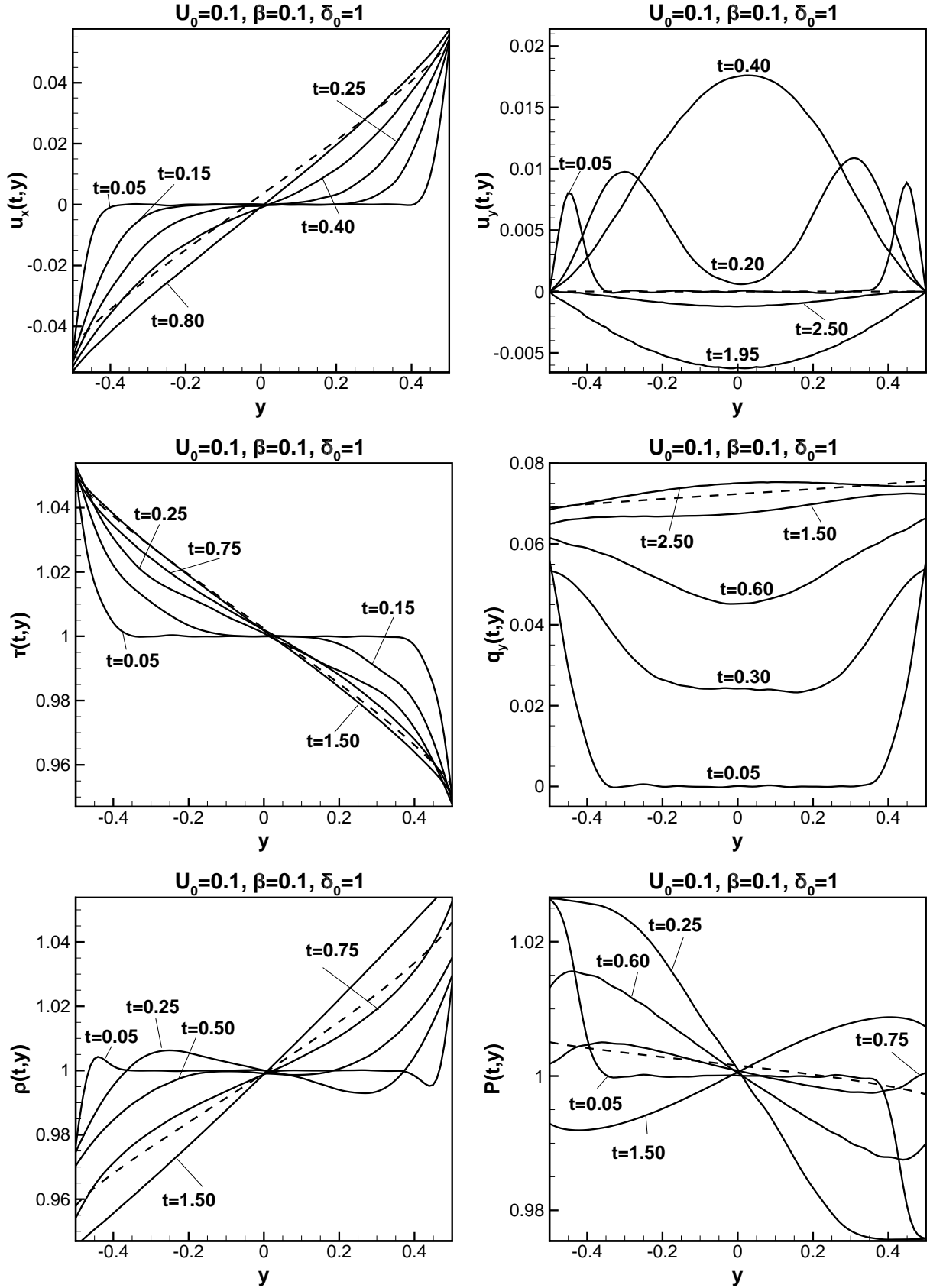
Σχήμα 5.14: Χρονομεταβαλλόμενη μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες: Σύγκριση μεταξύ BGK με $\delta_0 = 6.66$ (συμπαγείς γραμμές) και Shakhov με $\delta_0 = 10$ (διακεκομμένες γραμμές) για $\beta = 0.9$. Κατανομές ταχύτητας $u_y(t, y)$ (πάνω αριστερά), πυκνότητας $\rho(t, y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t, y)$ (κάτω αριστερά) και θερμορροής $q_y(t, y)$ (κάτω δεξιά).



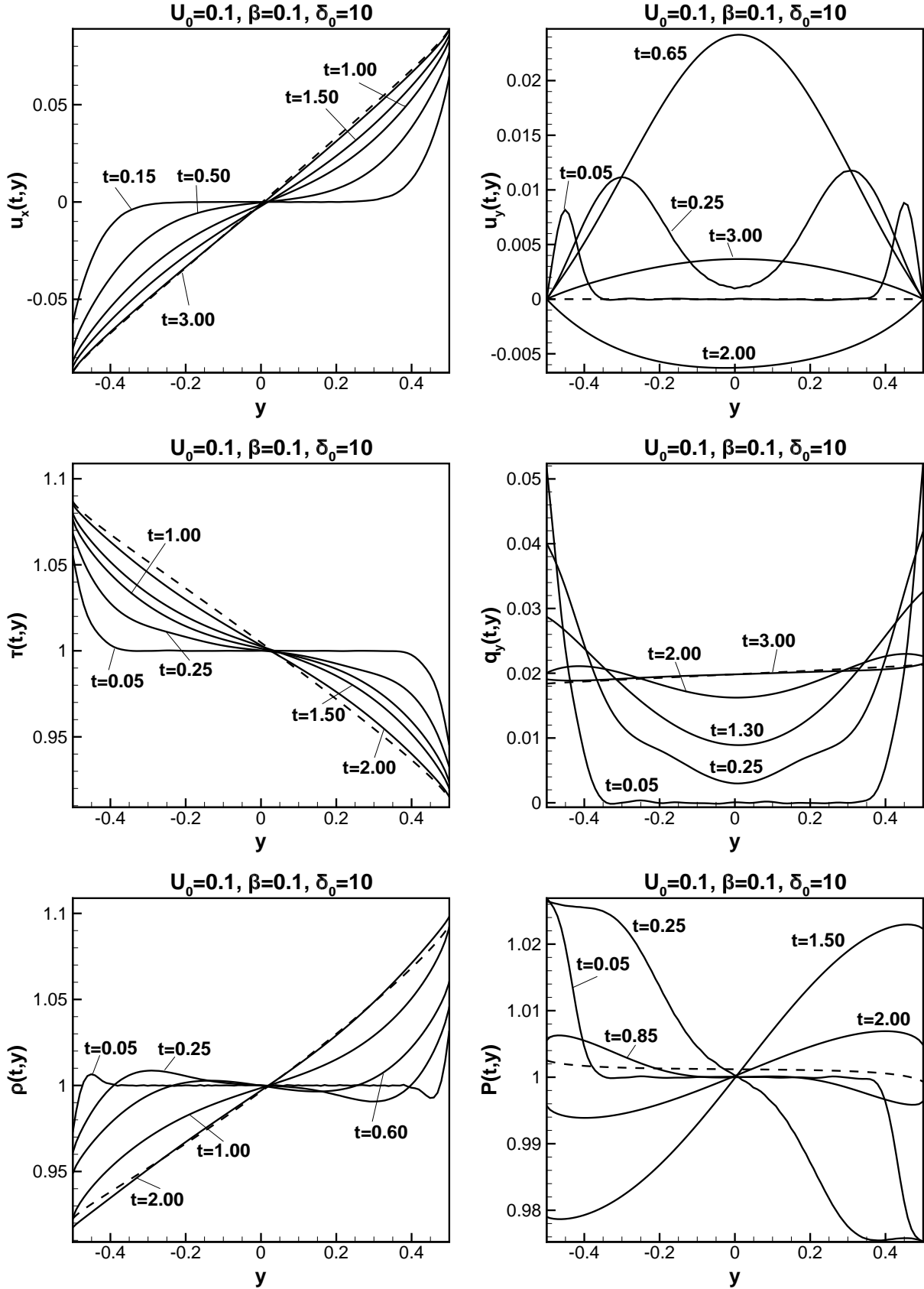
Σχήμα 5.15: Χρονομεταβαλλόμενη μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες: Σύγκριση αριθμητικής λύσης (συμπαγείς γραμμές) για $\delta_0 = 100$ και $\beta = 0.1$ με αναλυτική λύση (διακεκομμένες γραμμές)



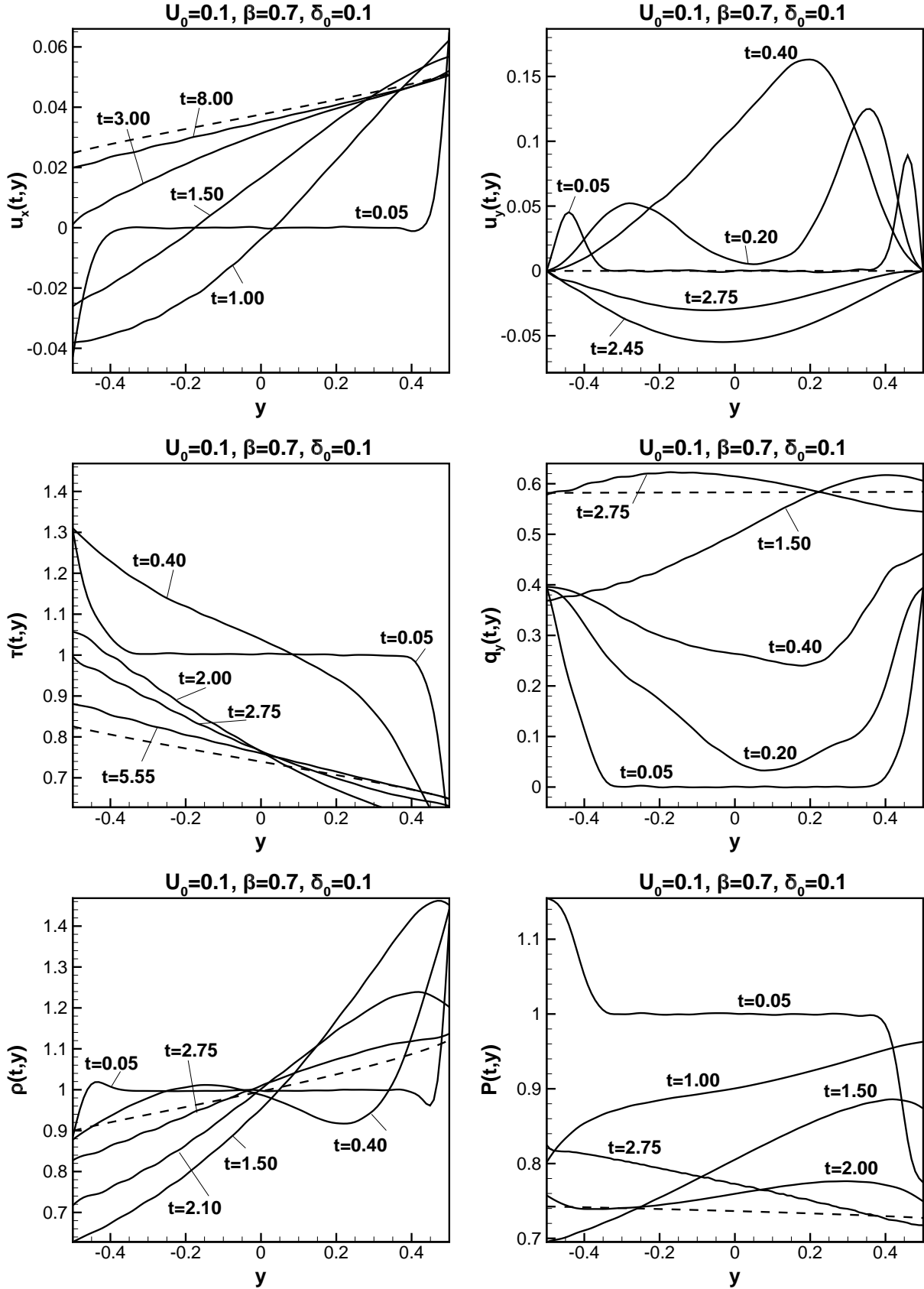
Σχήμα 5.16: Χρονομεταβαλλόμενη ροή Couette με μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες (Μοντέλο: Μη γραμμικό BGK). Κατανομές ταχύτητας $u_x(t,y)$ (πάνω αριστερά), ταχύτητας $u_y(t,y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t,y)$ (μέση αριστερά), θερμορροής $q_y(t,y)$ (μέση δεξιά), πυκνότητας $\rho(t,y)$ (κάτω αριστερά) και πίεσης $P(t,y)$ (κάτω δεξιά) για ταχύτητα πλακών $U_0 = 0.1$, λόγο θερμοκρασιών $\beta = 0.1$ και παράμετρο αραιοποίησης $\delta_0 = 0.1$



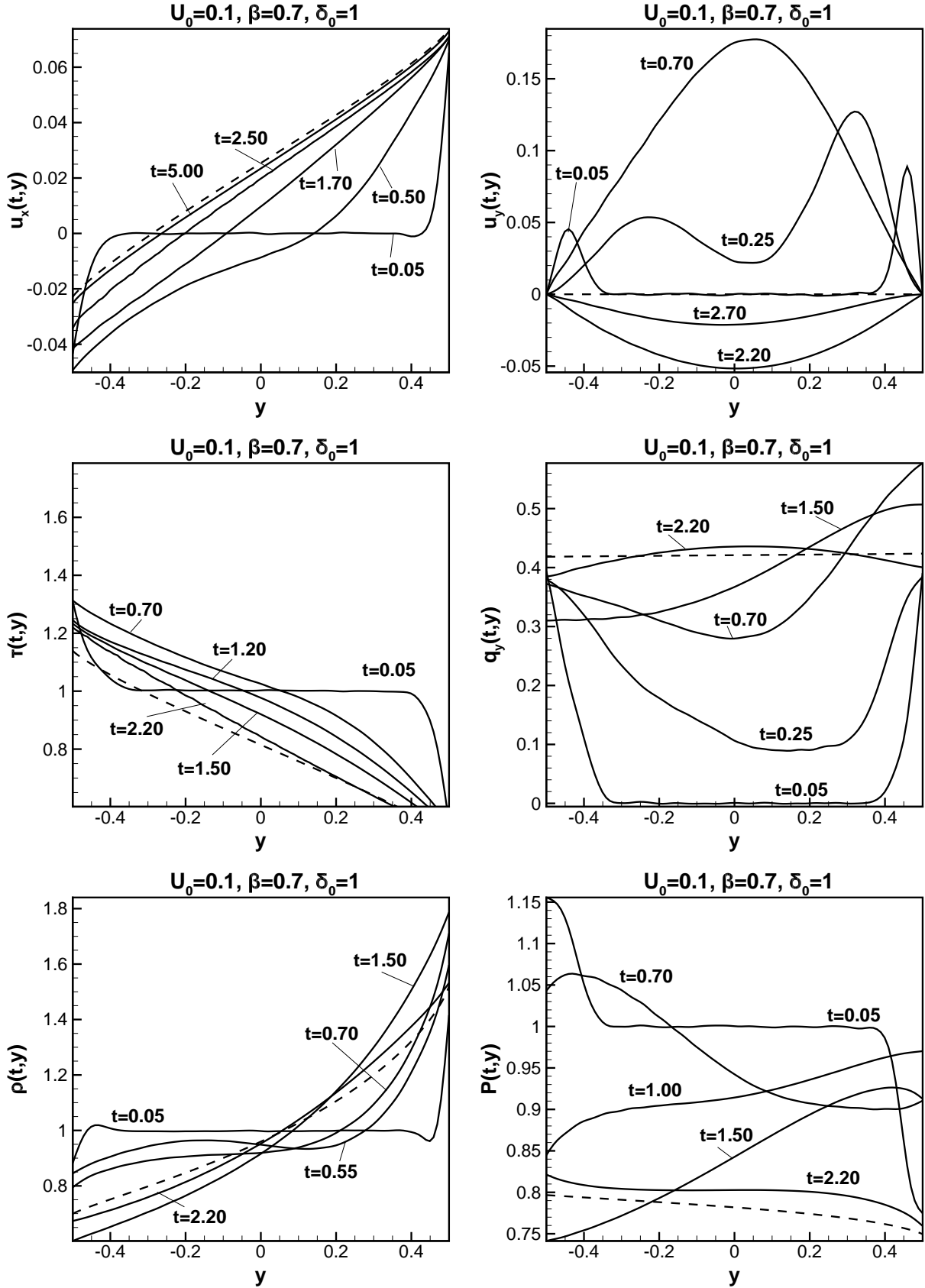
Σχήμα 5.17: Χρονομεταβαλλόμενη ροή Couette με μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες (Μοντέλο: Μη γραμμικό BGK). Κατανομές ταχύτητας $u_x(t,y)$ (πάνω αριστερά), ταχύτητας $u_y(t,y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t,y)$ (μέση αριστερά), θερμορροής $q_y(t,y)$ (μέση δεξιά), πυκνότητας $\rho(t,y)$ (κάτω αριστερά) και πίεσης $P(t,y)$ (κάτω δεξιά) για ταχύτητα πλακών $U_0 = 0.1$, λόγο θερμοκρασιών $\beta = 0.1$ και παράμετρο αραιοποίησης $\delta_0 = 1$



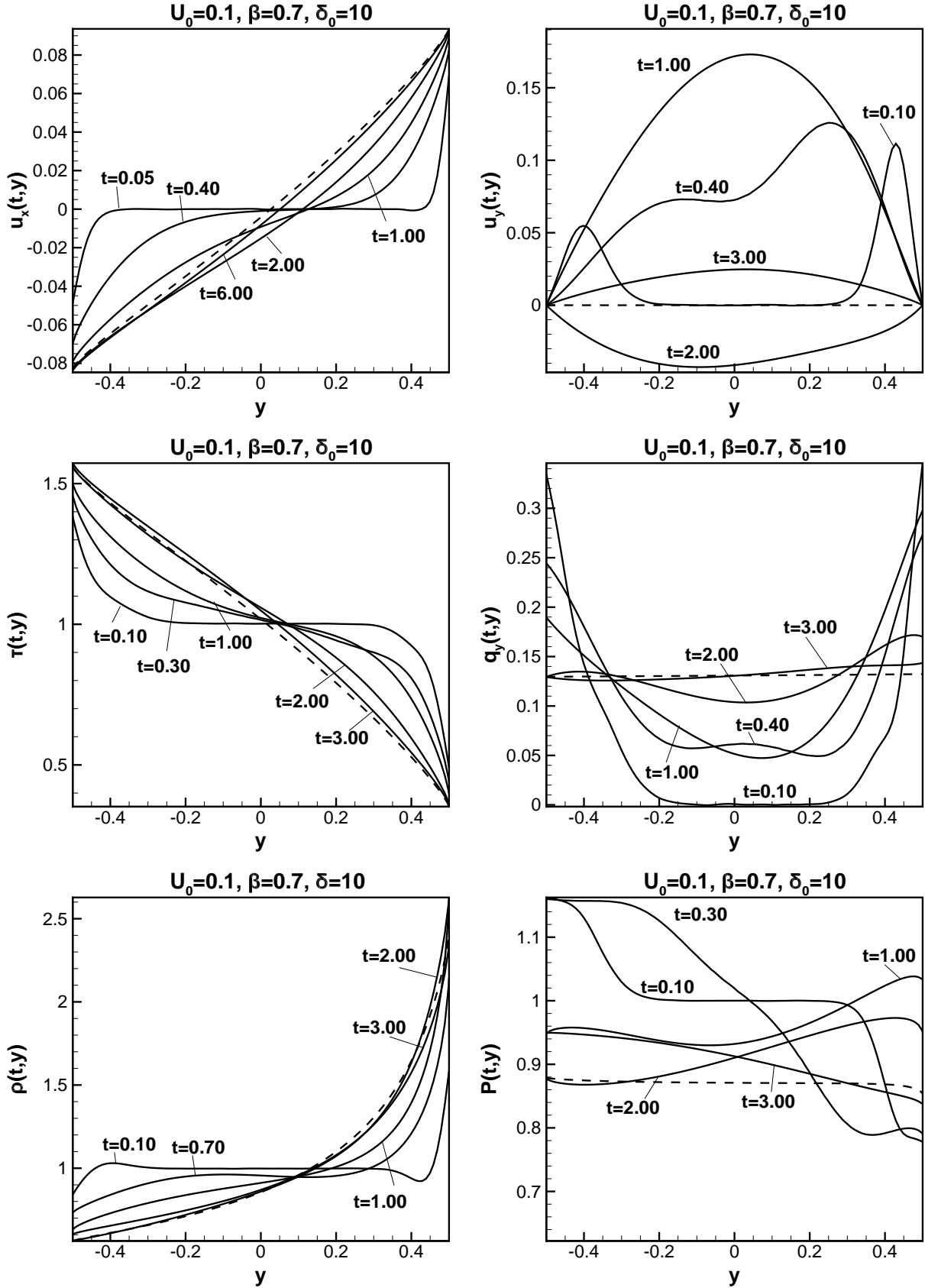
Σχήμα 5.18: Χρονομεταβαλλόμενη ροή Couette με μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες (Μοντέλο: Μη γραμμικό BGK). Κατανομές ταχύτητας $u_x(t, y)$ (πάνω αριστερά), ταχύτητας $u_y(t, y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t, y)$ (μέση αριστερά), θερμοροής $q_y(t, y)$ (μέση δεξιά), πυκνότητας $\rho(t, y)$ (κάτω αριστερά) και πίεσης $P(t, y)$ (κάτω δεξιά) για ταχύτητα πλακών $U_0 = 0.1$, λόγο θερμοκρασιών $\beta = 0.1$ και παράμετρο αραιοποίησης $\delta_0 = 10$



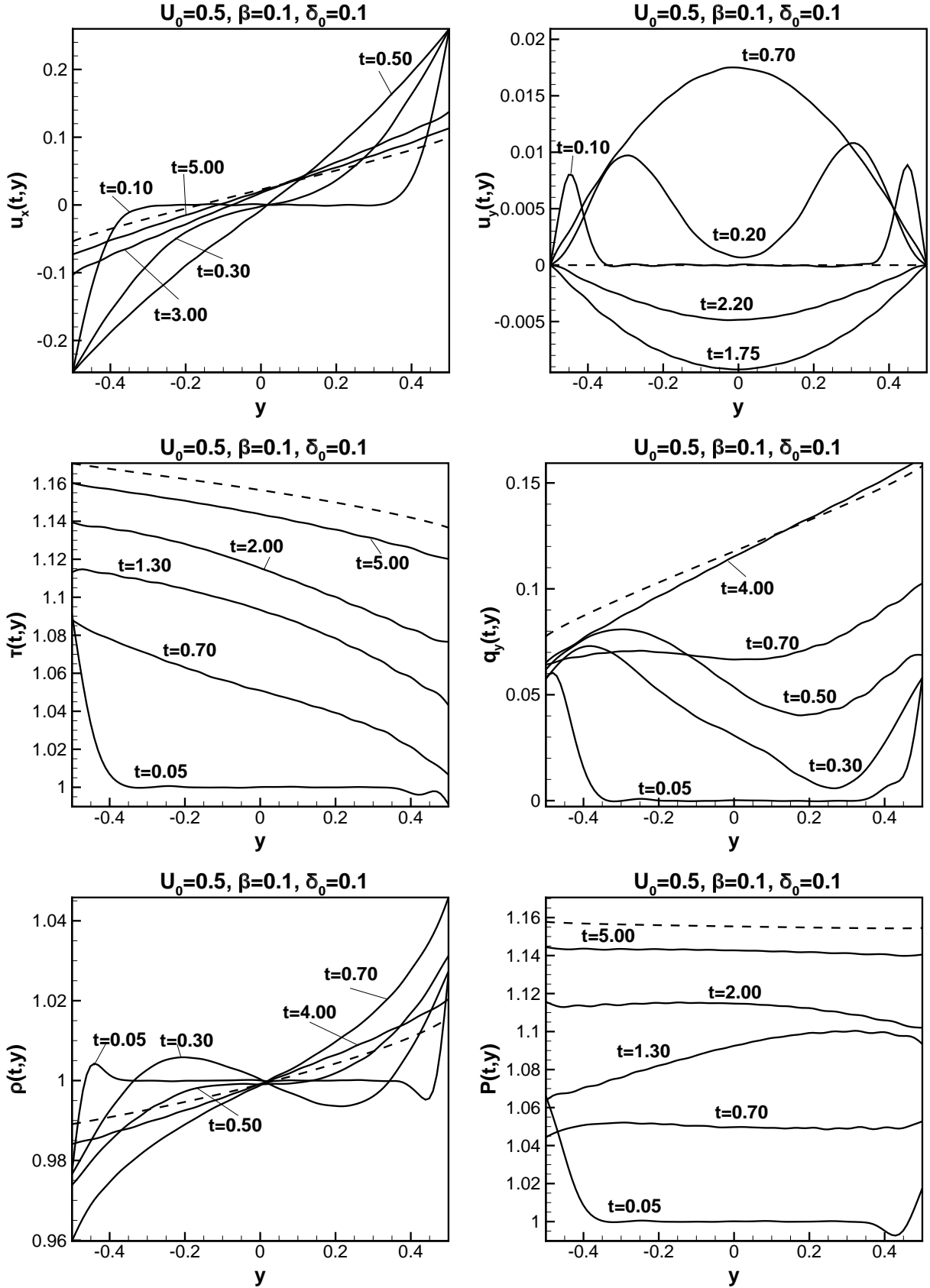
Σχήμα 5.19: Χρονομεταβαλλόμενη ροή Couette με μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες (Μοντέλο: Μη γραμμικό BGK). Κατανομές ταχύτητας $u_x(t,y)$ (πάνω αριστερά), ταχύτητας $u_y(t,y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t,y)$ (μέση αριστερά), θερμοροής $q_y(t,y)$ (μέση δεξιά), πυκνότητας $\rho(t,y)$ (κάτω αριστερά) και πίεσης $P(t,y)$ (κάτω δεξιά) για ταχύτητα πλακών $U_0 = 0.1$, λόγο θερμοκρασιών $\beta = 0.7$ και παράμετρο αραιοποίησης $\delta_0 = 0.1$



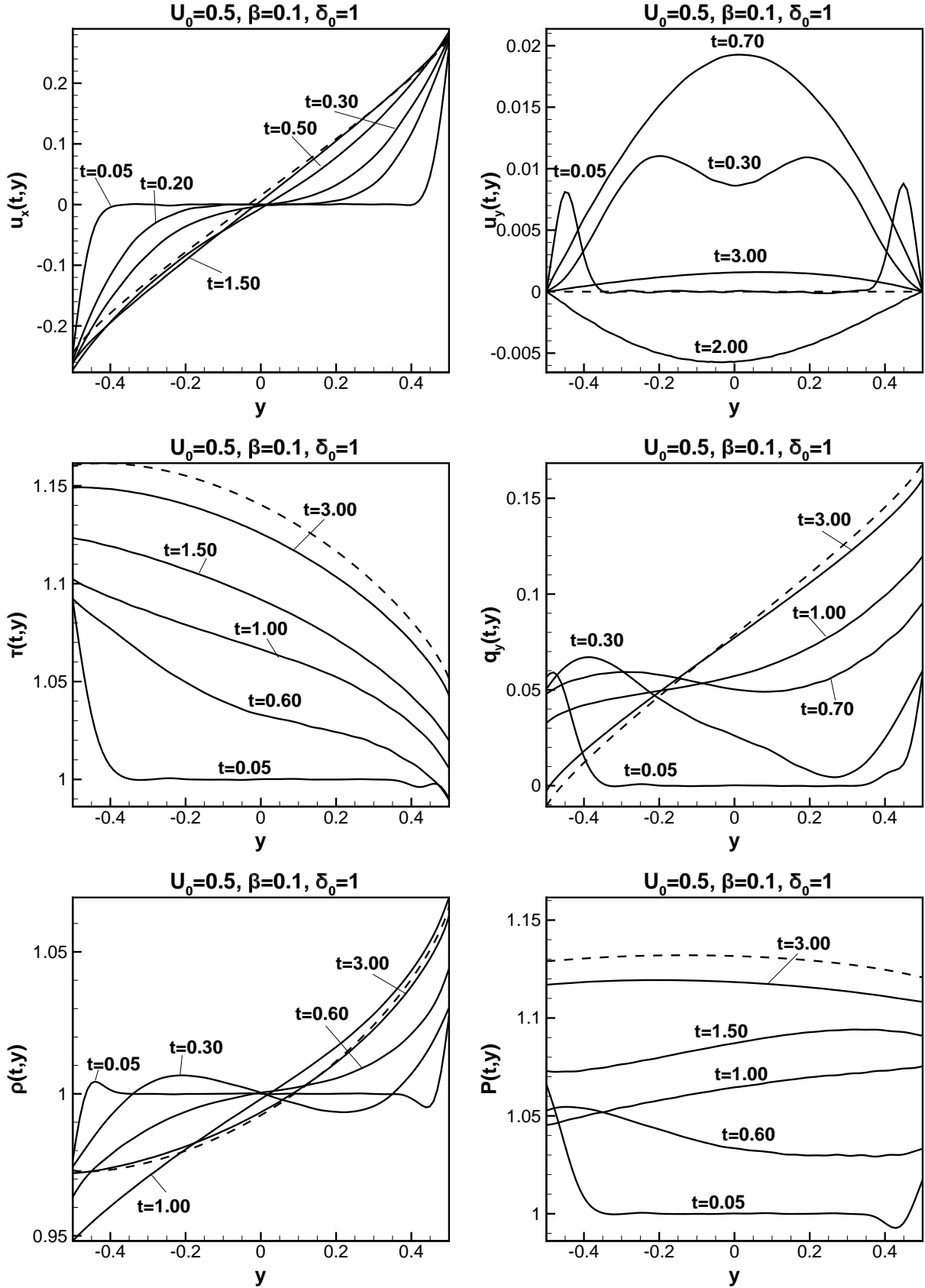
Σχήμα 5.20: Χρονομεταβαλλόμενη ροή Couette με μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες (Μοντέλο: Μη γραμμικό BGK). Κατανομές ταχύτητας $u_x(t, y)$ (πάνω αριστερά), ταχύτητας $u_y(t, y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t, y)$ (μέση αριστερά), θερμορροής $q_y(t, y)$ (μέση δεξιά), πυκνότητας $\rho(t, y)$ (κάτω αριστερά) και πίεσης $P(t, y)$ (κάτω δεξιά) για ταχύτητα πλακών $U_0 = 0.1$, λόγο θερμοκρασιών $\beta = 0.7$ και παράμετρο αραιοποίησης $\delta_0 = 1$



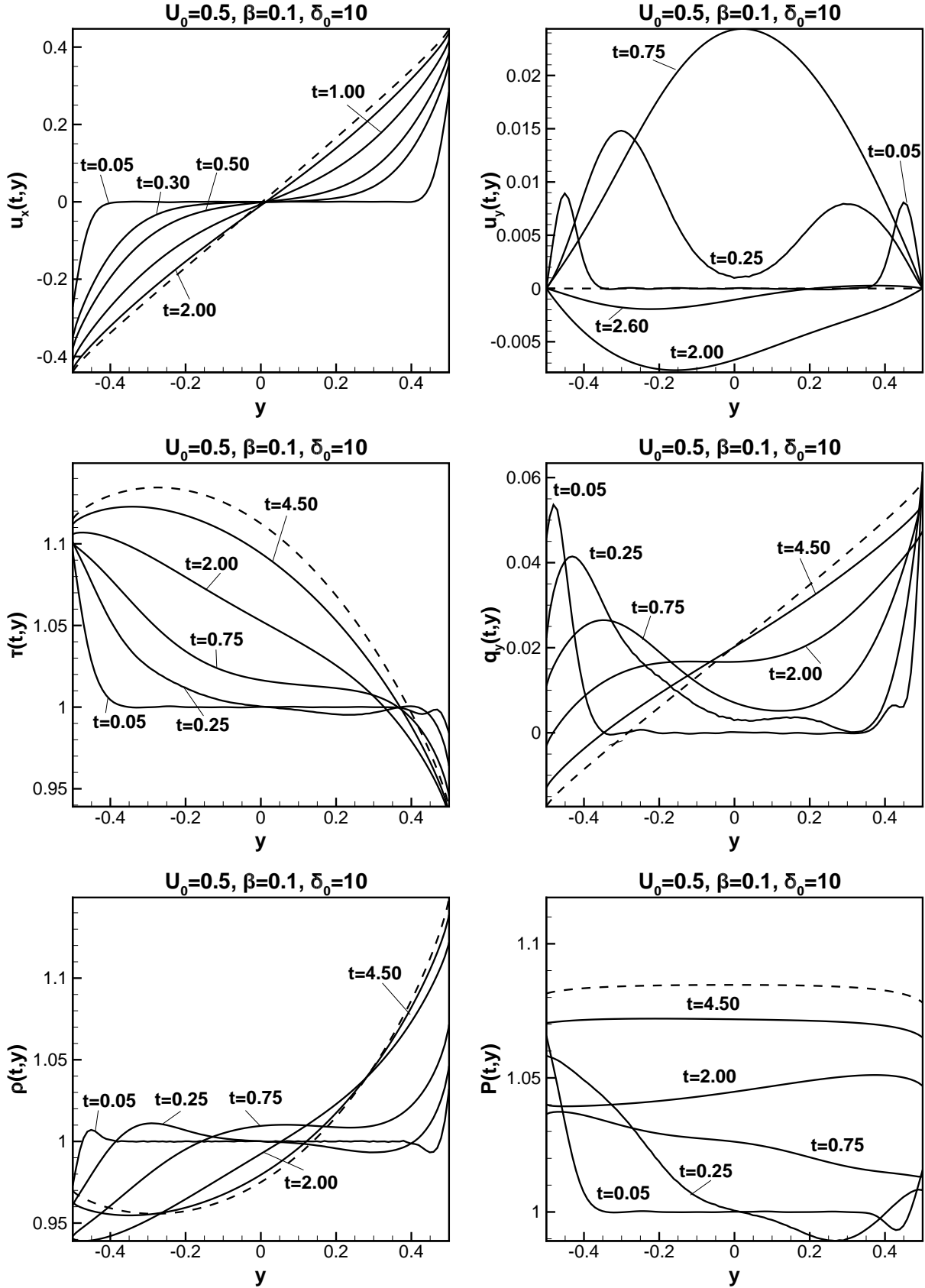
Σχήμα 5.21: Χρονομεταβαλλόμενη ροή Couette με μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες (Μοντέλο: Μη γραμμικό BGK). Κατανομές ταχύτητας $u_x(t, y)$ (πάνω αριστερά), ταχύτητας $u_y(t, y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t, y)$ (μέση αριστερά), θερμορροής $q_y(t, y)$ (μέση δεξιά), πυκνότητας $\rho(t, y)$ (κάτω αριστερά) και πίεσης $P(t, y)$ (κάτω δεξιά) για ταχύτητα πλακών $U_0 = 0.1$, λόγο θερμοκρασιών $\beta = 0.7$ και παράμετρο αραιοποίησης $\delta_0 = 10$



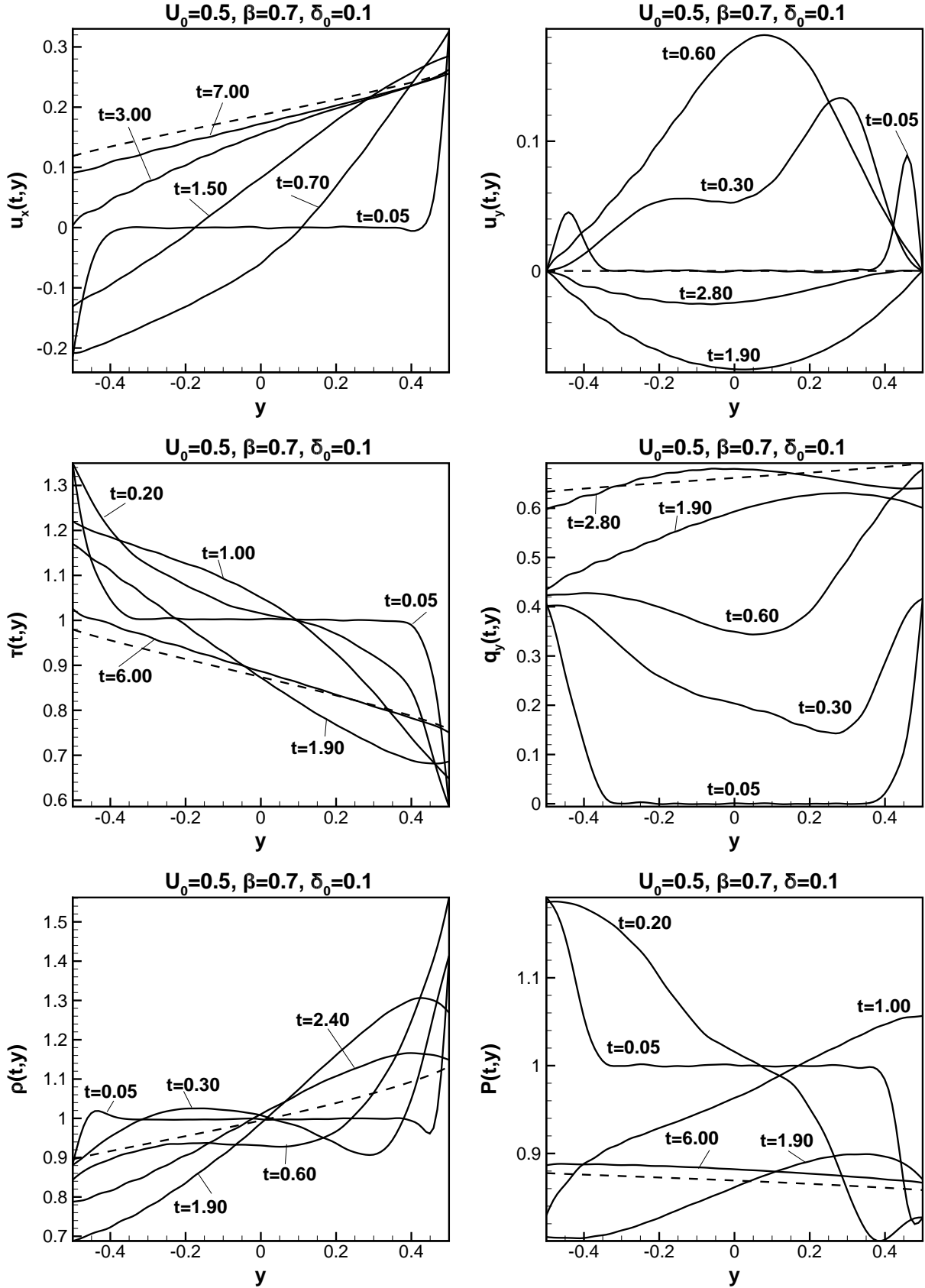
Σχήμα 5.22: Χρονομεταβαλλόμενη ροή Couette με μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες (Μοντέλο: Μη γραμμικό BGK). Κατανομές ταχύτητας $u_x(t,y)$ (πάνω αριστερά), ταχύτητας $u_y(t,y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t,y)$ (μέση αριστερά), θερμορροής $q_y(t,y)$ (μέση δεξιά), πυκνότητας $\rho(t,y)$ (κάτω αριστερά) και πίεσης $P(t,y)$ (κάτω δεξιά) για ταχύτητα πλακών $U_0 = 0.5$, λόγο θερμοκρασιών $\beta = 0.1$ και παράμετρο αραιοποίησης $\delta_0 = 0.1$



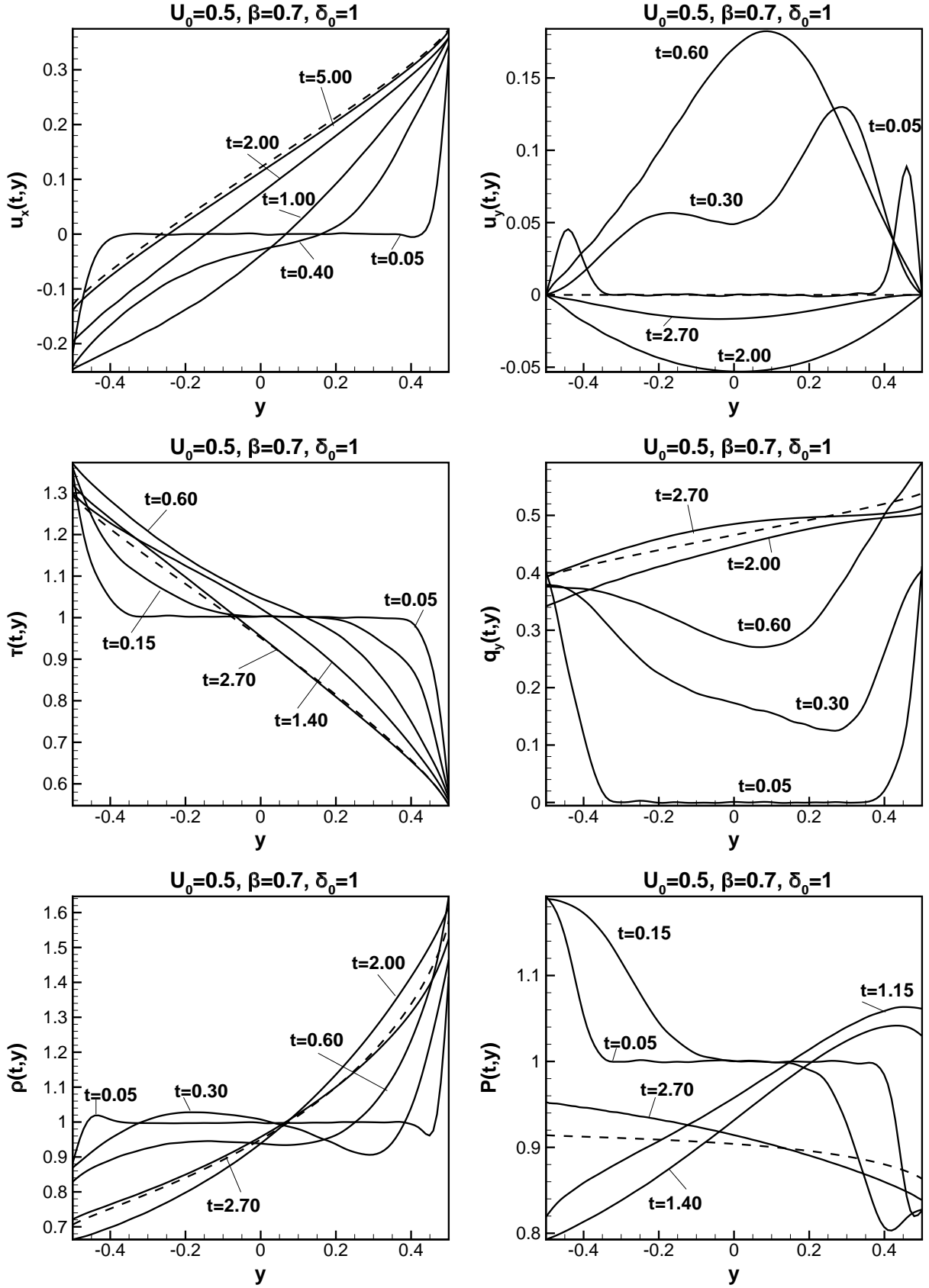
Σχήμα 5.23: Χρονομεταβαλλόμενη ροή Couette με μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες (Μοντέλο: Μη γραμμικό BGK). Κατανομές ταχύτητας $u_x(t,y)$ (πάνω αριστερά), ταχύτητας $u_y(t,y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t,y)$ (μέση αριστερά), θερμοροής $q_y(t,y)$ (μέση δεξιά), πυκνότητας $\rho(t,y)$ (κάτω αριστερά) και πίεσης $P(t,y)$ (κάτω δεξιά) για ταχύτητα πλακών $U_0 = 0.5$, λόγο θερμοκρασιών $\beta = 0.1$ και παράμετρο αραιοποίησης $\delta_0 = 1$



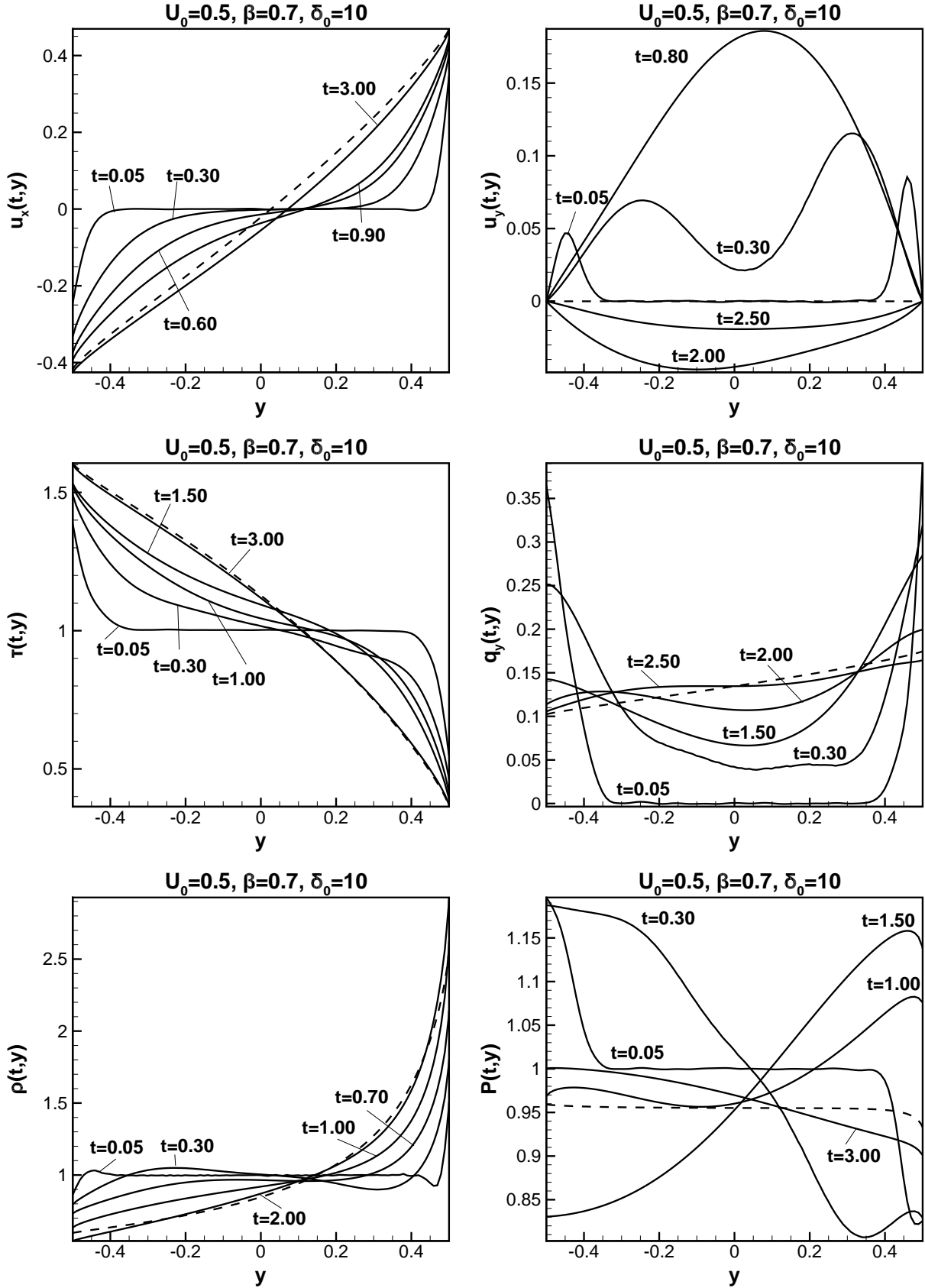
Σχήμα 5.24: Χρονομεταβαλλόμενη ροή Couette με μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες (Μοντέλο: Μη γραμμικό BGK). Κατανομές ταχύτητας $u_x(t, y)$ (πάνω αριστερά), ταχύτητας $u_y(t, y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t, y)$ (μέση αριστερά), θερμορροής $q_y(t, y)$ (μέση δεξιά), πυκνότητας $\rho(t, y)$ (κάτω αριστερά) και πίεσης $P(t, y)$ (κάτω δεξιά) για ταχύτητα πλακών $U_0 = 0.5$, λόγο θερμοκρασιών $\beta = 0.1$ και παράμετρο αραιοποίησης $\delta_0 = 10$



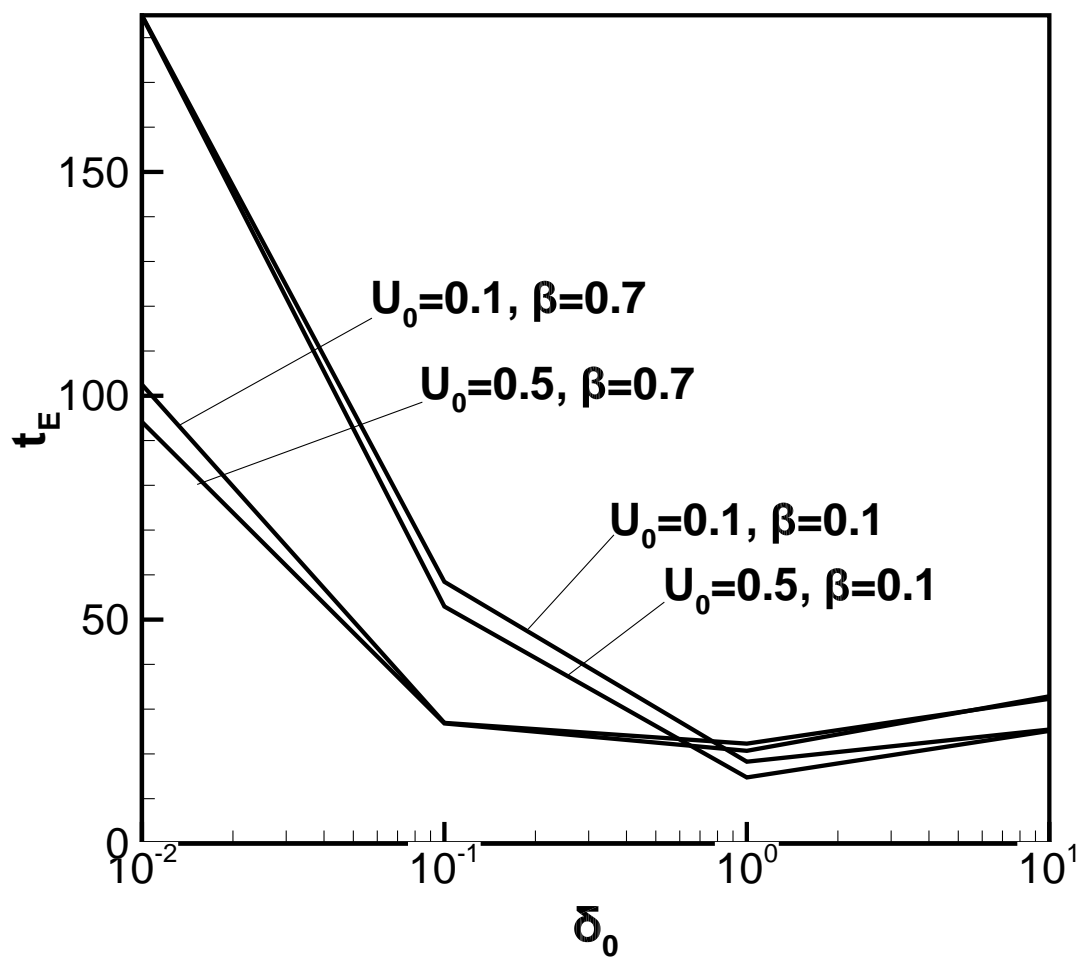
Σχήμα 5.25: Χρονομεταβαλλόμενη ροή Couette με μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες (Μοντέλο: Μη γραμμικό BGK). Κατανομές ταχύτητας $u_x(t,y)$ (πάνω αριστερά), ταχύτητας $u_y(t,y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t,y)$ (μέση αριστερά), θερμορροής $q_y(t,y)$ (μέση δεξιά), πυκνότητας $\rho(t,y)$ (κάτω αριστερά) και πίεσης $P(t,y)$ (κάτω δεξιά) για ταχύτητα πλακών $U_0 = 0.5$, λόγο θερμοκρασιών $\beta = 0.7$ και παράμετρο αραιοποίησης $\delta_0 = 0.1$



Σχήμα 5.26: Χρονομεταβαλλόμενη ροή Couette με μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες (Μοντέλο: Μη γραμμικό BGK). Κατανομές ταχύτητας $u_x(t,y)$ (πάνω αριστερά), ταχύτητας $u_y(t,y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t,y)$ (μέση αριστερά), θερμορροής $q_y(t,y)$ (μέση δεξιά), πυκνότητας $\rho(t,y)$ (κάτω αριστερά) και πίεσης $P(t,y)$ (κάτω δεξιά) για ταχύτητα πλακών $U_0 = 0.5$, λόγο θερμοκρασιών $\beta = 0.7$ και παράμετρο αραιοποίησης $\delta_0 = 1$



Σχήμα 5.27: Χρονομεταβαλλόμενη ροή Couette με μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες (Μοντέλο: Μη γραμμικό BGK). Κατανομές ταχύτητας $u_x(t,y)$ (πάνω αριστερά), ταχύτητας $u_y(t,y)$ (πάνω δεξιά), θερμοκρασίας $\tau(t,y)$ (μέση αριστερά), θερμορροής $q_y(t,y)$ (μέση δεξιά), πυκνότητας $\rho(t,y)$ (κάτω αριστερά) και πίεσης $P(t,y)$ (κάτω δεξιά) για ταχύτητα πλακών $U_0 = 0.5$, λόγο θερμοκρασιών $\beta = 0.7$ και παράμετρο αραιοποίησης $\delta_0 = 10$



Σχήμα 5.28: Αδιάστατος συνολικός χρόνος ισορροπίας t_E συναρτήσει της παραμέτρου αραιοποίησης δ_0 στη χρονομεταβαλλόμενη ροή Couette με μεταφορά θερμότητας σε παράλληλες πλάκες

Κεφάλαιο 6

Συμπεράσματα και μελλοντική έρευνα

Η συγκεκριμένη διδακτορική διατριβή έχει σαν στόχο την μελέτη μη μόνιμων ροών και μετάδοσης θερμότητας σε αραιοποιημένα αέρια και μίγματα αερίων. Παρουσιάζεται μια μεθοδολογία επίλυσης των μεταβατικών φαινομένων, η οποία είναι εφαρμόσιμη σε όλο το εύρος της παραμέτρου αραιοποίησης. Υπολογίζονται οι αδιάστατες μακροσκοπικές ποσότητες όπως η πυκνότητα, η ταχύτητα, η θερμορροή, και η παροχή ως χρονομεταβαλλόμενες κατανομές, καθώς και ο συνολικός χρόνος που απαιτείται από την έναρξη του φαινομένου έως τη μόνιμη κατάσταση (χρόνος ισορροπίας).

Αρχικά διερευνώνται πλήρως ανεπτυγμένες ροές Poiseuille ενός μονοατομικού αερίου σε αγωγούς μεγάλου μήκους ανάμεσα σε πλάκες, ορθογώνιους και κυλινδρικούς αγωγούς. Επίσης μελετάται η ροή Couette ανάμεσα σε πλάκες. Σε όλες τις ροές αυτές τα φαινόμενα στα άκρα του αγωγού μπορούν να αγνοηθούν και οι ροές μπορούν να γραμμικοποιηθούν καθώς πρόκειται για ροές με μικρούς αριθμούς Re και Ma . Η περιγραφή των ροών στηρίζεται στα γραμμικοποιημένα χρονομεταβαλλόμενα μοντέλα BGK και Shackle. Η διακριτοποίηση των κινητικών εξισώσεων γίνεται με πεπερασμένες διαφορές και αναπτύσσονται τρία διαφορετικά αριθμητικά σχήματα, εκ των οποίων το ένα είναι ρητό και τα δύο είναι ημιπεπλεγμένα. Η επίλυσή τους γίνεται με ντετερμινιστικό τρόπο με την αριθμητική μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων. Τα αριθμητικά αποτελέσματα συγκρίνονται με την αναλυτική λύση στο υδροδυναμικό όριο καθώς και με αποτελέσματα που αποκτώνται με τη μέθοδο DSMC. Και στις δύο περιπτώσεις υπάρχει πολύ καλή συμφωνία. Γενικά, η συμπεριφορά των χρονομεταβαλλόμενων κατανομών της παροχής για τις ροές Poiseuille και της διατμητικής τάσης για τη ροή Couette είναι η αναμενόμενη. Ξεκινούν από μηδενική τιμή

και στη συνέχεια αυξάνονται σταδιακά και προσεγγίζουν ασυμπτωτικά τις τιμές της αντίστοιχης μόνιμης ροής. Ο χρόνος ισορροπίας ως συνάρτηση της παραμέτρου αραιοποίησης, όπως προκύπτει, ακολουθεί μια μη μονότονη συμπεριφορά. Ξεκινώντας από μια αρχική τιμή για μικρές τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης, μειώνεται σταδιακά μέχρι να αποκτήσει μια ελάχιστη τιμή κοντά στο σημείο όπου παρατηρείται το γνωστό ελάχιστο Knudsen, και στη συνέχεια αρχίζει να αυξάνει και πάλι καθώς η παράμετρος αραιοποίησης μεγαλώνει. Παρουσιάζεται αναλυτικά η διαδικασία που πρέπει να ακολουθηθεί για τη διαστατοποίηση των αριθμητικών αποτελεσμάτων, καθώς αυτή δεν είναι προφανής.

Στη συνέχεια, μελετώνται μεταβατικές γραμμικοποιημένες ροές δυαδικού μίγματος αερίων σε πλάκες και κυλινδρικούς αγωγούς. Και εδώ ισχύουν οι παρατηρήσεις που έγιναν στην προηγούμενη παράγραφο, σχετικά με τη γραμμικοποίηση. Εξετάζονται ροές οφειλόμενες σε κλίσεις πίεσης, θερμοκρασίας, ή συγκέντρωσης κατά τη διεύθυνση της ροής. Διερευνάται η επίπτωση της διαφοράς μεταξύ των μοριακών μαζών των συστατικών του μίγματος. Για το λόγο αυτό επιλέγεται να μελετηθούν δύο συγκεκριμένα μίγματα αερίων. Το μίγμα Ne-Ar με μικρή διαφορά μοριακών μαζών και το μίγμα He-Xe με μεγάλη διαφορά μοριακών μαζών. Στο δεύτερο μίγμα παρατηρείται έντονο το φαινόμενο του διαχωρισμού των συστατικών του. Εφαρμόζεται το χρονομεταβαλλόμενο κινητικό μοντέλο McCormack και διακριτοποιείται με τα αριθμητικά σχήματα που αναφέρθηκαν στην προηγούμενη παράγραφο. Η επίλυση γίνεται και εδώ με την μέθοδο διακριτών ταχυτήτων. Μελετάται η επίπτωση της παραμέτρου αραιοποίησης και της συγκέντρωσης του μίγματος στον υπολογισμό των παροχών. Οι χρόνοι ισορροπίας υπολογίζονται ξεχωριστά για κάθε συστατικό του μίγματος. Τα αποτελέσματα της ροής, που οφείλεται σε κλίση πίεσης, συγκρίνονται με τα αντίστοιχα που αποκτώνται με τη μέθοδο DSMC και βρίσκεται πολύ καλή συμφωνία μεταξύ τους.

Τέλος, μελετώνται μη γραμμικά φαινόμενα μεταφοράς σε όλο το εύρος του Kn , όπου το αίτιο δημιουργίας τους μπορεί να είναι αυθαίρετα μεγάλο. Κατά συνέπεια, η μεταβολή στην κατανομή f των κινητικών εξισώσεων δεν μπορεί να θεωρηθεί μικρή και επομένως αυτές δεν μπορούν να γραμμικοποιηθούν. Συγκεκριμένα, μελετάται η μεταφορά θερμότητας ανάμεσα σε πλάκες με την απότομη επιβολή διαφοράς θερμοκρασίας σε αυτές. Επίσης, εξετάζεται, στην ίδια γεωμετρία, η συνδυασμένη ροή Couette με ταυτόχρονη μεταφορά θερμότητας. Η μοντελοποίηση των εξισώ-

σεων γίνεται και στις δύο περιπτώσεις με το μη γραμμικό χρονομεταβαλλόμενο κινητικό μοντέλο BGK, ενώ για την πρώτη περίπτωση εξετάζεται και το μη γραμμικό χρονομεταβαλλόμενο μοντέλο Shakhov. Τα αποτελέσματα αφορούν στη χρονική εξέλιξη των κατανομών της πυκνότητας, της ταχύτητας, της θερμορροής, της πίεσης και της θερμοκρασίας. Επίσης, καταγράφονται και οι χρόνοι ισορροπίας. Παρατηρείται μια ταλαντωτική συμπεριφορά των κατανομών όλων των μακροσκοπικών ποσοτήτων, η οποία οφείλεται στη δημιουργία κυματισμών πυκνότητας λόγω της μεταβολής της θερμοκρασίας των τοιχωμάτων. Επίσης, προκύπτει ότι η συνιστώσα της ταχύτητας κάθετη στα τοιχώματα στα αρχικά χρονικά βήματα ταλαντώνεται γύρω από τη μηδενική τιμή μέχρι που τελικά την προσεγγίζει καθώς το φαινόμενο εξελίσσεται στο χρόνο. Καθώς ο βαθμός αεροποίησης ελαττώνεται και η διαφορά της θερμοκρασίας ανάμεσα στις πλάκες μεγαλώνει, το θερμοκρασιακό άλμα στο θερμό τοίχωμα είναι μεγαλύτερο από ό,τι είναι στο κρύο τοίχωμα. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα τη μη συμμετρική κατανομή των μακροσκοπικών ποσοτήτων.

Οι περιπτώσεις των μεταβατικών ροών που μελετώνται στην παρούσα διατριβή μπορούν να θεωρηθούν ως πρότυπες ροές και δεν εξαντλούν τις πρακτικές εφαρμογές των χρονομεταβαλλόμενων ροών. Επομένως το πεδίο μελλοντικής έρευνας είναι μεγάλο. Περιλαμβάνει την ανάπτυξη νέων, ισχυρότερων, αριθμητικών σχημάτων ως προς τη χρονική παράγωγο, για τη μελέτη μεταβατικών ροών μονατομικών αερίων ή μιγμάτων αερίων σε πιο σύνθετες γεωμετρίες, όπως αγωγοί μικρού μήκους, οπές και ακροφύσια διαφόρων διατομών ή ακόμη και ροών ανάμεσα σε κυλίνδρους ή σε κοιλότητες. Επίσης είναι ενδιαφέρον να μελετηθούν πιο σύνθετα μοντέλα ενδομοριακού δυναμικού και οριακών συνθηκών με στόχο να αξιολογηθεί η επίδρασή τους στην χρονική εξέλιξη των διαφόρων ροών. Τέλος, μπορεί να διερευνηθεί η δυνατότητα εφαρμογής υβριδικών αριθμητικών σχημάτων με σκοπό την αντιμετώπιση του υπολογιστικού κόστους κοντά στην ελεύθερη μοριακή και στην υδροδυναμική περιοχή.

Παράρτημα Α

Γραμμικοποίηση αδιαστατοποίηση και προβολή κινητικών εξισώσεων χρονομεταβαλλόμενου μοντέλου BGK

A.1 Γενική μορφή εξίσωσης BGK και γραμμικοποίηση κατανομής

Το χρονομεταβαλλόμενο κινητικό μοντέλο BGK στην περίπτωση που έχουμε μηδενικό πεδίο εξωτερικών δυνάμεων γράφεται ως

$$\left(\frac{\partial}{\partial t'} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \right) f = \nu (f_{loc}^M - f) \quad (\text{A.1.1})$$

Θα παρουσιασθεί η διαδικασία γραμμικοποίησης και αδιαστατοποίησης του μοντέλου BGK για τη ροή ανάμεσα σε πλάκες, όπου υποθέτουμε ότι ενδιαφέρουν οι ακόλουθες μακροσκοπικές ποσότητες

Αριθμητική πυκνότητα

$$n(t', \mathbf{r}') = \int_{-\infty}^{\infty} f(t', \mathbf{r}', \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} \quad (\text{A.1.2})$$

Ταχύτητα

$$\mathbf{u}'(t', \mathbf{r}') = \frac{1}{n(t', \mathbf{r}')} \int_{-\infty}^{\infty} \boldsymbol{\xi} f(t', \mathbf{r}', \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} \quad (\text{A.1.3})$$

Θερμοκρασία

$$T(t', \mathbf{r}') = \frac{m}{3k_B n(t', \mathbf{r}')} \int_{-\infty}^{\infty} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}')^2 f(t', \mathbf{r}', \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}. \quad (\text{A.1.4})$$

Ο συμβολισμός $\int_{-\infty}^{\infty} (\cdot) d\boldsymbol{\xi}$ αντιστοιχεί στο τριπλό ολοκλήρωμα $\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (\cdot) d\xi_x d\xi_y d\xi_z$.

Η τοπική κατανομή Maxwell δίνεται από τη σχέση:

$$f_{loc}^M = n(t', \mathbf{r}') \left(\frac{m}{2\pi k_B T(t', \mathbf{r}')} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{m(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}'(t', \mathbf{r}'))^2}{2k_B T(t', \mathbf{r}')} \right]$$

και η απόλυτη κατανομή Maxwell δίνεται από τη σχέση:

$$f_{abs}^M = n_0 \left(\frac{m}{2\pi k_B T_0} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{m(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}'_0)^2}{2k_B T_0} \right]$$

όπου οι ποσότητες με δείκτη 0 είναι ποσότητες αναφοράς. Αν χρησιμοποιηθεί ο ορισμός της πιο πιθανής μοριακής ταχύτητας

$$v_0 = \frac{m}{2k_B T_0}, \quad (\text{A.1.5})$$

καθώς και το γεγονός πως στη ροή που μελετούμε ισχύει $\mathbf{u}'_0 = \mathbf{0}$, η απόλυτη κατανομή Maxwell γράφεται τελικά ως

$$f_{abs}^M = \frac{n_0}{\pi^{3/2} v_0^3} \exp \left(-\frac{\boldsymbol{\xi}^2}{v_0^2} \right) \quad (\text{A.1.6})$$

Υποθέτουμε ότι η ροή είναι πλήρως ανεπτυγμένη και ότι η διεύθυνσή της ταυτίζεται με τη διεύθυνση του άξονα των x . Ταυτόχρονα με τη γραμμικοποίηση των εξισώσεων θα γίνει και η αδιαστατοποίησή τους. Η αδιαστατοποίηση των χωρικών μεταβλητών γίνεται με τη χαρακτηριστική διάσταση του προβλήματος, η οποία για τη ροή ανάμεσα σε πλάκες είναι η απόσταση H μεταξύ των πλακών, ενώ της χρονικής μεταβλητής t' με τον λόγο H/v_0 . Τέλος η μοριακή ταχύτητα αδιαστατοποιείται ως $\mathbf{c} = \boldsymbol{\xi}/v_0$.

Η γραμμικοποίηση του κινητικού μοντέλου επιτυγχάνεται αν αντικατασταθεί η κατανομή f με την γραμμικοποιημένη της σχέση

$$f = f_{abs}^M (1 + X_p h + x X_p) \quad (\text{A.1.7})$$

με

$$\|X_p\| = \left\| \frac{1}{P_0} \frac{dP}{dx} \right\| \ll 1, \quad (\text{A.1.8})$$

όπου x η αδιάστατη συνιστώσα του διανύσματος θέσης προς την κατεύθυνση της ροής και $h(t', y', z', \boldsymbol{\xi})$ είναι μια νέα συνάρτηση κατανομής (η οποία είναι ανεξάρτητη της χωρικής μεταβλητής x').

A.2 Γραμμικοποίηση και αδιαστατοποίηση των ροών της f

Αριθμητική Πυκνότητα

Αντικαθιστώντας την σχέση (A.1.7) στη σχέση (A.1.2) παίρνουμε

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{n_0}{\pi^{3/2} v_0^3} \exp \left(-\frac{\boldsymbol{\xi}^2}{v_0^2} \right) (1 + h X_p + x X_p) d\boldsymbol{\xi} \quad (\text{A.2.1})$$

Εισάγοντας τις αδιάστατες ποσότητες, παίρνουμε διαδοχικά

$$\begin{aligned} n &= \frac{n_0}{\pi^{3/2} v_0^3} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{v_0^2 \mathbf{c}^2}{v_0^2} \right) (1 + h X_p + x X_p) v_0^3 d\mathbf{c} \Rightarrow \\ n &= \frac{n_0}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} (1 + h X_p + x X_p) e^{-\mathbf{c}^2} d\mathbf{c} \end{aligned}$$

Συνεχίζοντας τις πράξεις, έχουμε

$$n = \frac{n_0}{\pi^{3/2}} \left(\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} d\mathbf{c}}_{\pi^{3/2}} + \int_{-\infty}^{\infty} h X_p e^{-c^2} d\mathbf{c} + x X_p \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} d\mathbf{c}}_{\pi^{3/2}} \right) \Rightarrow$$

$$n = n_0 + n_0 x X_p + \frac{n_0}{\pi^{3/2}} X_p \int_{-\infty}^{\infty} h e^{-c^2} d\mathbf{c}$$

Ορίζοντας

$$\rho = \frac{n - n_0}{n_0} \frac{1}{X_p} - x, \quad (\text{A.2.2})$$

παίρνουμε τελικά

$$\rho = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} h e^{-c^2} d\mathbf{c} \quad (\text{A.2.3})$$

Μακροσκοπική Ταχύτητα

Αντικαθιστώντας τη σχέση (A.1.7) στη σχέση (A.1.3) για κάθε μία συνιστώσα του διανύσματος της ταχύτητας έχουμε

$$u_i' = \frac{1}{n} \int_{-\infty}^{\infty} \xi_i \frac{n_0}{\pi^{3/2} v_0^3} \exp\left(-\frac{\xi^2}{v_0^2}\right) (1 + h X_p + x X_p) d\xi \quad (\text{A.2.4})$$

Εισάγοντας τις αδιάστατες ποσότητες, παίρνουμε διαδοχικά

$$u_i' = \frac{n_0}{n} \frac{1}{\pi^{3/2} v_0^3} \int_{-\infty}^{\infty} v_0 c_i \exp\left(-\frac{v_0^2 c^2}{v_0^2}\right) (1 + h X_p + x X_p) v_0^3 d\mathbf{c} \Rightarrow$$

$$u_i' = \frac{n_0}{n} \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} v_0 c_i (1 + h X_p + x X_p) e^{-c^2} d\mathbf{c} \Rightarrow$$

$$\frac{u_i'}{v_0} = \frac{n_0}{n} \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} c_i (1 + h X_p + x X_p) e^{-c^2} d\mathbf{c} \Rightarrow$$

$$\frac{u_i'}{v_0} = \frac{n_0}{n} \frac{1}{\pi^{3/2}} \left(\int_{-\infty}^{\infty} c_i e^{-c^2} d\mathbf{c} + \int_{-\infty}^{\infty} c_i h X_p e^{-c^2} d\mathbf{c} + x X_p \int_{-\infty}^{\infty} c_i e^{-c^2} d\mathbf{c} \right)$$

Το πρώτο και το τρίτο ολοκλήρωμα ισούνται με 0, επομένως παίρνουμε

$$\frac{u_i'}{v_0} = \frac{n_0}{n} \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} c_i h X_p e^{-c^2} d\mathbf{c} \quad (\text{A.2.5})$$

Χρειαζόμαστε τώρα έναν τρόπο να εκφράσουμε την ποσότητα $1/n$. Είναι

$$\begin{aligned}\frac{1}{n} &= \frac{1}{n_0} - \underbrace{\frac{\Delta n}{n-n_0}}_{\frac{\Delta n}{n_0}} \frac{1}{n_0^2} + O(\Delta n^2) \Rightarrow \\ \frac{n_0}{n} &= 1 - \frac{\Delta n}{n_0} + O(\Delta n^2)\end{aligned}\quad (\text{A.2.6})$$

Διατηρώντας όρους μέχρι πρώτης τάξης ως προς Δn και αντικαθιστώντας την (A.2.6) στην (A.2.5) παίρνουμε

$$\begin{aligned}\frac{u_i'}{v_0} &= \left(1 - \frac{\Delta n}{n_0}\right) \frac{1}{\pi^{3/2}} \left(\int_{-\infty}^{\infty} c_i h X_p e^{-c^2} d\mathbf{c} \right) = \\ &= \frac{1}{\pi^{3/2}} \left(\int_{-\infty}^{\infty} c_i h X_p e^{-c^2} d\mathbf{c} \right) - \frac{1}{\pi^{3/2}} \frac{\Delta n}{n_0} \left(\int_{-\infty}^{\infty} c_i h X_p e^{-c^2} d\mathbf{c} \right)\end{aligned}$$

Το τελευταίο ολοκλήρωμα είναι σχεδόν 0 επειδή $\Delta n X_p \approx 0$ ως το γινόμενο δύο πολύ μικρών ποσοτήτων. Αν τέλος ορίσουμε

$$u_i = \frac{u_i'}{v_0} \frac{1}{X_p}, \quad (\text{A.2.7})$$

καταλήγουμε στη σχέση

$$u_i = \frac{1}{\pi^{3/2}} \left(\int_{-\infty}^{\infty} c_i h e^{-c^2} d\mathbf{c} \right) \quad (\text{A.2.8})$$

Θερμοκρασία

Αντικαθιστώντας τη σχέση (A.1.7) στη σχέση (A.1.4), παίρνουμε

$$T = \frac{m}{3k_B n} \int_{-\infty}^{\infty} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}')^2 \frac{n_0}{\pi^{3/2} v_0^3} \exp\left(-\frac{\boldsymbol{\xi}^2}{v_0^2}\right) (1 + hX_p + xX_p) d\boldsymbol{\xi} \quad (\text{A.2.9})$$

Εισάγοντας τις αδιάστατες ποσότητες, παίρνουμε διαδοχικά

$$\begin{aligned}T &= \frac{1}{3Rn} \int_{-\infty}^{\infty} (v_0 \mathbf{c} - v_0 X_p \mathbf{u})^2 \frac{n_0}{\pi^{3/2} v_0^3} \exp\left(-\frac{v_0^2 \mathbf{c}^2}{v_0^2}\right) (1 + hX_p + xX_p) v_0^3 d\mathbf{c} \Rightarrow \\ T &= \frac{n_0}{3Rn} \frac{1}{\pi^{3/2}} v_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} (\mathbf{c} - X_p \mathbf{u})^2 (1 + hX_p + xX_p) e^{-c^2} d\mathbf{c} \Rightarrow \\ T &= \frac{n_0}{3Rn} \frac{1}{\pi^{3/2}} (2RT_0) \int_{-\infty}^{\infty} (\mathbf{c} - X_p \mathbf{u})^2 (1 + hX_p + xX_p) e^{-c^2} d\mathbf{c} \Rightarrow \\ T &= \frac{2}{3} \frac{n_0}{n} \frac{1}{\pi^{3/2}} T_0 \int_{-\infty}^{\infty} (\mathbf{c} - X_p \mathbf{u})^2 (1 + hX_p + xX_p) e^{-c^2} d\mathbf{c}\end{aligned}$$

Συνεχίζοντας την εκτέλεση πράξεων και διώχνοντας τους όρους του X_p , που είναι μεγαλύτεροι

της πρώτης τάξης, όταν αυτοί προκύπτουν στην πορεία, έχουμε

$$\begin{aligned}
 T &= \frac{2}{3} \frac{n_0}{n} \frac{1}{\pi^{3/2}} T_0 \int_{-\infty}^{\infty} (\mathbf{c}^2 - 2X_p \mathbf{c} \cdot \mathbf{u} + X_p^2) (1 + hX_p + xX_p) e^{-c^2} d\mathbf{c} \Rightarrow \\
 T &= \frac{2}{3} \frac{n_0}{n} \frac{1}{\pi^{3/2}} T_0 \int_{-\infty}^{\infty} (\mathbf{c}^2 - 2X_p \mathbf{c} \cdot \mathbf{u}) (1 + hX_p + xX_p) e^{-c^2} d\mathbf{c} \Rightarrow \\
 T &= \frac{2}{3} \frac{n_0}{n} \frac{1}{\pi^{3/2}} T_0 \int_{-\infty}^{\infty} [\mathbf{c}^2 (1 + hX_p + xX_p) - 2X_p (1 + hX_p + xX_p) \mathbf{c} \cdot \mathbf{u}] e^{-c^2} d\mathbf{c} \Rightarrow \\
 T &= \frac{2}{3} \frac{n_0}{n} \frac{1}{\pi^{3/2}} T_0 \int_{-\infty}^{\infty} (\mathbf{c}^2 (1 + hX_p + xX_p) - (2X_p + 2hX_p^2 + 2xX_p^2) \mathbf{c} \cdot \mathbf{u}) e^{-c^2} d\mathbf{c} \Rightarrow \\
 T &= \frac{2}{3} \frac{n_0}{n} \frac{1}{\pi^{3/2}} T_0 \int_{-\infty}^{\infty} (\mathbf{c}^2 (1 + hX_p + xX_p) - 2X_p \mathbf{c} \cdot \mathbf{u}) e^{-c^2} d\mathbf{c} \Rightarrow \\
 T &= \frac{2}{3} \frac{n_0}{n} \frac{1}{\pi^{3/2}} T_0 \int_{-\infty}^{\infty} (\mathbf{c}^2 + h\mathbf{c}^2 X_p + xX_p \mathbf{c}^2 - 2X_p \mathbf{c} \cdot \mathbf{u}) e^{-c^2} d\mathbf{c}
 \end{aligned}$$

Συνεχίζοντας τις πράξεις, παίρνουμε

$$\begin{aligned}
 T &= \frac{2}{3} \frac{n_0}{n} \frac{T_0}{\pi^{3/2}} \left\{ \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{c}^2 e^{-c^2} d\mathbf{c}}_{3\pi^{3/2}/2} + X_p \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{c}^2 h e^{-c^2} d\mathbf{c} + xX_p \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{c}^2 e^{-c^2} d\mathbf{c}}_{3\pi^{3/2}/2} - 2X_p \mathbf{u} \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{c} e^{-c^2} d\mathbf{c}}_0 \right\} \Rightarrow \\
 T &= \frac{2}{3} \frac{n_0}{n} \frac{1}{\pi^{3/2}} T_0 \left\{ \frac{3}{2} \pi^{3/2} + X_p \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{c}^2 h e^{-c^2} d\mathbf{c} + \frac{3}{2} \pi^{3/2} xX_p \right\} \Rightarrow \\
 T &= \frac{n_0}{n} T_0 \left\{ 1 + \frac{2}{3} \frac{1}{\pi^{3/2}} X_p \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{c}^2 h e^{-c^2} d\mathbf{c} + xX_p \right\}
 \end{aligned}$$

Αντικαθιστώντας στην τελευταία εξίσωση την ποσότητα n_0/n από τη σχέση (Α.2.6), παίρνουμε

$$\begin{aligned}
 T &= \left(1 - \frac{\Delta n}{n_0} \right) T_0 \left\{ 1 + \frac{2}{3} \frac{1}{\pi^{3/2}} X_p \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{c}^2 h e^{-c^2} d\mathbf{c} + xX_p \right\} \Rightarrow \\
 T &= T_0 \left\{ 1 + \frac{2}{3} \frac{1}{\pi^{3/2}} X_p \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{c}^2 h e^{-c^2} d\mathbf{c} + xX_p \right\} - \frac{\Delta n}{n_0} T_0 \left\{ 1 + \frac{2}{3} \frac{1}{\pi^{3/2}} X_p \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{c}^2 h e^{-c^2} d\mathbf{c} + xX_p \right\} \Rightarrow \\
 T &= T_0 + T_0 \frac{2}{3} \frac{1}{\pi^{3/2}} X_p \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{c}^2 h e^{-c^2} d\mathbf{c} + T_0 xX_p - \frac{\Delta n}{n_0} T_0 - \underbrace{\frac{\Delta n X_p}{0}}_0 \frac{T_0}{n_0} \frac{2}{3} \frac{1}{\pi^{3/2}} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{c}^2 h e^{-c^2} d\mathbf{c} + x \right) \Rightarrow
 \end{aligned}$$

$$T = T_0 + T_0 \frac{2}{3} \frac{1}{\pi^{3/2}} X_p \int_{-\infty}^{\infty} c^2 h e^{-c^2} d\mathbf{c} + T_0 x X_p - \frac{\Delta n}{n_0} T_0$$

Από τον ορισμό του ρ έχουμε

$$\frac{\Delta n}{n_0} = X_p (\rho + x)$$

επομένως

$$\begin{aligned} T &= T_0 + T_0 \frac{2}{3} \frac{1}{\pi^{3/2}} X_p \int_{-\infty}^{\infty} c^2 h e^{-c^2} d\mathbf{c} + T_0 x X_p - X_p (\rho + x) T_0 \Rightarrow \\ T &= T_0 + T_0 \frac{2}{3} \frac{1}{\pi^{3/2}} X_p \int_{-\infty}^{\infty} c^2 h e^{-c^2} d\mathbf{c} - X_p T_0 \rho \Rightarrow \\ T &= T_0 + T_0 \frac{2}{3} \frac{1}{\pi^{3/2}} X_p \int_{-\infty}^{\infty} c^2 h e^{-c^2} d\mathbf{c} - X_p T_0 \underbrace{\frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} h e^{-c^2} d\mathbf{c}}_{\rho} \end{aligned}$$

Ορίζοντας

$$\tau = \frac{T - T_0}{T_0} \frac{1}{X_p}, \quad (\text{A.2.10})$$

παίρνουμε τελικά

$$\tau = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{2}{3} c^2 - 1 \right) h e^{-c^2} d\mathbf{c} \quad (\text{A.2.11})$$

A.3 Γραμμικοποίηση και αδιαστατοποίηση εξίσωσης BGK

Στα επόμενα ο συμβολισμός $(\cdot)|_0$ αντιστοιχεί στον $(\cdot)|_{n=n_0, \mathbf{u}'=\mathbf{u}'_0, T=T_0}$. Αρχικά αναπτύσσουμε την τοπική κατανομή Maxwell σε σειρά Taylor γύρω από την απόλυτη κατανομή Maxwell διατηρώντας όρους μέχρι πρώτης τάξης:

$$f_{loc}^M = f_{abs}^M + (n - n_0) \frac{\partial f_{loc}^M}{\partial n} \Big|_0 + (\mathbf{u}' - \mathbf{u}'_0) \cdot \frac{\partial f_{loc}^M}{\partial \mathbf{u}'} \Big|_0 + (T - T_0) \frac{\partial f_{loc}^M}{\partial T} \Big|_0 \quad (\text{A.3.1})$$

Υπολογίζοντας κάθε παράγωγο ξεχωριστά, παίρνουμε

$$\frac{\partial f_{loc}^M}{\partial n} \Big|_0 = \frac{1}{\pi^{3/2} v_0^3} e^{-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}'_0)^2}{v_0^2}} = \frac{f_{abs}^M}{n_0}$$

$$\frac{\partial f_{loc}^M}{\partial \mathbf{u}'} \Big|_0 = \frac{n_0}{\pi^{3/2} v_0^3} \left[-\frac{2(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}'_0)(-1)}{v_0^2} \right] e^{-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}'_0)^2}{v_0^2}} = f_{abs}^M \frac{\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}'_0}{v_0^2}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{loc}^M}{\partial T} \Big|_0 &= n_0 \left\{ \left(\frac{1}{2\pi R} \right)^{3/2} \left(-\frac{3}{2} T_0^{-5/2} \right) + \left(\frac{1}{2\pi R T_0} \right)^{3/2} \left(-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}'_0)^2}{2R} \right) \left(-\frac{1}{T_0^2} \right) \right\} e^{-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}'_0)^2}{v_0^2}} = \\ &= \frac{f_{abs}^M}{T_0} \left[-\frac{3}{2} + \frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}'_0)^2}{v_0^2} \right] \end{aligned}$$

Αντικαθιστώντας όλες τις παραγώγους στην εξίσωση (Α.3.1), έχουμε

$$f_{loc}^M = f_{abs}^M \left[1 + \frac{n - n_0}{n_0} + (\mathbf{u}' - \mathbf{u}'_0) \cdot 2 \frac{\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}'_0}{v_0^2} + \frac{T - T_0}{T_0} \left(\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}'_0)^2}{v_0^2} - \frac{3}{2} \right) \right]$$

Για τη ροή που μελετούμε είναι $\mathbf{u}'_0 = \mathbf{0}$, επομένως η τελική έκφραση για την f_{loc}^M γίνεται

$$f_{loc}^M = f_{abs}^M \left[1 + \frac{n - n_0}{n_0} + \frac{2}{v_0^2} \mathbf{u}' \cdot \boldsymbol{\xi} + \frac{T - T_0}{T_0} \left(\frac{\boldsymbol{\xi}^2}{v_0^2} - \frac{3}{2} \right) \right] \quad (\text{Α.3.2})$$

Αντικαθιστώντας την σχέση (Α.1.7) στην εξίσωση (Α.1.1) έχουμε

$$\frac{\partial [f_{abs}^M (1 + hX_p + xX_p)]}{\partial t'} + \boldsymbol{\xi} \cdot \frac{\partial [f_{abs}^M (1 + hX_p + xX_p)]}{\partial \mathbf{r}'} = \nu (f_{loc}^M - f_{abs}^M (1 + hX_p + xX_p)) \quad (\text{Α.3.3})$$

Στη συνέχεια θα επεξεργαστούμε ξεχωριστά το κάθε μέλος της (Α.3.3). Το αριστερό της μέλος δίνει διαδοχικά

$$\begin{aligned} & \frac{\partial [f_{abs}^M (1 + hX_p + xX_p)]}{\partial t'} + \boldsymbol{\xi} \cdot \frac{\partial [f_{abs}^M (1 + hX_p + xX_p)]}{\partial \mathbf{r}'} = \\ & f_{abs}^M X_p \frac{\partial h}{\partial t'} + f_{abs}^M \boldsymbol{\xi} \cdot \frac{\partial [(1 + hX_p + xX_p)]}{\partial \mathbf{r}'} = \\ & f_{abs}^M X_p \frac{\partial h}{\partial t'} + f_{abs}^M \boldsymbol{\xi} \cdot \left(\frac{\partial (hX_p)}{\partial \mathbf{r}'} + \frac{\partial (xX_p)}{\partial \mathbf{r}'} \right) = \\ & f_{abs}^M X_p \frac{\partial h}{\partial t'} + f_{abs}^M X_p \left(\boldsymbol{\xi} \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}'} + \boldsymbol{\xi} \cdot \frac{\partial x}{\partial \mathbf{r}'} \right) = \\ & f_{abs}^M X_p \left(\frac{\partial h}{\partial t'} + \boldsymbol{\xi} \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}'} + \left(\xi_x \frac{\partial x}{\partial x'} + \underbrace{\xi_y \frac{\partial x}{\partial y'}}_0 + \underbrace{\xi_z \frac{\partial x}{\partial z'}}_0 \right) \right) = \\ & f_{abs}^M X_p \left(\frac{\partial h}{\partial t'} + \boldsymbol{\xi} \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}'} + \xi_x \frac{\partial x}{\partial x'} \right) \end{aligned}$$

Εισάγοντας τις αδιάστατες ποσότητες, παίρνουμε

$$\begin{aligned} & f_{abs}^M X_p \left(\frac{v_0}{H} \frac{\partial h}{\partial t} + v_0 \mathbf{c} \cdot \frac{\partial h}{H \partial \mathbf{r}} + \frac{v_0 c_x}{H} \right) = \\ & f_{abs}^M X_p \frac{v_0}{H} \left(\frac{\partial h}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}} + c_x \right) \quad (\text{Α.3.4}) \end{aligned}$$

Αντικαθιστώντας την (Α.3.2) στο δεξί μέλος της (Α.3.3) έχουμε

$$\begin{aligned} & \nu \left(f_{abs}^M \left[1 + \frac{n - n_0}{n_0} + \frac{2}{v_0^2} \mathbf{u}' \cdot \boldsymbol{\xi} + \frac{T - T_0}{T_0} \left(\frac{\boldsymbol{\xi}^2}{v_0^2} - \frac{3}{2} \right) \right] - f_{abs}^M (1 + hX_p + xX_p) \right) = \\ & \nu f_{abs}^M \left(\frac{n - n_0}{n_0} + \frac{2}{v_0^2} \mathbf{u}' \cdot \boldsymbol{\xi} + \frac{T - T_0}{T_0} \left(\frac{\boldsymbol{\xi}^2}{v_0^2} - \frac{3}{2} \right) - hX_p - xX_p \right) \end{aligned}$$

Εισάγοντας τις αδιάστατες ποσότητες, παίρνουμε

$$\begin{aligned} & \nu f_{abs}^M \left(\frac{n - n_0}{n_0} + \frac{2}{v_0^2} v_0^2 \mathbf{u} \cdot \mathbf{c} + \frac{T - T_0}{T_0} \left(\frac{v_0^2 \mathbf{c}^2}{v_0^2} - \frac{3}{2} \right) - hX_p - xX_p \right) = \\ & \nu f_{abs}^M \left(\frac{n - n_0}{n_0} + 2 \mathbf{u} \cdot \mathbf{c} + \frac{T - T_0}{T_0} \left(\mathbf{c}^2 - \frac{3}{2} \right) - hX_p - xX_p \right) \quad (\text{Α.3.5}) \end{aligned}$$

Εξισώνοντας τις σχέσεις (A.3.4) και (A.3.5), προκύπτει ότι

$$f_{abs}^M X_p \frac{v_0}{H} \left(\frac{\partial h}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}} + c_x \right) = \nu f_{abs}^M \left(\frac{n - n_0}{n_0} + 2\mathbf{u} \cdot \mathbf{c} + \frac{T - T_0}{T_0} \left(\mathbf{c}^2 - \frac{3}{2} \right) - hX_p - xX_p \right) \Rightarrow$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}} + c_x = \frac{H}{v_0} \nu \left(\frac{n - n_0}{n_0 X_p} - x + 2\mathbf{u} \cdot \mathbf{c} + \frac{T - T_0}{T_0 X_p} \left(\mathbf{c}^2 - \frac{3}{2} \right) - h \right) \quad (\text{A.3.6})$$

Θέτοντας $\nu = P/\mu$ συνεπάγεται πως $\delta = \frac{H}{v_0} \nu$. Επομένως αν χρησιμοποιηθούν οι σχέσεις (A.2.2) και (A.2.10), η (A.3.6) δίνει την τελική εξίσωση του γραμμικοποιημένου BGK που είναι η

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}} + c_x = \delta \left(\rho + 2\mathbf{u} \cdot \mathbf{c} + \tau \left(\mathbf{c}^2 - \frac{3}{2} \right) - h \right) \quad (\text{A.3.7})$$

Επισημαίνεται ότι η εξίσωση (A.3.7) ισχύει πάνω σε μια διατομή κάθετα στη διεύθυνση της ροής (επίπεδο (y,z)) και αναλυτικότερα μπορεί να γραφεί στην ακόλουθη μορφή

$$\frac{\partial h(t, y, z, \mathbf{c})}{\partial t} + c_y \frac{\partial h(t, y, z, \mathbf{c})}{\partial y} + c_z \frac{\partial h(t, y, z, \mathbf{c})}{\partial z} + c_x =$$

$$\delta \{ \rho(t, y, z) + 2[u_x(t, y, z)c_x + u_y(t, y, z)c_y + u_z(t, y, z)c_z] +$$

$$\tau(t, y, z) \left(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2 - \frac{3}{2} \right) - h(t, y, z, \mathbf{c}) \} \quad (\text{A.3.8})$$

A.4 Προβολή γραμμικοποιημένου BGK για ροή σε παράλληλες πλάκες

Για τη χρονομεταβαλλόμενη, πλήρως ανεπτυγμένη, ισοθερμοκρασιακή ροή Poiseuille ανάμεσα σε πλάκες, όπου η διεύθυνση της ροής είναι κατά μήκος του άξονα των x, ισχύουν οι ακόλουθες παραδοχές

$$\frac{\partial}{\partial z}(\cdot) = 0$$

$$\mathbf{u} = (u_x(t, y), 0, 0)$$

$$\tau = 0$$

$$\rho = 0$$

$$h = h(t, y, c_x, c_y, c_z)$$

Επομένως η εξίσωση (A.3.8) απλοποιείται και γράφεται ως

$$\frac{\partial h(t, y, c_x, c_y, c_z)}{\partial t} + c_y \frac{\partial h(t, y, c_x, c_y, c_z)}{\partial y} + c_x = \delta [2u_x(t, y)c_x - h(t, y, c_x, c_y, c_z)] \quad (\text{A.4.1})$$

Για να μειωθεί ο υπολογιστικός χρόνος που απαιτείται για την αριθμητική επίλυση της εξίσωσης (A.4.1) ακολουθείται η διαδικασία της προβολής στο χώρο των μοριακών ταχυτήτων, με σκοπό την ελάττωση της τάξης του. Στη συγκεκριμένη ροή εφαρμόζουμε προβολή ως προς c_x και c_z . Αρχικά ορίζουμε μία νέα συνάρτηση κατανομής $Y(t, y, c_y)$, η οποία είναι ανεξάρτητη των c_x και c_z , ως εξής

$$Y(t, y, c_y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} h(t, y, c_x, c_y, c_z) e^{-x^2 - z^2} dc_x dc_z \quad (\text{A.4.2})$$

Στη συνέχεια, πολλαπλασιάζουμε και τα δύο μέλη της (Α.4.1) με $\frac{1}{\pi}c_x e^{-x^2-z^2}$ και ολοκληρώνουμε κάθε όρο ως προς c_x και c_z . Έχουμε λοιπόν διαδοχικά

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x \frac{\partial h}{\partial t} e^{-x^2-z^2} dc_x dc_z + c_y \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x \frac{\partial h}{\partial y} e^{-x^2-z^2} dc_x dc_z + \underbrace{\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x c_x e^{-x^2-z^2} dc_x dc_z}_{\pi/2} = \\
& 2\delta u_x \underbrace{\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x c_x e^{-x^2-z^2} dc_x dc_z}_{\pi/2} - \delta \underbrace{\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x h e^{-x^2-z^2} dc_x dc_z}_Y \Rightarrow \\
& \frac{\partial}{\partial t} \left(\underbrace{\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x h e^{-x^2-z^2} dc_x dc_z}_Y \right) + c_y \frac{\partial}{\partial y} \left(\underbrace{\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x h e^{-x^2-z^2} dc_x dc_z}_Y \right) + \frac{1}{2} = \delta u_x - \delta Y \Rightarrow \\
& \frac{\partial Y(t, y, c_y)}{\partial t} + c_y \frac{\partial Y(t, y, c_y)}{\partial y} + \delta Y(t, y, c_y) = \delta u_x(t, y) - \frac{1}{2} \tag{A.4.3}
\end{aligned}$$

Τέλος θα πρέπει οι εξισώσεις των ροπών που δίνουν τις μακροσκοπικές ποσότητες να γραφούν συναρτήσει της νέας συνάρτησης κατανομής Y . Στη συγκεκριμένη ροή ενδιαφέρει μόνον ο υπολογισμός της u_x . Επομένως έχουμε

$$\begin{aligned}
u_x &= \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} c_x h e^{-c^2} d\mathbf{c} \Rightarrow \\
u_x &= \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x h e^{-c_x^2 - c_y^2 - c_z^2} dc_x dc_y dc_z \Rightarrow \\
u_x &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x h e^{-c_x^2 - c_z^2} dc_x dc_z}_{Y} e^{-c_y^2} dc_y \Rightarrow \\
u_x(t, y) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} Y(t, y, c_y) e^{-c_y^2} dc_y \tag{A.4.4}
\end{aligned}$$

Καταλήγουμε λοιπόν στις εξισώσεις (Α.4.3) και (Α.4.4), οι οποίες αποτελούν το γραμμικοποιημένο χρονομεταβαλλόμενο μοντέλο BGK για τη ροή Poiseuille ανάμεσα σε πλάκες.

Βιβλιογραφία

- [1] J. H. Ferziger and H. G. Kaper. Mathematical theory of transport processes in gases. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1972.
- [2] M. A. Gallis, J. M. Reese, and D. A. Lockerby. New direction in fluid mechanics: non-equilibrium aerodynamic and microsystem flows. Philosophical Transactions of the Royal Society of London A, 361:2967–2988, 2003.
- [3] M. Gad-el-Hak. The MEMS handbook. CRC Press, Florida, USA, 2002.
- [4] C. M. Ho and Y. C. Tai. Micro-electro-mechanical systems (MEMS) and fluid flows. Annual Review of Fluid Mechanics, 30:579–612, 1998.
- [5] G. E. Karniadakis and A. Beskok. Micro Flows. Fundamentals and simulation. Springer-Verlag, New York, 2002.
- [6] F. Sharipov and V. Seleznev. Data on internal rarefied gas flows. Journal of Physical and Chemical Reference Data, 27(3):657–706, 1998.
- [7] 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. Philosophical Magazine, 19, 20:19–32, 21–32, 33–36, 1860.
- [8] L. Boltzmann. Weitere studien über das wärmegleichgewicht unter gasmolekülen. Sitzung Berichte Kaiserl. Akad. der Wissenschaften, 66(2):275–370, 1872.
- [9] C. Cercignani. The Boltzmann equation and its applications. Springer-Verlag, New York, 1988.
- [10] J. C. Maxwell. On the dynamical theory of gases. Philosophical Transactions of the Royal Society of London, 49-88:157, 1867.
- [11] S. Harris. An introduction to the theory of the Boltzmann equation. Dover Publications, New York, 1971.
- [12] K. Huang. Statistical mechanics. John Wiley & Sons, 1987.
- [13] J. Kestin, K. Knierim, E. A. Mason, B. Najafi, S. T. Ro, and M. Waldman. Equilibrium and transport properties of the noble gases and their mixture at low densities. Journal of Physical and Chemical Reference Data, 13(1):229–303, 1984.
- [14] J. McLennan. Introduction to non-equilibrium statistical mechanics. Prentice Hall, 1988.

- [15] T. Inamuro, M. Yoshino, and F. Ogino. Accuracy of the Lattice Boltzmann method for small Knudsen number with finite reynolds number. Physics of Fluids, 9(11):3535–3542, 1997.
- [16] S. Chen and G. D. Doolen. Lattice Boltzman method for fluid flows. Annual Review of Fluid Mechanics, 30(18):329–364, 1998.
- [17] S. Ansumali and I. Karlin. Kinetic boundary conditions in the Lattice Boltzmann method. Physical Review E, 66:026311, 2002.
- [18] C. Y. Lim, C. Shu, X. D. Niu, and Y. T. Chew. Application of Lattice Boltzmann method to simulate microchannels flows. Physics of Fluids, 14(7):2299–2308, 2002.
- [19] G. Breyiannis and D. Valougeorgis. Lattice kinetic simulations of 3-D mhd turbulence. Computers & Fluids, 35:920–924, 2006.
- [20] G. A. Bird. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. Oxford University Press, Oxford, 1994.
- [21] G. A. Bird. Recent advances and current challenges for DSMC. Computers and Mathematics with Applications, 35(1-2):1–14, 1998.
- [22] S. Stefanov and C. Cercignani. Monte-Carlo simulation of the Taylor Couette flow of a rarefied gas. Journal of Fluid Mechanics, 256:199–213, 1993.
- [23] S. Stefanov and C. Cercignani. Monte Carlo simulation of the propagation of a disturbance in the channel flow of a rarefied gas. Computers and Mathematics with Applications, 35(1-2):41–53, 1998.
- [24] T. M. M. Homolle and N. G. Hadjiconstantinou. A low-variance deviational simulation Monte Carlo for the Boltzmann equation. Journal of Computational Physics, (2):2341–2358, 2007.
- [25] J. S. Wu, Tseng K. C., and C. H. Kuo. The direct simulation Monte Carlo method using unstructured adaptive mesh and its application. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 38(4):351–375, 2002.
- [26] F. Sharipov. DSMC simulation of hypersonic flow near the Brazilian reusable satellite. In West East High Speed Flow Fields, pages 182–188. International Conference, Mareilles, 2003.
- [27] M. N. Kogan. Rarefied gas dynamics. Plenum, New York, 1969.
- [28] H. Cabannes. Couette flow for a gas with a discrete velocity distribution. Journal of Fluid Mechanics, 76:273–287, 1976.
- [29] J. Broadwell. Study of rarefied shear flow by the discrete velocity method. Journal of Fluid Mechanics, 19:401–414, 1964.
- [30] A. B. Huang and D. L. Harley. Nonlinear rarefied Couette flow with heat transfer. Physics of Fluids, 11:1321, 1968.
- [31] D. Valougeorgis and S. Naris. Acceleration schemes of the discrete velocity method: Gaseous flows in rectangular microchannels. SIAM Journal on Scientific Computing, 25(2):534–552, 2003.

- [32] J. Lihnaropoulos, S. Naris, and D. Valougeorgis. Formulation and stability analysis of rapidly convergent iteration schemes for the 2-D linearized BGK equation. Journal of Physics D: Applied Physics, 36:1–16, 2007.
- [33] P. L. Bhatnagar, E. P. Gross, and M. A. Krook. A model for collision processes in gases. Physical Review, 94:511–525, 1954.
- [34] 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. Philosophical T, 216:279–341, 1916.
- [35] E. M. Shakhov. Method of investigation of rarefied gas flows. Nauka, Moscow, 1974. [in Russian].
- [36] F. J. McCormack. Construction of linearized kinetic models for gaseous mixture and molecular gases. Physics of Fluids, 16:2095–2105, 1973.
- [37] J. C. Maxwell. On stress in rarefied gases arising from inequalities of temperature. Philosophical Transactions of the Royal Society of London, 1879.
- [38] B. T. Porodnov, A. N. Kulev, and F. T. Tukhvetov. Thermal transpiration in a circular capillary with a small temperature difference. Journal of Fluid Mechanics, 88(4):609–622, 1978.
- [39] F. Sharipov. Application of the Cercignani-Lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows. I. Plane flow between two parallel plates. European Journal of Mechanics - B/Fluids, 21(1):113–123, 2002.
- [40] F. Sharipov. Application of the Cercignani-Lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows. II. Slip and jump coefficients. European Journal of Mechanics - B/Fluids, 22:133–143, 2003.
- [41] R. G. Lord. Some further extensions of the Cercignani-Lampis gas-surface interaction model. Physics of Fluids, 7(5):1159–1161, 1995.
- [42] C. Cercignani and A. Daneri. Flow of a rarefied gas between two parallel plates. Journal of Applied Physics, 34:3509–3513, 1963.
- [43] C. Cercignani and C. D. Pagani. Variational approach to boundary value problems in kinetic theory. Physics of Fluids, 9(6):1167–1173, 1966.
- [44] T. T. Bramlette. Plane Poiseuille flow of rarefied gas based on the finite element method. Physics of Fluids, 14(2):288–293, 1971.
- [45] S. S. Lo and S. K. Loyalka. An efficient computation of near-continuum rarefied gas flows. Zeitschrift für Angewandte Mathematic und Physik (ZAMP), 33:419–424, 1982.
- [46] S. K. Loyalka and S. A. Hamoodi. Poiseuille flow of a rarefied gas in a cylindrical tube: Solution of linearized Boltzmann equation. Physics of Fluids A, 2(11):2061–2065, 1990.
- [47] F. Sharipov. Rarefied gas flow through a long tube at any temperature difference. Journal of Vacuum Science & Technology, A, 14(4):2627–2635, 1996.
- [48] C. E. Siewert and D. Valougeorgis. An analytical discrete-ordinates solution of the S-model kinetic equation for flow in a cylindrical tube. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, 72:351–550, 2002.

- [49] F. M. Sharipov and G. M. Kremer. Nonlinear Couette flow between two rotating cylinders. Transport Theory and Statistical Physics, 25(2):217–229, 1996.
- [50] F. M. Sharipov and G. M. Kremer. Linear Couette flow between two rotating cylinders. European Journal of Mechanics - B/Fluids, 15(4):493–505, 1996.
- [51] B. K. Annis. Thermal creep in gases. Journal of Chemical Physics, 57(7):2898–2905, 1972.
- [52] S. K. Loyalka. Temperature jump and thermal creep slip: Rigid sphere gas. Physics of Fluids A, 1:403–408, 1989.
- [53] C. E. Siewert. Poiseuille, thermal creep and Couette flow: results based on the CES model for the linearized Boltzmann equation. European Journal of Mechanics - B/Fluids, 21:579–597, 2002.
- [54] V. A. Titarev and E. M. Shakhov. Nonisothermal gas flow in a long channel analyzed on the basis of the kinetic S-model. Computational Mathematics and Mathematical Physics, 50(12):2131–2144, 2010.
- [55] R.W. Hanks and H.L. Weissberg. Slow viscous flow of rarefied gases through short tubes. Journal of Applied Physics, 35(1):142–144, 1964.
- [56] 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. British Journal of Applied Physics, 17:1092–1102, 1966.
- [57] T. Fujimoto and M. Usami. Rarefied gas flow through a circular orifice and short tubes. Journal of Fluids Engineering, 106(4):367–373, 1984.
- [58] 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. Physics of Fluids, 18:093601, 2006.
- [59] S. Varoutis, D. Valougeorgis, O. Sazhin, and F. Sharipov. Rarefied gas flow through short tubes into vacuum. Journal of Vacuum Science & Technology, A, A 26(2):228–238, 2008.
- [60] H. W. Liepmann. Gas kinetics and gas dynamics of orifice flow. Journal of Fluid Mechanics, 10:65–79, 1961.
- [61] G. M. Alder. The numerical solution of choked and supercritical ideal gas flow through orifices and convergent conical nozzles. Journal of Mechanical Engineering Science, 21(3):197–203, 1979.
- [62] 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 transitional regime. In AIAA 2001-3072. 35th Thermophysics Conference, 2001.
- [63] F. Sharipov. Rarefied gas flow into vacuum through a thin orifice. Influence of the boundary conditions. AIAA Journal, 40(10):2006–2008, 2002.
- [64] A. A. Alexeenko, D. A. Levin, S. F. Gimelshein, D. A. Levin, R. J. Collins, and B. D. Reed. Numerical modelling of axisymmetric and three-dimensional flows in microelectromechanical systems nozzles. AIAA Journal, 40(5):897–904, 2002.

- [65] R. H. Edwards. Low-density flows through tubes and nozzles. Rarefied Gas Dynamics, Part I:199–223, 1977.
- [66] A. Ketsdever, T. Lilly, S. Gimelshein, and A. Alexeenko. Experimental and numerical study of nozzle plume impingement on spacecraft surfaces. In AIP Conference Proceedings, volume 762, pages 367–372, 2005.
- [67] G. N. Markelov and M. S. Ivanov. Numerical study of 2D/3D micronozzles flows. pages 539–546. 22nd International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, 2000.
- [68] P. N. Shankar and M. D. Deshpande. Fluid mechanics in the driven cavity. Annual Review of Fluid Mechanics, 32(1):93–136, 2000.
- [69] K. Aoki, C. Bardos, C. Dogbe, and F. Golse. A note on the propagation of boundary induced discontinuities in kinetic theory. Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, 11(9):1581–1595, 2001.
- [70] S. Naris and D. Valougeorgis. The driven cavity flow over the whole range of the Knudsen number. Physics of Fluids, 17(9):097106, 2005.
- [71] S. Naris and D. Valougeorgis. Rarefaction effects in the driven cavity flow over the whole range of knudsen number. Physics of Fluids, 17:097106, 2005.
- [72] S. Naris and D. Valougeorgis. Boundary-driven none gas flow in a grooved channel via kinetic theory. Physics of Fluids, 19:067103, 2007.
- [73] L. M. G. Cumin, F. M. Sharipov, and G. M. Kremer. Rarefied gas flow between two cylinders caused by the evaporation and condensation on their surfaces. Physics of Fluids, 10(12):3203–3208, 1998.
- [74] Y. Sone and T. Doi. Analytical study of bifurcation of a flow of a gas between coaxial circular cylinders with evaporation and condensation. Physics of Fluids, 12(10):2639–2660, 2000.
- [75] Y. Sone and T. Doi. Bifurcation of a flow of a gas between rotating coaxial circular cylinders with evaporation and condensation. In A D Ketsdever and E P Muntz, editors, Rarefied Gas Dynamics, pages 646–653, Melville, New York, 2003. 23rd Int. Symp, Canada, AIP.
- [76] V. G. Chernyak, V. V. Kalinin, and P. E. Suetin. The kinetic phenomena in nonisothermal motion of a binary gas mixture through a plane channel. International Journal of Heat and Mass Transfer, 27(8):1189–1196, 1984.
- [77] S. Kosuge, K. Aoki, and S. Takata. Heat transfer in a gas mixture between two parallel plates: finite-difference analysis of the Boltzmann equation. In Rarefied Gas Dynamics, volume 585, pages 289–296. 22nd International Symposium, AIP, 2001.
- [78] R. D. M. Garcia and C. E. Siewert. The McCormack model for gas mixtures: Heat transfer in a plane channel. Physics of Fluids, 16(9):3393–3402, 2004.
- [79] F. Sharipov, L. M. G. Cumin, and D. Kalempa. Plane Couette flow of binary gaseous mixture in the whole range of the Knudsen number. European Journal of Mechanics - B/Fluids, 23:899–906, 2004.
- [80] H. Adzumi. Studies on the flow of gaseous mixture through capillaries. II. The molecular flow of gaseous mixture. Bulletin of Chemical Society of Japan, 12:285–291, 1937.

- [81] V. G. Chernyak. Flow of binary gas mixture through a cylindrical channel. Zhurnal Prikladnoi Mekhaniki i Tekhnicheskoi Fiziki, 5:50–58, 1982. [in Russian].
- [82] 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.
- [83] C. Cercignani and F. Sharipov. Gaseous mixture slit flow at intermediate Knudsen numbers. Physics of Fluids A, 4(6):1283–1289, 1992.
- [84] C. M. Huang, R. V. Thompson, T. K. Ghosh, I. N. Ivchenko, and S. K. Loyalka. Measurements of thermal creep in binary gas mixtures. Physics of Fluids, 11:1662–1672, 1999.
- [85] F. Sharipov and D. Kalempa. Oscillatory Couette flow at arbitrary oscillation frequency over the whole range of the Knudsen number. Microfluidics and Nanofluidics, 4(5):363–374, 2008.
- [86] F. Sharipov and D. Kalempa. Gas flow near a plate oscillating longitudinally with an arbitrary frequency. Physics of Fluids, 19(1):017110, 2007.
- [87] B. D. Ganapol. Determination of the density perturbation at the wall for the Rayleigh problem. Physics of Fluids, 25(12):2211–2217, 1982.
- [88] S. Colin, C. Aubert, and R. Caen. Unsteady gaseous flows in rectangular microchannels: frequency response of one or two pneumatic lines connected in series. European Journal of Mechanics - B/Fluids, 17(1):79–104, 1998.
- [89] N. B. Nichols. The linear properties of pneumatic transmission lines. I.S.A. Transactions, 1:5–14, 1962.
- [90] A. F. D’Souza and R. Oldenburger. Dynamic response of fluid lines. Journal of Basic Engineering, 86(3):589, 1964.
- [91] H. Schaedel. A theoretical investigation of fluidic transmission lines with rectangular cross section. In Third Cranfield Fluidics Conference, volume K3, pages 33–52, Turin, 1968.
- [92] A. J. Healey and R. J. Carlson. Frequency response of rectangular pneumatic transmission lines. A.S.M.E. Paper, WA/FL-5:1–8, 1969.
- [93] J. E. Funk and T. R. Robe. Transients in pneumatic transmission lines subjected to large pressure changes. A.S.M.E. Paper, 69-FLCS-42:1–12, 1969.
- [94] Y. Sone. Effect of sudden change of wall temperature in rarefied gas. Journal of the Physical Society of Japan, 20:222–229, 1965.
- [95] D. Kassoy. The response of a confined gas to a thermal disturbance. i: Slow transients. SIAM Journal on Applied Mathematics, 36(3):624–634, 1979.
- [96] D. R. Kassoy A. M. Radhwan. The response of a confined gas to a thermal disturbance: Rapid boundary heating. 18(2):133–156, 1984.
- [97] P. Norberg, Ackelid U., I. Lundstrom, and L. G. Peterson. On the transient gas flow through catalytically active micromachined channels. Journal of Applied Physics, 81(5):2094–2100, 1997.

- [98] A. R. Bestman, I. O. Ikonwa, and I. U. Mbeledogu. Transient slip flow. International Journal of Energy Research, 19:275–277, 1995.
- [99] E. B. Arkilic and K. S. Breuer. Gaseous flow in small channels. A.I.A.A. Paper, 93-3270:1–7, 1993.
- [100] A. M. Abourabia, M. A. Mahmoud, and W. S. Abdel Kareem. Unsteady heat transfer of a monatomic gas between two coaxial circular cylinders. Journal of Applied Mathematics, 2(3):141–161, 2002.
- [101] A. Manela and N. G. Hadjiconstantinou. On the motion induced in a gas confined in a small-scale gap due to instantaneous boundary heating. Journal of Fluid Mechanics, 593:453–462, 2007.
- [102] S. G. Kandlikar, S. Garimella, S. Colin, and M. King. Heat Transfer and Fluid Flow in Minichannels and Microchannels. Elsevier, 2006.
- [103] M. Perlmuter. Analysis of transient heat transfer through a collisionless gas enclosed between parallel plates. ASME, New York, N.Y., 1967.
- [104] D. C. Wadsworth, D. A. Erwin, and E. P. Muntz. Transient motion of a confined rarefied gas due to wall heating or cooling. Journal of Fluid Mechanics, 248:219–235, 1993.
- [105] A. Manela and N. G. Hadjiconstantinou. Gas motion induced by unsteady boundary heating in a small-scale slab. Physics of Fluids, 20(11):117104, 2008.
- [106] A. Manela and G. A. Radtke. The response of a gas in a micro-channel to periodic boundary heating. volume 1333, pages 748–753. 27th International Symposium on rarefied gas dynamics, 2011.
- [107] A. Manela and N. G. Hadjiconstantinou. Gas-flow animation by unsteady heating in a microchannel. Physics of Fluids, 22(6):062001, 2010.
- [108] T. Doi. Numerical analysis of the time-dependent energy and momentum transfers in a rarefied gas between two parallel planes based on the linearized boltzmann equation. Journal of Heat Transfer, 133(2):022404–022404, 2010.
- [109] F. Sharipov and D. Kalempa. Oscillatory Couette flow at arbitrary oscillation frequency over the whole range of the Knudsen number. Microfluidics and Nanofluidics, 4(5):363–374, 2008.
- [110] N. G. Hadjiconstantinou. Oscillatory shear-driven gas flows in the transition and free-molecular flow regimes. Physics of Fluids, 17:100611–9, 2005.
- [111] J. H. Park, P. Bahukudumbi, and A. Beskok. Rarefaction effects on shear driven oscillatory gas flows: A direct simulation Monte Carlo study in the entire Knudsen regime. Physics of Fluids, 16(2):317–330, 2004.
- [112] C. Cercignani K. Aoki. A technique for time-dependent boundary value problems in the kinetic theory of gases part II. application to sound propagation. Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik (ZAMP), 35(3):345–362, 1984.
- [113] N. G. Hadjiconstantinou and A. L. Garcia. Molecular simulation of sound wave propagation in simple gases. Physics of Fluids, 13(4):1040–1046, 2001.

- [114] N. G. Hadjiconstantinou. Sound wave propagation in a transition regime of micro and nanochannels. Physics of Fluids, 14(2):802–809, 2002.
- [115] R. D. M. Garcia and C. E. Siewert. The linearized Boltzmann equation: Sound-wave propagation in a rarefied gas. Zeitschrift für Angewandte Mathematic und Physik (ZAMP), 57:94–122, 2005.
- [116] F. Sharipov and D. Kalempa. Numerical modeling of the sound propagation through a rarefied gas in a semi-infinite space on the basis of linearized kinetic equation. The Journal of the Acoustical Society of America, 124(4):1993–2001, 2008.
- [117] D. Kalempa and F. Sharipov. Sound propagation through a rarefied gas confined between source and receptor at arbitrary knudsen number and sound frequency. Physics of Fluids, 21(10):103601, 2009.
- [118] F. Sharipov. Transient flow of rarefied gas through a short tube. Vacuum, 90:25–30, 2013.
- [119] F. Sharipov. Transient flow of rarefied gas through an orifice. Journal of Vacuum Science & Technology A, 30(2):021602, 2012.
- [120] M. Vargas, S. Naris, D. Valougeorgis, S. Pantazis, and K. Jousten. Hybrid modeling of time-dependent rarefied gas expansion. Journal of Vacuum Science & Technology A, 32(2):021602, 2014.
- [121] M. Vargas, S. Naris, D. Valougeorgis, S. Pantazis, and K. Jousten. Time-dependent rarefied gas flow of single gases and binary gas mixtures into vacuum. Vacuum, 2014.
- [122] S. Pantazis and K. Jousten. Computational and experimental study of unsteady gas flow in a dynamic vacuum standard. Vacuum, 2014.
- [123] F. Sharipov and I. Graur. General approach to transient flows of rarefied gases through long capillaries. Vacuum, 100:22–25, 2014.
- [124] J. Lihnaropoulos, O. Buchina, and D. Valougeorgis. Unsteady rarefied gas flow between parallel plates. In 2nd GASMEMS Workshop, Marseille, 2010.
- [125] J. Lihnaropoulos, O. Buchina, , and D. Valougeorgis. Starting flow in long rectangular microchannel over the whole range of the knudsen number. In 2nd European Conference on Microfluidics (μFlu'10), Toulouse, France, 2010.
- [126] J. Lihnaropoulos and D. Valougeorgis. Unsteady vacuum gas flow in cylindrical tubes. Fusion Engineering and Design, 86:2139–2142, 2011.
- [127] M. Knudsen. Die molekularstromung der gase durch offnungen und die effusion. Annalen der Physik, 28:999, 1909.
- [128] M. Knudsen. Die fasetse der molecular Stromung und die inneren Reibungstromung der gase durch rohren. Annalen der Physik (Leipzig), 28:75–130, 1909.
- [129] F. Sharipov. Onsager-Casimir reciprocity relations for open gaseous systems at arbitrary rarefaction. IV Rotating systems. Physica A, 260(3/5):499–509, 1998.