

ND = 14301
KOE: 14170

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ

ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ

ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΑΣ

Διδακτορική Διατριβή



**ΡΟΕΣ ΑΕΡΙΩΝ ΣΕ ΜΙΚΡΟΔΙΑΤΑΞΕΙΣ ΜΕ ΒΕΛΤΙΩΜΕΝΕΣ
ΜΕΘΟΔΟΥΣ ΔΙΑΚΡΙΤΩΝ ΤΑΧΥΤΗΤΩΝ**

υπό

ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΝΑΡΗ

Διπλωματούχου Μηχανολόγου Μηχανικού Α.Π.Θ., 1998

Υπεβλήθη για την εκπλήρωση μέρους των

απαιτήσεων για την απόκτηση του

Διδακτορικού Διπλώματος

2005

© 2005 Νάρης Στέργιος

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).

Εγκρίθηκε από τα Μέλη της Επταμελούς Εξεταστικής Επιτροπής:

Πρώτος Εξεταστής (Επιβλέπων)	Δρ. Βαλουγεώργης Δημήτρης Αναπληρωτής Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών Βιομηχανίας, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας
Δεύτερος Εξεταστής	Δρ. Βλάχος Νικόλαος Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών Βιομηχανίας, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας
Τρίτος Εξεταστής	Δρ. Μποντόζογλου Βασίλης Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών Βιομηχανίας, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας
Τέταρτος Εξεταστής	Δρ. Τσαγκάρης Σωκράτης Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Εθνικό Μετσόβειο Πολυτεχνείο
Πεμπτος Εξεταστής	Δρ. Μαθιουλάκης Δημήτρης Αναπληρωτής Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Εθνικό Μετσόβειο Πολυτεχνείο
Έκτος Εξεταστής	Δρ. Λιακόπουλος Αντώνης Καθηγητής, Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας
Έβδομος Εξεταστής	Δρ. Σταμούλης Γεώργιος Αναπληρωτής Καθηγητής, Τμήμα Μηχανικών Η/Υ, Τηλεπικοινωνιών και Δικτύων, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Ευχαριστίες

Η ολοκλήρωση της παρούσας διατριβής, αποτελεί το επιστέγασμα της προσπάθειας πολλών ετών. Όμως δεν θα είχε επιτευχθεί χωρίς την καθοδήγηση του επιβλέποντα Αναπληρωτή Καθηγητή Βαλουγεώργη Δημήτρη, τον οποίο ευχαριστώ τόσο για τις γνώσεις που μου προσέφερε και τη συμπαράστασή του, αλλά και για τη κατανόηση και ανοχή που επέδειξε καθ' όλο το διάστημα της συνεργασίας μας. Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Δρ. Μπρέγιαννη Γιώργο και τον υποψήφιο διδάκτορα Τσική Ισιδωρο για τη συνεργασία μας αλλά και τη γενικότερη υποστήριξη που μου παρείχαν.

Θα ήθελα επίσης να ευχαριστήσω τα μέλη της επιτροπής για την ανταπόκριση και τη συμμετοχή τους, καθώς και τον Καθηγητή Sharipon Felix του Departamento de Fysica, Universidade do Parana, Brazil, τον Δρ. Pavol Pavlo της Czech Academy of Science, Czech Republic και τον Καθηγητή Γκραίκο Άλκη του Université Libre de Bruxelles για τη συνεργασία τους, όπως και τον Δρ. Θεοδωρίδη Γιώργο του οποίου η συμβολή ήταν καθοριστική στο να λάβω την απόφαση να ξεκινήσω την όλη διαδικασία.

Πανω απ' όλα όμως θα ήθελα να εκφράσω της ευγνωμοσύνη μου στους γονείς μου Παύλο και Αντιγόνη και τον αδερφό μου Γιάννη για την υπομονή και συμπαράστασή τους. Η διατριβή τους αφιερώνεται δικαιωματικά όπως και στην Ελένη Τσιαγκάλη της οποίας η υποστήριξη και κατανόηση υπήρξε καταλυτική.

Τέλος, η ολοκλήρωση της διατριβής οφείλεται σε σημαντικό βαθμό στην οικονομική στήριξη που προσφέρθηκε απο τα προγράμματα «Ηράκλειτος» του υπουργείου Εθνικής Παιδείας και Θρησκευμάτων και «Εθνικό πρόγραμμα ελεγχόμενης θερμοπυρηνικής σύντηξης-EURATOM» της Ευρωπαϊκής Ένωσης.

Νάρης Στέργιος

Ιούνιος 2005

ΡΟΕΣ ΑΕΡΙΩΝ ΣΕ ΜΙΚΡΟΔΙΑΤΑΞΕΙΣ ΜΕ ΒΕΛΤΙΩΜΕΝΕΣ ΜΕΘΟΔΟΥΣ ΔΙΑΚΡΙΤΩΝ ΤΑΧΥΤΗΤΩΝ

ΝΑΡΗΣ ΣΤΕΡΓΙΟΣ

Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών Βιομηχανίας, 2005

Επιβλέπων Καθηγητής: Δρ. Βαλουγεώργης Δημήτρης, Αναπληρωτής Καθηγητής
Αναλυτικών και Υπολογιστικών Μεθόδων Μεσοκλίμακας σε Φαινόμενα Μεταφοράς

Περίληψη

Η μελέτη ροών σε διατάξεις μικροκλίμακας αποτελεί μια επιστημονική περιοχή που έχει προσελκύσει το ενδιαφέρον της επιστημονικής κοινότητας τα τελευταία χρόνια. Η συνήθης αντιμετώπιση βασίζεται στην επίλυση των εξισώσεων του συνεχούς μέσου με τη κατάλληλη διαμόρφωση των οριακών συνθηκών ώστε να ληφθούν υπόψη τα φαινόμενα ολίσθησης που παρατηρούνται στις διεπιφάνειες. Η προσέγγιση όμως αυτή, μπορεί να εφαρμοστεί μόνο για μικρούς αριθμούς Knudsen. Για αέρια με μεγαλύτερο βαθμό αραιοποίησης είναι απαραίτητη η χρήση μεθοδολογιών μεσοκλίμακας που να βασίζονται στη κινητική θεωρία.

Η παρούσα διατριβή έχει ως στόχο τη βελτίωση των αριθμητικών μεθοδολογιών που χρησιμοποιούνται στη μεσοκλίμακα και την εξαγωγή αξιόπιστων αποτελεσμάτων για ροές οι οποίες δεν έχουν αναλυθεί μέχρι τώρα.

Οι υφιστάμενοι επαναληπτικοί αλγόριθμοι της μεθόδου των διακριτών μοριακών ταχυτήτων και τη μεθόδου Lattice Boltzmann, βελτιώθηκαν και αναβαθμίστηκαν με την ανάπτυξη πρωτότυπων συνθετικών επαναληπτικών σχημάτων. Η αποτελεσματικότητα των σχημάτων διαπιστώνεται τόσο θεωρητικά με την εφαρμογή ανάλυσης ευστάθειας κατά Fourier, όσο και με αριθμητικές προσομοιώσεις. Και στις δύο περιπτώσεις η μείωση του απαιτούμενου χρόνου είναι εντυπωσιακή, ιδίως στις περιπτώσεις όπου οι τυπικές μεθοδολογίες παρουσιάζουν τη δυσμενέστερη συμπεριφορά.

Η χρησιμοποίηση των τεχνικών επιτάχυνσης επέτρεψε την προσομοίωση και την εξαγωγή αξιόπιστων αποτελεσμάτων για τη ροή μείγματος αερίων μεταξύ παραλλήλων πλακών και εντός αγωγού ορθογωνικής διατομής υπό την επίδραση κλίσης πίεσης, θερμοκρασίας και συγκέντρωσης. Διερευνήθηκε η επίδραση διαφόρων παραγόντων στη διαμόρφωση της ροής, όπως η σύσταση του μίγματος, η συγκέντρωση του κάθε συστατικού και το δυναμικό των σωματιδιακών συγκρούσεων. Επίσης εξετάστηκε η επίδραση μεταβλητών όπως η αραιοποίηση και ο λόγος των διαστάσεων της διατομής.

Άλλες ροές που μελετήθηκαν ήταν οι διατμητικές ροές και ιδιαίτερα η ροή εντός ορθογωνικής κοιλότητας. Αναπτύχθηκε μια νέα μεθοδολογία για την αντιμετώπιση ασυνεχειών στις οριακές συνθήκες. Η ροή αερίου ενός συστατικού αναλύθηκε ενδελεχώς και εξετάστηκαν διάφορες διαμορφώσεις της κοιλότητας,

ενώ τα αποτελέσματα που προέκυψαν και τα φυσικά φαινόμενα που παρατηρήθηκαν ήταν άκρως ενδιαφέροντα. Η αντίστοιχη ροή μείγματος σε κοιλότητα αντιμετωπίστηκε για την περίπτωση τετραγωνικής κοιλότητας. Μελετήθηκε η επίδραση της σύστασης του μίγματος καθώς και της αραιοποίησης, ενώ και σε αυτή τη περίπτωση αποδείχθηκε η ικανότητα των μεθόδων που εφαρμόζονται να δώσουν ακριβή αποτελέσματα.

Σημαντικό σημείο αποτελεί η διαπίστωση ότι οι μεσοσκοπικές μεθοδολογίες κινητικής φύσεως είναι ικανές να προσομοιώσουν αξιόπιστα ροές σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen, κάτι εξαιρετικά σημαντικό για προβλήματα όπου εμφανίζονται φαινόμενα σε διάφορες κλίμακες.

Συνολικά, στη διατριβή αναπτύχθηκε μια αποτελεσματική μεσοσκοπική μεθοδολογία και εφαρμόστηκε για την επίλυση μικροροών με σημαντικό τεχνολογικό ενδιαφέρον. Κύριο χαρακτηριστικό της προτεινόμενης μεθοδολογίας είναι η ικανότητα προσομοίωσης με ενιαίο τρόπο ροών εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας και συνεχών μέσων. Η προσέγγιση αυτή μπορεί να θεωρηθεί ως μια ισχυρή εναλλακτική πρόταση στην κλασσική πρακτική της επίλυσης των εξισώσεων διατηρησιμότητας με οριακές συνθήκες ολίσθησης, καθώς και στη μέθοδο Monte Carlo. Τέλος σημειώνεται ότι το πεδίο εφαρμογής επεκτείνεται και σε ροές σε συστήματα κενού καθώς και στην αεροδυναμική μεγάλων υψομέτρων.

Gas flows in nano- and micro-configurations via upgraded kinetic type discrete velocity algorithms

by

Steryios Naris

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

Extended Summary

1. Objectives

One of the most emerging technological fields is the area of design and manufacturing of nano- and micro-electromechanical devices and systems. Nowadays, medical instruments or computer parts with sizes of some microns are massively produced. The trend, without doubt, is to move to even smaller sizes. In many occasions, these devices and systems are in contact with fluids or they are designed to process fluids and to measure fluid properties. The existing macroscopic approach is not the proper way to handle transport phenomena in this multiscaling environment. As a result, there is great need for the development of new approaches and methodologies in order to simulate flows in nano- and micro-scale, in a more general and unified manner.

The most common approach until now is the use of the macroscopic conservation equations of mass, momentum and energy, associated with properly modified boundary conditions in order to take into account the slip phenomena on the boundaries, which have been observed in micro-scales. This approach is reliable only for small Knudsen numbers and, as we are moving far from equilibrium, it is reaching its limitations. The new approaches must be able to handle the flow and the involved transport phenomena in the whole range of the Knudsen number. Such methods should be based on kinetic theory as it expressed by the Boltzmann equation or evolution kinetic equations, where the continuity principle is not a prerequisite.

Within this framework, in the present Ph.D. thesis the following two objectives have been fulfilled:

- Novel computational schemes have been developed and successfully applied to amplify and enhance the applicability of the classical discrete velocity method (DVM) and the more recently introduced lattice Boltzmann method (LBM). This computational upgrading of the two numerical methods is crucial for the implementation of generalized kinetic type approaches in microfluidics with multidimensional geometrical configurations.
- Typical microflows in ducts and cavities for simple gases and binary mixtures have been solved and numerical results for the whole range of the Knudsen number (Kn) are provided for first time in the literature. The obtained results are very useful in several technological fields when non-equilibrium flows are involved and particularly of great importance in the MEMS industry.

2. Acceleration schemes

The main unknown in kinetic theory is the particle distribution $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$, where \mathbf{r} is the position vector, \mathbf{c} is the particle velocity and t is the time. The distribution function obeys an integro-differential kinetic equation, while the macroscopic

quantities of practical interest are obtained by taking moments of $f(r, c, t)$. The solution of these coupled equations, both in the discrete velocity and the lattice Boltzmann methods, after their discretization in the phase space, is based on an iterative algorithm between the kinetic equation and the moments of the distribution function. It is well known between DVM and LBM researches that the convergence rate of the iteration map is particularly slow for $Kn < 1$.

In the present work the spectral radius of the iteration schemes has been theoretically investigated via Fourier stability analysis and it has been found equal to one, which justifies the numerically observed slow convergence rates of the iteration scheme. Next, the efficiency of the DVM and the LBM is significantly improved by introducing a novel synthetic-type acceleration scheme. The fast iterative algorithm is based on the formulation of the so-called synthetic equations by taking Hermitian moments of the kinetic equations. The synthetic equations are solved coupled with the kinetic equation to improve significantly the slow iterative convergence rate of the typical iteration scheme. Depending upon the number of the moment equations involved in the system, various acceleration schemes can be produced. The spectral radius of the synthetic acceleration schemes is also studied and the optimum acceleration scenario is proposed. The theoretical results shown in Fig. 1, based on the continuum form of the equations, have been verified numerically by solving the gas flow problem through a rectangular duct. The typical DVM and the so-called H_1 acceleration scheme have been implemented and corresponding results in terms of the required number of iterations and CPU time are shown in Fig. 2. It is seen that the number of iterations needed for convergence as well as the required CPU time is dramatically reduced.

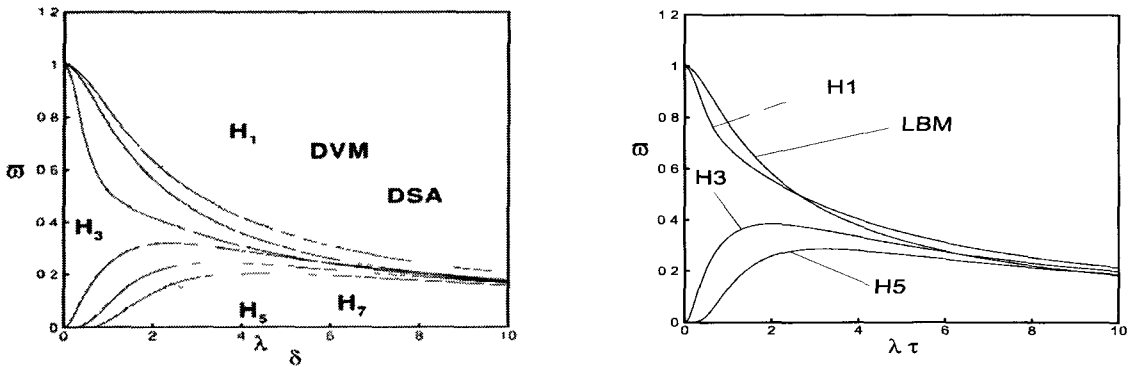


Fig. 1: Comparison of the dominant eigenvalue spectrum of the DVM (left) and the LBM (right), with various acceleration schemes.

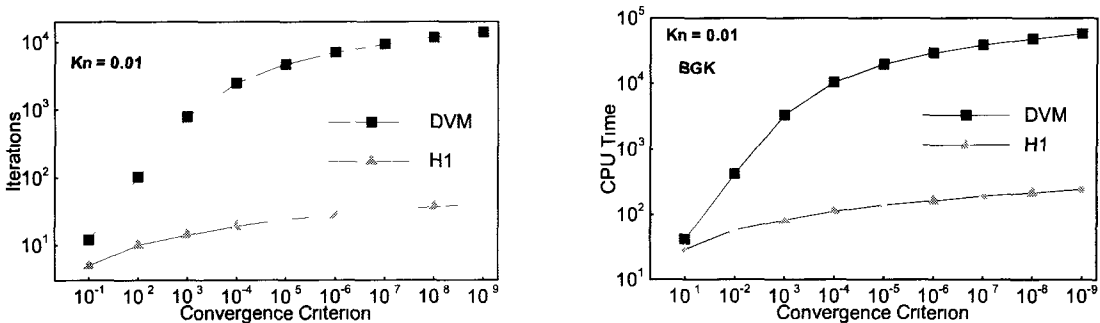


Fig. 2: Comparison of the number of iterations (left) and CPU time (right) upon convergence between the typical DVM iteration algorithm and the H_1 acceleration scheme.

3. Mixture flows in micro-channels

It is noted that in gaseous mixtures, the required computational effort drastically increases, due to a large number of parameters (molecular masses and diameters, intermolecular forces, concentration, gas-surface accommodation coefficients) involved in the calculations. Such a complexity explains the fact that most of the existing works on internal rarefied gas mixture flows are limited to problems with plane and axi-symmetric geometric configurations. In addition, in gaseous mixtures new transport phenomena appear.

In the present Ph.D. thesis, the flow of binary gaseous mixtures between parallel plates and through rectangular micro-ducts due to small pressure, temperature and molar concentration gradients has been studied and the corresponding results are presented for first time in the literature. In this type of flows in addition to the well known direct transport phenomena of

- a. mass flow caused by pressure gradient (Poiseuille flow),
- b. heat flow caused by temperature gradient (heat flow due to conduction) and
- c. diffusion flow caused by concentration gradient

the following so-called cross effects have been observed:

- d. mass flow caused by temperature gradient (thermal creep) and
- e. mass flow caused by concentration gradient (diffusion baroeffect),
- f. heat flow caused by pressure gradient (mechanocaloric effect)
- g. heat flow caused by concentration gradient (Dufour effect)
- h. diffusion flow caused by pressure gradient (barodiffusion)
- i. diffusion flow caused by temperature gradient (thermal diffusion or Soret effect)

The objective here is to estimate all these quantities of the mixture for the whole range of gas rarefaction. The solution is based on a meso-scale approach, formally described by two coupled kinetic equations, subject to diffuse scattering boundary conditions. The model proposed by McCormack substitutes the complicated collision term and the resulting kinetic equations are solved by the accelerated version of the discrete velocity method.

Typical results are presented for the flow rates and the heat fluxes of two different binary mixtures (Ne-Ar and He-Xe) with various molar concentrations, in one and two-dimensional (of different height to width ratios) micro-channels. A comparison between results implementing the rigid sphere potential and a realistic potential, obtained from experimental work, clearly indicates that the rigid sphere model of molecular collisions is inefficient when thermal and concentration effects are involved. Typical results for the mass flow of the two mixtures under investigation are shown in Fig.3, in terms of the mixture concentration for three different values of the Kn number. The accuracy of the results is confirmed in various ways including the fulfillment of the Onsager-Casimir reciprocity relations, the recovery of the limit solutions, obtained by analytical methods, for continuum and free molecular flows, as well as the satisfaction of analytical identities related to the shear stresses of the two species.

The formulation is very efficient and can be used instead of the classical method of solving the Navier-Stokes equations with slip boundary conditions, which is restricted by the hydrodynamic regime. Moreover, the present formulation is a good alternative to the direct simulation Monte Carlo method, which often becomes computationally inefficient.

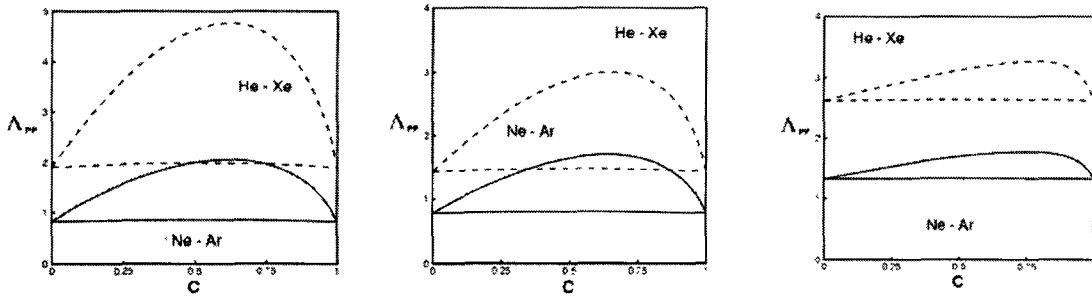


Fig. 3: Reduced flow rates due to pressure gradient in terms of the mixture concentration C , for $Kn=10^2$ (left), $Kn=1$ (center) and $Kn=10^{-1}$ (right).

4. Flows in micro-cavities

Another type of flows, which also encounter in micro-systems not in equilibrium, are boundary driven flows. Prototype flows of this kind are the Couette flow problem in one dimension and the cavity flow problem in two or three dimensions. The Couette flow problem for a single gas has been extensively studied, while the cavity flow problem has received much less attention. It is clarified that in the hydrodynamic limit the cavity problem is a well known typical benchmark problem for testing and verifying continuum solvers and has been thoroughly studied. However, the research work for the same flow pattern in the free molecular, transition and slip regimes is very limited.

In the present Ph.D. thesis, the Couette flow problem for binary mixtures has been solved. The results have been successfully compared with corresponding results recently published in the literature and our confidence to the proposed methodology has been strengthened.

More important the two dimensional cavity flows for a single gas and binary mixtures have been thoroughly investigated and the results are presented for first time in the literature. The flow is caused by the motion of the upper wall. The BGK model equation with perturbations in density, velocity and temperature is used to approximate the collision integral term for the single gas problem, while the McCormack model is used in the case of binary mixtures.

A detailed investigation of the rarefaction and compressibility effects on the flow pattern and quantities is presented, over the whole range of the Knudsen number and various aspect (height/width) ratios. Numerical results of flow characteristics, including the streamlines, the velocity profiles, the pressure and temperature contours and the drag force of the moving wall are presented for different aspect ratios and various degrees of gas rarefaction from the free molecular through the transition up to the continuum limit. It has been found that as the depth of the cavity is increased corner eddies are created, which grow and merge and finally result into new counter rotating vortices. During this process the existing vortices are slightly pushed upwards, while their structure and flow characteristics remain almost unchanged. It is also demonstrated that as the rarefaction parameter is decreased the critical aspect ratio, above which the first corner eddies show up, is increased. Typical flow patterns are shown in Fig. 4. Finally, it is noted that the numerical results based on the kinetic type approach, recover the analytical Stokes flow solution at the hydrodynamic limit.

One of the most interesting numerical aspects of this work is the treatment of

the boundary induced discontinuities in the flow field. This pitfall, well known as ray effects in the transport theory community, has been successfully circumvented by splitting the formulation and the solution in two parts. The first part, which takes care of the discontinuities between the stationary and moving walls, is solved analytically by the method of characteristics, while the second part is solved numerically in a standard manner. The methodology has been proven very efficiently and can be generalized.

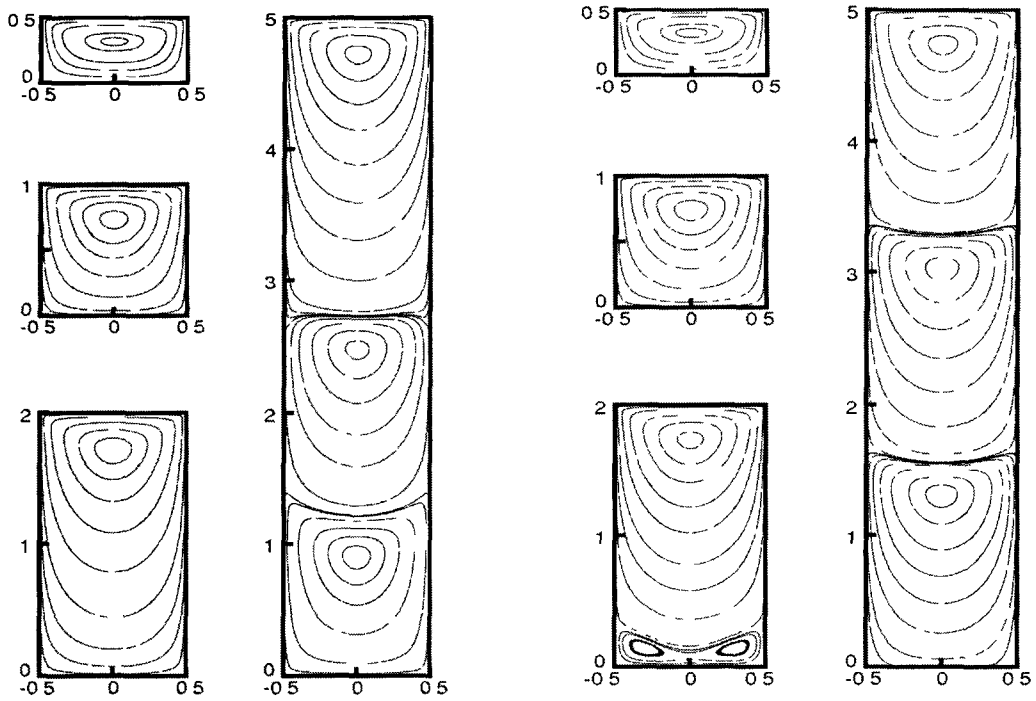


Figure 4: Streamlines for aspect ratios equal to 0.5, 1, 2 and 5 with $Kn = 0.2$ (left) and $Kn = 0.1$ (right).

5. Concluding remarks

In this Ph.D. thesis, a computationally efficient meso-scale kinetic type approach has been developed and applied to solve typical micro-flow problems with technological interest. Most important the proposed methodology has been proven capable of handling multiscale non-equilibrium flows in a unified manner. It may be implemented as a powerful alternative to the commonly used continuum conservation equations with slip boundary conditions and to the Monte Carlo simulation as well. Beyond microfluidics, the proposed approach is suitable of handling vacuum flows and high altitude aerodynamics.

Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή	5
2	Βιβλιογραφική ανασκόπηση	11
2.1	Εισαγωγή	11
2.2	Εξίσωση Boltzmann και εφαρμογές στη μικροκλίμακα	11
2.2.1	Μοντελοποίηση του όρου των σωματιδιακών συγκρούσεων	12
2.2.2	Προσδιορισμός οριακών συνθηκών	14
2.2.3	Εφαρμογές	15
2.3	Μεθοδολογίες συνεχούς μέσου στη μεσοκλίμακα	20
2.4	Αριθμητικές μεθοδολογίες για την επίλυση ροών με μεσοσκοπική προσέγγιση	21
2.5	Ανακεφαλαίωση	23
3	Στοιχεία κινητικής θεωρίας	25
3.1	Εισαγωγή	25
3.2	Διατύπωση εξίσωσης Boltzmann	25
3.3	Ο όρος των συγκρούσεων και η κατανομή Maxwell	28
3.4	Το θεώρημα H	28
3.5	Μοντελοποίηση του όρου των συγκρούσεων: Μοντέλα BGK και S	29
3.6	Γραμμικοποίηση των κινητικών εξισώσεων: Μοντέλα BGK και S	30
3.7	Αδιαστατοποίηση των κινητικών εξισώσεων: Μοντέλα BGK και S	31
3.8	Το μοντέλο McCormack	33
4	Σχήμα επιτάχυνσης της μεθόδου των διακριτών ταχυτήτων	37
4.1	Εισαγωγή	37
4.2	Ανάλυση ευστάθειας του σχήματος των διακριτών ταχυτήτων	39
4.2.1	Μονοδιάστατη εξίσωση BGK: Διατύπωση και ανάλυση ευστάθειας	39
4.2.2	Μονοδιάστατη εξίσωση μοντέλου S: Διατύπωση και ανάλυση ευστάθειας	42
4.2.3	Δισδιάστατη εξίσωση: Διατύπωση και ανάλυση ευστάθειας	45
4.3	Διαμόρφωση σχημάτων επιτάχυνσης	47
4.3.1	Μονοδιάστατη εξίσωση BGK: Διατύπωση σχήματος επιτάχυνσης και ανάλυση ευστάθειας	47

4.3.2	Μονοδιάστατη εξίσωση μοντέλου S: Διατύπωση σχήματος επιτάχυνσης	51
4.3.3	Δισδιάστατη εξίσωση μοντέλου BGK: Διατύπωση σχήματος επιτάχυνσης και ανάλυση ευστάθειας	53
4.4	Διατύπωση σχημάτων επιτάχυνσης και ανάλυση ευστάθειας της πλήρους μονοδιάστατης εξίσωσης BGK	54
4.4.1	Διατύπωση της πλήρους μονοδιάστατης εξίσωσης και ανάλυση ευστάθειας	55
4.4.2	Διαμόρφωση εξισώσεων ροπών	57
4.4.3	Διατύπωση σχημάτων επιτάχυνσης	58
4.4.4	Ανάλυση ευστάθειας σχημάτων επιτάχυνσης	60
4.5	Εφαρμογή του σχήματος επιτάχυνσης στην επίλυση ροής εντός αγωγού ορθογωνικής διατομής	64
4.6	Ανακεφαλαίωση	67
4.7	Πίνακες - Σχήματα	68
5	Σχήματα επιτάχυνσης της μεθόδου Lattice Boltzmann	75
5.1	Εισαγωγή	75
5.2	Η μέθοδος Lattice Boltzmann σε δύο διαστάσεις: Μοντέλο 9 ταχυτήτων	76
5.3	Ανάλυση ευστάθειας της μεθόδου Lattice Boltzmann	78
5.4	Σχήματα επιτάχυνσης	80
5.5	Ανάλυση ευστάθειας της επιταχυνόμενης μεθόδου Lattice Boltzmann	82
5.6	Ανακεφαλαίωση	83
5.7	Πίνακες - Σχήματα	84
6	Μονοδιάστατες ροές μειγμάτων αερίων	87
6.1	Εισαγωγή	87
6.2	Ορισμοί και διατύπωση του προβλήματος	88
6.3	Θερμοδυναμική ανάλυση	91
6.4	Λύσεις στο υδροδυναμικό όριο	93
6.5	Αριθμητικό σχήμα	94
6.6	Αξιολόγηση αριθμητικών αποτελεσμάτων	96
6.7	Ανακεφαλαίωση	98
6.8	Πίνακες - Σχήματα	100
7	Ροές μειγμάτων αερίων σε αγωγούς ορθογωνικής διατομής	113
7.1	Εισαγωγή	113
7.2	Ορισμοί και διατύπωση προβλήματος	114
7.3	Θερμοδυναμική ανάλυση	116
7.4	Λύσεις στο όριο ελεύθερης μοριακής κίνησης και στο υδροδυναμικό όριο	117
7.5	Αριθμητικό σχήμα και σχήμα επιτάχυνσης	119
7.6	Παράθεση και ανάλυση αποτελεσμάτων	122
7.7	Ανακεφαλαίωση	124

7.8	Πίνακες - Σχήματα	126
8	Διατμητικές ροές απλών αερίων	137
8.1	Εισαγωγή	137
8.2	Ροή σε ορθογωνική κοιλότητα	138
8.2.1	Γεωμετρική διατύπωση του προβλήματος	139
8.3	Διατύπωση μαθηματικού μοντέλου	139
8.4	Διαμόρφωση εξισώσεων με προβολή της τρίτης διάστασης	141
8.5	Οριακές συνθήκες	144
8.6	Αντιμετώπιση των ασυνεχειών στις οριακές συνθήκες	145
8.7	Αριθμητικό σχήμα	147
8.8	Αποτελέσματα προσομοίωσης και ανάλυσή τους	151
8.9	Ανακεφαλαίωση	154
8.10	Πίνακες - Σχήματα	156
9	Διατμητικές ροές αερίων μειγμάτων	171
9.1	Εισαγωγή	171
9.2	Ροή μεταξύ παράλληλων πλακών με σχετική κίνηση (ροή Couette)	171
9.3	Ροή μείγματος αερίων εντός ορθογωνικής κοιλότητας	173
9.3.1	Μαθηματική διατύπωση	174
9.3.2	Αποτελέσματα προσομοιώσεων	177
9.4	Ανακεφαλαίωση	178
9.5	Πίνακες - Σχήματα	179
10	Ανακεφαλαίωση και μελλοντική εργασία	189

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

Η κατασκευή συσκευών με διαστάσεις μικροκλίμακας αποτέλεσε όραμα αλλά και πρόκληση για την τεχνολογική ικανότητα του ανθρώπου εδώ και πολλά χρόνια [1]. Το όραμα αυτό άρχισε να πραγματώνεται από τις αρχές της δεκαετίας του 1990 και σήμερα αποτελεί πλέον κοινή πρακτική. Εξαρτήματα όπως επιταχυνσιόμετρα που χρησιμοποιούνται για την ενεργοποίηση των αερόσακων στα οχήματα, μικροσκοπικοί αισθητήρες πίεσης και ιατρικά εργαλεία για επεμβάσεις σε επίπεδο κυττάρου, παράγονται πλέον σε μαζική παραγωγή. Αυτό κατέστη δυνατό, χάρη στη ραγδαία τεχνολογική εξέλιξη των τελευταίων ετών και την εφαρμογή νέων κατασκευαστικών τεχνικών, όπως για παράδειγμα η επιφανειακή μικρο-επεξεργασία σιλικόνης, η δημιουργία τρισδιάστατων δομών μέσω λιθογραφίας ακτίνων X και οι διατάξεις ηλεκτρονικής εκκένωσης, μέσω των οποίων επετεύχθη η ελάττωση του κόστους στοιχείο απαραίτητο για τη διεύρυνση των εφαρμογών και τη μαζικοποίηση της παραγωγής [2].

Πολλές από τις συσκευές αυτές είτε έρχονται σε επαφή με ρευστά στο περιβάλλον λειτουργίας τους, είτε περιλαμβάνουν εξαρτήματα (μικρο-αγωγούς, μικρο-κοιλότητες) που είναι άμεσα συνδεδεμένα με ρευστά [3, 4]. Το γεγονός αυτό, καθιστά αναγκαίο τον βέλτιστο προσδιορισμό της συμπεριφοράς των ρευστών σε αυτές τις κλίμακες και της επίδρασης που έχουν στα εξαρτήματα με τα οποία έρχονται σε επαφή. Επιπρόσθετα, πολλές φορές οι συσκευές έχουν ως στόχο αποτελέσματα που αφορούν αποκλειστικά ρευστοδυναμικά μεγέθη (αντλίες, ροόμετρα, συστήματα κυκλωμάτων ψύξης κλπ), όπου πλέον η ανάγκη για τον προσδιορισμό των φαινομένων που λαμβάνουν χώρα στο ρευστό είναι προφανής. Έτσι, η ανάπτυξη μεθόδων για τη μελέτη ρευστοδυναμικών φαινομένων και την βέλτιστη προσομοίωση τους σε επίπεδο μικροκλίμακας αποτελεί το γνωστικό αντικείμενο της μικρορευστοδυναμικής. Ο τομέας αυτός εξελίσσεται ταυτόχρονα με την κατασκευαστική τεχνολογία και την τεχνολογία υλικών στη μικροκλίμακα. Τα τρία αυτά πεδία έρευνας θα μπορούσε να ισχυριστεί κανείς ότι αποτελούν τις τρεις συνιστώσες της επιστημονικής περιοχής που ονομάζεται μικρομηχανική.

Μια πιο εξεζητημένη περιοχή έρευνας για την οποία το τελευταίο διάστημα έχει αρχίσει να αναπτύσσεται το ενδιαφέρον είναι αυτή της νανοκλίμακας [5]. Βέβαια οι κατασκευαστικές δυνατότητες είναι ακόμα περιορισμένες, αλλά η θεμελίωση αρχών και η θεωρητική μελέτη των φαινομένων είναι κάτι εφικτό και ταυτόχρονα ζητούμενο για την προοδευτική

ανάπτυξή της.

Στις πρώτες διατάξεις με σχετικά μικρές διαστάσεις που δημιουργήθηκαν και θα μπορούσαν να καταταχθούν στην κατηγορία της μικρομηχανικής, η μελέτη των ρευστών γινόταν με τη χρησιμοποίηση των εξισώσεων συνέχειας. Προοδευτικά όμως, και καθώς οι δυνατότητες για δημιουργία όλο και μικρότερων διατάξεων γινόταν περισσότερες, φάνηκε ότι η μελέτη των ροών που παρουσιάζονται σε αυτές δεν μπορούσε να γίνει πλέον με τις εξισώσεις συνέχειας, αλλά απαιτούνταν ορισμένες αλλαγές. Η πιο αποτελεσματική τροποποίηση που προτάθηκε, αφορούσε τις οριακές συνθήκες ώστε αυτές να μπορέσουν να συμπεριλάβουν φαινόμενα ολίσθησης τα οποία παρουσιάζονται στα τοιχώματα. Η τακτική αυτή έδωσε ικανοποιητικά αποτελέσματα και φαίνεται ικανή να ανταποκριθεί στις απαιτήσεις ακόμα και της σημερινής εποχής [4]. Όμως η εξέλιξη της τεχνολογίας μάλλον την έχει οδηγήσει στα όριά της και πλέον απαιτείται μια νέα προσέγγιση.

Η νέα αυτή προσέγγιση αναμένεται να προκύψει με τη βοήθεια της κινητικής θεωρίας και αυτό διότι πλέον στις νέες συσκευές που παρουσιάζονται, η υπόθεση του συνεχούς μέσου γίνεται επισφαλής, ενώ τα φαινόμενα που παρουσιάζονται είναι αντίστοιχα με αυτά που παρατηρούνται σε ροές σε συνθήκες κενού ή γενικότερα πολύ χαμηλής πυκνότητας. Η βασική διαφορά βρίσκεται στην εγκατάλειψη της μελέτης των μακροσκοπικών ιδιοτήτων όπως η πυκνότητα, η ταχύτητα και η θερμοκρασία και την εστίαση στη συμπεριφορά των σωματιδίων από τα οποία αποτελείται το ρευστό. Φυσικά δεν είναι δυνατόν να εξετάζεται το κάθε σωματίδιο χωριστά και για το λόγο αυτό, υιοθετείται μια στατιστική αντιμετώπισή τους. Οι μακροσκοπικές ιδιότητες προκύπτουν ως δευτερεύοντα μεγέθη και το βασικό στοιχείο το οποίο μελετάται είναι μια συνάρτηση κατανομής η οποία υπακούει στην γνωστή εξίσωση Boltzmann [6, 7]. Το βασικό πλεονέκτημα που παρουσιάζει η νέα αυτή προσέγγιση είναι ότι η υπόθεση της συνέχειας είναι πλέον αδιάφορη και το πεδίο εφαρμογής εκτείνεται από τα συνεχή μέσα, μέχρι και τις ροές στις οποίες τα σωματίδια μπορούν να αντιμετωπιστούν ακόμα και διακριτά. Ταυτόχρονα, η μαθηματική τεκμηρίωση είναι ισχυρή ενώ τροποποιήσεις για την συμπερίληψη επιδράσεων όπως αυτή της βαρύτητας ή του μαγνητικού πεδίου για ροές ιονισμένων ρευστών, γίνονται με μαθηματική συνέπεια επιτρέποντας την ευχερέστερη αντιμετώπιση προβλημάτων μαγνητοϋδροδυναμικής και άλλων.

Οι τεχνικές οι οποίες χρησιμοποιούνται για την επίλυση των προκλυπουσών εξισώσεων, μπορούν να διαφοροποιηθούν ανάλογα με την αποτελεσματικότητα της κάθε μίας σε σχέση με τη κλίμακα των φαινομένων που μελετώνται. Έτσι για παράδειγμα, σε πολύ αραιά ρευστά η μέθοδος Monte Carlo [8] είναι ίσως η πιο ενδεδειγμένη, ενώ για συνεχή μέσα η μέθοδος Lattice Boltzmann [9] αποτελεί την κυριότερη πρόταση. Για τις ενδιάμεσες περιοχές το τοπίο δεν είναι τόσο ξεκάθαρο μιας και υπάρχουν αρκετές μέθοδοι που αποδεικνύονται αποτελεσματικές. Ωστόσο αν η προσέγγιση που ακολουθείται είναι πλήρως αριθμητική, τότε η μέθοδος των διακριτών ταχυτήτων (DVM) [10, 11, 12] αποκτά προβάδισμα.

Όμως η εφαρμογή όλων αυτών των τεχνικών δεν είναι χωρίς προβλήματα, κάτι βέβαια αναμενόμενο εφόσον πολλές από αυτές έχουν παρουσιαστεί πολύ πρόσφατα. Βασικό ανασταλτικό παράγοντα αποτελεί η μεγάλη απαίτηση που παρουσιάζεται για υπολογιστική ισχύ και υπολογιστικό χρόνο, κάτι που αρκετές φορές καθιστά απαγορευτική την

εφαρμογή των προαναφερθέντων τεχνικών. Ταυτόχρονα, υπάρχουν και μια σειρά άλλων εμποδίων που απαιτούν αντιμετώπιση, πολλά από τα οποία είναι κοινά σε όλες τις μεθόδους, ενώ άλλα αφορούν μόνο ορισμένες εξ αυτών. Όλα αυτά έχουν περιορίσει το πεδίο εφαρμογής των μεσοσκοπικών μεθοδολογιών αρκετά ώστε, με ελάχιστες εξαιρέσεις, τα προβλήματα που αντιμετωπίζονται να αφορούν μονοδιάστατες ροές απλής γεωμετρίας και ενός συστατικού.

Ο στόχος της παρούσας διατριβής είναι διπλός:

- Η ανάπτυξη αριθμητικών μεθόδων αντιμετώπισης ορισμένων εκ των προβλημάτων που καθιστούν τις μεθοδολογίες μεσοσκοπικής κλίμακας δύσχρηστες και σε ορισμένες περιπτώσεις ανίκανες να επιλύσουν συγκεκριμένους τύπους ροών.
- Η εφαρμογή των μεθοδολογιών αυτών για την επίλυση ροών με αυξημένη γεωμετρική πολυπλοκότητα καθώς και για ροές μειγμάτων. Σημειώνεται ότι οι ροές που επιλύονται δεν αποτελούν κάποια τυπικά προβλήματα που χρησιμοποιούνται για την πιστοποίηση των αριθμητικών μεθοδολογιών, αλλά στη μεγάλη πλειοψηφία τους αποτελούν προβλήματα που αντιμετωπίζονται για πρώτη φορά και τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται είναι πρωτότυπα.

Η διατριβή αποτελείται από τρεις βασικές ενότητες. Στη πρώτη ενότητα δίνονται ορισμένα γενικά στοιχεία που αφορούν τη περιγραφή της υπάρχουσας κατάστασης στη διεθνή βιβλιογραφία (Κεφάλαιο 2) καθώς και το υπόβαθρο στο οποίο στηρίζονται οι μεθοδολογίες που απασχολούν τη διατριβή (Κεφάλαιο 3). Οι άλλες δύο ενότητες αποτελούν το κορμό της διατριβής. Η δεύτερη ενότητα αποτελείται από τα Κεφάλαια 4 και 5 και αναφέρεται στις προτεινόμενες μεθοδολογίες οι οποίες αποσκοπούν στην επιτάχυνση του ρυθμού σύγκλισης των αριθμητικών μεσοσκοπικών μεθοδολογιών και την επακόλουθη μείωση του υπολογιστικού κόστους και χρόνου για την επίλυση ροών. Τέλος η τρίτη ενότητα (Κεφάλαια 6-9) αφορά την επίλυση ροών με μεσοσκοπικές μεθόδους σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen με εφαρμογή των μεθοδολογιών τόσο της προηγούμενης ενότητας όσο και άλλων οι οποίες αναπτύσσονται στα Κεφάλαια αυτά. Αναλυτικότερα η δομή της διατριβής έχει ως εξής:

Στο Κεφάλαιο 2 γίνεται μια λεπτομερής διερεύνηση της υπάρχουσας διεθνούς βιβλιογραφίας. Εξετάζονται οι αναλυτικές και αριθμητικές μέθοδοι που εφαρμόζονται για την επίλυση της εξίσωσης Boltzmann καθώς και στοιχεία που αφορούν τις χρησιμοποιούμενες οριακές συνθήκες, τα μοντέλα συγκρούσεων, καθώς και τις ροές που έχουν αντιμετωπιστεί. Επίσης παρουσιάζονται οι μακροσκοπικές προσεγγίσεις σε φαινόμενα μεσοκλίμακας και οι εφαρμογές τους.

Στο Κεφάλαιο 3 δίνονται συνοπτικά ορισμένα βασικά στοιχεία κινητικής θεωρίας. Αυτό θεωρήθηκε απαραίτητο προκειμένου να γίνει πιο κατανοητό το περιεχόμενο των επομένων Κεφαλαίων.

Περνώντας στο κυρίως μέρος της διατριβής, στο Κεφάλαιο 4 αναπτύσσονται και παρουσιάζονται οι νέες μεθοδολογίες [13] που προτείνονται για την επιτάχυνση των αριθμητικών σχημάτων επίλυσης της γραμμικοποιημένης εξίσωσης Boltzmann και βασίζονται

στη μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων. Ταυτόχρονα υπολογίζεται αναλυτικά η θεωρητική βελτίωση που αυτά επιφέρουν στο ρυθμό σύγκλισης, ενώ γίνεται και αριθμητική επαλήθευση αυτού μέσω της εφαρμογής των σχημάτων σε ορισμένες τυπικές ροές.

Στο Κεφάλαιο 5, αναπτύσσονται τεχνικές επιτάχυνσης της μεθόδου Lattice Boltzmann. Περιγράφεται αναλυτικά η δημιουργία των σχημάτων επιτάχυνσης [14]. Και σε αυτή τη περίπτωση εξάγονται οι θεωρητικές ακτίνες σύγκλισης τόσο της απλής Lattice Boltzmann, όσο και των σχημάτων επιτάχυνσης και συγκρίνονται, αποδεικνύοντας έτσι τη σημαντική βελτίωση που επιτυγχάνεται.

Ξεκινώντας την τρίτη ενότητα αρχικά στο Κεφάλαιο 6 επιλύεται η ροή μείγματος ευγενών αερίων μεταξύ παραλλήλων πλακών η οποία οφείλεται σε κλίση πίεσης, θερμοκρασίας ή συγκέντρωσης σε όλο το εύρος των αριθμού Knudsen [15]. Για την αντιμετώπιση της ροής χρησιμοποιείται το μοντέλο σωματιδιακών συγκρούσεων του McCormack που αποτελεί ένα ιδιαίτερα αξιόπιστο μοντέλο με πολλές δυνατότητες. Εξετάζεται η επίδραση διαφόρων παραμέτρων όπως της σύστασης του μείγματος, του δυναμικού των σωματιδιακών συγκρούσεων και άλλων, ενώ παράλληλα εφαρμόζεται και η τεχνική επιτάχυνσης του Κεφαλαίου 4.

Η αντίστοιχη ροή μείγματος εντός αγωγού ορθογωνικής διατομής που προκαλείται από κλίσεις πίεσης θερμοκρασίας ή συγκέντρωσης αντιμετωπίζεται στο Κεφάλαιο 7. Η εφαρμογή του σχήματος επιτάχυνσης του Κεφαλαίου 4 στη συγκεκριμένη περίπτωση αποδείχθηκε καταλυτική, μιας και το υπολογιστικό φορτίο όταν οι δύο διαστάσεις είναι πεπερασμένες είναι πολύ μεγάλο και στη συγκεκριμένη περίπτωση απαγορευτικό μέχρι τώρα, ιδιαίτερα για την μελέτη καταστάσεων κοντά στο συνεχές όριο. Γίνεται λεπτομερής μελέτη των αποτελεσμάτων και διερευνάται η επίδραση διαφόρων παραμέτρων όπως η συγκέντρωση, ο λόγος των διαστάσεων της διατομής και άλλων [16, 17]. Σημειώνεται ότι η ροή μειγμάτων σε αγωγούς ορθογωνικής διατομής, αποτελεί μια συνηθισμένη περίπτωση σε εφαρμογές και η ανάπτυξη εργαλείων για την αξιόπιστη προσομοίωση τους είναι καίριας σημασίας.

Πέρα όμως από τις ροές εντός αγωγών μια άλλη σημαντική κατηγορία με εξαιρετική σημασία σε πρακτικές εφαρμογές αποτελούν οι διατμητικές ροές οι οποίες και μελετώνται στο Κεφάλαιο 8 για αέριο ενός συστατικού. Η ροή Couette αποτελεί την απλούστερη περίπτωση και έχει αντιμετωπιστεί από πολλούς ερευνητές. Μια αρκετά πιο πολύπλοκη ροή που παραμένει εντελώς ανεξερεύνητη, είναι αυτή εντός ορθογωνικής κοιλότητας η οποία προκαλείται από κίνηση της άνω πλάκας κάθετα προς τη διατομή. Εκτός από τα συνηθισμένα προβλήματα στην περίπτωση αυτή απαιτείται και η αντιμετώπιση των ασυνεχειών που δημιουργούνται ανάμεσα στα στατικά τοιχώματα και την κινούμενη πλάκα. Στο παρόν Κεφάλαιο αναπτύσσεται μια νέα προσέγγιση για την αντιμετώπιση αυτού του προβλήματος με σημαντικά αποτελέσματα. Ταυτόχρονα γίνεται αναλυτική μελέτη των φυσικών φαινομένων που δημιουργούνται ενώ εξετάζονται οι ροές που διαμορφώνονται για διάφορες αναλογίες των διαστάσεων της κοιλότητας, ενώ η ροή επιλύεται για όλο το φάσμα του αριθμού Knudsen [18].

Οι αντίστοιχες ροές στην περίπτωση όπου το αέριο αποτελεί μείγμα αερίων εξετάζονται στο Κεφάλαιο 9. Αρχικά, μελετάται η περίπτωση της ροής Couette και στη συνέχεια η ροή σε κοιλότητα. Οι περιπτώσεις που εξετάζονται αφορούν τυπική τετραγωνική γεωμετρία

και την επίδραση διαφόρων παραγόντων όπως η σύσταση του μείγματος και ο αριθμός Knudsen της ροής [19]. Τέλος, τα αποτελέσματα συγκρίνονται με τα αντίστοιχα του αερίου ενός συστατικού που προέκυψαν στο Κεφάλαιο 8.

Η διατριβή κλείνει με μια ανακεφαλαίωση στο Κεφάλαιο 10 και μια συνόψιση των κυριότερων σημείων της. Ταυτόχρονα γίνονται και ορισμένες προτάσεις που αφορούν το πως μπορεί η παρούσα εργασία να επεκταθεί, αλλά και νέα ερευνητικά αντικείμενα που μπορούν να διερευνηθούν και να αναπτυχθούν στο ίδιο πάντα επιστημονικό πεδίο.

Κεφάλαιο 2

Βιβλιογραφική ανασκόπηση

2.1 Εισαγωγή

Όπως διατυπώθηκε και στην εισαγωγή της διατριβής, το αντικείμενο της αφορά τη μελέτη μικρορροών αερίων για όλο το φάσμα του αριθμού Knudsen και τη βελτίωση των εμπλεκόμενων υπολογιστικών μεθόδων και πιο συγκεκριμένα της μεθόδου DVM, και της μεθόδου Lattice Boltzmann. Στόχος, η διεύρυνση του εύρους των εφαρμογών που μπορούν να αντιμετωπιστούν αριθμητικά σε συσκευές μικρο- και νανο-κλίμακας ή σε αραιοποιημένες ατμόσφαιρες και η ευκολότερη και ακριβέστερη προσομοίωση τους.

Η θέσπιση των στόχων αυτών όμως, κατέστησε απαραίτητη την σε βάθος διερεύνηση και κατανόηση των μεσοσκοπικών μεθοδολογιών που εφαρμόζονται για την επίλυση προβλημάτων στη μικροκλίμακα. Ταυτόχρονα θεωρήθηκε απαραίτητη και η αναζήτηση άλλων προσεγγίσεων που βασίζονται σε διαφορετική λογική όπως η επίλυση των τροποποιημένων εξισώσεων Navier - Stokes και των αποτελεσμάτων που αυτές δίνουν, προκειμένου να καταστεί δυνατή η συγκριτική αξιολόγηση της προτεινόμενης μεθοδολογίας.

2.2 Εξίσωση Boltzmann και εφαρμογές στη μικροκλίμακα

Αν και η θεωρία του Boltzmann [20, 21, 22] ήταν γνωστή από το τέλος του 19^{ου} αιώνα, παρέμενε στο περιθώριο του επιστημονικής έρευνας για μεγάλο χρονικό διάστημα. Το πρώτο σημαντικό βήμα εξέλιξης έγινε τη δεκαετία του '50, με την ανάπτυξη μεθόδων που αφορούσαν την εφαρμογή της στη μελέτη φαινομένων που παρουσιαζόταν στην μικροσκοπική κλίμακα αλλά και την έλευση των υπολογιστικών συστημάτων η οποία υπήρξε καταλυτική. Αυτό συνέβη, διότι η υπολογιστική προσπάθεια που απαιτεί η όποια ενασχόληση με τη εξίσωση Boltzmann είναι εξαιρετικά μεγάλη και ουσιαστικά αδύνατη χωρίς την ύπαρξη κάποιου υπολογιστικού συστήματος με ικανοποιητική ισχύ. Η συνέχεια ήταν αρκετά παραγωγική μέχρι την τελευταία εικοσαετία όπου πλέον η ανάπτυξη υπήρξε ραγδαία, κυρίως λόγω της προοπτικής πρακτικών εφαρμογών.

Η εξίσωση Boltzmann¹ παρά την φαινομενική της απλότητα, είναι πολύ δύσκολη ως

¹ Στο Κεφάλαιο 3 παρουσιάζεται η εξίσωση Boltzmann και ορισμένα βασικά στοιχεία της.



προς την επίλυσή της ενώ ταυτόχρονα απαιτούνται ορισμένες σημαντικές παραδοχές. Οι βασικότερες εξ' αυτών αφορούν τον τρόπο προσδιορισμού του όρου των σωματιδιακών συγκρούσεων, καθώς και τον τύπο των οριακών συνθηκών. Οι συνήθεις πρακτικές που ακολουθούνται παρουσιάζονται στη συνέχεια.

2.2.1 Μοντελοποίηση του όρου των σωματιδιακών συγκρούσεων

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

Ο κάθε τύπος συγκρούσεων, αναφέρεται στον συνολικό αριθμό σωματιδίων που αλληλεπιδρούν μεταξύ τους την ίδια χρονική στιγμή. Προφανώς είναι αδύνατο να μπορέσουν να περιληφθούν όλοι οι πιθανοί τύποι των συγκρούσεων, αφού ο αριθμός τους είναι ίσος με τον αριθμό των σωματιδίων στο σύστημα. Από την άλλη βέβαια μεριά, δεν έχουν όλοι την ίδια σημασία αλλά και την ίδια συχνότητα [23]. Ιδιαίτερα για αραιοποιημένες ροές, φαίνεται ότι είναι αρκετός ο προσδιορισμός μόνο των συγκρούσεων στις οποίες εμπλέκονται δύο σωματίδια εφόσον όλες οι άλλες περιπτώσεις είναι πολύ σπάνιες. Όσο βέβαια προσεγγίζεται η υδροδυναμική περιοχή, καθίσταται χρήσιμος και προοδευτικά απαραίτητος ο υπολογισμός και των συγκρούσεων στις οποίες εμπλέκονται τρία σωματίδια αφού πλέον κάτι τέτοιο είναι αρκετά πιθανό.

Το επόμενο βήμα είναι φυσικά να καθοριστεί η συμπεριφορά των σωματιδίων κατά τις συγκρούσεις τους, ώστε να είναι δυνατός ο προσδιορισμός της μετέπειτα τροχιάς τους. Αυτό είναι εφικτό μέσω του υπολογισμού του δυναμικού αλληλεπίδρασης των σωματιδίων. Μια πρώτη προσέγγιση είναι το να θεωρηθούν οι συγκρούσεις των σωματιδίων ως απολύτως ελαστικές και τα σωματίδια εντοπισμένα χωρικά (μοντέλο συμπαγών σφαιρών) [24]. Κάτι τέτοιο απλοποιεί σημαντικά τα πράγματα, όμως δεν είναι αρκούντως ρεαλιστικό. Για το λόγο αυτό έχουν προταθεί και άλλες θεωρήσεις όπως αυτή των σωματιδίων Lenard - Jones [6]. Τέλος, μια διαφορετική τακτική είναι η χρήση πειραματικών δεδομένων και η εξ αυτών εξαγωγή των τιμών του δυναμικού αλληλεπίδρασης. Κάτι τέτοιο δεν είναι βέβαια θεωρητικά θεμελιωμένο, αλλά προφανώς αποτελεί τη πιο αποτελεσματική μεθοδολογία για την σωστή προσομοίωση των πραγματικών φαινομένων. Το δυναμικό που προκύπτει ονομάζεται πραγματικό δυναμικό [25].

Γνωρίζοντας τώρα τα δύο αυτά στοιχεία είναι πλέον δυνατή η αντικατάσταση του όρου των συγκρούσεων και η επίλυση της εξίσωσης Boltzmann. Όμως, ακόμα και με αυτές τις παραδοχές, η επίλυση είναι πολύ δυσχερής όσον αφορά την ανάκτηση αναλυτικών λύσεων, όπου αυτό είναι δυνατόν, αλλά και υπερβολικά απαιτητική σε υπολογιστικό χρόνο όταν χρησιμοποιείται αριθμητική προσομοίωση. Σε κάθε περίπτωση πάντως, τουλάχιστον προς το παρόν, το πλήθος των ροών που μπορεί να αντιμετωπιστούν με τον τρόπο αυτό είναι πολύ μικρό.

Μία περίπτωση όπου η επίλυση της εξίσωσης Boltzmann είναι εφικτή, είναι όταν η πυκνότητα των σωματιδίων είναι πολύ μικρή, και τα σωματίδια μπορούν να αντιμετωπι-

στούν διακριτά (free molecular regime) [16]. Τότε, θεωρώντας αμελητέο τον αριθμό των συγκρούσεων και με μεγάλη βέβαια προσπάθεια μπορεί να προκύψουν λύσεις. Όσο όμως η πυκνότητα αυξάνει, αυτό καθίσταται αρκετά δύσκολο και προοδευτικά αδύνατο. Το κριτήριο με το οποίο χαρακτηρίζεται αν μια ροή μπορεί να αντιμετωπιστεί ως σύνολο διακριτών σωματιδίων είναι ο αριθμός Kn . Ως περιοχή ελεύθερης κίνησης των σωματιδίων θεωρείται συνήθως όταν $Kn \geq 10^3$. Αντίστοιχα, μπορεί να οριστεί και η περιοχή όπου το ρευστό μπορεί πλέον να θεωρηθεί ως συνεχές μέσο και να χρησιμοποιηθούν οι εξισώσεις Navier - Stokes που είναι συνήθως για $Kn \leq 10^{-3}$ και με την εφαρμογή των κατάλληλων οριακών συνθηκών ολίσθησης για $Kn \leq 10^{-1}$. Για τις ενδιάμεσες τιμές, στην μεταβατική περιοχή όπως αποκαλείται, επιβάλλεται η επίλυση της εξίσωσης Boltzmann με την ύπαρξη του όρου των συγκρούσεων.

Προκειμένου να αντιμετωπιστούν πιο πολύπλοκες ροές και να υπερκεραστεί το εμπόδιο την έλλειψης υπολογιστικής ισχύος, η συνήθης πρακτική είναι η μοντελοποίηση του όρου των συγκρούσεων. Τα μοντέλα που έχουν προταθεί είναι αρκετά, όχι όλα βέβαια με την ίδια επιτυχία.

Το πρώτο μοντέλο που παρουσιάστηκε ήταν το BGK [26, 27]. Συνιστά την απλούστερη δυνατή προσέγγιση του όρου των συγκρούσεων, αλλά και την βάση στην οποία αναπτύχθηκαν και τα περισσότερα μετέπειτα μοντέλα. Χρησιμοποιείται σε μεγάλη έκταση για ροές ενός συστατικού μέχρι και σήμερα, αφού τα αποτελέσματα που δίνει είναι σε αρκετές περιπτώσεις ικανοποιητικά.

Μια βελτιωμένη εκδοχή όσον αφορά και πάλι ροές ενός συστατικού, παρουσιάστηκε το 1974 και ονομάστηκε μοντέλο S [28, 29]. Η διαφοροποίηση υπήρξε στην κατανομή ισορροπίας η οποία πλέον περιέλαβε και τον όρο της θερμορροής, καθιστώντας πλέον δυνατή την εξαγωγή αποτελεσμάτων με ικανοποιητική ακρίβεια για μη ισοθερμοκρασιακές ροές. Ο αριθμός Prandtl παρέμεινε σταθερός αλλά, σε αντίθεση με το BGK, στη σωστή τιμή όσον αφορά μονατομικά αέρια. Αντίστοιχα αποτελέσματα δίνει και το επονομαζόμενο ελλειψοειδές μοντέλο (ES) [30, 31] το οποίο βασίζεται στην αντικατάσταση την κατανομής Maxwell από μια ανισοτροπική κατανομή Gauss, όπου πλέον υπεισέρχεται ως ανεξάρτητη μεταβλητή και ο αριθμός Prandtl. Για τιμή του Prandtl μονάδα προκύπτει το μοντέλο BGK. Σημειώνεται πάντως ότι και για τις δύο περιπτώσεις δεν είναι δυνατή η απόδειξη του θεωρήματος H (βλ. Κεφάλαιο 3).

Η αντικατάσταση του όρου των συγκρούσεων όταν το ρευστό είναι μείγμα αερίων, έχει αποτελέσει αντικείμενο μελέτης από πολλούς ερευνητές [32, 33, 34, 6]. Μια σειρά από μοντελοποιήσεις προτάθηκαν μέσα σε σύντομο χρονικό διάστημα [35, 36, 37, 38] με σχετικά όμως περιορισμένες δυνατότητες. Ενδεικτικά, αναφέρεται ότι το μοντέλο Hamel [38] αποτελεί την ευθεία επέκταση του BGK για μείγμα δύο συστατικών. Επιλύονται από μία εξίσωση για κάθε συστατικό, ενώ ο όρος των συγκρούσεων είναι μια άθροιση των αποκλίσεων των συναρτήσεων πιθανότητας κατανομής από αυτές της κατά Maxwell ισορροπίας με διαφορετικό όμως χρόνο χαλάρωσης. Η άμεση σχέση όμως με το BGK προκαλεί και την διατήρηση των μειονεκτημάτων που εκείνο παρουσιάζει.

Ένα πιο σύνθετο μοντέλο από αυτά που ήδη αναφέρθηκαν, που όμως έχει πολύ καλύτερη φυσική θεμελίωση και μεγαλύτερες δυνατότητες, προτάθηκε από τον McCormack [39]. Είναι αρκετά πολύπλοκο, αλλά το γεγονός ότι περιλαμβάνονται αποκλίσεις τόσο

της συγκέντρωσης και της ταχύτητας όσο και της θερμοκρασίας και των τάσεων, διευρύνει πολύ το εύρος των εφαρμογών, ενώ επιτρέπει και την ανεξάρτητη μοντελοποίηση του τύπου των σωματιδίων και των συγκρούσεων χρησιμοποιώντας ακόμα και δεδομένα που έχουν προκύψει από πειραματικές παρατηρήσεις [40]. Ταυτόχρονα εκτός από την ικανοποίηση των νόμων διατηρησιμότητας και του θεωρήματος H που όλα τα προαναφερθέντα μοντέλα επιτυγχάνουν, η εφαρμογή της διαδικασίας Chapman-Enskog² δίνει τις σωστές εκφράσεις για όλους τους συντελεστές μεταφοράς, δηλαδή το ιξώδες, την θερμική αγωγιμότητα, τη διαχυτότητα και τη θερμική διαχυτότητα, κάτι που δεν συμβαίνει με τη πλειονότητα των υπολοίπων. Το γεγονός αυτό επιβεβαιώνεται και από τη σύγκριση των αποτελεσμάτων [41, 42, 43] με τα αντίστοιχα της ακριβούς εξίσωσης Boltzmann [44, 45].

Ένα κοινό χαρακτηριστικό που διαθέτουν τα προαναφερθέντα μοντέλα αφορά τον τρόπο προσδιορισμού της τιμής του χρόνου χαλάρωσης. Η συνήθης πρακτική είναι να λαμβάνεται ως μια σταθερά που καθορίζεται από πειραματικά δεδομένα με βάση τις τιμές ορισμένων μακροσκοπικών μεγεθών³. Υπάρχουν όμως και προσεγγίσεις όπου αυτό δεν ισχύει. Μία από αυτές είναι η θεώρηση ότι ο χρόνος χαλάρωσης είναι μεταβλητός και ανάλογος με τη μικροσκοπική ταχύτητα των σωματιδίων [46]. Υπάρχουν περιπτώσεις όπου η υπόθεση αυτή μπορεί να συνεισφέρει σημαντικά στην βελτίωση της ακρίβειας των αποτελεσμάτων.

2.2.2 Προσδιορισμός οριακών συνθηκών

Οι οριακές συνθήκες αποτελούν ίσως το βασικότερο παράγοντα που προσδιορίζει την ακρίβεια των προσομοιώσεων. Ιδιαίτερα στις περιπτώσεις διεπιφάνειας ρευστού-στερεού όπου η ανταλλαγή ορμής και ενέργειας είναι έντονη, αλλά και αποτελούν τη πιο κοινή περίπτωση, οι οριακές συνθήκες αποκτούν κρίσιμη σημασία.

Η πρώτη συνθήκη που προτάθηκε ανήκει στον Maxwell και αποτελεί τη συνήθη συνθήκη που εφαρμόζεται ακόμα και σήμερα [7]. Σύμφωνα με αυτή, η κατανομή των εισερχομένων προς τη ροή σωματιδίων ακολουθεί την κατανομή Maxwell όπως αυτή ορίζεται από τις μακροσκοπικές ιδιότητες του στερεού τοιχώματος. Αυτό σημαίνει ότι τα σωματίδια που προσπίπτουν στην επιφάνεια χάνουν τη μνήμη τους και συνεχίζουν μόνο με βάση τη πληροφορία του τοιχώματος. Είθισται να λέγεται ότι τα σωματίδια απορροφώνται από το τοίχωμα και επανεκπέμπονται, ενώ οι οριακές συνθήκες ονομάζονται τύπου διάχυσης. Ορισμένες φορές όμως, η εφαρμογή οριακών συνθηκών διάχυσης και ιδιαίτερα σε πολύ αραιά αέρια ή σε τοιχώματα με πολύ μικρή τραχύτητα, έρχεται σε αναντιστοιχία με τα πειραματικά δεδομένα. Προκειμένου να ξεπεραστεί αυτό το μειονέκτημα, ο ίδιος ο Maxwell [47] τροποποίησε τις οριακές συνθήκες ώστε να μην υπάρχει ολική απώλεια μνήμης των σωματιδίων. Έτσι, ένα ορισμένο ποσοστό α των σωματιδίων, δεν απορροφάται από το τοίχωμα αλλά ανακλάται πάνω σε αυτό, και συνεχίζει με ταχύτητα ίδια σε μέτρο με την προσπίπτουσα και συμμετρική σε αυτή ως προς επίπεδο κάθετο στο τοίχωμα. Ο

² Αποτελεί τεχνική που επιτρέπει την εξαγωγή των μακροσκοπικών εξισώσεων και μέσω αυτών τον προσδιορισμό των μακροσκοπικών συντελεστών μεταφοράς. Περισσότερες λεπτομέρειες υπάρχουν στη βιβλιογραφία [29, 7].

³ Για παράδειγμα βλέπε σχέση (3.36).

συντελεστής α είναι χαρακτηριστική ιδιότητα του συνδυασμού ρευστού-τοιχώματος και λαμβάνεται από πειραματικά δεδομένα. Οι οριακές συνθήκες του Maxwell είναι αυτές που χρησιμοποιούνται στην πλειονότητα των περιπτώσεων. Είναι αρκετά εύχρηστες και τα αποτελέσματά που δίνουν είναι αρκετά κοντά σε πειραματικά δεδομένα. Παρόλα αυτά ο τρόπος που αντιμετωπίζεται η αλληλεπίδραση ρευστού-τοιχώματος από φυσική άποψη δεν μπορεί να χαρακτηριστεί ακριβής, ενώ υπάρχουν ροές που αυτό οδηγεί σε σημαντικά σφάλματα. Στις περιπτώσεις αυτές χρησιμοποιούνται άλλου τύπου οριακές συνθήκες που προσφέρουν μεγαλύτερη ακρίβεια και καλύτερη φυσική συνοχή.

Η επιλογή του συντελεστή ανάκλασης α από πειραματικά δεδομένα δεν είναι κάτι απλό. Ακόμα και για ίδιο συνδυασμό υλικού επιφανείας και ρευστού οι τιμές είναι δυνατόν να διαφέρουν. Για παράδειγμα, πειραματικά δεδομένα για το συνδυασμό γυαλι με ήλιο δίνουν $\alpha = 0.895$, ενώ πλησιάζοντας στην περιοχή της ελεύθερης κίνησης των σωματιδίων προκύπτει $\alpha = 0.935$ [48]. Από άλλες μετρήσεις η τιμή του συντελεστή είναι $\alpha = 0.68$ [49]. Οι διαφορές αυτές οφείλονται στο γεγονός ότι δεν είναι δυνατόν μια ελεύθερη μεταβλητή να ορίζει ταυτόχρονα όλους τους συντελεστές μετάδοσης μεταξύ επιφανείας και ρευστού.

Για την αντιμετώπιση του προβλήματος προτάθηκε μια εναλλακτική θεώρηση [50], όπου πλέον οι συντελεστές για τον καθορισμό των οριακών συνθηκών έγιναν δύο. ένας που καθορίζει την μετάδοση ορμής και ένας δεύτερος την μετάδοση θερμότητας. Η εφαρμογή των οριακών συνθηκών Cercignani-Lampis όπως ονομάζονται, έχει γίνει με επιτυχία [51, 52] αν και περιορισμένα λόγω της αυξημένης πολυπλοκότητας που παρουσιάζεται. Επεκτάσεις του μοντέλου για πολυατομικά αέρια [53] έχουν παρουσιαστεί, ενώ πολύ πρόσφατα διατυπώθηκε μια γενικευμένη οριακή συνθήκη [54] που περιλαμβάνει ως υποπεριπτώσεις όλες τις προαναφερθείσες και αντιμετωπίζει ορισμένες φυσικές αναντιστοιχίες όπως το γεγονός ότι στις οριακές συνθήκες των Cercignani & Lampis ο ρυθμός μετάδοσης θερμότητας δεν επηρεάζεται από τον συντελεστή μετάδοσης ορμής.

2.2.3 Εφαρμογές

Το πλήθος των άρθρων που αναφέρονται στην εφαρμογή της εξίσωσης Boltzmann για την επίλυση συγκεκριμένων προβλημάτων είναι μεγάλο και αναφέρεται σε διαφόρων τύπων ροές. Στην πλειονότητα βέβαια των περιπτώσεων χρησιμοποιείται στη γραμμικοποιημένη μορφή (βλ. Παράγραφο 3.6) κάτι που περιορίζει μεν το εύρος των εξεταζομένων προβλημάτων αλλά όχι σημαντικά, τουλάχιστον για ροές στη μεταβατική περιοχή, ενώ δεν αντιμετωπίζονται οι τεράστιες δυσκολίες της μη γραμμικής εξίσωσης.

Η απλούστερη ροή είναι η ροή μεταξύ δύο παράλληλων πλακών μεγάλου μήκους, υπό την επίδραση μιας διαφοράς πίεσης. Πιο συγκεκριμένα, η περισσότερο μελετημένη περίπτωση αφορά μόνιμη ροή μεταξύ πλακών απείρου μήκους και ένα συστατικό. Αποτελεί ένα πρότυπο πρόβλημα στο οποίο μπορεί να εξεταστεί η αποτελεσματικότητα διαφόρων νέων θεωριών ή τεχνικών. Η εφαρμογή οριακών συνθηκών διάχυσης σε συνδυασμό με το μοντέλο BGK για την αντικατάσταση του όρου των συγκρούσεων, έχει επιτρέψει την χρησιμοποίηση όλων των αναλυτικών και αριθμητικών μεθόδων για την εξαγωγή αποτελεσμάτων [55, 56, 57, 58, 59, 60, 61], τα οποία συνήθως αφορούν την παροχή μάζας και θερμότητας. Αντίστοιχα αποτελέσματα έχουν ληφθεί και με το μοντέλο S [62]

καθώς και με απ' ευθείας επίλυση της εξίσωσης Boltzmann [63, 64, 65] βασιζόμενα πάντα στο μοντέλο των συμπαγών σφαιρών για τα σωματίδια. Μία σημαντική παρατήρηση που μπορεί να εξαχθεί από όλες αυτές τις εργασίες είναι ότι τελικά, τουλάχιστον για απλές ροές, τα αποτελέσματα που προκύπτουν από τις μοντελοποιημένες εξισώσεις (BGK και S) παρουσιάζουν πολύ μικρή απόκλιση από αυτά της κανονικής εξίσωσης Boltzmann.

Οι οριακές συνθήκες διάχυσης-ανάκλασης έχουν εφαρμοστεί επίσης με επιτυχία. Αυτό έχει γίνει τόσο με την χρησιμοποίηση του μοντέλου BGK [66, 60], όσο και της εξίσωσης Boltzmann [64]. Όμως φαίνεται ότι η βιβλιογραφία είναι αρκετά φτωχότερη σε σχέση με τις οριακές συνθήκες διάχυσης. Τέλος, υπάρχουν εργασίες όπου εξετάζεται και η εφαρμογή των οριακών συνθηκών Cercignani-Lampis [51, 52].

Η επόμενη ροή η οποία έχει μελετηθεί ικανοποιητικά, είναι αυτή της κίνησης του ρευστού εντός κυλινδρικού αγωγού μεγάλου μήκους υπό την επίδραση διαφοράς πίεσης. Η περίπτωση της ροής εντός κυλίνδρου, ενώ στην πραγματικότητα είναι δισδιάστατη, μαθηματικά μπορεί να γίνει μονοδιάστατη αν μεταφερθεί στο κυλινδρικό σύστημα συντεταγμένων όπου πλέον μεταβολές υπάρχουν μόνο στην ακτινική διεύθυνση. Και πάλι η εφαρμογή οριακών συνθηκών διάχυσης είναι η συνήθης πρακτική, σε συνδυασμό με διάφορες προτάσεις ως προς τον τρόπο επίλυσης της εξίσωσης όπως απ ευθείας αριθμητική επίλυση [67] ή με χρήση των ολοκληρωτικών εξισώσεων [68]. Ταυτόχρονα, και το μοντέλο S έχει δώσει ικανοποιητικά αποτελέσματα [69] αρκετά κοντά και σε αυτό που δίνει η επίλυση της γραμμικοποιημένης εξίσωσης Boltzmann [70] με το μοντέλο των συμπαγών σφαιρών. Αντίστοιχα στοιχεία έχουν προκύψει και για την περίπτωση των οριακών συνθηκών διάχυσης - ανάκλασης για το μοντέλο BGK [71, 66, 48] καθώς και για το S [69].

Μια άλλη κατηγορία ροών είναι αυτές που προκαλεί μια διαφορά θερμοκρασίας. Η πρώτη περίπτωση αφορά τη ροή μεταξύ δύο παράλληλων πλακών, δηλαδή τη ροή Poiseuille, με διαφορετική όμως γενεσιουργό αιτία η οποία αυτή τη φορά είναι η θερμοκρασία και όχι η πίεση, και ονομάζεται ροή θερμικού ερπυσμού (thermal creep flow). Και εδώ έχει υπάρξει μια σειρά εργασιών με οριακές συνθήκες διάχυσης [72, 73, 63, 64] αλλά και διάχυσης - ανάκλασης [74, 60, 75]. Το σημαντικό συμπέρασμα που μπορεί να εξαχθεί στην περίπτωση αυτή είναι ότι πλέον γίνεται φανερό η αδυναμία του BGK να προσομοιώσει ροές όπου περιλαμβάνονται θερμικά φαινόμενα εφόσον οι διαφορές των αποτελεσμάτων που δίνει, αποκλίνουν σημαντικά από αυτά της επίλυσης της εξίσωσης Boltzmann. Αντίθετα, το μοντέλο S βρίσκεται πολύ πιο κοντά στη πραγματικότητα [29, 76].

Η ίδια ροή παρατηρείται και εντός κυλινδρικού αγωγού. Η εφαρμογή του μοντέλου BGK [77, 78, 71, 48] και πάλι αποδεικνύεται ότι δεν καταφέρνει να δώσει καλά αποτελέσματα ιδίως για μικρούς αριθμούς Knudsen, αν θεωρηθεί ότι τα αποτελέσματα του μοντέλου S είναι πιο αξιόπιστα. Το συμπέρασμα αυτό ισχύει και για τις δύο περιπτώσεις οριακών συνθηκών τύπου Maxwell.

Υπάρχουν επίσης και μια σειρά από μονοδιάστατες ροές οι οποίες έχουν μελετηθεί αρκετά όπως η ροή Couette μεταξύ παράλληλων πλακών ή και μεταξύ ομόκεντρων κυλίνδρων [79, 80, 81, 82, 83, 84, 85], ροές γύρω από σώματα [86] καθώς και φαινόμενα όπως εξάτμιση και συμπύκνωση [87, 88, 89, 90]. Όλα όμως αναφέρονται σε μία διάσταση και είναι σχετικά απλά προβλήματα. Πιο πολύπλοκες ροές αλλά και οι τεχνολογικά σημαντι-

κές δυστυχώς δεν έχουν αντιμετωπιστεί τουλάχιστον σε βαθμό που τα αποτελέσματα να είναι αξιοποιήσιμα.

Ένα όμως από τα αποτελέσματα με τεχνολογικό ενδιαφέρον που έχει δώσει η επίλυση της εξίσωσης Boltzmann είναι ο προσδιορισμός των συντελεστών ολίσθησης. Οι συντελεστές αυτοί αποτελούν κρίσιμες παραμέτρους για την εφαρμογή των εξισώσεων συνέχειας στην επίλυση ελαφρά αραιωμένων ροών και την αντιμετώπιση προβλημάτων σε μικροκλίμακα χωρίς πάντως να μπορούν σε καμιά περίπτωση να προσεγγίσουν ροές όπου $Kn \geq 0.1$. Σε ροές ενός συστατικού υπάρχουν τρεις τέτοιοι συντελεστές, αυτός της ιξώδους ολίσθησης (viscous slip coefficient), της θερμικής ολίσθησης (thermal slip coefficient) καθώς και αυτός του θερμοκρασιακού άλματος (temperature jump coefficient). Ο πρώτος προκύπτει ως αδιάστατη έκφραση της ταχύτητας του ρευστού πάνω σε τοίχωμα όταν είναι καθορισμένη η ταχύτητα του μέσου στο άπειρο. Αντίστοιχα, ο συντελεστής θερμικής ολίσθησης αποτελεί την αντίστοιχη έκφραση όταν η κίνηση οφείλεται σε κλίση θερμοκρασίας. Τέλος, ο συντελεστής θερμοκρασιακού άλματος εκφράζει την απόκλιση της θερμοκρασίας τοιχώματος από την αντίστοιχη του ρευστού πάνω σε αυτό, όταν αυτή προκαλείται από κλίση θερμοκρασίας κάθετη προς το τοίχωμα. Σημειώνεται επίσης ότι υπάρχει και ο συντελεστής ολίσθησης λόγω διάχυσης (diffusion slip coefficient), ο οποίος όμως απαντάται μόνο σε μείγματα και εκφράζει την σχετική ταχύτητα του ρευστού πάνω στο τοίχωμα όταν αιτία της κίνησης είναι κλίση συγκέντρωσης παράλληλα ως προς το τοίχωμα.

Ο προσδιορισμός των συντελεστών που προαναφέρθηκαν επιτυγχάνεται συνήθως μέσω της επίλυσης ροών σε ημίαιρα χωρία. Η επιλογή αυτή γίνεται προκειμένου να αποφευχθούν τυχόν επιδράσεις από άλλα τοιχώματα. Για τον συντελεστή ιξώδους ολίσθησης (σ_P) με επίλυση της εξίσωσης Boltzmann για μοντέλο συμπαγών σφαιρών και οριακές συνθήκες διάχυσης, έχει προκύψει η τιμή $\sigma_P = 0.985$ [91, 92]. Με μοντελοποίηση του όρου των συγκρούσεων οι τιμές αποκτούν ένα μικρό εύρος διακύμανσης $0.9624 \leq \sigma_P \leq 1.0185$ [93, 94, 95]. Η επίδραση του συντελεστή ανάκλασης όταν οι οριακές συνθήκες είναι διάχυσης - ανάκλασης μπορεί να περιληφθεί σε μια συνολική έκφραση [96, 97]

$$\sigma_P(a) = \frac{2-a}{a} [\sigma_P(1) - 0.1211(1-a)] \quad (2.1)$$

η οποία βρίσκεται σε ικανοποιητική συμφωνία με τα αποτελέσματα που λαμβάνονται από την προσομοίωση [98, 99]. Αντίστοιχα, για τον συντελεστή θερμικής ολίσθησης έχουν εφαρμοστεί και πάλι διάφορες τεχνικές [100, 101, 102, 92] με τις τιμές να κυμαίνονται μεταξύ $1.149 \geq \sigma_T \geq 0.988$ με πιο αποδεκτή τιμή την $\sigma_T = 1.01$ [29]

Τελευταίος συντελεστής που υπολογίζεται για ροές ενός συστατικού είναι αυτός του θερμοκρασιακού άλματος. Και εδώ υπάρχει σημαντική βιβλιογραφία [103, 104, 105, 106, 107] που περιλαμβάνει λύσεις βασισμένες στην εξίσωση Boltzmann και σε μοντελοποιημένες εξισώσεις, καθώς και οριακές συνθήκες των δύο τύπων του Maxwell και των Cercignani-Lampis.

Γενικά, μπορεί να λεχθεί ότι η βιβλιογραφία όσον αφορά τους συντελεστές ολίσθησης είναι αρκετά πλήρης για ροές ενός συστατικού και υπάρχουν κάποιες τιμές στις οποίες συγκλίνουν οι εκτιμήσεις. Το βασικότερο ίσως πρόβλημα είναι η διάχυση της πληροφο-

ρίας αυτής στην περιοχή της ρευστομηχανικής όπου γενικά χρησιμοποιούνται ακόμα οι συντελεστές που είχε υπολογίσει ο ίδιος ο Maxwell που αν και αποτελούσαν επίτευγμα για την εποχή τους, σήμερα είναι μάλλον ξεπερασμένοι.

Περνώντας σε ροές μειγμάτων, γίνεται αμέσως εμφανές ότι η προσπάθεια που έχει καταβληθεί είναι περιορισμένη. Ελάχιστες εργασίες έχουν εμφανισθεί που να ασχολούνται με τον ακριβή υπολογισμό ροών, ενώ η αντίστοιχη προσπάθεια για τον υπολογισμό των συντελεστών ολίσθησης αν και πιο έντονη, δεν μπορεί να χαρακτηριστεί ικανοποιητική. Η εστίαση φυσικά στους συντελεστές ολίσθησης μπορεί να γίνει κατανοητή από την άμεση σχέση που έχουν με την εφαρμογή των εξισώσεων συνέχειας στην μικρο-ρευστοδυναμική. Παρόλα ταύτα, όπως έχει ήδη αναφερθεί, η προσέγγιση αυτή έχει περιορισμένες δυνατότητες ως προς το εύρος του αριθμού Knudsen που καλύπτει, και η επίλυση των κινητικών εξισώσεων θεωρείται ιδανική. Παράλληλα, οι περισσότεροι από τους υπάρχοντες συντελεστές έχουν προκύψει με την εφαρμογή απλών κινητικών μοντέλων που ήταν διαθέσιμα παλιότερα [108, 109, 110, 111, 112] και δεν μπορούν να χαρακτηριστούν ακριβείς και με ικανοποιητική φυσική συνοχή.

Πολύ πρόσφατα, έχουν αρχίσει να εφαρμόζονται πιο ανεπτυγμένα μοντέλα για τον υπολογισμό και των τεσσάρων συντελεστών ολίσθησης. Ειδικότερα για τον συντελεστή ιξώδους ολίσθησης, η χρήση του μοντέλου McCormack με τη μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων (DVM) και οριακές συνθήκες διάχυσης έχει δώσει με ικανοποιητική ακρίβεια αποτελέσματα που αφορούν ορισμένα μείγματα ευγενών αερίων [41]. Για τα ίδια μείγματα και την ίδια μεθοδολογία έχουν υπολογιστεί και οι συντελεστές θερμικής ολίσθησης [42], ολίσθησης λόγω διάχυσης [43] και θερμοκρασιακού άλματος [113].

Επίσης, η εφαρμογή αναλυτικών μεθόδων έχει γίνει με επιτυχία ξανά σε συνδυασμό με το μοντέλο McCormack [114, 115], ενώ και η ακριβής εξίσωση Boltzmann έχει επιλυθεί με θεώρηση για τις συγκρούσεις συμπαγών σφαιρών αλλά και συγκρούσεων τύπου Lennard-Jones [116, 117, 118, 45].

Ένα σημαντικό πρόβλημα πάντως που παρουσιάζεται όταν το ρευστό αποτελεί μείγμα είναι το μεγάλο πλήθος των παραμέτρων που υπεισέρχονται στην λύση. Το γεγονός αυτό καθιστά απαραίτητη την πραγματοποίηση ικανού αριθμού προσομοιώσεων για διαφόρους συνδυασμούς των τιμών των παραμέτρων, προκειμένου να υπάρξει καθαρή εικόνα της συμπεριφοράς του μείγματος.

Πέρα όμως από τον προσδιορισμό των συντελεστών για τις οριακές συνθήκες, έχουν υπάρξει και προσπάθειες για την επίλυση ορισμένων ροών με εξαγωγή του πλήρους φάσματος των αποτελεσμάτων που περιλαμβάνει τις κατανομές των μακροσκοπικών μεγεθών και συγκεντρωτικά μεγέθη όπως είναι η παροχή μάζας (mass flux) και η παροχή θερμότητας (heat flux). Στην κατεύθυνση αυτή έχει επιλυθεί η ροή μεταξύ παράλληλων πλακών [119, 120], η ροή σε κυλινδρικό αγωγό [121] και η ροή Couette [40] με χρήση του μοντέλου McCormack ενώ για την τελευταία έχει εφαρμοστεί και το μοντέλο Hamel [122]. Επίσης έχουν αντιμετωπιστεί και φαινόμενα όπως η εξάτμιση και η συμπίκνωση [123, 124]. Παρόλα αυτά, είναι εμφανής η έλλειψη συνολικής αντιμετώπισης αλλά και διασταύρωσης των εξαγόμενων αποτελεσμάτων πλην ελαχίστων εξαιρέσεων.

Σε προβλήματα δύο διαστάσεων η υπάρχουσα βιβλιογραφία είναι σαφώς πιο περιορισμένη. Σε αγωγούς ορθογωνικής διατομής μεγάλου μήκους, ορισμένα στοιχεία υπάρχουν

σε παλιότερες εργασίες οι οποίες όμως, είτε δεν είχαν ολοκληρωμένη αντιμετώπιση του προβλήματος και προσδιορισμό των ακριβών συνθηκών [125], είτε είχαν περιορισμένα αποτελέσματα [126]. Η πρώτη ολοκληρωμένη εργασία για μονατομικό αέριο αφορούσε την προσομοίωση μέσω της γραμμικοποιημένης εξίσωσης Boltzmann με το μοντέλο BGK σε συνδυασμό με τη μέθοδο DVM [127]. Αργότερα η ίδια προσέγγιση επεκτάθηκε και στο μοντέλο S [128].

Μια άλλη περίπτωση για την οποία έχουν υπάρξει αξιόπιστα αποτελέσματα είναι αυτή της ροής μέσω μιας μικρής οπής που συνδέει δύο δεξαμενές με διαφορετικές πιέσεις ή θερμοκρασίες [129, 130, 131, 132, 133, 134]. Η ροή έχει αντιμετωπιστεί τόσο για ισοθερμοκρασιακό πεδίο όσο και για μη ισοθερμοκρασιακό πεδίο.

Στην περιοχή των μειγμάτων αερίων σε δύο διαστάσεις η κατάσταση είναι όμως ακόμα πιο δύσκολη. Ειδικότερα εντοπίστηκαν ελάχιστες εργασίες που να δίνουν ολοκληρωμένα και αξιόπιστα αποτελέσματα για διαστάσιμα προβλήματα ακόμα και για τις σχετικά απλούστερες από τις ροές αυτής της κατηγορίας. Πιο συγκεκριμένα, μόνο για την περίπτωση της ροής σε οπή που συνδέει δύο δεξαμενές υπάρχουν συνολικά αποτελέσματα από προσομοιώσεις με χρήση του μοντέλου McCormack [135].

Μια παρατήρηση που αφορά συνολικά την περιοχή των αραιών αερίων και ενδεχομένως δεν είναι προφανής είναι η ύπαρξη ορισμένων φαινομένων τα οποία στα συνεχή μέσα εξαφανίζονται. Για παράδειγμα, αναφέρθηκε ότι η ροή θερμικού ερπυσμού είναι ροή μάζας που οφείλεται σε κλίση θερμοκρασίας, ενώ και η κλίση πίεσης δημιουργεί θερμοροή. Οι παρελκόμενες αυτές ροές (cross effects) μπορούν να είναι πολύ σημαντικές όμως πάντα εξαφανίζονται όταν ο αριθμός Knudsen μικρύνει αρκετά. Αν συμβολίσουμε τις αδιάστατες παροχές των διαφόρων μεγεθών ως Λ_{ij} όπου i το μετρούμενο μέγεθος και j η αιτία που προκαλεί το φαινόμενο και δημιουργηθεί το αντίστοιχο μητρώο, τότε τα στοιχεία της κύριας διαγωνίου αντιπροσωπεύουν φαινόμενα που εξακολουθούν να υπάρχουν και στο συνεχές όριο ενώ τα υπόλοιπα εξαφανίζονται. Συνολικά η φύση της κάθε ροής είναι [121]:

- Λ_{PP} : περιγράφει την ροή μάζας που οφείλεται σε κλίση πίεσης. Στο υδροδυναμικό όριο σχετίζεται με το ιξώδες μ .
- Λ_{TT} : περιγράφει την παροχή θερμότητας που οφείλεται σε κλίση θερμοκρασίας. Στο υδροδυναμικό όριο σχετίζεται με την θερμική αγωγιμότητα κ .
- Λ_{CC} : περιγράφει την παροχή λόγω διάχυσης που οφείλεται σε κλίση συγκέντρωσης. Στο υδροδυναμικό όριο σχετίζεται με τον συντελεστή διάχυσης D .
- Λ_{TP} : περιγράφει την παροχή θερμότητας που οφείλεται σε κλίση πίεσης και ονομάζεται *mechanocaloric effect* .
- Λ_{CP} : περιγράφει την παροχή λόγω διάχυσης που οφείλεται σε κλίση πίεσης και ονομάζεται *baroeffect* .
- Λ_{PT} : περιγράφει την ροή μάζας που οφείλεται σε κλίση θερμοκρασίας και ονομάζεται *θερμικός ερπυσμός (thermal creep)* .

- Λ_{CT} : περιγράφει την παροχή λόγω διάχυσης που οφείλεται σε κλίση θερμοκρασίας και ονομάζεται θερμική διάχυση *thermal diffusion* ή φαινόμενο Soret (Soret effect).
- Λ_{PC} : περιγράφει την ροή μάζας που οφείλεται σε κλίση συγκέντρωσης (δηλαδή την συνολική ροή μάζας του μείγματος) και ονομάζεται *diffusion baroeffect* .
- Λ_{TC} : περιγράφει την παροχή θερμότητας που οφείλεται σε κλίση συγκέντρωσης και ονομάζεται φαινόμενο Duffour (Duffour effect) .

Για τους συντελεστές Λ των δευτερευόντων φαινομένων υπάρχουν οι πολύ σημαντικές σχέσεις των Onsager-Kasimir [136, 137, 138] σύμφωνα με τις οποίες ισχύει $\Lambda_{ij} = \Lambda_{ji}$ για $i \neq j$. Η σημασία των σχέσεων αυτών είναι τεράστια γιατί ισχύουν σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen και επιτρέπουν την μείωση των απαραίτητων υπολογισμών προκειμένου να προσδιοριστούν όλοι οι συντελεστές, ενώ ταυτόχρονα αποτελούν ένα πολύ χρήσιμο εργαλείο για την πιστοποίηση αριθμητικών αποτελεσμάτων.

2.3 Μεθοδολογίες συνεχούς μέσου στη μεσοκλίμακα

Η ενδεικνυόμενη μεθοδολογία για την αντιμετώπιση ροών στη μικροκλίμακα και τη νανοκλίμακα όπως ήδη ειπώθηκε δεν μπορεί παρά να βασίζεται στη μεσοσκοπική προσέγγιση των φαινομένων. Παρόλα αυτά, ακόμα και σήμερα οι πρακτικές εφαρμογές αναφέρονται σε αριθμούς $Kn \leq 0.01$. Το γεγονός αυτό, επιτρέπει ακόμα την εφαρμογή εξισώσεων συνέχειας οι οποίες όμως πρέπει να τροποποιηθούν κατάλληλα, ώστε να περιλάβουν ορισμένα βασικά φαινόμενα με κυριότερο αυτό της ολίσθησης στα τοιχώματα. Αυτό επιτυγχάνεται με την χρησιμοποίηση των συντελεστών ολίσθησης που προκύπτουν από τη κινητική θεωρία και αναπτύχθηκαν στη προηγούμενη παράγραφο.

Οι ροές μέσα σε αγωγούς είναι από τις απλούστερες διατάξεις που μπορούν να μελετηθούν αλλά ταυτόχρονα αποτελούν και τις πιο συνήθεις που μπορεί να αντιμετωπιστούν στη πράξη. Η πειραματική μελέτη τους έχει αρχίσει από πολύ νωρίς [139], ενώ αριθμητικά η επίλυσή τους έχει απασχολήσει πολλούς ερευνητές [118, 140, 141, 142, 143].

Άλλες ροές που επίσης έχουν σημαντικό ενδιαφέρον και έχουν παρουσιαστεί εργασίες με αντικείμενο την επίλυσή τους είναι η ροή Couette [118], η ροή μέσα σε ορθογωνική κοιλότητα της οποίας η μία πλευρά κινείται (Cavity flow) και η αντίστοιχη ροή όπου όμως η κινούμενη πλάκα απέχει κάποια απόσταση από τη κοιλότητα (Grooved channel flow) [4] και άλλες [3]. Γενικότερα, φαίνεται ότι υπάρχει ένα όλο και αυξανόμενο ενδιαφέρον για την περιοχή και τη συγκεκριμένη μεθοδολογία, γεγονός που οφείλεται τόσο στις νέες δυνατότητες εφαρμογών που παρουσιάζονται αλλά και στη συσσωρευμένη εμπειρία της ερευνητικής κοινότητας στην αντιμετώπιση των εξισώσεων Navier-Stokes.

Μια πιο ενδιαφέρουσα προσέγγιση, τουλάχιστον για τους σκοπούς της παρούσας διατριβής, αποτελεί η μέθοδος Lattice Boltzmann. Η μέθοδος Lattice Boltzmann αν και έχει ως πεδίο εφαρμογής τα συνεχή μέσα, και παρά το γεγονός ότι αποτελεί εξέλιξη της Lattice Gas Automata [144, 145, 146], η φύση της είναι αντίστοιχη με αυτή της εξίσωσης Boltzmann [147, 148, 149]. Παρά το σχετικά σύντομο διάστημα που αναπτύσσεται,

έχει ήδη εφαρμοστεί με επιτυχία σε θερμικά προβλήματα [150, 151, 152, 153, 154, 155, 156, 157, 158, 159, 160], σε πολυφασικές ροές και ροές μειγμάτων [161, 162, 163, 164, 165, 166, 167], στη προσομοίωση τυρβωδών φαινομένων [168, 169, 170, 171, 172]. στη μαγνητοϋδροδυναμική [173, 174, 175, 176, 177] και σε πολλές άλλες περιπτώσεις [178].

Στην περιοχή της μικρο-ρευστομηχανικής, η μέθοδος έχει αρχίσει να κάνει ήδη τα πρώτα της βήματα. Έχει χρησιμοποιηθεί για την προσομοίωση απλών ροών όπως αυτές μέσα σε κανάλια και αγωγούς με αρκετή επιτυχία [179, 180] ακόμα και σε περιπτώσεις μειγμάτων [181, 182]. Ταυτόχρονα έχουν εξεταστεί και ροές οφειλόμενες σε ηλεκτρικό πεδίο γύρω από γωνία [183] καθώς και η ροή μέσα σε ορθογωνική κοιλότητα με κινούμενη την μία πλάκα. Τα αποτελέσματα που έχουν εξαχθεί είναι ενθαρρυντικά αλλά πρέπει να θεωρούνται ενδεικτικά της δυνατότητας εφαρμογής της μεθόδου στη περιοχή. Το θεωρητικό υπόβαθρο δεν υπάρχει και οι όποιες προσπάθειες δεν είναι επαρκώς τεκμηριωμένες. Πάντως φαίνεται ότι αυτά τα προβλήματα προοδευτικά θα ξεπεραστούν. Το μεγάλο βέβαια πλεονέκτημα της μεθόδου είναι η κινητική φύση της, η οποία γεννά ελπίδες ως προς τη δυνατότητα δημιουργίας μιας ενιαίας μεθοδολογίας για την αντιμετώπιση όλου του εύρους του αριθμού Knudsen.

2.4 Αριθμητικές μεθοδολογίες για την επίλυση ροών με μεσοσκοπική προσέγγιση

Οι μεσοσκοπικές προσεγγίσεις απαιτούν όπως διαπιστώθηκε ήδη, τον καθορισμό των οριακών συνθηκών καθώς και του μοντέλου των συγκρούσεων ανεξάρτητα από το αν εφαρμόζονται σε αραιοποιημένα ρευστά ή στη περιοχή του συνεχούς μέσου. Αν τα δύο αυτά στοιχεία καθοριστούν το μόνο που απομένει είναι η μεθοδολογία επίλυσης.

Η μεγάλη εμπειρία που υπάρχει στην επίλυση της εξίσωσης Boltzmann στη νανοκλίμακα, έχει βοηθήσει στη δημιουργία πολλών διαφορετικών προσεγγίσεων ως προς τον τρόπο που αυτό μπορεί να επιτευχθεί. Πολλές από αυτές μπορούν να χαρακτηριστούν ως αναλυτικές, όπως για παράδειγμα η μέθοδος των ροπών (Moment method)⁴ [8, 184, 7, 185] και αυτή των βασικών λύσεων (Method of elementary solutions) [29, 7], ενώ άλλες ως ημι-αναλυτικές όπως αυτή των ολοκληρωτικών ροπών (Integro-moment method) [58, 185, 29].

Οι πιο διαδεδομένες όμως μέθοδοι που εφαρμόζονται είναι οι καθαρά αριθμητικές. Κυρίαρχες σε αυτό το τομέα είναι η μέθοδος Monte Carlo και η DVM. Η μέθοδος Monte Carlo [8, 186, 187] αποτελεί μια ταχύτατα αναπτυσσόμενη προσέγγιση η οποία βασίζεται σε μεγάλο βαθμό στη διακριτή αντιμετώπιση καθορισμένων σωματιδίων. Είναι αρκετά αποτελεσματική σε πολύ αραιοποιημένες ροές. Το μεγάλο όμως μειονέκτημα είναι το αυξημένο υπολογιστικό κόστος όσο πιο συνεκτικό γίνεται το ρευστό, καθώς και η ύπαρξη θορύβου που μειώνει την αξιοπιστία όταν τα μακροσκοπικά μεγέθη έχουν μικρές τιμές.

Η μέθοδος DVM [185, 188, 189] αποτελεί την δεύτερη εναλλακτική μέθοδο για τη αριθμητική επίλυση της κινητικής εξίσωσης και είναι αυτή που κυρίως θα απασχολήσει την

⁴Η ελληνική ορολογία δυστυχώς είναι αρκετά περιορισμένη. Για το λόγο αυτό, όπου είναι σχετικά απλή η μεταφορά των όρων στην ελληνική γλώσσα αυτό γίνεται διατηρώντας και τον αγγλικό όρο. ενώ στις υπόλοιπες περιπτώσεις αναφέρεται μόνο ο αγγλικός.

παρούσα διατριβή. Η βασική της αρχή είναι η επιλογή ορισμένων διευθύνσεων και τιμών της μικροσκοπικής ταχύτητας, για τις οποίες αν είναι γνωστή η λύση της εξίσωσης Boltzmann, είναι δυνατός ο προσδιορισμός των μακροσκοπικών ιδιοτήτων. Όπως είναι φυσικό, όσο μεγαλύτερο είναι το πλήθος των διευθύνσεων και των ταχυτήτων τόσο πιο ακριβής θα είναι η προσέγγιση των μακροσκοπικών ιδιοτήτων. Για να επιτευχθεί η βελτιστοποίηση στην επιλογή των ταχυτήτων επιλέγεται αυτές να είναι οι ρίζες κάποιου ορθογώνιου πολυωνύμου. Αυτό συμβαίνει διότι οι μακροσκοπικές ιδιότητες αποτελούν ροπές της λύσης της εξίσωσης Boltzmann ως προς τη μικροσκοπική ταχύτητα και επομένως ολοκληρώματά της. Ουσιαστικά δηλαδή, απαιτείται μια σειρά από αριθμητικές ολοκληρώσεις το σφάλμα των οποίων ελαχιστοποιείται όταν αυτή γίνεται με την εφαρμογή κάποιας Γκαουσιανού τύπου μεθοδολογίας πράγμα που απαιτεί τη γνώση της ολοκληρώσιμης ποσότητας για τιμές της μεταβλητής ολοκλήρωσης ίση με τις ρίζες του πολυωνύμου που καθορίζει τη μεθοδολογία. Για παράδειγμα, αν το σχήμα ολοκλήρωσης είναι το Gauss-Hermite τάξης n απαιτείται η γνώση της λύσης της εξίσωσης Boltzmann για τιμές της μικροσκοπικής ταχύτητας ίση με τις ρίζες του πολυωνύμου Hermite τάξης n .

Το σχήμα είναι επαναληπτικό και στη γενική περίπτωση συγκλίνει. Βέβαια η σύγκλιση αυτή είναι αργή, ιδίως όταν ο αριθμός Knudsen της ροής είναι μικρός. Παρόλα αυτά τα αποτελέσματα θεωρούνται αξιόπιστα σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen και τα όποια σφάλματα που προκύπτουν είναι συνήθως αριθμητικής φύσης και ειδικότερα σφάλματα στρογγυλοποίησης, κάτι που σημαίνει ότι παρουσιάζονται σε πιο έντονη μορφή όταν αυξάνει πολύ ο αριθμός των επαναλήψεων. Για την αντιμετώπιση του προβλήματος αυτού, έχουν προταθεί ορισμένες βελτιώσεις [190] που όμως δεν έχουν γενική εφαρμογή και αφορούν μόνο ορισμένες απλές ροές.

Εκτός όμως της DVM μια άλλη μεσοσκοπικής φύσεως μέθοδος, με πεδίο εφαρμογής όμως την περιοχή του συνεχούς μέσου, είναι η μέθοδος Lattice Boltzmann. Ουσιαστικά αποτελεί μια ειδική διακριτοποίηση της εξίσωσης Boltzmann η οποία αποδεικνύεται ικανή στη προσομοίωση υδροδυναμικών ροών. Στην απλούστερη εκδοχή, η εξίσωση που επιλύεται είναι ίδια με την εξίσωση Boltzmann με μοντέλο συγκρούσεων το BGK και σταθερό χρόνο χαλάρωσης. Η κατανομή ισορροπίας είναι αντίστοιχη με αυτή του Maxwell. Η μέθοδος αποτελεί ουσιαστικά την τροποποιημένη εκδοχή της DVM για συνεχή μέσα, πράγμα που επιβάλλει ορισμένες διαφοροποιήσεις.

Η πρώτη σημαντική διαφορά παρουσιάζεται στην διακριτοποίηση τόσο του χώρου και του χρόνου, όσο και των μακροσκοπικών ταχυτήτων. Τα στοιχεία αυτά συνδυάζονται με τέτοιο τρόπο ώστε η διακριτοποιημένη εξίσωση να επιλύεται μεταξύ διαδοχικών χωρικών κόμβων. Ειδικότερα, το χρονικό βήμα επιλέγεται να είναι $\Delta t = \Delta x/c$ όπου Δx το χωρικό βήμα και c η μικροσκοπική ταχύτητα. Το χωρικό πλέγμα είναι ομοιόμορφο ενώ οι μικροσκοπικές ταχύτητες επιλέγονται, όπως και στην DVM, με τέτοιο τρόπο ώστε να ελαχιστοποιείται το σφάλμα της ολοκλήρωσης για τον προσδιορισμό των μακροσκοπικών μεγεθών τα οποία και πάλι αποτελούν ροπές της συνάρτησης που αποτελεί τη λύση της εξίσωσης Boltzmann ως προς τις μικροσκοπικές ταχύτητες. Η συνήθης τακτική είναι οι ρίζες να λαμβάνονται ίσες με αυτές του πολυωνύμου Hermite, τάξης $n = 3$. Αυτό γίνεται γιατί μπορεί πλέον να εφαρμοστεί η αριθμητική ολοκλήρωση Gauss-Hermite, ενώ ο μικρός αριθμός των διακριτών ταχυτήτων αποδεικνύεται ικανός για τον ακριβή υπολογι-

σμό των ολοκληρωμάτων, αλλά ταυτόχρονα επιτρέπει το μονοσήμαντο ορισμό του Δx και την επίλυση της διακριτοποιημένης εξίσωσης μεταξύ διαδοχικών χωρικών κόμβων. Πιο συγκεκριμένα, από τις τρεις ρίζες, η μία είναι μηδενική ενώ οι άλλες δύο είναι ίσες μεταξύ τους, κατά μέτρο. Έτσι, η ποσότητα Δx είναι σταθερή, για δεδομένο Δt .

Η δεύτερη σημαντική αλλαγή αφορά τον τρόπο αδιαστατοποίησης των ταχυτήτων η οποία πλέον γίνεται ως προς σταθερά τέτοια ώστε οι αδιάστατες ταχύτητες να έχουν τιμές ακέραιες και στην περίπτωση του πολυωνύμου Hermite τάξης $n = 3$ οι τιμές αυτές είναι $-1, 0$ και 1 . Η ιδιότητα αυτή δεν επιδιώχθηκε, αλλά είναι από τα στοιχεία εκείνα που προέκυψαν από την LGA. Παρόλα αυτά, αποδεικνύεται χρήσιμη και διευκολύνει αρκετά τις πράξεις.

Εκτός όμως από την απλή αυτή διατύπωση, πολλές άλλες εκδοχές της μεθόδου έχουν προταθεί. Η αιτία που οδήγησε σε αυτή την εξέλιξη ήταν οι περιορισμένες δυνατότητες τόσο ως προς τη προσομοίωση ροών με $Mach \geq 0.2$ αλλά και πιο απλών περιπτώσεων όπως θερμικές ροές ή ροές μειγμάτων. Σε όλες όμως τις περιπτώσεις η λογική που ακολουθείται είναι αντίστοιχη. Το τελευταίο διάστημα, η πιο δυναμική κατεύθυνση είναι αυτή της επίλυσης ενός συνόλου εξισώσεων, η κάθε μια εκ των οποίων αντιστοιχεί σε κάποια μακροσκοπική ιδιότητα [191, 192]. Φαίνεται ότι κάτι τέτοιο βελτιώνει σημαντικά χαρακτηριστικά όπως η ευστάθεια της μεθόδου, αλλά και η εφαρμοσιμότητά της, με κόστος βέβαια την αυξημένη πολυπλοκότητα.

2.5 Ανακεφαλαίωση

Από την βιβλιογραφική ανασκόπηση που αφορά τις μεσοσκοπικές μεθοδολογίες που εφαρμόζονται στην μεσο- και νανο-κλίμακα, προκύπτει ότι γενικά υπάρχει μεγάλος αριθμός εργασιών τουλάχιστον όσον αφορά την προσέγγιση με την χρησιμοποίηση της εξίσωσης Boltzmann. Έχουν αναπτυχθεί διάφορες τεχνικές πολλές από τις οποίες αποδεικνύονται ικανές για την αντιμετώπιση μιας σειράς προβλημάτων. Όμως είναι γεγονός ότι η μεγάλη πλειοψηφία είναι εφαρμόσιμη μόνο στην μονοδιάστατη εξίσωση Boltzmann, είτε λόγω της φύσης τους είτε λόγω του μεγάλου υπολογιστικού φόρτου που απαιτεί η επέκτασή τους σε περισσότερες διαστάσεις. Επομένως, οι ροές που αντιμετωπίζονται περιορίζονται σε μονοδιάστατα προβλήματα ενός αερίου. Η επίλυση προβλημάτων σε δύο και σε τρεις διαστάσεις είναι πολύ περιορισμένη, και ροές που αναφέρονται σε διατάξεις που ξεφεύγουν από τις κλασσικές περιπτώσεις των αγωγών ή των μονοδιάστατων ημιάπειρων χωρίων, έχουν μείνει ουσιαστικά ανεξερεύνητες. Ιδιαίτερα στην περίπτωση όπου το ρευστό αποτελεί μείγμα αερίων, και παρά το μεγάλο ενδιαφέρον που υπάρχει από πλευράς εφαρμογών, η βιβλιογραφία είναι πολύ φτωχή και απαιτείται σημαντική προσπάθεια για την ανάπτυξη της περιοχής.

Ταυτόχρονα, οι αριθμητικές μεθοδολογίες που εφαρμόζονται σε όλες τις περιπτώσεις ροών παρουσιάζουν ορισμένα προβλήματα, τα οποία αφορούν κυρίως την ταχύτητα των αλγορίθμων αλλά και την ευστάθειά τους, ιδίως στην περιοχή των ροών με μικρό αριθμό Knudsen ($Kn \leq 0.1$). Οι όποιες βελτιωτικές προσπάθειες έχουν προταθεί, αφορούν περιορισμένο αριθμό ροών και τα αποτελέσματά τους μπορούν να χαρακτηριστούν

ικανοποιητικά αλλά όχι εντυπωσιακά.

Στην περίπτωση της μεθόδου **Lattice Boltzmann** η κατάσταση είναι κάπως διαφοροποιημένη. Το πλήθος των προβλημάτων που έχουν εξεταστεί και αφορά συνεχή μέσα είναι μεγάλο, αν και σημαντικά προβλήματα όπως είναι για παράδειγμα ο προσδιορισμός του βέλτιστου μοντέλου για την προσομοίωση θερμικών ροών, δεν έχουν επιλυθεί. Την ίδια στιγμή, το θεωρητικό υπόβαθρο σε πολλούς τομείς δεν είναι ξεκάθαρο και η αποσαφήνισή του κρίνεται αναγκαία. Ταυτόχρονα, η ανάπτυξη μεθοδολογιών **Lattice Boltzmann** στην περιοχή της μικρο- ρευστομηχανικής, βρίσκεται ακόμα σε εμβρυϊκό στάδιο. Παρόλα αυτά, φαίνεται ότι το μέλλον διαγράφεται ευόιωνο και η αίσθηση αυτή βασίζεται στη μεσοσκοπική φύση της μεθόδου αλλά και στη δυναμική που αναπτύσσεται ως προς αυτή.

Κεφάλαιο 3

Στοιχεία κινητικής θεωρίας

3.1 Εισαγωγή

Η πρώτη προσέγγιση του φυσικών συστημάτων ως συνόλων διακριτών σωματιδίων έγινε από τον τους αρχαίους Έλληνες φιλοσόφους και αργότερα από τον Δημόκριτο και τους μαθητές του. Πολύ αργότερα η ιδέα ξαναγεννήθηκε στους στοχαστές της αναγέννησης και άρχισε να αναπτύσσεται πιο συστηματικά, θεμελιωμένη σε μαθηματικές αρχές. Έτσι προέκυψε η ευρύτερη περιοχή της επιστήμης που ονομάζεται στατιστική μηχανική.

Ο τομέας της στατιστικής μηχανικής με αντικείμενο τη μελέτη αερίων που βρίσκονται σε κατάσταση εκτός ισορροπίας ονομάστηκε κινητική θεωρία. Αρκετοί επιστήμονες ασχολήθηκαν με τη ανάπτυξη της περιοχής αλλά η πρώτη συγκροτημένη διατύπωση της κινητικής θεωρίας και η ολοκληρωμένη μαθηματική θεμελίωσή της, πραγματοποιήθηκε μόλις τον 19ο αιώνα από τον Ludwig Boltzmann. Η εργασία του περιλαμβάνεται κυρίως στο έργο του *Gastheorie*[20, 21, 22] που αποτελεί πλέον ένα από τα θεμελιώδη κείμενα της σύγχρονης επιστήμης. Σε αυτό διατυπώνεται η κινητική θεωρία των αερίων όπως την συνέλαβε ο Boltzmann, και αποτελεί αντικείμενο μελέτης ακόμα και σήμερα.

3.2 Διατύπωση εξίσωσης Boltzmann

Αν θεωρήσουμε ένα σύστημα N σωματιδίων και υποθέτοντας ότι ισχύουν οι νόμοι της κλασικής μηχανικής, τότε η κίνηση του κάθε σωματιδίου καθορίζεται από τον δεύτερο νόμο του Newton και επομένως από τις σχέσεις:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{r}}_i &= \boldsymbol{\xi}_i \\ \dot{\boldsymbol{\xi}}_i &= \mathbf{X}_i \\ \dot{\mathbf{r}}_i &= \mathbf{X}_i \end{aligned} \tag{3.1}$$

όπου \mathbf{r}_i είναι το άνωσμα θέσης του σωματιδίου i , $\boldsymbol{\xi}_i$ το αντίστοιχο άνωσμα της ταχύτητας και τέλος \mathbf{X}_i το ανηγμένο ως προς τη μάζα του σωματιδίου i , άνωσμα της συνισταμένης των δυνάμεων στο σημείο \mathbf{r}_i . Προκειμένου να περιγραφεί πλήρως το σύστημα πρέπει να προσδιοριστούν οι τιμές $6N + 1$ μεταβλητών, (των έξι συνιστωσών θέσης και ταχύτητας

για κάθε σωματίδιο και του χρόνου) μέσω της επίλυσης του συστήματος (3.1) και με καθορισμένες τις αρχικές συνθήκες. Όμως αυτό είναι αδύνατο μιας και το N είναι της τάξης του αριθμού Avogadro ενώ για τις αρχικές συνθήκες είναι απαραίτητη η γνώση της θέσης και του ανύσματος της ταχύτητας, για κάθε ένα από τα N σωματίδια σε κάποια ορισμένη χρονική στιγμή. Όλα αυτά καθιστούν ουσιαστικά ανέφικτη την όποια προσπάθεια προσέγγισης τέτοιου τύπου.

Είναι όμως απαραίτητη η απόκτηση όλης αυτής της πληροφορίας που θα παρείχε η ακριβής επίλυση; Προφανώς η απάντηση είναι αρνητική. Αυτό που ενδιαφέρει είναι κάποιες μέσες τιμές που συνδέονται με τα μακροσκοπικά μεγέθη. Στη διαπίστωση αυτή βασίστηκε η ανάπτυξη της στατιστικής μηχανικής όπου δεν ενδιαφέρει η πληροφορία για κάθε σωματίδιο χωριστά, αλλά μόνο τα στοιχεία που είναι απαραίτητα για τον προσδιορισμό των μακροσκοπικών μεγεθών. Έτσι στην περίπτωση των συστημάτων αερίων προέκυψε ότι αυτό που είναι απαραίτητο είναι ο προσδιορισμός της πιθανότητας να υπάρχει ορισμένος αριθμός σωματιδίων στην περιοχή $[x_i, x_i + dx]$ με ταχύτητα $[\xi_i, \xi_i + d\xi]$ την χρονική στιγμή t για όλο το πεδίο ορισμού. Η πληροφορία αυτή μπορεί να εκφραστεί μέσω μιας συνάρτησης κατανομής f . Αποδεικνύεται ότι η εξίσωση στην οποία υπακούει η συνάρτηση f είναι η εξίσωση Boltzmann:

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \xi, t)}{\partial t} + \xi_i \frac{\partial f(\mathbf{r}, \xi, t)}{\partial r} + X_i \frac{\partial f(\mathbf{r}, \xi, t)}{\partial \xi} = Q(f, f^*) \quad (3.2)$$

όπου στο δεξί μέρος ο όρος $Q(f, f^*)$ αποτελεί τον όρο των σωματιδιακών συγκρούσεων, δηλαδή της αλληλεπίδρασης του κάθε σωματιδίου με το υπόλοιπο σύστημα. Αν μελετηθεί η εξίσωση (3.2) γίνεται φανερό ότι το αριστερό σκέλος, αποτελεί την ολική παράγωγο της f περιλαμβάνοντας και τον όρο της επιτάχυνσης. Με άλλα λόγια, είναι η μεταβολή της ποσότητας f κατά μήκος μιας χαρακτηριστικής καμπύλης που ορίζεται από την ταχύτητα ξ και το πεδίο δυνάμεων X . Κοιτώντας από αυτή την σκοπιά, φαίνεται πλέον ότι το νόημα της εξίσωσης Boltzmann είναι:

Η μεταβολή της συνάρτησης κατανομής κατά μήκος μιας χαρακτηριστικής καμπύλης είναι ίση με το ολοκλήρωμα του όρου των σωματιδιακών συγκρούσεων πάνω στη καμπύλη αυτή.

Όλη η κινητική θεωρία των αερίων έχει ως σκοπό την επίλυση της εξίσωσης (3.2) και μέσω του προσδιορισμού της κατανομής f τον υπολογισμό των μακροσκοπικών μεγεθών:

αριθμητική πυκνότητα

$$n(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} f d\xi \quad (3.3)$$

μακροσκοπική ταχύτητα

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{n(\mathbf{r}, t)} \int_{-\infty}^{\infty} \xi f d\xi \quad (3.4)$$

πίεση

$$P(\mathbf{r}, t) = \frac{m}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \Xi^2 f d\xi \quad (3.5)$$

μητρώο τάσεων

$$P_{ij}(\mathbf{r}, t) = m \int_{-\infty}^{\infty} \Xi_i \Xi_j f d\xi \quad (3.6)$$

θερμοκρασία

$$T(\mathbf{r}, t) = \frac{m}{3k_B n(\mathbf{r}, t)} \int_{-\infty}^{\infty} \Xi^2 f d\xi \quad (3.7)$$

θερμορροή

$$\mathbf{q}(\mathbf{r}, t) = \frac{m}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \Xi^2 \Xi f d\xi \quad (3.8)$$

εσωτερική ενέργεια

$$\epsilon(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2n(\mathbf{r}, t)} \int_{-\infty}^{\infty} \Xi^2 f d\xi. \quad (3.9)$$

Η ταχύτητα Ξ είναι η σχετική και ορίζεται ως:

$$\Xi = \xi - \mathbf{u} \quad (3.10)$$

ενώ k_B η σταθερά του Boltzmann ($k_B = 1.380658 \times 10^{-23} \text{ J/K}$) και m είναι η μοριακή μάζα του αερίου. Από τις εξισώσεις (3.5) και (3.7) προκύπτει η καταστατική εξίσωση

$$P(\mathbf{r}, t) = n(\mathbf{r}, t) k_B T(\mathbf{r}, t) \quad (3.11)$$

που στη μορφή αυτή ισχύει και σε καταστάσεις εκτός ισορροπίας σε αντίθεση με το νόμο του Pascal. Αυτό είναι εφικτό γιατί η πίεση (3.5) ορίζεται πλέον ως μέσος όρος των τιμών στις τρεις διευθύνσεις.

Σημειώνεται ότι ο ορισμός της θερμοκρασίας (3.7) προκύπτει έμμεσα, από τον ορισμό της εσωτερικής ενέργειας (3.9) και την σχέση:

$$\epsilon(\mathbf{r}, t) = \frac{3}{2} \frac{k_B}{m} T(\mathbf{r}, t) \quad (3.12)$$

Τέλος, η ολική ροή ενέργειας εξ' ορισμού είναι

$$\mathbf{q}_{tot}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 \xi f d\xi. \quad (3.13)$$

Μετά από ορισμένες πράξεις προκύπτει ότι η ροή ενέργειας σε κάθε διεύθυνση μπορεί να γραφεί ως:

$$\mathbf{q}_{tot} = u_i \left(\frac{1}{2} n u^2 + n \epsilon \right) + u_j P_{ij} + \frac{m}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \Xi^2 \Xi f d\xi. \quad (3.14)$$

Ο πρώτος όρος αντιστοιχεί στην μακροσκοπική μεταφορά ενέργειας λόγω συναγωγής ενώ ο δεύτερος οφείλεται στο έργο που παράγουν οι τάσεις. Ο τρίτος όρος που ονομάζεται θερμορροή στις μακροσκοπικές εξισώσεις γενικά αντιστοιχεί με τον όρο μεταφοράς θερμότητας. Αυτό όμως δεν είναι απολύτως ακριβές μιας και υπάρχουν περιπτώσεις όπου σε ισοθερμοκρασιακά πεδία έχει μη μηδενικές τιμές.

3.3 Ο όρος των συγκρούσεων και η κατανομή Maxwell

Η εξίσωση Boltzmann (3.2), στο αριστερό της στέλος δεν φαίνεται να παρουσιάζει κάτι το αξιοσημείωτο που να δυσκολεύει δραματικά την επίλυσή της. Αυτό που είναι άγνωστο ακόμα είναι ο όρος των συγκρούσεων στο δεξί μέρος, ο προσδιορισμός του οποίου είναι απαραίτητος. Αυτό όμως είναι δυνατόν μόνο με την προϋπόθεση ότι θα γίνουν κάποιες παραδοχές που αφορούν τον τύπο των συγκρούσεων αλλά και τον τύπο των σωματιδίων. Η μόνη περίπτωση που αυτό δεν απαιτείται είναι προφανώς όταν ο όρος αυτός θεωρηθεί ίσος με το μηδέν. Τότε, και θεωρώντας ότι δεν υπάρχει πεδίο εξωτερικών δυνάμεων, μια δυνατή λύση είναι η:

$$f_{loc}^{(eq)}(\mathbf{r}, \xi, t) = n(\mathbf{r}, t) \left(\frac{m}{2\pi k_B T(\mathbf{r}, t)} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{m(\xi - u(\mathbf{r}, t))^2}{2k_B T(\mathbf{r}, t)}}. \quad (3.15)$$

Η κατανομή αυτή είναι γνωστή ως κατανομή Maxwell. Μαθηματικά, είναι μια κανονική κατανομή ως προς ξ με μέση τιμή την μακροσκοπική ταχύτητα \mathbf{u} και τυπική απόκλιση ϵ . Η κατανομή Maxwell αποτελεί ένα πολύ χρήσιμο εργαλείο μιας και αποτελεί το όριο προς το οποίο τείνει να συγκλίνει το σύστημα. Αποτελεί δηλαδή το σημείο μέγιστης εντροπίας όπως θα φανεί στη συνέχεια.

3.4 Το θεώρημα H

Αν η εξίσωση (3.2) πολλαπλασιαστεί με $\log f$ και κατόπιν ολοκληρωθεί ως προς ξ προκύπτει:

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{H}_i}{\partial \mathbf{r}_i} = \int_{-\infty}^{\infty} \log f Q(f, f^*) d\xi = \mathfrak{F} \quad (3.16)$$

όπου

$$\mathcal{H} = \int_{-\infty}^{\infty} f \log f d\xi \quad (3.17)$$

και

$$\mathcal{H}_i = \int_{-\infty}^{\infty} \xi_i f \log f d\xi. \quad (3.18)$$

Αν η f είναι μια συνάρτηση που ικανοποιεί την εξίσωση Boltzmann τότε προκύπτει ότι:

$$\mathfrak{F} \leq 0 \iff \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{H}_i}{\partial \mathbf{r}_i} \leq 0 \quad (3.19)$$

με την ισότητα να ισχύει στην περίπτωση όπου η f είναι τέτοιας μορφής ώστε να μηδενίζεται το ολοκλήρωμα του όρου των συγκρούσεων, όπως για παράδειγμα στην περίπτωση της κατανομής Maxwell. Στη συνέχεια ορίζεται η ποσότητα

$$\mathbb{H} = \int_R \mathcal{H} dx \quad (3.20)$$

όπου R είναι ολόκληρος ο όγκος ελέγχου. Αν η ποσότητα \mathcal{H} είναι μηδέν τότε το \mathbb{H} είναι μια διατηρήσιμη ποσότητα, όπως και η συνολική μάζα του συστήματος ή η συνολική ενέργεια. Στη γενική όμως περίπτωση, το \mathcal{H} είναι μη μηδενικό και επομένως αρνητικό και επακόλουθα και το \mathbb{H} είναι αρνητικό ή οριακά ίσο με το μηδέν.

Όλα αυτά βέβαια δεν θα σήμαιναν και πολλά αν δεν υπήρχε άμεση σχέση μεταξύ της ποσότητας \mathbb{H} και ενός μεγέθους όπως η εντροπία S . Αποδεικνύεται ότι ισχύει [6. 23]

$$S \geq -k_B \mathbb{H} \quad (3.21)$$

Με βάση τη σχέση αυτή μπορεί να συναχθεί ότι αν μια συνάρτηση f ικανοποιεί την εξίσωση Boltzmann στην αρχική της μορφή, και επομένως ικανοποιείται η μη θετικότητα της μεταβολής του \mathbb{H} ως προς το χρόνο, τότε εξασφαλίζεται η ισχύς του δεύτερου θερμοδυναμικού αξιώματος. Επομένως, οιαδήποτε μοντελοποίηση του όρου των συγκρούσεων θα πρέπει και αυτή να εξασφαλίζει το θεώρημα H ώστε να μην παραβιάζεται ο δεύτερος θερμοδυναμικός νόμος. Τέλος, σημειώνεται ότι μηδενισμός του όρου των συγκρούσεων συνεπάγεται ότι η ποσότητα \mathcal{H} είναι μηδέν και επομένως η ποσότητα \mathbb{H} είναι σταθερή.

3.5 Μοντελοποίηση του όρου των συγκρούσεων: Μοντέλα **BGK** και **S**

Όπως αναφέρθηκε ήδη ο απλούστερος τρόπος για να καταστεί επιλύσιμη η εξίσωση Boltzmann είναι η αντικατάσταση του όρου των συγκρούσεων από μια προσεγγιστική απλοποιημένη έκφραση. Οι εξισώσεις που προκύπτουν ονομάζονται κινητικές εξισώσεις. Η αντικατάσταση αυτή μπορεί να επιτευχθεί με διάφορα μοντέλα από τα οποία το κάθε ένα παρουσιάζει ορισμένα πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα. Τα κυριότερα από αυτά είναι, το μοντέλο **BGK** που είναι το πρώτο που παρουσιάστηκε, το **S** που αποτελεί μια επέκταση του **BGK** προκειμένου να αντιμετωπιστούν μη ισοθερμοκρασιακές ροές, ενώ για ροές μειγμάτων το απλούστερο μοντέλο είναι του Hamel ενώ του McCormack είναι αρκετά πιο αποτελεσματικό.

Το μοντέλο **BGK** βασίζεται στην υπόθεση ότι ο όρος των συγκρούσεων είναι ανάλογος προς την διαφορά της συνάρτησης κατανομής, από την κατανομή Maxwell που προσδιορίζεται από τις τοπικές μακροσκοπικές ιδιότητες σε κάθε σημείο και ονομάζεται τοπική κατανομή ισορροπίας:

$$Q(f, f^*) = -\nu(f - f_{loc}^{(eq)}) = -\nu \left(f - n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{m(\xi - \mathbf{u})^2}{2k_B T}} \right) \quad (3.22)$$

Η ποσότητα $1/\nu$ ονομάζεται χρόνος χαλάρωσης και είναι χαρακτηριστική ιδιότητα του μέσου η οποία συνδέεται με το ιξώδες. Είναι αρκετά απλό και σε πολλές περιπτώσεις δίνει ικανοποιητικά αποτελέσματα ενώ ταυτόχρονα αποδεικνύεται ότι ικανοποιεί και το θεώρημα H . Το βασικό μειονέκτημα είναι ότι δεν επιτρέπει τον ανεξάρτητο προσδιορισμό του ιξώδους και της θερμικής διαχυτότητας ενώ ο αριθμός Prandtl είναι πάντα ίσος με τη μονάδα.

Αντίστοιχη προσέγγιση ακολουθεί και το μοντέλο S με τη διαφορά ότι ο όρος των συγκρούσεων είναι ανάλογος της διαφοράς της κατανομής ισορροπίας από μια τροποποιημένη κατανομή ισορροπίας που λαμβάνει υπ' όψιν και τη θερμοροφή \mathbf{q} :

$$Q(f, f^*) = -\nu \left(f - n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{m(\xi - \mathbf{u})^2}{2k_B T}} \left[1 + \frac{2m}{15n(k_B T)^2} \mathbf{q} \cdot \xi \left(\frac{m\xi^2}{2k_B T} - \frac{5}{2} \right) \right] \right). \quad (3.23)$$

Ενώ και στο μοντέλο S δεν μπορεί να γίνει ανεξάρτητος προσδιορισμός του ιξώδους και της θερμικής διαχυτότητας, ο αριθμός Prandtl είναι πλέον ίσος με $2/3$ και επομένως ίσος με την θεωρητική τιμή για μονατομικά αέρια. Το κόστος είναι ότι δεν μπορεί να αποδειχθεί η ισχύς ή όχι του θεωρήματος H καθώς και η κάπως αυξημένη πολυπλοκότητα.

Τα δύο προαναφερθέντα μοντέλα μπορούν να χρησιμεύσουν για την προσομοίωση ροών ενός συστατικού. Για ροές μειγμάτων το απλούστερο μοντέλο είναι αυτό του Hamel στο οποίο επιλύονται δύο διαφορετικές εξισώσεις προκειμένου για μείγμα δύο συστατικών και υπάρχουν αντίστοιχες συναρτήσεις κατανομής. Ο όρος των συγκρούσεων για κάθε συστατικό είναι παρόμοιος με αυτόν του BGK αλλά πλέον περιλαμβάνει και την επίδραση του έτερου συστατικού. Στην περίπτωση όπου τα δύο συστατικά είναι όμοια, τότε το μοντέλο εκφυλίζεται στο BGK. Τέλος, ένα πιο αποτελεσματικό μοντέλο είναι αυτό που έχει προταθεί από τον McCormack το οποίο όμως θα αναπτυχθεί σε εύρος στη Παράγραφο 3.8.

3.6 Γραμμικοποίηση των κινητικών εξισώσεων: Μοντέλα BGK και S

Για μεγάλο μέρος των ροών που αντιμετωπίζονται στη πραγματικότητα, τα φαινόμενα που παρατηρούνται είναι σχετικά ήπια και μπορεί να θεωρηθεί ότι οι αποκλίσεις τόσο της ταχύτητας, όσο και της πυκνότητας και της θερμοκρασίας είναι σχετικά μικρές. Στην περίπτωση αυτή η συνάρτηση κατανομής μπορεί να γραμμικοποιηθεί ως προς μια κατανομή Maxwell που προσδιορίζεται από κάποιες ποσότητες αναφοράς και ονομάζεται απόλυτη κατανομή ισορροπίας. Ως ποσότητες αναφοράς επιλέγονται συνήθως τιμές κοντά στη μέση θερμοκρασία και τη μέση πυκνότητα της ροής ενώ ως ταχύτητα αναφοράς επιλέγεται η μηδενική. Η απόλυτη κατανομή ισορροπίας επομένως είναι:

$$f_{gl}^{(eq)} = n_0 \left(\frac{m}{2\pi k_B T_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{m\xi^2}{2k_B T_0}} \quad (3.24)$$

Η γραμμικοποίηση της τοπικής κατανομής ισορροπίας ως προς την απόλυτη κατανομή ισορροπίας γίνεται χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα Taylor. Αναπτύσσοντας ως προς τη

πυκνότητα, τη θερμοκρασία και την ταχύτητα Mach και κρατώντας μόνο τους όρους πρώτης τάξης προκύπτει:

$$f_{loc}^{(eq)} = f_{gl}^{(eq)} \left[1 + \varrho + \frac{m}{k_B T_0} \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{u} + \tau \left(\frac{m \xi^2}{2k_B T_0} - \frac{3}{2} \right) \right] \quad (3.25)$$

όπου οι ποσότητες ϱ και τ ορίζονται ως:

$$\varrho = \frac{n - n_0}{n_0} \quad (3.26)$$

και

$$\tau = \frac{T - T_0}{T_0} \quad (3.27)$$

και είναι οι αποκλίσεις της αριθμητικής πυκνότητας και της θερμοκρασίας. Σημειώνεται βέβαια ότι η απόκλιση της αριθμητικής πυκνότητας είναι ίδια με αυτή της πυκνότητας και με αυτή την ονομασία θα χρησιμοποιείται στη συνέχεια.

Τέλος, ορίζεται η ποσότητα h ούτως ώστε να ισχύει

$$f = f_{gl}^{(eq)} (1 + h). \quad (3.28)$$

Συνδυάζοντας τις εξισώσεις (3.22), (3.25) και (3.28) εξάγεται η γραμμικοποιημένη εξίσωση Boltzmann με μοντέλο συγκρούσεων το BGK

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}} = \nu \left[\varrho + \frac{m}{k_B T_0} \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{u} + \tau \left(\frac{m \xi^2}{2k_B T_0} - \frac{3}{2} \right) - h \right]. \quad (3.29)$$

Από τις (3.23), (3.25) και (3.28) προκύπτει η αντίστοιχη έκφραση για το μοντέλο S

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}} = \nu \left[\varrho + \frac{m}{k_B T_0} \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{u} + \tau \left(\frac{m \xi^2}{2k_B T_0} - \frac{3}{2} \right) + \frac{2m}{15n_0(k_B T_0)^2} \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\xi} \left(\frac{m \xi^2}{2k_B T_0} - \frac{5}{2} \right) - h \right], \quad (3.30)$$

όπου η θερμορροή αναφοράς έχει θεωρηθεί ίση με 0. Με όμοιο τρόπο προκύπτουν οι γραμμικοποιημένες εκφράσεις για οποιαδήποτε κινητική εξίσωση.

Η προσέγγιση αυτή απλοποιεί σχετικά την διαδικασία επίλυσης από μαθηματική σκοπιά. Ταυτόχρονα, επιτρέπει την εφαρμογή τεχνικών που βελτιώνουν τόσο την ακρίβεια όσο και την ταχύτητα της αριθμητικής προσέγγισης.

3.7 Αδιαστατοποίηση των κινητικών εξισώσεων: Μοντέλα **BGK** και **S**

Στην περιοχή των αραιών αερίων (όπως και στη ρευστοδυναμική) συνήθως δεν έχει ιδιαίτερο νόημα να εξετάζεται η διαστατή εξίσωση εκτός και αν μελετάται ένα συγκεκριμένο πρόβλημα. Στη γενική περίπτωση, τα διαστατά μεγέθη μπορούν να συνδυαστούν

και να δώσουν χαρακτηριστικά αδιάστατα μεγέθη. Ειδικότερα στην περίπτωση των γραμμικών προβλημάτων κάτι τέτοιο είναι αρκετά απλό και σύνηθες. Απαιτείται βέβαια ο προσδιορισμός ορισμένων χαρακτηριστικών μεγεθών. Έτσι, ορίζεται το χαρακτηριστικό μήκος του προβλήματος L ενώ η χαρακτηριστική ταχύτητα είναι

$$u_r = \sqrt{2k_B T_0/m}. \quad (3.31)$$

Απαραίτητος είναι επίσης και ο προσδιορισμός της πίεσης αναφοράς μέσω της σχέσης (3.11):

$$P_0 = n_0 k_B T_0. \quad (3.32)$$

Τα μεγέθη με διαστάσεις μήκους αδιαστατοποιούνται προφανώς με το μήκος L , ενώ τα αντίστοιχα με διαστάσεις ταχύτητας με την ταχύτητα u_r . Για την πυκνότητα και την θερμοκρασία ισχύουν οι σχέσεις (3.26-3.27) ενώ οι τάσεις αδιαστατοποιούνται με την πίεση αναφοράς (3.32). Τέλος για τη θερμορροή ισχύει

$$\hat{\mathbf{q}} = \frac{\mathbf{q}}{u_r P_0} = q \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{2k_B T_0}} \frac{1}{n_0 k_B T_0} \quad (3.33)$$

Οι εξισώσεις πλέον (3.29) και (3.30) παίρνουν τη μορφή:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{x}} = \frac{L \sqrt{m}}{\sqrt{2k_B T_0}} \nu_0 \left[\varrho + 2 \mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{u}} + \tau \left(c^2 - \frac{3}{2} \right) - h \right]. \quad (3.34)$$

και

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{x}} = \frac{L \sqrt{m}}{\sqrt{2k_B T_0}} \nu_0 \left[\varrho + 2 \mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{u}} + \tau \left(c^2 - \frac{3}{2} \right) + \frac{4}{15} \mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{q}} \left(c^2 - \frac{5}{2} \right) - h \right]. \quad (3.35)$$

όπου \mathbf{c} η αδιάστατη μικροσκοπική ταχύτητα και \mathbf{x} το αδιάστατο άνωσμα θέσης. Η ποσότητα ν συνδέεται με τα μακροσκοπικά μεγέθη μέσω της σχέσης [29]:

$$\nu_0 = \frac{P_0}{\mu(T_0)} \quad (3.36)$$

όπου μ το ιξώδες στη θερμοκρασία T_0 .

Αν ληφθεί υπόψη ότι η μέση ελεύθερη διαδρομή των σωματιδίων μεταξύ δύο διαδοχικών συγκρούσεων λ είναι [29]

$$\lambda = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\mu}{P_0} \left(\frac{2k_B T_0}{m} \right)^{1/2} \quad (3.37)$$

τότε ο όρος που πολλαπλασιάζει το δεξί σκέλος στις εξισώσεις (3.34) και (3.35) είναι:

$$\frac{L \sqrt{m}}{\sqrt{2k_B T_0}} \nu_0 = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{L}{\lambda} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{Kn} \quad (3.38)$$

Ο αδιάστατος αριθμός Knudsen (Kn) αποτελεί την κύρια παράμετρο που χαρακτηρίζει τις ροές στην περιοχή των αραιών αερίων και είναι ο λόγος της μέσης ελεύθερης διαδρομής των σωματιδίων προς την χαρακτηριστική διάσταση της ροής. Στο συνεχές όριο μηδενίζεται, ενώ για ροές χωρίς συγκρούσεις τείνει στο άπειρο. Εκφράζει σε μεγάλο βαθμό το πόσο σημαντικά είναι τα φαινόμενα που προκαλεί η αραιοποίηση ενός αερίου και είναι η παράμετρος ως προς την οποία παραμετροποιούνται συνήθως τα αποτελέσματα. Συνδέεται με τους αδιάστατους αριθμούς Reynolds (Re) και Mach (Ma) μέσω της σχέσης:

$$Kn = \sqrt{\frac{\pi \gamma}{2}} \frac{Ma}{Re} \quad (3.39)$$

Επιστρέφοντας στην εξίσωση Boltzmann αν κάνουμε την αντιστοίχιση

$$\delta = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{Kn}, \quad (3.40)$$

οι εξισώσεις (3.29) και (3.30) γίνονται:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{x}} = \delta \left[\varrho + 2 \mathbf{c} \cdot \mathbf{u} + \tau \left(c^2 - \frac{3}{2} \right) - h \right]. \quad (3.41)$$

και

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{x}} = \delta \left[\varrho + 2 \mathbf{c} \cdot \mathbf{u} + \tau \left(c^2 - \frac{3}{2} \right) + \frac{4}{15} \mathbf{c} \cdot \mathbf{q} \left(c^2 - \frac{5}{2} \right) - h \right]. \quad (3.42)$$

αντίστοιχα και είναι η μορφή στην οποία θα χρησιμοποιηθούν στη συνέχεια. Σημειώνεται ότι για χάρη απλότητας στις δύο τελευταίες εξισώσεις έχουν απαλειφθεί τα σύμβολα $\hat{\cdot}$. Στην συνέχεια όλα τα μεγέθη είναι αδιάστατα εκτός αν υπάρχει σχετική αναφορά.

3.8 Το μοντέλο McCormack

Στην περίπτωση των αερίων μειγμάτων το αποτελεσματικότερο μέχρι στιγμής μοντέλο έχει αποδειχθεί πως είναι αυτό του McCormack [39]. Αποτελεί μοντέλο που έχει αναπτυχθεί ειδικά για την γραμμικοποιημένη εξίσωση, και δεν υπάρχει η αντίστοιχη έκφραση για την περίπτωση της μη γραμμικής εξίσωσης. Στην περίπτωση των μειγμάτων, δημιουργείται από μία κινητική εξίσωση για κάθε συστατικό που στην περίπτωση του McCormack έχει τη μορφή:

$$\frac{\partial h_\alpha}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial h_\alpha}{\partial \mathbf{x}} = \sum_{\beta=1}^2 L_{\alpha\beta}(h_\alpha) \quad (3.43)$$

όπου ο όρος $L_{\alpha\beta}(h_\alpha)$ είναι

$$L_{\alpha\beta}(h_\alpha) = -\gamma_{\alpha\beta} h_\alpha + \gamma_{\alpha\beta} \varrho_\alpha + 2 \left[\gamma_{\alpha\beta} u_{\alpha i} - \nu_{\alpha\beta}^{(1)} \left(u_{\alpha i} - \sqrt{\frac{m_\alpha}{m_\beta}} u_{\beta i} \right) - \nu_{\alpha\beta}^{(2)} \left(q_{\alpha i} - \left(\frac{m_\alpha}{m_\beta} \right)^{\frac{3}{2}} q_{\beta i} \right) \right] c_{\alpha i} +$$

$$\begin{aligned}
& + \left[\gamma_{\alpha\beta} T_\alpha - 2 \frac{m^*}{m_\beta} T_\alpha - T_\beta \right] v_{\alpha\beta}^{(1)} \left(c_\alpha^2 - \frac{3}{2} \right) + 2 \left[(\gamma_{\alpha\beta} - v_{\alpha\beta}^{(3)}) \Pi_{\alpha j} + \Pi_{\beta i j} v_{\alpha\beta}^{(4)} \right] c_{\alpha i} c_{\alpha j} \\
& \frac{8}{5} \left[(\gamma_{\alpha\beta} - v_{\alpha\beta}^{(5)}) q_{\alpha i} + v_{\alpha\beta}^{(6)} q_{\beta i} - \frac{5}{8} \left(u_{\alpha i} - \sqrt{\frac{m_\alpha}{m_\beta}} u_{\beta i} \right) v_{\alpha\beta}^{(2)} \right] c_{\alpha i} \left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right), \quad (3.44)
\end{aligned}$$

με $\alpha, \beta = 1, 2$ και $i, j = x, y, z$. Όπως φαίνεται στην σχέση του McCormack υπάρχει μια σειρά συντελεστών οι οποίοι πρέπει να προσδιοριστούν. Έτσι, οι δύο συχνότητες συγχρούσεων $\gamma_\alpha = \gamma_{\alpha\alpha} + \gamma_{\alpha\beta}$ δίνονται ως

$$\gamma_\alpha = \frac{S_\alpha S_\beta - v_{\alpha\beta}^{(4)} v_{\beta\alpha}^{(4)}}{S_\beta + v_{\alpha\beta}^{(4)}}, \quad (3.45)$$

με

$$S_\alpha = v_{\alpha\alpha}^{(3)} - v_{\alpha\alpha}^{(4)} + v_{\alpha\beta}^{(3)}. \quad (3.46)$$

Στις εξισώσεις (3.45) και (3.46), $\alpha = 1, 2$ και $\beta \neq \alpha$. Επιπλέον

$$v_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{16}{3} \frac{m_{\alpha\beta}}{m_\alpha} n_\beta \Omega_{\alpha\beta}^{11}, \quad (3.47)$$

$$v_{\alpha\beta}^{(2)} = \frac{64}{15} \left(\frac{m_{\alpha\beta}}{m_\alpha} \right)^2 n_\beta \left(\Omega_{\alpha\beta}^{12} - \frac{5}{2} \Omega_{\alpha\beta}^{22} \right), \quad (3.48)$$

$$v_{\alpha\beta}^{(3)} = \frac{16}{5} \frac{m_{\alpha\beta}^2}{m_\alpha m_\beta} n_\beta \left(\frac{10}{3} \Omega_{\alpha\beta}^{11} + \frac{m_\beta}{m_\alpha} \Omega_{\alpha\beta}^{22} \right), \quad (3.49)$$

$$v_{\alpha\beta}^{(4)} = \frac{16}{5} \frac{m_{\alpha\beta}^2}{m_\alpha m_\beta} n_\beta \left(\frac{10}{3} \Omega_{\alpha\beta}^{11} - \Omega_{\alpha\beta}^{22} \right), \quad (3.50)$$

$$\begin{aligned}
v_{\alpha\beta}^{(5)} = \frac{64}{15} \left(\frac{m_{\alpha\beta}}{m_\alpha} \right)^3 \frac{m_\alpha}{m_\beta} n_\beta \left[\Omega_{\alpha\beta}^{22} + \left(\frac{15m_\alpha}{4m_\beta} + \frac{25}{8} \frac{m_\beta}{m_\alpha} \right) \Omega_{\alpha\beta}^{11} \right. \\
\left. - \frac{1}{2} \frac{m_\beta}{m_\alpha} (5\Omega_{\alpha\beta}^{12} - \Omega_{\alpha\beta}^{13}) \right], \quad (3.51)
\end{aligned}$$

$$v_{\alpha\beta}^{(6)} = \frac{64}{15} \left(\frac{m_{\alpha\beta}}{m_\alpha} \right)^3 \left(\frac{m_\alpha}{m_\beta} \right)^{3/2} n_\beta \left[-\Omega_{\alpha\beta}^{22} + \frac{55}{8} \Omega_{\alpha\beta}^{11} - \frac{5}{2} \Omega_{\alpha\beta}^{12} + \frac{1}{2} \Omega_{\alpha\beta}^{13} \right], \quad (3.52)$$

και

$$m_{\alpha\beta} = \frac{m_\alpha m_\beta}{(m_\alpha + m_\beta)}. \quad (3.53)$$

Τα $\Omega_{\alpha\beta}^{ij}$ είναι τα ολοκληρώματα Chapman-Cowling [6], που για το μοντέλο των συμπαγών σφαιρών υπολογίζονται μέσω των σχέσεων:

$$\Omega_{\alpha\beta}^{(ij)} = \frac{(j+1)!}{8} \left[1 - \frac{1+(-1)^i}{2(i+1)} \right] \left(\frac{\pi kT}{2m_{\alpha\beta}} \right)^{1/2} (d_\alpha + d_\beta)^2. \quad (3.54)$$

και επομένως ισχύουν οι σχέσεις

$$\Omega_{a\beta}^{11} = \hat{\Omega}_{a\beta} \quad \Omega_{a\beta}^{12} = 3\hat{\Omega}_{a\beta} \quad \Omega_{a\beta}^{13} = 12\hat{\Omega}_{a\beta} \quad \text{και} \quad \Omega_{a\beta}^{22} = 2\hat{\Omega}_{a\beta} \quad (3.55)$$

με

$$\hat{\Omega}_{a,\beta} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi k T_0}{2m_{a,\beta}}} (d_a + d_\beta)^2. \quad (3.56)$$

Στην περίπτωση του πραγματικού δυναμικού και τη χρησιμοποίηση πειραματικών δεδομένων τα ολοκληρώματα $\Omega_{a\beta}^{ij}$ υπολογίζονται από τις σχέσεις [25]

$$\Omega_{a\beta}^{11} = \hat{\Omega}_{a\beta} \omega_{a\beta}^{11} \quad \Omega_{a,\beta}^{12} = 3\hat{\Omega}_{a\beta} \omega_{a,\beta}^{12} \quad \Omega_{a\beta}^{13} = 12\hat{\Omega}_{a\beta} \omega_{a\beta}^{13} \quad \Omega_{a\beta}^{22} = 2\hat{\Omega}_{a\beta} \omega_{a\beta}^{22} \quad (3.57)$$

Οι συντελεστές $\omega_{a,\beta}^{ij}$ προκύπτουν από πειραματικές μετρήσεις [25] ανάλογα με το είδος του μείγματος. Ενδεικτικά στον Πίνακα 6.8 δίνονται οι τιμές για τα μείγματα $Ne - Ar$ και $He - Xe$. Τέλος σημειώνεται ότι θέτοντας $m_1 = m_2$ και $d_1 = d_2$ το κινητικό μοντέλο McCormack ανάγεται στο μοντέλο S για απλά αέρια.

Κεφάλαιο 4

Σχήμα επιτάχυνσης της μεθόδου των διακριτών ταχυτήτων

4.1 Εισαγωγή

Η μέθοδος των διακριτών ταχυτήτων (DVM) αποτελεί ίσως την κυρίαρχη τεχνική προκειμένου να επιλυθούν με αριθμητικό τρόπο προβλήματα στην μεταβατική περιοχή. Η ακρίβεια της μεθόδου είναι ανάλογη του αριθμού των διακριτών ταχυτήτων που επιλέγονται αλλά όπως είναι φυσικό και της πυκνότητας του χωρικού πλέγματος. Ταυτόχρονα, πολύ σημαντικό είναι το σχήμα διακριτοποίησης που χρησιμοποιείται τόσο στο φυσικό χώρο όσο και στον χώρο των ταχυτήτων.

Βασικό μειονέκτημα αποτελεί η μεγάλη υπολογιστική προσπάθεια που απαιτείται. Αν ο αριθμός των διακριτών ταχυτήτων αυξηθεί αρκετά ώστε να επιτευχθεί ικανοποιητική ακρίβεια των αποτελεσμάτων όσον αφορά τα μακροσκοπικά μεγέθη, τότε ο απαραίτητος χρόνος, ακόμα και με τη χρήση σύγχρονων υπολογιστικών συστημάτων, είναι σημαντικό. Η κατάσταση γίνεται προοδευτικά όλο και χειρότερη όσο ο αριθμός K_n μικραίνει και προσεγγίζεται το συνεχές όριο. Στην περίπτωση αυτή ο υπολογιστικός χρόνος, ιδίως αν μελετώνται λίγο πιο πολύπλοκες ροές, γίνεται απαγορευτικός. Εκτός όμως από το θέμα του υπολογιστικού χρόνου προκύπτουν και ζητήματα ακρίβειας μιας και το αριθμητικό σφάλμα που εισάγεται από τον αυξημένο αριθμό επαναλήψεων είναι σημαντικό και απαιτούνται ειδικές τεχνικές προκειμένου αυτό να περιοριστεί και τα όποια αποτελέσματα να παραμείνουν αξιόπιστα.

Η μελέτη της μεταβατικής περιοχής και ιδιαίτερα προς το όριο του συνεχούς μέσου, έχει αποκτήσει ιδιαίτερο ενδιαφέρον το τελευταίο διάστημα λόγω της τεχνολογικής εξέλιξης που έχει συντελεστεί στην περιοχή της μικρομηχανικής. Το γεγονός αυτό έχει κάνει επιτακτική την ανάγκη εύρεσης νέων μεθοδολογιών προκειμένου να επιτευχθεί οικονομία πόρων αλλά και αξιοπιστία αποτελεσμάτων. Εκτός από τις μεθοδολογίες που προτείνονται από την παρούσα διατριβή, έχουν υπάρξει πολύ λίγες προτάσεις προς την κατεύθυνση αυτή. Ειδικότερα, η κυριότερη προσπάθεια συνίσταται στην χρήση της υδροδυναμικής λύσης προκειμένου να καταστεί δυνατή μείωση του αριθμού των επαναλήψεων [190]. Αυτό επιτυγχάνεται μέσω του διαχωρισμού της λύσης σε υδροδυναμικό τμήμα και την απόκλι-

ση της πραγματικής από αυτή. Τα αποτελέσματα είναι ικανοποιητικά αλλά απαιτείται η γνώση της υδροδυναμικής λύσης του προβλήματος πράγμα που σπανίως συμβαίνει.

Η παρούσα προσέγγιση βασίζεται σε αντίστοιχες μεθοδολογίες που χρησιμοποιούνται εδώ και μεγάλο διάστημα στην περιοχή των φαινομένων μεταφοράς σε πυρηνικούς αντιδραστήρες και ειδικότερα στην μελέτη νετρονίων [193, 194, 195]. Έχουν εφαρμοστεί με επιτυχία στην επιτάχυνση της σύγκλισης της μεθόδου των διακριτών διευθύνσεων σε προβλήματα επίλυσης περιοχών με μεγάλο οπτικό πάχος και μικρή απορροφητικότητα, τόσο με ισοτροπική όσο και με ανισοτροπική σκέδαση [196].

Το γεγονός αυτό συντέλεσε στην προσέλκυση του ενδιαφέροντος προκειμένου να εφαρμοστούν αντίστοιχες μέθοδοι και στην περιοχή των αραιών αερίων. Σε αυτό, συνηγόρησε η παρόμοια μορφή που έχουν οι εξισώσεις που περιγράφουν την μεταφορά νετρονίων και αυτές που διέπουν την κινητική θεωρία. Και στις δύο περιπτώσεις, αποτελούν γραμμικές ολοκληροδιαφορικές εξισώσεις προερχόμενες από την εξίσωση Boltzmann, ενώ και οι μέθοδοι των διακριτών διευθύνσεων και των διακριτών ταχυτήτων έχουν αντίστοιχα χαρακτηριστικά και βασίζονται σε παρόμοιες αρχές. Επομένως, δε θα ήταν ουτοπικό να αναμένονται θετικά αποτελέσματα από την εφαρμογή τεχνικών επιτάχυνσης ανάλογων με αυτές που χρησιμοποιούνται στη μέθοδο των διακριτών διευθύνσεων και στη μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων.

Στο παρόν Κεφάλαιο αναπτύσσεται η προτεινόμενη μεθοδολογία και εφαρμόζεται σε χαρακτηριστικές ροές. Ειδικότερα, εξετάζεται η περίπτωση όπου τα διανυσματικά μακροσκοπικά μεγέθη έχουν μία συνιστώσα, ενώ τα βαθμωτά όπως η πυκνότητα και η θερμοκρασία μπορεί να θεωρηθεί ότι είναι σταθερά [13, 197]. Κάτι τέτοιο μπορεί για παράδειγμα να θεωρηθεί ότι συμβαίνει σε πλήρως ανεπτυγμένες ροές μεταξύ δύο πλακών και σε αντίστοιχες ροές εντός αγωγών ή σε προβλήματα ημίαιρου χωρίου. Αποτελεί ίσως την απλούστερη των περιπτώσεων ενώ ταυτόχρονα ροές τέτοιου τύπου είναι το βασικό αντικείμενο έρευνας στη βιβλιογραφία. Ταυτόχρονα, μελετάται και η περίπτωση της πλήρους εξίσωσης.

Οι περιπτώσεις που εξετάζονται ως ενδεικτικές, είναι των δύο βασικότερων μοντέλων για ροές ενός συστατικού, δηλαδή του BGK και του μοντέλου S. Ταυτόχρονα, γίνεται η ανάλυση Fourier για την απλή μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων και για το σχήμα που προκύπτει με την εφαρμογή του σχήματος επιτάχυνσης. Με τον τρόπο αυτό υπολογίζονται οι θεωρητικές ακτίνες σύγκλισης των δύο σχημάτων και προκύπτει η θεωρητική βελτίωση που επιτυγχάνεται. Ταυτόχρονα μελετάται και η περίπτωση της μονοδιάστατης ροής με αποκλίσεις τόσο στην ταχύτητα όσο και στη πυκνότητα και τη θερμοκρασία με μοντέλο συγκρούσεων το BGK [198, 199]. Και σε αυτή τη περίπτωση γίνεται η ανάλυση Fourier και προκύπτει η θεωρητική βελτίωση στη σύγκλιση των αλγορίθμων. Τέλος, το σχήμα εφαρμόζεται για την επίλυση της ροής μέσα σε κανάλι σε μία και δύο διαστάσεις υπό την επίδραση κλίσης πίεσης προκειμένου να εξεταστεί και αριθμητικά η αποτελεσματικότητα του σχήματος.

4.2 Ανάλυση ευστάθειας του σχήματος των διακριτών ταχυτήτων

Όταν αντιμετωπίζονται προβλήματα όπου τα διανυσματικά μεγέθη έχουν μόνο μία συνιστώσα και τα βαθμωτά παραμένουν σταθερά, τότε η εξίσωση Boltzmann μπορεί να απλοποιηθεί σημαντικά. Πιο συγκεκριμένα, μπορεί να εφαρμοστεί μια τεχνική όπου γίνονται οι απαιτούμενες προβολές στον χώρο των ταχυτήτων και επιλύονται οι νέες εξισώσεις. Ο αριθμός των εξισώσεων που είναι αναγκαίος εξαρτάται από τα μεγέθη τα οποία εξετάζονται, καθώς και από το μοντέλο του όρου των συγκρούσεων. Έτσι, αν η κατανομή της ταχύτητας είναι το ζητούμενο και μοντέλο το BGK, τότε απαιτείται μια εξίσωση ενώ αν το μοντέλο είναι το S ή αν χρειάζεται προσδιορισμός και του πεδίου θερμορροής, τότε οι εξισώσεις είναι δύο.

Η τεχνική αυτή αν και μπορεί να αυξάνει τον αριθμό των εξισώσεων, μειώνει δραστικά τον αριθμό των διακριτών ταχυτήτων μιας και οι διαστάσεις του χώρου των ταχυτήτων μειώνονται κατά μία ή και δύο, ανάλογα με τη φύση της ροής και τις διαστάσεις στις οποίες μεταβάλλονται τα μακροσκοπικά μεγέθη. Υπολογιστικά το κέρδος είναι πολύ σημαντικό αλλά και οι εξισώσεις αρκετά απλές.

4.2.1 Μονοδιάστατη εξίσωση BGK: Διατύπωση και ανάλυση ευστάθειας

Μονοδιάστατα προβλήματα θεωρούνται γενικά οι ροές όπου η συνάρτηση κατανομής μεταβάλλεται μόνο ως προς μία διάσταση. Χαρακτηριστικά παραδείγματα τέτοιων ροών είναι οι ροές Couette και Poiseuille. Η αρχική εξίσωση που χρησιμοποιείται στην περίπτωση αυτή είναι η

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{x}} = \delta \left[\varrho + 2 \mathbf{c} \cdot \mathbf{u} + \tau \left(c^2 - \frac{3}{2} \right) - h \right]. \quad (3.41)$$

Θεωρώντας ότι η ταχύτητα έχει συνιστώσα μόνο στη κατεύθυνση x , οι αποκλίσεις της πυκνότητας και της θερμοκρασίας είναι μηδενικές και οι μεταβολές της u_x γίνονται μόνο στη διεύθυνση y , τότε, για χρονικά αμετάβλητη ροή, η (3.41) απλοποιείται στην

$$c_y \frac{\partial h(y, c_x, c_y, c_z)}{\partial y} = \delta \left[2 c_x u_x(y) - h(y, c_x, c_y, c_z) \right] + c_x X_P, \quad (4.1)$$

όπου X_P είναι ο όρος πηγής που οφείλεται σε διαφορά πίεσης. Η εξίσωση αυτή είναι η απλοποιημένη μορφή της εξίσωσης Boltzmann για χρονικά αμετάβλητες ροές οφειλόμενες είτε σε κλίση πίεσης (ροή Poiseuille), είτε σε μεταφορά ορμής από τα τοιχώματα (ροή Couette), είτε σε συνδυασμό τους.

Ακόμα και σε αυτή την μορφή όμως ο χώρος των μικροσκοπικών ταχυτήτων παραμένει τρισδιάστατος και η διακριτοποίηση πρέπει να επεκτείνεται σε τρεις διαστάσεις. Προκειμένου να αποφευχθεί αυτό, γίνεται η προβολή τη εξίσωσης στο πεδίο της c_y , πολλαπλασιάζοντας την εξίσωση (4.1) με $\frac{1}{\pi} c_x e^{-c_x^2 - c_z^2}$ και στη συνέχεια ολοκληρώνοντας ως

προς c_x και c_z . Αν οριστεί ως ψ η ποσότητα

$$\psi(y, c_y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x h(y, c_x, c_y, c_z) e^{-c_x^2 - c_z^2} dc_x dc_z \quad (4.2)$$

τότε η εξίσωση (4.1) γίνεται

$$c_y \frac{\partial \psi(y, c_y)}{\partial y} = \delta[u_x(y) - \psi(y, c_y)] + \frac{1}{2} X_P. \quad (4.3)$$

Τέλος λαμβάνοντας υπόψη ότι η ταχύτητα u_x είναι

$$u_x(y) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x h(y, c_x, c_y, c_z) e^{-c_x^2 - c_y^2 - c_z^2} dc_x dc_y dc_z \quad (4.4)$$

προκύπτει

$$u_x(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(y, c_y) e^{-c_y^2} dc_y. \quad (4.5)$$

Όπως είναι φανερό, η ταχύτητα είναι η μηδενική ροπή του ψ ως προς την μικροσκοπική ταχύτητα c_y . Ονομάζοντας $\phi_n(y)$

$$\phi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(c_y) \psi(y, c_y) e^{-c_y^2} dc_y \quad (4.6)$$

όπου $H_n(c_y)$ το πολυώνυμο Hermite τάξης n ως προς c_y τότε η τελική εξίσωση που πρέπει να επιλυθεί είναι:

$$c_y \frac{\partial \psi(y, c_y)}{\partial y} + \delta \psi(y, c_y) = \delta \phi_0(y) + \frac{1}{2} X_P \quad (4.7)$$

με

$$\phi_0(y) = u_x(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(y, c_y) e^{-c_y^2} dc_y. \quad (4.8)$$

Ο επαναληπτικός αλγόριθμος της μεθόδου των διακριτών ταχυτήτων στο σύστημα (4.7) και (4.8) διατυπώνεται παρακάτω:

$$c_y \frac{\partial \psi(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})}}{\partial x} + \psi(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})} = \phi_0(y)^{(l)} + \frac{1}{2} X_P \quad (4.9)$$

όπου

$$\phi_0(y)^{(l+1)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})} e^{-c_y^2} dc_y. \quad (4.10)$$

Ο δείκτης l είναι ο δείκτης επανάληψης. Με άλλα λόγια η μέθοδος συνίσταται στην επίλυση της εξίσωσης (4.9) με χρήση των τιμών της $\phi_0(y)$ που βρέθηκαν στην επανάληψη l και από τις τιμές της $\psi(y, c_y)$ που προκύπτουν, τον προσδιορισμό των τιμών της $\phi_0(y)$ στην επανάληψη $l+1$. Ο ρυθμός σύγκλισης του επαναληπτικού σχήματος προσδιορίζεται στη συνέχεια με χρήση της ανάλυσης ευστάθειας Fourier, εφαρμοζόμενης σε άπειρο μέσο.

Οι συναρτήσεις διόρθωσης ορίζονται ως:

$$Y(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})} = \psi(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})} - \psi(y, c_y)^{(l-\frac{1}{2})} \quad (4.11)$$

και

$$\Phi_0(y)^{(l+1)} = \phi_0(y)^{(l+1)} - \phi_0(y)^{(l)} \quad (4.12)$$

και είναι οι μεταβολές των $\psi(y, c_y)$ και $\phi_0(y)$ μεταξύ δύο επάλληλων επαναλήψεων αντίστοιχα. Ο ρυθμός με τον οποίο οι ποσότητες $Y(y, c_y)$ και $\Phi_0(y)$ τείνουν προς το μηδέν είναι και ο ρυθμός σύγκλισης της μεθόδου των διακριτών ταχυτήτων. Αφαιρώντας τις εξισώσεις (4.9) και (4.10) για δύο διαδοχικές επαναλήψεις και χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (4.11) και (4.12) προκύπτει:

$$c_y \frac{\partial Y(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})}}{\partial x} + \delta Y(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})} = \delta \Phi_0(y)^{(l)} \quad (4.13)$$

και

$$\Phi_0(y)^{(l+1)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} Y(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})} e^{-c_y^2} dc_y \quad (4.14)$$

αντίστοιχα. Για τον υπολογισμό του ρυθμού σύγκλισης είναι απαραίτητος ο προσδιορισμός των ιδιοτιμών και των ιδιοσυναρτήσεων της μορφής:

$$Y(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})} = \omega^l y_1(c_y) e^{\omega y} \quad (4.15)$$

και

$$\Phi_0(y)^{(l+1)} = \omega \Phi_0(y)^{(l)} = \omega^2 \Phi_0(y)^{(l-1)} = \dots = \omega^{l+1} a_0 e^{\omega y} \quad (4.16)$$

όπου ο συντελεστής a_0 είναι μία άγνωστη σταθερά. Στις εξισώσεις (4.15) και (4.16), η μεταβλητή ω είναι η ιδιοτιμή που αντιστοιχεί στον κυματαριθμό λ και δηλώνει τη διόρθωση μεταξύ των επαναλήψεων. Αντικαθιστώντας τις εξισώσεις (4.15) και (4.16) στις (4.13) και (4.14) εξάγονται οι εκφράσεις για τον υπολογισμό των ιδιοσυναρτήσεων και των ιδιοτιμών

$$y_1(c_y) = \frac{a_0}{1 + i \frac{\lambda c_y}{\delta}} \quad (4.17)$$

και

$$\omega = \omega_{DVM} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-c_y^2}}{1 + \left(\frac{\lambda c_y}{\delta}\right)^2} dc_y = \Lambda \quad (4.18)$$

αντίστοιχα. Για να καταστεί εφικτή η διατήρηση των συμβολισμών και στη συνέχεια, όπου θα αναπτυχθούν τα σχήματα επιτάχυνσης, η ιδιοτιμή ω της μεθόδου των διακριτών ταχυτήτων συμβολίζεται ως ω_{DVM} . Η φασματική ακτίνα $\sup_{\lambda} |\omega_{DVM}|$ με $-\infty < \lambda < \infty$, αποτελεί την βραδύτερη δυνατή μείωση του σφάλματος μεταξύ δύο διαδοχικών επαναλήψεων. Το ολοκλήρωμα στην εξίσωση (4.18) υπολογίζεται αριθμητικά και τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στο Σχήμα (4.1). Η μέγιστη τιμή για την ποσότητα $|\omega_{DVM}|$, αντιστοιχεί στο

$\lambda = 0$, και είναι ίση με τη μονάδα. Σε ένα πεπερασμένο σύστημα η τιμή $\lambda = 0$ και η αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση $y(c_y) = a_0$ δεν υπάρχουν και αυτή είναι η αιτία που η μέθοδος που περιγράφεται από τις εξισώσεις (4.9) και (4.10) εφαρμοζόμενη σε πραγματικά, πεπερασμένα συστήματα με οριακές συνθήκες συγκλίνει. Παρόλα ταύτα η αργή σύγκλιση της μεθόδου γίνεται αντιληπτή και θεμελιώνεται και θεωρητικά.

Τα αποτελέσματα από την επίλυση της (4.18) για διάφορες τιμές του δ παρουσιάζονται στο Σχήμα (4.2). Όπως είναι προφανές, για μικρές τιμές του δ η σύγκλιση επιτυγχάνεται αρκετά εύκολα. Αντίθετα για μεγάλες τιμές του δ , η σύγκλιση είναι πολύ αργή και απαιτείται σημαντικός αριθμός επαναλήψεων. Το αποτέλεσμα αυτό επιβεβαιώνει και θεωρητικά την αριθμητική διαπίστωση ότι όσο μειώνεται ο αριθμός Kn (δηλαδή αυξάνεται το δ), τόσο η σύγκλιση γίνεται όλο και δυσκολότερη.

4.2.2 Μονοδιάστατη εξίσωση μοντέλου S: Διατύπωση και ανάλυση ευστάθειας

Με αντίστοιχο τρόπο όπως και πριν μπορεί να εξαχθεί και η εξίσωση όταν ως μοντέλο συγκρούσεων επιλεγεί το S. Και πάλι χρησιμοποιούνται οι ίδιες παραδοχές, δηλαδή ότι οι αποκλίσεις πυκνότητας και θερμοκρασίας είναι μηδενικές, ότι η ταχύτητα και η θερμοροή έχουν ως μη μηδενικές συνιστώσες μόνο τις u_x και q_x αντίστοιχα και τέλος ότι οι παράγωγοι της συνάρτησης κατανομής είναι μηδενικές στις διευθύνσεις x και z . Τότε, η αρχική εξίσωση που αυτή τη φορά είναι η (3.42), απλοποιείται και παίρνει τη μορφή:

$$c_y \frac{\partial h(y, c_x, c_y, c_z)}{\partial y} = \delta \left[2 c_x u_x(y) + \frac{4}{15} c_x q_x(y) \left(c^2 - \frac{5}{2} \right) - h(y, c_x, c_y, c_z) \right] + c_x X_P \quad (4.19)$$

όπου η ταχύτητα u_x δίνεται από τη σχέση (4.4), ενώ η θερμοροή από την σχέση

$$q_x(y) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x \left(c^2 - \frac{5}{2} \right) h(y, c_x, c_y, c_z) e^{-c_x^2 - c_y^2 - c_z^2} dc_x dc_y dc_z. \quad (4.20)$$

Χρησιμοποιώντας την ίδια διαδικασία όπως και πριν, δηλαδή πολλαπλασιάζοντας την εξίσωση (4.1) με $\frac{1}{\pi} c_x e^{-c_x^2 - c_z^2}$ και κατόπιν ολοκληρώνοντας ως προς c_x και c_z , αφού πρώτα οριστεί ως ψ_1 η ποσότητα

$$\psi_1(y, c_y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x h(y, c_x, c_y, c_z) e^{-c_x^2 - c_z^2} dc_x dc_z \quad (4.21)$$

προκύπτει

$$c_y \frac{\partial \psi_1(y, c_y)}{\partial y} = \delta \left[u_x(y) + \frac{2}{15} q_x(y) \left(c_y^2 - \frac{1}{2} \right) - \psi_1(y, c_y) \right] + \frac{1}{2} X_P. \quad (4.22)$$

Στην εξίσωση αυτή όμως υπεισέρχεται και ο υπολογισμός της θερμοροής, ο προσδιορισμός της οποίας άλλωστε είναι και ένα από τα ζητούμενα, κάτι όμως που δεν είναι εφικτό χρησιμοποιώντας μόνο την ψ_1 . Για να ξεπεραστεί το εμπόδιο αυτό, απαιτείται η δημιουργία μιας νέας εξίσωσης που προκύπτει αν η (4.19) πολλαπλασιαστεί με

$$\frac{1}{2\pi} c_x (c_x^2 + c_z^2) e^{-c_x^2 - c_z^2} \quad (4.23)$$

και ολοκληρωθεί ως προς c_x και c_z . Η προκύπτουσα εξίσωση είναι

$$c_y \frac{\partial \psi_2(y, c_y)}{\partial y} = \delta \left[u_x(y) + \frac{2}{15} q_x(y) \left(c_y^2 + \frac{1}{2} \right) - \psi_2(y, c_y) \right] + \frac{1}{2} X_P. \quad (4.24)$$

όπου

$$\psi_2(y, c_y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} c_x (c_x^2 + c_z^2) h(y, c_x, c_y, c_z) e^{-c_x^2 - c_z^2} dc_x dc_z. \quad (4.25)$$

Αντικαθιστώντας τις εκφράσεις για τα ψ_1 και ψ_2 στις (4.4) και (4.20), μπορεί να υπολογιστούν οι μακροσκοπικές ιδιότητες

$$u_x(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1(y, c_y) e^{-c_y^2} dc_y \quad (4.26)$$

και

$$q_x(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\psi_1(y, c_y) \left(c_y^2 - \frac{5}{2} \right) + 2 \psi_2(y, c_y) \right] e^{-c_y^2} dc_y \quad (4.27)$$

Το σύστημα των εξισώσεων (4.22), (4.24), (4.26) και (4.27) είναι αυτό που επιλύεται. Για να βρεθεί ο ρυθμός σύγκλισης ορίζονται και πάλι οι ποσότητες

$$Y_1(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})} = \psi_1(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})} - \psi_1(y, c_y)^{(l-\frac{1}{2})} \quad (4.28)$$

$$Y_2(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})} = \psi_2(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})} - \psi_2(y, c_y)^{(l-\frac{1}{2})} \quad (4.29)$$

$$Z_0(y)^{(l+1)} = u_x(y)^{(l+1)} - u_x(y)^{(l-1)} \quad (4.30)$$

και

$$W_0(y)^{(l+1)} = q_x(y)^{(l+1)} - q_x(y)^{(l-1)}. \quad (4.31)$$

Αν οι εξισώσεις (4.22) και (4.24) αφαιρεθούν για δύο διαδοχικές επαναλήψεις, προκύπτει

$$c_y \frac{\partial Y_1(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})}}{\partial y} + \delta Y_1(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})} = \delta \left[Z_0(y)^{(l)} + \frac{2}{15} W_0(y)^{(l)} \left(c_y^2 - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (4.32)$$

$$c_y \frac{\partial Y_2(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})}}{\partial y} + \delta Y_2(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})} = \delta \left[Z_0(y)^{(l)} + \frac{2}{15} W_0(y)^{(l)} \left(c_y^2 + \frac{1}{2} \right) \right] \quad (4.33)$$

$$Z_0(y)^{(l+1)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} Y_1(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})} e^{-c_y^2} dc_y \quad (4.34)$$

και

$$W_0(y)^{(l+1)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[Y_1(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})} \left(c_y^2 - \frac{5}{2} \right) + 2 Y_2(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})} \right] e^{-c_y^2} dc_y. \quad (4.35)$$

Εφαρμόζοντας την ανάλυση Fourier όπως και στο μοντέλο BGK, γίνεται ο χωρισμός μεταβλητών

$$Y_1(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})} = \omega^l y_1(c_y) e^{l y} \quad (4.36)$$

$$Y_2(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})} = \omega^l y_2(c_y) e^{l y} \quad (4.37)$$

$$Z_0(y)^{(l+1)} = \omega Z_0(y)^{(l)} = \omega^2 Z_0(y)^{(l-1)} = \dots = \omega^{l+1} z_0 e^{l y} \quad (4.38)$$

$$W_0(y)^{(l+1)} = \omega W_0(y)^{(l)} = \omega^2 W_0(y)^{(l-1)} = \dots = \omega^{l+1} w_0 e^{l y} \quad (4.39)$$

με τα z_0 και w_0 να είναι άγνωστες σταθερές. Αντικαθιστώντας τις εξισώσεις (4.36) και (4.37) στις (4.32) και (4.33) εξάγονται οι εκφράσεις για τις δύο ιδιοσυναρτήσεις

$$y_1(c_y) = \frac{z_0 + \frac{2}{15} \left(c_y^2 - \frac{1}{2} \right) w_0}{1 + i \frac{\lambda c_y}{\delta}} \quad (4.40)$$

$$y_2(c_y) = \frac{z_0 + \frac{2}{15} \left(c_y^2 + \frac{1}{2} \right) w_0}{1 + i \frac{\lambda c_y}{\delta}} \quad (4.41)$$

οι οποίες αν με τη σειρά τους αντικατασταθούν στις (4.34) και (4.35) μέσω των σχέσεων (4.36) και (4.37) προκύπτει ένα πρόβλημα εύρεσης ιδιοτιμών ενός πίνακα 2×2 , το οποίο έχει τη μορφή

$$\left(\underline{\underline{A}} - \omega \underline{\underline{I}} \right) \underline{\underline{\alpha}} = 0. \quad (4.42)$$

Στο σύστημα (4.42), ω είναι οι δύο ιδιοτιμές που υποδεικνύουν το ρυθμό σύγκλισης της μεθόδου DVM, $\underline{\underline{\alpha}} = [z_0, w_0]^T$ είναι κάποιο από τα δύο ιδιοδιανύσματα και τέλος ο πίνακας $\underline{\underline{A}}$ έχει τη μορφή

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} \Lambda & \frac{2}{15} \left[\frac{\delta^2}{\lambda^2} (1 - \Lambda) - \frac{\Lambda}{2} \right] \\ \left[\frac{\delta^2}{\lambda^2} (1 - \Lambda) - \frac{\Lambda}{2} \right] & \frac{3}{10} \Lambda - \frac{2}{15} \frac{\delta^2}{\lambda^2} \left[\frac{\delta^2}{\lambda^2} (1 - \Lambda) - \Lambda + \frac{1}{2} \right] \end{bmatrix}, \quad (4.43)$$

με το Λ να έχει οριστεί στην (4.18). Αναλυτικές εκφράσεις για τις ιδιοτιμές είναι εύκολο να βρεθούν επιλύοντας τη δευτεροβάθμια εξίσωση που προκύπτει. Στην συνέχεια, μπορεί να υπολογιστούν αριθμητικά οι ακριβείς τιμές συναρτήσεως του λ . Οι τιμές αυτές παρουσιάζονται στο Σχήμα (4.1). Όπως γίνεται αντιληπτό, όσο το λ προσεγγίζει το μηδέν οι τιμές των $\omega_1(\lambda)$ και $\omega_2(\lambda)$ αυξάνουν και η μέγιστη τιμή παρουσιάζεται και στις δύο για $\lambda = 0$ και είναι $|\omega_1| = 1$ και $|\omega_2| = \frac{1}{3}$ αντίστοιχα. Η φασματική ακτίνα του μοντέλου $\underline{\underline{S}}$ είναι ίση με τη μονάδα και ίδια με αυτή που βρέθηκε και για το BGK. Ταυτόχρονα φαίνεται ότι σε όλο το εύρος των τιμών του λ οι τιμές του $|\omega_1|$ είναι πολύ κοντά σε αυτές του $|\omega_{BGK}|$ ενώ οι τιμές του $|\omega_2|$ είναι πάντα μικρότερες. Δικαιολογείται με τον τρόπο αυτό η αργή σύγκλιση που παρουσιάζει η DVM και με την εφαρμογή του μοντέλου $\underline{\underline{S}}$, ιδιαίτερα όσο το δ αυξάνει, εφόσον η συμπεριφορά και για το μοντέλο $\underline{\underline{S}}$ για μικρούς αριθμούς Kn είναι αντίστοιχη με αυτή του BGK.

4.2.3 Δισδιάστατη εξίσωση: Διατύπωση και ανάλυση ευστάθειας

Μια πιο πολύπλοκη περίπτωση είναι όταν θεωρηθεί ροή όπου ενώ τα μακροσκοπικά μεγέθη έχουν συνιστώσα μόνο σε μια διεύθυνση, οι παράγωγοί τους καθώς και η παράγωγος της συνάρτησης κατανομής μεταβάλλονται και στις δύο άλλες διευθύνσεις. Χαρακτηριστικό παράδειγμα είναι ροές μέσα σε αγωγούς. Και στην περίπτωση αυτή μπορεί να εφαρμοστεί η τεχνική της προβολής στον χώρο των ταχυτήτων προκειμένου να μειωθεί ο αριθμός των διακριτών ταχυτήτων που απαιτούνται.

Στην περίπτωση όπου μοντέλο συγχρούσεων είναι το BGK τότε για μηδενικές αποκλίσεις θερμοκρασίας και πυκνότητας η εξίσωση (3.41) παίρνει τη μορφή

$$c_y \frac{\partial h(y, z, c_x, c_y, c_z)}{\partial y} + c_z \frac{\partial h(y, z, c_x, c_y, c_z)}{\partial z} + \delta h(y, z, c_x, c_y, c_z) = 2 \delta c_x u_x(y) + c_x X_P. \quad (4.44)$$

Στη συνέχεια πολλαπλασιάζοντας την εξίσωση με $\frac{1}{\sqrt{\pi}} c_x e^{-c_x^2}$, ολοκληρώνοντας ως προς c_x , και θέτοντας ως ψ την ποσότητα

$$\psi(y, z, c_y, c_z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} c_x h(y, z, c_x, c_y, c_z) e^{-c_x^2} dc_x, \quad (4.45)$$

η εξίσωση (4.44) γίνεται

$$c_y \frac{\partial \psi(y, z, c_y, c_z)}{\partial y} + c_z \frac{\partial \psi(y, z, c_y, c_z)}{\partial z} + \delta \psi(y, z, c_y, c_z) = \delta u_x(y, z) + \frac{X_P}{2}. \quad (4.46)$$

ενώ η ταχύτητα $u_x(y, z)$ είναι

$$u_x(y, z) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(y, z, c_y, c_z) e^{-c_y^2 - c_z^2} dc_y dc_z. \quad (4.47)$$

Η επίλυση του προβλήματος γίνεται μέσω των εξισώσεων (4.46) και (4.47) με το πλεονέκτημα ότι ο χώρος των ταχυτήτων είναι πλέον δισδιάστατος.

Η ανάλυση ευστάθειας στις δύο διαστάσεις δεν διαφέρει σε σχέση με την αντίστοιχη διαδικασία που ακολουθήθηκε στο μονοδιάστατο πρόβλημα. Έτσι, αν η εξίσωση (4.46) διατυπωθεί για δύο επάλληλες επαναλήψεις και γίνει αφαίρεση κατά μέλη, προκύπτει

$$c_y \frac{\partial Y(y, z, c_y, c_z)^{(l+\frac{1}{2})}}{\partial y} + c_z \frac{\partial Y(y, z, c_y, c_z)^{(l+\frac{1}{2})}}{\partial z} + \delta Y(y, z, c_y, c_z)^{(l+\frac{1}{2})} = \delta \Phi_{00}(y, z)^{(l)} \quad (4.48)$$

και

$$\Phi_{00}(y, z)^{(l+1)} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Y(y, z, c_y, c_z)^{(l+\frac{1}{2})} e^{-c_y^2 - c_z^2} dc_y dc_z \quad (4.49)$$

με $Y(y, z, c_y, c_z)^{(l+\frac{1}{2})}$ και $\Phi_{00}(y, z)^{(l+1)}$ να είναι

$$Y(y, z, c_y, c_z)^{(l+\frac{1}{2})} = \psi(y, z, c_y, c_z)^{(l+\frac{1}{2})} - \psi(y, z, c_y, c_z)^{(l-\frac{1}{2})} \quad (4.50)$$

και

$$\Phi_{00}(y, z)^{(l+1)} = u_x(y, z)^{(l+1)} - u_x(y, z)^{(l)}. \quad (4.51)$$

Χρησιμοποιώντας και πάλι την ανάλυση Fourier, θέτουμε

$$Y(y, z, c_y, c_z)^{(l+\frac{1}{2})} = \omega^l s(c_y, c_z) e^{i\lambda(y\theta_y + z\theta_z)} \quad (4.52)$$

και

$$\Phi_{00}(y, z)^{(l+1)} = \omega \Phi_{00}(y, z)^{(l)} = \omega^{l+1} a_{00} e^{i\lambda(y\theta_y + z\theta_z)} \quad (4.53)$$

όπου $s(c_y, c_z)$ η ιδιοσυνάρτηση που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή ω . Τελικά οι εκφράσεις που λαμβάνονται για τις ιδιοσυναρτήσεις και τις ιδιοτιμές είναι αντίστοιχα

$$s(c_y, c_z) = \frac{a_{00}}{1 + i\frac{\lambda}{\delta}(c_y\theta_y + c_z\theta_z)} \quad (4.54)$$

και

$$\omega(\lambda) = \omega_{DVM}(\lambda) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-c_y^2 - c_z^2}}{1 + \left(\frac{\lambda}{\delta}\right)^2 (c_y\theta_y + c_z\theta_z)^2} dc_y dc_z. \quad (4.55)$$

Αν εφαρμοστεί ένας απλός γραμμικός μετασχηματισμός τότε το διπλό ολοκλήρωμα της (4.55) μετατρέπεται σε απλό όμοιο με αυτό που προέκυψε από την ανάλυση του μονοδιάστατου προβλήματος. Όπως ήταν αναμενόμενο, για άπειρο χωρίο, η λύση του μονοδιάστατου και του διδιάστατου προβλήματος ταυτίζονται. Το γεγονός αυτό οδηγεί στο συμπέρασμα ότι η μεθοδολογία εφαρμόζεται με αντίστοιχα αποτελέσματα σε όλες τις Καρτεσιανές γεωμετρίες.

Στην αντίστοιχη περίπτωση όπου ως μοντέλο για τον όρο των συγκρούσεων λαμβάνεται το S, οι εξισώσεις μεταφοράς είναι δύο και πιο συγκεκριμένα οι

$$c_y \frac{\partial \psi_1(y, z, c_y, c_z)}{\partial y} + c_z \frac{\partial \psi_1(y, z, c_y, c_z)}{\partial z} + \delta \psi_1(y, z, c_y, c_z) = \delta \left[u_x(y) + \frac{2}{15} q_x(y) (c_y^2 + c_z^2 - 1) \right] + \frac{X_P}{2}. \quad (4.56)$$

και

$$c_y \frac{\partial \psi_2(y, z, c_y, c_z)}{\partial y} + c_z \frac{\partial \psi_2(y, z, c_y, c_z)}{\partial z} + \delta \psi_2(y, z, c_y, c_z) = \delta \frac{3}{2} \left[u_x(y) + \frac{2}{15} q_x(y) (c_y^2 + c_z^2) \right] + \frac{3}{4} X_P \quad (4.57)$$

με

$$\psi_1(y, z, c_y, c_z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} c_x h(y, z, c_x, c_y, c_z) e^{-c_x^2} dc_x \quad (4.58)$$

$$\psi_2(y, z, c_y, c_z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} c_x^3 h(y, z, c_x, c_y, c_z) e^{-c_x^2} dc_x \quad (4.59)$$

και

$$u_x(y, z) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1(y, z, c_y, c_z) e^{-c_y^2 - c_z^2} dc_y dc_z \quad (4.60)$$

$$q_x(y, z) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\psi_1(y, z, c_y, c_z) \left(c_y^2 + c_z^2 - \frac{5}{2} \right) + \psi_2(y, z, c_y, c_z) \right] e^{-c_y^2 - c_z^2} dc_y dc_z. \quad (4.61)$$

Η ανάλυση ευστάθειας ακολουθεί τα ίδια βήματα όπως και με το μοντέλο BGK. Το αποτέλεσμα που προκύπτει είναι και πάλι ίδιο με αυτό της μονοδιάστατης περίπτωσης και επομένως μπορεί να επιβεβαιωθεί ότι η συμπεριφορά των εξισώσεων ως προς το ρυθμό σύγκλισης δεν είναι εξαρτώμενη από τον αριθμό των χωρικών διαστάσεων. Η διαπίστωση αυτή ισχύει και για τα σχήματα επιτάχυνσης που παρουσιάζονται στη συνέχεια.

Τέλος σημειώνεται ότι η διαμόρφωση των εξισώσεων μέσω των προβολών μειώνει μεν το εύρος των εφαρμογών αλλά όχι δραματικά. Υπάρχουν πλείστες περιπτώσεις όπου μπορούν να χρησιμοποιηθούν και είναι η συνήθης μορφή των εξισώσεων μεταφοράς με την οποία χρησιμοποιούνται στη βιβλιογραφία.

4.3 Διαμόρφωση σχημάτων επιτάχυνσης

Οι μεθοδολογίες που αναπτύσσονται στο παρόν Κεφάλαιο βασίζονται σε ανάλογες που εφαρμόζονται με επιτυχία στην επίλυση προβλημάτων μεταφοράς σε νετρόνια και σε ακτινοβολία. Οι πιο αποτελεσματικές εξ αυτών βασίζονται στην διαμόρφωση εξισώσεων ροπών οι οποίες ονομάζονται συνθετικές εξισώσεις, και επιλύονται μαζί με την εξίσωση μεταφοράς επιτυγχάνοντας σημαντική βελτίωση στον αργό ρυθμό σύγκλισης της εξίσωσης μεταφοράς.

Στην συνέχεια θα αναπτυχθούν αντίστοιχου τύπου συνθετικές εξισώσεις οι οποίες θα συνδυαστούν με την εξίσωση μεταφοράς προκειμένου να επιτευχθεί βελτίωση του ρυθμού σύγκλισης. Ειδικότερα θα αναπτυχθούν οι μεθοδολογίες για τις περιπτώσεις που ο όρος των συγκρούσεων αντικαθίσταται από τα μοντέλα BGK και S.

4.3.1 Μονοδιάστατη εξίσωση BGK: Διατύπωση σχήματος επιτάχυνσης και ανάλυση ευστάθειας

Το σχήμα επιτάχυνσης που αναπτύσσεται βασίζεται στην εξίσωση μεταφοράς (4.7) που παρουσιάστηκε στην προηγούμενη παράγραφο. Αν η εξίσωση αυτή πολλαπλασιαστεί με $\frac{1}{\sqrt{\pi}} H_0(c_y) e^{-c_y^2}$ και κατόπιν ολοκληρωθεί ως προς c_y προκύπτει:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \phi_1(y)}{\partial y} + \delta \phi_0(y) = \delta \phi_0(y) + \frac{1}{2} X_p \quad (4.62)$$

όπου το ϕ_1 ορίζεται από την εξίσωση (4.6) και το H_0 είναι το πολυώνυμο Hermite μηδενικής τάξης. Ακολουθώντας την ίδια διαδικασία, μπορεί να εξαχθεί και δεύτερη εξίσωση. Αυτό γίνεται πολλαπλασιάζοντας την εξίσωση μεταφοράς με $\frac{1}{\sqrt{\pi}} H_1(c_y) e^{-c_y^2}$ και ολοκληρώνοντας

ως προς c_y

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \phi_2(y)}{\partial y} + \frac{\partial \phi_0(y)}{\partial y} + \delta \phi_1(y) = 0 \quad (4.63)$$

Αντίστοιχα μπορούν να προκύψουν όσες εξισώσεις είναι απαραίτητες πολλαπλασιάζοντας την εξίσωση μεταφοράς (4.7) με $\frac{1}{\sqrt{\pi}} H_n(c_y) e^{-c_y^2}$ και ολοκληρώνοντας. Η μορφή αυτών είναι

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \phi_{n+1}(y)}{\partial y} + n \frac{\partial \phi_{n-1}(y)}{\partial y} + \delta \phi_n(y) = 0, \quad n = 1, 2, \dots, N \quad (4.64)$$

Οι εξισώσεις ροπών, όπως αυτές ονομάζονται, χρησιμοποιούνται για την δημιουργία του σχήματος επιτάχυνσης. Το σχήμα συνίσταται στην επίλυση του συστήματος των εξισώσεων ροπών με την εξίσωση μεταφοράς σε κάθε επανάληψη. Το επαναληπτικό σχήμα που προκύπτει έχει τη κάτωθι μορφή

$$c_y \frac{\partial \psi(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})}}{\partial x} + \delta \psi(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})} = \delta \phi_0(y)^{(l)} + \frac{1}{2} X_P \quad (4.65)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial \phi_{n+1}(y)^{(l+1)}}{\partial y} + n \frac{\partial \phi_{n-1}(y)^{(l+1)}}{\partial y} + \delta \phi_n(y)^{(l+1)} &= 0, \quad n = 1, 2, \dots, N-1 \\ N \frac{\partial \phi_{N-1}(y)^{(l+1)}}{\partial y} + \delta \phi_N(y)^{(l+1)} &= -\frac{1}{2} \frac{\partial \phi_{N+1}(y)^{(l+\frac{1}{2})}}{\partial y} \end{aligned} \quad (4.66)$$

με

$$\phi_{N+1}(y)^{(l+\frac{1}{2})} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} H_{N+1}(c_y) \psi(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})} e^{-c_y^2} dc_y. \quad (4.67)$$

Όλες οι ροπές επιταχύνονται, εκτός από την ϕ_N . Όπως φαίνεται και από τις παραπάνω εξισώσεις, το σχήμα αποτελείται από τα παρακάτω βήματα:

1) Η εξίσωση μεταφοράς (4.65) επιλύεται με βάση τις τιμές της ϕ_0 που έχουν προκύψει στο βήμα l .

2) Υπολογίζεται η ροπή $\phi_{N+1}(y)^{(l+\frac{1}{2})}$ μέσω της σχέσης (4.67)

3) Επιλύεται το σύστημα (4.64) και εξάγονται οι τιμές των $\phi_n(y)^{(l+1)}$ για $n = 0, 1, 2, \dots, N$

4) Γίνεται έλεγχος της σύγκλισης μεταξύ των τιμών $\phi_0(y)^{(l+1)}$ και $\phi_0(y)^{(l)}$ και αν κρίνεται απαραίτητο επαναλαμβάνεται η διαδικασία, ξεκινώντας από τον υπολογισμό του $\psi(y, c_y)$ με βάση την νέα τιμή του $\phi_0(y)^{(l+1)}$ που προέκυψε από την εφαρμογή του σχήματος επιτάχυνσης.

Όπως είναι φανερό διάφορα σχήματα επιτάχυνσης μπορούν να προκύψουν, ανάλογα με τον αριθμό των ροπών που επιταχύνονται. Αν η μεγαλύτερη ροπή που επιταχύνεται είναι η ϕ_N , τότε το αντίστοιχο σχήμα ονομάζεται " H_n σχήμα επιτάχυνσης" και αποτελείται από τις εξισώσεις (4.65-4.67). Το υπολογιστικό κόστος ανά επανάληψη αυξάνεται, αλλά,

όπως θα φανεί στη συνέχεια, το κόστος δεν είναι μεγάλο ενώ ο αριθμός των επαναλήψεων μειώνεται σημαντικά. Έτσι, ο συνολικός υπολογιστικός χρόνος είναι τελικά πολύ μικρότερος.

Περνώντας τώρα στην ανάλυση ευστάθειας του σχήματος και τον προσδιορισμό της φασματικής ακτίνας, ακολουθείται αντίστοιχη προσέγγιση με την περίπτωση της απλής μεθόδου των διακριτών ταχυτήτων. Εφαρμόζεται η ανάλυση Fourier και προσδιορίζεται ο ρυθμός σύγκλισης για όλο το φάσμα των κυματαριθμών λ .

Αρχικά ορίζονται οι συναρτήσεις

$$Y(y)^{(l+\frac{1}{2})} = \psi(y)^{(l+\frac{1}{2})} - \psi(y)^{(l-\frac{1}{2})} \quad (4.68)$$

και

$$\Phi_n(y)^{(l+1)} = \phi_n(y)^{(l+1)} - \phi_n(y)^{(l)} \quad (4.69)$$

που είναι και πάλι οι συναρτήσεις διόρθωσης σε κάθε επανάληψη. Από τις εξισώσεις (4.66) και (4.67) προκύπτει:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial \Phi_1(y)^{(l+1)}}{\partial y} &= 0 \\ \frac{1}{2} \frac{\partial \Phi_{n+1}(y)^{(l+1)}}{\partial y} + n \frac{\partial \Phi_{n-1}(y)^{(l+1)}}{\partial y} + \delta \Phi_n(y)^{(l+1)} &= 0, \quad n = 1, 2, \dots, N-1 \\ N \frac{\partial \Phi_{N-1}(y)^{(l+1)}}{\partial y} + \delta \Phi_N(y)^{(l+1)} &= -\frac{1}{2} \frac{\partial \Phi_{N+1}(y)^{(l+\frac{1}{2})}}{\partial y} \end{aligned} \quad (4.70)$$

με

$$\Phi_{N+1}(y)^{(l+\frac{1}{2})} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} H_{N+1}(c_y) Y(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})} e^{-c_y^2} dc_y. \quad (4.71)$$

Στη συνέχεια, ορίζεται ο ρυθμός σύγκλισης των ροπών

$$\Phi_n(y)^{(l+1)} = \omega \Phi_n(y)^{(l)} = \dots = \omega^{l+1} \Phi_n(y) = \omega^{l+1} a_n e^{i\lambda y} \quad n = 0, 1, 2, \dots, N. \quad (4.72)$$

Αντικαθιστώντας τις σχέσεις (4.71) και (4.72) στις (4.70) και με ορισμένες αλγεβρικές πράξεις προκύπτει η διανυσματική εξίσωση

$$\omega \underline{\underline{D}} \underline{\underline{a}} = -i\lambda \underline{\underline{V}} \underline{\underline{G}}_{N+1} \quad (4.73)$$

όπου $\underline{\underline{a}}^T = (a_0, a_1, \dots, a_n)$ είναι διάνυσμα με στοιχεία τους αγνώστους συντελεστές και $\underline{\underline{V}}^T = (0, 0, \dots, 0, 1)$. Το μητρώο $\underline{\underline{D}}$ είναι τριδιαγώνιο και δίνεται από

$$D(\lambda) = \left\{ \begin{array}{ccccccc} 0 & \frac{i\lambda}{2} & 0 & & & & \\ & i\lambda & \delta & \frac{i\lambda}{2} & & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & & & n i\lambda & \delta & \frac{i\lambda}{2} & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & & 0 & N i\lambda & \delta \end{array} \right\}, \quad (4.74)$$

με $n = 0, 1, 2, \dots, N$. Τέλος το G_{N+1} είναι μια βαθμωτή ποσότητα

$$G_{N+1} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} H_{N+1}(c_y) y_1(c_y) e^{-c_y^2} dc_y. \quad (4.75)$$

Χρησιμοποιώντας για την ιδιοσυνάρτηση $\psi_1(c_y)$ την τιμή που δίνεται στην εξίσωση (4.17), μιας και η εξίσωση μεταφοράς παραμένει η ίδια, και αντικαθιστώντας στην σχέση (4.75) προκύπτει

$$G_{N+1} = F \cdot a \quad (4.76)$$

όπου το F είναι ένα διάνυσμα με μια γραμμή και στοιχεία

$$F_0(\lambda) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} H_{N+1}(c_y) \frac{e^{-c_y^2}}{1 + i \frac{\lambda c_y}{\delta}} dc_y \quad (4.77)$$

και

$$F_n(\lambda) = 0, \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad (4.78)$$

Στην περίπτωση αυτή, η σχέση 4.73 μπορεί να γραφεί ως

$$(\underline{A} - \omega \underline{I}) \underline{a} = 0 \quad (4.79)$$

με

$$\underline{A} = -i\lambda \underline{D}^{-1} \underline{V} \underline{F} \quad (4.80)$$

που αποτελεί πρόβλημα ιδιοτιμών στο οποίο ω είναι οι ιδιοτιμές του A και a τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα. Όμως από τη σχέση (4.80) γίνεται φανερό ότι το μητρώο A είναι γινόμενο ενός διανύσματος-στήλης και ενός διανύσματος-γραμμής και επομένως η τάξη του είναι ίση με τη μονάδα. Επομένως υπάρχει μία κύρια ιδιοτιμή ενώ όλες οι άλλες είναι μηδενικές. Άρα η μελέτη της συμπεριφοράς μίας και μόνο ιδιοτιμής αρκεί για να εξαχθούν συμπεράσματα σε σχέση με το ρυθμό σύγκλισης του σχήματος.

Αν εφαρμοστεί η μέθοδος επιταχύνοντας δύο, τρεις και τέσσερις ροπές, προκύπτουν αντίστοιχα οι παρακάτω αναλυτικές εκφράσεις για τις κύριες ιδιοτιμές

$$\omega_{H1} = \Lambda + \frac{2\delta^2}{\lambda^2}(\Lambda - 1) \quad (4.81)$$

$$\omega_{H2} = 3\Lambda + \frac{2\delta^2}{\lambda^2}(\Lambda - 1) - 2 \quad (4.82)$$

και

$$\omega_{H3} = \frac{1}{2 + 3\left(\frac{\lambda}{\delta}\right)^2} \left\{ 3\left(\frac{\lambda}{\delta}\right)^2 \Lambda + 4(\Lambda - 1) \left[3 + \left(\frac{\delta}{\lambda}\right)^2 \right] + 2 \right\}. \quad (4.83)$$

Οι παραπάνω εκφράσεις είναι οι ρυθμοί σύγκλισης των σχημάτων H_1, H_2 και H_3 αντίστοιχα, ενώ το Λ έχει οριστεί με τη σχέση (4.18) και αντιστοιχεί στον ρυθμό σύγκλισης της απλής μεθόδου των διακριτών ταχυτήτων με μοντέλο συγκρούσεων το BGK.

Οι εξισώσεις (4.81 - 4.83) επιλύονται αριθμητικά και τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στο Σχήμα (4.3) όπου περιλαμβάνεται και οι αντίστοιχες τιμές της απλής DVM, ενώ στο πίνακα (4.1) υπολογίζονται οι φασματικές ακτίνες του κάθε σχήματος.

Η δυστοκία που παρουσιάζει το σχήμα H_2 και η οποία έχει παρατηρηθεί και στο παρελθόν σε αντίστοιχα σχήματα [196] είναι προφανής. Για την ακρίβεια φαίνεται ότι το σχήμα δεν συγκλίνει καν. Τα άλλα δύο σχήματα (H_1 και H_3) φαίνεται να επιτυγχάνουν μεγάλη βελτίωση εφόσον με δύο επαναλήψεις το H_1 επιτυγχάνει μείωση του σφάλματος περίπου στο ένα δέκατο του αρχικού ενώ το H_3 το ελαττώνει στο 4% του αρχικού. Η βέλτιστη επιλογή βέβαια, εξαρτάται από την αύξηση σε υπολογιστικό χρόνο για κάθε επανάληψη που απαιτεί το κάθε σχήμα, που με τη σειρά του είναι συνάρτηση αρκετών παραγόντων όπως ο αριθμός των διακριτών ταχυτήτων που επιλέγονται.

4.3.2 Μονοδιάστατη εξίσωση μοντέλου **S**: Διατύπωση σχήματος επιτάχυνσης

Η διαμόρφωση των εξισώσεων επιτάχυνσης όταν ο όρος των συγκρούσεων αντικαθίσταται από το μοντέλο **S** δεν διαφοροποιείται σημαντικά. Ορισμένες αλλαγές βέβαια είναι απαραίτητες εφόσον στην περίπτωση αυτή υπάρχουν δύο εξισώσεις μεταφοράς αντί μίας που υπήρχε όταν μοντέλο συγκρούσεων ήταν το **BGK**.

Αρχικά είναι απαραίτητο να οριστούν οι ροπές των δύο συναρτήσεων κατανομής ψ_1 και ψ_2 ως προς τα πολυώνυμα Hermite

$$f_n(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(c_y) \psi_1(y, c_y) e^{-c_y^2} dc_y \quad (4.84)$$

$$g_n(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(c_y) \psi_2(y, c_y) e^{-c_y^2} dc_y. \quad (4.85)$$

Από αυτούς τους ορισμούς και τις σχέσεις (4.26) και (4.27) προκύπτει ότι

$$u_x(y) = f_0(y) \quad (4.86)$$

και

$$q_x(y) = \frac{1}{4} f_2(y) - 2f_0(y) + 2g_0(y). \quad (4.87)$$

Αντικαθιστώντας στις (4.22) και (4.24) εξάγονται οι σχέσεις

$$c_y \frac{\partial \psi_1(y, c_y)}{\partial y} + \delta \psi_1(y, c_y) = \delta \left\{ f_0(y) + \frac{2}{15} \left(c_y^2 - \frac{1}{2} \right) \left[\frac{1}{4} f_2(y) - 2f_0(y) + 2g_0(y) \right] \right\} + \frac{1}{2} X_P \quad (4.88)$$

και

$$c_y \frac{\partial \psi_2(y, c_y)}{\partial y} + \delta \psi_2(y, c_y) = \delta \left\{ f_0(y) + \frac{2}{15} \left(c_y^2 + \frac{1}{2} \right) \left[\frac{1}{4} f_2(y) - 2f_0(y) + 2g_0(y) \right] \right\} + \frac{1}{2} X_P. \quad (4.89)$$

Αν οι εξισώσεις (4.88) και (4.89) πολλαπλασιαστούν με $\frac{1}{\sqrt{\pi}}H_n(c_y)e^{-c_y^2}$ και κατόπιν ολοκληρωθούν προκύπτουν οι συνθετικές εξισώσεις. Η επίλυσή τους σε συνδυασμό με τις δύο εξισώσεις μεταφοράς επιτυγχάνει την επιτάχυνση του αριθμητικού σχήματος.

Πολλαπλασιάζοντας τις εξισώσεις μεταφοράς με $\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-c_y^2}$ και ολοκληρώνοντας ως προς c_y λαμβάνονται οι σχέσεις

$$\frac{1}{2} \frac{\partial f_1(y)}{\partial y} + \delta f_0(y) = \delta f_0(y) + \frac{1}{2} X_P \quad (4.90)$$

και

$$\frac{1}{2} \frac{\partial g_1(y)}{\partial y} + \delta g_0(y) = \delta \left[\frac{11}{15} f_0(y) + \frac{1}{30} f_2(y) + \frac{4}{15} g_0(y) \right] + \frac{1}{2} X_P \quad (4.91)$$

Ομοίως αν πολλαπλασιαστούν με $\frac{1}{\sqrt{\pi}}H_1(c_y)e^{-c_y^2}$ και κατόπιν ολοκληρωθούν προκύπτει:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial f_2(y)}{\partial y} + \frac{\partial f_0(y)}{\partial y} + \delta f_1(y) = 0 \quad (4.92)$$

και

$$\frac{1}{2} \frac{\partial g_2(y)}{\partial y} + \frac{\partial g_0(y)}{\partial y} + \delta g_1(y) = 0. \quad (4.93)$$

Οι εξισώσεις αυτές αρκούν για να εφαρμοστεί το σχήμα επιτάχυνσης H_1 . Το επαναληπτικό σχήμα έχει πλέον τη μορφή:

$$c_y \frac{\partial \psi_1(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})}}{\partial y} + \delta \psi_1(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})} = \delta \left\{ f_0(y)^{(l)} + \frac{2}{15} \left(c_y^2 - \frac{1}{2} \right) \left[\frac{1}{4} f_2(y)^{(l)} - 2f_0(y)^{(l)} + 2g_0(y)^{(l)} \right] \right\} + \frac{1}{2} X_P \quad (4.94)$$

$$c_y \frac{\partial \psi_2(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})}}{\partial y} + \delta \psi_2(y, c_y)^{(l+\frac{1}{2})} = \delta \left\{ f_0(y)^{(l)} + \frac{2}{15} \left(c_y^2 + \frac{1}{2} \right) \left[\frac{1}{4} f_2(y)^{(l)} - 2f_0(y)^{(l)} + 2g_0(y)^{(l)} \right] \right\} + \frac{1}{2} X_P. \quad (4.95)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial f_1(y)^{(l+1)}}{\partial y} = \frac{1}{2} X_P \quad (4.96)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial g_1(y)^{(l+1)}}{\partial y} + \delta \frac{11}{15} \left[g_0(y)^{(l+1)} - f_0(y)^{(l+1)} \right] = \delta \frac{1}{30} f_2(y)^{(l+\frac{1}{2})} + \frac{1}{2} X_P \quad (4.97)$$

$$\frac{\partial f_0(y)^{(l+1)}}{\partial y} + \delta f_1(y)^{(l+1)} = -\frac{1}{2} \frac{\partial f_2(y)^{(l+\frac{1}{2})}}{\partial y} \quad (4.98)$$

$$\frac{\partial g_0(y)^{(l+1)}}{\partial y} + \delta g_1(y)^{(l+1)} = -\frac{1}{2} \frac{\partial g_2(y)^{(l+\frac{1}{2})}}{\partial y}. \quad (4.99)$$

Οι μόνες ροπές που δεν επιταχύνονται είναι οι $f_2(y)$ και $g_2(y)$ οι οποίες υπολογίζονται από τις σχέσεις (4.84) και (4.85) για $n = 2$.

Η διαδικασία για την ανάλυση ευστάθειας είναι ακριβώς ίδια με αυτή που στην περίπτωση του μοντέλου BGK, με την διαφορά ότι οι αλγεβρικές πράξεις είναι αρκετά πιο πολύπλοκες. Έτσι κρίθηκε σκόπιμο να μην παρουσιαστεί. Αξίζει μόνο να σημειωθεί είναι ότι και πάλι η φασματική ακτίνα του σχήματος H_1 είναι σημαντικά μικρότερη αυτής της απλής DVM και αντίστοιχη του ανάλογου σχήματος με το μοντέλο BGK. Πάντως, γενικά η χρήση του μοντέλου S απαιτεί περίπου διπλάσιο χρόνο για την επίλυση κάποιου προβλήματος σε σχέση με το BGK μιας και λύνεται διπλάσιος αριθμός εξισώσεων.

4.3.3 Διδιαστάτη εξίσωση μοντέλου BGK: Διατύπωση σχήματος επιτάχυνσης και ανάλυση ευστάθειας

Η διατύπωση του σχήματος επιτάχυνσης σε δύο διαστάσεις είναι λίγο πιο σύνθετη και αυτό διότι απαιτούνται περισσότερες εξισώσεις. Ξεκινώντας, το πρώτο βήμα είναι ο ορισμός των ροπών που στην περίπτωση των δύο διαστάσεων είναι:

$$\phi_{mn}(y, z) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} H_m(c_y) H_n(c_z) \psi(y, z, c_y, c_z) e^{-c_y^2 - c_z^2} dc_y dc_z \quad (4.100)$$

Οι συνθετικές εξισώσεις αυτή την φορά προκύπτουν αν πολλαπλασιαστεί η εξίσωση μεταφοράς με $\frac{1}{\pi} H_m(c_y) H_n(c_z) e^{-c_y^2 - c_z^2}$ και στη συνέχεια η εξίσωση ολοκληρωθεί ως προς c_y και c_z . Αν $m = n = 0$ τότε

$$\frac{\partial \phi_{10}(y, z)}{\partial y} + \frac{\partial \phi_{01}(y, z)}{\partial z} = X_p. \quad (4.101)$$

ενώ για $m = 1$ και $n = 0$

$$\frac{\partial \phi_{00}(y, z)}{\partial y} + \delta \phi_{10}(y, z) = -\frac{1}{2} \frac{\partial \phi_{20}(y, z)}{\partial y} - \frac{1}{2} \frac{\partial \phi_{11}(y, z)}{\partial z} \quad (4.102)$$

και αντίστοιχα για $m = 0$ και $n = 1$

$$\frac{\partial \phi_{00}(y, z)}{\partial z} + \delta \phi_{01}(y, z) = -\frac{1}{2} \frac{\partial \phi_{02}(y, z)}{\partial z} - \frac{1}{2} \frac{\partial \phi_{11}(y, z)}{\partial y}. \quad (4.103)$$

Με τις εξισώσεις αυτές μπορεί ήδη να διαμορφωθεί το σχήμα επιτάχυνσης H_1 . Οι ροπές οι οποίες δεν επιταχύνονται και υπολογίζονται απ' ευθείας από την συνάρτηση κατανομής είναι οι ϕ_{20} , ϕ_{02} και ϕ_{11} ενώ οι υπόλοιπες υπολογίζονται από τις εξισώσεις ροπών. Η επαναληπτική διαδικασία που ακολουθείται είναι όμοια με αυτή που παρουσιάστηκε στη μονοδιάστατη περίπτωση. Για ανώτερα σχήματα δημιουργούνται οι κατάλληλες εξισώσεις ροπών και επιταχύνονται πάντα όλες οι ροπές, πλην αυτών της ανώτερης κάθε φορά τάξεως.

Η ανάλυση ευστάθειας ακολουθεί πάλι την μεθοδολογία Fourier. Οι εξισώσεις (4.101-4.103) αφαιρούνται για δύο διαδοχικές επαναλήψεις και στις εξισώσεις που προκύπτουν αντικαθίστανται οι σχέσεις

$$\Phi_{00}(y)^{(l+1)} = \omega \Phi_{00}(y)^{(l)} = \omega^{l+1} a_{00} e^{i\lambda y} \quad (4.104)$$

$$\Phi_{10}(y)^{(l+1)} = \omega \Phi_{10}(y)^{(l)} = \omega^{l+1} a_{10} e^{\lambda y} \quad (4.105)$$

και

$$\Phi_{01}(y)^{(l+1)} = \omega \Phi_{01}(y)^{(l)} = \omega^{l+1} a_{01} e^{\lambda y} \quad (4.106)$$

όπου

$$\Phi_{mn}(y)^{(l+1)} = \phi_{mn}(y)^{(l+1)} - \phi_{mn}(y)^{(l)}. \quad (4.107)$$

Οι σχέσεις που εξάγονται αν τα αποτελέσματα συνδυαστούν με τις (4.52) και (4.54) είναι

$$\omega(i\lambda\theta_y a_{10} + i\lambda\theta_z a_{01}) = 0 \quad (4.108)$$

$$\omega(i\lambda\theta_y a_{00} + a_{10}) = -\frac{1}{2}i(\lambda\theta_y G_{20} + \lambda\theta_z G_{11}) \quad (4.109)$$

$$\omega(i\lambda\theta_z a_{00} + a_{01}) = -\frac{1}{2}i(\lambda\theta_z G_{02} + \lambda\theta_y G_{11}) \quad (4.110)$$

με

$$G_{mn}(y, z) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} H_m(c_y) H_n(c_z) s(c_y, c_z) e^{-c_y^2 - c_z^2} dc_y dc_z. \quad (4.111)$$

Στην γενική περίπτωση αντιστοιχούν τρεις ιδιοτιμές για κάθε τιμή του λ . Εισάγοντας στην σχέση (4.54) για την ιδιοσυνάρτηση $s(c_y, c_z)$ στις (4.108)-(4.110) και μετά από ορισμένες πράξεις προκύπτει ότι $\omega_1 = \omega_2 = 0$ και η μόνη ιδιοτιμή που απομένει είναι

$$\omega_3 = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} [1 - 2(c_y\theta_y + c_z\theta_z)^2] s(c_y, c_z) e^{-c_y^2 - c_z^2} dc_y dc_z. \quad (4.112)$$

Το ολοκλήρωμα (4.112) μπορεί να υπολογιστεί αναλυτικά. Το αποτέλεσμα είναι ίδιο με αυτό του σχήματος H_1 για τη μονοδιάστατη εξίσωση με μοντέλο συγκρούσεων το BGK (4.81). Αντίστοιχα είναι τα συμπεράσματα που προκύπτουν και από τον προσδιορισμό των ακτινών σύγκλισης σχημάτων ανώτερης τάξης. Το γεγονός αυτό επιβεβαιώνει, τουλάχιστον θεωρητικά, ότι τα αποτελέσματα από την εφαρμογή των σχημάτων επιτάχυνσης σε μια ή περισσότερες διαστάσεις είναι παρόμοια.

4.4 Διατύπωση σχημάτων επιτάχυνσης και ανάλυση ευστάθειας της πλήρους μονοδιάστατης εξίσωσης BGK

Όπως αναφέρθηκε στην παράγραφο 4.2.1, η μέχρι τώρα ανάλυση βασίστηκε στην υπόθεση ότι οι αποκλίσεις στην πυκνότητα και τη θερμοκρασία ήταν μηδενικές. Κάτι τέτοιο όμως μπορεί να ισχύσει προσεγγιστικά και σε ορισμένες μόνο ροές. Στην γενική περίπτωση, δεν μπορεί να θεωρηθεί κάτι τέτοιο ως δεδομένο και είναι απαραίτητη η επίλυση του πλήρους προβλήματος.

Στην παρούσα παράγραφο θα αναπτυχθεί η μεθοδολογία επιτάχυνσης των προηγουμένων παραγράφων εφαρμοσμένη στην πλήρη μονοδιάστατη γραμμικοποιημένη εξίσωση Boltzmann με μοντέλο συγκρούσεων το BGK. Ταυτόχρονα θα γίνει η ανάλυση ευστάθειας, τόσο του σχήματος DVM όσο και των προκυπτόντων σχημάτων επιτάχυνσης.

4.4.1 Διατύπωση της πλήρους μονοδιάστατης εξίσωσης και ανάλυση ευστάθειας

Η γραμμικοποιημένη εξίσωση Boltzmann από την οποία και ξεκινά η μαθηματική επεξεργασία είναι η

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, \mathbf{c}_x)}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial h(\mathbf{x}, \mathbf{c}_x)}{\partial \mathbf{x}} = \delta \left[\varrho(\mathbf{x}) + 2 \mathbf{c} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) + \tau(\mathbf{x}) \left(c^2 - \frac{3}{2} \right) - h(\mathbf{x}, \mathbf{c}_x) \right]. \quad (3.41)$$

Θεωρώντας ότι οι όποιες μεταβολές τόσο των μακροσκοπικών μεγεθών όσο και της συνάρτησης κατανομής γίνονται αποκλειστικά στην διεύθυνση x ενώ δεν υπάρχει και χρονική εξάρτηση, τότε αν η εξίσωση πολλαπλασιαστεί με την ποσότητα $\frac{1}{\pi} e^{-c_x^2 - c_z^2}$ και κατόπιν ολοκληρωθεί ως προς c_y και c_z προκύπτει:

$$c_x \frac{\partial \phi(x, c_x)}{\partial x} + \delta \phi(x, c_x) = \delta \left[\varrho(x) + 2 c_x u_x(x) + \tau(x) \left(c_x^2 - \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (4.113)$$

Εφαρμόζοντας την ίδια διαδικασία αλλά αυτή τη φορά πολλαπλασιάζοντας με $\frac{1}{\pi} (c_y^2 + c_z^2 - 1) e^{-c_y^2 - c_z^2}$, η νέα εξίσωση είναι:

$$c_x \frac{\partial \psi(x, c_x)}{\partial x} + \delta \psi(x, c_x) = \delta \tau(x). \quad (4.114)$$

Στην συνέχεια, ορίζονται οι ερμιτιανές ροπές των ϕ και ψ ως

$$\Phi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x, c_x) e^{-c_x^2} H_k(c_x) dc_x \quad (4.115)$$

και

$$\Psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, c_x) e^{-c_x^2} H_k(c_x) dc_x \quad (4.116)$$

όπου προφανώς $H_k(c_x)$ είναι το πολυώνυμο Hermite τάξης k ως προς c_x . Οι μακροσκοπικές ποσότητες μπορούν πλέον να εκφραστούν ως

$$\varrho(x) = \Phi_0(x), \quad u_x(x) = \frac{\Phi_1(x)}{2} \quad \text{και} \quad \tau(x) = \frac{2}{3} \left(\Psi_0(x) + \frac{\Phi_2(x)}{4} \right). \quad (4.117)$$

Από τις εξισώσεις (4.113) και (4.114) επομένως και εφόσον είναι γνωστές οι τιμές των ροπών υπολογίζονται οι τιμές των συναρτήσεων $\phi(x, c_x)$ και $\psi(x, c_x)$ από τις εξισώσεις

$$c_x \frac{\partial \phi^{(l+1/2)}(x, c_x)}{\partial x} + \delta \phi^{(l+1/2)}(x, c_x) = \delta \left[\Phi_0^{(l)}(x) + c_x \Phi_1^{(l)}(x) + \frac{2}{3} \left(c_x^2 - \frac{1}{2} \right) \left(\Psi_0^{(l)}(x) + \frac{\Phi_2^{(l)}(x)}{4} \right) \right] \quad (4.118)$$

και

$$c_x \frac{\partial \psi^{(l+1/2)}(x, c_x)}{\partial x} + \delta \psi^{(l+1/2)}(x, c_x) = \delta \frac{2}{3} \left(\Psi_0^{(l)}(x) + \frac{\Phi_2^{(l)}(x)}{4} \right). \quad (4.119)$$

όπου l είναι ο δείκτης επανάληψης. Στην επαναληπτική διαδικασία που ακολουθείται για την αριθμητική επίλυση των εξισώσεων, οι τιμές που προκύπτουν αντικαθιστώνται στις κατάλληλες εξισώσεις ορισμού των ροών (4.115 και 4.116) ώστε να υπολογιστούν τα δεδομένα εισόδου για τη νέα επίλυση των εξισώσεων (4.118) και (4.119).

Περνώντας τώρα στην ανάλυση ευστάθειας και ακολουθώντας την διαδικασία που εφαρμόστηκε και στις προηγούμενες παραγράφους, η πρώτη κίνηση είναι να οριστούν οι ποσότητες

$$Q(x, c_x)^{(l+1/2)} = \phi(x, c_x)^{(l+1/2)} - \phi(x, c_x)^{(l-1/2)} = \omega^l g(c_x) e^{i\lambda x} \quad (4.120)$$

$$\Theta(x, c_x)^{(l+1/2)} = \psi(x, c_x)^{(l+1/2)} - \psi(x, c_x)^{(l-1/2)} = \omega^l \zeta(c_x) e^{i\lambda x} \quad (4.121)$$

$$W_k(x)^{(l+1)} = \Phi_k(x)^{(l+1)} - \Phi_k(x)^{(l)} = \omega^{l+1} w_k e^{i\lambda x} \quad (4.122)$$

$$Z_k(x)^{(l+1)} = \Psi_k(x)^{(l+1)} - \Psi_k(x)^{(l)} = \omega^{l+1} z_k e^{i\lambda x} \quad (4.123)$$

Αφαιρώντας τώρα για δύο διαδοχικές επαναλήψεις τις εξισώσεις (4.118) και (4.119) και αντικαθιστώντας τις εκφράσεις (4.120-4.123) εξάγονται οι σχέσεις:

$$g(c_x) = \frac{w_0 + c_x w_1 + \frac{1}{6}(c_x^2 - \frac{1}{2})w_2 + \frac{2}{3}(c_x^2 - \frac{1}{2})z_0}{1 + i\frac{\lambda}{\delta}c_x} \quad (4.124)$$

και

$$\zeta(c_x) = \frac{\frac{1}{6}w_2 + \frac{2}{3}z_0}{1 + i\frac{\lambda}{\delta}c_x}. \quad (4.125)$$

Αντικαθιστώντας τις εκφράσεις (4.124) και (4.125) στις εξισώσεις (4.122) και (4.123) για $W_0(x)$, $W_1(x)$, $W_2(x)$ και $Z_0(x)$ προκύπτει το σύστημα

$$\omega \underline{\alpha} = \underline{A} \cdot \underline{\alpha} \quad (4.126)$$

με

$$\underline{\alpha} = \begin{Bmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \\ z_0 \end{Bmatrix}, \quad (4.127)$$

και

$$\underline{A} = \begin{Bmatrix} \Lambda_0 & -i\frac{\lambda}{\delta}\Lambda_2 & \frac{1}{6}(\Lambda_2 - \frac{\Lambda_0}{2}) & \frac{2}{3}(\Lambda_2 - \frac{\Lambda_0}{2}) \\ -2i\frac{\lambda}{\delta}\Lambda_2 & 2\Lambda_2 & -\frac{1}{3}i\frac{\lambda}{\delta}(\Lambda_4 - \frac{\Lambda_2}{2}) & -\frac{4}{3}i\frac{\lambda}{\delta}(\Lambda_4 - \frac{\Lambda_2}{2}) \\ 4\Lambda_2 - 2\Lambda_0 & -i\frac{\lambda}{\delta}(4\Lambda_4 - 2\Lambda_2) & \frac{2}{3}\Lambda_4 - \frac{2}{3}\Lambda_2 + \frac{\Lambda_0}{6} & \frac{8}{3}\Lambda_4 - \frac{8}{3}\Lambda_2 + \frac{2}{3}\Lambda_0 \\ 0 & 0 & \frac{\Lambda_0}{6} & \frac{2}{3}\Lambda_0 \end{Bmatrix} \quad (4.128)$$

όπου

$$\Lambda_k\left(\frac{\lambda}{\delta}\right) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mu^k}{1 + (\frac{\lambda}{\delta})^2} e^{-\mu^2} d\mu. \quad (4.129)$$

Το σύστημα (4.126) αποτελεί ένα πρόβλημα ιδιοτιμών η λύση του οποίου δίνει την φασματική ακτίνα του σχήματος που είναι ίση με 1. Η τιμή αυτή επιβεβαιώνεται και αριθμητικά με την αργή σύγκλιση των αλγορίθμων ιδίως για μεγάλα δ .

4.4.2 Διαμόρφωση εξισώσεων ροπών

Προκειμένου να καταστεί δυνατή η διατύπωση σχημάτων επιτάχυνσης, είναι απαραίτητη πρώτα η διαμόρφωση των εξισώσεων ροπών, οι οποίες μπορούν να προκύψουν ως Ερμιτιανές ροπές των εξισώσεων (4.118) και (4.119) ως προς c_x . Έτσι, αν πολλαπλασιαστούν με $H_0(c_x)e^{-c_x^2}$ και κατόπιν ολοκληρωθούν ως προς c_x προκύπτουν οι δύο εξισώσεις ροπών μηδενικής τάξης:

$$\frac{\partial \Phi_1(x)}{\partial x} = 0 \quad (4.130)$$

και

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \Psi_1(x)}{\partial x} + \frac{1}{3} \delta \Psi_0(x) - \frac{1}{6} \delta \Phi_0(x) = 0 \quad (4.131)$$

αντίστοιχα. Με παρόμοιο τρόπο μπορούν να εξαχθούν και οι εξισώσεις ροπών ανώτερης τάξης. Έτσι αν η ποσότητα με την οποία πολλαπλασιάζεται η εξίσωση είναι $H_1(c_x)e^{-c_x^2}$, τότε οι εκφράσεις που προκύπτουν για τις εξισώσεις ροπών πρώτης τάξης είναι

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \Phi_2(x)}{\partial x} + \frac{\partial \Phi_0(x)}{\partial x} = 0 \quad (4.132)$$

και

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \Psi_2(x)}{\partial x} + \frac{\partial \Psi_0(x)}{\partial x} + \delta \Psi_1(x) = 0 \quad (4.133)$$

Συνεχίζοντας με την ποσότητα $H_2(c_x)e^{-c_x^2}$ προκύπτει

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \Phi_3(x)}{\partial x} + 2 \frac{\partial \Phi_1(x)}{\partial x} + \frac{2}{3} \delta \Phi_2(x) - \frac{4}{3} \delta \Psi_0(x) = 0 \quad (4.134)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \Psi_3(x)}{\partial x} + 2 \frac{\partial \Psi_1(x)}{\partial x} + \delta \Psi_2(x) = 0 \quad (4.135)$$

Από το σημείο αυτό και πέρα, οι εξισώσεις αποκτούν συστηματική μορφή. Έτσι για την εξαγωγή των εξισώσεων ροπών τάξης κ , η ποσότητα με την οποία πολλαπλασιάζονται οι (4.118) και (4.119) είναι $H_\kappa(c_x)e^{-c_x^2}$, $\kappa \geq 3$ και οι εκφράσεις που προκύπτουν είναι

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \Phi_{\kappa+1}(x)}{\partial x} + \kappa \frac{\partial \Phi_{\kappa-1}(x)}{\partial x} + \delta \Phi_\kappa(x) = 0 \quad (4.136)$$

και

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \Psi_{\kappa+1}(x)}{\partial x} + \kappa \frac{\partial \Psi_{\kappa-1}(x)}{\partial x} + \delta \Psi_\kappa(x) = 0. \quad (4.137)$$

Με τον τρόπο αυτό είναι πλέον διατυπωμένες όλες οι απαραίτητες εξισώσεις με τη χρήση των οποίων μπορούν να σχηματιστούν τα διάφορα σχήματα επιτάχυνσης.

4.4.3 Διατύπωση σχημάτων επιτάχυνσης

Έχοντας όλες τις εξισώσεις ροπών, μπορούν να σχηματιστούν όλα τα σχήματα επιτάχυνσης σύμφωνα με τη διαδικασία που περιγράφηκε στη παράγραφο 4.3.1. Το κάθε σχήμα επιτάχυνσης H_k συνίσταται στην επίλυση του γραμμικού συστήματος εξισώσεων που αποτελείται από τις εξισώσεις ροπών μέχρι τάξης k . Το σύστημα όμως αυτό, αποτελείται από $2k$ εξισώσεις με $2(k+1)$ αγνώστους και προφανώς απαιτούνται δύο επιπλέον σχέσεις για το κλείσιμό του. Οι δύο αυτές σχέσεις επιλέγεται να είναι οι εξισώσεις ορισμού (4.115-4.116) των δύο μεγαλύτερων τη τάξη ροπών, δηλαδή των $\Phi_{k+1}(x)$ και $\Psi_{k+1}(x)$. Βέβαια, για να γίνει αυτό πρέπει να είναι γνωστή η κατανομή των συναρτήσεων ϕ και ψ , κάτι που επιτυγχάνεται με την επίλυση των εξισώσεων μεταφοράς. Το μόνο σχήμα που διαφοροποιείται κάπως είναι το DSA (ή το σχήμα μηδενικής τάξης), στο οποίο για το κλείσιμο του συστήματος απαιτείται η χρησιμοποίηση των σχέσεων ορισμού για τον προσδιορισμό τεσσάρων ροπών και αυτό διότι ο αριθμός των εξισώσεων ροπών που χρησιμοποιούνται είναι μόλις δύο. Γενικά πάντως για όλα τα σχήματα επιτάχυνσης, το επαναληπτικό σχήμα αποτελείται από τα βήματα που περιγράφηκαν στη Παράγραφο 4.3.1.

Το απλούστερο σχήμα είναι προφανώς το DSA. Ουσιαστικά επιλύεται ένα σύστημα δύο γραμμικών εξισώσεων ροπών (πρώτης τάξης) με τη βοήθεια των τεσσάρων εξισώσεων ορισμού για τις ποσότητες $\Phi_2(x)$, $\Psi_2(x)$, $\Phi_1(x)$ και $\Psi_1(x)$. Το επαναληπτικό σχήμα πλέον αποτελείται από τις εξισώσεις μεταφοράς (4.118-4.119) καθώς και τις σχέσεις

$$\Phi_2^{(l+1)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi^{(l+1/2)}(x, c_x) e^{-c_x^2(4c_x^2 - 2)} dc_x \quad (4.138)$$

$$\Psi_2^{(l+1)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^{(l+1/2)}(x, c_x) e^{-c_x^2(4c_x^2 - 2)} dc_x \quad (4.139)$$

$$\Phi_1^{(l+1)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi^{(l+1/2)}(x, c_x) e^{-c_x^2} 2c_x dc_x \quad (4.140)$$

$$\Psi_1^{(l+1)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^{(l+1/2)}(x, c_x) e^{-c_x^2} 2c_x dc_x \quad (4.141)$$

$$\frac{\partial \Phi_0^{(l+1)}(x)}{\partial x} = -\frac{1}{2} \frac{\partial \Phi_2^{(l+1/2)}(x)}{\partial x} \quad (4.142)$$

και

$$\frac{\partial \Psi_0^{(l+1)}(x)}{\partial x} = -\frac{1}{2} \frac{\partial \Psi_2^{(l+1/2)}(x)}{\partial x} - \delta \Psi_1^{(l+1/2)}(x). \quad (4.143)$$

Περιγραφικά θα μπορούσε να ειπωθεί ότι με βάση τις τιμές των ροπών στην επανάληψη l προσδιορίζονται οι τιμές των δύο συναρτήσεων κατανομής και από αυτές μέσω των εξισώσεων ορισμού οι ποσότητες $\Phi_2(x)$, $\Psi_2(x)$, $\Phi_1(x)$ και $\Psi_1(x)$. Πλέον, είναι εφικτή η επίλυση των δύο εξισώσεων ροπών και με τον τρόπο αυτό εξάγονται οι τιμές όλων των μακροσκοπικών ποσοτήτων στην επανάληψη $l+1$.

Το επόμενο σχήμα που μπορεί να διαμορφωθεί είναι το H_1 , στο οποίο χρησιμοποιούνται οι σχέσεις (4.130-4.131) ώστε να επιταχυνθούν και οι ροπές πρώτης τάξης $\Psi_1(x)$ και

$\Phi_1(x)$. Το επαναληπτικό σχήμα πλέον συνίσταται από τις εξισώσεις (4.118-4.119), τις εξισώσεις ορισμού

$$\Phi_2^{(l+1)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi^{(l+1/2)}(x, c_x) e^{-c_x^2} (4c_x^2 - 2) dc_x \quad (4.144)$$

$$\Psi_2^{(l+1)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^{(l+1/2)}(x, c_x) e^{-c_x^2} (4c_x^2 - 2) dc_x \quad (4.145)$$

καθώς και το γραμμικό σύστημα

$$\frac{\partial \Phi_1^{(l+1)}(x)}{\partial x} = 0 \quad (4.146)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \Psi_1^{(l+1)}(x)}{\partial x} + \frac{1}{3} \delta \Psi_0^{(l+1)}(x) - \frac{1}{6} \delta \Phi_0^{(l+1)}(x) = 0 \quad (4.147)$$

$$\frac{\partial \Phi_0^{(l+1)}(x)}{\partial x} = -\frac{1}{2} \frac{\partial \Phi_2^{(l+1/2)}(x)}{\partial x} \quad (4.148)$$

$$\frac{\partial \Psi_0^{(l+1)}(x)}{\partial x} + \delta \Psi_1^{(l+1)}(x) = -\frac{1}{2} \frac{\partial \Psi_2^{(l+1/2)}(x)}{\partial x}. \quad (4.149)$$

Συνεχίζοντας, μπορεί να διατυπωθεί το σχήμα H_2 το οποίο αποτελείται φυσικά από τις δύο εξισώσεις μεταφοράς, τις εξισώσεις ορισμού για τις ποσότητες $\Phi_3(x)$ και $\Psi_3(x)$

$$\Phi_3^{(l+1)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi^{(l+1/2)}(x, c_x) e^{-c_x^2} (8c_x^3 - 12c_x) dc_x \quad (4.150)$$

$$\Psi_3^{(l+1)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^{(l+1/2)}(x, c_x) e^{-c_x^2} (8c_x^3 - 12c_x) dc_x \quad (4.151)$$

οι οποίες χρησιμοποιούνται για την επίλυση του γραμμικού συστήματος των εξισώσεων ροπών που αποτελείται από τις εξισώσεις μηδενικής, πρώτης και δεύτερης τάξης, δηλαδή

$$\frac{\partial \Phi_1^{(l+1)}(x)}{\partial x} = 0 \quad (4.152)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \Psi_1^{(l+1)}(x)}{\partial x} + \frac{1}{3} \delta \Psi_0^{(l+1)}(x) - \frac{1}{6} \delta \Phi_0^{(l+1)}(x) = 0 \quad (4.153)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \Phi_2^{(l+1)}(x)}{\partial x} + \frac{\partial \Phi_0^{(l+1)}(x)}{\partial x} = 0 \quad (4.154)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \Psi_2^{(l+1)}(x)}{\partial x} + \frac{\partial \Psi_0^{(l+1)}(x)}{\partial x} + \delta \Psi_1^{(l+1)}(x) = 0 \quad (4.155)$$

$$2 \frac{\partial \Phi_1^{(l+1)}(x)}{\partial x} + \delta \frac{2}{3} \Psi_2^{(l+1)}(x) - \delta \frac{4}{3} \Psi_0^{(l+1)}(x) = -\frac{1}{2} \frac{\partial \Phi_3^{(l+1/2)}(x)}{\partial x} \quad (4.156)$$

και

$$2 \frac{\partial \Psi_1^{(l+1)}(x)}{\partial x} + \delta \Psi_2^{(l+1)}(x) = -\frac{1}{2} \frac{\partial \Psi_3^{(l+1/2)}(x)}{\partial x} \quad (4.157)$$

Προχωρώντας στο σχήμα H_3 και ακολουθώντας την ίδια διαδικασία, αυτό σχηματίζεται από τις εξισώσεις μεταφοράς, τους ορισμούς των $\Phi_4(x)$ και $\Psi_4(x)$

$$\Phi_4^{(l+1)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi^{(l+1/2)}(x, c_x) e^{-c_x^2} (16c_x^4 - 48c_x^2 + 12) dc_x \quad (4.158)$$

$$\Psi_4^{(l+1)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^{(l+1/2)}(x, c_x) e^{-c_x^2} (16c_x^4 - 48c_x^2 + 12) dc_x \quad (4.159)$$

και το γραμμικό σύστημα

$$\frac{\partial \Phi_1^{(l+1)}(x)}{\partial x} = 0 \quad (4.160)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \Psi_1^{(l+1)}(x)}{\partial x} + \frac{1}{3} \delta \Psi_0^{(l+1)}(x) - \frac{1}{6} \delta \Phi_0^{(l+1)}(x) = 0 \quad (4.161)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \Phi_2^{(l+1)}(x)}{\partial x} + \frac{\partial \Phi_0^{(l+1)}(x)}{\partial x} = 0 \quad (4.162)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \Psi_2^{(l+1)}(x)}{\partial x} + \frac{\partial \Psi_0^{(l+1)}(x)}{\partial x} + \delta \Psi_1^{(l+1)}(x) = 0 \quad (4.163)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \Phi_3^{(l+1)}(x)}{\partial x} + 2 \frac{\partial \Phi_1^{(l+1)}(x)}{\partial x} + \delta \frac{2}{3} \Psi_2^{(l+1)}(x) - \delta \frac{4}{3} \Psi_0^{(l+1)}(x) = 0 \quad (4.164)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \Psi_3^{(l+1)}(x)}{\partial x} + 2 \frac{\partial \Psi_1^{(l+1)}(x)}{\partial x} + \delta \Psi_2^{(l+1)}(x) = 0 \quad (4.165)$$

$$3 \frac{\partial \Phi_2^{(l+1)}(x)}{\partial x} + \delta \Psi_3^{(l+1)}(x) = -\frac{1}{2} \frac{\partial \Phi_4^{(l+1/2)}(x)}{\partial x} \quad (4.166)$$

$$3 \frac{\partial \Psi_2^{(l+1)}(x)}{\partial x} + \delta \Psi_3^{(l+1)}(x) = -\frac{1}{2} \frac{\partial \Psi_4^{(l+1/2)}(x)}{\partial x}. \quad (4.167)$$

Με αντίστοιχο τρόπο δημιουργούνται και τα σχήματα ανώτερης τάξης.

4.4.4 Ανάλυση ευστάθειας σχημάτων επιτάχυνσης

Για την εύρεση της ακτίνας σύγκλισης, όλες οι εμπλεκόμενες κάθε φορά εξισώσεις ροπών αφαιρούνται για δύο διαδοχικά βήματα. Στη συνέχεια, χρησιμοποιούνται οι εξισώσεις (4.120-4.123) για όλες τις ροπές, εκτός αυτής της τάξεως $\kappa + 1$ για την οποία χρησιμοποιείται η εξίσωση ορισμού. Έτσι προκύπτει ένα πρόβλημα ιδιοτιμών η λύση του οποίου και πάλι δίνει τη ακτίνα σύγκλισης του κάθε σχήματος, καθώς και τη φασματική ακτίνα.

Στο σχήμα DSA η εφαρμογή μια τέτοιας διαδικασίας οδηγεί σε ένα πρόβλημα της μορφής

$$\omega \underline{\alpha} = \underline{A} \cdot \underline{\alpha} \quad (4.126)$$

όπου το άνωσμα $\underline{\alpha}$ και το μητρώο \underline{A} δίνονται από τις σχέσεις

$$\underline{\alpha} = \begin{pmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \\ z_0 \\ z_1 \\ z_2 \end{pmatrix}, \quad (4.168)$$

$$\underline{A} = \begin{pmatrix} \Lambda_0 - 2\Lambda_2 & i\frac{\lambda}{\delta}(2\Lambda_4 - \Lambda_2) & \frac{\Lambda_2}{3} - \frac{\Lambda_4}{3} - \frac{\Lambda_0}{12} & \frac{4\Lambda_2}{3} - \frac{4\Lambda_4}{3} - \frac{\Lambda_0}{3} & 0 & 0 \\ -2i\frac{\lambda}{\delta}\Lambda_2 & 2\Lambda_2 & -i\frac{\lambda}{\delta}\left(\frac{\Lambda_4}{3} - \frac{\Lambda_2}{6}\right) & \frac{4}{3}i\frac{\lambda}{\delta}\left(\frac{\Lambda_2}{2} - \Lambda_4\right) & 0 & 0 \\ 4\Lambda_2 - 2\Lambda_0 & i\frac{\lambda}{\delta}(2\Lambda_2 - 4\Lambda_4) & \frac{2\Lambda_4}{3} - \frac{2\Lambda_2}{3} + \frac{\Lambda_0}{6} & \frac{8\Lambda_4}{3} - \frac{8\Lambda_2}{3} + \frac{2\Lambda_0}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\Lambda_0}{6} & \frac{2}{3}\Lambda_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\frac{\lambda}{\delta}\frac{\Lambda_2}{3} & -i\frac{\lambda}{\delta}\frac{4}{3}\Lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{3}\Lambda_2 - \frac{1}{3}\Lambda_0 & \frac{8}{3}\Lambda_2 - \frac{4}{3}\Lambda_0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.169)$$

και αποτελεί προφανώς πρόβλημα ιδιοτιμών η λύση του οποίου δίνει τη φασματική ακτίνα.

Στα σχήματα ανώτερης τάξης υπάρχει μια μικρή διαφοροποίηση η οποία έγκειται στο γεγονός ότι πλέον το πρόβλημα που διαμορφώνεται είναι της μορφής

$$\omega \underline{D} \cdot \underline{\alpha} = \underline{A} \cdot \underline{\alpha} \quad (4.170)$$

Έτσι, στη περίπτωση του σχήματος H_1 , το άνωσμα $\underline{\alpha}$ δίνεται από τη σχέση (4.150) ενώ τα μητρώα \underline{D} και \underline{A} από τις σχέσεις

$$\underline{D} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i\frac{\lambda}{\delta} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{2}i\frac{\lambda}{\delta} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.171)$$

$$\underline{A} = \left\{ \begin{array}{cccccc} \Lambda_0 - 2\Lambda_2 & i\frac{\lambda}{\delta}(2\Lambda_4 - \Lambda_2) & \frac{\Lambda_2}{3} - \frac{\Lambda_4}{3} - \frac{\Lambda_0}{12} & \frac{4\Lambda_2}{3} - \frac{4\Lambda_4}{3} - \frac{\Lambda_0}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 4\Lambda_2 - 2\Lambda_0 & i\frac{\lambda}{\delta}(2\Lambda_2 - 4\Lambda_4) & \frac{2\Lambda_4}{3} - \frac{2\Lambda_2}{3} + \frac{\Lambda_0}{6} & \frac{8\Lambda_4}{3} - \frac{8\Lambda_2}{3} + \frac{2\Lambda_0}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\frac{\lambda}{\delta}\left(\frac{\Lambda_0}{6} - \frac{\Lambda_2}{3}\right) & i\frac{\lambda}{\delta}\left(\frac{2\Lambda_0}{3} - \frac{4\Lambda_2}{3}\right) & 0 & 0 \\ \frac{2\Lambda_2}{3} - \frac{\Lambda_0}{3} & i\frac{\lambda}{\delta}\left(\frac{\Lambda_2}{3} - \frac{2\Lambda_4}{3}\right) & \frac{\Lambda_4}{9} - \frac{\Lambda_2}{9} + \frac{\Lambda_0}{36} & \frac{4\Lambda_4}{9} - \frac{4\Lambda_2}{9} + \frac{\Lambda_0}{9} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{3}\Lambda_2 - \frac{1}{3}\Lambda_0 & \frac{8}{3}\Lambda_2 - \frac{4}{3}\Lambda_0 & 0 & 0 \end{array} \right\} \quad (4.172)$$

Στο σχήμα H_2 η ανάλυση ευστάθειας οδηγεί σε ένα πρόβλημα ιδιοτιμών της μορφής (4.170) το άνυσμα $\underline{\alpha}$ δίνεται και πάλι από τη σχέση (4.150) ενώ τα μητρώα \underline{D} και \underline{A} παίρνουν τη μορφή

$$\underline{D} = \left\{ \begin{array}{cccccc} 1 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i\frac{2\lambda}{\delta} & \frac{2}{3} & -\frac{4}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i\frac{\lambda}{\delta} & 1 & i\frac{\lambda}{2\delta} \\ 0 & 0 & -\frac{1}{6} & \frac{1}{3} & i\frac{\lambda}{2\delta} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & i\frac{2\lambda}{\delta} & 1 \end{array} \right\} \quad (4.173)$$

$$\underline{A}^T = \left\{ \begin{array}{cccccc} 0 & 0 & -\frac{1}{2}\left(\frac{\lambda}{\delta}\right)^2(8\Lambda_4 - 12\Lambda_2) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\frac{\lambda}{2\delta}(8\Lambda_4 - 12\Lambda_2) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2}\left(\frac{\lambda}{\delta}\right)^2\left(\frac{4\Lambda_6}{3} - \frac{8\Lambda_4}{3} + \Lambda_2\right) & 0 & 0 & -\frac{1}{2}\left(\frac{\lambda}{\delta}\right)^2\left(\frac{4\Lambda_4}{3} - 2\Lambda_2\right) \\ 0 & 0 & 2\left(\frac{\lambda}{\delta}\right)^2\left(\frac{4\Lambda_6}{3} - \frac{8\Lambda_4}{3} + \Lambda_2\right) & 0 & 0 & -2\left(\frac{\lambda}{\delta}\right)^2\left(\frac{4\Lambda_4}{3} - 2\Lambda_2\right) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right\} \quad (4.174)$$

Στα επόμενα σχήματα, ακολουθείται η ίδια διαδικασία. Κάθε φορά η διάσταση των πινάκων μεγαλώνει κατά δύο μιας και προστίθενται δύο νέες εξισώσεις στο σύστημα. Έτσι,

για παράδειγμα, στο σχήμα H_3 το άνωσμα $\underline{\alpha}$ είναι

$$\underline{\alpha} = \begin{pmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ z_0 \\ z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix}, \quad (4.175)$$

ενώ τα μητρώα $\underline{\underline{D}}$ και $\underline{\underline{A}}$ παίρνουν τη μορφή

$$\underline{\underline{D}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i\frac{2\lambda}{\delta} & \frac{2}{3} & i\frac{\lambda}{2\delta} & -\frac{4}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\frac{3\lambda}{\delta} & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & i\frac{\lambda}{\delta} & 1 & i\frac{\lambda}{2\delta} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{6} & 0 & \frac{1}{3} & i\frac{\lambda}{2\delta} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i\frac{2\lambda}{\delta} & 1 & i\frac{\lambda}{2\delta} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i\frac{3\lambda}{\delta} & 1 \end{pmatrix} \quad (4.176)$$

$$\underline{\underline{A}}^T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i\frac{\lambda}{2\delta}(16\Lambda_4 - 48\Lambda_2 + 12\Lambda_0) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2}\left(\frac{\lambda}{\delta}\right)^2(16\Lambda_6 - 48\Lambda_4 + 12\Lambda_2) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i\frac{\lambda}{2\delta}\left(\frac{8\Lambda_6}{3} - \frac{28\Lambda_4}{3} + 6\Lambda_2 - \Lambda_0\right) & 0 & 0 & 0 & -i\frac{\lambda}{2\delta}\left(\frac{8\Lambda_4}{3} - 8\Lambda_2 + 2\Lambda_0\right) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -i\frac{2\lambda}{\delta}\left(\frac{8\Lambda_4}{3} - 8\Lambda_2 + 2\Lambda_0\right) \\ 0 & 0 & 0 & -i\frac{2\lambda}{\delta}\left(\frac{8\Lambda_6}{3} - \frac{28\Lambda_4}{3} + 6\Lambda_2 - \Lambda_0\right) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.177)$$

Η λύση των προβλημάτων αυτών είναι τριπλή για τα σχήματα DVM και DSA, ενώ από το σχήμα H_1 και πέρα είναι διπλή. Σε κάθε περίπτωση, η μεγαλύτερη από τις λύσεις

(κατ' απόλυτη τιμή) δίνει τη φασματική ακτίνα του κάθε σχήματος. Οι εκφράσεις αυτές μπορούν να βρεθούν αναλυτικά, όμως είναι αρκετά πολύπλοκες και δεν κρίνεται σκόπιμο να παρουσιαστούν.

Τα αποτελέσματα που προέκυψαν για την ακτίνα σύγκλισης παρουσιάζονται στο σχήμα 4.4 για τις μεθόδους επιτάχυνσης περιττής τάξεως και στο σχήμα 4.5 για τα άρτιας τάξεως. Επίσης, στον Πίνακα 4.2 δίνονται οι φασματικές ακτίνες για όλα τα σχήματα επιτάχυνσης μέχρι και το H_7 .

Παρατηρώντας τις φασματικές ακτίνες είναι εμφανές ότι τα σχήματα που θεωρητικά επιφέρουν βελτίωση στη σύγκλιση, είναι τα σχήματα περιττής τάξεως από H_3 και πάνω. Ειδικότερα, το σχήμα H_3 έχει φασματική ακτίνα 0.321 το H_5 έχει 0.245 ενώ τέλος το H_7 έχει 0.202. Με βάση τα αποτελέσματα αυτά, βέλτιστο θα μπορούσε να θεωρηθεί το H_7 μιας και έχει τη μεγαλύτερη βελτίωση ανά επανάληψη. Όμως το υπολογιστικό κόστος ανά επανάληψη είναι αρκετά μεγάλο. Πιο ισορροπημένη επιλογή και με καλύτερο τελικά αποτέλεσμα φαίνεται να είναι αυτή του σχήματος H_3 όπου και σημαντική βελτίωση παρατηρείται ανά επανάληψη, ενώ και η υπολογιστική προσπάθεια σε κάθε βήμα είναι μέτρια. Όσον αφορά τα σχήματα άρτιας τάξεως οδηγούν τη λύση περισσότερο προς την απόκλιση παρά προς τη σύγκλιση. Κάτι τέτοιο παρατηρήθηκε και στις προηγούμενες παραγράφους και είναι αναμενόμενο. Παρόλα αυτά η φασματική ακτίνα βαίνει μειούμενη αυξανόμενης της τάξης του σχήματος. Επομένως είναι πιθανό σε κάποιο σχήμα ανώτερης τάξης η φασματική ακτίνα να λάβει τιμή μικρότερη από τη μονάδα, που σημαίνει ότι το σχήμα θα συγκλίνει. Όμως και αν ακόμα αυτό συμβεί, το υπολογιστικό κόστος ανά επανάληψη θα είναι τεράστιο. Τέλος ένα άλλο σημείο που αξίζει να σημειωθεί είναι η συμπεριφορά των σχημάτων χαμηλής τάξης, δηλαδή τα σχήματα DVM, DSA και H_1 . Και για τα τρία, η φασματική ακτίνα είναι ίση με τη μονάδα. Παρόλα αυτά όμως, η εφαρμογή του σχήματος H_1 αναμένεται να επιφέρει βελτίωση εφόσον όλη η καμπύλη της ακτίνας σύγκλισης βρίσκεται σε χαμηλότερες τιμές από την αντίστοιχη της DVM. Αντίθετα, η μέθοδος DSA αναμένεται να χειροτερέψει τη σύγκλιση, η οποία όμως έστω και δύσκολα αναμένεται να επιτευχθεί. Συνολικά, φαίνεται ότι και στην περίπτωση της πλήρους εξίσωσης, η τεχνική επιτάχυνσης μπορεί να επιφέρει σημαντικές βελτιώσεις εφόσον επιλεγθεί το κατάλληλο σχήμα, αν και με λίγο μεγαλύτερο κόστος από ότι στην περίπτωση προβλημάτων με αποκλίσεις μόνο στην ταχύτητα.

4.5 Εφαρμογή του σχήματος επιτάχυνσης στην επίλυση ροής εντός αγωγού ορθογωνικής διατομής

Όλη αυτή η θεωρητική ανάλυση βέβαια δεν θα είχε καμία αξία αν δεν επιβεβαιώνεται στη πράξη. Στην συνέχεια, παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της εφαρμογής της μεθόδου στην επίλυση μιας ενδεικτικής ροής η οποία επιλέχθηκε να είναι η πλήρως ανεπτυγμένη ροή εντός ενός αγωγού ορθογωνικής διατομής που οφείλεται σε κλίση πίεσης. Αποτελεί μια από τις ελάχιστες ροές σε δύο διαστάσεις που έχουν αναλυθεί επαρκώς και υπάρχουν αξιόπιστα αποτελέσματα [127, 128], ενώ ταυτόχρονα είναι από τις περιπτώσεις όπου η υπολογιστική προσπάθεια που απαιτείται είναι πολύ μεγάλη. Ταυτόχρονα αποτελεί μια

ροή όπου μπορεί να θεωρηθεί ότι οι αποκλίσεις τόσο της πυκνότητας όσο και της θερμοκρασίας είναι μηδενικές. Επιλύθηκε με χρησιμοποίηση τόσο του μοντέλου BGK όσο και του μοντέλου S. Στην πρώτη περίπτωση οι εξισώσεις μεταφοράς που περιγράφουν το πρόβλημα είναι η (4.46) σε συνδυασμό με την (4.47), ενώ αντίστοιχα για το μοντέλο S χρησιμοποιείται το ζεύγος των εξισώσεων (4.56) και (4.57) μαζί με τις (4.60) και (4.61).

Το σχήμα επιτάχυνσης που επιλέχθηκε ήταν το H_1 . Η επιλογή αυτή βασίστηκε στο γεγονός ότι ακόμα και με το H_1 η μείωση στον αριθμό των επαναλήψεων είναι σημαντική ενώ ταυτόχρονα και οι επιλυόμενες εξισώσεις παραμένουν σχετικά απλές. Πολύ εύκολα βέβαια μπορεί να εφαρμοστεί και οποιοδήποτε σχήμα ανώτερης τάξης. Οι εξισώσεις που χρησιμοποιήθηκαν ήταν αυτές που αναπτύχθηκαν στη παράγραφο 4.3.3 για το μοντέλο BGK και οι αντίστοιχες για το μοντέλο S σε συνδυασμό φυσικά και με τις εξισώσεις μεταφοράς.

Η διερεύνηση της αποτελεσματικότητας του προτεινόμενου σχήματος επιτάχυνσης, βασίστηκε στον υπολογισμό μεγεθών όπως η συνολική παροχή μάζας και η αντίστοιχη παροχή θερμότητας, μεγέθη που έχουν μεγάλο ενδιαφέρον σε ρεαλιστικές εφαρμογές. Αντικειμενικός σκοπός βέβαια στη παρούσα φάση είναι ο έλεγχος της αποτελεσματικότητας του σχήματος επιτάχυνσης. Έτσι κρίθηκε σκόπιμο να μην παρουσιαστούν τα αποτελέσματα για τα μακροσκοπικά μεγέθη που υπολογίστηκαν, μιας και αυτά υπάρχουν στην βιβλιογραφία [127, 128] και είναι ταυτόσημα με αυτά που εξήχθησαν από τις προσομοιώσεις, τουλάχιστον σε τέσσερα σημαντικά ψηφία. Παρουσιάζεται μόνο ο απαραίτητος αριθμός επαναλήψεων προκειμένου να επιτευχθεί το καθορισμένο κριτήριο σύγκλισης τόσο με την κλασική DVM όσο και με την εφαρμογή του σχήματος επιτάχυνσης για σημαντικό εύρος των τιμών του αριθμού Knudsen. Ταυτόχρονα γίνεται και η αντίστοιχη σύγκριση μεταξύ των δύο μεθόδων που αφορά τον απαραίτητο υπολογιστικό χρόνο.

Οι εξισώσεις μεταφοράς καθώς και οι συνθετικές εξισώσεις διακριτοποιήθηκαν χωρικά χρησιμοποιώντας το diamond-difference σχήμα [200], ενώ για τις ολοκληρώσεις, και επομένως και για την διακριτοποίηση στον χώρο των ταχυτήτων, εφαρμόστηκε μια τροποποιημένη εκδοχή της ολοκλήρωσης Gauss-Hermite. Σημειώνεται ότι για την εφαρμογή ανάλογων μεθόδων [193, 195, 196], η ταυτόσημη διακριτοποίηση των εξισώσεων μεταφοράς και των συνθετικών εξισώσεων είναι απαραίτητη προκειμένου να αποφευχθούν αστάθειες στην επίλυση με την εφαρμογή των σχημάτων επιτάχυνσης. Η ίδια αρχή εφαρμόζεται και εδώ. Τέλος οι οριακές συνθήκες που χρησιμοποιούνται είναι οι συνθήκες διάχυσης του Maxwell χωρίς ανάκλαση γιατί είναι οι απλούστερες αλλά κυρίως γιατί και στα αποτελέσματα της βιβλιογραφίας με τα οποία συγκρίνονται, έχουν εφαρμοστεί οι ίδιες συνθήκες.

Μια πρώτη σύγκριση των αποτελεσμάτων φαίνεται στο σχήμα 4.6 όπου παρουσιάζεται ο αριθμός των απαραίτητων επαναλήψεων ως προς το ζητούμενο κριτήριο σύγκλισης για τρεις διαφορετικές τιμές του αριθμού Knudsen και μοντέλο για τον όρο των συγκρούσεων το BGK. Όπως γίνεται φανερό, για αριθμούς Knudsen κοντά στη μονάδα, ο αριθμός των επαναλήψεων που απαιτούνται με χρήση της DVM είναι μικρός και η εφαρμογή του σχήματος επιτάχυνσης δεν έχει ιδιαίτερο νόημα. Αντίθετα για αριθμούς Knudsen της τάξης του 10^{-1} , φαίνεται ότι υπάρχει σημαντική διαφορά μιας και η DVM απαιτεί μεγάλο αριθμό επαναλήψεων ενώ ο αντίστοιχος αριθμός επαναλήψεων για το σχήμα H_1 παραμένει

μικρός και περίπου δέκα φορές μικρότερος από αυτόν της DVM. Ακόμα πιο σημαντική είναι η διαφορά όταν επιλύονται ροές με αριθμό Knudsen της τάξης του 10^{-2} . Εκεί η αντίστοιχη βελτίωση που επιτυγχάνεται είναι θεαματική ενώ ο λόγος των απαραίτητων επαναλήψεων προσεγγίζει το 10^3 . Επίσης φαίνεται ότι το σχήμα H_1 επιτυγχάνει ακόμα και πολύ αυστηρά κριτήρια σύγκλισης με ελάχιστη αύξηση του αριθμού των επαναλήψεων, ενώ η αντίστοιχη αύξηση στην DVM είναι σημαντική.

Παρόμοια είναι τα αποτελέσματα που λαμβάνονται και από την εφαρμογή των δύο προσεγγίσεων όταν ως μοντέλο για τον όρο των συγκρούσεων επιλεγεί το S (Σχήμα 4.7). Το γεγονός αυτό δείχνει ότι η αποτελεσματικότητα των σχημάτων επιτάχυνσης δεν επηρεάζεται σε σημαντικό βαθμό από την πολυπλοκότητα των μοντέλων του όρου των συγκρούσεων. Το συμπέρασμα αυτό θα επιβεβαιωθεί και στην συνέχεια όταν ως μοντέλο συγκρούσεων θα χρησιμοποιείται το αρκετά πιο σύνθετο μοντέλο του McCormack.

Στο Σχήμα (4.8) παρουσιάζεται ο απαραίτητος υπολογιστικός χρόνος και πάλι ως συνάρτηση του ζητούμενου κριτηρίου σύγκλισης. Ο αριθμός Knudsen είναι $Kn = 0.01$ ενώ οι συγκρίσεις αφορούν και τα δύο μοντέλα του όρου των συγκρούσεων. Όπως φαίνεται, η μείωση του υπολογιστικού χρόνου είναι αντίστοιχη με αυτή του αριθμού των επαναλήψεων. Αυτό είναι αναμενόμενο μιας και ο επιπλέον χρόνος ανά επανάληψη είναι ασήμαντος αν συγκριθεί με το κέρδος σε αριθμό επαναλήψεων. Αυτό γίνεται ακόμα πιο εμφανές αν συγκριθεί ο χρόνος ανά επανάληψη των δύο σχημάτων όπου η DVM υπερτερεί μόλις κατά ένα μικρό ποσοστό που κυμαίνεται από 4 – 25%. Σημειώνεται τέλος, ότι οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν σε έναν υπολογιστή Pentium III, 700MHz.

Τα αποτελέσματα αυτά είναι αρκετά θετικά όσον αφορά την εφαρμοσιμότητα της προτεινόμενης μεθοδολογίας. Ειδικότερα, αν επιταχυνθούν και οι οριακοί κόμβοι, οι οποίοι στην παρούσα φάση υπολογίζονται από την εξίσωση μεταφοράς, τότε τα αποτελέσματα εικάζεται ότι θα είναι ακόμα πιο ικανοποιητικά. Επίσης, όπως φάνηκε από την θεωρητική ανάλυση, η εφαρμογή ανώτερων σχημάτων θα επιφέρει ακόμα καλύτερα αποτελέσματα μιας και η αύξηση του απαιτούμενου χρόνου ανά επανάληψη αναμένεται να είναι μικρή. Αυτό βέβαια ίσως να μην είναι απαραίτητο, εφόσον ήδη με το σχήμα H_1 , ο αριθμός των επαναλήψεων παραμένει σε πολύ χαμηλά επίπεδα.

Ένα ακόμα σημείο που πρέπει να τονιστεί είναι ότι όταν η μέθοδος DVM εφαρμόζεται για μικρούς αριθμούς Knudsen, το αθροιστικό σφάλμα στρογγυλοποίησης γίνεται σημαντικό λόγω του μεγάλου αριθμού των επαναλήψεων. Επομένως η απαίτηση για αυστηρότερα κριτήρια σύγκλισης δεν σημαίνει απαραίτητα βελτίωση των αποτελεσμάτων ενώ μπορεί να οδηγεί και στην αντίθετη κατεύθυνση. Κάτι τέτοιο αποφεύγεται από την εφαρμογή των σχημάτων επιτάχυνσης μιας και ο μικρός αριθμός επαναλήψεων δεν επιτρέπει στο σφάλμα στρογγυλοποίησης να γίνει σημαντικό.

Τέλος σημειώνεται ότι η βελτίωση που παρατηρείται από την εφαρμογή των σχημάτων επιτάχυνσης είναι ίση ή και καλύτερη από αυτήν που θεωρητικά είχε υπολογιστεί για την συνεχή εξίσωση.

4.6 Ανακεφαλαίωση

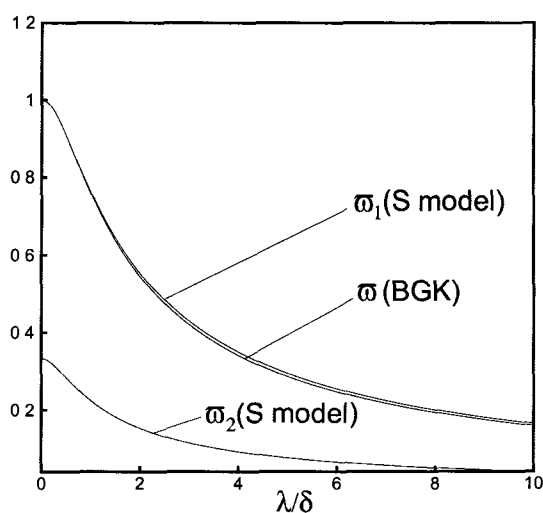
Στο παρόν Κεφάλαιο νέα αριθμητικά σχήματα για την επιτάχυνση της σύγκλισης της μεθόδου των διακριτών ταχυτήτων προτάθηκαν. Αρχικά διαπιστώθηκε θεωρητικά ο αργός ρυθμός σύγκλισης της μεθόδου με την εφαρμογή της ανάλυσης ευστάθειας Fourier και με την χρησιμοποίηση τόσο του μοντέλου BGK όσο και του μοντέλου S στην περίπτωση της εξίσωσης με αποκλίσεις μόνο στη ταχύτητα και του μοντέλου BGK για την πλήρη εξίσωση. Η φασματική ακτίνα σε όλες τις περιπτώσεις βρέθηκε να είναι ίση με τη μονάδα, τόσο σε μία όσο και σε δύο διαστάσεις, κάτι που επιβεβαιώνει την αριθμητικά παρατηρηθείσα αργή σύγκλιση.

Στη συνέχεια αναπτύχθηκε η καινούργια μεθοδολογία η οποία συνίσταται στην δημιουργία μιας ομάδας εξισώσεων που επιλύονται σε συνδυασμό με την εξίσωση μεταφοράς. Οι νέες αυτές εξισώσεις προκύπτουν ως οι ροπές της εξίσωσης μεταφοράς, με χρησιμοποίηση των πολυωνύμων Hermite. Από τα σχήματα επιτάχυνσης που μπορούν να διαμορφωθούν, φαίνεται ότι τα άρτιας τάξεως (H_2 , H_4 κλπ) χειροτερεύουν τη σύγκλιση ενώ τα περιττής τάξης (H_1 , H_3 κλπ) τη βελτιώνουν θεαματικά. Η επιτάχυνση της σύγκλισης είναι σημαντική ακόμα και με τη χρησιμοποίηση του H_1 αλλά γίνεται εντονότερη όσο μεγαλώνει η τάξη του σχήματος. Ως βέλτιστη επιλογή θεωρείται πάντως αυτή του σχήματος H_1 ή H_3 μιας και η μείωση του αριθμού των επαναλήψεων είναι μεγάλη, ενώ ο υπολογιστικός χρόνος ανά επανάληψη και η πολυπλοκότητα των εξισώσεων δεν αυξάνουν σημαντικά. Τα θεωρητικά αποτελέσματα επιβεβαιώθηκαν και αριθμητικά, με την εφαρμογή της μεθοδολογίας στην επίλυση της διδιάστατης ροής σε μικρο-αγωγό μεγάλου μήκους ορθογωνικής διατομής. Ως μοντέλα για τον όρο των συγκρούσεων χρησιμοποιήθηκαν το BGK και το μοντέλο S. Το γεγονός ότι τα προτεινόμενα σχήματα λειτουργούν το ίδιο αποτελεσματικά είναι ενθαρρυντική ένδειξη όσον αφορά την εφαρμογή τους στην γραμμικοποιημένη εξίσωση Boltzmann με πιο σύνθετες προσεγγίσεις του όρου των συγκρούσεων.

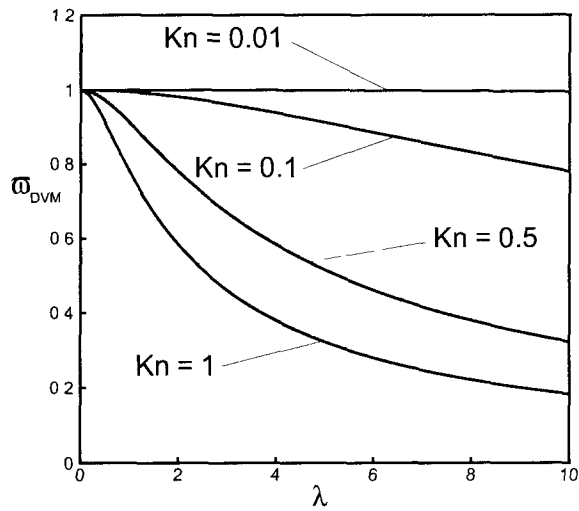
4.7 Πίνακες - Σχήματα

Πίνακας 4.1: Φασματικές ακτίνες για διάφορα σχήματα επιτάχυνσης, μοντέλο συγκρούσεων το BGK και αποκλίσεις μόνο στη ταχύτητα.

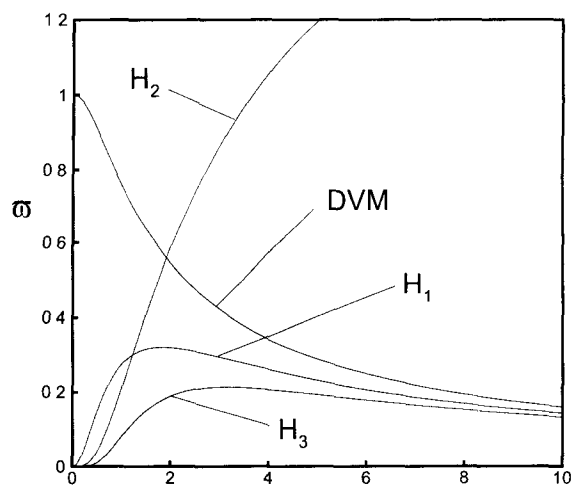
Μέθοδος	DVM	H_1	H_2	H_3
Φασματική ακτίνα	1.00	0.3196	2.00	0.2124



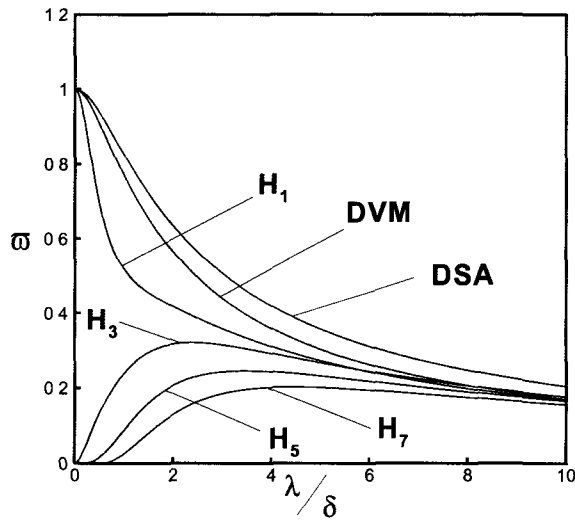
Σχήμα 4.1: Φάσμα ιδιοτιμών της απλής μεθόδου των διακριτών ταχυτήτων για τα μοντέλα BGK και S και αποκλίσεις μόνο στη ταχύτητα.



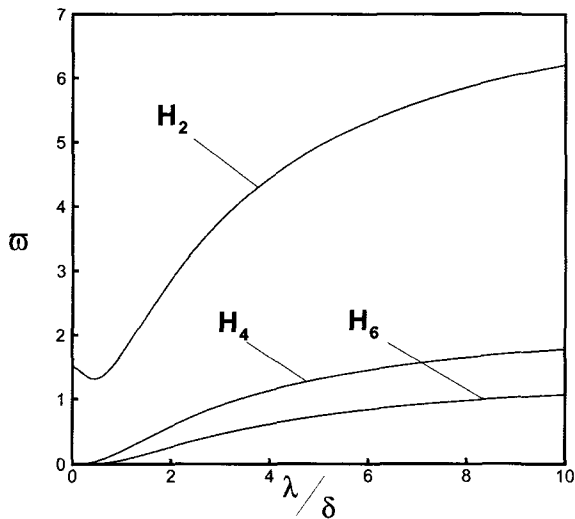
Σχήμα 4.2: Φάσμα ιδιοτιμών της απλής μεθόδου των διακριτών ταχυτήτων για τα διάφορες τιμές του αριθμού Kn , το μοντέλο BGK και αποκλίσεις μόνο στη ταχύτητα.



Σχήμα 4.3: Φάσμα ιδιοτιμών για διάφορα σχήματα επιτάχυνσης και αποκλίσεις μόνο στη ταχύτητα.



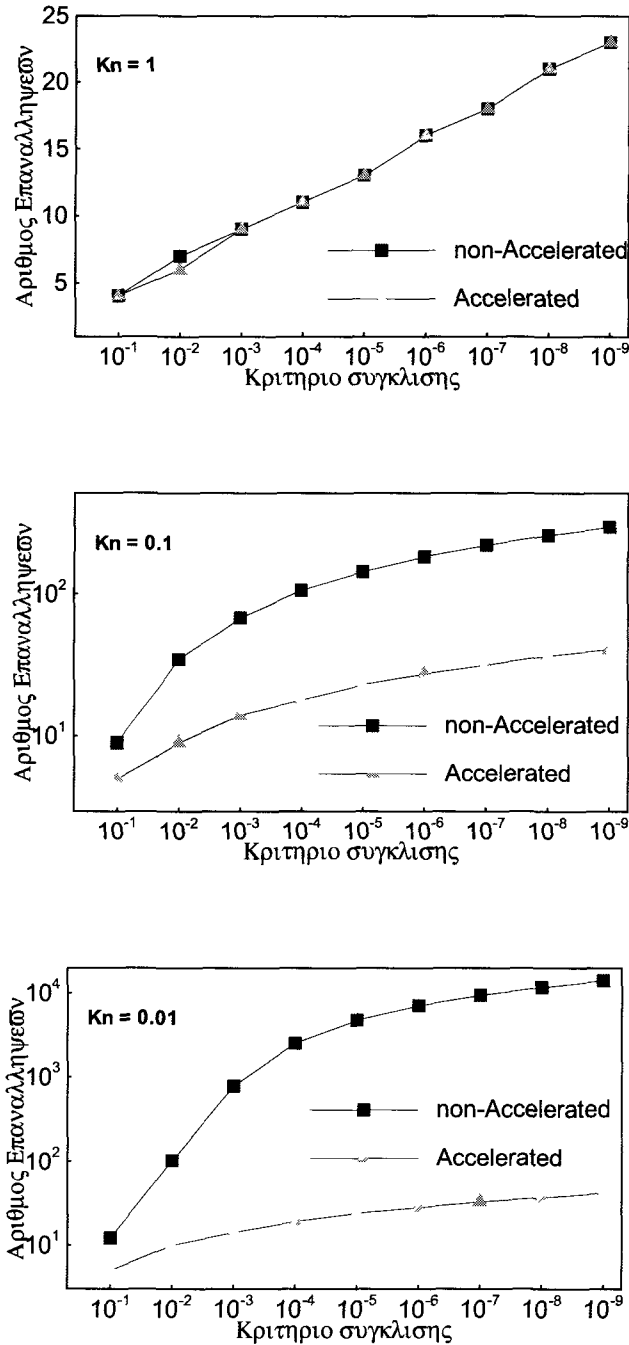
Σχήμα 4.4: Φάσμα ιδιοτιμών για διάφορα περιττά σχήματα επιτάχυνσης στο πλήρες σχήμα.



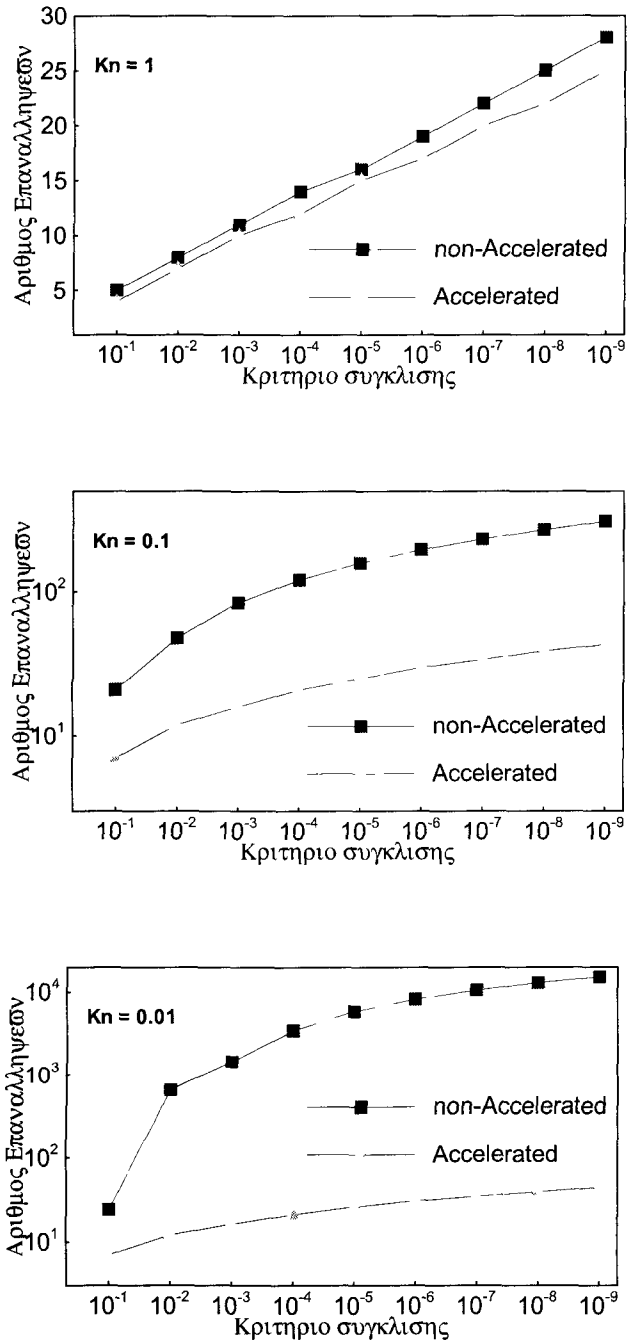
Σχήμα 4.5: Φάσμα ιδιοτιμών για διάφορα άρτια σχήματα επιτάχυνσης στο πλήρες σχήμα.

Πίνακας 4.2: Φασματικές ακτίνες για διάφορα σχήματα επιτάχυνσης στην πλήρη εξίσωση και μοντέλο συγκρούσεων το BGK.

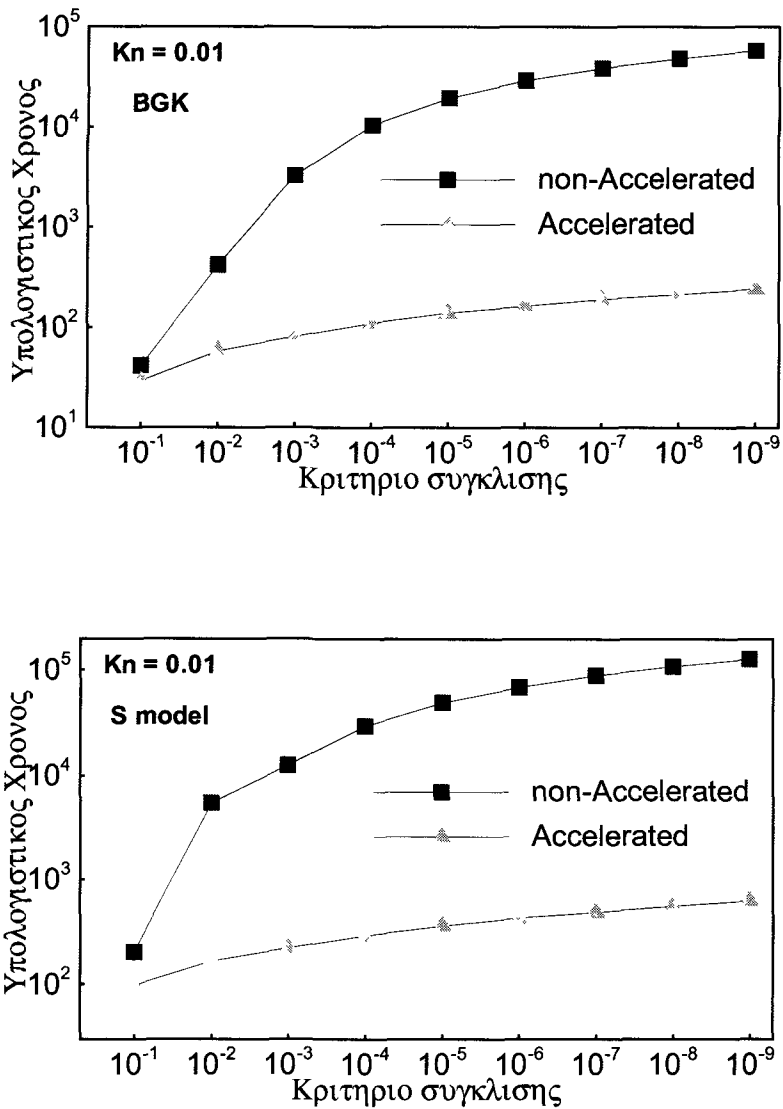
Μέθοδος	Φασματική ακτίνα
<i>DVM</i>	1.00
<i>DSA</i>	1.00
<i>H1</i>	1.00
<i>H2</i>	8.00
<i>H3</i>	0.321
<i>H4</i>	2.46
<i>H5</i>	0.245
<i>H6</i>	1.56
<i>H7</i>	0.202



Σχήμα 4.6: Σύγκριση της απλής DVM και του σχήματος επιτάχυνσης H_1 ως προς τον απαιτούμενο αριθμό επαναλήψεων για την επίτευξη του κριτηρίου σύγκλισης για διάφορους αριθμούς Knudsen. Μοντέλο για τον όρο των συγκρούσεων το BGK.



Σχήμα 4.7: Σύγκριση της απλής DVM και του σχήματος επιτάχυνσης H_1 ως προς τον απαιτούμενο αριθμό επαναλήψεων για την επίτευξη του κριτηρίου σύγκλισης για διάφορους αριθμούς Knudsen. Μοντέλο για τον όρο των συγκρούσεων το S.



Σχήμα 4.8: Σύγκριση της απλής DVM και του σχήματος επιτάχυνσης H_1 ως προς τον απαιτούμενο χρόνο για την επίτευξη του κριτηρίου σύγκλισης αριθμό $Kn = 0.01$ και μοντέλα όρου συγκρούσεων το BGK (πάνω) και το S (κάτω).

Κεφάλαιο 5

Σχήματα επιτάχυνσης της μεθόδου **Lattice Boltzmann**

5.1 Εισαγωγή

Η μέθοδος Lattice Boltzmann από τη στιγμή που πρωτοδιατυπώθηκε πριν από 15 περίπου χρόνια έχει ακολουθήσει μια εντυπωσιακή πορεία. Έχει εισχωρήσει στα περισσότερα από τα πεδία με τα οποία ασχολείται η κλασσική ρευστοδυναμική, ενώ το πλήθος των προβλημάτων που έχουν επιλυθεί είναι μεγάλο. Παρόλα αυτά υπάρχουν ακόμα σημαντικά προβλήματα τα οποία πρέπει να αντιμετωπιστούν.

Ένα από τα σημαντικότερα προβλήματα αποτελεί ο μεγάλος αριθμός επαναλήψεων που απαιτείται για τη σύγκλιση των αριθμητικών σχημάτων, ιδίως όταν ο αριθμός Reynolds μεγαλώσει αρκετά. Το γεγονός αυτό είναι απόλυτα λογικό μιας και σε υψηλούς αριθμούς Reynolds η προσέγγιση της μόνιμης κατάστασης απαιτεί μεγάλο χρονικό διάστημα πράγμα που, με δεδομένο το μικρό χρονικό βήμα της μεθόδου Lattice Boltzmann, μεταφράζεται σε μεγάλο αριθμό επαναλήψεων.

Όταν όμως αυτό που ενδιαφέρει δεν είναι η μεταβατική κατάσταση αλλά η μόνιμη στην οποία καταλήγει το σύστημα, τότε είναι θεμιτή η εφαρμογή τεχνικών οι οποίες μπορούν να οδηγήσουν ταχύτερα σε αυτό. Τα σχήματα που έχουν παρουσιαστεί μέχρι τώρα για την επιτάχυνση της σύγκλισης, εφαρμόζουν ουσιαστικά ένα σχήμα χαλάρωσης [201] με το οποίο επιτυγχάνεται κάποια μικρή μείωση του απαιτούμενου υπολογιστικού χρόνου.

Στο παρόν Κεφάλαιο παρουσιάζεται μια νέα τεχνική για την επιτάχυνση της μεθόδου Lattice Boltzmann η οποία αποτελεί ουσιαστικά την επέκταση της αντίστοιχης τεχνικής που αναπτύχθηκε στο Κεφάλαιο 4 για τη μέθοδο DVM στην περιοχή των αραιοποιημένων ροών. Τα αποτελέσματα είναι και πάλι εντυπωσιακά και βελτιώνουν τόσο τον υπολογιστικό χρόνο που απαιτείται όσο και την ευστάθεια του αλγορίθμου [14, 202]. Πριν όμως από την παρουσίαση του σχήματος κρίνεται σκόπιμη μια σύντομη παρουσίαση της μεθόδου Lattice Boltzmann.

5.2 Η μέθοδος **Lattice Boltzmann** σε δύο διαστάσεις: Μοντέλο 9 ταχυτήτων

Η πρώτη εκδοχή της μεθόδου ήταν αυτή σε δύο διαστάσεις όπου ο αριθμός των διακριτών ταχυτήτων ήταν επτά εκ των οποίων η μία μηδενική και οι υπόλοιπες έξι ήταν ίσες σε μέτρο. Όμως αποδείχθηκε ότι το σχήμα αυτό έπασχε σε πολλά σημεία. Το μοντέλο το οποίο παρουσίαζε τη μεγαλύτερη ευστάθεια και από το οποίο μπορούσε με εφαρμογή της διαδικασίας Chapman-Enskog να προκύψουν οι εξισώσεις Navier-Stokes ήταν αυτό του ορθογωνικού πλέγματος εννέα ταχυτήτων το οποίο και θα αναπτυχθεί στη συνέχεια.

Η εξίσωση Boltzmann με την εφαρμογή του μοντέλου BGK έχει τη μορφή:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \xi \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{x}} = -\frac{1}{\lambda}(h - h^{(0)}) \quad (5.1)$$

όπου $h^{(0)}$ είναι η κατανομή Maxwell και λ ο χρόνος χαλάρωσης. Αν εφαρμοστεί η διαδικασία Chapman-Enskog στη συνεχή εξίσωση προκύπτει ότι το κινηματικό ιξώδες δίνεται από τη σχέση

$$\frac{\mu}{\rho} = \lambda R T \quad (5.2)$$

με R να είναι η σταθερά του αερίου και T η θερμοκρασία. Η κατανομή Maxwell αναπτύχθηκε ως προς τη ταχύτητα U και κρατηθούν όροι μέχρι δεύτερης τάξης, προκύπτει:

$$h^{(0)} = \frac{\rho}{(2\pi R T)^{D/2}} e^{-\xi^2/2R T} \left\{ 1 + \frac{\xi \cdot \mathbf{U}}{R T} + \frac{(\xi \cdot \mathbf{U})^2}{2(R T)^2} - \frac{U^2}{2R T} \right\} \quad (5.3)$$

όπου D ο αριθμός των διαστάσεων. Οι μακροσκοπικές ιδιότητες τέλος δίνονται από τα ολοκληρώματα:

$$\rho = \int_{-\infty}^{\infty} h d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} h^{(0)} d\xi \quad (5.4)$$

και

$$\mathbf{U} = \int_{-\infty}^{\infty} \xi h d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} \xi h^{(0)} d\xi. \quad (5.5)$$

Αν περιορίσουμε το πρόβλημα τώρα σε δύο διαστάσεις, έστω x και y , και χρησιμοποιήσουμε τις αδιαστατοποιήσεις

$$\mathbf{v} = \frac{\xi}{\sqrt{2RT}}, \quad \mu = v_x, \quad \eta = v_y, \quad \mathbf{u} = \frac{\mathbf{U}}{\sqrt{2RT}}, \quad t = t \sqrt{2RT}$$

$$\tau = \lambda \sqrt{2RT}, \quad f = h \sqrt{2RT} e^{\mu^2 + \eta^2}, \quad f^{(0)} = h^{(0)} \sqrt{2RT} e^{\mu^2 + \eta^2} \quad (5.6)$$

τότε η εξίσωση Boltzmann και οι μακροσκοπικές ιδιότητες δίνονται πλέον από τις σχέσεις:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + \frac{1}{\tau} f = \frac{1}{\tau} \left\{ \rho + 2\mathbf{v} \cdot (\rho \mathbf{u}) + 2\rho(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})^2 - \rho u^2 \right\} \quad (5.7)$$

$$\rho = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f e^{-v^2} dv = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f^{(0)} e^{-v^2} dv \quad (5.8)$$

και

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{v} f e^{-v^2} dv = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{v} f^{(0)} e^{-v^2} dv \quad (5.9)$$

το οποίο είναι και το σύστημα το οποίο επιλύεται. Εφαρμόζοντας τώρα τη μέθοδο DVM και χρησιμοποιώντας για τον υπολογισμό των ολοκληρωμάτων το σχήμα Gauss-Hermite τάξης $n = 3$ σε κάθε διεύθυνση τότε απαιτείται ουσιαστικά η λύση της εξίσωσης μεταφοράς για συνολικά εννέα διαφορετικές τιμές της μικροσκοπικής ταχύτητας \mathbf{v} που είναι:

$$\begin{aligned} v_0 &= \{0, 0\}, \quad v_1 = \left\{ \sqrt{\frac{3}{2}}, 0 \right\}, \quad v_2 = \left\{ 0, \sqrt{\frac{3}{2}} \right\}, \quad v_3 = \left\{ -\sqrt{\frac{3}{2}}, 0 \right\}, \quad v_4 = \left\{ 0, -\sqrt{\frac{3}{2}} \right\}, \\ v_5 &= \left\{ \sqrt{\frac{3}{2}}, \sqrt{\frac{3}{2}} \right\}, \quad v_6 = \left\{ -\sqrt{\frac{3}{2}}, \sqrt{\frac{3}{2}} \right\}, \quad v_7 = \left\{ -\sqrt{\frac{3}{2}}, -\sqrt{\frac{3}{2}} \right\}, \quad v_8 = \left\{ \sqrt{\frac{3}{2}}, -\sqrt{\frac{3}{2}} \right\}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

ενώ ο συντελεστής βαρύτητας w_a της κάθε μίας είναι το γινόμενο των αντίστοιχων συντελεστών του σχήματος Gauss-Hermite για κάθε μια από τις συνιστώσες της ταχύτητας. Γνωρίζοντας τις τιμές της f για τις εννέα αυτές ταχύτητες, οι μακροσκοπικές ιδιότητες είναι

$$\rho = \frac{1}{\pi} \sum_{a=0}^8 w_a f_a \quad \mathbf{u} = \frac{1}{\pi} \sum_{a=0}^8 w_a \mathbf{v}_a f_a. \quad (5.11)$$

Συνήθως ο όρος w_a/π πολλαπλασιάζει την αντίστοιχη εξίσωση ώστε το αποτέλεσμα για τη συνάρτηση f να δίνει τελικά τη ποσότητα $f'_a = f_a w_a/\pi$.

Το τελευταίο βήμα αφορά την αλλαγή μεταβλητής που γίνεται όσον αφορά τις ταχύτητες και είναι:

$$\mathbf{e}_a = \sqrt{\frac{2}{3}} \mathbf{v}_a \quad \mathbf{u}'_a = \sqrt{\frac{2}{3}} \mathbf{u} \quad (5.12)$$

ώστε οι διακριτές ταχύτητες να είναι πλέον

$$\begin{aligned} e_0 &= \{0, 0\}, \quad e_1 = \{1, 0\}, \quad e_2 = \{0, 1\}, \quad e_3 = \{-1, 0\}, \quad e_4 = \{0, -1\}, \\ e_5 &= \{1, 1\}, \quad e_6 = \{-1, 1\}, \quad e_7 = \{-1, -1\}, \quad e_8 = \{1, -1\}. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Το τελικό σχήμα όπως διαμορφώνεται αποτελείται από τις εξισώσεις μεταφοράς (που έχουν πολλαπλασιαστεί με $\sqrt{2/3}$):

$$\frac{\partial f'_a}{\partial t'} + \mathbf{e}_a \frac{\partial f'_a}{\partial \mathbf{x}} + \frac{1}{\tau'} f'_a = \frac{\rho}{\tau'} \frac{w_a}{\pi} \left\{ 1 + 3 \mathbf{e}_a \cdot \mathbf{u}' + \frac{9}{2} (\mathbf{e}_a \cdot \mathbf{u}')^2 - \frac{3}{2} u'^2 \right\} \quad (5.14)$$

και τις εκφράσεις για τον υπολογισμό των μακροσκοπικών μεγεθών

$$\rho = \sum_{a=0}^8 f'_a \quad \mathbf{u}' = \sum_{a=0}^8 \mathbf{e}_a f'_a \quad (5.15)$$

Σημειώνεται ότι η τιμή που προκύπτει για τη πυκνότητα είναι η ακριβής ενώ η πραγματική ταχύτητα U συνδέεται με την υπολογιζόμενη από τη σχέση

$$U = u' \sqrt{3RT}. \quad (5.16)$$

Στην συνέχεια γίνεται η χωρική και η χρονική διακριτοποίηση. Το βήμα αυτό πρέπει να γίνει με τέτοιο τρόπο ώστε ο υπολογισμός του αριστερού μέλους να μπορεί να γίνει με βάση τις τιμές στα σημεία του πλέγματος. Αυτό, επιτυγχάνεται με την επιλογή του χρονικού βήματος ως συνάρτηση του χωρικού βήματος. Τελικά η σχέση αυτή είναι της μορφής $\Delta t' = \Delta x$ που σε πραγματικές διαστάσεις είναι $\Delta t = \Delta x / \sqrt{3RT}$

5.3 Ανάλυση ευστάθειας της μεθόδου **Lattice Boltzmann**

Το σχήμα επιτάχυνσης σε πρώτο στάδιο εφαρμόζεται στην συνεχή μονοδιάστατη εξίσωση που κατ' αντιστοιχία με την εξίσωση (5.7) είναι:

$$\mu \frac{\partial f^{(k+1/2)}}{\partial x} + \frac{1}{\tau} f^{(k+1/2)} = \frac{1}{\tau} [\rho + \mu(2\rho u) + \mu^2(2\rho u^2) - \rho u^2]^{(k)} \quad (5.17)$$

με

$$\rho^{(k+1)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f^{(k+1/2)}(x, \xi) e^{-\mu^2} d\mu \quad (5.18)$$

και

$$\rho^{(k+1)}(x) u^{(k+1)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mu f^{(k+1/2)}(x, \xi) e^{-\mu^2} d\mu. \quad (5.19)$$

Ο εκθέτης (k) συμβολίζει τον αριθμό της επανάληψης στην οποία έχει υπολογιστεί η κάθε ποσότητα. Ο όρος της χρονικής παραγώγου έχει εξαλειφθεί εφόσον το σχήμα της επιτάχυνσης έχει νόημα μόνο όταν η επιλυόμενη ροή είναι χρονικά αμετάβλητη. Το τυπικό σχήμα που χρησιμοποιείται στη μέθοδο **Lattice Boltzmann** στη συνέχεια θα συμβολίζεται ως **LBTI** ώστε να διακρίνεται από τα σχήματα επιτάχυνσης που θα παρουσιαστούν στη συνέχεια. Το σχήμα αυτό αντιστοιχεί στην απλή **DVM** όπως αυτή διατυπώθηκε στο Κεφάλαιο 4.

Ως πρώτο βήμα για την ανάλυση ευστάθειας του σχήματος ορίζονται οι Ερμιτιανές ροπές

$$\phi_m(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} H_m(\mu) f(x, \xi) e^{-\mu^2} d\mu = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} H_m(\mu) f^{(0)}(x, \xi) e^{-\mu^2} d\mu \quad (5.20)$$

όπου ως γνωστόν με $H_m(\mu)$, ($m = 0, 1, 2$), συμβολίζονται τα πολυώνυμα Hermite τάξης m . Εφόσον ισχύει

$$\phi_0(x) = \rho(x), \quad \phi_1(x) = 2\rho(x)u(x), \quad \phi_2(x) = 4\rho(x)u^2(x) \quad (5.21)$$

η εξίσωση της **LBTI** μπορεί να γραφεί ως

$$\mu \frac{\partial f^{(k+1/2)}}{\partial x} + \frac{1}{\tau} f^{(k+1/2)} = \frac{1}{\tau} \left[\phi_0^{(k)} + \mu \phi_1^{(k)} + \frac{1}{2} \left(\mu^2 - \frac{1}{2} \right) \phi_2^{(k)} \right] \quad (5.22)$$

με

$$\phi_m^{(k+1)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} H_m(\mu) f^{(k+1/2)}(x, \xi) e^{-\mu^2} d\mu, \quad m = 0, 1, 2. \quad (5.23)$$

Για τον ποσοτικό προσδιορισμό της συμπεριφοράς της LBTI ως προς το ρυθμό σύγκλισης της είναι απαραίτητος ο ορισμός των συναρτήσεων διόρθωσης στην επανάληψη k :

$$F^{(k+1/2)}(x, \mu) = f^{(k+1/2)}(x, \mu) - f^{(k-1/2)}(x, \mu) \quad (5.24)$$

και

$$\Phi^{(k+1/2)}(x) = \phi^{(k+1/2)}(x) - \phi^{(k-1/2)}(x). \quad (5.25)$$

Οι εξισώσεις (5.22) και (5.23) αφαιρούνται για διαδοχικές επαναλήψεις ώστε να προκύψει

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial F^{(k+1/2)}(x, \mu)}{\partial x} + \frac{1}{\tau} F^{(k+1/2)}(x, \mu) = \\ \frac{1}{\tau} \left[\Phi_0^{(l)}(x) + \mu \Phi_1^{(l)}(x) + \frac{1}{2} \left(\mu^2 - \frac{1}{2} \right) \Phi_2^{(l)}(x) \right] \end{aligned} \quad (5.26)$$

και

$$\Phi_m^{(k+1)}(x, \mu) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} H_m(\mu) F^{(k+1/2)}(x, \mu) e^{-\mu^2} d\mu \quad (5.27)$$

αντίστοιχα. Για τον προσδιορισμό του ρυθμού σύγκλισης εφαρμόζεται ο διαχωρισμός μεταβλητών κατά Fourier στις εξισώσεις (5.26) και (5.27) σύμφωνα με τις σχέσεις

$$F^{(k+1/2)}(x, \mu) = \omega F^{(k-1/2)}(x, \mu) = \dots = \omega^k g(\mu) e^{i\lambda x} \quad (5.28)$$

και

$$\Phi_m^{(k+1)}(x) = \omega \Phi_m^{(k)}(x) = \omega^2 \Phi_m^{(k-1)}(x) = \dots = \omega^{k+1} \alpha_m e^{i\lambda x} \quad (5.29)$$

όπου ω είναι οι ιδιοτιμές που αντιστοιχούν στον κυματαριθμό λ και αντιστοιχεί στο σφάλμα μεταξύ διαδοχικών επαναλήψεων, $g(\mu)$ είναι η ιδιοσυνάρτηση και τέλος α_m είναι ορισμένοι άγνωστοι συντελεστές. Αν στη συνέχεια οι εξισώσεις (5.28) και (5.29) αντικατασταθούν στις εξισώσεις (5.26) και (5.27) προκύπτει

$$g(\mu) = \frac{\alpha_0 + \mu \alpha_1 + \frac{1}{2} \left(\mu^2 - \frac{1}{2} \right)}{1 + i\lambda \mu} \quad (5.30)$$

και

$$\omega \alpha_m = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} H_m(\mu) g(\mu) e^{-\mu^2} d\mu, \quad m = 0, 1, 2 \quad (5.31)$$

αντίστοιχα. Επομένως ανακύπτει το πρόβλημα ιδιοτιμών

$$\omega \underline{\alpha} = \underline{A} \underline{\alpha} \quad (5.32)$$

όπου $\alpha = [\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2]^T$ και

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \Lambda_0 & -i \lambda \tau \Lambda_2 & \frac{1}{2}(\Lambda_2 - \frac{\Lambda_0}{2}) \\ -2i \lambda \tau \Lambda_2 & 2\Lambda_2 & -i \lambda \tau (\Lambda_4 - \frac{\Lambda_2}{2}) \\ 2(2\Lambda_2 - \Lambda_0) & -2i \lambda \tau (2\Lambda_4 - \Lambda_2) & 2\Lambda_4 - 2\Lambda_2 + \frac{\Lambda_0}{2} \end{pmatrix} \quad (5.33)$$

με

$$\Lambda_a = \Lambda_a(\lambda \tau) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mu^{2a} e^{-\mu^2}}{1 + (\lambda \tau \mu)^2} d\mu, \quad a = 1, 2, 3. \quad (5.34)$$

Υπάρχουν τρεις διακριτές ιδιοτιμές και αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα. Για την εύρεση της φασματικής ακτίνας

$$S_{LBTI} = \max_{1 \leq j \leq 3} \sup_{\lambda} |\omega_j(\lambda)| \quad (5.35)$$

του πίνακα επανάληψης για ένα δεδομένο τ , πρέπει να βρεθεί ένα πάνω όριο των τιμών των ιδιοτιμών $|\omega_j|$ του \mathbf{A} ως συνάρτηση της παραμέτρου λ . Η φασματική ακτίνα αντικατοπτρίζει τον βραδύτερο ρυθμό με τον οποίο μειώνεται το σφάλμα μεταξύ δύο διαδοχικών επαναλήψεων. Τα ολοκληρώματα στην εξίσωση (5.34) υπολογίζονται αριθμητικά και στη συνέχεια οι ιδιοτιμές του μητρώου \mathbf{A} μπορούν να εξαχθούν εύκολα. Στο Σχήμα 5.1 παρουσιάζεται η μέγιστη ιδιοτιμή $\max_{1 \leq j \leq 3} |\omega_j(\lambda)|$ του LBTI σχήματος, που συμβολίζεται με ω_{LBTI} για όλο το εύρος της παραμέτρου λ και διάφορες τιμές του χρόνου χαλάρωσης τ .

Όπως είναι εμφανές, το σχήμα επανάληψης ελαχιστοποιεί γρήγορα το σφάλμα που αφορά μορφές που αντιστοιχούν σε ισχυρές χωρικές μεταβολές και όμοιες μεταβολές ταχυτήτων ($\lambda \gg 1$) καθώς και για μεγάλους χρόνους χαλάρωσης, αλλά όχι τις μορφές που αντιστοιχούν σε ασθενείς μεταβολές ($\lambda \ll 1$) και για μικρούς χρόνους χαλάρωσης. Η μέγιστη τιμή του $|\omega_{LBTI}|$, που παρατηρείται για $\lambda = 0$, είναι $\omega_{LBTI} = 1$ και είναι ανεξάρτητη του τ . Πάντως, σε ένα πεπερασμένο σύστημα η τιμή $\lambda = 0$, δεν υπάρχει και επομένως το σχήμα LBTI συγκλίνει πάντα, τουλάχιστον θεωρητικά. Παρόλα αυτά γίνεται αντιληπτή η αργή σύγκλιση και αποδεικνύεται μαθηματικά. Υπενθυμίζεται ότι όπως και στην αντίστοιχη περίπτωση της DVM εκτός από το πρόβλημα του υπολογιστικού χρόνου παρουσιάζονται σφάλματα και στο όριο προς το οποίο συγκλίνουν τα αποτελέσματα λόγω σφαλμάτων στρογγυλοποίησης.

5.4 Σχήματα επιτάχυνσης

Για την εξαγωγή των σχημάτων επιτάχυνσης λαμβάνονται οι ροπές της εξίσωσης μεταφοράς (5.22) κατά Hermite και δημιουργείται το σύστημα των συνθετικών εξισώσεων οι οποίες λύνονται σε συνδυασμό με την εξίσωση μεταφοράς σε κάθε επανάληψη.

Στη συνέχεια παρουσιάζονται τρία σχήματα επιτάχυνσης που προκύπτουν από τη δημιουργία συνθετικών εξισώσεων για τις δύο, τέσσερις και έξι πρώτες ροπές αντίστοιχα. Οι ομάδες εξισώσεων που προκύπτουν για κάθε σχήμα, τα οποία ονομάζονται LBH1,

LBH3 και LBH5 αντίστοιχα είναι:

$$\begin{aligned}
 \text{LBH1} \quad & \frac{d\phi_1^{k+1}}{dx} = 0 \\
 & \frac{d\phi_0^{k+1}}{dx} = -\frac{1}{2} \frac{d\phi_2^{k+1/2}}{dx}
 \end{aligned} \tag{5.36}$$

$$\begin{aligned}
 \text{LBH3} \quad & \frac{d\phi_1^{k+1}}{dx} = 0 \\
 & \frac{1}{2} \frac{d\phi_2^{k+1}}{dx} + \frac{d\phi_0^{k+1}}{dx} = 0 \\
 & \frac{1}{2} \frac{d\phi_3^{k+1}}{dx} + 2 \frac{d\phi_1^{k+1}}{dx} = 0 \\
 & 3 \frac{d\phi_2^{k+1}}{dx} + \frac{1}{\tau} \phi_3^{k+1} = -\frac{1}{2} \frac{d\phi_4^{k+1/2}}{dx}
 \end{aligned} \tag{5.37}$$

$$\begin{aligned}
 \text{LBH5} \quad & \frac{d\phi_1^{k+1}}{dx} = 0 \\
 & \frac{1}{2} \frac{d\phi_2^{k+1}}{dx} + \frac{d\phi_0^{k+1}}{dx} = 0 \\
 & \frac{1}{2} \frac{d\phi_3^{k+1}}{dx} + 2 \frac{d\phi_1^{k+1}}{dx} = 0 \\
 & \frac{1}{2} \frac{d\phi_4^{k+1}}{dx} + 3 \frac{d\phi_2^{k+1}}{dx} + \frac{1}{\tau} \phi_3^{k+1} = 0 \\
 & \frac{1}{2} \frac{d\phi_5^{k+1}}{dx} + 4 \frac{d\phi_3^{k+1}}{dx} + \frac{1}{\tau} \phi_4^{k+1} = 0 \\
 & 5 \frac{d\phi_4^{k+1}}{dx} + \frac{1}{\tau} \phi_5^{k+1} = -\frac{1}{2} \frac{d\phi_6^{k+1/2}}{dx}
 \end{aligned} \tag{5.38}$$

Σε κάθε ομάδα εξισώσεων από τις (5.36), (5.37) και (5.38), οι ροπές της $f(x, \mu)$ στο αριστερό σκέλος είναι αυτές που επιταχύνονται, ενώ οι ροπές τάξης $N + 1$ που βρίσκονται στο δεξί σκέλος είναι αυτές που υπολογίζονται από τη συνάρτηση κατανομής μέσω της εξίσωσης (5.23) με $m = 2, 4, 6$ και δεν επιταχύνονται.

Ανάλογα με τον αριθμό των ροπών που επιταχύνονται, διάφορα σχήματα μπορούν να οριστούν. Αν οι πρώτες $N + 1$ Ερμιτιανές ροπές της $f(x, \mu)$ επιταχύνονται, ο προκύπτων αλγόριθμος ονομάζεται LBHN. Αποδεικνύεται ότι ο αριθμός των επιταχυνόμενων ροπών παίζει σημαντικό ρόλο στη συμπεριφορά και στη σύγκλιση του σχήματος.

Ειδικότερα τα βήματα που ακολουθούνται σε κάθε επανάληψη είναι τα εξής:

1. Ορίζεται ένα αρχικό πεδίο για το $\phi_n^{(k)}(x)$ και επιλύεται η εξίσωση μεταφοράς για το $f^{(l+1/2)}(x, \mu)$.
2. Υπολογίζεται η μη επιταχυνόμενη ροπή $\phi_{N+1}^{(k+1/2)}(x)$ από τις τιμές που έχουν προκύψει για την $f^{(l+1/2)}(x, \mu)$.

3. Λύνεται το σύστημα των συνθετικών εξισώσεων για $\phi_n^{(k+1)}(x)$ με $n = 0, 1, \dots, N$.

Στην επόμενη παράγραφο αποδεικνύεται ότι με την εφαρμογή του κατάλληλου σχήματος επιτάχυνσης ο αριθμός των απαιτούμενων επαναλήψεων για την επίτευξη της σύγκλισης μειώνεται δραστικά. Από τη άλλη πλευρά είναι αναμενόμενο ο χρόνος που απαιτείται για κάθε επανάληψη να αυξάνεται, λόγω της επίλυσης του γραμμικού συστήματος. Όμως, η αύξηση αυτή είναι πολύ μικρή και επομένως ο συνολικός χρόνος τελικά είναι αντίστοιχος με αυτόν της DVM. Τέλος σημειώνεται ότι όπως και στην DVM, αποτελεσματικά αποδεικνύονται μόνο τα σχήματα στα οποία επιταχύνεται άρτιος αριθμός ροπών, ενώ σε αντίθετη περίπτωση τα αποτελέσματα είναι χειρότερα ακόμα και από την απλή μέθοδο.

5.5 Ανάλυση ευστάθειας της επιταχυνόμενης μεθόδου **Lattice Boltzmann**

Τα σχήματα επιτάχυνσης επιτρέπουν επίσης την ανάλυση ευστάθειας κατά Fourier, όπως και στο απλό σχήμα. Η διαδικασία είναι ανάλογη με αυτή που ακολουθήθηκε για το LBTI και από τη στιγμή που έχει ήδη παρουσιαστεί, δεν κρίνεται σκόπιμο να παρατεθεί εδώ ξανά.

Σε όλες τις περιπτώσεις η τάξη του Πίνακα επανάληψης είναι μονάδα και επομένως όλες οι ιδιοτιμές που προκύπτουν είναι μηδενικές εκτός από μία. Οι τελικές εκφράσεις που προκύπτουν για τις ιδιοτιμές είναι:

$$\begin{aligned} \text{LBH1} \quad \omega_1 = \omega_2 = 0 \\ \omega_3 = 2\Lambda_4 - 4\Lambda_2 + \frac{3}{2}\Lambda_0 \end{aligned} \quad (5.39)$$

$$\begin{aligned} \text{LBH3} \quad \omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = 0 \\ \omega_4 = -\frac{4}{3}\Lambda_6 + 6\Lambda_4 - 7\Lambda_2 + \frac{3}{2}\Lambda_0 \end{aligned} \quad (5.40)$$

$$\begin{aligned} \text{LBH5} \quad \omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega_4 = \omega_5 = 0 \\ \omega_6 = \frac{\lambda^2 \tau^2}{2 + 5\lambda^2 \tau^2} \left(\frac{8}{3}\Lambda_8 - 24\Lambda_6 + 60\Lambda_4 - 50\Lambda_2 + \frac{15}{2}\Lambda_0 \right) \end{aligned} \quad (5.41)$$

Τα ολοκληρώματα $\Lambda_n(\lambda\tau)$ υπολογίζονται αριθμητικά και στη συνέχεια οι εξισώσεις (5.39 - 5.41) χρησιμοποιούνται προκειμένου να εξαχθούν οι τιμές των ιδιοτιμών για όλο το εύρος της παραμέτρου λ . Τα αποτελέσματα για κάθε σχήμα επιτάχυνσης καθώς και αυτά για το μη επιταχυνόμενο σχήμα παρουσιάζονται στο Σχήμα 5.2, ενώ στον Πίνακα 5.1 οι προκύπτουσες ακτίνες σύγκλισης.

Όπως φαίνεται τόσο το σχήμα LBH3 όσο και το LBH5 επιτυγχάνουν σημαντική βελτίωση στη σύγκλιση του πίνακα επανάληψης για $\lambda \ll 1$ ενώ κάτι τέτοιο δεν παρατηρείται με το LBH1. Μια επανάληψη του σχήματος LBH3 μειώνει το σφάλμα κατά 2.6 φορές

περίπου ενώ η ανάλογη τιμή του LBH5 είναι 3.5. Το γεγονός αυτό σε συνδυασμό με τη παρατήρηση ότι το μεγαλύτερο μέρος του υπολογιστικού χρόνου κάθε επανάληψης ανήλθε για τον προσδιορισμό της συνάρτησης κατανομής υποδεικνύει τόσο το LBH3, όσο και το LBH5 επιφέρουν σημαντική βελτίωση της σύγκλισης.

5.6 Ανακεφαλαίωση

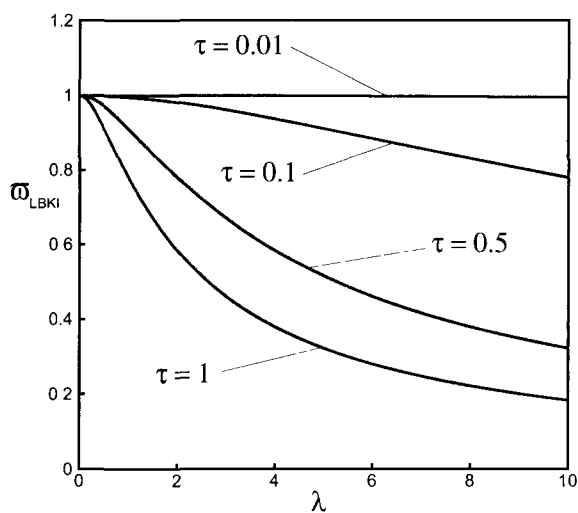
Στο παρόν Κεφάλαιο έγινε αρχικά μια σύντομη παρουσίαση της μεθόδου Lattice Boltzmann. Προσδιορίστηκε ο ρυθμός σύγκλισης της μεθόδου εφαρμόζοντας την ανάλυση ευστάθειας Fourier. Η αναλυτική ακτίνα σύγκλισης βρέθηκε ότι είναι ίση με τη μονάδα κάτι που δικαιολογεί την παρατηρηθείσα αργή σύγκλιση.

Στη συνέχεια διατυπώθηκε η μεθοδολογία για τη δημιουργία σχημάτων επιτάχυνσης. Για τα σημαντικότερα εξ αυτών έγινε ανάλυση ευστάθειας κατά Fourier και βρέθηκε ότι τα σχήματα LBH3 και LBH5 βελτιώνουν σημαντικά τη σύγκλιση σε αντίθεση με το LBH1.

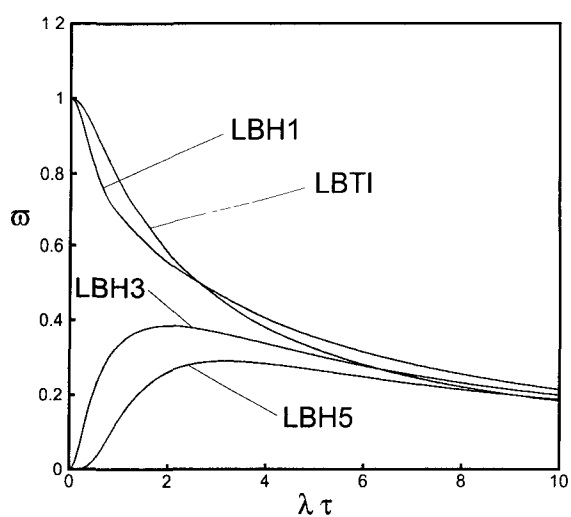
5.7 Πίνακες - Σχήματα

Πίνακας 5.1: Ακτίνα σύγκλισης για τα σχήματα *LB1*, *LB1*, *LB3* και *LB5*.

Μέθοδος	<i>LB1</i>	<i>LB1</i>	<i>LB3</i>	<i>LB5</i>
Ακτίνα σύγκλισης	1	1	0.3852	0.2884



Σχήμα 5.1: Διακύμανση των ιδιοτιμών ω_{LBKI} σε όλο το εύρος των ιδιοτιμών και για διάφορες τιμές του χρόνου χαλάρωσης τ .



Σχήμα 5.2: Διακύμανση των ιδιοτιμών ω_{LBKI} σε όλο το εύρος της παραμέτρου $\lambda\tau$ και για διάφορα σχήματα επιτάχυνσης.

Κεφάλαιο 6

Μονοδιάστατες ροές μειγμάτων αερίων

6.1 Εισαγωγή

Η ανάπτυξη της περιοχής της μικρομηχανικής όπως έχει ήδη αναφερθεί έχει προκαλέσει το έντονο ενδιαφέρον για τη μελέτη της συμπεριφοράς των ρευστών σε αντίστοιχες διαστάσεις. Από τους σημαντικότερους τύπους ροών με μεγάλο τεχνολογικό ενδιαφέρον είναι βέβαια οι εσωτερικές ροές και ειδικότερα αυτές εντός αγωγών. Είναι η συνηθέστερη περίπτωση και αφορά πλήθος εφαρμογών. Η περίπτωση όπου το ρευστό αποτελείται από ένα και μόνο συστατικό έχει μελετηθεί πλήρως, τουλάχιστον για μονοδιάστατα προβλήματα, ενώ αντίθετα οι ροές μειγμάτων, αν και αποτελούν πολύ σημαντικό τμήμα των εφαρμογών, είναι σχετικά ανεξερεύνητες (βλ. Κεφάλαιο 2.2.3).

Το μεγαλύτερο μέρος της ερευνητικής προσπάθειας, έχει επικεντρωθεί στον υπολογισμό των συντελεστών ολίσθησης. Η εστίαση αυτή μπορεί εύκολα να εξηγηθεί μιας και η μέχρι σήμερα βασική μέθοδος αντιμετώπισης προβλημάτων της μεταβατικής περιοχής βασίζεται στην επίλυση των εξισώσεων Navier-Stokes με την κατάλληλη προσαρμογή των οριακών συνθηκών κάτι όμως που προϋποθέτει τη γνώση των συντελεστών ολίσθησης. Η προσέγγιση όμως αυτή έχει περιορισμένες δυνατότητες ως προς το εύρος του αριθμού Knudsen που καλύπτει. Έτσι, η μόνη ολοκληρωμένη προσέγγιση δεν μπορεί παρά να βασίζεται στην κινητική θεωρία, μιας και αποτελεί τη μοναδική μέθοδο για υπολογισμούς στη μεταβατική περιοχή ενώ διατηρεί και τη δυνατότητα ενιαίας αντιμετώπισης όλου του φάσματος των τιμών του αριθμού Knudsen.

Στο παρόν Κεφάλαιο αναπτύσσεται η εφαρμογή της γραμμικοποιημένης εξίσωσης Boltzmann με μοντέλο συγκρούσεων το McCormack για την επίλυση της ροής μεταξύ δύο παράλληλων πλακών υπό την επίδραση κλίσης πίεσης, θερμοκρασίας και συγκέντρωσης [15]. Γίνεται ανάλυση των αποτελεσμάτων τόσο για τα κύρια φαινόμενα μεταφοράς όσο και για τα δευτερεύοντα. Παρουσιάζονται αριθμητικά αποτελέσματα που αφορούν τη παροχή μάζας, τη παροχή θερμότητας και την σχετική παροχή του κάθε συστατικού ως τη μέση τιμή (παροχή διάχυσης) για δύο διαφορετικά μείγματα αερίων και όλο το εύρος της συγκέντρωσης. Ταυτόχρονα, εξετάζεται και η επίδραση του νόμου αλληλεπίδρασης των σωματιδίων μέσω της εφαρμογής του μοντέλου των συμπαγών σφαιρών αλλά και πραγματικού δυναμικού που βασίζεται σε πειραματικά δεδομένα. Το αριθμητικό σχήμα που

επιλέχθηκε είναι η μέθοδος των διακριτών ταχυτήτων (DVM) που αποτελεί αξιόπιστη και καθαρά αριθμητική προσέγγιση, ενώ έγινε εφαρμογή και του σχήματος επιτάχυνσης που παρουσιάστηκε στο Κεφάλαιο 4.

6.2 Ορισμοί και διατύπωση του προβλήματος

Το υπό μελέτη πρόβλημα αφορά την ροή μεταξύ δύο παραλλήλων πλακών μεγάλου μήκους που απέχουν μεταξύ τους απόσταση H και οι πλάκες βρίσκονται στις θέσεις $y' = \pm H/2$ (βλ. Σχήμα 6.1). Η ροή προκαλείται από μικρές κλίσεις πίεσης, θερμοκρασίας και συγκέντρωσης που ορίζονται ως

$$X_P = \frac{H}{P} \frac{\partial P}{\partial z'}, \quad X_T = \frac{H}{T} \frac{\partial T}{\partial z'}, \quad X_C = \frac{H}{C} \frac{\partial C}{\partial z'}, \quad (6.1)$$

αντίστοιχα. Το μικρό μέγεθος των κλίσεων σημαίνει ότι

$$|X_P| \ll 1, \quad |X_T| \ll 1, \quad |X_C| \ll 1. \quad (6.2)$$

Η διαμήκης διάσταση είναι z' , ενώ P , T και C είναι η πίεση, η θερμοκρασία και η μοριακή συγκέντρωση σε κάποια δεδομένη διατομή. Η μοριακή συγκέντρωση ορίζεται ως

$$C = \frac{n_1}{n_1 + n_2} \quad (6.3)$$

όπου n_a ($a = 1, 2$) είναι η αριθμητική πυκνότητα του συστατικού a όπως αυτή ορίστηκε στη σχέση (3.3). Επιπλέον όπως αναφέρθηκε το μήκος των πλακών είναι πολύ μεγάλο σε σχέση με την απόσταση μεταξύ τους και επομένως αγνοούνται τα φαινόμενα εισόδου και εξόδου στο κανάλι (end effects), ενώ θεωρείται ότι τα μακροσκοπικά μεγέθη της ταχύτητας \mathbf{u}' και της θερμορροής \mathbf{q}' έχουν συνιστώσα μόνο στη διαμήκη διεύθυνση, και μεταβολές μόνο στην κάθετη στις πλάκες διεύθυνση, δηλαδή ισχύει:

$$\mathbf{u}' = (0, 0, u'(y)), \quad \mathbf{q}' = (0, 0, q'(y)) \quad (6.4)$$

ενώ από το μητρώο των τάσεων μη μηδενικές τιμές έχουν μόνο τα στοιχεία Π'_{yz} (και Π'_{zy}).

Οι ποσότητες με πρακτικό ενδιαφέρον είναι η παροχή μάζας, η παροχή θερμότητας και παροχή λόγω διάχυσης που δίνονται από τις σχέσεις

$$J_M = \int_{-H/2}^{H/2} \rho u' dy', \quad (6.5)$$

$$J_H = \int_{-H/2}^{H/2} q' dy', \quad (6.6)$$

$$J_D = \int_{-H/2}^{H/2} \rho_1 (u'_1 - u') dy' = \int_{-H/2}^{H/2} \frac{\rho_1 \rho_2}{\rho} (u'_1 - u'_2) dy', \quad (6.7)$$

αντίστοιχα. Η πυκνότητα του μείγματος

$$\rho = \rho_1 + \rho_2, \quad (6.8)$$

όπου $\rho_a = n_a m_a$ είναι η πυκνότητα του κάθε συστατικού και m_a ($a = 1, 2$) η αντίστοιχη μοριακή μάζα. Η μακροσκοπική ταχύτητα του μείγματος ορίζεται ως

$$u' = \frac{1}{\rho}(\rho_1 u'_1 + \rho_2 u'_2), \quad (6.9)$$

με u'_1 και u'_2 να είναι οι μακροσκοπικές ταχύτητες των δύο συστατικών. Είναι επίσης βολικό να οριστούν η μέση ταχύτητα του μείγματος

$$w = \frac{1}{n}(n_1 u'_1 + n_2 u'_2) \quad (6.10)$$

και η ειδική θερμορροή

$$q^* = q' - \frac{5}{2}P(w - u'). \quad (6.11)$$

Η παράμετρος αραιοποίησης δ (βλ. και σχέση 3.40) στο υπό μελέτη πρόβλημα ισούται με

$$\delta = \frac{HP_0}{\mu(T_0)} \sqrt{\frac{m}{2kT_0}}. \quad (6.12)$$

Υπενθυμίζεται ότι P_0 και T_0 είναι η πίεση και η θερμοκρασία αναφοράς αντίστοιχα, μ το ιξώδες στη θερμοκρασία T_0 , k η σταθερά Boltzmann ενώ m είναι η μέση μοριακή μάζα που ορίζεται ως

$$m = C_0 m_1 + (1 - C_0) m_2, \quad (6.13)$$

με C_0 να είναι η μοριακή συγκέντρωση ισορροπίας.

Το μικρό μέγεθος των δυνάμεων που προκαλούν τη ροή επιτρέπει τη χρησιμοποίηση της γραμμικοποιημένης εξίσωσης Boltzmann. Στην περίπτωση των μειγμάτων υπάρχει μια συνάρτηση κατανομής για κάθε συστατικό και αντίστοιχα από μια κατανομή ισορροπίας. Επομένως η γραμμικοποίηση της εξίσωσης του κάθε συστατικού γίνεται ως προς την αντίστοιχη κάθε φορά κατανομή ισορροπίας, δηλαδή

$$f_a(y', z', \mathbf{v}_a) = f_a^0(z', \mathbf{v}_a)[1 + h_a(y', \mathbf{v}_a)], \quad |h_a| \ll 1, \quad (6.14)$$

με

$$f_a^0(z', \mathbf{v}_a) = n_{0a}(z') \left[\frac{m_a}{2\pi kT(z')} \right]^{3/2} \exp \left[-\frac{m_a v_a^2}{2kT(z')} \right] \quad (6.15)$$

όπου $h_a(y', \mathbf{v}')$ είναι η συνάρτηση της απόκλισης για το συστατικό a και με \mathbf{v}_a συμβολίζεται η διαστατή ταχύτητα. Επιπλέον η αδιαστατοποίηση των ταχυτήτων γίνεται με διαφορετική για κάθε συστατικό σταθερά, ενώ τα μεγέθη μήκους αδιαστατοποιούνται ως προς την απόσταση μεταξύ των πλακών και επομένως ισχύει:

$$\mathbf{c}_a = \sqrt{\frac{m_a}{2kT_0}} \mathbf{v}_a, \quad z = \frac{z'}{H}, \quad y = \frac{y'}{H}. \quad (6.16)$$

Έτσι το σύστημα των δύο διαφορικών εξισώσεων έχει τη μορφή

$$c_{\alpha y} \frac{\partial h_{\alpha}}{\partial y} = \omega_{\alpha} \sum_{\beta=1}^2 L_{\alpha\beta} h_{\alpha} - c_{\alpha z} \left[X_P + \eta_{\alpha} X_C + \left(c_{\alpha}^2 - \frac{5}{2} \right) X_T \right], \quad \alpha = 1, 2, \quad (6.17)$$

όπου

$$\eta_1 = 1, \quad \eta_2 = -\frac{C_0}{(1 - C_0)}, \quad (6.18)$$

και

$$\omega_{\alpha} = H \sqrt{\frac{m_{\alpha}}{2kT_0}}. \quad (6.19)$$

Ο όρος των συγκρούσεων $L_{\alpha\beta} h_{\alpha}$ αντικαθίσταται από το μοντέλο του McCormack [39] που περιγράφηκε στη Παράγραφο 3.8. Στην περίπτωση του υπό μελέτη προβλήματος, ορισμένοι όροι μπορούν να απαλειφθούν, όπως για παράδειγμα η θερμοκρασία, ενώ αν αξιοποιηθεί και η μονοδιάστατη φύση της ροής η τελική μορφή που προκύπτει είναι

$$\begin{aligned} L_{\alpha\beta} h_{\alpha} = & -\gamma_{\alpha\beta} h_{\alpha} + 2 \sqrt{\frac{m_{\alpha}}{m}} \left[\gamma_{\alpha\beta} u_{\alpha} - v_{\alpha\beta}^{(1)} (u_{\alpha} - u_{\beta}) - \frac{1}{2} v_{\alpha\beta}^{(2)} \left(q_{\alpha} - \frac{m_{\alpha}}{m_{\beta}} q_{\beta} \right) \right] c_{\alpha x} \\ & + 4 \left[(\gamma_{\alpha\beta} - v_{\alpha\beta}^{(3)}) \Pi_{\alpha} + v_{\alpha\beta}^{(4)} \Pi_{\beta} \right] c_{\alpha x} c_{\alpha y} + \frac{4}{5} \sqrt{\frac{m_{\alpha}}{m}} \left[(\gamma_{\alpha\beta} - v_{\alpha\beta}^{(5)}) q_{\alpha} \right. \\ & \left. + v_{\alpha\beta}^{(6)} \sqrt{\frac{m_{\beta}}{m_{\alpha}}} q_{\beta} - \frac{5}{4} v_{\alpha\beta}^{(2)} (u_{\alpha} - u_{\beta}) \right] c_{\alpha x} \left(c_{\alpha}^2 - \frac{5}{2} \right), \quad \alpha, \beta = 1, 2 \end{aligned} \quad (6.20)$$

Οι αδιάστατες πλέον μακροσκοπικές ιδιότητες (που αποτελούν βέβαια και ροπές της απόκλισης) είναι

$$u_{\alpha}(y) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \sqrt{\frac{m}{m_{\alpha}}} \int c_{\alpha x} h_{\alpha}(y, \mathbf{c}) \exp(-c_{\alpha}^2) d\mathbf{c}_{\alpha}, \quad (6.21)$$

$$q_{\alpha}(y) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \sqrt{\frac{m}{m_{\alpha}}} \int c_{\alpha x} \left(c_{\alpha}^2 - \frac{5}{2} \right) h_{\alpha}(y, \mathbf{c}) \exp(-c_{\alpha}^2) d\mathbf{c}_{\alpha} \quad (6.22)$$

και

$$\Pi_{\alpha}(y) = \pi^{-3/2} \int c_{\alpha x} c_{\alpha y} h_{\alpha}(y, \mathbf{c}) \exp(-c_{\alpha}^2) d\mathbf{c}_{\alpha}. \quad (6.23)$$

Επίσης οι αδιάστατες ποσότητες συνδέονται με τις διαστατές μέσω των σχέσεων

$$u'_{\alpha} = \sqrt{\frac{2kT_0}{m}} u_{\alpha}, \quad (6.24)$$

$$w = \sqrt{\frac{2kT_0}{m}} [C_0 u_1 + (1 - C_0) u_2], \quad (6.25)$$

και

$$q^* = P_0 \sqrt{\frac{2kT_0}{m}} [C_0 q_1 + (1 - C_0) q_2]. \quad (6.26)$$

Χρησιμοποιώντας πάντως τις σχέσεις (6.12), (6.19) καθώς και τις σχέσεις της Παραγράφου 3.8, προκύπτει ότι

$$\omega_\alpha = \delta \left[\frac{C_0}{\gamma_1} + \frac{1 - C_0}{\gamma_2} \right] \sqrt{\frac{m_\alpha}{m}}, \quad (6.27)$$

με γ_a ($a = 1, 2$) να είναι οι συχνότητες των συγκρούσεων.

Στη συνέχεια και εφόσον η εξίσωση (6.17) είναι γραμμική, μπορεί να γίνει ο διαχωρισμός της λύσης ως

$$h_\alpha = h_\alpha^{(P)} X_P + h_\alpha^{(T)} X_T + h_\alpha^{(C)} X_C, \quad (6.28)$$

και επομένως οι ροπές της μπορούν να αποσυνθεθούν ως

$$u_\alpha = u_\alpha^{(P)} X_P + u_\alpha^{(T)} X_T + u_\alpha^{(C)} X_C, \quad (6.29)$$

$$q_\alpha = q_\alpha^{(P)} X_P + q_\alpha^{(T)} X_T + q_\alpha^{(C)} X_C, \quad (6.30)$$

$$\Pi_\alpha = \Pi_\alpha^{(P)} X_P + \Pi_\alpha^{(T)} X_T + \Pi_\alpha^{(C)} X_C. \quad (6.31)$$

Τέλος, από την ολοκλήρωση των μακροσκοπικών μεγεθών της ταχύτητας και της θερμορροής μπορούν να προκύψουν τα μεγέθη της ανοιγμένης παροχής μάζας και της παροχής θερμότητας

$$U_\alpha^{(i)} = -2 \int_{-1/2}^{1/2} u_\alpha^{(i)}(y) dy \quad (6.32)$$

$$Q_\alpha^{(i)} = -2 \int_{-1/2}^{1/2} q_\alpha^{(i)}(y) dy \quad (6.33)$$

αντίστοιχα, για $a = 1, 2$ και $i = P, T, C$.

Στη συνέχεια θα παρουσιαστούν τα αποτελέσματα από την επίλυση της εξίσωσης (6.17) και ειδικότερα οι κατανομές της ταχύτητας της θερμορροής και των διατμητικών τάσεων καθώς επίσης και τα συγκεντρωτικά μεγέθη της παροχής μάζας και θερμότητας. Οι οριακές συνθήκες που χρησιμοποιήθηκαν ήταν τύπου διάχυσης χωρίς ανάκλαση.

6.3 Θερμοδυναμική ανάλυση

Μια γενική θερμοδυναμική ανάλυση για μια σειρά θερμοδυναμικών συστημάτων μπορεί να βρεθεί στην αναφορά [203], η οποία βασίζεται στην αρχή της θερμοδυναμικής ισορροπίας και επομένως έχει ισχύ μόνο στην υδροδυναμική περιοχή. Μια τέτοια ανάλυση επιτρέπει την ανάκτηση των σχέσεων αμοιβαιότητας των Onsager-Kasimir και την μείωση του αριθμού των κινητικών συντελεστών που είναι απαραίτητοι για τον προσδιορισμό μη-αντιστρεπτών φαινομένων. Αντίστοιχες σχέσεις σε γενική μορφή και χωρίς την παραδοχή της τοπικής ισορροπίας, δηλαδή με ισχύ σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen, έχουν εξαχθεί πρόσφατα [204, 205, 206]. Για την περίπτωση της ροής μείγματος μέσα σε κύλινδρο οι σχέσεις αυτές δίνονται στην αναφορά [121]. Στη συνέχεια διατυπώνονται οι αντίστοιχες σχέσεις για την ροή μεταξύ παράλληλων πλακών.

Είναι γνωστό ότι οι παροχές J_P , J_T και J_C όπως αυτές ορίστηκαν στις εξισώσεις (6.5-6.7) και είναι γραμμικά εξαρτημένες από τις θερμοδυναμικές δυνάμεις X_P , X_T και X_C , δεν ικανοποιούν τις σχέσεις Onsager-Kasimir. Για να ικανοποιηθούν οι σχέσεις ισοδυναμίας, πρέπει οι θερμοδυναμικές παροχές να οριστούν ως

$$J_P = -n_0 \int_{-H/2}^{H/2} w dy', \quad (6.34)$$

$$J_T = -\frac{1}{kT_0} \int_{-H/2}^{H/2} q^* dy', \quad (6.35)$$

$$J_C = -n_{01} \int_{-H/2}^{H/2} (u'_1 - u'_2) dy'. \quad (6.36)$$

Στην περίπτωση αυτή, οι θερμοδυναμικές παροχές σχετίζονται με τις θερμοδυναμικές δυνάμεις σε διανυσματική μορφή:

$$\begin{pmatrix} J_P \\ J_T \\ J_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Lambda'_{PP} & \Lambda'_{PT} & \Lambda'_{PC} \\ \Lambda'_{TP} & \Lambda'_{TT} & \Lambda'_{TC} \\ \Lambda'_{CP} & \Lambda'_{CT} & \Lambda'_{CC} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_P \\ X_T \\ X_C \end{pmatrix} \quad (6.37)$$

και από τη στιγμή που οι θερμοδυναμικές δυνάμεις που θεωρούνται στη παρούσα ροή δεν αντιστρέφουν το πρόσημό τους με την αντιστροφή του χρόνου, οι σχέσεις Onsager-Kasimir παίρνουν τη μορφή

$$\Lambda'_{PT} = \Lambda'_{TP}, \quad \Lambda'_{PC} = \Lambda'_{CP}, \quad \Lambda'_{TC} = \Lambda'_{CT}. \quad (6.38)$$

Όλοι οι κινητικοί συντελεστές έχουν τις ίδιες διαστάσεις και για το λόγο αυτό επιλέγεται στη συνέχεια να χρησιμοποιούνται στην μορφή:

$$\Lambda_{ij} = \frac{2}{n_0 H} \sqrt{\frac{m}{2kT_0}} \Lambda'_{ij}. \quad (6.39)$$

Αν οι αδιάστατοι κινητικοί συντελεστές Λ_{ij} ($i, j = P, T, C$), όπως ονομάζονται είναι γνωστοί, τότε και οι παροχές J_P , J_T και J_C μπορούν πολύ εύκολα να προσδιοριστούν μέσω της σχέσης (6.37). Στη συνέχεια οι παροχές με πρακτικό ενδιαφέρον J_M , J_H και J_D μπορούν να υπολογιστούν από τις σχέσεις

$$J_M = -mJ_P + (m_2 - m_1)(1 - C_0)J_C, \quad (6.40)$$

$$J_H = -kT_0 \left[J_T + \frac{5}{2} \frac{m_2 - m_1}{m} (1 - C_0)J_C \right] \quad (6.41)$$

$$J_D = -\frac{m_1 m_2}{m} (1 - C_0)J_C. \quad (6.42)$$

Στο σημείο αυτό είναι πλέον απαραίτητος ο προσδιορισμός των συντελεστών Λ_{ij} ($i, j = P, T, C$) ως συνάρτηση των υπολογιζόμενων μεγεθών της ανοιγμένης παροχής μάζας και θερμότητας που δόθηκαν από τις σχέσεις (6.32-6.33). Συνδυάζοντας τις εξισώσεις (6.34-6.36) με τις (6.37),(6.38),(6.29) και (6.30) προκύπτει

$$\Lambda_{Pi} = C_0 U_1^{(i)} + (1 - C_0) U_2^{(i)}, \quad (6.43)$$

$$\Lambda_{Ti} = C_0 Q_1^{(i)} + (1 - C_0) Q_2^{(i)}, \quad (6.44)$$

και

$$\Lambda_{Ci} = C_0 [U_1^{(i)} - U_2^{(i)}], \quad (6.45)$$

με $i = P, T, C$. Έτσι ο συνολικός αριθμός των εννιά αγνώστων συντελεστών μειώνεται τελικά στους έξι με τη χρήση των σχέσεων Onsager-Kasimir.

6.4 Λύσεις στο υδροδυναμικό όριο

Στην υδροδυναμική περιοχή, η επίλυση των εξισώσεων συνέχειας με τη χρήση του ιξώδους και του θερμικού συντελεστή ολίσθησης καθώς και του αντίστοιχου συντελεστή διάχυσης, δίνουν την παρακάτω λύση όσον αφορά τη κατανομή της ταχύτητας

$$u' = -\frac{P_0 H}{2\mu} \left(\frac{1}{4} - y^2 + \frac{\sigma_p}{\delta} \right) X_p + \frac{\mu}{H\rho} (\sigma_T X_T + \sigma_C X_C). \quad (6.46)$$

Για το υπολογισμό των αντίστοιχων κατανομών για την θερμοροή και την ροή διάχυσης, εφαρμόζονται οι νόμοι των Fourier και Fick. Σύμφωνα με την προσέγγιση πρώτης τάξης των Chapman - Enskog προκύπτει

$$q^* = -\kappa \frac{T_0}{H} X_T + P_0 C_0 (1 - C_0) \alpha_T (u'_1 - u'_2), \quad (6.47)$$

και

$$u'_1 - u'_2 = -\frac{D_{12}}{H} \left[\frac{m_2 - m_1}{m} X_p + \alpha_T X_T + \frac{1}{1 - C_0} X_C \right], \quad (6.48)$$

όπου κ είναι η θερμική αγωγιμότητα, D_{12} είναι ο συντελεστής διάχυσης και α_T είναι ο συντελεστής της θερμικής διάχυσης. Οι εκφράσεις για τους συντελεστές μεταφοράς μ , κ , D_{12} και α_T δίνονται στην αναφορά [121]¹. Οι συντελεστές ολίσθησης σ_p , σ_T και σ_C που έχουν προκύψει από την εφαρμογή του μοντέλου McCormack δίνονται στις [41, 42, 43], αντίστοιχα. Οι εξισώσεις (6.47) και (6.48) δεν είναι βέβαια πλήρεις εφόσον ορισμένοι όροι πρώτης τάξης ως προς τον αριθμό Knudsen δηλαδή $O(1/\delta)$, εμφανίζονται μόνο αν χρησιμοποιηθεί η προσέγγιση δεύτερης τάξης των Chapman - Enskog. Επιπλέον οι ροές θερμότητας και διάχυσης στο οριακό στρώμα Knudsen περιλαμβάνει ομοίως όρους πρώτης τάξης. Επομένως αν οι συντελεστές Λ_{CP} και Λ_{TP} εξαχθούν από τις εξισώσεις (6.47) και

¹Σημειώνεται ότι μπροστά από το δεξί μέρος της εξίσωσης (73) του άρθρου [121], έχει παραλειφθεί ένα μείον από αμέλεια

(6.48), δεν θα ικανοποιούνται οι σχέσεις ισοδυναμίας (6.38). Αντίθετα, η εξίσωση (6.46) περιλαμβάνει όλους τους όρους πρώτης τάξης $O(1/\delta)$ και επομένως από εκεί μπορούν να εξαχθούν οι συντελεστές Λ_{PC} και Λ_{PT} . Στη συνέχεια μέσω της σχέσης (6.38) προκύπτουν οι τιμές για τους συντελεστές Λ_{CP} και Λ_{TP} . Με βάση αυτή τη συλλογιστική λαμβάνονται οι οριακές τιμές στο υδροδυναμικό όριο:

$$\Lambda_{PP} = \frac{\delta}{6} + \sigma_P \quad (6.49)$$

$$\Lambda_{TT} = \frac{\rho}{\mu} \left[\kappa \frac{T_0}{P_0} + C_0(1 - C_0)\alpha_T^2 D_{12} \right] \frac{1}{\delta}, \quad (6.50)$$

$$\Lambda_{CC} = \frac{C_0 \rho D_{12}}{(1 - C_0)\mu} \frac{1}{\delta}, \quad (6.51)$$

$$\Lambda_{PC} = \Lambda_{CP} = \left[\frac{n_{01} D_{12}}{\mu} (m_2 - m_1) - \sigma_C \right] \frac{1}{\delta}, \quad (6.52)$$

$$\Lambda_{PT} = \Lambda_{TP} = \left[\frac{n_{01}(1 - C_0) D_{12} \alpha_T}{\mu} (m_2 - m_1) - \sigma_T \right] \frac{1}{\delta}, \quad (6.53)$$

$$\Lambda_{TC} = \Lambda_{CT} = \frac{n_{01} m D_{12} \alpha_T}{\mu} \frac{1}{\delta}. \quad (6.54)$$

και οι οποίες αποτελούν ένα πλήρες σύνολο αναλυτικών εκφράσεων για τον καθορισμό των αδιάστατων κινητικών συντελεστών στο υδροδυναμικό όριο.

6.5 Αριθμητικό σχήμα

Εφόσον η ροή είναι μονοδιάστατη και πλήρως ανεπτυγμένη μπορεί να εφαρμοστεί και εδώ (όπως και στο προηγούμενο Κεφάλαιο) η τεχνική απαλοιφής των δύο συνιστωσών της μικροσκοπικής ταχύτητας, δηλαδή των c_{ax} και c_{az} ($a = 1, 2$), εισάγοντας τις ποσότητες

$$\Phi_\alpha(y, c_{\alpha y}) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} h_\alpha(y, \mathbf{c}_\alpha) c_{\alpha z} e^{-c_{\alpha x}^2 - c_{\alpha z}^2} dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} \quad (6.55)$$

και

$$\Psi_\alpha(y, c_{\alpha y}) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} h_\alpha(y, \mathbf{c}_\alpha) c_{\alpha z} (c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2 - 2) e^{-c_{\alpha x}^2 - c_{\alpha z}^2} dc_{\alpha x} dc_{\alpha z}. \quad (6.56)$$

Η εξίσωση (6.17) πολλαπλασιάζεται διαδοχικά με

$$\phi_\alpha(c_{\alpha x}, c_{\alpha z}) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} c_{\alpha z} e^{-c_{\alpha x}^2 - c_{\alpha z}^2} \quad (6.57)$$

και

$$\psi_\alpha(c_{\alpha x}, c_{\alpha z}) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} c_{\alpha z} (c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2 - 2) e^{-c_{\alpha x}^2 - c_{\alpha z}^2} \quad (6.58)$$

και οι προκύπτουσες εκφράσεις ολοκληρώνονται ως προς c_{ax} και c_{ay} . Με τις προβολές αυτές δημιουργείται ένα σύστημα τεσσάρων συζευγμένων ολοκληροδιαφορικών εξισώσεων που είναι:

$$\begin{aligned}
c_{ay} \frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial y} + \omega_\alpha \gamma_\alpha \Phi_\alpha = & -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} \left[X_p + \eta_\alpha X_c + \left(c_{ay}^2 - \frac{1}{2} \right) X_T \right] \\
& + \omega_\alpha \left\{ \gamma_\alpha u_\alpha - \nu_{\alpha\beta}^{(1)} (u_\alpha - u_\beta) - \frac{1}{2} \nu_{\alpha\beta}^{(2)} \left(q_\alpha - \frac{m_\alpha}{m_\beta} q_\beta \right) \right\} \\
& + 2 \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} \left[\left(\gamma_\alpha - \nu_{\alpha\alpha}^{(3)} + \nu_{\alpha\alpha}^{(4)} - \nu_{\alpha\beta}^{(3)} \right) \Pi_\alpha + \nu_{\alpha\beta}^{(4)} \Pi_\beta \right] c_{ay} \\
& + \frac{2}{5} \left[\left(\gamma_\alpha - \nu_{\alpha\alpha}^{(5)} + \nu_{\alpha\alpha}^{(6)} - \nu_{\alpha\beta}^{(5)} \right) q_\alpha + \nu_{\alpha\beta}^{(6)} \sqrt{\frac{m_\beta}{m_\alpha}} q_\beta \right. \\
& \left. - \frac{5}{4} \nu_{\alpha\beta}^{(2)} (u_\alpha - u_\beta) \right] \left(c_{ay}^2 - \frac{1}{2} \right), \quad \alpha = 1, 2, \quad \beta \neq \alpha, \quad (6.59)
\end{aligned}$$

και

$$\begin{aligned}
c_{ay} \frac{\partial \Psi_\alpha}{\partial h} + \omega_\alpha \gamma_\alpha \Psi_\alpha = & -\sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} X_T + \omega_\alpha \frac{4}{5} \left[\left(\gamma_\alpha - \nu_{\alpha\alpha}^{(5)} + \nu_{\alpha\alpha}^{(6)} - \nu_{\alpha\beta}^{(5)} \right) q_\alpha \right. \\
& \left. + \nu_{\alpha\beta}^{(6)} \sqrt{\frac{m_\beta}{m_\alpha}} q_\beta - \frac{5}{4} \nu_{\alpha\beta}^{(2)} (u_\alpha - u_\beta) \right], \quad \alpha = 1, 2, \quad \beta \neq \alpha, \quad (6.60)
\end{aligned}$$

όπου

$$u_\alpha(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_\alpha e^{-c_{ay}^2} dc_{ay}, \quad (6.61)$$

$$q_\alpha(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\Psi_\alpha + \left(c_{ay}^2 - \frac{1}{2} \right) \Phi_\alpha \right] e^{-c_{ay}^2} dc_{ay}, \quad (6.62)$$

$$\Pi_\alpha(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{m_\alpha}{m}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_\alpha c_{ay} e^{-c_{ay}^2} dc_{ay}. \quad (6.63)$$

με $a = 1, 2$. Η διακριτοποίηση στο χώρο των ταχυτήτων γίνεται με την εφαρμογή της μεθόδου των διακριτών ταχυτήτων (DVM). Οι διακριτές ταχύτητες επιλέγονται με βάση το σχήμα ολοκλήρωσης για το προσδιορισμό των μακροσκοπικών ιδιοτήτων. Το σχήμα ολοκλήρωσης που χρησιμοποιήθηκε στην παρούσα εργασία βασίστηκε στην ολοκλήρωση Gauss-Hermite και επομένως οι διακριτές ταχύτητες ήταν οι ρίζες του πολυωνύμου Hermite. Προκειμένου να επιτευχθεί μέγιστη ακρίβεια, επιλέχθηκε το πολυώνυμο τάξης 128. Αυτό κρίθηκε απαραίτητο αφού με μικρότερο αριθμό ταχυτήτων η ανάλυση ευαισθησίας έδειξε ότι η λύση δεν ήταν ανεξάρτητη του αριθμού των ταχυτήτων.

Στον φυσικό χώρο η διακριτοποίηση έγινε με την εφαρμογή του σχήματος Diamond-Difference[194]. Σύμφωνα με αυτό η απόσταση H διαιρείται σε K τμήματα και οι επιλυόμενες εξισώσεις διακριτοποιούνται στο μέσο αυτών. Για τις πρώτες παραγώγους χρησιμοποιείται κεντρώα παραγωγή ενώ όλα τα άλλα μεγέθη προσεγγίζονται με βάση τις

τιμές τους στα δύο άκρα του κάθε διαστήματος με συντελεστές στάθμισης. Όταν οι συντελεστές αυτοί είναι ίσοι μεταξύ τους τότε το σχήμα ονομάζεται *Diamond-Difference*. Ως αποτέλεσμα το σχήμα είναι δεύτερης τάξης.

Στην επίλυση της ροής όταν το δ αυξηθεί, παρουσιάζονται τα προβλήματα που ήδη έχουν αναφερθεί, δηλαδή πολύ αργή σύγκλιση και μειωμένη ακρίβεια οφειλόμενη στον μεγάλο αριθμό επαναλήψεων. Έτσι εφαρμόστηκε και σε αυτή τη περίπτωση το σχήμα επιτάχυνσης που παρουσιάστηκε στο Κεφάλαιο 4 και τα αποτελέσματα ήταν και πάλι εντυπωσιακά μειώνοντας τον αριθμό των επαναλήψεων μέχρι και τρεις τάξεις μεγέθους.

6.6 Αξιολόγηση αριθμητικών αποτελεσμάτων

Τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται σε αυτή τη παράγραφο εξήχθησαν με την μεθοδολογία που περιγράφηκε, ενώ η σύγκλισή τους έχει διαπιστωθεί με ανάλυση ευαισθησίας τόσο ως προς τον αριθμό των διακριτών ταχυτήτων όσο και ως προς την χωρική διακριτοποίηση. Χρησιμοποιήθηκαν 128 διακριτές τιμές για τις ταχύτητες και 101 σημεία για την χωρική διακριτοποίηση ($\Delta h = 10^{-2}$). Το κριτήριο σύγκλισης που αφορούσε το άθροισμα των απολύτων τιμών των σχετικών σφαλμάτων των μακροσκοπικών μεγεθών της ταχύτητας και της θερμοροής για κάθε συστατικό ορίστηκε 10^{-6} . Η ακρίβεια των αποτελεσμάτων επιβεβαιώθηκε επίσης με τις σχέσεις *Onsager-Kasimir* οι οποίες ικανοποιούνται με μεγάλη ακρίβεια, ενώ και η προσομοίωση της περίπτωσης του ενός αερίου (θέτοντας $m_1 = m_2$ και $d_1 = d_2$) δίνει τα αποτελέσματα που υπάρχουν στη βιβλιογραφία με χρήση του μοντέλου *S* [76]. Ταυτόχρονα επιβεβαιώθηκε σε κάθε περίπτωση η ταυτότητα

$$C_0 \frac{\partial \Pi_1}{\partial y} + (1 - C_0) \frac{\partial \Pi_2}{\partial y} = X_P + C_0 X_C, \quad (6.64)$$

η οποία προκύπτει από την αναλυτική επεξεργασία των εξισώσεων μεταφοράς και εκφράζει τη διατήρηση της ορμής. Τέλος και η σύγκριση με τα αποτελέσματα στο υδροδυναμικό όριο που παρουσιάστηκαν στη παράγραφο 6.4 επιβεβαίωσε την ακρίβεια των αριθμητικών αποτελεσμάτων. Η επιβεβαίωση αυτή αφορά τόσο τον απλό αριθμητικό κώδικα όσο και αυτόν με την εφαρμογή του σχήματος επιτάχυνσης, τα αποτελέσματα των οποίων βέβαια συμπίπτουν, εκτός από την περιοχή του υδροδυναμικού ορίου όπου ο απλός κώδικας παρουσιάζει κάποια απόκλιση η οποία έχει ήδη εξηγηθεί.

Τα μείγματα τα οποία επιλέχθηκαν ήταν του Νέου με το Αργό (*Ne - Ar*) και του Ήλιου με το Ξένιο (*He - Xe*). Οι μοριακές μάζες του κάθε συστατικού είναι αντίστοιχα $m_{Ne} = 20.183$, $m_{Ar} = 39.948$, $m_{He} = 4.0026$ και $m_{Xe} = 131.3$. Όπως γίνεται φανερό τα αποτελέσματα αφορούν ένα μείγμα του οποίου τα συστατικά έχουν μοριακές μάζες με μικρή διαφορά και ένα μείγμα του οποίου τα συστατικά έχουν πολύ διαφορετικές μοριακές μάζες.

Προκειμένου να εξεταστεί η επίδραση του μοντέλου των σωματιδιακών συγκρούσεων στους κινητικούς συντελεστές, εξετάστηκαν το μοντέλο των συμπαγών σφαιρών καθώς και αυτό του πραγματικού δυναμικού το οποίο προκύπτει από πειραματικά δεδομένα. Στην πρώτη περίπτωση οι μοριακές διαμέτροι d_a για κάθε συστατικό a υπολογίζονται με βάση

τη σχέση για το ιξώδες

$$\mu_\alpha = 1.016034 \frac{5}{16} \frac{\sqrt{\pi m_\alpha k T}}{\pi d_\alpha^2} \quad (6.65)$$

που έχει προκύψει από την εξίσωση Boltzmann [207, 208]. Τα πειραματικά δεδομένα για το ιξώδες του κάθε συστατικού (*He*, *Xe*, *Ne* και *Ar*) ελήφθησαν για θερμοκρασία $T = 300^\circ K$ [25]. Ο λόγος των σωματιδιακών διαμέτρων d_2/d_1 προέκυψε ίσος με 1.406 για το μείγμα *Ne* – *Ar* και 2.226 για το μείγμα *He* – *Xe*. Στην περίπτωση του πραγματικού δυναμικού χρησιμοποιήθηκαν οι σχέσεις που περιγράφονται στην Παράγραφο 3.8 για τον υπολογισμό των ολοκληρωμάτων Ω ενώ η θερμοκρασία θεωρήθηκε και πάλι $T = 300^\circ K$. Οι τιμές που προέκυψαν για τους συντελεστές μετατροπής $\omega_{\alpha\beta}^{ij}$ για τα δύο μείγματα που μελετώνται δίνονται στον Πίνακα 6.8. Σημειώνεται ότι με βάση τα ολοκληρώματα αυτά μπορούν να υπολογιστούν με πειραματική ακρίβεια όλοι οι μακροσκοπικοί συντελεστές μεταφοράς.

Οι αδιάστατοι κινητικοί συντελεστές Λ_{ij} ($i, j = P, T, C$) για τα δύο μείγματα παρουσιάζονται στους Πίνακες 6.1 - 6.6. Οι υπολογισμοί αφορούν μεγάλο εύρος της παραμέτρου δ ($10^{-3} \leq \delta \leq 10^2$) και για τρεις διαφορετικές τιμές της μοριακής συγκέντρωσης $C_0 = 0.1, 0.5$ και 0.9 . Επίσης στον Πίνακα 6.7 δίνονται οι αριθμητικές τιμές που προκύπτουν για τους συντελεστές Λ_{ij} ($i, j = P, T, C$) από την ασυμπτωτική ανάλυση στο υδροδυναμικό όριο ($\delta \rightarrow \infty$).

Όπως φαίνεται υπάρχουν ορισμένες περιπτώσεις όπου οι αδιάστατοι κινητικοί συντελεστές έχουν αρνητικό πρόσημο. Η έννοια του είναι ότι η δευτερεύουσα ροή έχει φορά αντίθετη από την κύρια που προκαλεί η εφαρμοζόμενη θερμοδυναμική δύναμη. Για παράδειγμα το αρνητικό πρόσημο των συντελεστών Λ_{PT} και Λ_{CT} σημαίνει ότι υπάρχει ροή προκαλούμενη από κλίση θερμοκρασίας από την περιοχή χαμηλής θερμοκρασίας προς την περιοχή υψηλής θερμοκρασίας. Τα φαινόμενα αυτά όπως έχει ήδη αναφερθεί ονομάζονται θερμικός ερπυσμός και φαινόμενο Soret αντίστοιχα.

Σε όλες τις περιπτώσεις φαίνεται ότι για τον συντελεστή Λ_{PP} παρουσιάζεται το ονομαζόμενο και ελάχιστο σημείο Knudsen για $Kn \sim 1$, ενώ όλοι οι άλλοι συντελεστές μειώνονται καθώς το δ αυξάνει. Αντίστοιχη συμπεριφορά παρατηρείται και στην περίπτωση του ενός αερίου. Για μεγάλες τιμές του δ όπως φαίνεται στον Πίνακα 6.7 προσεγγίζει την ασυμπτωτική λύση, κάτι που συμβαίνει και για όλους τους υπόλοιπους συντελεστές επίσης. Ειδικότερα, για $\delta = 100$ η σύμπτωση των αποτελεσμάτων ήδη έχει υπερβεί αυτή των δύο σημαντικών ψηφίων.

Στη συνέχεια γίνεται σύγκριση των αποτελεσμάτων που δίνουν οι δύο διαφορετικές προσεγγίσεις για τον υπολογισμό των ολοκληρωμάτων των συγκρούσεων. Από τη μελέτη των αποτελεσμάτων φαίνεται ότι ο συντελεστής Λ_{PP} παραμένει ουσιαστικά ανεπηρέαστος από τον τύπο του δυναμικού που χρησιμοποιείται. Κάτι αντίστοιχο συμβαίνει και με τους συντελεστές Λ_{TT} και Λ_{PT} (ή Λ_{TP}) όπου η εξάρτηση υπάρχει μεν αλλά είναι πολύ μικρή. Αντίθετα οι συντελεστές που αφορούν ή προκαλούνται από διαφορές συγκέντρωσης, δηλαδή οι Λ_{CC} , Λ_{CP} (ή Λ_{PC}) και Λ_{CT} (ή Λ_{TC}) μεταβάλλονται αρκετά όταν αλλάζει ο τύπος των συγκρούσεων. Ιδιαίτερα για $\delta > 10^{-1}$ οι διαφορές γίνονται σημαντικές. Συμπερασματικά μπορεί να λεχθεί ότι η εφαρμογή του μοντέλου των συμπαγών σφαιρών δίνει σχετικά ακριβή αποτελέσματα για τους τέσσερις από τους εννιά κινητικούς συντελεστές

και επομένως θα πρέπει να αποφεύγεται όταν μελετώνται μείγματα και ιδιαίτερα όταν οι ποσότητες ενδιαφέροντος σχετίζονται με φαινόμενα διάχυσης. Επίσης σημειώνεται ότι η επίδραση του μοντέλου των σωματιδιακών συγκρούσεων είναι πολύ εντονότερη στο μείγμα $He - Xe$ παρά στο $Ne - Ar$ κάτι που βέβαια εξηγείται από τη σχέση των μοριακών μαζών των δύο συστατικών που παρουσιάζεται σε κάθε μείγμα.

Στη συνέχεια και στο Σχήμα 6.2 φαίνεται η συμπεριφορά των συντελεστών ως συνάρτηση της μοριακής συγκέντρωσης για $\delta = 1$. Σημειώνεται ότι το C_0 αναφέρεται εξ ορισμού στην συγκέντρωση του πρώτου συστατικού το οποίο σε κάθε περίπτωση είναι αυτό με τη μικρότερη μοριακή μάζα. Όπως είναι αναμενόμενο η επίδραση του C_0 είναι πολύ πιο έντονη στο μείγμα $He - Xe$ όπου τα δύο συστατικά διαφέρουν σημαντικά. Οι συντελεστές Λ_{PP} , Λ_{TT} και Λ_{PT} (ή Λ_{TP}) φαίνεται ότι έχουν μια εξάρτηση από τη συγκέντρωση C_0 αλλά όχι δραματική. Αντίθετα οι συντελεστές που σχετίζονται με φαινόμενα διάχυσης δηλαδή οι Λ_{CC} , Λ_{CP} (ή Λ_{PC}) και Λ_{CT} (ή Λ_{TC}) είναι αρκετά ευαίσθητοι σε μεταβολές του C_0 ιδιαίτερα δε ο συντελεστής Λ_{CC} ο οποίος αυξάνει προοδευτικά με την αύξηση της συγκέντρωσης του ελαφρύτερου συστατικού. Πρέπει να σημειωθεί πάντως ότι για τους συντελεστές Λ_{CC} , Λ_{CP} (ή Λ_{PC}) και Λ_{CT} (ή Λ_{TC}) οι τιμές για $C_0 = 1$ πρέπει να θεωρούνται ως ασυμπτωτικές προσεγγίσεις μιας και τιμή αυτή σημαίνει ότι το μείγμα αποτελείται από ένα μόνο συστατικό και τα φαινόμενα που εκφράζουν οι συντελεστές αυτοί παύουν να υπάρχουν.

Αντίστοιχη συμπεριφορά παρουσιάζεται και για άλλες τιμές του δ . Η μόνη ουσιαστική διαφορά έγκειται στην μεταβολή της συγκέντρωσης όπου παρουσιάζεται το μέγιστο των συντελεστών το οποίο μεταφέρεται σε μεγαλύτερες τιμές του C_0 όσο μεγαλώνει το δ .

Τέλος στα Σχήματα 6.3 - 6.8 παρουσιάζονται οι κατανομές της μακροσκοπικής ταχύτητας για τρεις διαφορετικές τιμές του δ ($\delta = 0.1, 1, 10$) και τρεις διαφορετικές συγκεντρώσεις $C_0 = 0.1, 0.5, 0.9$. Για $\delta = 0.1$ και 1 οι ταχύτητες των δύο συστατικών διαφέρουν αρκετά μεταξύ τους ενώ για $\delta = 10$ φαίνεται ότι προσεγγίζουν και αρχίζει να δημιουργείται προοδευτικά η γνωστή παραβολική κατανομή της ροής Poiseuille. Όταν η αιτία της κίνησης είναι μια κλίση πίεσης ή θερμοκρασίας, τότε το ελαφρύτερο συστατικό έχει μεγαλύτερη ταχύτητα ακόμα και κοντά στην υδροδυναμική περιοχή. Η κίνηση λόγω κλίσης θερμοκρασίας φαίνεται ότι προκαλεί κίνηση από τη ψυχρή περιοχή προς τη θερμή (θερμικός ερπυσμός). Τέλος, όταν γενεσιουργός αιτία της κίνησης είναι κλίση συγκέντρωσης, τότε οι ταχύτητες των δύο συστατικών έχουν αντίθετα πρόσημα. Για μικρές τιμές της συγκέντρωσης το ελαφρύτερο συστατικό έχει πολύ μικρότερη ταχύτητα (κατά μέτρο) κάτι που δεν ισχύει για μεγαλύτερες συγκεντρώσεις.

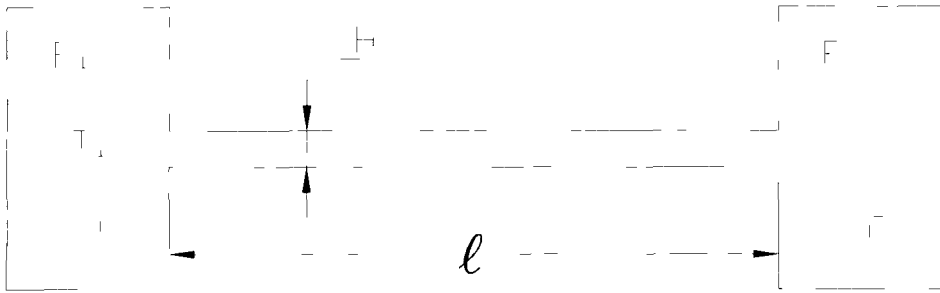
6.7 Ανακεφαλαίωση

Στο παρόν Κεφάλαιο μελετήθηκε η ροή μειγμάτων ευγενών αερίων μεταξύ παράλληλων πλακών μεγάλου μήκους οφειλόμενη σε κλίσεις πίεσης, θερμοκρασίας και συγκέντρωσης. Η μοντελοποίηση του όρου των συγκρούσεων έγινε με το μοντέλο McCormack ενώ για την αριθμητική επίλυση χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος των διακριτών ταχυτήτων. Τα αποτελέσματα αφορούν τόσο του κύριους κινητικούς συντελεστές όσο και τους δευ-

τερεύοντες.

Παρουσιάστηκαν αριθμητικά αποτελέσματα που αφορούν δύο μείγματα και συγκεκριμένα το $Ne - Ar$ και το $He - Xe$ για όλο το εύρος των τιμών της συγκέντρωσης. Εξήχθησαν τόσο οι τιμές των αδιάστατων κινητικών συντελεστών, οι οποίοι υπακούουν στις σχέσεις Onsager - Kasimir, όσο και οι κατανομές των μακροσκοπικών ταχυτήτων για τα δύο συστατικά του κάθε μείγματος. Διατυπώθηκαν αναλυτικές εκφράσεις για τους κινητικούς συντελεστές στο υδροδυναμικό όριο, ενώ μελετήθηκε και η επίδραση του δυναμικού των σωματιδιακών συγχρούσεων στην τελική λύση με την εφαρμογή τόσο του μοντέλου των συμπαγών σφαιρών, όσο και του πραγματικού δυναμικού που προκύπτει από την επεξεργασία πειραματικών αποτελεσμάτων. Από τα αποτελέσματα φάνηκε ότι το μοντέλο των συμπαγών σφαιρών δεν ενδείκνυται για ροές μειγμάτων ιδίως όταν τα φαινόμενα που ενδιαφέρουν σχετίζονται με διάχυση. Έτσι συνολικά μπορεί να λεχθεί ότι έγινε μια ολοκληρωμένη ανάλυση της ροής των δύο μειγμάτων σε σχέση με αρκετές παραμέτρους και σε μεγάλο εύρος του αριθμού Knudsen.

6.8 Πίνακες - Σχήματα



Σχήμα 6.1: Γεωμετρική διαμόρφωση ροής.

Πίνακας 6.1: Αδιάστατοι κινητικοί συντελεστές για διάφορες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ για το μείγμα $Ne - Ar$ και $C_0=0.1$.

δ	Λ_{PP}	Λ_{TT}	Λ_{CC}	$-\Lambda_{TP} = -\Lambda_{PT}$	$\Lambda_{CP} = \Lambda_{PC}$	$-\Lambda_{CT} = -\Lambda_{TC}$
Μοντέλο συμπαγών σφαιρών						
1.0 (-3)	4.3447	9.7492	6.4513 (-1)	1.8873	1.8428 (-1)	8.1291 (-2)
1.0 (-2)	3.1034	6.8492	4.5540 (-1)	1.2688	1.3247 (-1)	5.6814 (-2)
1.0 (-1)	2.0720	4.1235	2.7329 (-1)	7.4568 (-1)	8.0588 (-2)	3.5950 (-2)
1.0	1.5687	1.7789	1.1282 (-1)	3.7077 (-1)	3.2054 (-2)	1.9736 (-2)
1.0 (1)	2.7873	3.4517 (-1)	1.9851 (-2)	9.9167 (-2)	5.0455 (-3)	4.5728 (-3)
1.0 (2)	1.7696 (1)	3.7667 (-2)	2.1184 (-3)	1.1678 (-2)	5.2409 (-4)	5.0614 (-4)
Πραγματικό δυναμικό						
1.0 (-3)	4.3453	9.7505	6.4668 (-1)	1.8875	1.8581 (-1)	8.1919 (-2)
1.0 (-2)	3.1039	6.8511	4.5746 (-1)	1.2690	1.3398 (-1)	5.6872 (-2)
1.0 (-1)	2.0725	4.1272	2.7706 (-1)	7.4553 (-1)	8.2050 (-2)	3.4078 (-2)
1.0	1.5690	1.7848	1.1856 (-1)	3.7046 (-1)	3.3021 (-2)	1.5421 (-2)
1.0 (1)	2.7878	3.4757 (-1)	2.1980 (-2)	9.9420 (-2)	4.9308 (-3)	2.8686 (-3)
1.0 (2)	1.7697 (1)	3.7961 (-2)	2.3673 (-3)	1.1727 (-2)	4.9367 (-4)	3.0279 (-4)

Πίνακας 6.2: Αδιάστατοι κινητικοί συντελεστές για διάφορες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ για το μείγμα $Ne - Ar$ και $C_0=0.5$.

δ	Λ_{PP}	Λ_{TT}	Λ_{CC}	$-\Lambda_{TP} = -\Lambda_{PT}$	$\Lambda_{CP} = \Lambda_{PC}$	$-\Lambda_{CT} = -\Lambda_{TC}$
Μοντέλο συμπαγών σφαιρών						
1.0 (-3)	4.4871	1.0069 (1)	4.4730	1.9502	8.1505 (-1)	3.5955 (-1)
1.0 (-2)	3.2072	7.0807	3.1365	1.3128	5.8409 (-1)	2.5149 (-1)
1.0 (-1)	2.1371	4.2620	1.8589	7.7176 (-1)	3.5201 (-1)	1.6092 (-1)
1.0	1.5996	1.8305	7.4601 (-1)	3.8123 (-1)	1.3514 (-1)	8.9259 (-2)
1.0 (1)	2.8052	3.5491 (-1)	1.2603 (-1)	1.0133 (-1)	2.0280 (-2)	2.0031 (-2)
1.0 (2)	1.7712 (1)	3.8768 (-2)	1.3357 (-2)	1.1965 (-2)	2.1005 (-3)	2.2052 (-3)
Πραγματικό δυναμικό						
1.0 (-3)	4.4870	1.0069 (1)	4.4740	1.9501	8.1457 (-1)	3.5861 (-1)
1.0 (-2)	3.2071	7.0825	3.1423	1.3125	5.8416 (-1)	2.4797 (-1)
1.0 (-1)	2.1373	4.2692	1.8800	7.7062 (-1)	3.5395 (-1)	1.4870 (-1)
1.0	1.5999	1.8444	7.8372 (-1)	3.7999 (-1)	1.3815 (-1)	6.6998 (-2)
1.0 (1)	2.8053	3.6047 (-1)	1.3882 (-1)	1.0187 (-1)	1.9870 (-2)	1.2030 (-2)
1.0 (2)	1.7712 (1)	3.9437 (-2)	1.4819 (-2)	1.2066 (-2)	1.9990 (-3)	1.2688 (-3)

Πίνακας 6.3: Αδιάστατοι κινητικοί συντελεστές για διάφορες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ για το μείγμα $Ne - Ar$ και $C_0=0.9$.

δ	Λ_{PP}	Λ_{TT}	Λ_{CC}	$-\Lambda_{TP} = -\Lambda_{PT}$	$\Lambda_{CP} = \Lambda_{PC}$	$-\Lambda_{CT} = -\Lambda_{TC}$
Μοντέλο συμπαγών σφαιρών						
1.0 (-3)	4.3585	9.7803	2.9107 (1)	1.8934	1.2469	5.5008 (-1)
1.0 (-2)	3.1133	6.8715	2.0194 (1)	1.2730	8.8891 (-1)	3.8520 (-1)
1.0 (-1)	2.0781	4.1368	1.1729 (1)	7.4812 (-1)	5.2735 (-1)	2.5042 (-1)
1.0	1.5723	1.7845	4.4955	3.7157 (-1)	1.9109 (-1)	1.4014 (-1)
1.0 (1)	2.7914	3.4649 (-1)	7.1414 (-1)	9.9462 (-2)	2.7081 (-2)	3.0258 (-2)
1.0 (2)	1.7700 (1)	3.7817 (-2)	7.4973 (-2)	1.1720 (-2)	2.8044 (-3)	3.3117 (-3)
Πραγματικό δυναμικό						
1.0 (-3)	4.3578	9.7787	2.9213 (1)	1.8930	1.2345	5.4249 (-1)
1.0 (-2)	3.1127	6.8706	2.0333 (1)	1.2726	8.7892 (-1)	3.7339 (-1)
1.0 (-1)	2.0779	4.1381	1.1964 (1)	7.4742 (-1)	5.2509 (-1)	2.2465 (-1)
1.0	1.5722	1.7886	4.8040	3.7102 (-1)	1.9714 (-1)	1.0067 (-1)
1.0 (1)	2.7907	3.4806 (-1)	8.0466 (-1)	9.9585 (-2)	2.7400 (-2)	1.7437 (-2)
1.0 (2)	1.7699 (1)	3.8002 (-2)	8.5091 (-2)	1.1741 (-2)	2.7743 (-3)	1.8383 (-3)

Πίνακας 6.4: Αδιάστατοι κινητικοί συντελεστές για διάφορες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ για το μείγμα $He - Xe$ και $C_0=0.1$.

δ	Λ_{PP}	Λ_{TT}	Λ_{CC}	$-\Lambda_{TP} = -\Lambda_{PT}$	$\Lambda_{CP} = \Lambda_{PC}$	$-\Lambda_{CT} = -\Lambda_{TC}$
Μοντέλο συμπαγών σφαιρών						
1.0 (-3)	6.1070	1.3711(1)	2.4824	2.6612	2.0307	8.9070 (-1)
1.0 (-2)	4.3703	9.6813	1.7710	1.8010	1.4530	6.1063 (-1)
1.0 (-1)	2.8593	5.8247	1.0868	1.0605	8.9365 (-1)	3.6299 (-1)
1.0	1.9267	2.4557	4.7538 (-1)	5.1259 (-1)	3.8871 (-1)	1.6808 (-1)
1.0 (1)	2.8820	4.7045 (-1)	9.2012 (-2)	1.2896 (-1)	7.3750 (-2)	3.4461 (-2)
1.0 (2)	1.7736 (1)	5.1425 (-2)	1.0008 (-2)	1.5045 (-2)	7.9721 (-3)	3.7634 (-3)
Πραγματικό δυναμικό						
1.0 (-3)	6.1456	1.3800 (1)	2.5232	2.6801	2.0715	9.1041 (-1)
1.0 (-2)	4.4088	9.7807	1.8132	1.8180	1.4943	6.2762 (-1)
1.0 (-1)	2.8981	5.9572	1.1343	1.0710	9.3699 (-1)	3.7077 (-1)
1.0	1.9622	2.6120	5.2821 (-1)	5.1558 (-1)	4.3168 (-1)	1.6443 (-1)
1.0 (1)	2.8951	5.2953 (-1)	1.1353 (-1)	1.3108 (-1)	8.8919 (-2)	3.1817 (-2)
1.0 (2)	1.7739 (1)	5.8759 (-2)	1.2636 (-2)	1.5441 (-2)	9.7205 (-3)	3.3798 (-3)

Πίνακας 6.5: Αδιάστατοι κινητικοί συντελεστές για διάφορες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ για το μείγμα $He - Xe$ και $C_0=0.5$.

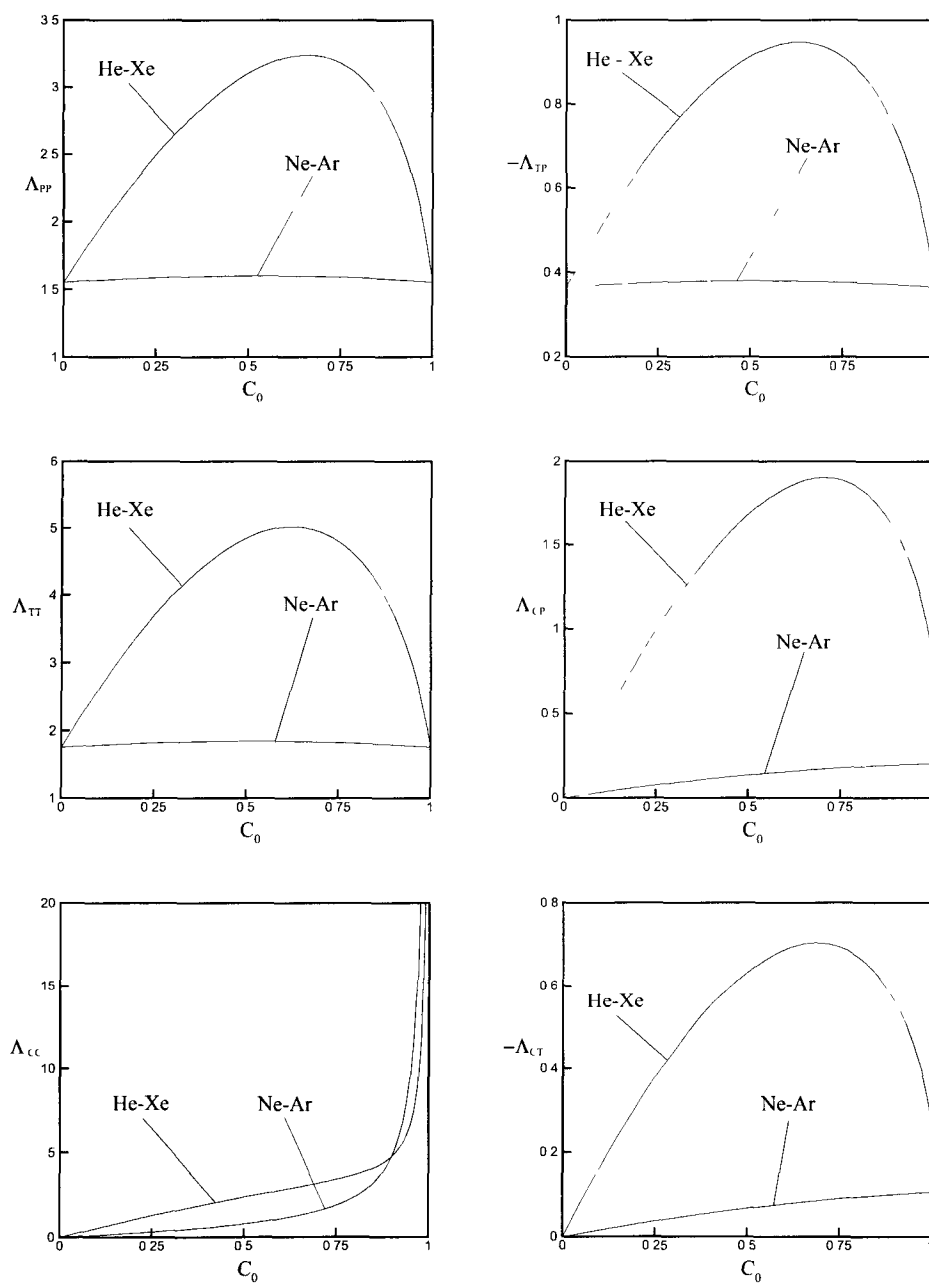
δ	Λ_{PP}	Λ_{TT}	Λ_{CC}	$-\Lambda_{TP} = -\Lambda_{PT}$	$\Lambda_{CP} = \Lambda_{PC}$	$-\Lambda_{CT} = -\Lambda_{TC}$
Μοντέλο συμπαγών σφαιρών						
1.0 (-3)	1.0844 (1)	2.4360 (1)	1.0833 (1)	4.7462	7.7122	3.3852
1.0 (-2)	7.8049	1.7358 (1)	7.7462	3.2467	5.5364	2.3294
1.0 (-1)	5.0465	1.0539 (1)	4.8018	1.9278	3.4447	1.4007
1.0	3.0158	4.4534	2.1872	9.1884 (-1)	1.5625	6.7512 (-1)
1.0 (1)	3.2652	8.7344 (-1)	4.4886 (-1)	2.2321 (-1)	3.1405 (-1)	1.4608 (-1)
1.0 (2)	1.7955 (1)	9.6574 (-2)	4.9343 (-2)	2.6175 (-2)	3.4287 (-2)	1.6087 (-2)
Πραγματικό δυναμικό						
1.0 (-3)	10.909 (1)	2.4512 (1)	1.0899 (1)	4.7773	7.7831	3.4182
1.0 (-2)	7.8720	1.7541 (1)	7.8236	3.2739	5.6125	2.3543
1.0 (-1)	5.1240	1.0830 (1)	4.9192	1.9405	3.5411	1.3968
1.0	3.1057	4.8564	2.3691	9.1427 (-1)	1.6882	6.3291 (-1)
1.0 (1)	3.3024	1.0386	5.3403 (-1)	2.2543 (-1)	3.6447 (-1)	1.2377 (-1)
1.0 (2)	1.7966 (1)	1.1732 (-1)	5.9880 (-2)	2.6926 (-2)	4.0148 (-2)	1.3112 (-2)

Πίνακας 6.6: Αδιάστατοι κινητικοί συντελεστές για διάφορες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ για το μείγμα $He - Xe$ και $C_0=0.9$.

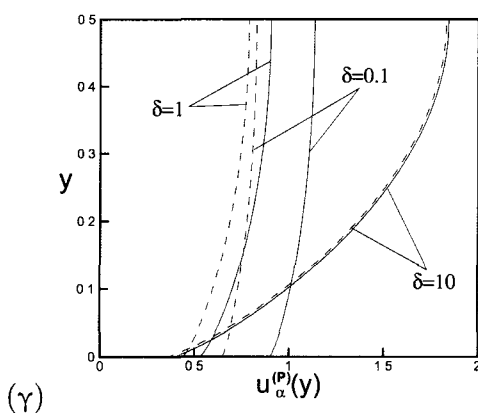
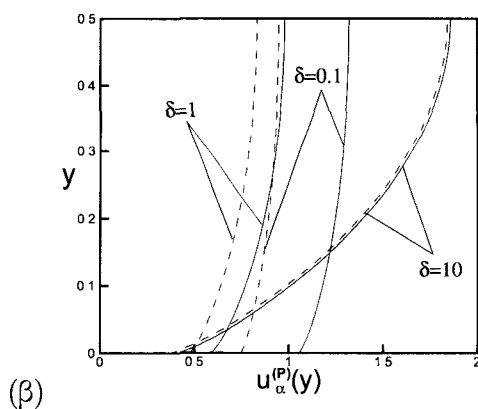
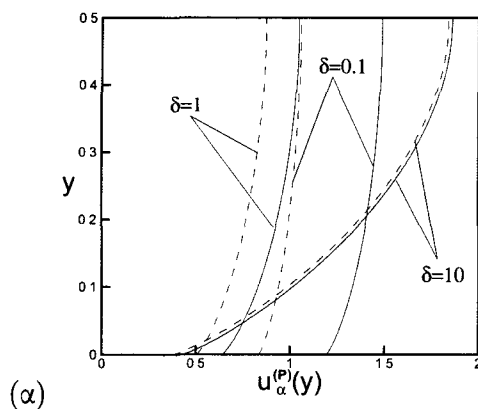
δ	Λ_{pp}	Λ_{TT}	Λ_{CC}	$-\Lambda_{TP} = -\Lambda_{PT}$	$\Lambda_{CP} = \Lambda_{PC}$	$-\Lambda_{CT} = -\Lambda_{TC}$
Μοντέλο συμπαγών σφαιρών						
1.0 (-3)	8.3897	1.8842 (1)	2.0977 (1)	3.6684	6.8039	2.9814
1.0 (-2)	6.0517	1.3434 (1)	1.4964 (1)	2.5081	4.8737	2.0480
1.0 (-1)	3.9984	8.2473	9.3289	1.4968	3.0633	1.2513
1.0	2.6609	3.6657	4.4633	7.4169 (-1)	1.4885	6.4810 (-1)
1.0 (1)	3.3488	7.6774 (-1)	9.8977 (-1)	2.0137 (-1)	3.3468 (-1)	1.4860 (-1)
1.0 (2)	1.8109 (1)	8.5864 (-2)	1.1022 (-1)	2.4422 (-2)	3.7385 (-2)	1.6410 (-2)
Πραγματικό δυναμικό						
1.0 (-3)	8.3444	1.8740 (1)	2.1058 (1)	3.6454	6.7448	2.9494
1.0 (-2)	6.0122	1.3347 (1)	1.5065 (1)	2.4862	4.8264	2.0110
1.0 (-1)	3.9790	8.2093	9.5047	1.4768	3.0581	1.1946
1.0	2.6827	3.7005	4.7820	7.2377 (-1)	1.5686	5.6157 (-1)
1.0 (1)	3.3706	7.8756 (-1)	1.1645	1.9279 (-1)	3.9485 (-1)	1.0659 (-1)
1.0 (2)	1.8111 (1)	8.8275 (-2)	1.3235 (-1)	2.3187 (-2)	4.5275 (-2)	1.1023 (-2)

Πίνακας 6.7: Αδιάστατοι κινητικοί συντελεστές στο υδροδυναμικό όριο όπως προκύπτουν από τις σχέσεις (6.49)-(6.54).

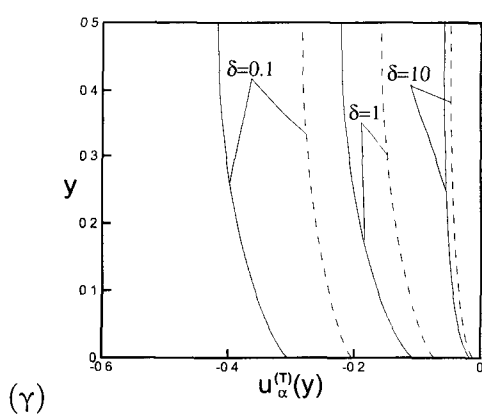
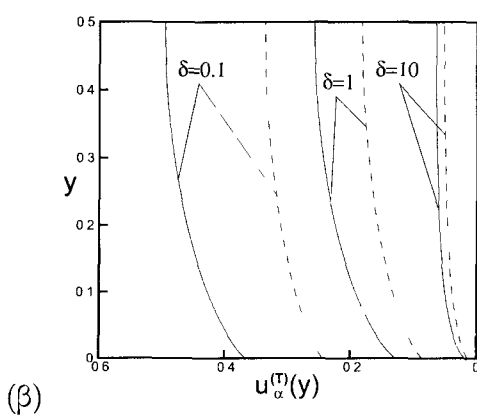
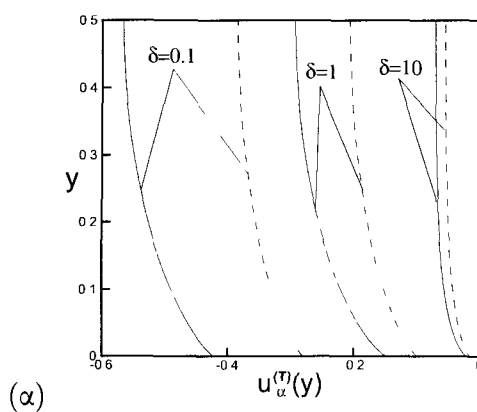
C_0	Ne-Ar			He-Xe		
	0.1	0.5	0.9	0.1	0.5	0.9
Μοντέλο συμπαγών σφαιρών						
$\delta\Lambda_{TT}$	3.8018	3.9134	3.8170	5.1916	9.7619	8.6891
$\delta\Lambda_{CC}$	0.2134	1.3441	7.5348	1.0099	4.9843	11.148
$\delta\Lambda_{PC}$	0.0529	0.2108	0.2811	0.8038	3.4614	3.7819
$-\delta\Lambda_{TC}$	0.0512	0.2228	0.3343	0.3799	1.6253	1.6583
$-\delta\Lambda_{PT}$	1.1880	1.2172	1.1928	1.5291	2.6621	2.4926
Πραγματικό δυναμικό						
$\delta\Lambda_{TT}$	3.8318	3.9815	3.8358	5.9413	11.884	8.9347
$\delta\Lambda_{CC}$	0.2386	1.4922	8.5606	1.2779	6.0606	13.413
$\delta\Lambda_{PC}$	0.0498	0.1995	0.2776	0.9818	4.0560	4.5922
$-\delta\Lambda_{TC}$	0.0305	0.1276	0.1849	0.3401	1.3191	1.1061
$-\delta\Lambda_{PT}$	1.1933	1.2279	1.1945	1.5716	2.7441	2.3645



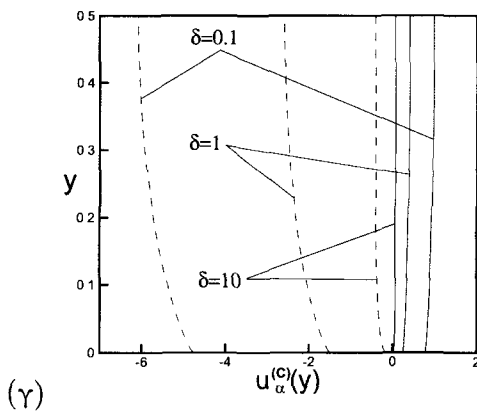
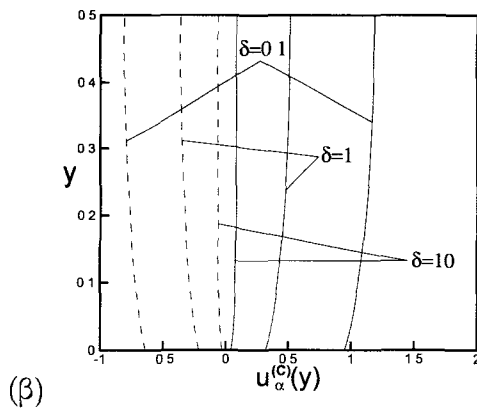
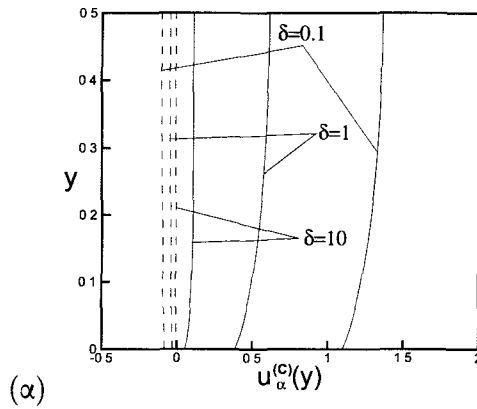
Σχήμα 6.2: Αδιάστατοι κινητικοί συντελεστές ως συνάρτηση της συγκέντρωσης C_0 για $\delta = 1$ και πραγματικό δυναμικό για τη προσομοίωση των σωματιδιακών συγκρούσεων.



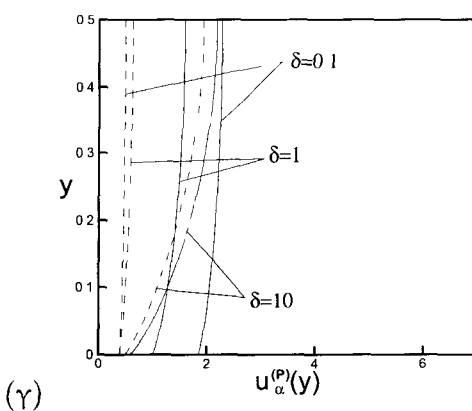
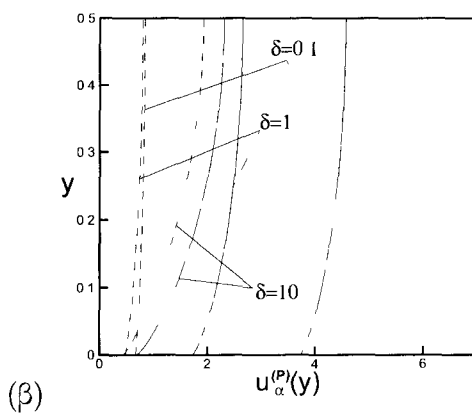
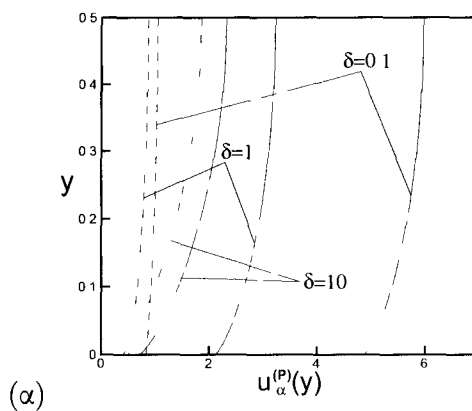
Σχήμα 6.3: Κατανομή της ταχύτητας $u_{\alpha}^{(P)}(y)$ για το κάθε συστατικό του μείγματος $Ne-Ar$ (συνεχής γραμμή - Ne , διακεκομμένη γραμμή - Ar) προκαλούμενη από κλίση πίεσης για διάφορες τιμές της παραμέτρου δ και πραγματικό δυναμικό για τις συγκρούσεις: (α) $C_0=0.1$ (β) $C_0=0.5$ (γ) $C_0=0.9$.



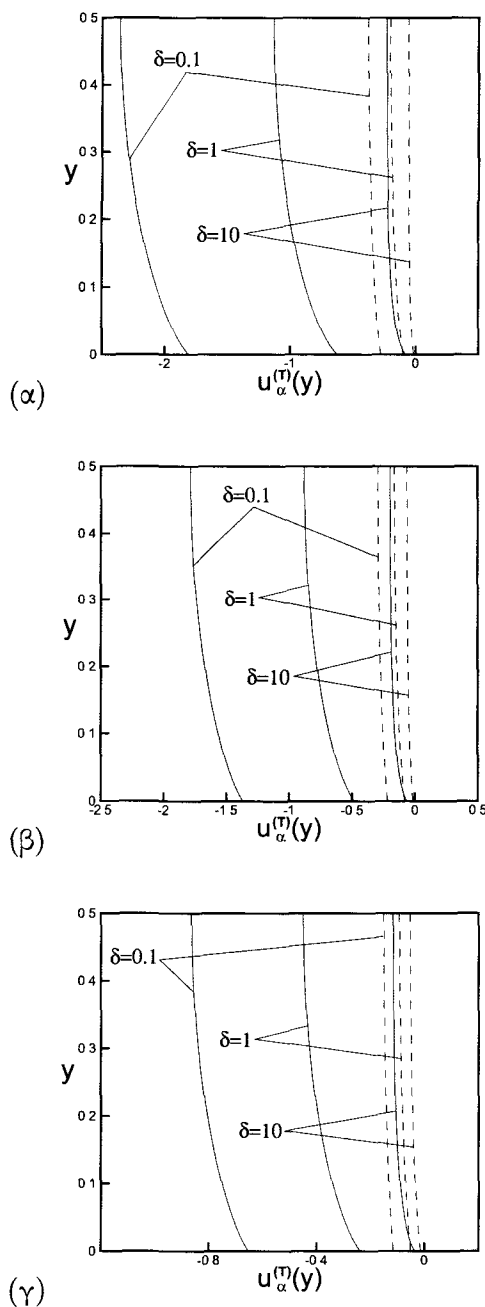
Σχήμα 6.4: Κατανομή της ταχύτητας $u_{\alpha}^{(T)}(y)$ για το κάθε συστατικό του μείγματος $Ne-Ar$ (συνεχής γραμμή - Ne , διακεκομμένη γραμμή - Ar) προκαλούμενη από κλίση θερμοκρασίας για διάφορες τιμές της παραμέτρου δ και πραγματικό δυναμικό για τις συγκρούσεις : (α) $C_0=0.1$ (β) $C_0=0.5$ (γ) $C_0=0.9$.



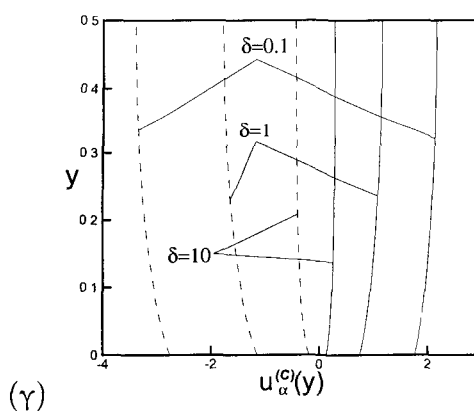
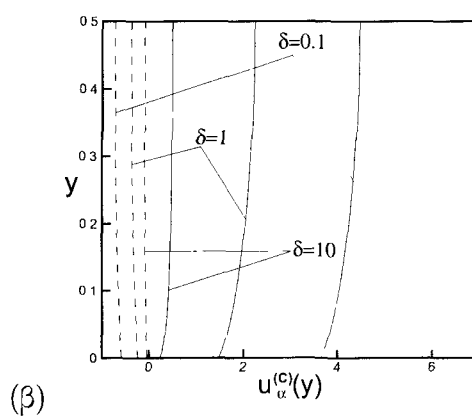
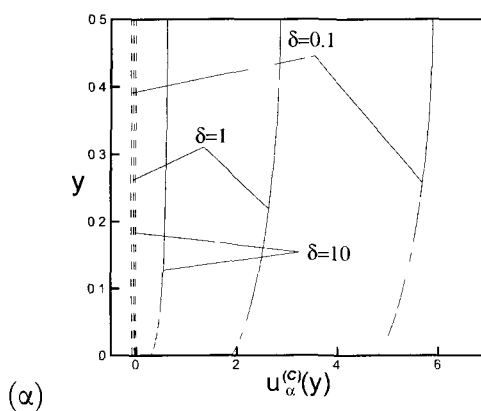
Σχήμα 6.5: Κατανομή της ταχύτητας $u_{\alpha}^{(C)}(y)$ για το κάθε συστατικό του μείγματος $Ne-Ar$ (συνεχής γραμμή - Ne , διακεκομμένη γραμμή - Ar) προκαλούμενη από κλίση συγκέντρωσης για διάφορες τιμές της παραμέτρου δ και πραγματικό δυναμικό για τις συγκρούσεις: (α) $C_0=0.1$ (β) $C_0=0.5$ (γ) $C_0=0.9$.



Σχήμα 6.6: Κατανομή της ταχύτητας $u_{\alpha}^{(P)}(y)$ για το κάθε συστατικό του μείγματος $He-Xe$ (συνεχής γραμμή - He , διακεκομμένη γραμμή - Xe) προκαλούμενη από κλίση πίεσης για διάφορες τιμές της παραμέτρου δ και πραγματικό δυναμικό για τις συγκρούσεις: (α) $C_0=0.1$ (β) $C_0=0.5$ (γ) $C_0=0.9$.



Σχήμα 6.7: Κατανομή της ταχύτητας $u_{\alpha}^{(T)}(y)$ για το κάθε συστατικό του μείγματος $He-Xe$ (συνεχής γραμμή - He , διακεκομμένη γραμμή - Xe) προκαλούμενη από κλίση θερμοκρασίας για διάφορες τιμές της παραμέτρου δ και πραγματικό δυναμικό για τις συγκρούσεις: (α) $C_0=0.1$ (β) $C_0=0.5$ (γ) $C_0=0.9$.



Σχήμα 6.8: Κατανομή της ταχύτητας $u_{\alpha}^{(c)}(y)$ για το κάθε συστατικό του μείγματος $He-Xe$ (συνεχής γραμμή - He , διακεκομμένη γραμμή - Xe) προκαλούμενη από κλίση συγκέντρωσης για διάφορες τιμές της παραμέτρου δ και πραγματικό δυναμικό για τις συγκρούσεις: (α) $C_0=0.1$ (β) $C_0=0.5$ (γ) $C_0=0.9$.

Πίνακας 6.8: Συντελεστές μετατροπής των ολοκληρωμάτων Chapman-Cowling με βάση το πραγματικό δυναμικό για τα μείγματα *Ne – Ar* και *He – Xe*.

$\omega_{a,\beta}^{ij}$	<i>Ne – Ar</i>	<i>He – Xe</i>
$\omega_{1,1}^{11}$	0.768754669916597	0.597727055211534
$\omega_{1,2}^{11}$	0.837673534683851	0.723087008086678
$\omega_{2,1}^{11}$	0.837673534683851	0.723087008086678
$\omega_{2,2}^{11}$	1.04836323161772	1.37071814951854
$\omega_{1,1}^{12}$	0.721430934913180	0.559593911463963
$\omega_{1,2}^{12}$	0.774869458057293	0.680838499855103
$\omega_{2,1}^{12}$	0.774869458057293	0.680838499855103
$\omega_{2,2}^{12}$	0.926354621781066	1.16223055660763
$\omega_{1,1}^{13}$	0.692035788051667	0.531653295664392
$\omega_{1,2}^{13}$	0.739993789139267	0.650622754478913
$\omega_{2,1}^{13}$	0.739993789139267	0.650622754478913
$\omega_{2,2}^{13}$	0.860768133117480	1.03959995300687
$\omega_{1,1}^{22}$	0.858217573578140	0.681746367268716
$\omega_{1,2}^{22}$	0.928490969393994	0.811296244094844
$\omega_{2,1}^{22}$	0.928490969393994	0.811296244094844
$\omega_{2,2}^{22}$	1.14240103671819	1.51561991782861

Κεφάλαιο 7

Ροές μειγμάτων αερίων σε αγωγούς ορθογώνιας διατομής

7.1 Εισαγωγή

Η αντιμετώπιση προβλημάτων που αναπτύσσονται σε μία διάσταση αποτελεί μια πολύ καλή μέθοδο για την βαθύτερη κατανόηση φαινομένων, ενώ ταυτόχρονα επιτρέπει και την εξαγωγή χρήσιμων στοιχείων όπως οι συντελεστές ολίσθησης. Παρόλα αυτά, οι ροές που εξετάζονται παραμένουν αρκετά θεωρητικές και δεν απαντώνται σε πρακτικές εφαρμογές ή αποτελούν πολύ απλοποιημένες προσεγγίσεις. Προκειμένου να αντιμετωπιστούν προβλήματα που μπορεί να εμφανιστούν στη πράξη, είναι απαραίτητη η ανάπτυξη τεχνικών και υπολογιστικών εργαλείων που να μπορούν να διαχειριστούν ροές που αναπτύσσονται σε περισσότερες της μίας διαστάσεις.

Χαρακτηριστικό παράδειγμα αποτελεί η ροή εντός ορθογώνιου αγωγού μεγάλου μήκους. Είναι η άμεση επέκταση της ροής ανάμεσα σε δύο πλάκες σε δύο διαστάσεις εφόσον η αλλαγή έγκειται στο πεπερασμένο μήκος της τρίτης διάστασης.

Η ροή σε αγωγό ορθογώνιας διατομής στην περίπτωση του ενός συστατικού έχει μελετηθεί σε κάποιο βαθμό [125, 127, 128]. Αντίθετα για τις ροές μειγμάτων, και παρά τη μεγάλη τους πρακτική σημασία, δεν έχει υπάρξει κάποια ιδιαίτερη αναφορά κυρίως λόγω της πολυπλοκότητας που παρουσιάζουν αλλά και του μεγάλου υπολογιστικού χρόνου που απαιτούν.

Όπως φάνηκε και στο προηγούμενο Κεφάλαιο, στην περίπτωση του μείγματος η συμπεριφορά του ρευστού διαφοροποιείται σημαντικά σε σχέση με αυτή του απλού αερίου ενώ ταυτόχρονα νέα φαινόμενα παρουσιάζονται. Τα στοιχεία αυτά καθιστούν αδύνατη την προσέγγιση των ροών αυτών στη μεταβατική περιοχή με μοντέλα ενός αερίου και πολύ περισσότερο με εξισώσεις συνέχειας ακόμα και με τη χρήση των συντελεστών ολίσθησης.

Στη συνέχεια θα παρουσιαστεί η μεθοδολογία αλλά και μια σειρά αποτελεσμάτων που αφορούν την ροή δύο μειγμάτων ευγενών αερίων εντός αγωγού ορθογώνιας διατομής οφειλόμενη σε κλίσεις πίεσης [16, 209], θερμοκρασίας και συγκέντρωσης [17, 210, 211]. Η επίλυση γίνεται με την εφαρμογή του σχήματος επιτάχυνσης H_1 που αναπτύχθηκε στο Κεφάλαιο 4. Η προσέγγιση αυτή αποδεικνύεται πολύ αποτελεσματική και ακριβής ενώ

ταυτόχρονα καλύπτει όλο το εύρος του αριθμού Knudsen και καθίσταται άκρως ανταγωνιστική ως προς την επίλυση των εξισώσεων συνέχειας που ούτως ή άλλως περιορίζονται αναγκαστικά στο υδροδυναμικό όριο.

7.2 Ορισμοί και διατύπωση προβλήματος

Έστω ότι ορίζεται σύστημα συντεταγμένων με αρχή στο κέντρο μιας διατομής του αγωγού ώστε η επιφάνεια της διατομής να ορίζεται από τις σχέσεις: $-H/2 \leq x' \leq H/2$ και $-W/2 \leq y' \leq W/2$ όπου ως H ορίζεται το ολικό ύψος της διατομής και W το αντίστοιχο πλάτος. Χωρίς να απολεσθεί η γενικότητα της μεθοδολογίας θεωρείται ότι το ύψος είναι μικρότερο του πλάτους ($H \leq W$). Η γεωμετρική διατύπωση του προβλήματος φαίνεται στο Σχήμα 7.1. Η ροή προκαλείται από μικρές κλίσης πίεσης, θερμοκρασίας και συγκέντρωσης οι οποίες ορίστηκαν στην εξίσωση 6.1 και οι ποσότητες P , T και C αναφέρονται σε κάποια δεδομένη διατομή αναφοράς. Η συγκέντρωση ορίζεται και πάλι ως

$$C = \frac{n_1}{n_1 + n_2} \quad (6.3)$$

όπου n_a ($a = 1, 2$) είναι η περιεκτικότητα του συστατικού a όπως αυτή ορίστηκε στη σχέση (3.3).

Η ταχύτητα και η θερμοροή των δύο συστατικών έχει συνιστώσα μόνο στη διεύθυνση z αλλά αυτή τη φορά είναι συναρτήσεις και των δύο άλλων διευθύνσεων:

$$\mathbf{u}' = (0, 0, u'(x, y)), \quad \mathbf{q}' = (0, 0, q'(x, y)) \quad (7.1)$$

Από το μητρώο των τάσεων επιβιώνουν οι όροι Π'_{xz} και Π'_{yz} καθώς και τα συμμετρικά τους στοιχεία (Π'_{zx} και Π'_{zy}) που είναι συναρτήσεις τόσο του x όσο και του y .

Οι ποσότητες με άμεσο πρακτικό ενδιαφέρον, όπως και στο μονοδιάστατο πρόβλημα, είναι η παροχή μάζας, η παροχή θερμότητας και παροχή λόγω διάχυσης που στο διδιάστατο πρόβλημα δίνονται από τις σχέσεις

$$J_M = \int_{-\frac{W}{2}}^{\frac{W}{2}} \int_{-\frac{H}{2}}^{\frac{H}{2}} \rho u'(x, y) dx' dy', \quad (7.2)$$

$$J_Q = \int_{-\frac{W}{2}}^{\frac{W}{2}} \int_{-\frac{H}{2}}^{\frac{H}{2}} q'(x, y) dx' dy' \quad (7.3)$$

και

$$J_D = \int_{-\frac{W}{2}}^{\frac{W}{2}} \int_{-\frac{H}{2}}^{\frac{H}{2}} \rho_1 (u'_1 - u') dx' dy' = \int_{-\frac{W}{2}}^{\frac{W}{2}} \int_{-\frac{H}{2}}^{\frac{H}{2}} \frac{\rho_1 \rho_2}{\rho} (u'_1 - u'_2) dx' dy'. \quad (7.4)$$

Για την πυκνότητα ρ , τη μακροσκοπική ταχύτητα του μείγματος u' , την μέση ταχύτητα του μείγματος w' , την ειδική θερμοροή q^* , την παράμετρο αραιοποίησης δ και τη μέση μοριακή μάζα m ισχύουν οι σχέσεις (6.8), (6.9), (6.10), (6.11), (6.12) και (6.13) αντίστοιχα.

Η αδιαστατοποίηση των χωρικών μεταβλητών γίνεται ως προς το ύψος του αγωγού H :

$$x = x'/H, \quad y = y'/H, \quad z = z'/H \quad (7.5)$$

ενώ τα υπόλοιπα μεγέθη αδιαστατοποιούνται όπως και στη μονοδιάστατη περίπτωση. Η γραμμικοποίηση της συνάρτησης κατανομής f είναι

$$f_\alpha(x, y, z, \mathbf{c}_\alpha) = f_\alpha^{(M)}(z, \mathbf{c}_\alpha)[1 + h_\alpha(x, y, \mathbf{c}_\alpha)], \quad |h_\alpha| \ll 1, \quad (7.6)$$

και γίνεται ως προς την κατανομή ισορροπίας του κάθε συστατικού που σε αδιάστατη μορφή είναι

$$f_\alpha^{(M)}(z, \mathbf{c}) = n_\alpha(z) \left[\frac{m_\alpha}{2\pi kT(z)} \right]^{3/2} \exp \left[-\frac{\mathbf{c}_\alpha}{T(z)/T_0} \right]. \quad (7.7)$$

Οι εξισώσεις πλέον που διέπουν τη ροή του μείγματος είναι σε αδιάστατη μορφή

$$c_{\alpha x} \frac{\partial h_\alpha}{\partial x} + c_{\alpha y} \frac{\partial h_\alpha}{\partial y} = \omega_\alpha \sum_{\beta=1}^2 L_{\alpha\beta} h_\alpha - c_{\alpha z} \left[X_V + \eta_\alpha X_C + \left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right) X_T \right], \quad \alpha = 1, 2, \quad (7.8)$$

όπου

$$\omega_\alpha = H \sqrt{m_\alpha/2kT_0}, \quad \eta_1 = 1, \quad \eta_2 = C_0/(1 - C_0). \quad (7.9)$$

Για τη μοντελοποίηση του όρου των συγκρούσεων χρησιμοποιείται το μοντέλο McCormack που για τη συγκεκριμένη περίπτωση απλοποιείται και παίρνει τη μορφή:

$$\begin{aligned} L_{\alpha\beta} h_\alpha = & -\gamma_\alpha h_\alpha + 2 \sqrt{\frac{m_\alpha}{m}} \left[\gamma_\alpha u_\alpha - v_{\alpha\beta}^{(1)} (u_\alpha - u_\beta) - \frac{1}{2} v_{\alpha\beta}^{(2)} \left(q_\alpha - \frac{m_\alpha}{m_\beta} q_\beta \right) \right] c_{\alpha z} \\ & + 4 \left[(\gamma_{\alpha\beta} - v_{\alpha\beta}^{(3)}) \Pi_{\alpha x z} + v_{\alpha\beta}^{(4)} \Pi_{\beta x z} \right] c_{\alpha z} c_{\alpha x} + 4 \left[(\gamma_{\alpha\beta} - v_{\alpha\beta}^{(3)}) \Pi_{\alpha y z} + v_{\alpha\beta}^{(4)} \Pi_{\beta y z} \right] c_{\alpha z} c_{\alpha y} \\ & + \frac{4}{5} \sqrt{\frac{m_\alpha}{m}} \left[(\gamma_{\alpha\beta} - v_{\alpha\beta}^{(5)}) q_\alpha + v_{\alpha\beta}^{(6)} \sqrt{\frac{m_\beta}{m_\alpha}} q_\beta - \frac{5}{4} v_{\alpha\beta}^{(2)} (u_\alpha - u_\beta) \right] c_{\alpha z} \left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right). \end{aligned} \quad (7.10)$$

οι συντελεστές $v_{\alpha\beta}^{(i)}$ λαμβάνονται από τις εκφράσεις που δόθηκαν στη Παράγραφο 3.8.

Οι μακροσκοπικές ποσότητες σε αδιάστατη μορφή προκύπτουν ως ροπές των συναρτήσεων απόκλισης h_α μέσω των σχέσεων:

$$u_\alpha(x, y) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} \int c_{\alpha z} h_\alpha \exp(-c_\alpha^2) d\mathbf{c}_\alpha, \quad (7.11)$$

$$q_\alpha(x, y) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} \int c_{\alpha z} \left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right) h_\alpha \exp(-c_\alpha^2) d\mathbf{c}_\alpha \quad (7.12)$$

και

$$\Pi_{\alpha j z}(x, y) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int c_{\alpha z} c_{\alpha j} h_\alpha \exp(-c_\alpha^2) d\mathbf{c}_\alpha, \quad j = x, y \quad (7.13)$$

για την ταχύτητα, την θερμοροή και τις τάσεις αντίστοιχα. Επιπλέον η εξίσωση (7.8) είναι γραμμική και η λύση μπορεί να διαχωριστεί σε τρία τμήματα:

$$h_\alpha = h_\alpha^{(P)} X_P + h_\alpha^{(T)} X_T + h_\alpha^{(C)} X_C, \quad (7.14)$$

όπως και οι ροπές της

$$u_\alpha = u_\alpha^{(P)} X_P + u_\alpha^{(T)} X_T + u_\alpha^{(C)} X_C \quad (7.15)$$

$$q_\alpha = q_\alpha^{(P)} X_P + q_\alpha^{(T)} X_T + q_\alpha^{(C)} X_C \quad (7.16)$$

$$\Pi_{\alpha jz} = \Pi_{\alpha jz}^{(P)} X_P + \Pi_{\alpha jz}^{(T)} X_T + \Pi_{\alpha jz}^{(C)} X_C, \quad j = x, y. \quad (7.17)$$

Τέλος, η ανοιγμένη παροχή μάζας και η ανάλογη παροχή θερμότητας δίνονται από τις σχέσεις:

$$U_\alpha^{(i)} = -2 \frac{H}{W} \int_{-\frac{W}{2H}}^{\frac{W}{2H}} \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} u_\alpha^{(i)}(x, y) dx dy \quad (7.18)$$

και

$$Q_\alpha^{(i)} = -2 \frac{H}{W} \int_{-\frac{W}{2H}}^{\frac{W}{2H}} \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} q_\alpha^{(i)}(x, y) dx dy, \quad (7.19)$$

για $a = 1, 2$ και $i = P, T, C$.

7.3 Θερμοδυναμική ανάλυση

Όπως διαπιστώθηκε και στην αντίστοιχη ανάλυση για μια διάσταση οι παροχές όπως αυτές ορίζονται από τις εξισώσεις (7.2) - (7.4) δεν ικανοποιούν τις σχέσεις Onsager - Kasimir παρά το ότι είναι γραμμικώς εξαρτώμενες από τις αντίστοιχες θερμοδυναμικές δυνάμεις. Για να συμβεί αυτό πρέπει οι παροχές να οριστούν ως:

$$J_P = -n_0 \int_{-\frac{W}{2}}^{\frac{W}{2}} \int_{-\frac{H}{2}}^{\frac{H}{2}} w dx' dy', \quad (7.20)$$

$$J_T = -\frac{1}{kT_0} \int_{-\frac{W}{2}}^{\frac{W}{2}} \int_{-\frac{H}{2}}^{\frac{H}{2}} q^* dx' dy', \quad (7.21)$$

$$J_C = -n_{01} \int_{-\frac{W}{2}}^{\frac{W}{2}} \int_{-\frac{H}{2}}^{\frac{H}{2}} (u'_1 - u'_2) dx' dy'. \quad (7.22)$$

οι οποίες πλέον συνδέονται με τις θερμοδυναμικές δυνάμεις σε μητρωϊκή μορφή

$$\begin{pmatrix} J_P \\ J_T \\ J_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Lambda'_{PP} & \Lambda'_{PT} & \Lambda'_{PC} \\ \Lambda'_{TP} & \Lambda'_{TT} & \Lambda'_{TC} \\ \Lambda'_{CP} & \Lambda'_{CT} & \Lambda'_{CC} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_P \\ X_T \\ X_C \end{pmatrix} \quad (7.23)$$

και επομένως οι σχέσεις Onsager-Kasimir παίρνουν τη μορφή

$$\Lambda'_{PT} = \Lambda'_{TP}, \quad \Lambda'_{PC} = \Lambda'_{CP}, \quad \Lambda'_{TC} = \Lambda'_{CT}. \quad (7.24)$$

Οι αδιάστατοι κινητικοί συντελεστές στη διαδιάστατη θεώρηση συνδέονται με τους διαστατούς με τη σχέση

$$\Lambda_{ij} = \frac{2}{n_0 HW} \sqrt{\frac{m}{2kT_0}} \Lambda'_{ij} \quad (7.25)$$

Επομένως η γνώση των αδιάστατων κινητικών συντελεστών, πολύ εύκολα οδηγεί και στον υπολογισμό των παροχών J_P , J_T και J_C από την εξίσωση (7.23), οι οποίες με την σειρά τους μπορούν να δώσουν τα μεγέθη άμεσου ενδιαφέροντος J_M , J_Q και J_D :

$$J_M = -mJ_P + (m_2 - m_1)(1 - C_0)J_C, \quad (7.26)$$

$$J_Q = -kT_0 \left[J_T + \frac{5}{2} \frac{m_2 - m_1}{m} (1 - C_0)J_C \right] \quad (7.27)$$

και

$$J_D = -\frac{m_1 m_2}{m} (1 - C_0)J_C. \quad (7.28)$$

Τέλος οι αδιάστατοι κινητικοί συντελεστές συνδέονται με τα υπολογιζόμενα μεγέθη της ανοιγμένης παροχής μάζας και θερμότητας $U_a^{(j)}$ και $Q_a^{(j)}$ με τις σχέσεις:

$$\Lambda_{Pj} = C_0 U_1^{(j)} + (1 - C_0) U_2^{(j)}, \quad (7.29)$$

$$\Lambda_{Tj} = C_0 Q_1^{(j)} + (1 - C_0) Q_2^{(j)}, \quad (7.30)$$

και

$$\Lambda_{Cj} = C_0 \left[U_1^{(j)} - U_2^{(j)} \right], \quad (7.31)$$

όπου $j = P, T, C$.

7.4 Λύσεις στο όριο ελεύθερης μοριακής κίνησης και στο υδροδυναμικό όριο

Στο όριο της ελεύθερης μοριακής κίνησης τα δύο συστατικά μπορεί να θεωρηθεί ότι κινούνται ανεξάρτητα και επομένως μπορεί να χρησιμοποιηθεί η αντίστοιχη λύση του ενός αερίου [127]. Οι αδιάστατοι κινητικοί συντελεστές τότε δίνονται από τις σχέσεις:

$$\Lambda_{PP} = U_{fm} \left[C_0 \left(\frac{m}{m_1} \right)^{1/2} + (1 - C_0) \left(\frac{m}{m_2} \right)^{1/2} \right], \quad (7.32)$$

$$\Lambda_{TT} = \frac{9}{4} \Lambda_{PP}, \quad (7.33)$$

$$\Lambda_{CC} = C_0 U_{fm} \left[\left(\frac{m}{m_1} \right)^{1/2} + \frac{C_0}{(1 - C_0)} \left(\frac{m}{m_2} \right)^{1/2} \right], \quad (7.34)$$

$$\Lambda_{PT} = \Lambda_{TP} = -\frac{1}{2}\Lambda_{PP}, \quad (7.35)$$

$$\Lambda_{PC} = \Lambda_{CP} = C_0 U_{fm} \left[\left(\frac{m}{m_1} \right)^{1/2} - \left(\frac{m}{m_2} \right)^{1/2} \right], \quad (7.36)$$

$$\Lambda_{TC} = \Lambda_{CT} = -\frac{1}{2}\Lambda_{PC}, \quad (7.37)$$

όπου

$$U_{fm} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{H}{W} \int_{-W/2H}^{W/2H} \int_{-1/2}^{1/2} \left[\left(\frac{W}{2H} - y \right) \ln \left(\frac{1 + \sin \varphi}{1 - \sin \varphi} \right) + \left(\frac{1}{2} - x \right) \ln \left(\frac{1 + \cos \varphi}{1 - \cos \varphi} \right) \right] dx dy, \quad (7.38)$$

με

$$\varphi = \arctan \left(\frac{1/2 - x}{W/2H - y} \right). \quad (7.39)$$

Οι τιμές της παραμέτρου U_{fm} που προκύπτουν για διάφορες τιμές του λόγου H/W , δίνονται στο άρθρο [127]. Οι τιμές που αναφέρονται στις περιπτώσεις που επιλύονται στη παρούσα εργασία δίνονται στο Πίνακα 7.1. Με βάση αυτές και τις σχέσεις (7.32)-(7.37) υπολογίζονται όλοι οι αδιάστατοι συντελεστές Λ_{ij} .

Περνώντας τώρα στο υδροδυναμικό όριο ακολουθείται αντίστοιχη διαδικασία όπως και στη μονοδιάστατη περίπτωση. Χρησιμοποιείται και πάλι η υδροδυναμική λύση. Ο κινητικός συντελεστής Λ_{PP} διασπάται σε δύο κομμάτια

$$\Lambda_{PP} = \delta\Lambda_{PP}^{(h)} + \sigma_P\Lambda_{PP}^{(s)}, \quad (7.40)$$

Ο πρώτος όρος αποτελεί την αναλυτική λύση που δίνουν οι εξισώσεις Navier - Stokes χωρίς την ολίσθηση στα τοιχώματα και είναι

$$\Lambda_{PP}^{(h)} = \frac{1}{6} \left[1 - 192 \frac{H}{W} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{n^5} \tanh \left(\frac{nW}{2H} \right) \right], \quad n = \pi(2i + 1) \quad (7.41)$$

ενώ ο δεύτερος αντιστοιχεί στη διόρθωση λόγω ολίσθησης στα τοιχώματα. Ο ιξώδης συντελεστής ολίσθησης σ_P λαμβάνεται από τη βιβλιογραφία, όπως για παράδειγμα στην αναφορά [41] για διαφόρους τύπους μειγμάτων). Και οι δύο ποσότητες $\Lambda_{PP}^{(h)}$ και $\Lambda_{PP}^{(s)}$ δεν εξαρτώνται από τη σύνθεση του μείγματος και μπορούν να χρησιμοποιηθούν οι τιμές που έχουν προκύψει για την περίπτωση του αερίου με ένα συστατικό [127]. Οι τιμές που αντιστοιχούν στους λόγους H/W που αντιμετωπίζονται στη παρούσα εργασία δίνονται στον Πίνακα 7.1.

Οι υπόλοιποι κινητικοί συντελεστές δεν επηρεάζονται από το λόγο των διαστάσεων H και W διότι υπολογίζονται ως μέσες τιμές των ταχυτήτων $u_a^{(T)}$ και $u_a^{(C)}$ και της θερμορροής $q_a^{(C)}$ που όμως στο υδροδυναμικό όριο αποκτούν σταθερή τιμή σε όλη τη διατομή του αγωγού. Επομένως οι αναλυτικές εκφράσεις που προέκυψαν για τη μονοδιάστατη περίπτωση (6.49)-(6.54) μπορούν να χρησιμοποιηθούν και στο δισδιάστατο αγωγό.

Τα αποτελέσματα που δίνονται στην παρούσα παράγραφο μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την επαλήθευση των αριθμητικών τιμών που εξάγονται, τόσο στο υδροδυναμικό όριο όσο και στο όριο της ελεύθερης μοριακής κίνησης.

7.5 Αριθμητικό σχήμα και σχήμα επιτάχυνσης

Εφόσον έχει θεωρηθεί ήδη ότι η συνάρτηση h δεν μεταβάλλεται στη διεύθυνση z μπορεί να γίνει η προβολή της εξίσωσης μεταφοράς ως προς c_{az} . Επειδή όμως στα μεγέθη που περιλαμβάνονται στην επίλυση ανήκει και η θερμορροή, είναι απαραίτητη η διπλή προβολή της εξίσωσης, σε αντιστοιχία με την περίπτωση του μοντέλου S (βλ. Παράγραφο 4.2.3). Για τον λόγο αυτό ορίζονται οι ποσότητες

$$\Phi_a(x, y, c_{ax}, c_{ay}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} h_a(x, y, \mathbf{c}_a) c_{az} e^{-c_{az}^2} dc_{az}, \quad (7.42)$$

και

$$\Psi_a(x, y, c_{ax}, c_{ay}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} h_a(x, y, \mathbf{c}_a) c_{az}^3 e^{-c_{az}^2} dc_{az}. \quad (7.43)$$

Αν στην εξίσωση (7.8) αντικατασταθεί ο όρος των συγκρούσεων (7.10) και εν συνεχεία η προκύπτουσα εξίσωση πολλαπλασιαστεί με $\frac{1}{\sqrt{\pi}} c_{az} e^{-c_{az}^2}$ και $\frac{1}{\sqrt{\pi}} c_{az}^3 e^{-c_{az}^2}$ αντίστοιχα και κατόπιν ολοκληρωθεί ως προς c_z , οι εξισώσεις που λαμβάνονται είναι

$$\begin{aligned} c_{ax} \frac{\partial \Phi_a}{\partial x} + c_{ay} \frac{\partial \Phi_a}{\partial y} + \gamma_a \Phi_a = & \\ & -\frac{1}{2} [X_P + \eta_a X_C + (c_{ax}^2 + c_{ay}^2 - 1) X_T] \\ & + \omega_a \sum_{b=1}^2 \left\{ \sqrt{\frac{m_a}{m}} \left[\gamma_{ab} u_a - \nu_{ab}^{(1)} (u_a - u_b) - \frac{1}{2} \nu_{ab}^{(2)} \left(q_a - \frac{m_a}{m_b} q_b \right) \right] \right. \\ & + 2 \left[(\gamma_{ab} - \nu_{ab}^{(3)}) \Pi_{axz} + \nu_{ab}^{(4)} \Pi_{bxz} \right] c_{ax} + 2 \left[(\gamma_{ab} - \nu_{ab}^{(3)}) \Pi_{ayz} + \nu_{ab}^{(4)} \Pi_{byz} \right] c_{ay} \\ & \left. + \frac{2}{5} \sqrt{\frac{m_a}{m}} \left[(\gamma_{ab} - \nu_{ab}^{(5)}) q_a + \nu_{ab}^{(6)} \sqrt{\frac{m_b}{m_a}} q_b - \frac{5}{4} \nu_{ab}^{(2)} (u_a - u_b) \right] (c_{ax}^2 + c_{ay}^2 - 1) \right\} \quad (7.44) \end{aligned}$$

και

$$\begin{aligned} c_{ax} \frac{\partial \Psi_a}{\partial x} + c_{ay} \frac{\partial \Psi_a}{\partial y} + \gamma_a \Psi_a = & \\ & -\frac{3}{4} [X_P + \eta_a X_C + (c_{ax}^2 + c_{ay}^2) X_T] \\ & + \omega_a \sum_{b=1}^2 \left\{ \frac{3}{2} \sqrt{\frac{m_a}{m}} \left[\gamma_{ab} u_a - \nu_{ab}^{(1)} (u_a - u_b) - \frac{1}{2} \nu_{ab}^{(2)} \left(q_a - \frac{m_a}{m_b} q_b \right) \right] \right. \\ & + 3 \left[(\gamma_{ab} - \nu_{ab}^{(3)}) \Pi_{axz} + \nu_{ab}^{(4)} \Pi_{bxz} \right] c_{ax} + 3 \left[(\gamma_{ab} - \nu_{ab}^{(3)}) \Pi_{ayz} + \nu_{ab}^{(4)} \Pi_{byz} \right] c_{ay} \\ & \left. + \frac{3}{5} \sqrt{\frac{m_a}{m}} \left[(\gamma_{ab} - \nu_{ab}^{(5)}) q_a + \nu_{ab}^{(6)} \sqrt{\frac{m_b}{m_a}} q_b - \frac{5}{4} \nu_{ab}^{(2)} (u_a - u_b) \right] (c_{ax}^2 + c_{ay}^2) \right\}, \quad (7.45) \end{aligned}$$

ενώ η ταχύτητα, η θερμορροή και οι διατμητικές τάσεις για το κάθε συστατικό δίνονται ως συναρτήσεις των Φ και Ψ :

$$u_a(x, y) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{m}{m_a} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_a e^{-c_{ax}^2 - c_{ay}^2} dc_{ax} dc_{ay}, \quad (7.46)$$

$$q_a(x, y) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{m}{m_a} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\Psi_a + \left(c_{ax}^2 + c_{ay}^2 - \frac{5}{2} \right) \Phi_a \right] e^{-c_{ax}^2 - c_{ay}^2} dc_{ax} dc_{ay}, \quad (7.47)$$

και

$$\Pi_{aiz}(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_{ai} \Phi_a e^{-c_{ax}^2 - c_{ay}^2} dc_{ax} dc_{ay}, \quad i = x, y. \quad (7.48)$$

Η χωρική διακριτοποίηση των εξισώσεων γίνεται με την επιλυόμενη διατομή να χωρίζεται σε ορθογωνικά στοιχεία και τις εξισώσεις να επιλύονται στο κέντρο αυτών. Οι πρώτες παράγωγοι προσεγγίζονται με κεντρώα διαφορίση στην αντίστοιχη διεύθυνση και στη συνέχεια γίνεται σταθμισμένη παρεμβολή στα γωνιακά σημεία του κάθε στοιχείου. Με τον τρόπο αυτό, επιτυγχάνεται ακρίβεια δεύτερης τάξης.

Η διακριτοποίηση στο χώρο των ταχυτήτων γίνεται με τέτοιο τρόπο ώστε να είναι εφαρμόσιμη η μέθοδος DVM. Πιο συγκεκριμένα, τα ολοκληρώματα μετατρέπονται σε πολικές συντεταγμένες και η γωνία ολοκλήρωσης διακριτοποιείται σε K ίσα τμήματα. Όσον αφορά την ακτινική διεύθυνση, εκεί χρησιμοποιούνται οι ρίζες του πολυωνύμου Hermite. Για μεγάλες τιμές της παραμέτρου δ όμως επιλυείται μια απλή ολοκλήρωση Gauss η οποία αποδεικνύεται ότι επιτρέπει τον ακριβέστερο προσδιορισμό αποτελεσμάτων με μικρότερη υπολογιστική προσπάθεια.

Οι οριακές συνθήκες που χρησιμοποιούνται αυτές του Maxwell χωρίς ανάκλαση. Πιο συγκεκριμένα για τα τέσσερα τοιχώματα του αγωγού ισχύουν οι σχέσεις:

$$\Phi_a(x, -\frac{1}{2}, c_{ax}, c_{ay}) = \Psi_a(x, -\frac{1}{2}, c_{ax}, c_{ay}) = 0, \quad c_{ax} \in (-\infty, \infty), \quad c_{ay} \in [0, \infty) \quad (7.49)$$

$$\Phi_a(x, \frac{1}{2}, c_{ax}, c_{ay}) = \Psi_a(x, \frac{1}{2}, c_{ax}, c_{ay}) = 0, \quad c_{ax} \in (-\infty, \infty), \quad c_{ay} \in (-\infty, 0] \quad (7.50)$$

$$\Phi_a(-\frac{1}{2}, y, c_{ax}, c_{ay}) = \Psi_a(-\frac{1}{2}, y, c_{ax}, c_{ay}) = 0, \quad c_{ax} \in [0, \infty), \quad c_{ay} \in (-\infty, \infty) \quad (7.51)$$

$$\Phi_a(\frac{1}{2}, y, c_{ax}, c_{ay}) = \Psi_a(\frac{1}{2}, y, c_{ax}, c_{ay}) = 0, \quad c_{ax} \in (-\infty, 0], \quad c_{ay} \in (-\infty, \infty) \quad (7.52)$$

Με τη διαμόρφωση αυτή είναι δυνατή η ρητή επίλυση του προβλήματος χωρίς να απαιτείται η επίλυση του συστήματος. Όμως η αργή σύγκλιση της απλής DVM, επέβαλλε την εφαρμογή του σχήματος επιτάχυνσης που προτάθηκε στο Κεφάλαιο 4. Για να επιτευχθεί αυτό αρχικά ορίστηκαν οι Ερμιτιανές ροπές των ποσοτήτων Φ_a και Ψ_a ως

$$U_{mn}^a(x, y) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{m}{m_a} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} H_m(c_{ax}) H_n(c_{ay}) \Phi_a e^{-c_{ax}^2 - c_{ay}^2} dc_{ax} dc_{ay} \quad (7.53)$$

και

$$Q_{mn}^a(x, y) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{m}{m_a} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} H_m(c_{ax}) H_n(c_{ay}) \times \left[\Psi_a + \left(c_{ax}^2 + c_{ay}^2 - \frac{5}{2} \right) \Phi_a \right] e^{-c_{ax}^2 - c_{ay}^2} dc_{ax} dc_{ay} \quad (7.54)$$

όπου H_m το πολυώνυμο Hermite τάξης m . Από τους ορισμούς αυτούς προκύπτει ότι:

$$U_{00}^a = u_a, \quad Q_{00}^a = q_a, \quad U_{10}^a = 2 \sqrt{\frac{m}{m_a}} \Pi_{axz}, \quad U_{01}^a = 2 \sqrt{\frac{m}{m_a}} \Pi_{ayz}. \quad (7.55)$$

Στη συνέχεια η διαδικασία που ακολουθείται περιλαμβάνει τον πολλαπλασιασμό των εξισώσεων μεταφοράς με $\frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{m}{m_a}} e^{-c_{ax}^2 - c_{ay}^2}$ και τις προκύπτουσες εξισώσεις με $H_0(c_{ax})H_0(c_{ay})$, $H_1(c_{ax})H_0(c_{ay})$ και $H_0(c_{ax})H_1(c_{ay})$ διαδοχικά. Οι έξι νέες εξισώσεις αν ολοκληρωθούν ως προς c_x και c_y , λαμβάνονται οι αντίστοιχες εξισώσεις των ροπών, από τον συνδυασμό των οποίων ανά τρεις τελικά προκύπτει

$$\begin{aligned} & \partial_{xx} U_{00}^a + \partial_{yy} U_{00}^a - 2d_a^2 (v_{aa}^{(3)} + v_{ab}^{(3)} - v_{aa}^{(4)}) \left[v_{ab}^{(1)} (U_{00}^a - U_{00}^b) + \frac{v_{ab}^{(2)}}{2} \left(Q_{00}^a - \frac{m_a}{m_b} Q_{00}^b \right) \right] \\ & + 2d_a d_b \sqrt{\frac{m_b}{m_a}} v_{ab}^{(4)} \left[v_{ab}^{(1)} (U_{00}^b - U_{00}^a) + \frac{v_{ab}^{(2)}}{2} \left(Q_{00}^b - \frac{m_b}{m_a} Q_{00}^a \right) \right] = \\ & - \frac{1}{2} \partial_{xx} U_{20}^a - \frac{1}{2} \partial_{yy} U_{02}^a - \partial_{xy} U_{11}^a \\ & + d_a \sqrt{\frac{m}{m_a}} \left\{ (X_P + \eta_a X_C) (v_{aa}^{(3)} + v_{ab}^{(3)} - v_{aa}^{(4)}) - (X_P + \eta_b X_C) v_{ab}^{(4)} \right\} \end{aligned} \quad (7.56)$$

και

$$\begin{aligned} & \partial_{xx} Q_{00}^a + \partial_{yy} Q_{00}^a + 2d_a^2 \left[- (v_{aa}^{(5)} + v_{ab}^{(5)} - v_{aa}^{(6)}) Q_{00}^a + \sqrt{\frac{m_b}{m_a}} v_{ab}^{(6)} Q_{00}^b - \frac{5}{4} v_{ab}^{(2)} (U_{00}^a - U_{00}^b) \right] \\ & + 2d_a^2 (\gamma_a - v_{aa}^{(3)} - v_{ab}^{(3)} + v_{aa}^{(4)}) \left[v_{ab}^{(1)} (U_{00}^a - U_{00}^b) + \frac{v_{ab}^{(2)}}{2} \left(Q_{00}^a - \frac{m_a}{m_b} Q_{00}^b \right) \right] \\ & + 2d_a d_b \sqrt{\frac{m_b}{m_a}} v_{ab}^{(4)} \left[v_{ab}^{(1)} (U_{00}^b - U_{00}^a) + \frac{v_{ab}^{(2)}}{2} \left(Q_{00}^b - \frac{m_b}{m_a} Q_{00}^a \right) \right] = \\ & - \frac{1}{2} \partial_{xx} Q_{20}^a - \frac{1}{2} \partial_{yy} Q_{02}^a - \partial_{xy} Q_{11}^a \\ & + d_a \sqrt{\frac{m}{m_a}} \left\{ (X_P + \eta_a X_C) (\gamma_a - v_{aa}^{(3)} - v_{ab}^{(3)} + v_{aa}^{(4)}) + (X_P + \eta_b X_C) v_{ab}^{(4)} + \frac{5}{2} X_T \right\} \end{aligned} \quad (7.57)$$

με $a, b = 1, 2$ και $a \neq b$.

Οι τέσσερις αυτές εξισώσεις είναι οι εξισώσεις επιτάχυνσης. Με το σχήμα αυτό επιταχύνονται μόνο οι μηδενικές ροπές των Φ_a και Ψ_a , ενώ οι πρώτες ροπές έχουν εκλείψει μέσω ορισμένων αλγεβρικών συνδυασμών των εξισώσεων. Οι δεύτερες ροπές που βρίσκονται στο δεξί σκέλος των εξισώσεων υπολογίζονται μέσω των αποτελεσμάτων που δίνει η επίλυση των εξισώσεων μεταφοράς. Αναλυτικά τα βήματα του επαναληπτικού σχήματος είναι τα ακόλουθα:

ι) Γίνεται μια αρχική υπόθεση για τις τιμές των U_{00}^a , Q_{00}^a , U_{10}^a και U_{01}^a και υπολογίζονται τα Φ_a και Ψ_a από τις εξισώσεις (7.44) και (7.45).

- ii) Υπολογίζονται τα Φ_a και Ψ_a από τις εξισώσεις (7.44) και (7.45).
- iii) Υπολογίζονται οι δεύτερες ροπές $U_{20}^a, U_{11}^a, U_{02}^a, Q_{20}^a, Q_{11}^a, Q_{02}^a$, οι οποίες και δεν επιταχύνονται, από τις σχέσεις (7.53) και (7.54).
- iv) Λύνεται το σύστημα των διαφορικών εξισώσεων (7.56) και (7.57) και προσδιορίζονται οι νέες τιμές των U_{00}^a και Q_{00}^a .
- v) Εάν το κριτήριο σύγκλισης που έχει τεθεί δεν ικανοποιείται, επαναλαμβάνεται η διαδικασία από το βήμα (ii) και χρησιμοποιούνται οι νέες επιταχυνθείσες τιμές των U_{00}^a και Q_{00}^a για τον υπολογισμό των καινούργιων Φ_a και Ψ_a .
- Με αντίστοιχο τρόπο μπορούν να εφαρμοστούν και ανώτερα σχήματα.

7.6 Παράθεση και ανάλυση αποτελεσμάτων

Τα αριθμητικά αποτελέσματα που παρουσιάζονται στη συνέχεια αναφέρονται στα μείγματα ευγενών αερίων $Ne-Ar$ και $He-Xe$ τα οποία είχαν μελετηθεί και στο μονοδιάστατο πρόβλημα. Αποτελούν ενδεικτικές περιπτώσεις διότι στο πρώτο τα δύο συστατικά έχουν σχετικά μικρές διαφορές ενώ στη δεύτερη τα συστατικά είναι τελείως διαφορετικά ως προς τη μοριακή τους μάζα (βλ. Κεφάλαιο 6). Οι προσομοιώσεις που πραγματοποιήθηκαν αφορούν ένα μεγάλο εύρος της παραμέτρου δ , ($10^{-3} \leq \delta \leq 50$) και του λόγου των διαστάσεων ($H/W = 1, 0.5$ και 0.1), ενώ μελετήθηκε όλο το εύρος των τιμών της μοριακής συγκέντρωσης.

Ο υπολογισμός των συντελεστών $\nu_{ab}^{(i)}$ έγινε με τη χρησιμοποίηση των $\Omega_{kl}^{(i)}$ που προκύπτουν από την εφαρμογή του πραγματικού δυναμικού. Σε αυτό, καθοριστικό ρόλο έπαιξε το συμπέρασμα που προέκυψε στη μονοδιάστατη ροή σύμφωνα με το οποίο το μοντέλο των συμπαγών σφαιρών δεν ενδείκνυται για την επίλυση μειγμάτων, ιδίως όταν μελετάται και η επίδραση της μοριακής συγκέντρωσης. Τα ολοκληρώματα $\Omega_{kl}^{(i)}$ υπολογίστηκαν για θερμοκρασία $T = 300K$ αφενός μεν γιατί αποτελεί μια θερμοκρασία που απαντάται συχνά σε εφαρμογές αφετέρου για να υπάρχει η δυνατότητα σύγκρισης με τα αντίστοιχα αποτελέσματα που προέκυψαν για ροή ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες.

Η χωρική διακριτοποίηση που χρησιμοποιήθηκε ήταν 101×101 για $\delta \leq 1$ και 301×301 για $\delta > 1$ ενώ για τη διακριτοποίηση του χώρου των ταχυτήτων επιλέχθηκε το πολυώνυμο Hermite 128ου βαθμού για $\delta \leq 1$ και η απλό πολυώνυμο 16ου βαθμού για $\delta > 1$. Η διακριτοποίηση αυτή τόσο στο χώρο όσο και στις ταχύτητες αποδείχθηκε ικανή να δώσει αξιόπιστα αποτελέσματα τουλάχιστον με ακρίβεια τεσσάρων σημαντικών ψηφίων με σχετικό κριτήριο σύγκλισης του επαναληπτικού σχήματος 10^{-6} . Σημειώνεται επίσης ότι η αύξηση του αριθμού των κόμβων στην διεύθυνση y (οριζόντια) όταν η διατομή είναι ορθογώνια, δεν επιφέρει ουσιαστική βελτίωση στα αποτελέσματα και για αυτό η ίδια διακριτοποίηση παρέμεινε και για $H/W \neq 1$.

Η ακρίβεια των αποτελεσμάτων ελέγχθηκε με διάφορους τρόπους. Ειδικότερα, επιβεβαιώθηκε ότι οι εξαγόμενοι συντελεστές ικανοποιούν τις σχέσεις ισοδυναμίας των Onsager-Casimir με ικανοποιητική ακρίβεια αντίστοιχη του επαναληπτικού σχήματος. Επίσης, επιλύθηκαν και αγωγοί με λόγο $H/W \rightarrow 0$ και τα αντίστοιχα αποτελέσματα της μονοδιάστατης ροής [15] προσεγγίστηκαν σε ικανοποιητικό βαθμό. Ταυτόχρονα, θέτοντας

$m_1 = m_2$ (και $d_1 = d_2$ στο μοντέλο των συμπαγών σφαιρών), ανακτήθηκαν τα αποτελέσματα για ένα αέριο που δίνονται στη βιβλιογραφία για το μοντέλο S [128]. Τέλος, σε όλες τις περιπτώσεις όπου ελέγχθηκε, επιβεβαιώθηκε η ισχύς της ταυτότητας

$$C_0 \left(\frac{\partial \Pi_{1xz}}{\partial x} + \frac{\partial \Pi_{1yz}}{\partial y} \right) + (1 - C_0) \left(\frac{\partial \Pi_{2xz}}{\partial x} + \frac{\partial \Pi_{2yz}}{\partial y} \right) = X_P + C_0 X_C \quad (7.58)$$

που εκφράζει το νόμο διατήρησης της ορμής. Αξιίζει να σημειωθεί ότι όλοι οι έλεγχοι πραγματοποιήθηκαν τόσο για τον απλό αριθμητικό κώδικα με εφαρμογή της μεθόδου των διακριτών ταχυτήτων όσο και με αυτόν όπου εφαρμόστηκε το σχήμα επιτάχυνσης.

Αρχικά παρουσιάζονται στα Σχήματα (7.2) και (7.3) ορισμένες τυπικές κατανομές ταχυτήτων στο κέντρο του αγωγού ($y = 0$) στην περίπτωση όπου την ροή προκαλεί μικρή κλίση πίεσης. Όπως είναι φανερό, για μεγάλες τιμές της παραμέτρου δ η κατανομή έχει παραβολική μορφή και προσεγγίζει προοδευτικά αυτή που εξάγεται από τις εξισώσεις Navier - Stokes, ενώ φαίνεται και η ολίσθηση που παρουσιάζεται στο τοίχωμα. Για μικρότερες τιμές του δ οι κατανομές γίνονται όλο και πιο ομοιόμορφες. Παρόλα αυτά οι διαφορές στις κατανομές των δύο συστατικών του κάθε μείγματος είναι σημαντικές με το ελαφρύτερο συστατικό να είναι πάντα ταχύτερο. Αυτό είναι πολύ πιο έντονο στην περίπτωση του μείγματος $He - Xe$ όπου η διαφορά των μοριακών μαζών είναι πολύ μεγάλη.

Περνώντας τώρα στους αδιάστατους κινητικούς συντελεστές Λ_i , για τα δύο μείγματα, αυτοί παρουσιάζονται στους Πίνακες 7.2-7.13 για διάφορες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ , $C_0 = 0.5$ και τρεις διαφορετικές τιμές του λόγου H/W . Σημειώνεται ότι για δεδομένη τιμή του δ όσο μειώνεται ο λόγος H/W η διατομή αυξάνει εφόσον το δ υπολογίζεται με μήκος αναφοράς το ύψος του αγωγού H . Έτσι, καθώς ο λόγος H/W τείνει στο μηδέν προκύπτουν τα αποτελέσματα της μονοδιάστατης ροής που χάριν ευκολίας συγκρίσεων, παρουσιάζονται στη τελευταία στήλη του κάθε Πίνακα. Το αρνητικό σύμβολο μπροστά από ορισμένους συντελεστές συμβολίζει και πάλι ότι δημιουργείται η αντίστοιχη δευτερεύουσα ροή με αντίθετη φορά από ότι η κύρια.

Μια πρώτη γενική παρατήρηση που αφορά τα αποτελέσματα των Πινάκων 7.2-7.13 είναι ότι παρουσιάζουν ποιοτική συμπεριφορά αντίστοιχη με αυτή των συντελεστών που έχουν προκύψει για ένα αέριο [127, 128]. Για παράδειγμα, σε όλες τις περιπτώσεις ο συντελεστής Λ_{PP} παρουσιάζει το λεγόμενο ελάχιστο Knudsen για $\delta \sim 1$ ενώ όλοι οι άλλοι συντελεστές μειώνονται αυξανόμενου του δ και τελικά σχεδόν μηδενίζονται στο υδροδυναμικό όριο ($\delta \rightarrow \infty$).

Συγκρίνοντας τώρα τα αποτελέσματα των Πινάκων 7.2-7.7 με αυτά των 7.8-7.13 γίνεται αμέσως φανερό ότι οι συντελεστές του μείγματος $He - Xe$ είναι σημαντικά μεγαλύτεροι, σε απόλυτες τιμές από τους αντίστοιχους του $Ne - Ar$ και ειδικότερα οι συντελεστές Λ_{CP} και Λ_{CT} διαφέρουν κατά μία τάξη μεγέθους. Το γεγονός αυτό οφείλεται στην μεγάλη διαφορά των μοριακών μαζών και υποδεικνύει την σημαντική επίδραση που έχει η σύσταση του μείγματος στην ποσοτική συμπεριφορά των κινητικών συντελεστών στην μεταβατική περιοχή.

Ελέγχοντας τις προκύπτουσες τιμές των κινητικών συντελεστών, συνάγεται ότι κοντά στο υδροδυναμικό όριο, όλοι εκτός του Λ_{PP} τείνουν προς την ταύτιση με τις αντίστοιχες τιμές της μονοδιάστατης ροής [15], (δηλαδή για $H/W = 0$). Αυτό βρίσκεται σε συμφωνία

με την παρατήρηση της παραγράφου 7.4 ότι όλοι οι κινητικοί συντελεστές (πλην του Λ_{PP}) στο υδροδυναμικό όριο ($\delta \rightarrow \infty$) δεν εξαρτώνται από τον λόγο H/W σε αντίθεση με τη μεταβατική περιοχή και την περιοχή της ελεύθερης μοριακής κίνησης όπου η εξάρτηση είναι έντονη. Από τους Πίνακες 7.2-7.13 φαίνεται ότι γενικά η μείωση του λόγου H/W συνδέεται με αύξηση όλων των κινητικών συντελεστών. Προσεγγιστικά μπορεί να λεχθεί ότι εκτός του Λ_{PP} για $\delta \leq 10^{-1}$ οι τιμές παρουσιάζουν πολύ μικρές μεταβολές ενώ για $10^{-1} < \delta \leq 10$ φαίνεται μια γραμμική εξάρτηση τους με το δ και για $\delta > 10$ ουσιαστικά μηδενίζονται.

Η συμπεριφορά των κινητικών συντελεστών ως προς τις αλλαγές της μοριακής συγκέντρωσης C_0 και για τα δύο μείγματα παρουσιάζεται στα Σχήματα 7.4, 7.5 και 7.6 για $\delta = 0.01, 1$ και 10 , αντίστοιχα. Σημειώνεται ότι οι τιμές των κινητικών συντελεστών Λ_{CC} , Λ_{CP} (ή Λ_{PC}) και Λ_{CT} (ή Λ_{TC}) για $C_0 = 1$ πρέπει να θεωρούνται ως ασυμπτωτικές τιμές μιας και στη περίπτωση αυτή, το δεύτερο συστατικό δεν υπάρχει και τα περιγραφόμενα φαινόμενα δεν υπάρχουν. Από τη μελέτη των σχημάτων φαίνεται ότι η εξάρτηση των αποτελεσμάτων από αλλαγές του C_0 είναι μικρή στην περίπτωση του μείγματος $Ne - Ar$, στο οποίο ο λόγος των μαζών είναι μικρός ($m_{Ar}/m_{Ne} \approx 2$), ενώ αντίθετα οι μεταβολές είναι πολύ έντονες στο μείγμα $He - Xe$ όπου ο λόγος των μαζών είναι μεγάλος ($m_{Xe}/m_{He} \approx 33$). Ειδικότερα, για το μείγμα $Ne - Ar$, οι κινητικοί συντελεστές Λ_{PP} , Λ_{TT} και Λ_{PT} (ή Λ_{TP}) παρουσιάζουν ελάχιστη διακύμανση για $0 \leq C_0 \leq 1$. Ο συντελεστής Λ_{CC} είναι αυτός με τη μεγαλύτερη εξάρτηση από το C_0 και αυξάνει όταν μεγαλώνει η συγκέντρωση του ελαφρύτερου συστατικού. Στην περίπτωση του μείγματος $He - Xe$ υπάρχουν έντονες αλλαγές και αφορούν όλους τους συντελεστές. Φαίνεται πάντως ότι οι μεγαλύτερες τιμές (εκτός αυτών του συντελεστή Λ_{CC}) λαμβάνονται για $C_0 = 0.62 - 0.66$ για μικρά δ ενώ για μεγάλα δ τα αντίστοιχα μέγιστα εμφανίζονται για $C_0 = 0.66 - 0.78$ ανάλογα με τον μελετούμενο συντελεστή. Γενικά πάντως όσο μεγαλώνει το δ , υπάρχει μια μικρή μετατόπιση των τιμών του C_0 για τις οποίες παρουσιάζονται τα μέγιστα προς μεγαλύτερες τιμές.

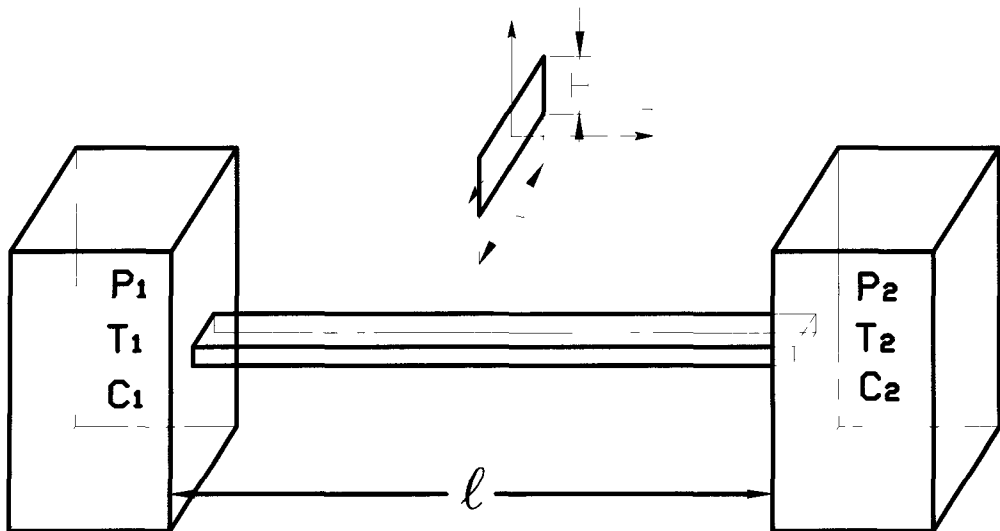
7.7 Ανακεφαλαίωση

Στο παρόν Κεφάλαιο αναπτύχθηκε η μεθοδολογία αντιμετώπισης ροών μειγμάτων ευγενών αερίων εντός αγωγών ορθογωνικής διατομής για όλο το εύρος της παραμέτρου αραιοποίησης δ . Μελετήθηκαν ροές που οφείλονται τόσο σε κλίση πίεσης, όσο και σε κλίση θερμοκρασίας ή συγκέντρωσης. Το μοντέλο συγκρούσεων που χρησιμοποιήθηκε ήταν αυτό του McCormack, ενώ οι οριακές συνθήκες ήταν τύπου Maxwell χωρίς ανάκλαση. Η αριθμητική επίλυση βασίστηκε στη μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων. Ταυτόχρονα εφαρμόστηκε το σχήμα επιτάχυνσης που προτάθηκε στο Κεφάλαιο 4. Παρουσιάστηκαν αριθμητικά αποτελέσματα για δύο τύπους μειγμάτων ($Ne - Ar$ και $He - Xe$) με πολύ διαφορετικές αναλογίες μοριακών μαζών. Μελετήθηκε σε βάθος η επίδραση που έχει στην συμπεριφορά των αδιάστατων κινητικών συντελεστών τόσο η μοριακή συγκέντρωση, όσο και ο λόγος των διαστάσεων του αγωγού.

Η μεθοδολογία που αναπτύχθηκε μπορεί να εφαρμοστεί σε οποιοδήποτε μείγμα αερίων για την εξαγωγή αξιόπιστων αποτελεσμάτων σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen. Ειδι-

κότερα στη μεταβατική περιοχή είναι απαραίτητη η υιοθέτησή της έναντι της προσέγγισης με τη χρησιμοποίηση των εξισώσεων Navier - Stokes σε συνδυασμό με τους συντελεστές ολίσθησης, η οποία δεν μπορεί να εφαρμοστεί.

7.8 Πίνακες - Σχήματα



Σχήμα 7.1: Γεωμετρική διαμόρφωση ροής.

Πίνακας 7.1: Οι συντελεστές U_{fm} , $\Lambda_{pp}^{(h)}$ και $\Lambda_{pp}^{(s)}$ για διάφορες τιμές H/W .

	H/W		
	1	0.5	0.1
U_{fm}	0.8387	1.152	1.991
$\Lambda_{pp}^{(h)}$	0.0703	0.1143	0.1562
$\Lambda_{pp}^{(s)}$	0.5623	0.7492	0.9493

Πίνακας 7.2: Αδιάστατος κινητικός συντελεστής Λ_{PP} του μείγματος Ne-Ar, για διάφορες τιμές H/W και $C_0 = 0.5$.

δ	Λ_{PP}			
	$H/W = 1$	$H/W = 0.5$	$H/W = 0.1$	$H/W = 0$
0	8.756 (-1)	1.203	2.079	∞
0.001	8.739 (-1)	1.200	2.063	4.487
0.01	8.648 (-1)	1.183	1.990	3.207
0.1	8.300 (-1)	1.123	1.748	2.137
1	8.012 (-1)	1.086	1.484	1.600
10	1.341	1.988	2.640	2.805
50	4.115	6.514	8.818	9.397

Πίνακας 7.3: Αδιάστατος κινητικός συντελεστής Λ_{TT} του μείγματος Ne-Ar, για διάφορες τιμές H/W και $C_0 = 0.5$.

δ	Λ_{TT}			
	$H/W = 1$	$H/W = 0.5$	$H/W = 0.1$	$H/W = 0$
0	1.970	2.706	4.677	∞
0.001	1.965	2.697	4.632	1.007 (1)
0.01	1.933	2.639	4.411	7.083
0.1	1.768	2.350	3.530	4.269
1	1.197	1.455	1.758	1.844
10	3.296 (-1)	3.450 (-1)	3.573 (-1)	3.605 (-1)
50	7.664 (-2)	7.736 (-2)	7.790 (-2)	7.812 (-2)

Πίνακας 7.4: Αδιάστατος κινητικός συντελεστής Λ_{CC} του μείγματος Ne-Ar, για διάφορες τιμές H/W και $C_0 = 0.5$.

δ	Λ_{CC}			
	$H/W = 1$	$H/W = 0.5$	$H/W = 0.1$	$H/W = 0$
0	8.756 (-1)	1.203	2.079	∞
0.001	8.734 (-1)	1.199	2.060	4.474
0.01	8.601 (-1)	1.174	1.965	3.142
0.1	7.881 (-1)	1.048	1.571	1.880
1	5.266 (-1)	6.342 (-1)	7.520 (-1)	7.837 (-1)
10	1.297 (-1)	1.343 (-1)	1.379 (-1)	1.388 (-1)
50	2.902 (-2)	2.922 (-2)	2.936 (-2)	2.942 (-2)

Πίνακας 7.5: Αδιάστατος κινητικός συντελεστής Λ_{TP} του μείγματος Ne-Ar, για διάφορες τιμές H/W και $C_0 = 0.5$.

δ	$-\Lambda_{TP}(= -\Lambda_{PT})$			
	$H/W = 1$	$H/W = 0.5$	$H/W = 0.1$	$H/W = 0$
0	4.378 (-1)	6.014 (-1)	1.039	∞
0.001	4.359 (-1)	5.980 (-1)	1.024	1.950
0.01	4.259 (-1)	5.797 (-1)	9.521 (-1)	1.313
0.1	3.816 (-1)	5.039 (-1)	7.153 (-1)	7.706 (-1)
1	2.661 (-1)	3.249 (-1)	3.717 (-1)	3.800 (-1)
10	9.113 (-2)	9.686 (-2)	1.009 (-1)	1.019 (-1)
50	2.301 (-2)	2.337 (-2)	2.365 (-2)	2.372 (-2)

Πίνακας 7.6: Αδιάστατος κινητικός συντελεστής Λ_{CP} του μείγματος Ne-Ar, για διάφορες τιμές H/W και $C_0 = 0.5$.

δ	$\Lambda_{CP}(= \Lambda_{PC})$			
	$H/W = 1$	$H/W = 0.5$	$H/W = 0.1$	$H/W = 0$
0	1.480 (-1)	2.034 (-1)	3.514 (-1)	∞
0.001	1.478 (-1)	2.030 (-1)	3.496 (-1)	8.146 (-1)
0.01	1.463 (-1)	2.001 (-1)	3.387 (-1)	5.842 (-1)
0.1	1.360 (-1)	1.816 (-1)	2.810 (-1)	3.540 (-1)
1	8.936 (-2)	1.073 (-1)	1.310 (-1)	1.382 (-1)
10	1.891 (-2)	1.934 (-2)	1.977 (-2)	1.987 (-2)
50	3.983 (-3)	3.990 (-3)	3.993 (-3)	3.995 (-3)

Πίνακας 7.7: Αδιάστατος κινητικός συντελεστής Λ_{CT} του μείγματος Ne-Ar, για διάφορες τιμές H/W και $C_0 = 0.5$.

δ	$-\Lambda_{CT} = (-\Lambda_{TC})$			
	$H/W = 1$	$H/W = 0.5$	$H/W = 0.1$	$H/W = 0$
0	7.403 (-2)	1.017 (-1)	1.757 (-1)	∞
0.001	7.387 (-2)	1.014 (-1)	1.743 (-1)	3.586 (-1)
0.01	7.288 (-2)	9.957 (-2)	1.667 (-1)	2.480 (-1)
0.1	6.739 (-2)	8.979 (-2)	1.333 (-1)	1.487 (-1)
1	4.658 (-2)	5.620 (-2)	6.513 (-2)	6.700 (-2)
10	1.136 (-2)	1.170 (-2)	1.196 (-2)	1.203 (-2)
50	2.494 (-3)	2.509 (-3)	2.518 (-3)	2.523 (-3)

Πίνακας 7.8: Αδιάστατος κινητικός συντελεστής Λ_{PP} του μείγματος He-Xe, για διάφορες τιμές H/W και $C_0 = 0.5$.

δ	Λ_{PP}			
	$H/W = 1$	$H/W = 0.5$	$H/W = 0.1$	$H/W = 0$
0	2.025	2.781	4.807	∞
0.001	2.022	2.776	4.779	1.091 (1)
0.01	2.004	2.743	4.637	7.872
0.1	1.914	2.584	4.056	5.124
1	1.649	2.159	2.885	3.106
10	1.698	2.403	3.121	3.302
50	4.296	6.738	9.088	9.680

Πίνακας 7.9: Αδιάστατος κινητικός συντελεστής Λ_{TT} του μείγματος He-Xe, για διάφορες τιμές H/W και $C_0 = 0.5$.

δ	Λ_{TT}			
	$H/W = 1$	$H/W = 0.5$	$H/W = 0.1$	$H/W = 0$
0	4.556	6.258	1.082 (1)	∞
0.001	4.547	6.243	1.074 (1)	2.451 (1)
0.01	4.492	6.141	1.034 (1)	1.754 (1)
0.1	4.180	5.590	8.602	1.083 (1)
1	2.981	3.675	4.577	4.856
10	9.254 (-1)	9.814 (-1)	1.027	1.039
50	2.258 (-1)	2.286 (-1)	2.308 (-1)	2.316 (-1)

Πίνακας 7.10: Αδιάστατος κινητικός συντελεστής Λ_{CC} του μείγματος He-Xe, για διάφορες τιμές H/W και $C_0 = 0.5$.

δ	Λ_{CC}			
	$H/W = 1$	$H/W = 0.5$	$H/W = 0.1$	$H/W = 0$
0	2.024	2.781	4.807	∞
0.001	2.021	2.776	4.777	1.090 (1)
0.01	2.000	2.736	4.620	7.824
0.1	1.884	2.530	3.924	4.919
1	1.429	1.784	2.237	2.369
10	4.772 (-1)	5.055 (-1)	5.282 (-1)	5.340 (-1)
50	1.155 (-1)	1.169 (-1)	1.179 (-1)	1.183 (-1)

Πίνακας 7.11: Αδιάστατος κινητικός συντελεστής Λ_{TP} του μείγματος He-Xe, για διάφορες τιμές H/W και $C_0 = 0.5$.

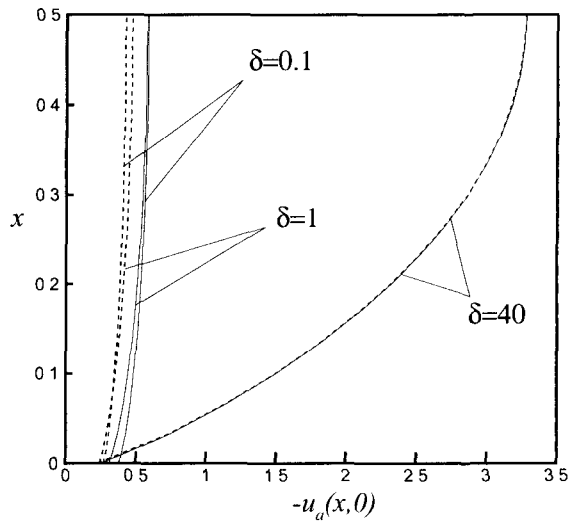
δ	$-\Lambda_{TP} = (-\Lambda_{PT})$			
	$H/W = 1$	$H/W = 0.5$	$H/W = 0.1$	$H/W = 0$
0	1.012	1.390	2.403	∞
0.001	1.009	1.385	2.377	4.777
0.01	9.912 (-1)	1.352	2.246	3.274
0.1	9.023 (-1)	1.197	1.751	1.941
1	6.286 (-1)	7.678 (-1)	8.925 (-2)	9.143 (-1)
10	2.029 (-1)	2.151 (-1)	2.234 (-2)	2.254 (-1)
50	5.122 (-2)	5.203 (-2)	5.266 (-2)	5.283 (-2)

Πίνακας 7.12: Αδιάστατος κινητικός συντελεστής Λ_{CP} του μείγματος He-Xe, για διάφορες τιμές H/W και $C_0 = 0.5$.

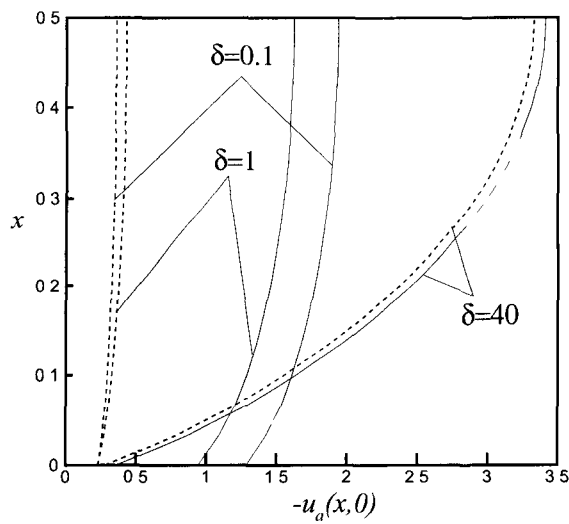
δ	$\Lambda_{CP} = (\Lambda_{PC})$			
	$H/W = 1$	$H/W = 0.5$	$H/W = 0.1$	$H/W = 0$
0	1.423	1.954	3.378	∞
0.001	1.421	1.951	3.359	7.783
0.01	1.407	1.926	3.258	5.613
0.1	1.329	1.786	2.789	3.541
1	1.007	1.257	1.588	1.688
10	3.267 (-1)	3.452 (-1)	3.606 (-1)	3.645 (-1)
50	7.781 (-2)	7.864 (-2)	7.931 (-2)	7.948 (-2)

Πίνακας 7.13: Αδιάστατος κινητικός συντελεστής Λ_{CT} του μείγματος He-Xe, για διάφορες τιμές H/W και $C_0 = 0.5$.

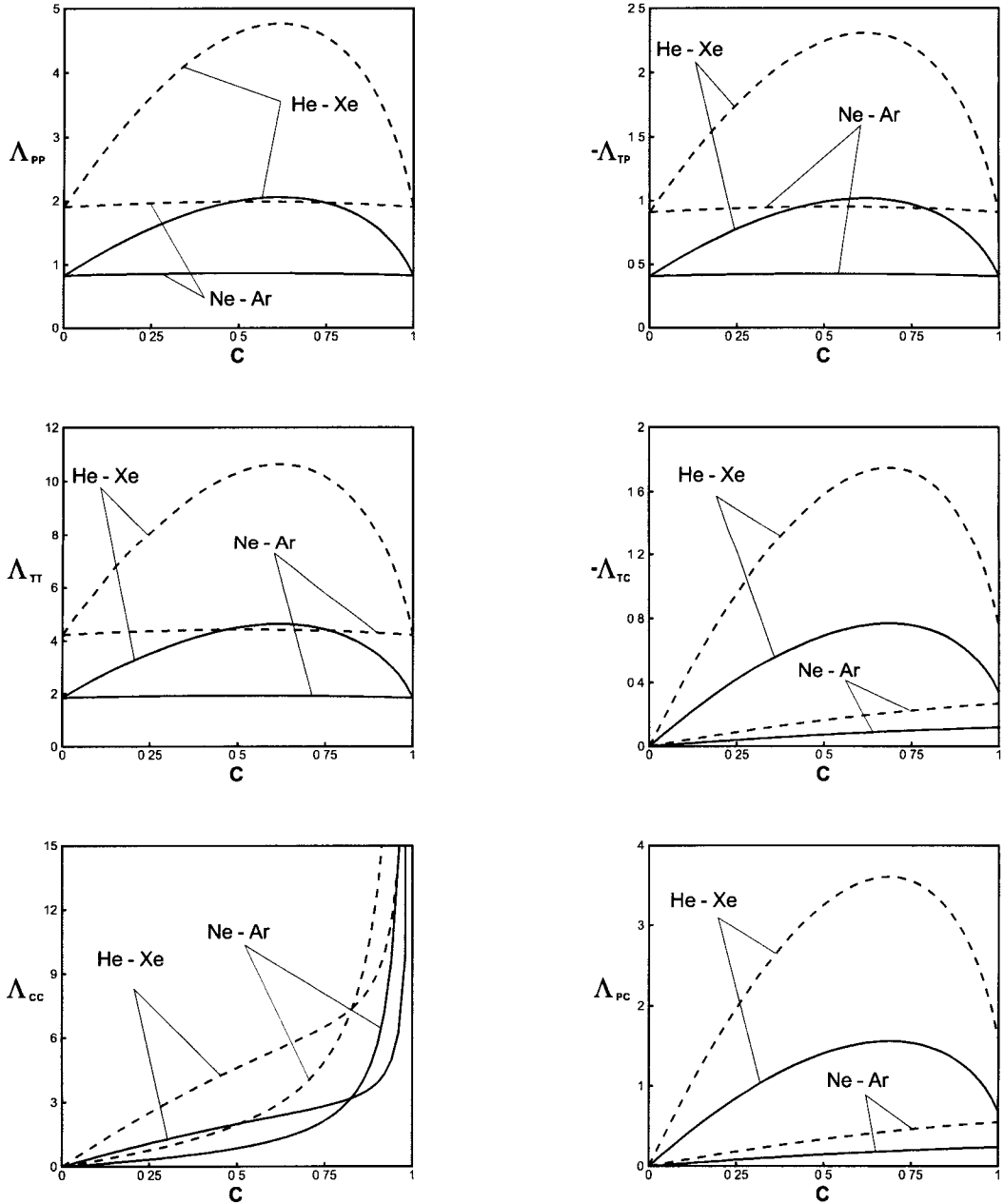
δ	$-\Lambda_{CT} = (-\Lambda_{TC})$			
	$H/W = 1$	$H/W = 0.5$	$H/W = 0.1$	$H/W = 0$
0	7.114 (-1)	9.772 (-1)	1.689	∞
0.001	7.094 (-1)	9.737 (-1)	1.672	3.418
0.01	6.977 (-1)	9.521 (-1)	1.587	2.354
0.1	6.368 (-1)	8.456 (-1)	1.247	1.397
1	4.346 (-1)	5.272 (-1)	6.155 (-1)	6.329 (-1)
10	1.160 (-1)	1.200 (-1)	1.230 (-1)	1.238 (-1)
50	2.575 (-2)	2.590 (-2)	2.601 (-2)	2.607 (-2)



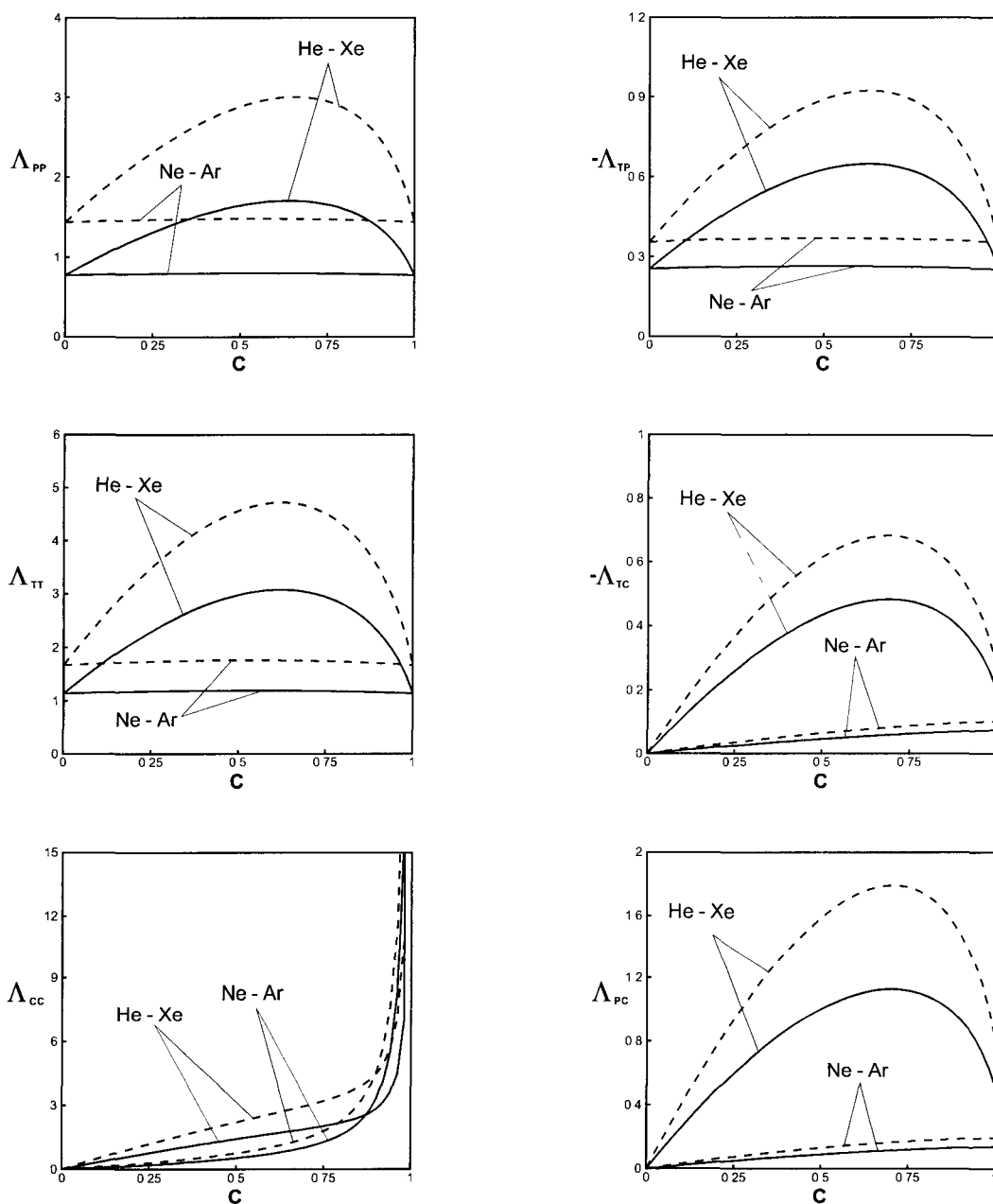
Σχήμα 7.2: Κατανομές ταχυτήτων του κάθε συστατικού του μείγματος Ne-Ar για $C_0 = 0.5$ και διάφορες τιμές της παραμέτρου δ : συνεχής γραμμή - Ne, διακεκομμένη γραμμή - Ar.



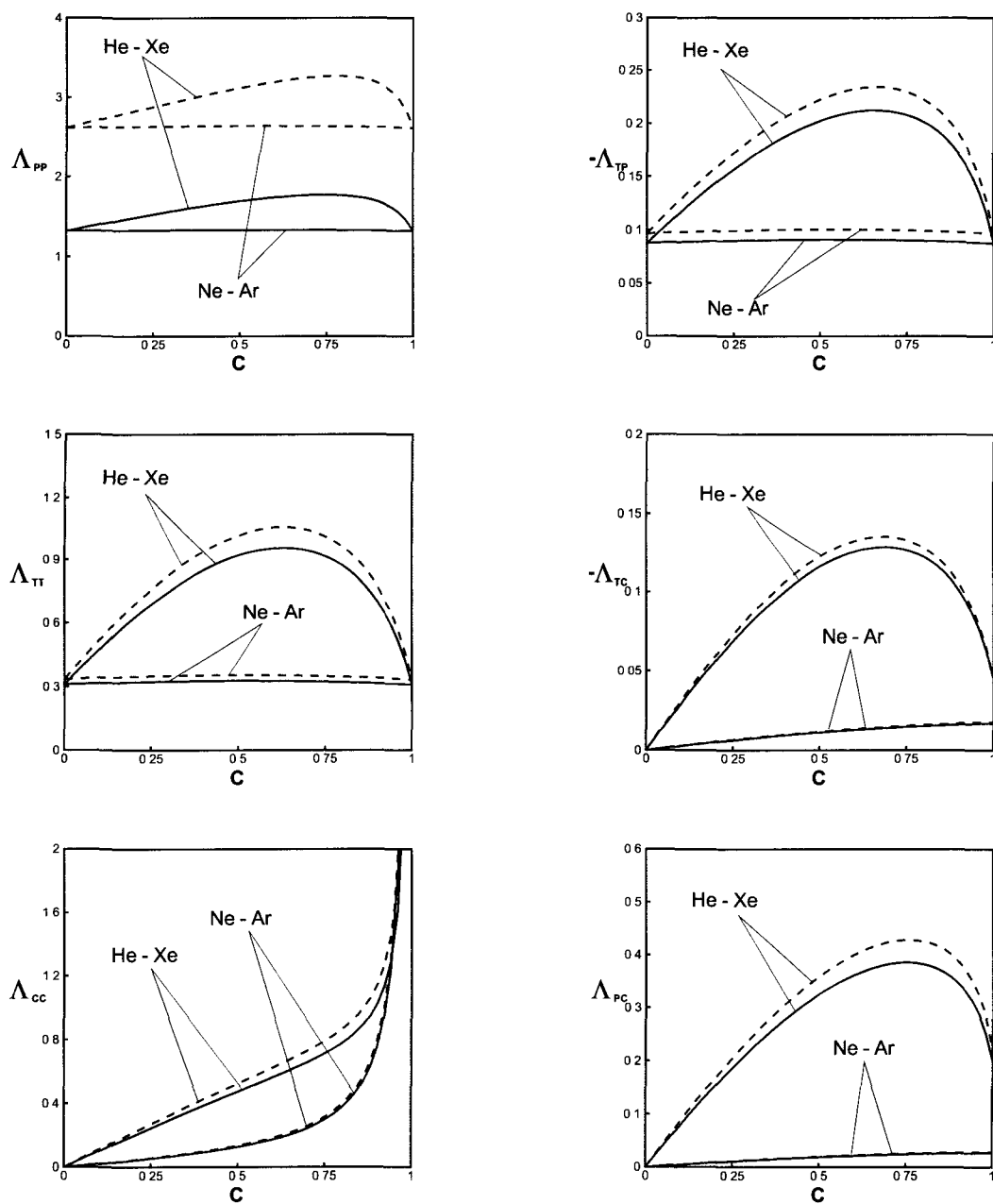
Σχήμα 7.3: Κατανομές ταχυτήτων του κάθε συστατικού του μείγματος He-Xe για $C_0 = 0.5$ και διάφορες τιμές της παραμέτρου δ : συνεχής γραμμή - He, διακεκομμένη γραμμή - Xe.



Σχήμα 7.4: Αδιάστατοι κινητικοί συντελεστές σε όλο το εύρος της μοριακής συγκέντρωσης C_0 για $\delta = 0.01$: συνεχής γραμμή - $H/W = 1$, διακεκομμένη γραμμή - $H/W = 0.1$.



Σχήμα 7.5: Αδιάστατοι κινητικοί συντελεστές σε όλο το εύρος της μοριακής συγκέντρωσης C_0 για $\delta = 1.0$: συνεχής γραμμή - $H/W = 1$, διακεκομμένη γραμμή - $H/W = 0.1$.



Σχήμα 7.6: Αδιάστατοι κινητικοί συντελεστές σε όλο το εύρος της μοριακής συγκέντρωσης C_0 για $\delta = 1.0$: συνεχής γραμμή - $H/W = 1$, διακεκομμένη γραμμή - $H/W = 0.1$.

Κεφάλαιο 8

Διατμητικές ροές απλών αερίων

8.1 Εισαγωγή

Εκτός από τις ροές που προκαλούνται από κλίσεις ορισμένων ιδιοτήτων όπως η πίεση, η θερμοκρασία και η συγκέντρωση μεταξύ δύο σημείων, μια άλλη κατηγορία ροών είναι αυτές που οφείλονται σε μεταφορά ορμής λόγω διάτμησης. Την πιο κλασσική περίπτωση αποτελεί η ροή Couette όπως ονομάζεται η ροή μεταξύ δύο παράλληλων πλακών των οποίων η σχετική κίνηση έχει ως αποτέλεσμα τη κίνηση του ρευστού.

Οι διατμητικές ροές όπως ονομάζονται, παρουσιάζουν έντονο ενδιαφέρον, τόσο από φυσικής άποψης όσο και από τεχνολογικής. Παρατηρούνται πολύ συχνά σε συσκευές και έχουν αποτελέσει αντικείμενο έρευνας εδώ και πολλά χρόνια. Εκτός από την ροή Couette, μια άλλη συνήθης ροή είναι αυτή μέσα σε κοιλότητα (Cavity flow). Με τον όρο αυτό περιγράφεται η ροή που δημιουργείται μέσα σε ορθογωνική κοιλότητα, σε δύο ή σε τρεις διαστάσεις, όταν η μία εκ των πλακών που σχηματίζουν τη κοιλότητα κινείται κάθετα προς τις εφάπτουσες σε αυτή πλάκες. Αποτελεί ένα από τα προβλήματα αναφοράς της ρευστοδυναμικής, και χρησιμοποιείται συχνά για τη πιστοποίηση κωδίκων. Ταυτόχρονα είναι μια πολύ κρίσιμη τεχνολογικά ροή εφόσον συναντάται συχνά σε εφαρμογές.

Η κύρια μέθοδος που χρησιμοποιήθηκε στην, εκτεταμένη ομολογουμένως, μελέτη των διατμητικών ροών ήταν οι εξισώσεις συνέχειας όπως οι Navier - Stokes ή άλλες μέθοδοι όπως διάφορες μέθοδοι ψευδοσυμπιεστότητας. Όλες όμως είχαν ως κοινό σημείο ότι αναφέρονταν αποκλειστικά σε συνεχή μέσα. Τέτοιου τύπου μεθόδολογίες όμως, φαίνεται πως είναι ανεπαρκείς για τη μελέτη φαινομένων που αναπτύσσονται σε μεσοσκοπική κλίμακα. Όπως φάνηκε και στα προηγούμενα Κεφάλαια, ακόμα και ο μετασχηματισμός των εξισώσεων με την προσθήκη των συντελεστών ολίσθησης, διευρύνει μεν το πεδίο εφαρμογής τους, χωρίς όμως να τις καθιστά ικανές για την αντιμετώπιση ολόκληρου του φάσματος του αριθμού Knudsen. Η ανάγκη για δημιουργία νέων μεθόδων που να είναι λειτουργικές (και) στην περιοχή της μικροκλίμακας είναι προφανής. Έτσι, η εφαρμογή της προσέγγισης που αναπτύχθηκε στα προηγούμενα Κεφάλαια και βασίζεται στη κινητική θεωρία φαίνεται πως αποτελεί ιδανική λύση και στην περίπτωση των διατμητικών ροών.

Η ροή Couette αποτελεί την απλούστερη περίπτωση διατμητικής ροής. Στην περίπτωση του ρευστού ενός συστατικού έχει μελετηθεί σε μεγάλο βαθμό (βλ. Παράγραφο 2.2.3)

και τα αποτελέσματα που έχουν προκύψει έχουν πιστοποιηθεί σε σημείο ώστε πλέον να θεωρείται πρότυπη ροή. Στην παρούσα διατριβή, ο ρόλος της επίλυσης της ροής Couette ήταν ακριβώς η πιστοποίηση της μεθοδολογίας αλλά και των αριθμητικών κωδίκων. Αυτό συνέβη και υπήρξε ικανοποιητική ταυτοποίηση των εξαγόμενων αποτελεσμάτων με αυτά της υπάρχουσας βιβλιογραφίας. Ορισμένα ενδεικτικά αποτελέσματα παρουσιάζονται στον Πίνακα 9.1 και αφορούν την αδιάστατη διατμητική τάση για ορισμένες χαρακτηριστικές τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ , χρησιμοποιούνται δε ως οριακές περιπτώσεις για την πιστοποίηση των αντίστοιχων αποτελεσμάτων που αφορούν ροές μειγμάτων και παρουσιάζονται στο επόμενο Κεφάλαιο.

Στο παρόν Κεφάλαιο αναλύεται και επιλύεται η δεύτερη βασική ροή που είναι η ροή σε ορθογωνική κοιλότητα [18, 212]. Ειδικότερα, αναπτύσσεται η μεθοδολογία και μελετώνται τα φαινόμενα που παρουσιάζονται στην περίπτωση ροής αερίου ενός συστατικού.

8.2 Ροή σε ορθογωνική κοιλότητα

Η ροή σε κοιλότητα είναι ίσως μια από τις τυπικότερες ροές στην περιοχή της κλασικής υδροδυναμικής και έχει αντιμετωπιστεί με επιτυχία εδώ και αρκετά χρόνια. Αποτελεί ένα πρότυπο πρόβλημα και χρησιμοποιείται πολύ συχνά στην πιστοποίηση κωδίκων και μεθοδολογιών.

Πέρα όμως από την περιοχή του συνεχούς μέσου, φαίνεται ότι δεν υπάρχει σημαντική βιβλιογραφία που να αφορά την μελέτη ροών στην μεταβατική περιοχή. Υπάρχουν ορισμένες εργασίες που αφορούν την επίλυση της ροής σε κοιλότητα με χρησιμοποίηση είτε των εξισώσεων συνεχούς μέσου, είτε της μεθοδολογίας Lattice Boltzmann σε συνδυασμό με οριακές συνθήκες ολίσθησης, αλλά και σε αριθμό είναι λίγες και τα εξαγόμενα αποτελέσματα δεν μπορεί να θεωρηθεί ότι είναι πιστοποιημένα. Ταυτόχρονα, η εφαρμογή τέτοιου τύπου μεθοδολογιών δεν μπορεί να επεκταθεί σε ροές με αριθμό $Kn < 0.01$. Επίσης μια άλλη μεθοδολογία που εφαρμόζεται είναι η προσομοίωση Monte Carlo η οποία όμως με τη σειρά της δεν είναι ικανή να επιλύσει ροές για $Kn > 10$.¹ Έτσι φαίνεται ότι υπάρχει ένα μεγάλο κενό το οποίο μάλιστα αφορά ροές κρίσιμες για τεχνολογικές εφαρμογές.

Το κενό αυτό φαίνεται ότι μπορεί να καλυφθεί από μεθοδολογίες που βασίζονται στην κινητική θεωρία όπως αυτές που περιγράφηκαν και αναπτύχθηκαν στα προηγούμενα Κεφάλαια. Μάλιστα με τον τρόπο αυτό, μπορεί να επιτευχθεί η ενιαία αντιμετώπιση όλου του φάσματος του αριθμού Kn κάτι ιδιαίτερα σημαντικό. Η εφαρμογή τους όμως παρουσιάζει ορισμένες διαφοροποιήσεις σε σχέση με όλες τις περιπτώσεις που αντιμετωπίστηκαν μέχρι τώρα.

Από φυσικής άποψης, οι κύριες διαφοροποιήσεις έγκειται στο γεγονός ότι οι διανυσματικές μακροσκοπικές ιδιότητες όπως η ταχύτητα και η θερμοροή έχουν πλέον (στο δισδιάστατο πρόβλημα) δύο συνιστώσες μη μηδενικές. Ταυτόχρονα δεν μπορεί πλέον οι

¹ Θεωρητικά βέβαια, η μεθοδολογία είναι εφαρμόσιμη σε όλο το εύρος του αριθμού Kn αλλά οι απαιτήσεις σε υπολογιστικούς πόρους και χρόνο την καθιστούν ανεφάρμοστη, ενώ ταυτόχρονα όταν οι ταχύτητες είναι μικρές η ύπαρξη θορύβου παραποιεί τα αποτελέσματα.

αποκλίσεις της πυκνότητας να θεωρούνται μηδενικές μιας και τα φαινόμενα συμπιεστότητας είναι σημαντικά.

Από υπολογιστική άποψη, καθίσταται ανέφικτη η προβολή του προβλήματος στο χώρο της ορμής, όπως συνέβη στις προηγούμενες περιπτώσεις, ή στους χώρους της ορμής και της θερμορροής. Μπορεί να γίνει βέβαια προβολή της τρίτης συνιστώσας της μικροσκοπικής ταχύτητας, μιας και θεωρείται ότι τα φαινόμενα είναι δισδιάστατα, αλλά η διατύπωση δεν αλλάζει ουσιαστικά. Τέλος, ένα άλλο σημείο το οποίο είναι πολύ σημαντικό, είναι η ύπαρξη σημείων ασυνέχειας τα οποία γενικά δυσκολεύουν την επίλυση. Για την αντιμετώπιση των δυσκολιών αυτών απαιτείται ειδική τεχνική η οποία και αναπτύσσεται στη Παράγραφο 8.6.

Στη συνέχεια παρουσιάζεται αναλυτικά η μεθοδολογία επίλυσης του προβλήματος ροής σε κοιλότητα βασιζόμενη στη μέθοδο των διακριτών μοντέλο συγκρούσεων το BGK και οριακές συνθήκες τύπου διάχυσης. Το αριθμητικό σχήμα φαίνεται αρκετά αποτελεσματικό και ακριβές. Τα αποτελέσματα που εξάγονται αφορούν όλο το εύρος του αριθμού Knudsen, και διάφορες τιμές του λόγου των διαστάσεων της κοιλότητας και περιλαμβάνουν διάφορα μακροσκοπικά μεγέθη με σημαντικό ενδιαφέρον. Τέλος σημειώνεται ότι η όλη προσέγγιση αφορά μικρές τιμές του αριθμού Reynolds και Mach και αυτό λόγω της γραμμικοποίησης που εφαρμόζεται στην εξίσωση Boltzmann.

8.2.1 Γεωμετρική διατύπωση του προβλήματος

Η υπό μελέτη ροή διαμορφώνεται εντός μιας κοιλότητας ορθογωνικής διατομής η οποία έχει ύψος H και πλάτος L . Η διαμόρφωση της διατομής και το σύστημα συντεταγμένων φαίνονται στο Σχήμα 8.1. Τα τοιχώματα στις θέσεις $y = 0$, $x = -L/2$ και $x = L/2$ είναι ακίνητα, ενώ η πλάκα στη θέση $y = H$ κινείται με σταθερή οριζόντια ταχύτητα U_0 . Η κίνηση αυτή αποτελεί και την αιτία της ροής. Όλα τα τοιχώματα θεωρούνται ισοθερμοκρασιακά με θερμοκρασία ίση με την θερμοκρασία αναφοράς T_0 . Ο λόγος A ορίζεται ως το πηλίκο του ύψους H προς το πλάτος της κοιλότητας L ($A = H/L$), ενώ ως χαρακτηριστικό μήκος της ροής θεωρείται το πλάτος L . Έτσι προκύπτει ότι ο λόγος A είναι ίσος προς το αδιάστατο ύψος της κοιλότητας. Τα αποτελέσματα που θα παρουσιαστούν στη συνέχεια αφορούν τιμές του A που κυμαίνονται μεταξύ $0.5 < A < 5$. Τέλος σημειώνεται ότι η τρίτη διάσταση της κοιλότητας z θεωρείται ότι έχει άπειρο μήκος ώστε η ροή να μπορεί να αντιμετωπιστεί ως δισδιάστατη.

8.3 Διατύπωση μαθηματικού μοντέλου

Η εξίσωση Boltzmann για μόνιμη ροή και με μοντέλο συγκρούσεων το BGK έχει τη μορφή

$$\xi \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \frac{P}{\mu} (f^{eq} - f) \quad (8.1)$$

όπου $f = f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi})$ είναι η συνάρτηση κατανομής, \mathbf{r} είναι το άνωσμα θέσης, $\boldsymbol{\xi} = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$ είναι η μικροσκοπική ταχύτητα, P η τοπική πίεση και μ είναι το ιξώδες του ρευστού στην τοπική θερμοκρασία T . Επίσης f^{eq} είναι η τοπική κατανομή ισορροπίας Maxwell που δίνεται από τη σχέση

$$f_{loc}^{(eq)}(\mathbf{r}, t) = n(\mathbf{r}, t) \left(\frac{m}{2\pi k_B T(\mathbf{r}, t)} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{m(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t))^2}{2k_B T(\mathbf{r}, t)}}. \quad (3.15)$$

Οι τοπικές μακροσκοπικές ποσότητες προκύπτουν από τις σχέσεις (3.3-3.9). Τέλος σημειώνεται ότι ισχύει η καταστατική εξίσωση των αερίων προσδιορισμένη όμως βάσει των τοπικών μακροσκοπικών ιδιοτήτων, δηλαδή $P = nkT$.

Η κατάσταση ισορροπίας διαταράσσεται από την κίνηση της άνω πλάκας η οποία κινείται με σταθερή ταχύτητα $U_0 \ll v_0$, όπου $v_0 = \sqrt{2RT_0}$ είναι η χαρακτηριστική μοριακή ταχύτητα. Στην περίπτωση αυτή μπορεί να θεωρηθεί ότι το ρευστό βρίσκεται μεν σε κατάσταση εκτός ισορροπίας, αλλά αρκετά κοντά σε αυτή και επομένως η ροή μπορεί να περιγραφεί από τη γραμμικοποιημένη έκφραση της εξίσωσης (8.1). Σε αυτή, ως άγνωστη συνάρτηση κατανομής ορίζεται η $h = h(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi})$ που συνδέεται με την αρχική μέσω της σχέσης

$$f = f_{gl}^{(eq)} \left(1 + h \frac{U_0}{v_0} \right) \quad (8.2)$$

όπου η ποσότητα $f_{gl}^{(eq)}$ δίνεται από τη σχέση

$$f_{gl}^{(eq)} = n_0 \left(\frac{m}{2\pi k_B T_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{m\xi^2}{2k_B T_0}} \quad (8.3)$$

και αποτελεί τη απόλυτη κατανομή ισορροπίας οριζόμενη από μια μοριακή συγκέντρωση αναφοράς n_0 και μια θερμοκρασία αναφοράς T_0 . Αν τώρα αναπτυχθεί η τοπική κατανομή ισορροπίας $f_{loc}^{(eq)}$ ως προς την απόλυτη, χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα Taylor και κρατώντας όρους μέχρι πρώτης τάξεως προκύπτει:

$$f_{loc}^{(eq)} = f_{gl}^{(eq)} \left[1 + \varrho \frac{U_0}{v_0} + \frac{\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{V}}{RT_0} + \tau \frac{U_0}{v_0} \left(\frac{\xi^2}{2RT_0} - \frac{3}{2} \right) \right] \quad (8.4)$$

και οι αδιάστατες μακροσκοπικές ποσότητες πλέον ορίζονται ως

$$\varrho = \frac{n - n_0}{n_0} \frac{v_0}{U_0} \quad \text{και} \quad \tau = \frac{T - T_0}{T_0} \frac{v_0}{U_0}. \quad (8.5)$$

Στη συνέχεια αν αντικατασταθούν οι εξισώσεις (8.2) και (8.4) στην εξίσωση (8.1) λαμβάνεται η γραμμικοποιημένη εξίσωση Boltzmann με μοντέλο συγκρούσεων το BGK

$$\boldsymbol{\xi} \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}} = \frac{P_0}{\mu_0} \left[\varrho + \frac{\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{V}}{RT_0} \frac{v_0}{U_0} + \tau \left(\frac{\xi^2}{2RT_0} - \frac{3}{2} \right) - h \right] \quad (8.6)$$

όπου P_0 και μ_0 αντιστοιχούν στην πίεση ισορροπίας και το ιξώδες του ρευστού σε θερμοκρασία T_0 αντίστοιχα. Τέλος ορίζοντας τις αδιάστατες ποσότητες

$$\mathbf{s} = \frac{\mathbf{r}}{L}, \quad \mathbf{c} = \frac{\boldsymbol{\xi}}{\sqrt{2RT_0}}, \quad \text{και} \quad \mathbf{u} = \frac{\mathbf{V}}{U_0} \quad (8.7)$$

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

$$\mathbf{c} \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{s}} + \delta h = \delta \left[\varrho + 2\mathbf{c} \cdot \mathbf{u} + \tau \left(c^2 - \frac{3}{2} \right) \right] \quad (8.8)$$

με την παράμετρο αραιοποίησης δ να δίνεται ως γνωστόν από τη σχέση

$$\delta = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{Kn} = \frac{P_0 L}{\mu_0 \sqrt{2RT_0}}. \quad (8.9)$$

Οι αδιάστατες αποκλίσεις της πυκνότητας, της ταχύτητας και της θερμοκρασίας από τα αντίστοιχα μεγέθη σε κατάσταση ισορροπίας, δίνονται ως ροπές της h από τις σχέσεις

$$\varrho = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} h e^{-c^2} d\mathbf{c}, \quad \mathbf{u} = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{c} h e^{-c^2} d\mathbf{c} \quad \text{και} \quad \tau = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{2}{3} c^2 - 1 \right) h e^{-c^2} d\mathbf{c} \quad (8.10)$$

Επιπλέον, το αδιάστατο μητρώο των τάσεων είναι

$$\Pi_{ij} = \frac{P_{ij} v_0}{2P_0 U_0} = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} c_i c_j h e^{-c^2} d\mathbf{c}, \quad i = x, y, z, \quad j = x, y, z, \quad i \neq j, \quad (8.11)$$

ενώ και η απόκλιση της πίεσης δίνεται από τη σχέση

$$p = \frac{P - P_0}{P_0} \frac{v_0}{U_0} = \varrho + \tau. \quad (8.12)$$

Η εξίσωση (8.12) αποτελεί την γραμμικοποιημένη μορφή της καταστατικής εξίσωσης.

8.4 Διαμόρφωση εξισώσεων με προβολή της τρίτης διάστασης

Η υπό μελέτη ροή όπως έχει ήδη αναφερθεί είναι δισδιάστατη εφόσον τα οριακά φαινόμενα στην τρίτη διάσταση έχουν παραβλεφθεί θεωρώντας το βάθος της κοιλότητας άπειρο. Το γεγονός αυτό καθιστά τόσο την συνάρτηση κατανομής h όσο και τις μακροσκοπικές ποσότητες μεταβλητές ανεξάρτητες της διάστασης z και επομένως ισχύει ότι $h(\mathbf{s}, \mathbf{c}) = h(x, y, c_x, c_y, c_z)$ ενώ οι μακροσκοπικές ποσότητες, είναι συναρτήσεις μόνο των x, y . Ταυτόχρονα, η δισδιάστατη φύση της ροής επιτρέπει την απάλειψη της τρίτης συνιστώσας της μικροσκοπικής ταχύτητας c_z μέσω της εφαρμογής της τεχνικής των προβολών που ήδη έχει εφαρμοστεί και στα προηγούμενα Κεφάλαια.

Μια σημαντική διαφοροποίηση σε σχέση με τη διαδικασία που ακολουθήθηκε στις προηγούμενα προβλήματα είναι ότι πλέον δεν μπορεί η προβολή να γίνει στον χώρο της ορμής και αυτό διότι δεν μπορεί να υποτεθεί ότι οι αποκλίσεις της πυκνότητας είναι μικρές. Επίσης, εφόσον ενδιαφέρει και ο υπολογισμός ποσοτήτων όπως η θερμοκρασία και η θερμοροή, είναι απαραίτητη η διπλή προβολή μιας και τα μεγέθη αυτά περιλαμβάνουν ροπές δεύτερης τάξης ως προς την συνιστώσα c_z όπως μπορεί να φανεί και από τους ορισμούς τους.

Προκειμένου να εξαχθεί η πρώτη εξίσωση μεταφοράς, πολλαπλασιάζεται η κινητική εξίσωση (8.8) με τη ποσότητα $\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-c_z^2}$ και η προκύπτουσα εξίσωση ολοκληρώνεται ως προς c_z . Για την δεύτερη εξίσωση μεταφοράς ακολουθείται η ίδια διαδικασία με τη διαφορά ότι η ποσότητα με την οποία πολλαπλασιάζεται η κινητική εξίσωση είναι η $\frac{1}{\sqrt{\pi}}(c_z^2 - \frac{1}{2})e^{-c_z^2}$. Οι εξισώσεις που προκύπτουν είναι

$$c_x \frac{\partial \phi}{\partial x} + c_y \frac{\partial \phi}{\partial y} + \delta \phi = \delta \left[\varrho + 2c_x u_x + 2c_y u_y + \tau(c_x^2 + c_y^2 - 1) \right] \quad (8.13)$$

και

$$c_x \frac{\partial \psi}{\partial x} + c_y \frac{\partial \psi}{\partial y} + \psi = \delta \frac{\tau}{2} \quad (8.14)$$

ενώ πλέον οι άγνωστες συναρτήσεις κατανομής ϕ και ψ συνδέονται με την h μέσω των σχέσεων

$$\phi(x, y, c_x, c_y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} h(x, y, c_x, c_y, c_z) e^{-c_z^2} dc_z \quad (8.15)$$

και

$$\psi(x, y, c_x, c_y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} h(x, y, c_x, c_y, c_z) \left(c_z^2 - \frac{1}{2} \right) e^{-c_z^2} dc_z \quad (8.16)$$

αντίστοιχα. Οι εξισώσεις (8.13) και (8.14) είναι αυτές που επιλύονται σε συνδυασμό με τις εξισώσεις ορισμού των μακροσκοπικών ποσοτήτων οι οποίες πλέον προσδιορίζονται βάσει των νέων συναρτήσεων κατανομής ως

$$\varrho(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi e^{-c_x^2 - c_y^2} dc_x dc_y, \quad (8.17)$$

$$u_x(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi c_x e^{-c_x^2 - c_y^2} dc_x dc_y, \quad (8.18)$$

$$u_y(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi c_y e^{-c_x^2 - c_y^2} dc_x dc_y, \quad (8.19)$$

$$\tau(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2}{3} [(c_x^2 + c_y^2 - 1)\phi + \psi] e^{-c_x^2 - c_y^2} dc_x dc_y, \quad (8.20)$$

και

$$\Pi_{xy}(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi c_x c_y e^{-c_x^2 - c_y^2} dc_x dc_y. \quad (8.21)$$

Η απαλοιφή μιας ή και περισσότερων συνιστωσών της μικροσκοπικής ταχύτητας, όπως και στις ροές που μελετήθηκαν σε προηγούμενα Κεφάλαια, είναι ζωτικής σημασίας όσον αφορά το υπολογιστικό κόστος και τον απαιτούμενο χρόνο. Βέβαια είναι προφανές ότι στην περίπτωση της επίλυσης προβλημάτων που παρουσιάζουν μεταβολές και στις τρεις διαστάσεις, όπως η ροή σε κοιλότητα με πεπερασμένη την τρίτη διάσταση, κάτι τέτοιο δεν είναι εφικτό και αναγκαστικά επιλύεται η κινητική εξίσωση (8.8).

Ένα άλλο σημείο που αξίζει να σημειωθεί είναι ότι παρά το γεγονός ότι τα τοιχώματα βρίσκονται όλα σε θερμοκρασία ίδια μεταξύ τους και ίση με T_0 , οι αποκλίσεις της θερμοκρασίας πρέπει να περιληφθούν στην επίλυση και αυτό λόγω των σημαντικών φαινομένων

συμπιεστότητας που παρουσιάζονται και τα οποία επηρεάζουν τη λύση. Παρόλα ταύτα, όπως θα φανεί και από την παράθεση των αποτελεσμάτων, η επίδραση αυτή δεν είναι σημαντική και στην περίπτωση όπου απαιτούνται αποτελέσματα με μικρότερη ακρίβεια και αφορούν μόνο τη κατανομή της συγκέντρωσης και το ροϊκό πεδίο, ο υπολογισμός της απόκλισης της θερμοκρασίας θα μπορούσε να παραλειφθεί. Κάτι τέτοιο υπολογιστικά είναι πολύ σημαντικό μιας και πλέον απαιτείται η επίλυση μόνο μίας εξίσωσης μεταφοράς (της 8.13), κάτι που μειώνει σημαντικά το υπολογιστικό χρόνο. Κάτι τέτοιο όμως θα πρέπει να γίνεται με επίγνωση του μεγέθους του σφάλματος της λύσης, ενώ ταυτόχρονα θα πρέπει να ληφθεί υπόψη ότι το συμπέρασμα αυτό αφορά αποκλειστικά τη συγκεκριμένη ροή και δεν έχει γενική εφαρμοσιμότητα. Τέλος, σημειώνεται ότι με αυτή την προσέγγιση δεν είναι δυνατός πλέον ο έλεγχος της λύσης που προκύπτει μέσω της καταστατικής εξίσωσης εφόσον τόσο η πίεση όσο και η θερμοκρασία δεν μπορούν να υπολογιστούν.

Μια επιπλέον αλλαγή που μπορεί να γίνει είναι η μεταφορά του πεδίου των μικροσκοπικών ταχυτήτων στο πολικό σύστημα συντεταγμένων (ή στο σφαιρικό αν επρόκειτο για το πλήρες τρισδιάστατο πρόβλημα), ενόσω οι χωρικές συντεταγμένες παραμένουν σε καρτεσιανό σύστημα. Κάτι τέτοιο έχει αποδειχθεί ότι συμβάλλει σημαντικά στην βελτίωση της ακρίβειας των αποτελεσμάτων. Έτσι ορίζοντας τις νέες μεταβλητές $0 \leq \mu < \infty$ και $0 \leq \theta \leq 2\pi$ ως

$$\mu = \sqrt{c_x^2 + c_y^2} \quad \text{και} \quad \theta = \arctan(c_y/c_x) \quad (8.22)$$

Οι εξισώσεις μεταφοράς (8.13) και (8.14) επαναδιατυπώνονται ως

$$\mu \left[\cos\theta \frac{\partial \phi}{\partial x} + \sin\theta \frac{\partial \phi}{\partial y} \right] + \delta\phi = \delta \left[\varrho + 2\mu(u_x \cos\theta + u_y \sin\theta) + \tau(\mu^2 - 1) \right] \quad (8.23)$$

και

$$\mu \left[\cos\theta \frac{\partial \psi}{\partial x} + \sin\theta \frac{\partial \psi}{\partial y} \right] + \delta\psi = \delta \frac{\tau}{2}. \quad (8.24)$$

ενώ και οι μακροσκοπικές ποσότητες δίνονται από τις σχέσεις

$$\varrho(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \phi \mu e^{-\mu^2} d\mu d\theta, \quad (8.25)$$

$$u_x(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \phi \mu^2 e^{-\mu^2} \cos\theta d\mu d\theta \quad (8.26)$$

$$u_y(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \phi \mu^2 e^{-\mu^2} \sin\theta d\mu d\theta \quad (8.27)$$

$$\tau(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \frac{2}{3} [(\mu^2 - 1)\phi + \psi] \mu e^{-\mu^2} d\mu d\theta \quad (8.28)$$

και

$$\Pi_{xy}(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \phi \mu^3 e^{-\mu^2} \sin\theta \cos\theta d\mu d\theta. \quad (8.29)$$

Οι συζευγμένες ολοκληρο-διαφορικές εξισώσεις (8.23) και (8.24) αποτελούν τις κύριες εξισώσεις που επιλύονται στην περίπτωση της δισδιάστατης ροής σε κοιλότητα. Αφού υπολογιστούν οι άγνωστες συναρτήσεις ϕ και ψ , οι μακροσκοπικές ποσότητες προκύπτουν μέσω των ολοκληρωτικών εξισώσεων (8.25-8.29).

8.5 Οριακές συνθήκες

Οι οριακές συνθήκες στα τοιχώματα θεωρήθηκε ότι είναι τύπου Maxwell διάχυσης-ανάκλασης. Έτσι, αν θεωρήσουμε ότι η κατανομή των προσπιπτόντων σωματιδίων συμβολίζεται με (f^-) και των εκπεμπόμενων σωματιδίων (f^+) τότε ισχύει ότι

$$f^+ = a f_{\text{τοιχ}}^{eq} + (1 - a) f^- \quad (8.30)$$

όπου a είναι η γνωστή σταθερά ανάκλασης (βλ. Παράγραφο 2.2.2) που εξαρτάται από τον συνδυασμό ρευστού-τοιχώματος, ενώ

$$f_{\text{τοιχ}}^{eq} = \frac{n_{\text{τοιχ}}}{(2\pi RT_{\text{τοιχ}})^{3/2}} e^{-(\xi - U_{\text{τοιχ}})^2} \quad (8.31)$$

είναι η τοπική κατανομή ισορροπίας που προσδιορίζεται από τη συγκέντρωση στο τοίχωμα καθώς και την ταχύτητα $U_{\text{τοιχ}}$ και τη θερμοκρασία $T_{\text{τοιχ}}$ του τοιχώματος.

Εφαρμόζοντας και στις οριακές συνθήκες τη γραμμικοποίηση που χρησιμοποιήθηκε και στις εξισώσεις μεταφοράς προκύπτει ότι

$$h^+ = a \left[\rho_{\text{τοιχ}} + 2c \cdot \frac{U_{\text{τοιχ}}}{U_0} + \tau_{\text{τοιχ}} \left(c^2 - \frac{3}{2} \right) \right] + (1 - a) h^- \quad (8.32)$$

όπου οι ποσότητες $U_{\text{τοιχ}}/U_0$ και $\tau_{\text{τοιχ}}$ αντιστοιχούν στην αδιάστατη ταχύτητα και θερμοκρασία του τοιχώματος. Η αδιάστατη πυκνότητα $\rho_{\text{τοιχ}}$ προκύπτει εφαρμόζοντας την αρχή της μη-διαπερατότητας στο τοίχωμα σύμφωνα με την οποία, η κάθετη στο τοίχωμα συνιστώσα της ταχύτητας πρέπει να μηδενίζεται [184]. Στη συνέχεια, αν εφαρμοστεί η γνωστή πλέον διαδικασία της διπλής προβολής και της μεταφοράς σε πολικό σύστημα συντεταγμένων που περιγράφηκε στην Παράγραφο 8.4, οι εξισώσεις που προκύπτουν είναι

$$\phi^+ = a \left[\rho_{\text{τοιχ}} + 2\mu \left[\cos\theta \frac{(U_{\text{τοιχ}})_x}{U_0} + \sin\theta \frac{(U_{\text{τοιχ}})_y}{U_0} \right] + \tau_{\text{τοιχ}} (\mu^2 - 1) \right] + (1 - a) \phi^- \quad (8.33)$$

και

$$\psi^+ = a \frac{\tau_{\text{τοιχ}}}{2} + (1 - a) \psi^-. \quad (8.34)$$

Υπενθυμίζεται ότι οι εκθέτες $+$ και $-$ συμβολίζουν την κατανομή των εκπεμπόμενων και των προσπιπτόντων σωματιδίων αντίστοιχα, ενώ οι ποσότητες $(U_{\text{τοιχ}})_x$ και $(U_{\text{τοιχ}})_y$ αποτελούν τις συνιστώσες στις διευθύνσεις x και y της ταχύτητας του τοιχώματος. Τέλος, αν ληφθεί υπόψη ότι τα τρία τοιχώματα παραμένουν ακίνητα ενώ η πάνω πλάκα κινείται μόνο στη διεύθυνση x με ταχύτητα U_0 , καθώς και την ισοθερμοκρασιακή κατάσταση στην

οποία βρίσκονται τα τοιχώματα (σε θερμοκρασία ($\tau_{\text{τοιχ}} = 0$)), οι οριακές συνθήκες για τα τρία ακίνητα τοιχώματα μπορούν να γραφούν ως

$$\phi(x, 0, \mu, \theta) = \rho_{\text{τοιχ}}(x, 0), \quad \psi(x, 0, \mu, \theta) = 0, \quad \mu \epsilon \quad 0 < \theta < \pi, \quad (8.35)$$

$$\phi(-\frac{1}{2}, y, \mu, \theta) = \rho_{\text{τοιχ}}(-\frac{1}{2}, y), \quad \psi(-\frac{1}{2}, y, \mu, \theta) = 0, \quad \mu \epsilon \quad -\frac{\pi}{2} < \theta < \frac{\pi}{2}, \quad (8.36)$$

$$\phi(\frac{1}{2}, y, \mu, \theta) = \rho_{\text{τοιχ}}(\frac{1}{2}, y), \quad \psi(\frac{1}{2}, y, \mu, \theta) = 0, \quad \mu \epsilon \quad \frac{\pi}{2} < \theta < \frac{3\pi}{2} \quad (8.37)$$

ενώ για την κινούμενη πλάκα ($y = A = H/L$)

$$\phi(x, A, \mu, \theta) = \rho_{\text{τοιχ}}(x, A) + 2\mu \cos\theta, \quad \psi(x, A, \mu, \theta) = 0, \quad \mu \epsilon \quad \pi < \theta < 2\pi. \quad (8.38)$$

Στη συνέχεια και για λόγους απλότητας, η παράμετρος ανάκλασης στις εξισώσεις (8.35-8.38) λαμβάνεται για όλα τα τοιχώματα ίση με ένα ($a = 1$). Η πυκνότητα και για τα τέσσερα τοιχώματα και εφαρμόζοντας της αρχή της μη διείδυσης, υπολογίζεται μέσω των σχέσεων

$$\varrho_{\text{τοιχ}}(x, 0) = -\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\pi}^{2\pi} \int_0^{\infty} \phi(x, 0, \mu, \theta) \mu^2 e^{-\mu^2} \sin\theta d\mu d\theta, \quad (8.39)$$

$$\varrho_{\text{τοιχ}}(-\frac{1}{2}, y) = -\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{3\pi}{2}} \int_0^{\infty} \phi(-\frac{1}{2}, y, \mu, \theta) \mu^2 e^{-\mu^2} \cos\theta d\mu d\theta, \quad (8.40)$$

$$\varrho_{\text{τοιχ}}(\frac{1}{2}, y) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\pi}^{2\pi} \int_0^{\infty} \phi(\frac{1}{2}, y, \mu, \theta) \mu^2 e^{-\mu^2} \cos\theta d\mu d\theta \quad (8.41)$$

$$\varrho_{\text{τοιχ}}(x, A) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} \phi(x, A, \mu, \theta) \mu^2 e^{-\mu^2} \sin\theta d\mu d\theta \quad (8.42)$$

και επομένως για την εύρεση των συναρτήσεων κατανομής ϕ και ψ επιλύονται οι εξισώσεις (8.23) και (8.24) υποκειμένες στις οριακές συνθήκες (8.35-8.38) με την βοήθεια των (8.39-8.42).

8.6 Αντιμετώπιση των ασυνεχειών στις οριακές συνθήκες

Η διάδοση ασυνεχειών των οριακών συνθηκών εντός της ροής και η επίδραση που αυτές έχουν στη συνάρτηση κατανομής και στις μακροσκοπικές ιδιότητες αποτελεί σημαντική πηγή δυσκολιών και έχει απασχολήσει διαφόρους ερευνητές [213, 214]. Εξαιτίας των ασυνεχειών, σε πολλές από τις μακροσκοπικές ποσότητες παρατηρούνται κυματισμοί και ταλαντωτικά φαινόμενα χωρίς φυσική ερμηνεία. Η συμπεριφορά αυτή είναι καθαρά αριθμητικής φύσης και προκαλείται από την προσέγγιση των πεπερασμένων διαφορών κατά μήκος των ασυνεχειών. Αποτελεί σύννηθες φαινόμενο στην περιοχή της μελέτης

νετρονίων γνωστό και ως ray effect (φαινόμενα ρυτιδώσεων). Αυξάνοντας την ανάλυση στον χώρο των μικροσκοπικών ταχυτήτων παρότι μειώνεται το πλάτος των κυματισμών αυξάνει η συχνότητά τους.

Ένας πιο αποτελεσματικός τρόπος για την αντιμετώπιση του φαινομένου αυτού, αποτελεί η διάσπαση του προβλήματος σε δύο υποπροβλήματα στα οποία στο καθένα ξεχωριστά είτε δεν αντιμετωπίζονται προβλήματα ασυνέχειας, είτε δεν είναι απαραίτητη η εφαρμογή αριθμητικής λύσης. Αντίστοιχη μεθοδολογία έχει παρουσιαστεί πρόσφατα για την αντιμετώπιση προβλημάτων στην περίπτωση της μονοδιάστατης εξίσωσης μεταφοράς μίας ταχύτητας σε ημιάπειρα χωρία [214].

Στην περίπτωση της ροής σε κοιλότητα, οι ασυνέχειες που παρουσιάζονται είναι δύο μορφών. Η πρώτη αφορά τεχνητές ασυνέχειες που προκαλούνται από τον τρόπο με τον οποίο υπολογίζεται η πυκνότητα στους γωνιακούς κόμβους. Στα σημεία αυτά, η πυκνότητα οφείλει να ικανοποιεί τη συνθήκη της μη διείσδυσης τόσο στην διεύθυνση x όσο και στη διεύθυνση y και επομένως πρέπει να λάβει δύο διαφορετικές τιμές. Οι ασυνέχειες αυτές δεν αποτελούν όμως σημαντική πηγή προβλημάτων και μπορούν να αντιμετωπιστούν σχετικά απλά, όπως για παράδειγμα, με προσδιορισμό της πυκνότητας στους γωνιακούς κόμβους με προεξβολή των τιμών των γειτονικών κόμβων. Η τεχνική αυτή χρησιμοποιείται και στην παρούσα μελέτη.

Η δεύτερη μορφή ασυνεχειών είναι φυσική και προκαλείται στους γωνιακούς κόμβους όπου η ταχύτητα καθορίζεται τόσο από την ταχύτητα του στατικού τοιχώματος όσο και από αυτή του κινούμενου τοιχώματος. Γενικότερα οι οριακοί κόμβοι στην κινούμενη πλάκα εκπέμπουν τα σωματίδια με κατανομές πολύ διαφορετικές από ότι οι αντίστοιχοι κόμβοι των στατικών τοιχωμάτων. Το γεγονός αυτό, προκαλεί έντονες ασυνέχειες στη συνάρτηση κατανομής σε όλους τους εσωτερικούς κόμβους. Οι ασυνέχειες αυτές βέβαια σχεδιάζονται αναλογικά με την απόσταση που το σημείο έχει από την πηγή της ασυνέχειας. Η σκέδαση αυτή όμως εκτός από την αναλογικότητα που παρουσιάζει ως προς την απόσταση από την πηγή της ασυνέχειας, είναι ανάλογη και με τον όρο των σωματιδιακών συγκρούσεων. Επομένως σημαντικά προβλήματα παρουσιάζονται κοντά στους γωνιακούς κόμβους της κινούμενης πλάκας καθώς και για μικρές τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ . Σημειώνεται επίσης ότι τα προβλήματα αυτά αφορούν την συνάρτηση κατανομής ϕ μιας και οι οριακές συνθήκες της ψ δεν επηρεάζονται από την ταχύτητα των τοιχωμάτων.

Προκειμένου να περιγραφεί η μεθοδολογία αντιμετώπισης των ασυνεχειών, η εξίσωση (8.23) γράφεται ως

$$D\phi + \delta\phi = \delta I \quad (8.43)$$

όπου

$$D = \mu \left[\cos\theta \frac{\partial}{\partial x} + \sin\theta \frac{\partial}{\partial y} \right] = -\mu \frac{\partial}{\partial s} \quad (8.44)$$

αντιπροσωπεύει τον διαφορικό τελεστή που εφαρμόζεται στην ποσότητα ϕ , ενώ s είναι η χαρακτηριστική διεύθυνση και

$$I = \rho + 2\mu(u_x \cos\theta + u_y \sin\theta) + \tau(\mu^2 - 1). \quad (8.45)$$

Στη συνέχεια η ποσότητα ϕ χωρίζεται σε δύο κομμάτια

$$\phi = \phi_1 + \phi_2. \quad (8.46)$$

Η εξίσωση (8.46) αντικαθίσταται στην εξίσωση (8.43) και εφαρμόζονται οι αντίστοιχες οριακές συνθήκες (8.35-8.38) ώστε να προκύψουν τα δύο υποπροβλήματα. Το πρώτο αφορά τη ποσότητα ϕ_1 , και περιγράφεται από την διαφορική εξίσωση

$$D\phi_1 + \delta\phi_1 = 0 \quad (8.47)$$

με $\phi_1^+ = 0$ στα τρία ακίνητα τοιχώματα, και $\phi_1^+ = 2\mu\cos\theta$ στο κινούμενο τοίχωμα (το θετικό πρόσημο συμβολίζει το ότι η ποσότητα αφορά την κατανομή των εκπεπομένων σωματιδίων). Το πρόβλημα αυτό μπορεί να λυθεί αναλυτικά ολοκληρώνοντας κατά μήκος της χαρακτηριστικής. Η λύση που προκύπτει είναι

$$\phi_1(x, y, \mu, \theta) = \phi_1^+ e^{-\delta s_0/\mu} \quad (8.48)$$

όπου s_0 είναι η απόσταση κατά μήκος της χαρακτηριστικής μεταξύ του σημείου (x, y) και του αντίστοιχου οριακού σημείου και ϕ_1^+ η τιμή στο σημείο όπου η χαρακτηριστική τέμνει το τοίχωμα.

Το δεύτερο υποπρόβλημα αφορά τη μεταβλητή ϕ_2 , που περιγράφεται από την ολοκληρο-διαφορική εξίσωση

$$D\phi_2 + \delta\phi_2 = \delta I \quad (8.49)$$

με $\phi_2^+ = \varrho_{\text{τοιχ}}$ και στα τέσσερα τοιχώματα και $\varrho_{\text{τοιχ}}$ την πυκνότητα στο αντίστοιχο σημείο του τοιχώματος που δίνεται από τις εξισώσεις (8.39-8.42).

Όπως είναι φανερό, το πρόβλημα που πρέπει να επιλυθεί αριθμητικά είναι αυτό που αφορά τη μεταβλητή ϕ_2 στο οποίο πλέον οι οριακές συνθήκες δεν περιλαμβάνουν τις ασυνέχειες που οφείλονται στην κίνηση της πλάκας. Σε κάθε επανάληψη απαιτείται πλέον η επίλυση των εξισώσεων μεταφοράς που αφορούν τις ϕ_2 και ψ . Στις τιμές που προκύπτουν για την ϕ_2 προστίθεται στη συνέχεια η αντίστοιχη τιμή που έχει προκύψει από την αναλυτική λύση για την ϕ_1 και πλέον μπορούν να υπολογιστούν όλες οι μακροσκοπικές ποσότητες. Είναι προφανές ότι η ϕ_1 επιλύεται μόνο μια φορά και χρησιμοποιείται καθ' όλη την επαναληπτική διαδικασία.

Ακολουθώντας την παραπάνω διαδικασία πλέον οι ταλαντωτική συμπεριφορά των αποτελεσμάτων εξαφανίζεται ολοκληρωτικά.

8.7 Αριθμητικό σχήμα

Οι συζευγμένες ολοκληροδιαφορικές εξισώσεις (8.23) και (8.24), σε συνδυασμό με τις ολοκληρωτικές εκφράσεις (8.25-8.28) για τις μακροσκοπικές ποσότητες και τις αντίστοιχες οριακές συνθήκες (8.35-8.38) επιλύονται αριθμητικά μέσω επαναληπτικού σχήματος. Η διακριτοποίηση στον χώρο των μικροσκοπικών ταχυτήτων βασίζεται στη γνωστή πλέον

μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων για τις εξισώσεις μόνιμης ροής [29]. Στο φυσικό χώρο ακολουθείται μια διαφοροποιημένη σχετικά μεθοδολογία, με στόχο να συμβαδίζει το σχήμα επίλυσης με την φύση των εξισώσεων αλλά και να επιτευχθεί μεγαλύτερη ακρίβεια. Για να καταστεί αυτό δυνατό, οι εξισώσεις επιλύονται κατά μήκος της χαρακτηριστικής χρησιμοποιώντας ένα σχήμα δεύτερης τάξης (βλ. Σχήματα 8.2 και 8.3). Οι εξισώσεις μεταφοράς σε αυτή τη περίπτωση παίρνουν τη μορφή:

$$\mu \frac{\partial \phi_2}{\partial s} + \delta \phi_2 = \delta \left[\rho + 2\mu(u_x \cos\theta + u_y \sin\theta) + \tau(\mu^2 - 1) \right] \quad (8.50)$$

και

$$\mu \frac{\partial \psi}{\partial s} + \delta \psi = \delta \frac{\tau}{2} \quad (8.51)$$

όπου s το άνωμα του διαστήματος πάνω στη χαρακτηριστική. Οι ποσότητες μ και s μπορούν να αντικατασταθούν από το μέτρο τους εφόσον πλέον έχουν την ίδια διεύθυνση. Οι εξισώσεις επιλύονται στο σημείο N που είναι το μέσο του τμήματος της χαρακτηριστικής που διασχίζει το κελί υπολογισμού. Στην συνέχεια περιγράφεται το σχήμα για την περίπτωση όπου $0 < \theta < \pi/2$. Με αντίστοιχο τρόπο γίνεται η επίλυση και στις υπόλοιπες περιπτώσεις.

Οι διακριτοποιημένες εξισώσεις είναι:

$$\mu \frac{(\phi_2)_{i,j} - (\phi_2)_M}{\Delta s} + \delta \frac{(\phi_2)_{i,j} + (\phi_2)_M}{2} = \delta \left[\rho_N + 2\mu[(u_x)_N \cos\theta + (u_y)_N \sin\theta] + \tau_N(\mu^2 - 1) \right] \quad (8.52)$$

και

$$\mu \frac{\psi_{i,j} - \psi_M}{\Delta s} + \delta \frac{\psi_{i,j} + \psi_M}{2} = \delta \frac{\tau_N}{2} \quad (8.53)$$

Στη συνέχεια πρέπει να γίνει διάκριση σε δύο περιπτώσεις, η πρώτη είναι όταν η χαρακτηριστική τέμνει την απέναντι κάθετη πλευρά του κελιού υπολογισμού ($\theta < \theta_{ref} = \arctan(\Delta x/\Delta y)$) και η δεύτερη όταν τέμνει την απέναντι οριζόντια πλευρά ($\theta > \theta_{ref}$). Στην πρώτη περίπτωση ισχύουν οι σχέσεις

$$s = \frac{\Delta x}{\cos(\theta)}, \quad k'_2 = \frac{k_2}{\Delta y} = \frac{\tan(\theta)}{\tan(\theta_{ref})}, \quad k'_1 = \frac{k_1}{\Delta y} = 1 - \frac{\tan(\theta)}{\tan(\theta_{ref})} \quad (8.54)$$

με την βοήθεια των οποίων και χρησιμοποιώντας γραμμική παρεμβολή μπορεί να προκύψει ότι

$$(\phi_2)_M = k'_1(\phi_2)_{i-1,j} + k'_2(\phi_2)_{i-1,j-1} \quad (8.55)$$

και

$$\psi_M = k'_1\psi_{i-1,j} + k'_2\psi_{i-1,j-1}. \quad (8.56)$$

Αντικαθιστώντας τις σχέσεις (8.55) και (8.56) στις (8.52) και (8.53) και επιλύοντας ως προς $(\phi_2)_{i,j}$ και $\psi_{i,j}$ αντίστοιχα:

$$\begin{aligned} (\phi_2)_{i,j} = & \frac{\frac{\mu}{\Delta s} - \frac{\delta}{2}}{\frac{\mu}{\Delta s} + \frac{\delta}{2}} \left(k'_1(\phi_2)_{i-1,j} + k'_2(\phi_2)_{i-1,j-1} \right) + \\ & + \frac{\delta}{\frac{\mu}{\Delta s} + \frac{\delta}{2}} \left(\rho_N + 2\mu((u_x)_N \cos\theta + (u_y)_N \sin\theta) + \tau_N(\mu^2 - 1) \right) \end{aligned} \quad (8.57)$$

και

$$\psi_{i,j} = \frac{\frac{\mu}{\Delta s} - \frac{\delta}{2}}{\frac{\mu}{\Delta s} + \frac{\delta}{2}} (k'_1 \psi_{i-1,j} + k'_2 \psi_{i-1,j-1}) + \frac{\delta}{\frac{\mu}{\Delta s} + \frac{\delta}{2}} \left(\frac{\tau_N}{2} \right) \quad (8.58)$$

Οι μακροσκοπικές ποσότητες στο σημείο N προσδιορίζονται με γραμμική παρεμβολή σε δύο διαστάσεις, και υπολογίζονται βάσει των σχέσεων:

$$\varrho_N = \frac{k'_1}{4} (\varrho_{i,j-1} + \varrho_{i-1,j-1}) + \left(\frac{1}{2} - \frac{k'_2}{4} \right) (\varrho_{i,j} + \varrho_{i-1,j}) \quad (8.59)$$

$$(u_x)_N = \frac{k'_1}{4} ((u_x)_{i,j-1} + (u_x)_{i-1,j-1}) + \left(\frac{1}{2} - \frac{k'_2}{4} \right) ((u_x)_{i,j} + (u_x)_{i-1,j}) \quad (8.60)$$

$$(u_y)_N = \frac{k'_1}{4} ((u_y)_{i,j-1} + (u_y)_{i-1,j-1}) + \left(\frac{1}{2} - \frac{k'_2}{4} \right) ((u_y)_{i,j} + (u_y)_{i-1,j}) \quad (8.61)$$

$$\tau_N = \frac{k'_1}{4} (\tau_{i,j-1} + \tau_{i-1,j-1}) + \left(\frac{1}{2} - \frac{k'_2}{4} \right) (\tau_{i,j} + \tau_{i-1,j}) \quad (8.62)$$

Στην δεύτερη περίπτωση όπου ($\theta > \theta_{ref}$) ισχύουν οι σχέσεις

$$s = \frac{\Delta y}{\sin(\theta)}, \quad k'_2 = \frac{k_2}{\Delta x} = \frac{\tan(\theta_{ref})}{\tan(\theta)}, \quad k'_1 = \frac{k_1}{\Delta x} = 1 - \frac{\tan(\theta_{ref})}{\tan(\theta)} \quad (8.63)$$

ενώ ο υπολογισμός των $(\phi_2)_M$ και ψ_M γίνεται ως

$$(\phi_2)_M = k'_1 (\phi_2)_{i,j-1} + k'_2 (\phi_2)_{i-1,j-1} \quad (8.64)$$

και

$$\psi_M = k'_1 \psi_{i,j-1} + k'_2 \psi_{i-1,j-1} \quad (8.65)$$

Αντικαθιστώντας αυτή τη φορά τις σχέσεις (8.64) και (8.65) στις (8.52) και (8.53) και επιλύοντας ως προς $(\phi_2)_{i,j}$ και $\psi_{i,j}$ αντίστοιχα:

$$\begin{aligned} (\phi_2)_{i,j} = & \frac{\frac{\mu}{\Delta s} - \frac{\delta}{2}}{\frac{\mu}{\Delta s} + \frac{\delta}{2}} (k'_1 (\phi_2)_{i,j-1} + k'_2 (\phi_2)_{i-1,j-1}) + \\ & + \frac{\delta}{\frac{\mu}{\Delta s} + \frac{\delta}{2}} (\varrho_N + 2\mu((u_x)_N \cos\theta + (u_y)_N \sin\theta) + \tau_N(\mu^2 - 1)) \end{aligned} \quad (8.66)$$

και

$$\psi_{i,j} = \frac{\frac{\mu}{\Delta s} - \frac{\delta}{2}}{\frac{\mu}{\Delta s} + \frac{\delta}{2}} (k'_1 \psi_{i,j-1} + k'_2 \psi_{i-1,j-1}) + \frac{\delta}{\frac{\mu}{\Delta s} + \frac{\delta}{2}} \left(\frac{\tau_N}{2} \right) \quad (8.67)$$

Οι μακροσκοπικές ποσότητες στο σημείο N προσδιορίζονται με γραμμική παρεμβολή σε δύο διαστάσεις και υπολογίζονται βάσει των σχέσεων:

$$\varrho_N = \frac{k'_2}{4} (\varrho_{i,j} + \varrho_{i,j-1}) + \left(\frac{1}{2} - \frac{k'_1}{4} \right) (\varrho_{i-1,j} + \varrho_{i-1,j-1}) \quad (8.68)$$

$$(u_x)_N = \frac{k'_2}{4}((u_x)_{i,j} + (u_x)_{i,j-1}) + \left(\frac{1}{2} - \frac{k'_2}{4}\right)((u_x)_{i-1,j} + (u_x)_{i-1,j-1}) \quad (8.69)$$

$$(u_y)_N = \frac{k'_2}{4}((u_y)_{i,j} + (u_y)_{i,j-1}) + \left(\frac{1}{2} - \frac{k'_2}{4}\right)((u_y)_{i-1,j} + (u_y)_{i-1,j-1}) \quad (8.70)$$

$$\tau_N = \frac{k'_2}{4}(\tau_{i,j} + \tau_{i,j-1}) + \left(\frac{1}{2} - \frac{k'_2}{4}\right)(\tau_{i-1,j} + \tau_{i-1,j-1}) \quad (8.71)$$

Το σχήμα έτσι όπως διαμορφώνεται έχει ακρίβεια στη δυσμενέστερη περίπτωση ίδια με αυτή του σχήματος Diamond Difference. Ταυτόχρονα, βελτιώνεται και η ακρίβεια εξ αιτίας του γεγονότος ότι η εξίσωση ακολουθεί την χαρακτηριστική και η λύση δεν επηρεάζεται γενικά από φαινόμενα εκτός αυτής. Η παρατήρηση αυτή γίνεται πολύ εύκολα αντιληπτή όταν επιλύεται το πρόβλημα χωρίς την εφαρμογή της μεθοδολογίας που περιγράφηκε στη προηγούμενη παράγραφο και αφορά την αντιμετώπιση των ασυνεχειών στις οριακές συνθήκες. Η λύση που λαμβάνεται με το προτεινόμενο σχήμα διακριτοποίησης παρουσιάζει αρκετά μικρότερη ένταση των πτυχώσεων. Βέβαια δεν πρέπει αυτό να παρερμηνευθεί, μιας και για την σωστή και πλήρη αντιμετώπιση των αριθμητικών προβλημάτων είναι απαραίτητη η εφαρμογή της μεθοδολογίας της Παραγράφου 8.6.

Στον χώρο των μικροσκοπικών ταχυτήτων η διακριτοποίηση πραγματοποιείται επιλέγοντας μια κατάλληλη ομάδα διακριτών ταχυτήτων (μ_m, θ_n) , που ορίζονται στο πεδίο $0 \leq \mu_m < \infty$ και $0 \leq \theta_n \leq 2\pi$, με $m = 1, 2, \dots, M$ και $n = 1, 2, \dots, N$ αντίστοιχα. Το πλήθος των διακριτών ταχυτήτων που προκύπτει είναι $M \times N$.

Με βάση την διακριτοποίηση αυτή, οι συνεχείς συναρτήσεις $\phi(x, y, \mu, \theta)$ και $\psi(x, y, \mu, \theta)$ που περιγράφονται από τις ολοκληρο-διαφορικές εξισώσεις (8.23) και (8.24) αντικαθίστανται από τις διακριτοποιημένες $\phi_{i,j,m,n}$ και $\psi_{i,j,m,n}$ που υπολογίζονται από μια ομάδα αλγεβρικών εξισώσεων. Επομένως, προκύπτουν $2 \times M \times N$ εξισώσεις σε κάθε ένα από τα $I \times J$ στοιχεία. Στη συνέχεια μπορούν να υπολογιστούν οι μακροσκοπικές ποσότητες μέσω των παρακάτω σχέσεων:

$$\varrho_{i,j} = \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M w_m \phi_{i,j,m,n} \mu_m e^{-\mu_m^2} \Delta\theta, \quad (8.72)$$

$$(u_x)_{i,j} = \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M w_m \phi_{i,j,m,n} \mu_m^2 e^{-\mu_m^2} \cos\theta_n \Delta\theta, \quad (8.73)$$

$$(u_y)_{i,j} = \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M w_m \phi_{i,j,m,n} \mu_m^2 e^{-\mu_m^2} \sin\theta_n \Delta\theta, \quad (8.74)$$

και

$$\tau_{i,j} = \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M \frac{2}{3} w_m [(\mu_m^2 - 1)\phi_{i,j,m,n} + \psi_{i,j,m,n}] \mu_m e^{-\mu_m^2} \Delta\theta. \quad (8.75)$$

όπου μ_m και w_m είναι οι ρίζες και οι αντίστοιχοι συντελεστές βαρύτητας ενός κατάλληλου πολυωνύμου τύπου Gauss οριζόμενου στο διάστημα $[0, \infty)$, ενώ $\Delta\theta = 2\pi/N$. Με ανάλογο

τρόπο προκύπτει

$$\Pi_{i,j} = \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M w_m \phi_{i,j,m,n} \mu_m^3 e^{-\mu_m^2} \sin\theta_n \cos\theta_n \Delta\theta. \quad (8.76)$$

Η διακριτοποιημένη μορφή των εξισώσεων (8.23) και (8.24) καθώς και τα αντίστοιχα αθροίσματα (8.72-8.75) επιλύονται με επαναληπτική διαδικασία η οποία και τερματίζεται όταν το κριτήριο σύγκλισης που έχει τεθεί ικανοποιηθεί. Σε κάθε επαναληπτικό βήμα η τιμή της συνάρτησης κατανομής υπολογίζεται για κάθε διακριτή ταχύτητα (μ_m, θ_n) σε κάθε χωρικό κόμβο. Με τη μεθοδολογία αυτή δεν απαιτείται καμία αναστροφή μητρώου.

8.8 Αποτελέσματα προσομοίωσης και ανάλυσή τους

Πριν την παράθεση των αποτελεσμάτων είναι σημαντικό να υπενθυμιστεί ότι η όλη ανάλυση και λόγω της γραμμικοποίησης ισχύει για χαμηλές τιμές των αριθμών Mach και Reynolds. Λαμβάνοντας υπόψη το γεγονός ότι ισχύει $Re \sim \delta Ma$, ο άνωθεν περιορισμός υποδεικνύει ότι για $\delta \leq 1$ η συνθήκη $U_0/v_0 \ll 1$ είναι ικανή, ενώ για $\delta > 1$ η ικανή συνθήκη είναι $\delta U_0/v_0 \ll 1$.

Οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν για μεγάλο εύρος της παραμέτρου αραιοποίησης και διάφορες τιμές της του γεωμετρικού λόγου A . Ειδικότερα, τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται αφορούν $\delta = 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}, 1, 5, 10, 10^2$ και $A = 0.5, 1, 2, 5$. Ανάλογα με τη γεωμετρική διαμόρφωση και τα φαινόμενα που παρουσιάζονται, το απόλυτο κριτήριο σύγκλισης κυμαίνεται μεταξύ 10^{-11} και 10^{-14} . Η διακριτοποίηση στο φυσικό χώρο αλλά και στο χώρο των διακριτών ταχυτήτων βελτιστοποιήθηκε ώστε να επιτευχθεί ακρίβεια των αποτελεσμάτων σε αρκετά σημαντικά σημεία. Μια γενική διαπίστωση είναι ότι σε ρευστά μεγάλης αραιοποίησης, απαιτείται πυκνό πλέγμα στο χώρο των ταχυτήτων ενώ το χωρικό πλέγμα μπορεί να είναι λιγότερο πυκνό. Αντίστροφα, όσο προσεγγίζεται το συνεχές όριο τόσο περισσότερο σημαντική γίνεται η χωρική διακριτοποίηση ενώ το πλήθος των διακριτών ταχυτήτων μπορεί να μειωθεί. Στις προσομοιώσεις υιοθετήθηκε χωρικό βήμα $h_x = h_y = 10^{-2}$ για όλα τα δ και A , ενώ ο αριθμός των διακριτών ταχυτήτων $M \times N$ ήταν 64×400 για $\delta \leq 1$, 16×400 για $\delta > 1$ και 16×40 για $\delta = 10^2$.

Στα Σχήματα 8.4, 8.5, 8.6 και 8.7 παρουσιάζονται οι ροϊκές γραμμές για $\delta = 1, 5, 10$ και 10^2 αντίστοιχα, ενώ σε κάθε Σχήμα δίνονται αποτελέσματα για διάφορες τιμές της παραμέτρου A . Η ροή είναι πάντα συμμετρική ως προς τον άξονα x στο σημείο $x = 0$. Στο Σχήμα 8.4 και για $\delta = 1$ δίνεται μια γενική άποψη της διαμόρφωσης που παρουσιάζει η ροή για διάφορες τιμές της παραμέτρου A . Σε κάθε περίπτωση, δημιουργείται μια δίνη. Τα αντίστοιχα αποτελέσματα για $\delta = 5$ που παρουσιάζονται στο Σχήμα 8.5 δείχνουν ότι ενώ για $A = 0.5, 1$ και 2 δημιουργείται και πάλι μία και μόνη δίνη, για $A = 5$ εμφανίζονται δύο επιπλέον δίνες κάτω από την κύρια. Ο μηχανισμός με τον οποίο δημιουργούνται αυτές φαίνεται πιο ξεκάθαρα στα Σχήματα 8.6 και 8.7, όπου παρουσιάζονται οι ροϊκές γραμμές για $\delta = 10$ και 10^2 αντίστοιχα. Όπως παρατηρείται, για $A = 2$, κάτω από την κύρια δίνη δημιουργούνται δύο μικρές δευτερεύουσες δίνες. Όσο το βάθος της κοιλότητας αυξάνει

οι δίνες αυτές μεγαλώνουν και τελικά ενώνονται δημιουργώντας μία ενιαία κάτω από την κύρια. Για ακόμα μεγαλύτερο βάθος, με αντίστοιχο τρόπο δημιουργείται και τρίτη δίνη κάτι που φαίνεται για $A = 5$. Στο Σχήμα 8.7 όπου παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για $\delta = 10^2$, για $A = 2$ εμφανίζονται δύο δίνες ενώ για $A = 5$ τέσσερις. Έτσι, συνάγεται ότι για κάθε δ , υπάρχει μια κρίσιμη τιμή του λόγου A , πέρα από την οποία δημιουργούνται οι γωνιακές δίνες οι οποίες εν συνεχεία μεγεθύνονται και ενώνονται προς τη δημιουργία μίας ενιαίας με φορά αντίθετη προς αυτή της κύριας δίνης. Η διαδικασία αυτή, επαναλαμβάνεται όσο το βάθος της κοιλότητας μεγαλώνει. Η επίδραση της αραιοποίησης φαίνεται επίσης αν συγκριθούν τα αποτελέσματα των σχημάτων 8.4-8.7 για ίδιο A . Είναι εμφανές ότι όσο η παράμετρος αραιοποίησης δ μειώνεται και προσεγγίζεται το όριο της ελεύθερης μοριακής κίνησης η κρίσιμη τιμή του βάθους A , πέρα από την οποία εμφανίζονται οι γωνιακές δίνες αυξάνει.

Κάτι το οποίο είναι πολύ ενδιαφέρον και αξίζει να τονιστεί, είναι ότι σε πρόσφατο άρθρο ανασκόπησης [215] για την υδροδυναμική ροή σε κοιλότητα παρατηρήθηκε αντίστοιχος μηχανισμός που οδηγεί στην δημιουργία δινών όταν μελετάται ροή Stokes ($Re = 0$). Τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται εδώ, και συγκεκριμένα στο Σχήμα 8.7 για $\delta = 10^2$ όπου πλέον προσεγγίζεται σε μεγάλο βαθμό το υδροδυναμικό όριο, βρίσκονται σε πλήρη αντιστοιχία με αυτά που δίδονται στην εργασία [215]. Το γεγονός αυτό ενισχύει την πεποίθηση ότι η προτεινόμενη εδώ μεθοδολογία μπορεί να δώσει αποτελέσματα με μεγάλη ακρίβεια μιας και η λύση που δίνεται στην [215] είναι αναλυτική και αφορά ροή συνεχούς μέσου για Reynolds ίσο με μηδέν ενώ τα αποτελέσματα στο Σχήμα 8.7 αναφέρονται σε ροή κοντά στο συνεχές όριο και χαμηλό αριθμό Reynolds.

Έχοντας πλέον μια ξεκάθαρη άποψη όσον αφορά τη διαμόρφωση της ροής για διάφορα δ και A , μπορεί να μελετηθεί η ροή και ποσοτικά. Η κατανομή της κάθετης ταχύτητας σε οριζόντιο επίπεδο που διασχίζει το κέντρο της κύριας δίνης δίδεται στο Σχήμα 8.8, για όλες τις τιμές των δ και A που μελετώνται. Η μορφή των κατανομών στην περίπτωση της ρηχής κοιλότητας, δηλαδή για $A = 0.5$, είναι αρκετά διαφορετική από αυτή που παρατηρείται στις υπόλοιπες οι οποίες μοιάζουν αρκετά μεταξύ τους. Επίσης, μπορεί να γίνει αντιληπτή η επίδραση που έχει η αραιοποίηση στη ολίσθηση της ταχύτητας στο τοίχωμα. Τα αποτελέσματα για $\delta = 10^{-3}$, 10^{-2} και 10^{-1} βρίσκονται πολύ κοντά μεταξύ τους και για το λόγο αυτό αναπαριστώνται με μία καμπύλη.

Στα Σχήματα 8.9(a) και 8.9(b) δίδονται οι αντίστοιχες κατανομές της κάθετης ταχύτητας για οριζόντιο επίπεδο που διαπερνά το κέντρο της δευτερεύουσας και της τριτεύουσας δίνης αντίστοιχα, για $A = 5$ και για $\delta = 5, 10$ και 10^2 . Εξετάζοντας τα αποτελέσματα αυτά, καθώς και το Σχήμα 8.8(d), συνάγεται το συμπέρασμα ότι το μέτρο της κάθετης ταχύτητας μεταξύ της κύριας, της δευτερεύουσας και της τριτεύουσας δίνης μειώνεται κατά 2-3 τάξεις μεγέθους. Το συμπέρασμα αυτό είναι γενικό και παρατηρείται σε όλες τις περιπτώσεις που εξετάστηκαν. Σημειώνεται ότι αντίστοιχοι μεγέθους είναι και οι μεταβολές της ροϊκής συνάρτησης που παρατηρούνται μεταξύ των διαδοχικών δινών και στο συνεχές μέσο [215].

Η κατανομή της οριζόντιας ταχύτητας σε κατακόρυφο επίπεδο που διαπερνά το κέντρο της δίνης (και που αποτελεί επίπεδο αντισυμμετρίας για τη ροή) εμφανίζεται στο Σχήμα 8.10, για $\delta = 10^{-2}, 1, 10^2$ και όλες τις τιμές του A που μελετώνται. Σε αυτό το επίπεδο

η κατακόρυφη ταχύτητα είναι μηδενική. Στις περισσότερες περιπτώσεις υπάρχει μόνο μία δίνη στη κοιλότητα και η κατανομή της ταχύτητας αλλάζει πρόσημο μόνο μια φορά. Για τιμή της παραμέτρου αραιοποίησης $\delta = 10^2$ και $A = 2$, δημιουργούνται δύο δίνες, ενώ για $A = 5$ οι δίνες είναι πλέον τέσσερις (βλ. επίσης και Σχήμα 8.7). Το γεγονός αυτό δεν είναι άμεσα εμφανές στο Σχήμα 8.10 διότι όπως αναφέρθηκε ήδη το μέτρο της ταχύτητας μειώνεται από δίνη σε δίνη όσο απομακρυνόμαστε από τη κινούμενη πλάκα κατά 2-3 τάξεις μεγέθους. Προκειμένου να καταστεί παρατηρήσιμη η κατανομή της ταχύτητας για όλες τις δίνες, στο Σχήμα 8.10 και για $\delta = 10^2$, έγινε αλλαγή της κλίμακας σε συγκεκριμένα σημεία κατά μήκος του άξονα x . Είναι προφανές ότι τα σημεία στα οποία η οριζόντια ταχύτητα αλλάζει πρόσημο, αποτελούν τα κέντρα των δινών, οι οποίες έχουν εναλλάξ αντίθετη φορά.

Στο Σχήμα 8.11 παρουσιάζεται η κατακόρυφη σχετική θέση (y/A) του κέντρου της κύριας δίνης από την κινούμενη πλάκα ως συνάρτηση της παραμέτρου δ , για $A = 0.5, 1, 2$ και 5 . Η ροή είναι συμμετρική ως προς τον άξονα y στο σημείο $x = 0$, και επομένως τα κέντρα των δινών βρίσκονται πάντα στο $x = 0$. Φαίνεται ότι σε κάθε περίπτωση καθώς το δ αυξάνει, το κέντρο της δίνης κινείται ελαφρά προς το μέρος της κινούμενης πλάκας. Σημειώνεται πάντως ότι η συντεταγμένη y είναι η σχετική απόσταση, κάτι που επιλέχθηκε προκειμένου να διαχωριστούν τα αποτελέσματα για τα διάφορα βάθη A . Η απόλυτη τιμή της απόστασης του κέντρου της κύριας δίνης από την κινούμενη πλάκα παραμένει ουσιαστικά αμετάβλητη ως προς A για $A \geq 1$. Ταυτόχρονα η μορφή της κύριας δίνης δεν μεταβάλλεται ιδιαίτερα καθώς αυξάνει το A παρά το γεγονός ότι νέες δίνες εμφανίζονται. Η μόνη επίδραση που αυτές έχουν είναι ότι οι υπάρχουσες κάθε φορά δίνες μετακινούνται ελαφρά προς την κινούμενη πλάκα. Την παρατήρηση αυτή επιβεβαιώνουν και οι κατανομές των σχημάτων 8.8, 8.9 και 8.10.

Στο Σχήμα 8.12, δίδονται τα αποτελέσματα που προέκυψαν για την ανοιγμένη ογκομετρική παροχή μεταξύ της πλάκας και του κέντρου της κύριας δίνης σε σχέση με τη παράμετρο δ , για $A = 0.5, 1, 2$ και 5 . Τα αποτελέσματα αυτά, προέκυψαν μέσω της ολοκλήρωσης της κατανομής της οριζόντιας ταχύτητας που υπολογίζεται μέσω της σχέσης (8.26). Παρατηρείται ότι για δεδομένη τιμή του δ η παροχή αυξάνει όσο μεγαλώνει το βάθος και προσεγγίζει μια σταθερή τιμή A , κάτι που συμβαίνει όταν η κύρια δίνη διαμορφωθεί στην τελική της μορφή και δεν επηρεάζεται πλέον από τις υποκείμενες μεταβολές. Η ακριβής τιμή στην οποία μπορεί να θεωρηθεί ότι η κύρια δίνη είναι πλέον ανεξάρτητη του βάθους εξαρτάται από το δ αλλά φαίνεται ότι γενικά είναι λίγο μικρότερη του $A = 2$. Επίσης διαπιστώνεται ότι, για δεδομένο A , η ανοιγμένη παροχή παραμένει ουσιαστικά αμετάβλητη για $10^{-3} \leq \delta \leq 10^{-1}$, στη συνέχεια και για $1 \leq \delta \leq 50$ αυξάνεται γραμμικά ως προς το λογάριθμο του δ και τέλος αποκτά την τιμή της λύσης του συνεχούς μέσου στην περιοχή του $\delta = 10^2$.

Ο συντελεστής οπισθέλκουσας της κινούμενης πλάκας μπορεί να υπολογιστεί αν ολοκληρωθεί η ανοιγμένη διατμητική τάση που δίνεται από τη σχέση (8.29), κατά μήκος της πλάκας. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στο Σχήμα 8.13 ως συνάρτηση της παραμέτρου δ , για $A = 0.5, 1, 2$ και 5 . Η ανοιγμένη διατμητική τάση βγαίνει πάντα μειούμενη αυξανόμενου του δ . Η συμπεριφορά αυτή βρίσκεται σε αντιστοιχία με ότι έχει παρατηρηθεί στην ροή Couette, τόσο για απλό αέριο όσο και για μείγμα [40]. Αναπόφευκτα

επομένως και ο συντελεστής οπισθέλκουσας της πλάκας παρουσιάζει την ίδια εξάρτηση ως προς δ , κάτι που διαπιστώνεται στο Σχήμα 8.13. Για μεγάλες τιμές της παραμέτρου δ , οι τιμές προσεγγίζουν τις αντίστοιχες που προκύπτουν αν εφαρμοστεί η καταστατική σχέση του Newton που συνδέει την τάση με την κλίση της ταχύτητας και το ιξώδες. Έτσι διαπιστώνεται ότι ο συντελεστής c_d μειώνεται καθώς αυξάνει το A και τελικά, όπως είναι και αναμενόμενο, προσεγγίζει μια σταθερή τιμή.

Τέλος, δίνονται ορισμένες τυπικές κατανομές που αφορούν τις αποκλίσεις της πίεσης και της θερμοκρασίας για $A = 1$ και $\delta = 10^{-2}, 1, 10^2$ στα Σχήματα 8.14 και 8.15 αντίστοιχα. Όλες οι κατανομές παρουσιάζουν αντισυμμετρία ως προς τον άξονα y στο σημείο $x = 0$, όπου και μηδενίζονται. Επιπρόσθετα, υπολογίστηκε και η αντίστοιχη κατανομή της απόκλισης της πυκνότητας και σε κάθε περίπτωση επιβεβαιώθηκε η γραμμικοποιημένη καταστατική εξίσωση. Διαπιστώθηκε ότι ενώ οι αποκλίσεις της πίεσης και της πυκνότητας είναι της ίδιας τάξης, οι αντίστοιχη της θερμοκρασίας είναι τουλάχιστον μια τάξη μικρότερη και επομένως θα μπορούσε να μη ληφθεί υπόψη. Ταυτόχρονα παρατηρείται ότι καθώς προσεγγίζεται το συνεχές όριο όλες οι αποκλίσεις (πυκνότητα, θερμοκρασία και πίεση) μικραίνουν σημαντικά αγγίζοντας την θερμοδυναμική ισορροπία του συνεχούς μέσου. Τέλος σημειώνεται ότι αν και τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται είναι ενδεικτικά, ανάλογη είναι η συμπεριφορά για όλες τις περιπτώσεις που μελετήθηκαν.

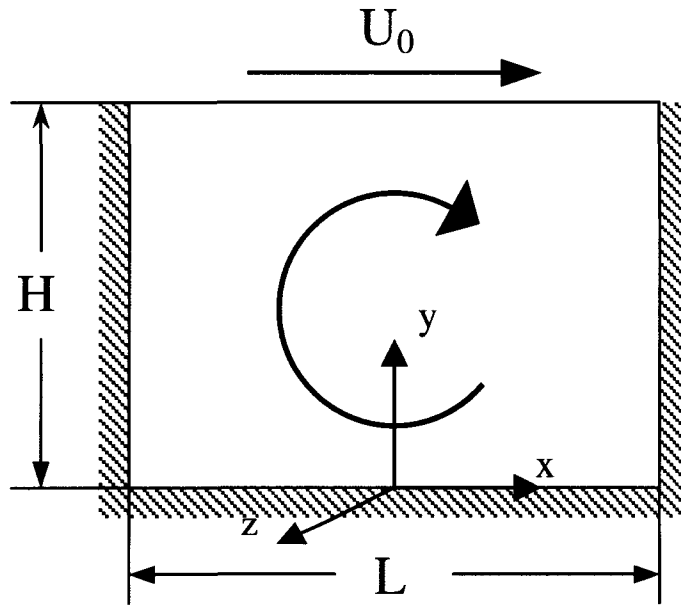
8.9 Ανακεφαλαίωση

Το παρόν Κεφάλαιο αναλώθηκε στην μελέτη των διατμητικών ροών μονατομικού αερίου. Ειδικότερα δόθηκαν ορισμένα συνοπτικά στοιχεία που αφορούν της ροή Couette και στη συνέχεια μελετήθηκε σε βάθος η ροή εντός ορθογωνικής κοιλότητας για όλο το εύρος του αριθμού Kn . Εξετάστηκε η επίδραση που έχει στην διαμόρφωση της ροής τόσο η παράμετρος αραιοποίησης δ , όσο και το βάθος της κοιλότητας A . Η μαθηματική μοντελοποίηση βασίστηκε στη δισδιάστατη γραμμικοποιημένη εξίσωση Boltzmann με μοντέλο για τον όρο των συγκρούσεων το BGK. Οι προκύπτουσες ολοκληρωδιαφορικές εξισώσεις επιλύθηκαν αριθμητικά με την εφαρμογή της μεθόδου των διακριτών ταχυτήτων. Προκειμένου να υπερκεραστούν τα προβλήματα που προκαλούν οι ασυνέχειες στις συμβολές της κινούμενης πλάκας με τα ακίνητα τοιχώματα, το πρόβλημα διασπάστηκε σε δύο υποπροβλήματα όπου το πρώτο περιέλαβε τους όρους της ασυνέχειας και επιλύθηκε αναλυτικά, ενώ το δεύτερο επιλύθηκε με αριθμητικό τρόπο και με βάση κλασσικές πρακτικές.

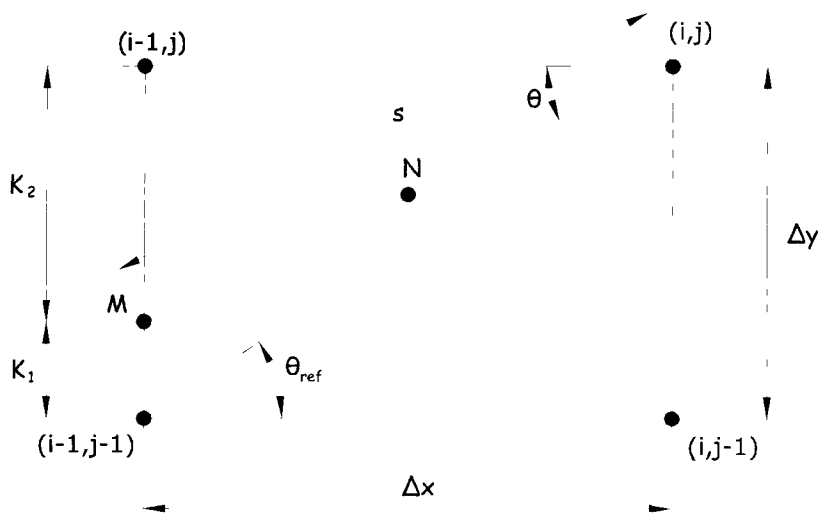
Τα αποτελέσματα που εξήχθησαν αφορούν τόσο την διαμόρφωση της ροής, όσο και τον προσδιορισμό των μακροσκοπικών ποσοτήτων της ροής καθώς και χαρακτηριστικά μεγέθη όπως ο συντελεστής οπισθέλκουσας της κινούμενης πλάκας και η ανοιγμένη ογκομετρική παροχή μεταξύ της κινούμενης πλάκας και του κέντρου της κύριας δίνης. Σύμφωνα με αυτά, φαίνεται ότι καθώς το βάθος της κοιλότητας αυξάνει, δημιουργούνται μικρές δίνες στις κάτω γωνίες οι οποίες προοδευτικά μεγαλώνουν και τελικά ενώνονται δημιουργώντας δευτερεύουσες δίνες. Το φαινόμενο αυτό επαναλαμβάνεται καθώς το βάθος αυξάνει περαιτέρω. Η φορά των δινών εναλλάσσεται διαδοχικά. Κατά την διαδικασία

αυτή, οι υπάρχουσες κάθε φορά δίνες μετακινούνται ελαφρά προς την κινούμενη πλάκα, ενόσω η μορφή των υπάρχουσών δομών παραμένει ουσιαστικά ανεπηρέαστη. Διαπιστώθηκε επίσης ότι καθώς το δ αυξάνει, η κρίσιμη τιμή του A πέρα από την οποία αρχίζουν να εμφανίζονται οι δίνες στις κάτω γωνίες μειώνεται. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν και βασίζονται στην κινητική θεωρία, προσεγγίζουν με ικανοποιητική ακρίβεια την υδροδυναμική λύση στο συνεχές όριο. Η μεσοσκοπική, κινητικού τύπου προσέγγιση φαίνεται ότι είναι κατάλληλη για την αντιμετώπιση ροών οι οποίες περιλαμβάνουν φαινόμενα που αναπτύσσονται σε διαφορετικές κλίμακες όπως η παρούσα εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας ροή.

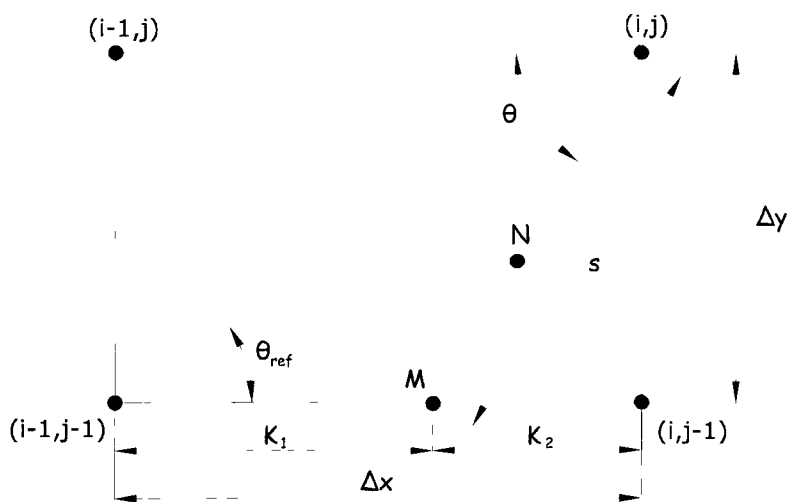
8.10 Πίνακες - Σχήματα



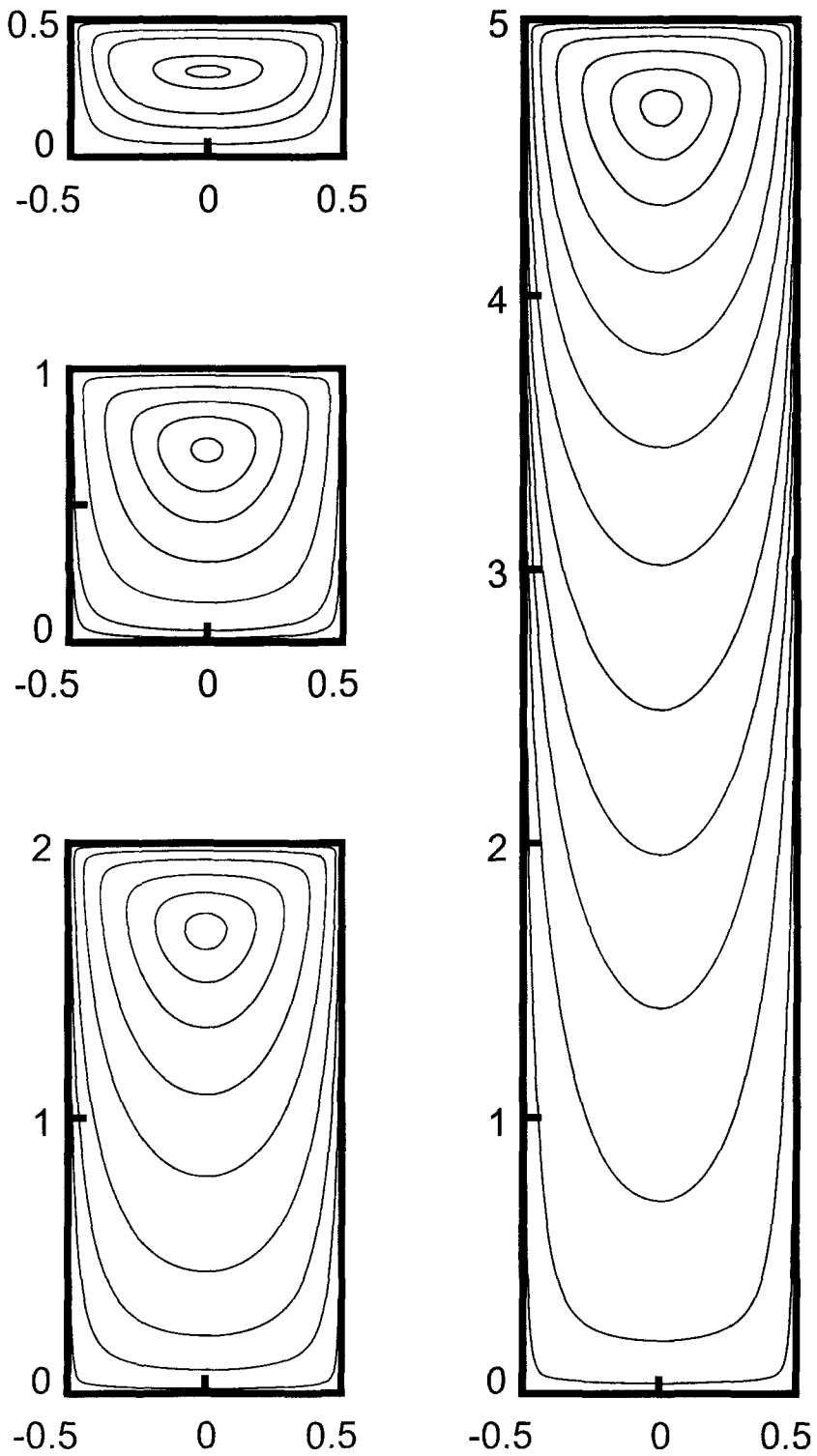
Σχήμα 8.1: Γεωμετρική διαμόρφωση της μελετούμενης ροής.



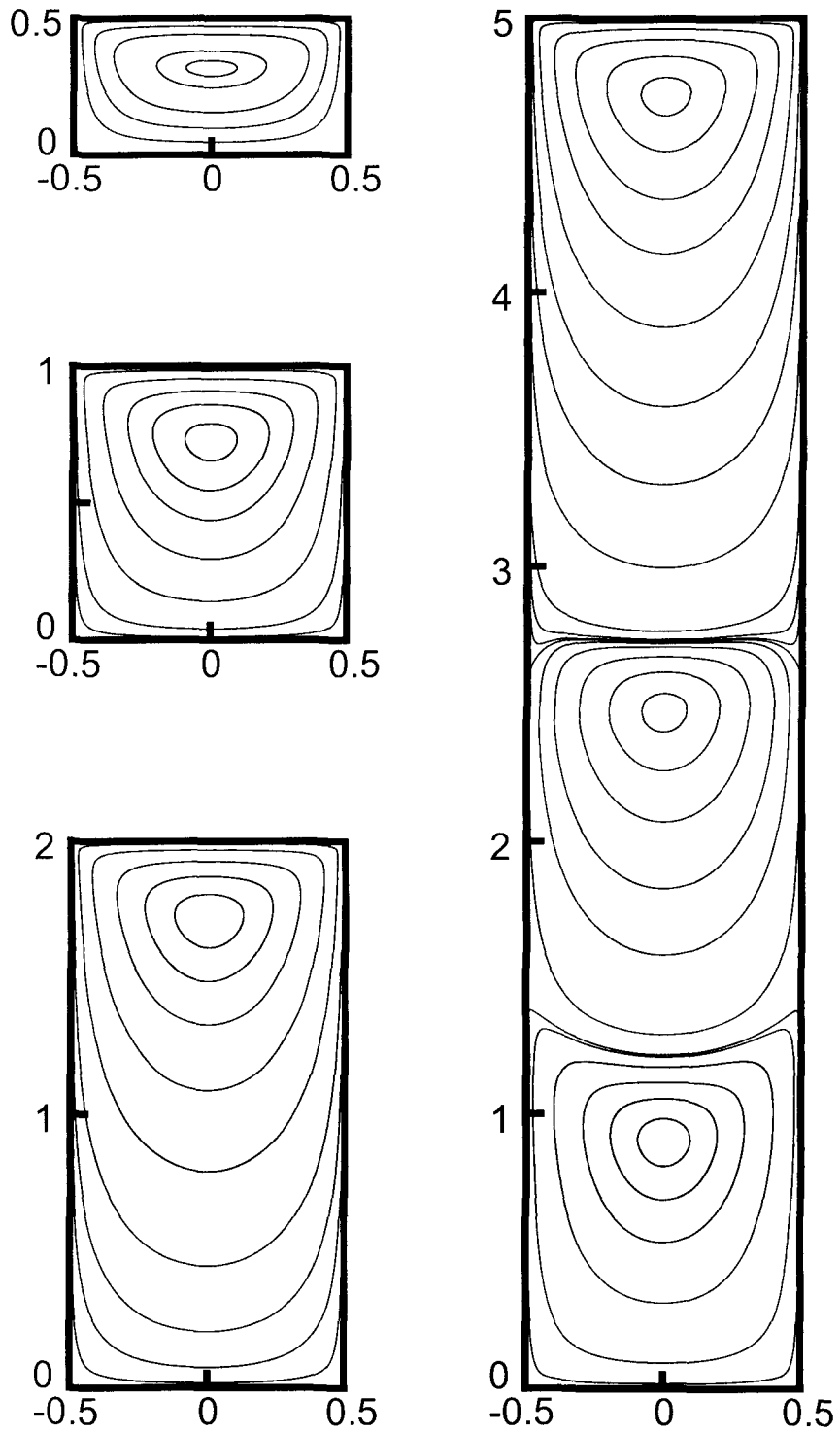
Σχήμα 8.2: Στοιχεία του σχήματος διακριτοποίησης στην περίπτωση όπου $\theta < \theta_{ref}$.



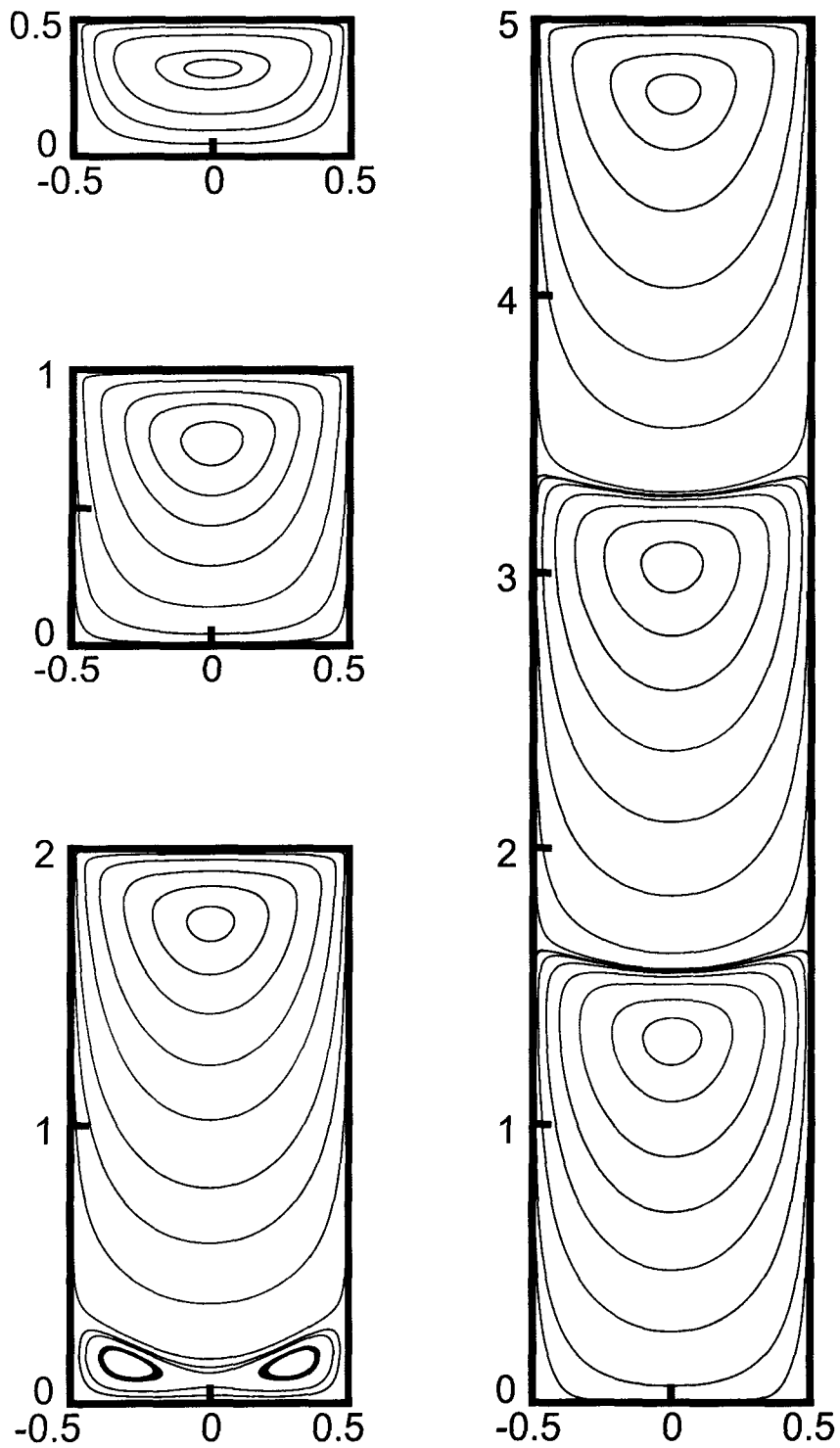
Σχήμα 8.3: Στοιχεία του σχήματος διακριτοποίησης στην περίπτωση όπου $\theta \geq \theta_{ref}$.



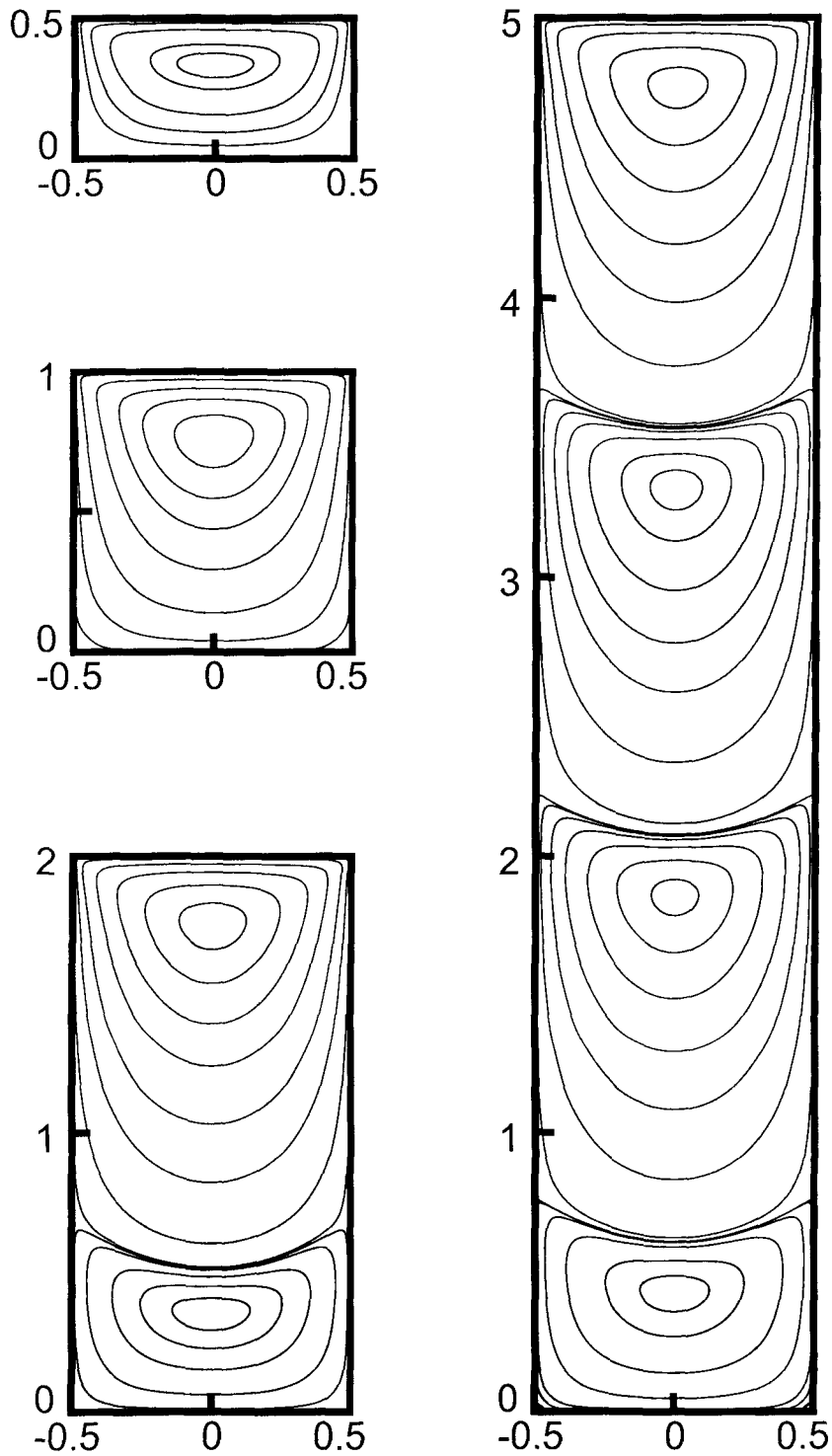
Σχήμα 8.4: Ροϊκές γραμμές για $\delta = 1$ και $A = 0.5, 1, 2, 5$.



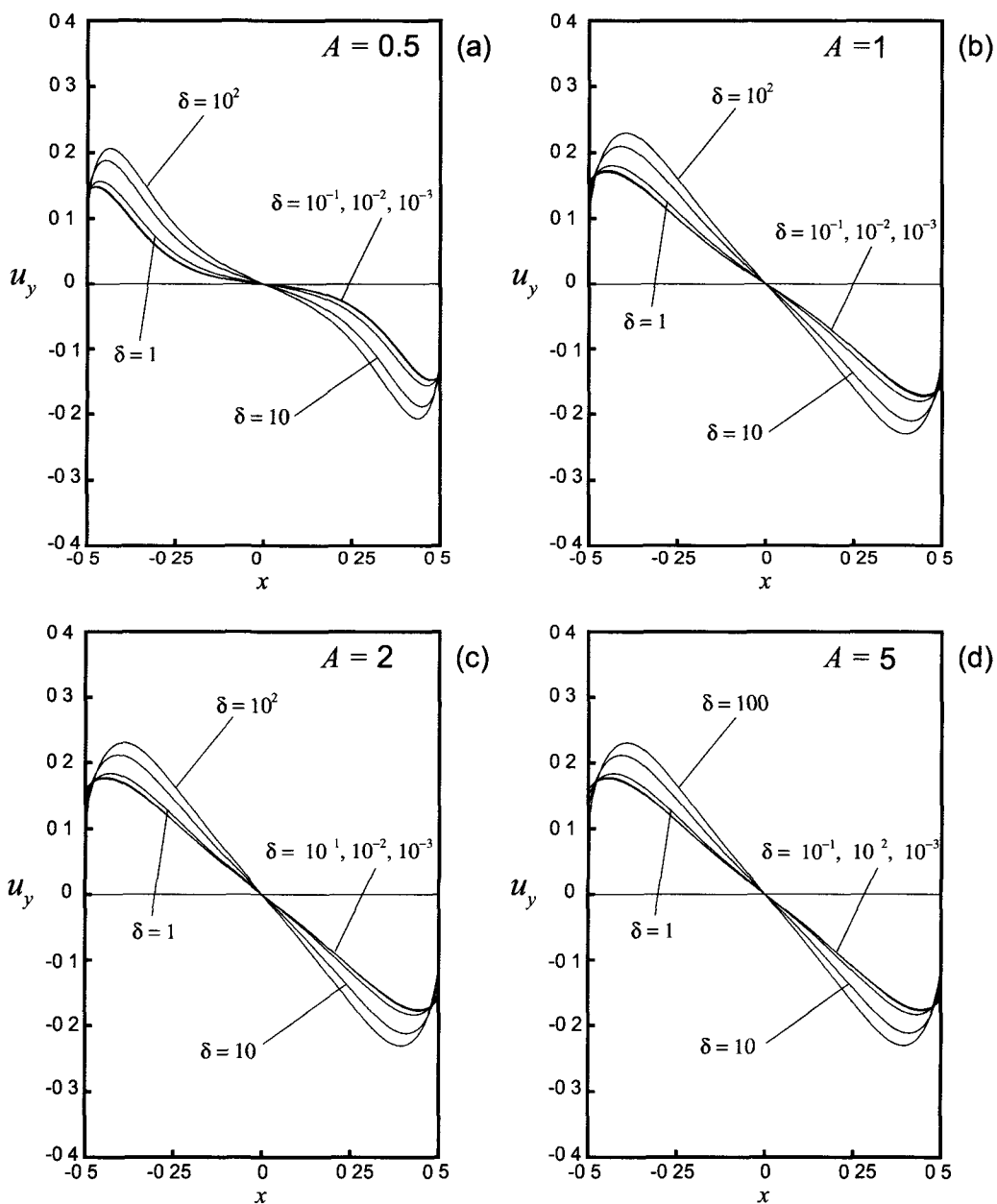
Σχήμα 8.5: Ροϊκές γραμμές για $\delta = 5$ και $A = 0.5, 1, 2, 5$.



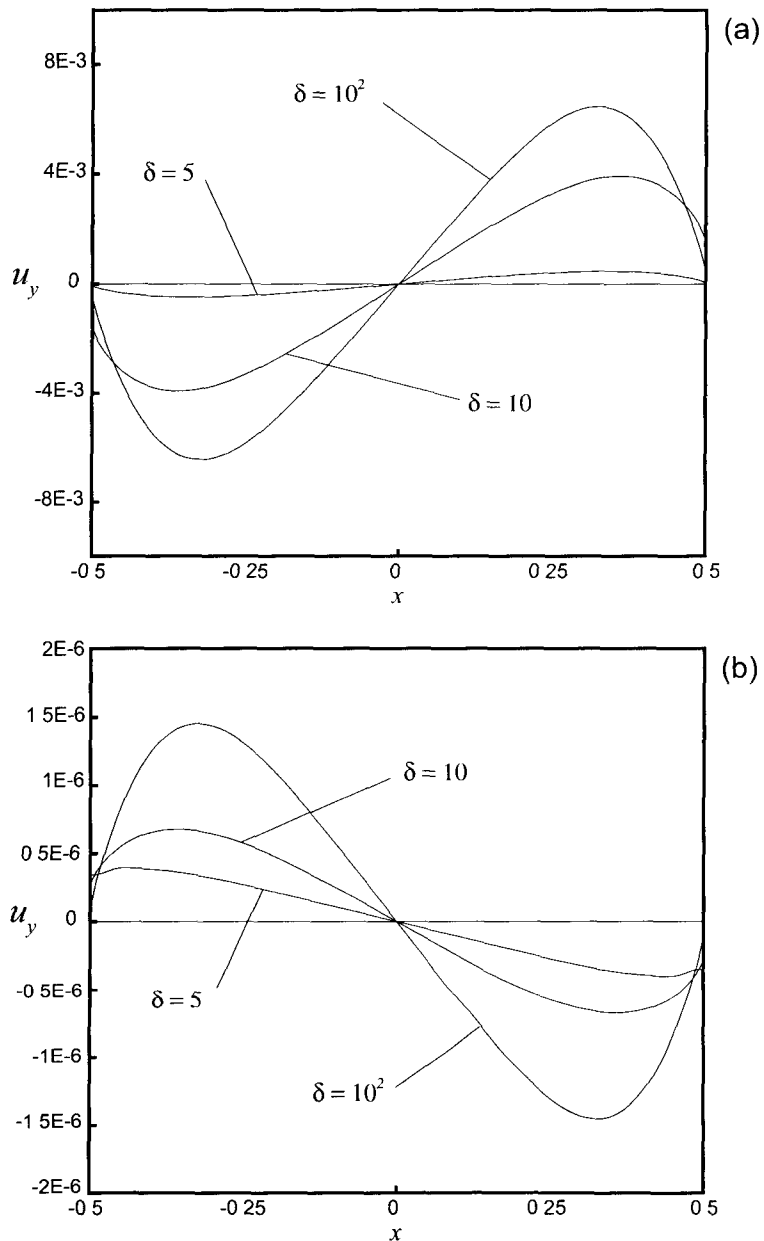
Σχήμα 8.6: Ποικίλες γραμμές για $\delta = 10$ και $A = 0.5, 1, 2, 5$.



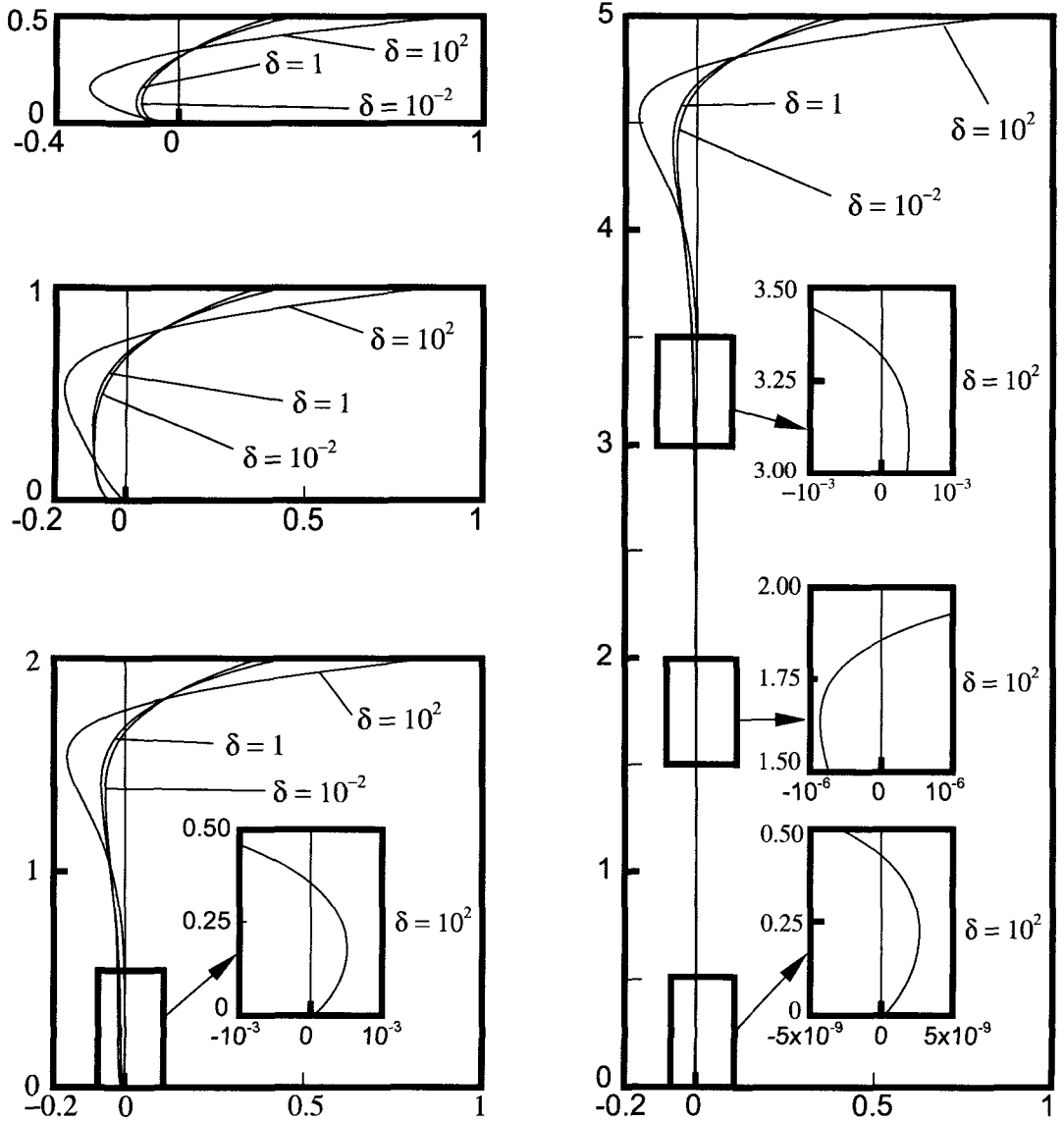
Σχήμα 8.7: Ροϊκές γραμμές για $\delta = 100$ και $A = 0.5, 1, 2, 5$.



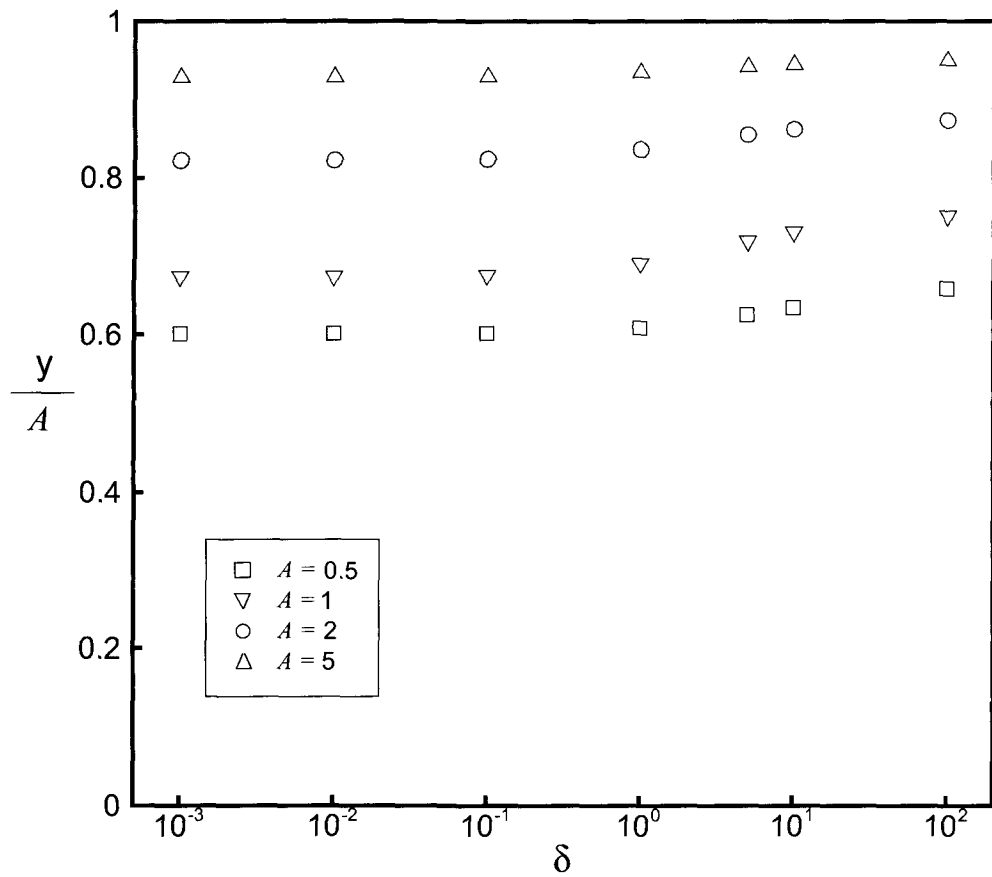
Σχήμα 8.8: Κατανομή της κατακόρυφης συνιστώσας της ταχύτητας σε οριζόντιο επίπεδο που περιλαμβάνει το κέντρο της κύριας δίνης, για διάφορες τιμές των παραμέτρων δ και A .



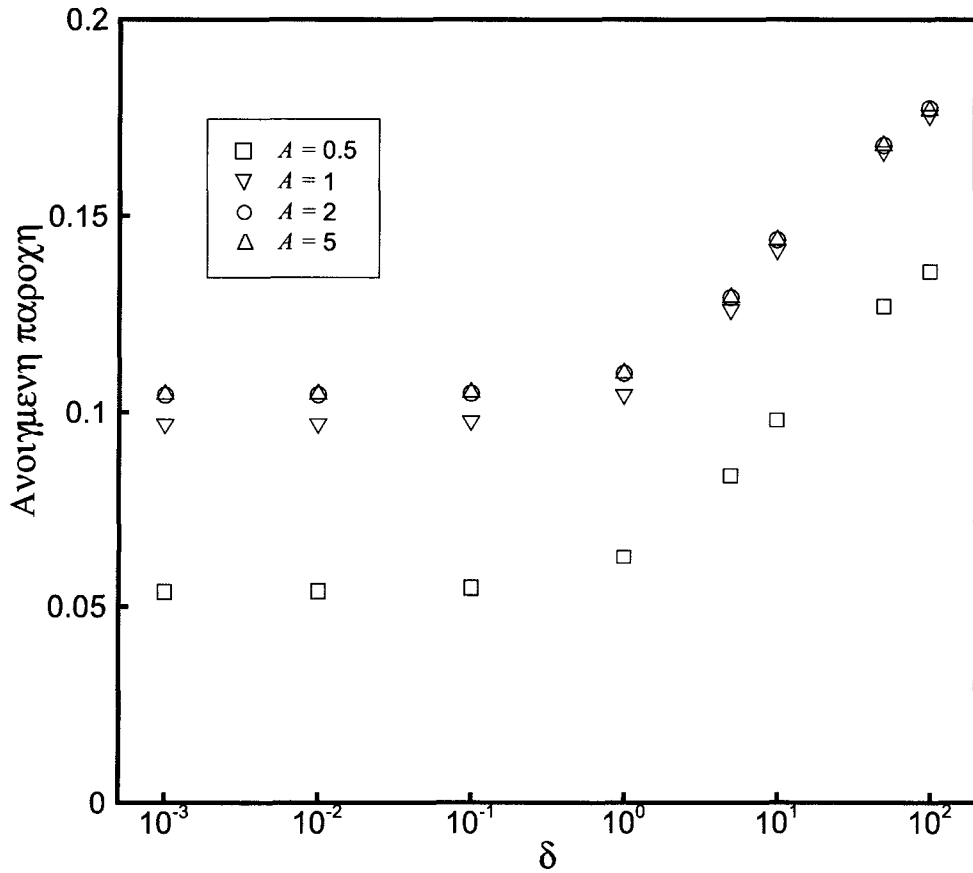
Σχήμα 8.9: Κατανομή της κατακόρυφης συνιστώσας της ταχύτητας σε οριζόντιο επίπεδο που περιλαμβάνει το κέντρο της δευτερεύουσας (a) και της τριτεύουσας (b) δίνης, για $A = 5$ και διάφορες τιμές της παραμέτρου δ .



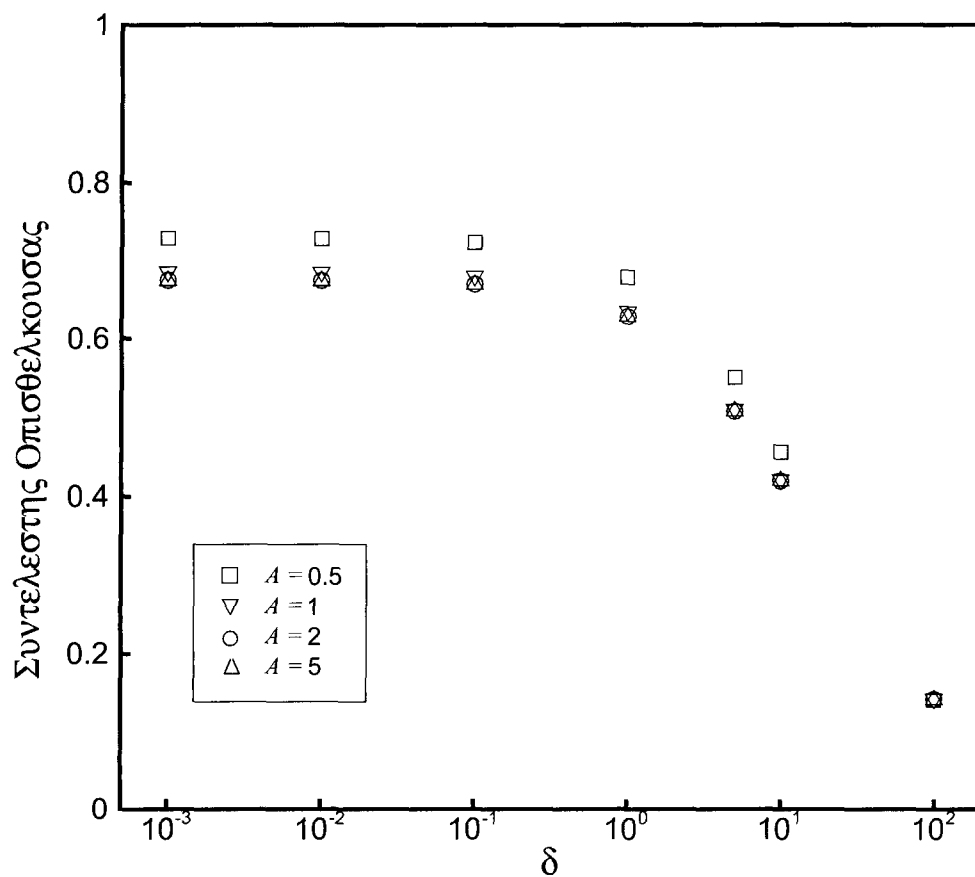
Σχήμα 8.10: Κατανομή της οριζόντιας συνιστώσας της ταχύτητας σε οριζόντιο επίπεδο που περιλαμβάνει το κέντρο της κοιλότητας, για διάφορες τιμές των παραμέτρων δ και A .



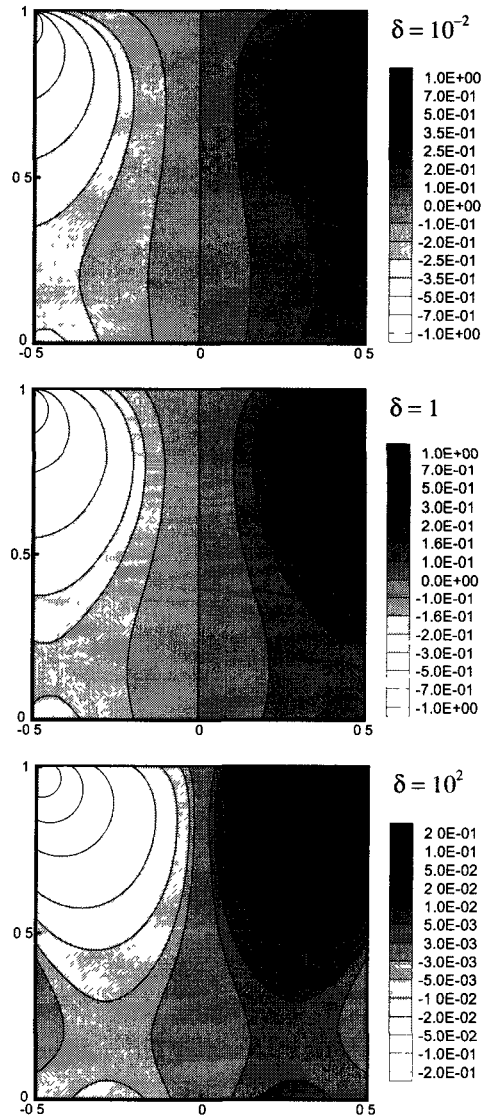
Σχήμα 8.11: Θέση του κέντρου της κύριας δίνης για διάφορες τιμές των παραμέτρων δ και A .



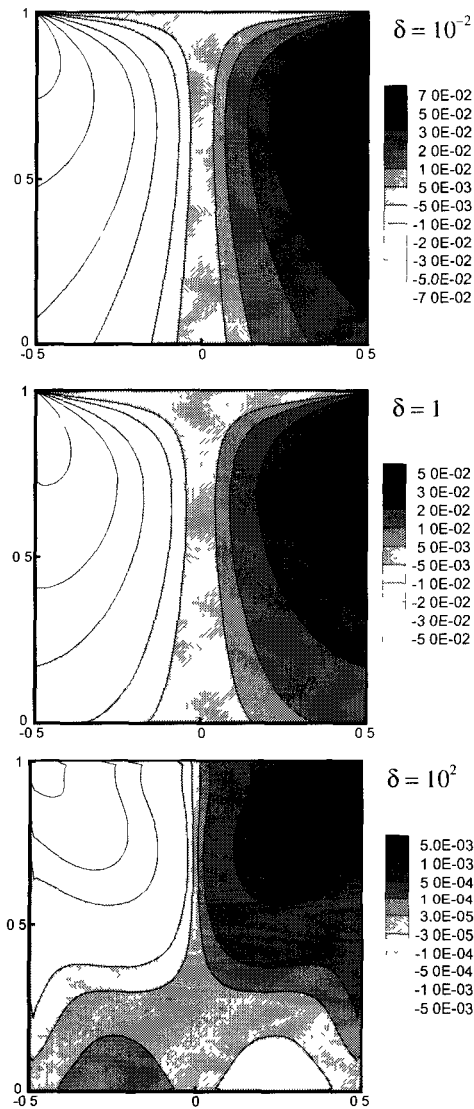
Σχήμα 8.12: Ανοιγμένη παροχή όγκου μεταξύ του κέντρου της κύριας δίνης και της κινούμενης πλάκας για διάφορες τιμές των παραμέτρων δ και A .



Σχήμα 8.13: Συντελεστής οπισθέλκουσας της κινούμενης πλάκας για διάφορες τιμές των παραμέτρων δ και A .



Σχήμα 8.14: Ισοϋφείς πίεσης για $A = 1$ και διάφορες τιμές της παραμέτρου δ .



Σχήμα 8.15: Ισοϋφείς θερμοκρασίας για $A = 1$ και διάφορες τιμές της παραμέτρου δ .

Κεφάλαιο 9

Διατμητικές ροές αερίων μειγμάτων

9.1 Εισαγωγή

Η επίλυση διατμητικών ροών για ρευστά που αποτελούνται από ένα συστατικό, αν και είναι πολύ σημαντικές, αποτελούν ίσως μειοψηφία των παρατηρούμενων στη πράξη ροών. Όπως αναφέρθηκε και στις αντίστοιχες ροές εντός αγωγών, στις περισσότερες περιπτώσεις, τα ρευστά αποτελούν μείγμα αερίων των οποίων η συμπεριφορά διαφέρει από αυτή του αντίστοιχου ρευστού ενός συστατικού. Ταυτόχρονα είναι πιθανή η εμφάνιση, κατ' αναλογία με ότι συμβαίνει στις ροές εντός αγωγών, νέων φαινομένων και συμπεριφορών, που ενδεχόμενα μπορούν να οδηγήσουν σε τεχνολογικές εφαρμογές εκτός την γνωσιακής ικανοποίησης που σίγουρα θα προσέφεραν.

Στο πλαίσιο αυτό επιχειρήθηκε η αντιμετώπιση της ροής Couette καθώς και της ροής σε κοιλότητα με κινούμενο το πάνω τοίχωμα, αυτή τη φορά για μείγμα αερίων [19, 216]. Οι ροές αυτές επιλέχθηκαν, λαμβάνοντας υπόψη τόσο την εφαρμοσιμότητά τους όσο και το γεγονός ότι η εμπειρία που αποκτήθηκε στις ροές αυτές από την επίλυση των αντίστοιχων προβλημάτων για ένα συστατικό θα μπορούσε να αποδειχθεί καταλυτική.

9.2 Ροή μεταξύ παράλληλων πλακών με σχετική κίνηση (ροή Couette)

Όταν το ρευστό αποτελείται από δύο συστατικά, στο συνεχές μέσο οι διαφοροποιήσεις σε σχέση με την αντίστοιχη ροή ενός συστατικού είναι μικρές και περιορίζονται σε αλλαγές που αφορούν κυρίως τους συντελεστές μεταφοράς. Στη μεταβατική περιοχή όμως τα πράγματα είναι αρκετά διαφορετικά. Αρχικά παρατηρείται, όπως και στη ροή Poiseuille, ολίσθηση στα τοιχώματα η οποία είναι διαφορετική για το κάθε συστατικό. Επίσης οι κατανομές των ταχυτήτων αλλά και της θερμορροής για το κάθε συστατικό δεν ταυτίζονται.

Η ροή Couette στη μεταβατική περιοχή για μείγμα αερίων έχει επιλυθεί παλιότερα με χρήση του μοντέλου Hamel [122] για διάφορες τιμές του λόγου των μαζών m_1/m_2 . Όμως

το μοντέλο Hamel, όπως έχει ήδη διαπιστωθεί, δεν είναι η καλύτερη δυνατή επιλογή. Έτσι πρόσφατα εφαρμόστηκε και το μοντέλο McCormack με επιτυχία [40, 216].

Το αριθμητικό σχήμα που εφαρμόστηκε ήταν η μέθοδος των διακριτών ταχυτήτων. Επειδή όμως η όλη διατύπωση είναι αντίστοιχη με αυτή του Κεφαλαίου 6 δεν παρατίθεται εδώ ξανά. Το μόνο στοιχείο που αναφέρεται είναι ότι δεν υπάρχουν πλέον στην εξίσωση οι όροι που αναφέρονται στις κλίσεις πίεσης, θερμοκρασίας και συγκέντρωσης. Αντίθετα, στη ροή Couette διαφοροποιούνται οι οριακές συνθήκες. Αν χρησιμοποιηθούν οι οριακές συνθήκες διάχυσης του Maxwell, τότε πρέπει να ληφθεί υπόψη η ταχύτητα των τοιχωμάτων που όμως δεν είναι στην περίπτωση αυτή μηδενική. Έτσι, και ακολουθώντας τους συμβολισμούς του Κεφαλαίου 6 για τους οριακούς κόμβους οι τιμές των συναρτήσεων Φ_i και Ψ_i είναι

$$\begin{aligned}\Phi_i(-H/2, c_y) &= -\frac{1}{2}, & c_y > 0 \\ \Phi_i(H/2, c_y) &= \frac{1}{2}, & c_y < 0 \\ \Psi_i(-H/2, c_y) &= 0, & c_y > 0 \\ \Psi_i(H/2, c_y) &= 0, & c_y < 0\end{aligned}\quad (9.1)$$

για $i = 1, 2$.

Τα αριθμητικά αποτελέσματα που προέκυψαν από τους υπολογισμούς αναφέρονται σε ικανό εύρος του αριθμού Knudsen και στα μείγματα $Ne - Ar$ και $He - Xe$. Για τον όρο των συγκρούσεων επιλέχθηκαν και πάλι τα ολοκληρώματα που προκύπτουν με τη χρήση του πραγματικού δυναμικού για θερμοκρασία $300^{\circ}K$ λόγω της γνωστής αδυναμίας του μοντέλου των συμπαγών σφαιρών στην μελέτη μειγμάτων.

Στους Πίνακες 9.1 και 9.2 παρουσιάζονται οι μέσες ανοιγμένες διατμητικές τάσεις για τα δύο μείγματα

$$\Pi(y) = -[C_0\Pi_1(y) + (1 - C_0)\Pi_2(y)] = \text{σταθερά} \quad (9.2)$$

για διάφορες τιμές της παραμέτρου δ και της μοριακής συγκέντρωσης C_0 , με $\Pi_a(y)$ να δίνεται από τη σχέση (6.23). Η ποσότητα Π παραμένει σταθερή καθ' όλο το πλάτος του καναλιού, κάτι που μπορεί να επιβεβαιωθεί και από τη σχέση (6.64) αν τεθεί $X_P = X_C = 0$.

Είναι εμφανές ότι όσο αυξάνει το δ τόσο οι τιμές των τάσεων μειώνονται πράγμα αναμενόμενο εφόσον αντίστοιχη είναι η συμπεριφορά και στην ροή ενός συστατικού. Επίσης φαίνεται ότι για δεδομένο δ οι τιμές του μείγματος είναι πάντα μικρότερες από αυτές του ενός συστατικού. Τέλος, το μείγμα $He - Xe$ είναι αρκετά πιο ευαίσθητο στις μεταβολές του C_0 από ότι το μείγμα $Ne - Ar$ που ήταν ούτως ή άλλως αναμενόμενο λόγω της μεγάλης διαφοράς των μοριακών μαζών των συστατικών του που παρουσιάζει το πρώτο.

Στα Σχήματα 9.1 δίνονται οι κατανομές των μέσων ταχυτήτων για διάφορες τιμές του δ . Γενικά, όσο μεγαλύτερο είναι το δ τόσο μικρότερη είναι η ολίσθηση στο τοίχωμα, ενώ το μείγμα $He - Xe$ δείχνει να αργεί περισσότερο να προσεγγίσει την υδροδυναμική λύση κυρίως λόγω της παρουσίας του ελαφρού He το οποίο πιο δύσκολα αντιλαμβάνεται την παρουσία του τοιχώματος.

Στο Σχήμα 9.2 δίνονται οι κατανομές ταχυτήτων των δύο συστατικών του μείγματος $He - Xe$ για διάφορες τιμές της παραμέτρου δ . Διακρίνεται ότι τα δύο συστατικά παρουσιάζουν σημαντικές αποκλίσεις για μικρά δ ενώ όσο αυτό μεγαλώνει οι κατανομές προσεγγίζουν η μία την άλλη.

Στη συνέχεια και στον Πίνακα 9.3 φαίνεται η εξάρτηση της ταχύτητας ολίσθησης του κάθε συστατικού του μείγματος $He - Xe$ από την παράμετρο δ . Στην περιοχή κοντά στην ελεύθερη μοριακή κίνηση, ουσιαστικά το ρευστό δεν αντιλαμβάνεται την κίνηση του τοιχώματος και παραμένει αδρανές. Όσο ο αριθμός Knudsen μειώνεται, τόσο περισσότερο γίνεται αντιληπτή η παρουσία του τοιχώματος και το συστατικό που το αντιλαμβάνεται πιο έντονα είναι το βαρύτερο Xe . Προσεγγίζοντας την υδροδυναμική περιοχή, η ολίσθηση γίνεται μικρή και για $\delta > 10^2$ αρχίζει να κυριαρχεί η υδροδυναμική λύση. Πάντως είναι φανερό ότι οι ολισθήσεις που παρουσιάζουν τα δύο συστατικά διαφέρουν αρκετά μεταξύ τους, τουλάχιστον όταν οι τιμές των μοριακών μαζών απέχουν αρκετά.

Τέλος στον Πίνακα 9.4 παρουσιάζεται η επίδραση που έχει στην μέση ταχύτητα ολίσθησης των μειγμάτων $Ne - Ar$ και $He - Xe$ η μοριακή συγκέντρωση C_0 . Φαίνεται ότι η εξάρτηση είναι σημαντική στο $He - Xe$, ιδίως για $0.5 < \delta < 50$ όπου οι διαφορές μπορεί να φτάσουν (για τις συγκεκριμένες συγκεντρώσεις) ως και το 25%. Αντίθετα, στο $Ne - Ar$ δεν υπάρχει ουσιαστικά καμία επίδραση, κάτι αναμενόμενο μιας και ουσιαστικά η συμπεριφορά του είναι αντίστοιχη με αυτή του αερίου ενός συστατικού.

Ως γενικό συμπέρασμα μπορεί να εξαχθεί ότι η ροή Couette αν και είναι η απλούστερη των διατμητικών ροών παρουσιάζει σημαντικές μεταβολές όταν το ρευστό είναι μείγμα αερίων, ιδίως όταν τα συστατικά είναι πολύ διαφορετικά ως προς τις μοριακές τους μάζες. Η ολίσθηση στο τοίχωμα φαίνεται ότι είναι στην περίπτωση αυτή αρκετά ευαίσθητη στις μεταβολές της συγκέντρωσης, ενώ και οι διαφορές μεταξύ των συστατικών είναι και αυτές σημαντικές.

9.3 Ροή μείγματος αερίων εντός ορθογωνικής κοιλότητας

Η επόμενη ροή προς την οποία στράφηκε το ενδιαφέρον ήταν η ροή σε ορθογωνική κοιλότητα. Όπως φάνηκε και στην περίπτωση του απλού αερίου η ροή αυτή παρουσιάζει σημαντικές διαφοροποιήσεις σε σχέση με τη ροή σε αγωγό τόσο στην μαθηματική διατύπωση, όσο και στις αριθμητικές δυσκολίες που αντιμετωπίζονται κατά την επίλυση.

Το μοντέλο που επιλέχθηκε για τον προσεγγιστικό προσδιορισμό του όρου των συγκρούσεων ήταν και πάλι το McCormack το οποίο έχει αποδειχθεί όπως διαπιστώθηκε και στα προηγούμενα Κεφάλαια, ως το πιο ακριβές και πλήρες. Η εξίσωση Boltzmann με την εφαρμογή του μοντέλου McCormack υπέστη την κατάλληλη επεξεργασία ώστε να διατυπωθούν οι εξισώσεις σε μορφή τέτοια που να επιτρέπουν τη πλήρη περιγραφή του προβλήματος με το λιγότερο δυνατό υπολογιστικό κόστος.

Όπως είναι προφανές, τα προβλήματα που προέκυψαν στην επίλυση της ροής αερίου ενός συστατικού, ανέκυψαν και στην επίλυση του μείγματος αερίου. Έτσι και πάλι οι ασυνέχειες στα σημεία επαφής της κινούμενης πλάκας με τα στατικά τοιχώματα δεν επέτρεπαν την σύγκλιση του αλγορίθμου στην σωστή λύση. Το πρόβλημα και πάλι αν-

τιμετωπίστηκε με την εφαρμογή της τεχνικής που περιγράφηκε στην Παράγραφο 8.6 με θεαματικά αποτελέσματα. Στην περίπτωση αυτή βέβαια κατέστη αναγκαία η εφαρμογή της στις εξισώσεις και των δύο συστατικών.

Τέλος σημειώνεται ότι η ύπαρξη των δύο συστατικών επέβαλλε πλέον την επίλυση τεσσάρων εξισώσεων και την εύρεση δύο αναλυτικών λύσεων. Το γεγονός αυτό σε συνδυασμό με την αυξημένη απαίτηση σε υπολογιστικό χρόνο του μοντέλου McCormack, επέφερε σημαντική αύξηση στην υπολογιστική προσπάθεια για την εξαγωγή των αποτελεσμάτων σε σχέση με την αντίστοιχη της περίπτωσης του ενός αερίου.

9.3.1 Μαθηματική διατύπωση

Το πρόβλημα που αντιμετωπίζεται είναι εν γένει δισδιάστατο υπό την έννοια ότι στην τρίτη διάσταση z θεωρείται ότι δεν υπάρχουν διαφοροποιήσεις τόσο των μακροσκοπικών ιδιοτήτων, όσο και των συναρτήσεων κατανομής. Με βάση την παραδοχή αυτή, η εξίσωση Boltzmann με την αντικατάσταση του μοντέλου McCormack μπορεί να πολλαπλασιαστεί με $\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-c_z^2}$ και κατόπιν να ολοκληρωθεί ως προς c_z . Η εξίσωση που προκύπτει είναι:

$$\begin{aligned} & \mu \left[\cos\theta \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x} + \sin\theta \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial y} \right] + \omega_\alpha \gamma_\alpha \phi_\alpha = \\ & \omega_\alpha \sqrt{\frac{m_\alpha}{m}} \left\{ \gamma_\alpha \varrho_\alpha + 2 \left[\gamma_\alpha u_{\alpha i} - v_{\alpha\beta}^{(1)} (u_{\alpha i} - u_{\beta i}) - \frac{1}{2} v_{\alpha\beta}^{(2)} \left(q_{\alpha i} - \frac{m_\alpha}{m_\beta} q_{\beta i} \right) \right] \mu \cos\theta + \right. \\ & \mu^2 \left[(\gamma_\alpha - v_{\alpha\alpha}^{(3)} + v_{\alpha\alpha}^{(4)} - v_{\alpha\beta}^{(3)}) (\Pi_{\alpha xx} \cos^2\theta + \Pi_{\alpha yy} \sin^2\theta) + v_{\alpha\beta}^{(4)} \sqrt{\frac{m_\beta}{m_\alpha}} (\Pi_{\beta xx} \cos^2\theta + \Pi_{\beta yy} \sin^2\theta) \right] + \\ & \left[(\gamma_\alpha - v_{\alpha\alpha}^{(3)} + v_{\alpha\alpha}^{(4)} - v_{\alpha\beta}^{(3)}) \Pi_{\alpha zz} + v_{\alpha\beta}^{(4)} \sqrt{\frac{m_\beta}{m_\alpha}} \Pi_{\beta zz} \right] + \\ & \left[(\gamma_\alpha - v_{\alpha\alpha}^{(3)} + v_{\alpha\alpha}^{(4)} - v_{\alpha\beta}^{(3)}) \Pi_{\alpha xy} + v_{\alpha\beta}^{(4)} \sqrt{\frac{m_\beta}{m_\alpha}} \Pi_{\beta xy} \right] \mu^2 \cos\theta \sin\theta + \\ & \left[\gamma_\alpha T_\alpha - 2 \frac{m_\alpha}{m_\alpha + m_\beta} v_{\alpha\beta}^{(1)} (T_\alpha - \sqrt{\frac{m_\beta}{m_\alpha}} T_\beta) \right] (\mu^2 - 1) + \\ & \frac{8}{5} \left[(\gamma_\alpha - v_{\alpha\alpha}^{(5)} + v_{\alpha\alpha}^{(6)} - v_{\alpha\beta}^{(5)}) q_{\alpha x} + v_{\alpha\beta}^{(6)} \sqrt{\frac{m_\beta}{m_\alpha}} q_{\beta x} - \frac{5}{8} v_{\alpha\beta}^{(2)} (u_{\alpha x} - u_{\beta x}) \right] \mu \cos\theta (\mu^2 - 2) \left. \right\} + \\ & + \frac{8}{5} \left[(\gamma_\alpha - v_{\alpha\alpha}^{(5)} + v_{\alpha\alpha}^{(6)} - v_{\alpha\beta}^{(5)}) q_{\alpha y} + v_{\alpha\beta}^{(6)} \sqrt{\frac{m_\beta}{m_\alpha}} q_{\beta y} - \frac{5}{8} v_{\alpha\beta}^{(2)} (u_{\alpha y} - u_{\beta y}) \right] \mu \sin\theta (\mu^2 - 2) \left. \right\} \quad (9.3) \end{aligned}$$

με $\alpha, \beta = 1, 2$, $\alpha \neq \beta$. Η διατύπωση είναι σε κυλινδρικές συντεταγμένες μιας και έχει φανερί ότι με τον τρόπο αυτό διευκολύνεται η αριθμητική επίλυση. Οι ορισμοί των μ και θ έχουν δοθεί στις σχέσεις (8.22). Αν επαναληφθεί η ίδια διαδικασία αλλά αυτή τη φορά με τη ποσότητα $\frac{1}{\sqrt{\pi}}(c_z^2 - \frac{1}{2})e^{-c_z^2}$ προκύπτει:

$$\mu \left[\cos\theta \frac{\partial \psi_\alpha}{\partial x} + \sin\theta \frac{\partial \psi_\alpha}{\partial y} \right] + \omega_\alpha \gamma_\alpha \psi_\alpha =$$

$$\begin{aligned}
& \omega_\alpha \sqrt{\frac{m_\alpha}{m}} \left\{ \left[(\gamma_\alpha - \nu_{\alpha\alpha}^{(3)} + \nu_{\alpha\alpha}^{(4)} - \nu_{\alpha\beta}^{(3)}) \Pi_{\alpha z z} + \nu_{\alpha\beta}^{(4)} \sqrt{\frac{m_\beta}{m_\alpha}} \Pi_{\beta z z} \right] + \right. \\
& \quad \left. \frac{1}{2} \left[\gamma_\alpha T_\alpha - 2 \frac{m_\alpha}{m_\alpha + m_\beta} \nu_{\alpha\beta}^{(1)} (T_\alpha - \sqrt{\frac{m_\beta}{m_\alpha}} T_\beta) \right] + \right. \\
& \quad \left. \frac{8}{10} \left[(\gamma_\alpha - \nu_{\alpha\alpha}^{(5)} + \nu_{\alpha\alpha}^{(6)} - \nu_{\alpha\beta}^{(5)}) q_{\alpha x} + \nu_{\alpha\beta}^{(6)} \sqrt{\frac{m_\beta}{m_\alpha}} q_{\beta x} - \frac{5}{8} \nu_{\alpha\beta}^{(2)} (u_{\alpha x} - u_{\beta x}) \right] \mu \cos \theta + \right. \\
& \quad \left. \frac{8}{10} \left[(\gamma_\alpha - \nu_{\alpha\alpha}^{(5)} + \nu_{\alpha\alpha}^{(6)} - \nu_{\alpha\beta}^{(5)}) q_{\alpha y} + \nu_{\alpha\beta}^{(6)} \sqrt{\frac{m_\beta}{m_\alpha}} q_{\beta y} - \frac{5}{8} \nu_{\alpha\beta}^{(2)} (u_{\alpha y} - u_{\beta y}) \right] \mu \sin \theta \right\} \quad (9.4)
\end{aligned}$$

Στις εξισώσεις (9.3) και (9.4), $\alpha, \beta = 1, 2$ με $\alpha \neq \beta$, $\gamma_\alpha = \gamma_{\alpha\alpha} + \gamma_{\alpha\beta}$ και

$$\omega_\alpha = \delta \left(\frac{C}{\gamma_\alpha} + \frac{1-C}{\gamma_\beta} \right) \sqrt{\frac{m_\alpha}{m}} \quad (9.5)$$

όπου το δ ορίζεται με βάση τη μέση μοριακή μάζα μέσω της σχέσης (6.12). Οι ποσότητες ϕ_α και ψ_α είναι

$$\phi_\alpha = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} h_\alpha e^{-c_z^2} dc_z \quad (9.6)$$

και

$$\psi_\alpha = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(c_z^2 - \frac{1}{2} \right) h_\alpha e^{-c_z^2} dc_z \quad (9.7)$$

με h_α να αντιπροσωπεύει τη γραμμικοποιημένη συνάρτηση κατανομής της γραμμικοποιημένης τρισδιάστατης εξίσωσης Boltzmann. Οι μακροσκοπικές ποσότητες μπορούν να υπολογιστούν ως ροπές των ϕ και ψ σύμφωνα με τις σχέσεις:

$$\varrho_\alpha(x, y) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_\alpha \mu e^{-\mu^2} d\mu d\theta \quad (9.8)$$

$$u_{\alpha x}(x, y) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mu^2 \cos \theta \phi_\alpha e^{-\mu^2} d\mu d\theta \quad (9.9)$$

$$u_{\alpha y}(x, y) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mu^2 \sin \theta \phi_\alpha e^{-\mu^2} d\mu d\theta \quad (9.10)$$

$$q_{\alpha x}(x, y) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mu^2 \cos \theta \left[(\mu^2 - 2) \phi_\alpha + \psi_\alpha \right] e^{-\mu^2} d\mu d\theta \quad (9.11)$$

$$q_{\alpha y}(x, y) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mu^2 \sin \theta \left[(\mu^2 - 2) \phi_\alpha + \psi_\alpha \right] e^{-\mu^2} d\mu d\theta \quad (9.12)$$

$$\Pi_{\alpha xx}(x, y) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mu \frac{1}{3} \left[(\mu^2 (2 \cos^2 \theta - \sin^2 \theta) - \frac{1}{2}) \phi_\alpha - \psi_\alpha \right] e^{-\mu^2} d\mu d\theta \quad (9.13)$$

$$\Pi_{\alpha yy}(x, y) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mu \frac{1}{3} \left[(\mu^2 (2 \sin^2 \theta - \cos^2 \theta) - \frac{1}{2}) \phi_\alpha - \psi_\alpha \right] e^{-\mu^2} d\mu d\theta \quad (9.14)$$

$$\Pi_{\alpha z z}(x, y) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{m}{m_{\alpha}}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mu \frac{1}{3} [-(\mu^2 - 1)\phi_{\alpha} + 2\psi_{\alpha}] e^{-\mu^2} d\mu d\theta \quad (9.15)$$

$$\Pi_{\alpha x y}(x, y) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{m}{m_{\alpha}}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mu^3 \cos\theta \sin\theta \phi_{\alpha} e^{-\mu^2} d\mu d\theta \quad (9.16)$$

και τέλος

$$T_{\alpha}(x, y) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{m}{m_{\alpha}}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mu \frac{2}{3} [(\mu^2 - 1)\phi_{\alpha} + \psi_{\alpha}] e^{-\mu^2} d\mu d\theta. \quad (9.17)$$

Επομένως υπάρχει πλέον το σύνολο των εξισώσεων για την επίλυση του προβλήματος το οποίο αποτελείται από τις συζευγμένες ολοκληροδιαφορικές εξισώσεις (9.3) και (9.4) και τις εκφράσεις (9.8-9.17). Επιπλέον βέβαια απαιτείται ο προσδιορισμός των κατάλληλων οριακών συνθηκών οι οποίες στην περίπτωση όπου τα τοιχώματα έχουν σταθερή θερμοκρασία T_0 είναι:

$$\phi(x, 0, \mu, \theta) = \sqrt{\frac{m_{\alpha}}{m}} \varrho(x, 0) \quad \text{για } 0 < \theta < \pi \quad (9.18)$$

$$\phi(-\frac{1}{2}, y, \mu, \theta) = \sqrt{\frac{m_{\alpha}}{m}} \varrho(-\frac{1}{2}, y) \quad \text{για } -\frac{\pi}{2} < \theta < \frac{\pi}{2} \quad (9.19)$$

$$\phi(\frac{1}{2}, y, \mu, \theta) = \sqrt{\frac{m_{\alpha}}{m}} \varrho(\frac{1}{2}, y) \quad \text{για } \frac{\pi}{2} < \theta < \frac{3\pi}{2} \quad (9.20)$$

$$\phi(x, A, \mu, \theta) = \sqrt{\frac{m_{\alpha}}{m}} \varrho(x, A) + 2\mu \cos\theta U_0 \quad \text{για } \pi < \theta < 2\pi \quad (9.21)$$

και

$$\psi(x, 0, \mu, \theta) = 0 \quad \text{για } 0 < \theta < \pi \quad (9.22)$$

$$\psi(-\frac{1}{2}, y, \mu, \theta) = 0 \quad \text{για } -\frac{\pi}{2} < \theta < \frac{\pi}{2} \quad (9.23)$$

$$\psi(\frac{1}{2}, y, \mu, \theta) = 0 \quad \text{για } \frac{\pi}{2} < \theta < \frac{3\pi}{2} \quad (9.24)$$

$$\psi(x, A, \mu, \theta) = 0 \quad \text{για } \pi < \theta < 2\pi \quad (9.25)$$

για τις εξισώσεις (9.3) και (9.4) αντίστοιχα. Στη συνέχεια και σύμφωνα με τη Παράγραφο 8.6 μπορεί να εφαρμοστεί η διάσπαση του προβλήματος ώστε να παρακαμφθούν τα προβλήματα που προκύπτουν από τις ασυνέχειες στα άκρα της κινούμενης πλάκας. Τέλος σημειώνεται ότι το αριθμητικό σχήμα που εφαρμόζεται είναι αντίστοιχο με αυτό που αναπτύχθηκε στην Παράγραφο 8.7 στο αντίστοιχο πρόβλημα ενός συστατικού.

9.3.2 Αποτελέσματα προσομοιώσεων

Στα πλαίσια της παρούσας διατριβής, και όσον αφορά τη ροή μείγματος αερίων σε ορθογωνική κοιλότητα, κύριος στόχος ήταν η διερεύνηση των δυνατοτήτων αποτελεσματικής προσομοίωσης και όχι τόσο η ενδελεχής μελέτη των φυσικών φαινομένων που λαμβάνουν χώρα. Έτσι επιλέχθηκε η πραγματοποίηση περιορισμένου αριθμού προσομοιώσεων, ενδεικτικών πάντως των δυνατοτήτων του αναπτυχθέντος αλγόριθμου και όχι η εξαγωγή πλήρους ομάδας αποτελεσμάτων κάτι που συνέβη στην περίπτωση του αερίου με ένα συστατικό.

Οι προσομοιώσεις που πραγματοποιήθηκαν αφορούσαν τα μείγματα $Ne - Ar$ και $He - Xe$. Η συγκέντρωση για το πρώτο συστατικό, που αποτελεί και την παράμετρο υπολογισμού, επιλέχθηκε ίση με $C = 0.5$. Επίσης τα συμπεράσματα του Κεφαλαίου 6 που αφορούσαν το τύπο του επιλεχθέντος δυναμικού των συγκρούσεων, οδήγησαν στην επιλογή του πραγματικού δυναμικού ως της βέλτιστης.

Οι τιμές της παραμέτρου δ για τις οποίες ελήφθησαν αποτελέσματα ήταν $\delta = 0.1, 1, 10$ προκειμένου να διαπιστωθεί σε ένα σημαντικό εύρος τιμών η ύπαρξη ή μη σημαντικών προβλημάτων. Τέλος και όσον αφορά τη γεωμετρία, επιλέχθηκε η τετραγωνική κοιλότητα ως η τυπικότερη περίπτωση.

Στο Σχήμα 9.3 φαίνονται οι ροϊκές γραμμές του μείγματος $Ne - Ar$ για τις τρεις τιμές του δ ενώ στο Σχήμα 9.4 δίνονται τα αντίστοιχα αποτελέσματα για το μείγμα $He - Xe$. Όπως παρατηρείται, τα αποτελέσματα είναι σχετικά κοντά αλλά υπάρχουν συγκεκριμένες διαφοροποιήσεις. Και στις δύο περιπτώσεις ενώ το κέντρο της δίνης ξεκινάει από μια ορισμένη θέση η οποία καθορίζεται από τη λύση στο όρια της ελεύθερης μοριακής κίνησης, προοδευτικά ανέρχεται προσεγγίζοντας τη λύση στο υδροδυναμικό όριο. Κάτι αντίστοιχο παρατηρήθηκε και στην περίπτωση του απλού αερίου. Παρόλα ταύτα όμως η άνοδος αυτή συμβαίνει ελαφρά γρηγορότερα στην περίπτωση του $Ne - Ar$.

Στα Σχήματα 9.5 και 9.6 δίδονται οι κατανομές της οριζόντιας συνιστώσας της ταχύτητας σε κατακόρυφο επίπεδο που περνά από το σημείο $x = 0$, και της κατακόρυφης συνιστώσας σε οριζόντιο επίπεδο που διαπερνά το κέντρο της δίνης. Επίσης, στα Σχήματα 9.7 και 9.8 παρουσιάζονται τα αντίστοιχα αποτελέσματα για το μείγμα $He - Xe$. Από τη σύγκριση διαπιστώνεται ότι οι ταχύτητες στην δεύτερη περίπτωση είναι μεγαλύτερες αλλά όχι σημαντικά.

Από τα πρώτα αυτά ενδεικτικά αποτελέσματα διαπιστώνεται ότι σε γενικές γραμμές υπάρχουν μεταβολές στα ροϊκά χαρακτηριστικά ανάλογα με τα συστατικά του μείγματος οι οποίες όμως παραμένουν σχετικά μικρές. Είναι γεγονός πάντως ότι η αναλυτική και σε βάθος διερεύνηση του προβλήματος είναι απαραίτητη, ώστε να διαπιστωθεί αν οι αποκλίσεις στη συμπεριφορά του μείγματος από αυτή του αερίου ενός συστατικού είναι μικρές σε όλες τις παραμέτρους και γεωμετρίες ή αυτή η παρατήρηση αφορά μόνο τα μεγέθη και τη γεωμετρία που εξετάστηκε στη παρούσα εργασία. Ταυτόχρονα είναι πιθανό, ακόμα και οι μικρές αυτές διαφοροποιήσεις να είναι αξιοποιήσιμες. Τέλος επιβεβαιώνεται ότι η προτεινόμενη προσέγγιση είναι ικανή να προσομοιώσει με ακρίβεια και διατμητικές ροές μιγμάτων.

9.4 Ανακεφαλαίωση

Στο παρόν Κεφάλαιο αναπτύχθηκαν μεθοδολογίες επίλυσης διατμητικών ροών μειγμάτων αερίων. Αρχικά επιλύθηκε η ροή Couette που αποτελεί την απλούστερη ίσως περίπτωση διατμητικής ροής. Η περίπτωση του μείγματος ευγενών αερίων που αντιμετωπίστηκε επιβεβαίωσε την σημασία της εφαρμογής μεσοσκοπικών μεθόδων για την αντιμετώπιση προβλημάτων στην μεταβατική περιοχή. Στη συνέχεια παρουσιάστηκε η μεθοδολογία για την επίλυση της ροής μείγματος αερίων σε ορθογωνική κοιλότητα με κινούμενη την άνω πλάκα. Το μοντέλο McCormack χρησιμοποιήθηκε και πάλι προκειμένου να περιγραφεί ο όρος των συγκρούσεων. Επίσης παρουσιάστηκαν ορισμένα ενδεικτικά αποτελέσματα που αφορούσαν τετραγωνική κοιλότητα και δύο χαρακτηριστικά μείγματα. Διαπιστώθηκαν αποκλίσεις από την αντίστοιχη ροή μονατομικού αερίου, και φάνηκε η ανάγκη για λεπτομερέστερη μελέτη της συγκεκριμένης ροής.

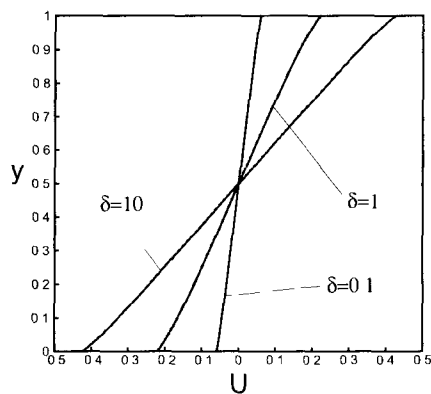
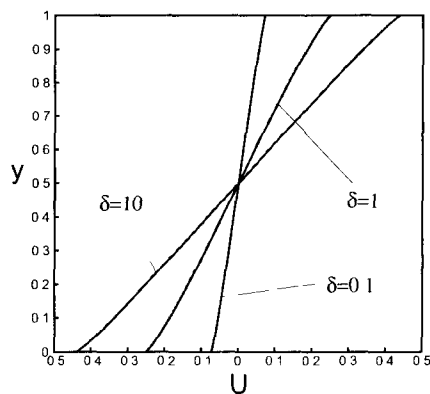
9.5 Πίνακες - Σχήματα

Πίνακας 9.1: Διατηρητικές τάσεις για το μείγμα Ne - Ar και διάφορες τιμές της παραμέτρου δ και της μοριακής συγκέντρωσης C_0 .

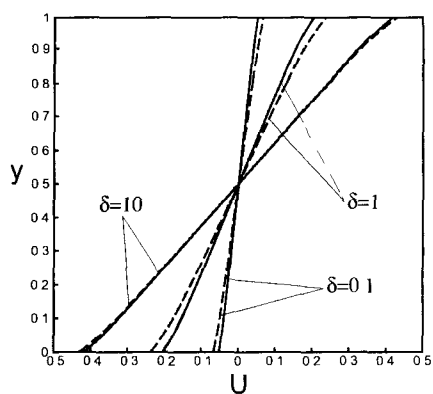
δ	Ένα	Ne - Ar		
	συστατικό	$C_0 = 0.1$	$C_0 = 0.5$	$C_0 = 0.9$
0.001	2.818 (-1)	2.807 (-1)	2.779 (-1)	2.799 (-1)
0.01	2.797 (-1)	2.786 (-1)	2.758 (-1)	2.778 (-1)
0.1	2.612 (-1)	2.601 (-1)	2.576 (-1)	2.594 (-1)
1	1.694 (-1)	1.688 (-1)	1.675 (-1)	1.685 (-1)
10	4.154 (-2)	4.150 (-2)	4.139 (-2)	4.148 (-2)
50	9.609 (-3)	9.606 (-3)	9.601 (-3)	9.605 (-3)

Πίνακας 9.2: Διατημητικές τάσεις για το μείγμα He - Xe και διάφορες τιμές της παραμέτρου δ και της μοριακής συγκέντρωσης C_0 .

δ	Ένα	<i>He - Xe</i>		
	συστατικό	$C_0 = 0.1$	$C_0 = 0.5$	$C_0 = 0.9$
0.001	2.818 (-1)	2.721 (-1)	2.306 (-1)	2.031 (-1)
0.01	2.797 (-1)	2.701 (-1)	2.291 (-1)	2.019 (-1)
0.1	2.612 (-1)	2.527 (-1)	2.162 (-1)	1.919 (-1)
1	1.694 (-1)	1.654 (-1)	1.480 (-1)	1.361 (-1)
10	4.154 (-2)	4.126 (-2)	3.994 (-2)	3.900 (-2)
50	9.609 (-3)	9.593 (-3)	9.520 (-3)	9.465 (-3)



Σχήμα 9.1: Κατανομές της μέσης ταχύτητας για διάφορες τιμές της παραμέτρου δ και $C_0 = 0.5$ για τα μείγματα $Ne - Ar$ (πάνω) και $He - Xe$ (κάτω).



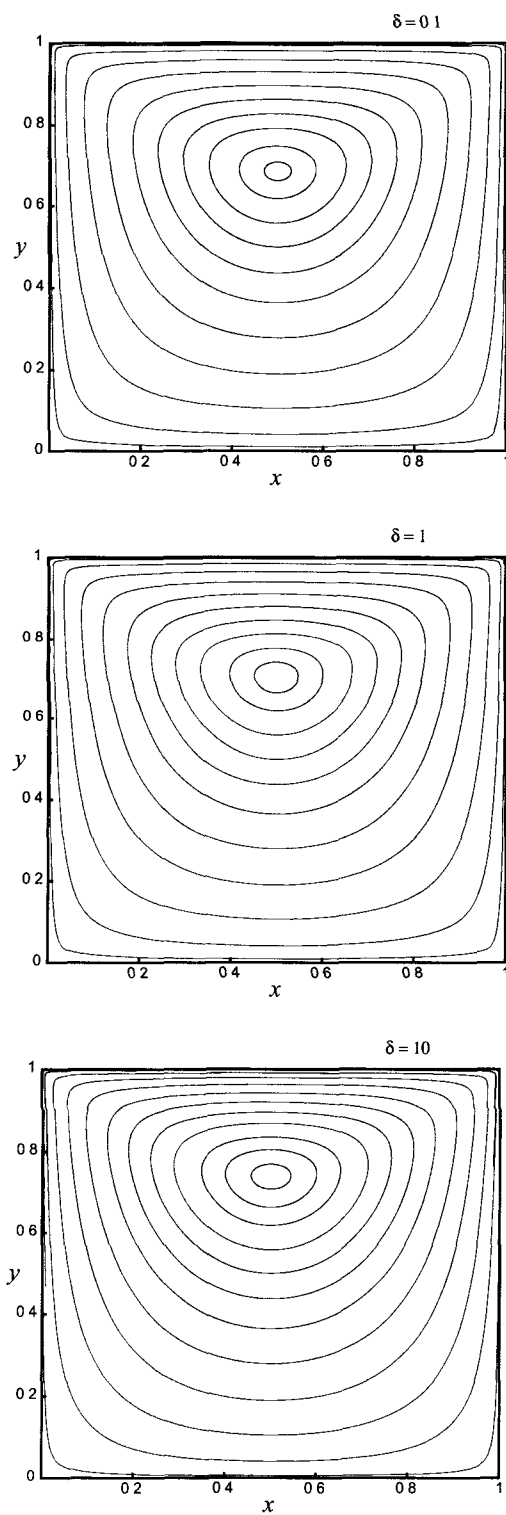
Σχήμα 9.2: Κατανομές ταχυτήτων του κάθε συστατικού για διάφορες τιμές του δ και $C_0 = 0.5$ για το μείγμα $He - Xe$: συνεχής γραμμή - He , διακεκομμένη γραμμή - Xe .

Πίνακας 9.3: Ταχύτητα ολίσθησης του κάθε συστατικού πάνω στο τοίχωμα ως συνάρτηση της παραμέτρου δ για το μείγμα $He - Xe$ και μοριακή συγκέντρωση $C_0 = 0.1$ και $C_0 = 0.9$.

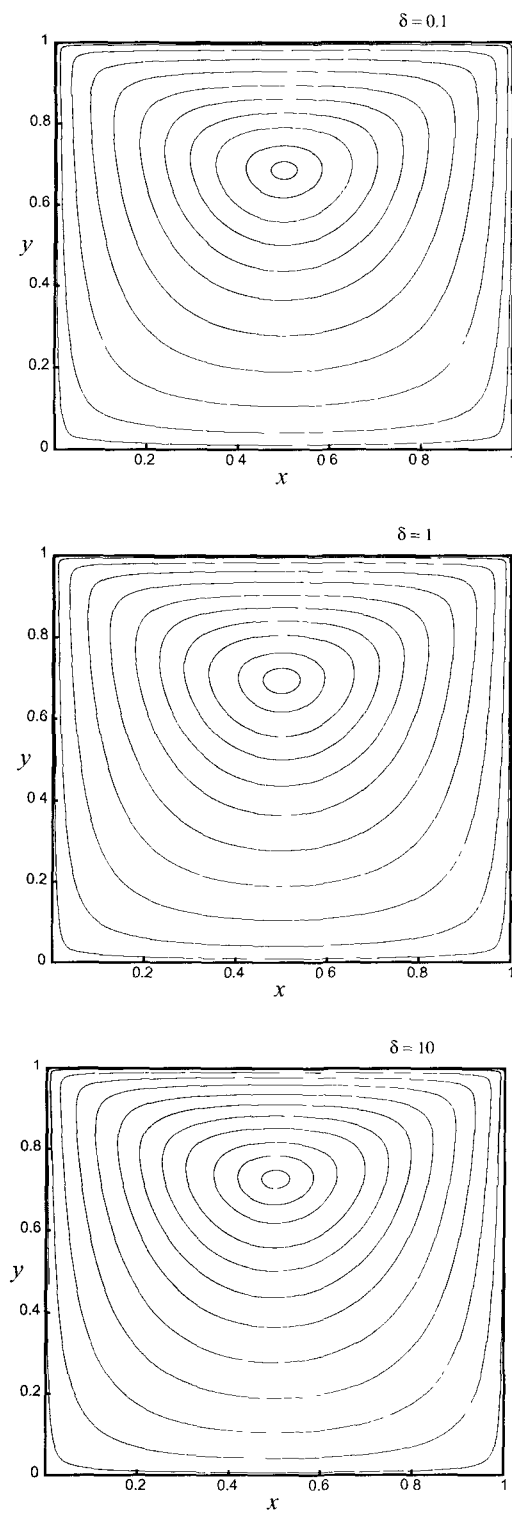
δ	$He - Xe(C_0 = 0.1)$		$He - Xe(C_0 = 0.9)$	
	U_{He}	U_{Xe}	U_{He}	U_{Xe}
0.001	4.987 (-1)	4.980 (-1)	4.985 (-1)	4.985 (-1)
0.01	4.912 (-1)	4.868 (-1)	4.895 (-1)	4.898 (-1)
0.1	4.490 (-1)	4.281 (-1)	4.411 (-1)	4.420 (-1)
0.6	3.424 (-1)	2.998 (-1)	3.267 (-1)	3.291 (-1)
1.0	2.952 (-1)	2.501 (-1)	2.792 (-1)	2.821 (-1)
2.0	2.233 (-1)	1.812 (-1)	2.102 (-1)	2.132 (-1)
4.0	1.517 (-1)	1.194 (-1)	1.442 (-1)	1.469 (-1)
10.0	7.731 (-2)	5.989 (-2)	7.589 (-2)	7.742 (-2)
40.0	2.227 (-2)	1.723 (-2)	2.271 (-2)	2.317 (-2)
100.	9.184 (-3)	7.105 (-3)	9.458 (-3)	9.651 (-3)

Πίνακας 9.4: Μέση ταχύτητα ολίσθησης πάνω στο τοίχωμα ως συνάρτηση της παραμέτρου δ για τα μείγματα $Ne - Ar$ και $He - Xe$ και μοριακή συγκέντρωση $C_0 = 0.1$ και $C_0 = 0.9$.

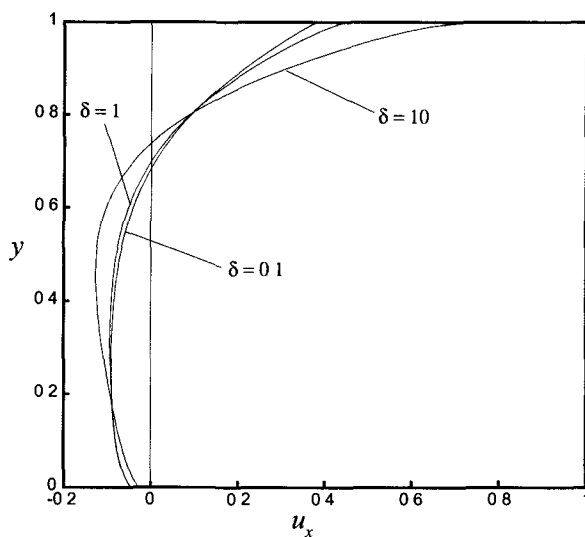
δ	<i>He - Xe</i>		<i>Ne - Ar</i>	
	$C_0 = 0.1$	$C_0 = 0.9$	$C_0 = 0.1$	$C_0 = 0.9$
0.001	4.981 (-1)	4.985 (-1)	4.980 (-1)	4.980 (-1)
0.01	4.872 (-1)	4.896 (-1)	4.866 (-1)	4.867 (-1)
0.1	4.302 (-1)	4.412 (-1)	4.274 (-1)	4.274 (-1)
0.6	3.041 (-1)	3.269 (-1)	2.983 (-1)	2.983 (-1)
1.0	2.546 (-1)	2.795 (-1)	2.485 (-1)	2.484 (-1)
2.0	1.854 (-1)	2.105 (-1)	1.795 (-1)	1.795 (-1)
4.0	1.226 (-1)	1.445 (-1)	1.179 (-1)	1.179 (-1)
10.0	6.163 (-2)	7.604 (-2)	5.888 (-2)	5.888 (-2)
40.0	1.773 (-2)	2.276 (-2)	1.687 (-2)	1.687 (-2)
100.	7.313 (-3)	9.477 (-3)	6.951 (-3)	6.951 (-3)



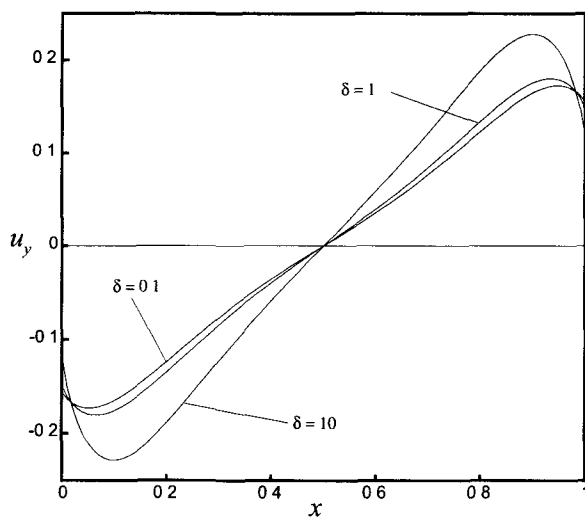
Σχήμα 9.3: Ροϊκές γραμμές για το μείγμα $Ne - Ar$ ($C = 0.5$) και διάφορες τιμές της παραμέτρου δ .



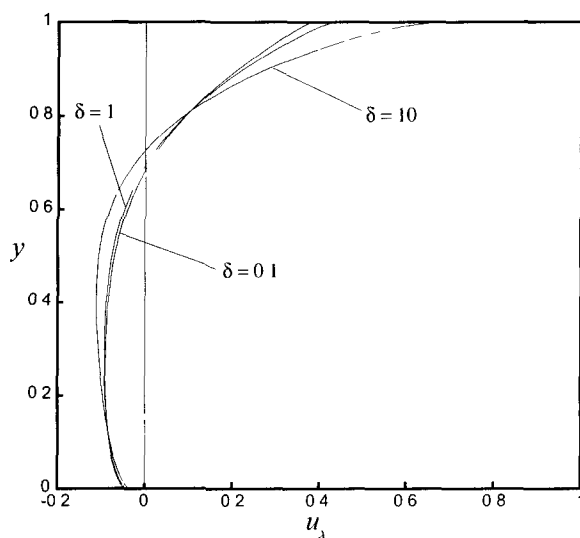
Σχήμα 9.4: Ροϊκές γραμμές για το μείγμα $He - Xe$ ($C = 0.5$) και διάφορες τιμές της παραμέτρου δ .



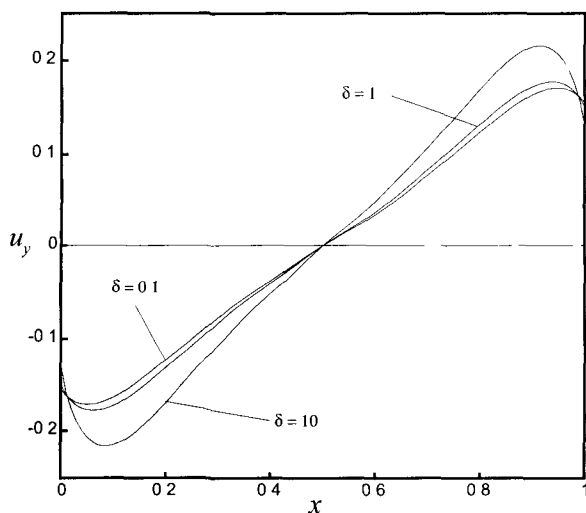
Σχήμα 9.5: Κατανομή της οριζόντιας συνιστώσας της ταχύτητας u_x σε κατακόρυφη τομή στην οποία ανήκει και το κέντρο της κοιλότητας, για διάφορες τιμές της παραμέτρου δ για το μείγμα $Ne - Ar$ ($C = 0.5$).



Σχήμα 9.6: Κατανομή της κάθετης συνιστώσας της ταχύτητας u_y σε οριζόντια τομή στην οποία ανήκει και το κέντρο της κοιλότητας, για διάφορες τιμές της παραμέτρου δ για το μείγμα $Ne - Ar$ ($C = 0.5$).



Σχήμα 9.7: Κατανομή της οριζόντιας συνιστώσας της ταχύτητας u_x σε κατακόρυφη τομή στην οποία ανήκει και το κέντρο της κοιλότητας, για διάφορες τιμές της παραμέτρου δ για το μείγμα $He - Xe$ ($C = 0.5$).



Σχήμα 9.8: Κατανομή της κάθετης συνιστώσας της ταχύτητας u_y σε οριζόντια τομή στην οποία ανήκει και το κέντρο της κοιλότητας, για διάφορες τιμές της παραμέτρου δ για το μείγμα $He - Xe$ ($C = 0.5$).

Κεφάλαιο 10

Ανακεφαλαίωση και μελλοντική εργασία

Ο αρχικός στόχος της διατριβής ήταν διττός: Από τη μια πλευρά ζητούμενο ήταν η ανάπτυξη τεχνικών οι οποίες θα αντιμετώπιζαν βασικά προβλήματα των αριθμητικών τεχνικών που εφαρμόζονται σε μεσοσκοπικές προσεγγίσεις φαινομένων μεταφοράς και από τη άλλη, η διερεύνηση και επίλυση ροών μειγμάτων αερίων στην περιοχή της μεσοκλίμακας καθώς και σύνθετων γεωμετρικών διαμορφώσεων, περιοχών που παρέμεναν ανεξερεύνητες σε μεγάλο βαθμό μέχρι τώρα.

Ως προς το πρώτο σκέλος, βασική συμβολή της διατριβής αποτέλεσε η ανάπτυξη και εφαρμογή μιας μεθοδολογίας διαμόρφωσης συνθετικών σχημάτων επιτάχυνσης τα οποία βελτιώνουν σημαντικά το ρυθμό σύγκλισης της μεθόδου των διακριτών ταχυτήτων. Το προτεινόμενο σχήμα εφαρμόστηκε με επιτυχία σε συνδυασμό με μια σειρά μοντέλων για τον όρο των σωματιδιακών συγκρούσεων που περιελάμβανε τα μοντέλα BGK και S για την επίλυση ροών ενός συστατικού και το μοντέλο McCormack για ροές μειγμάτων αερίων.

Βασικό στοιχείο για την αξιολόγηση της επιτυχίας του σχήματος αποτέλεσε η ανάλυση ευστάθειας που πραγματοποιήθηκε τόσο για τη μέθοδο DVM όσο και για τα προτεινόμενα σχήματα επιτάχυνσης. Τα θεωρητικά αυτά αποτελέσματα έδειξαν ότι η μέθοδος DVM συγκλίνει σχετικά γρήγορα για μικρές τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ αλλά καθώς αυτή αυξάνει και προσεγγίζεται το υδροδυναμικό όριο, η σύγκλιση δυσκολεύει και καθίσταται προοδευτικά ασύμφορη. Αντίθετα, τα σχήματα επιτάχυνσης επιτυγχάνουν ταχύτερη σύγκλιση σε όλο το εύρος του αριθμού Kn . Η βελτίωση για όλα τα σχήματα που προτάθηκαν ήταν σημαντική ενώ όπως φάνηκε όσο μεγαλύτερη είναι η τάξη του σχήματος τόσο πιο γρήγορη είναι η σύγκλιση. Τα αποτελέσματα αυτά επιβεβαιώθηκαν και αριθμητικά με προσομοιώσεις ροών σε δύο διαστάσεις. Πιο συγκεκριμένα, διαπιστώθηκε ότι οι αλγόριθμοι συνέκλιναν ακόμα ταχύτερα από την πρόβλεψη της θεωρητικής ανάλυσης της συνεχούς εξίσωσης, κάτι βέβαια που ήταν αναμενόμενο. Ιδιαίτερα για μεγάλες τιμές της παραμέτρου δ ο απαιτούμενος υπολογιστικός χρόνος ήταν δύο ή και τρεις τάξεις μεγέθους μικρότερος από τον αντίστοιχο χρόνο που απαιτούσε η εφαρμογή της απλής DVM.

Αντίστοιχη προσέγγιση εφαρμόστηκε και στη μέθοδο Lattice Boltzmann η οποία αποτελεί μια ειδικά διακριτοποιημένη μορφή της DVM για την επίλυση ροών συνεχούς μέσου. Η θεωρητική ανάλυση έδειξε ότι και σε αυτή τη περίπτωση, η βελτίωση είναι εντυπωσιακή. Και πάλι ο θεωρητικός υπολογιστικός χρόνος μειώνεται ως και δύο τάξεις μεγέθους.

Τέλος, ένα άλλο σημαντικό χαρακτηριστικό των σχημάτων επιτάχυνσης που αξίζει να αναφερθεί, αφορά την βελτίωση της ακρίβειας των αποτελεσμάτων που επιτυγχάνεται. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι ελαχιστοποιείται το σφάλμα στρογγυλοποίησης το οποίο είναι σημαντικό όταν ο αριθμός των επαναλήψεων είναι μεγάλος.

Ο δεύτερος στόχος δηλαδή η μελέτη ροών σε πολύπλοκες γεωμετρίες καθώς και μειγμάτων αερίων σε μία και δύο διαστάσεις εξυπηρετήθηκε με την ανάλυση ροών μειγμάτων ευγενών αερίων εντός αγωγών σε μία και σε δύο διαστάσεις καθώς και με την επίλυση της ροής σε κοιλότητα για απλό αέριο αλλά και μείγμα αερίων.

Πιο συγκεκριμένα, επιλύθηκε η ροή μείγματος ευγενών αερίων μεταξύ παραλλήλων πλακών και διερευνήθηκε η επίδραση διαφόρων παραγόντων στη διαμόρφωση της ροής όπως η σύσταση του μείγματος, η συγκέντρωση του κάθε συστατικού και το δυναμικό των σωματιδιακών συγκρούσεων. Επίσης διερευνήθηκε και η ροή μείγματος εντός αγωγού ορθογωνικής διατομής υπό την επίδραση κλίσης πίεσης, θερμοκρασίας ή συγκέντρωσης. Και στην περίπτωση αυτή, εξετάστηκε η επίδραση που έχουν στη ροή διάφορες μεταβλητές όπως η συγκέντρωση, η αραιοποίηση καθώς και ο λόγος των διαστάσεων της διατομής.

Η μελέτη διατμητικών ροών επικεντρώθηκε κυρίως στην αντιμετώπιση της ροής εντός ορθογωνικής κοιλότητας. Αναπτύχθηκε μια νέα μεθοδολογία για την αντιμετώπιση των ασυνεχειών που παρουσιάζονται μεταξύ την κινούμενης πλάκας και των στατικών τοιχωμάτων και εφαρμόστηκε με επιτυχία. Η ροή ενός συστατικού αναλύθηκε ενδελεχώς και εξετάστηκαν διάφορες διαμορφώσεις της κοιλότητας ενώ τα αποτελέσματα που προέκυψαν και τα φυσικά φαινόμενα που παρατηρήθηκαν ήταν άκρως ενδιαφέροντα. Σημαντικό σημείο αποτελεί η παρατήρηση ότι οι μεσοσκοπικές μεθοδολογίες φαίνεται ότι είναι ικανές να προσομοιώσουν αξιόπιστα όλο το εύρος του αριθμού Knudsen κάτι εξαιρετικά σημαντικό σε περιπτώσεις ροών όπου παρουσιάζονται φαινόμενα σε διάφορες κλίμακες. Η αντίστοιχη ροή σε κοιλότητα μείγματος αερίων εξετάστηκε για την περίπτωση τετραγωνικής διατομής. Μελετήθηκε η επίδραση της σύστασης του μείγματος καθώς και της αραιοποίησης. Επίσης τα αποτελέσματα συγκρίθηκαν με τα αντίστοιχα της περίπτωσης του ενός αερίου.

Συμπερασματικά, οι κυριότερες συνεισφορές της παρούσας εργασίας αποτελούν η ανάπτυξη μεθοδολογιών για την εξοικονόμηση πόρων και χρόνου σε αριθμητικές προσεγγίσεις μεσοσκοπικής φύσεως, η ανάπτυξη τεχνικών για την αντιμετώπιση ασυνεχειών στις οριακές συνθήκες και τέλος η διατύπωση αξιόπιστων αποτελεσμάτων για ροές σε αγωγούς και κοιλότητες.

Οι τομείς στους οποίους θα μπορούσε να αναπτυχθεί η έρευνα στη συνέχεια περιλαμβάνει πολλές εναλλακτικές περιοχές. Έτσι μια δυνατότητα αποτελεί η εφαρμογή των μεθοδολογιών που αναπτύχθηκαν εδώ για την επίλυση διαφόρων ροών όπως για παράδειγμα η κυλινδρική ροή Couette, η ροή σε αγωγούς με μεταβλητή διατομή, σε αγωγούς με πολυγωνική διατομή και άλλες. Επίσης μπορούν να μελετηθούν ροές μέσα από σχισμές και οπές καθώς και ροές πάνω από πολλαπλώς διαμορφωμένες επιφάνειες. Όλα αυτά βέβαια μπορούν να εφαρμοστούν τόσο για απλό αέριο όσο και για μείγμα.

Μια άλλη περιοχή εφαρμογών μπορεί να αποτελέσει η μελέτη προβλημάτων μετάδοσης θερμότητας με αγωγή. Ταυτόχρονα, πολύ χρήσιμη θα ήταν και η εξαγωγή παραμετρικών σχέσεων με βάση τις οποίες θα μπορούσε να προσδιοριστούν διάφορα μεγέθη όπως η

ογκομετρική παροχή ή η θερμοροή χωρίς να είναι απαραίτητη κάθε φορά η προσομοίωση της ροής. Γενικότερα, μεγάλη ποικιλία εφαρμογών μπορεί να αναζητηθεί σε περιοχές όπως η τεχνολογία ψύξης μικροσυσκευών, η αεροδιαστημική τεχνολογία καθώς και η τεχνολογία κενού, όπως για παράδειγμα τα συστήματα κενού σε αντιδραστήρες σύντηξης.

Περνώντας τώρα σε πιο θεωρητικά αντικείμενα, περιοχή με ιδιαίτερο ενδιαφέρον μπορεί να θεωρηθεί η ενασχόληση με τη γραμμικοποιημένη εξίσωση Boltzmann κλείνοντας έτσι το κύκλο των γραμμικών εξισώσεων.

Τέλος, η μελέτη και αντιμετώπιση της μη γραμμικής εξίσωσης Boltzmann θα επιτρέψει την επέκταση της εφαρμοσιμότητας της προσέγγισης και σε ροές με μεγαλύτερους αριθμούς Re και $Mach$ καθιστώντας την πλέον ένα ολοκληρωμένο εργαλείο επίλυσης κάθε τύπου ροής.

Βιβλιογραφία

- [1] R P Feynman. The Feynman Lectures on Physics. Addison-Wesley, 1977.
- [2] Mohamed Gad-el Hak. The MEMS Handbook. CRCPress, Florida, USA, 2002.
- [3] C M Ho and Y C Tai. Micro-electro-mechanical systems (MEMS) and fluid flows. Ann. Rev. Fluid. Mech., 30:579–612, 1998.
- [4] G E Karniadakis and A Beskok. Microflows: Fundamentals and Simulations. Springer-Verlag, Berlin, 2000.
- [5] B Bhushan, editor. Springer Handbook of Nanotechnology. Springer, 2004.
- [6] J H Ferziger and H G Kaper. Mathematical Theory of Transport Processes in Gases. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1972.
- [7] C Cercignani. Theory and Application of the Boltzmann Equation. Scottish Academic Press, Edinburgh, 1975.
- [8] G A Bird. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. Oxford University Press, Oxford, 1994.
- [9] S Chen and G D Doolen. Lattice Boltzmann method for fluid flows. Annu. Rev. Fluid Mech., 30:329–364, 1998.
- [10] J Broadwell. Study of rarefied shear flow by the discrete velocity method. J. Fluid Mech., 19:401–414, 1964.
- [11] H Cabannes. Couette flow for a gas with a discrete velocity distribution. J. Fluid Mech., 76:273–287, 1976.
- [12] A B Huang, P F Huang, D P Giddens, and R Srinivasan. High speed leading edge problem. Phys.Fluids, 16:814–824, 1973.
- [13] D Valougeorgis and S Naris. Acceleration schemes of the discrete velocity method: Gaseous flows in rectangular microchannels. SIAM J. Sci. Comp., 25(2):534–552, 2003.

- [14] S Naris and D Valougeorgis. A fast synthetic lattice Boltzmann method for steady-state simulations. J. Stat. Phys., 2005. [submitted].
- [15] 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, 336:294–318, 2004.
- [16] S Naris, D Valougeorgis, F Sharipov, and D Kalempa. Discrete velocity modelling of gaseous mixture flows in MEMS. Superlattices and Microstructures, 35:629–643, 2004.
- [17] S Naris, D Valougeorgis, F Sharipov, and D Kalempa. Discrete velocity modelling of gaseous mixture flows in MEMS. Phys. Fluids, 17(6):xxx–xxx, 2005.
- [18] S Naris and D Valougeorgis. Rarefaction effects in the driven cavity flow over the whole range of the Knudsen number. Phys. Fluids, 2005. [accepted].
- [19] S Naris and D Valougeorgis. Shear driven microflows of gaseous mixtures. Sensors Letters, 2005. [accepted].
- [20] L Boltzmann. Vorlesungen über Gastheorie, Part I. Barth J.A., Leipzig, 1896.
- [21] L Boltzmann. Vorlesungen über Gastheorie, Part II. Barth J.A., Leipzig, 1898.
- [22] L Boltzmann. Lectures on Gas Theory. Dover Publications, New York, 1964.
- [23] A J McLennan. Introduction to Non-equilibrium Statistical Mechanics. Prentice Hall, 1988.
- [24] K Huang. Statistical Mechanics. Wiley, 2004.
- [25] 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. J. Phys. Chem. Ref. Data, 13(1):229–303, 1984.
- [26] P L Bhatnagar, E P Gross, and M A Krook. A model for collision processes in gases. Phys. Rev., 94:511–525, 1954.
- [27] Welander. On the temperature jump in a rarefied gas. Ark. Fys., 7:507–553, 1954.
- [28] E M Shakhov. Method of Investigation of Rarefied Gas Flows. Nauka, Moscow, 1974. [in Russian].
- [29] F Sharipov and V Seleznev. Data on internal rarefied gas flows. J. Phys. Chem. Ref. Data, 27(3):657–706, 1998.
- [30] C Cercignani. Mathematical Methods in Kinetic Theory. Plenum, New York, 1969.

- [31] L H Holway. Approximation Procedures for kinetic theory. PhD thesis, Harvard, 1963.
- [32] S Chapman and T G Cowling. The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases. University Press, Cambridge, 1952.
- [33] M Gross, E P Krook. Model for collision processes in gases: Small-amplitude oscillations of charged two-component systems. Phys. Rev., 102(3):593–604, 1956.
- [34] E P Gross and E A Jackson. Kinetic models and the linearized Boltzmann equation. Phys. Fluids, 2:432, 1959.
- [35] L Sirovich. Kinetic modeling of gas mixture. Phys. Fluids, 5(8):908–918, 1962.
- [36] T.F. Morse. Kinetic model for gases with internal degrees of freedom. Phys. Fluids, 7(2):159–169, 1964.
- [37] T F Morse. Kinetic model equations for a gas mixture. Phys. Fluids, 7(12):2012–2013, 1964.
- [38] B B Hamel. Kinetic model for binary gas mixture. Phys. Fluids, 8(3):418–425, 1965.
- [39] F J McCormack. Construction of linearized kinetic models for gaseous mixture and molecular gases. Phys. Fluids, 16:2095–2105, 1973.
- [40] F. Sharipov, L M G Cumin, and D Kalempa. Plane Couette flow of binary gaseous mixture in the whole range of the Knudsen number. Eur. J. Mech. B/Fluids, 2004. [accepted].
- [41] F Sharipov and D Kalempa. Velocity slip and temperature jump coefficients for gaseous mixtures. I. Viscous slip coefficient. Phys. Fluids, 15(6):1800–1806, 2003.
- [42] F Sharipov and D Kalempa. Velocity slip and temperature jump coefficients for gaseous mixtures. II. Thermal slip coefficient. Phys. Fluids, 16(3):759–764, 2004.
- [43] F Sharipov and D Kalempa. Velocity slip and temperature jump coefficients for gaseous mixtures. III. Diffusion slip coefficient. Phys. Fluids, 16(10):3779–3785, 2004.
- [44] S Takata. Diffusion slip for a binary mixture of hard-sphere molecular gases: Numerical analysis based on the linearized Boltzmann equation. In T J Bartel and M A Gallis, editors, Rarefied Gas Dynamics, volume 585, pages 22–29, New York, 2001. 22nd Int. Symp., AIP Conference Proc.
- [45] S Takata, S Yasuda, S Kosuge, and K Aoki. Numerical analysis of thermal-slip and diffusion-slip flows of a binary mixture of hard-sphere molecular gases. Phys. Fluids A, 15:3745–3766, 2003.

- [46] S K Loyalka and H Lang. Linearized Poiseuille flow between parallel plates. Z. Angew. Math. Phys (ZAMP), 21:690–698, 1970.
- [47] J C Maxwell. On stress in rarefied gases arising from inequalities of temperature. Phil Trans. R. Soc. Lond., 1879.
- [48] B T Porodnov, A N Kulev, and F T Tukhvetov. Thermal transpiration in a circular capillary with a small temperature difference. J. Fluid Mech., 88(4):609–622, 1978.
- [49] B T Porodnov, P E Suetin, S F Borisov, and V D Akinshin. Experimental investigation of rarefied gas flow in different channels. J. Fluid Mech., 64(3):417–437, 1974.
- [50] C Cercignani and M Lampis. Kinetic model for gas-surface interaction. Transp. Theory and Stat. Phys., 1:101–114, 1971.
- [51] F Sharipov. Application of the Cercignani-Lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows. I. Plane flow between two parallel plates. Eur. J. Mech. B / Fluids, 21(1):113–123, 2002.
- [52] F Sharipov. Application of the Cercignani-Lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows. II. Slip and jump coefficients. Eur. J. Mech. B / Fluids, 22:133–143, 2003.
- [53] R G Lord. Some further extensions of the Cercignani-Lampis gas-surface interaction model. Phys. Fluids, 7(5):1159–1161, 1995.
- [54] A V Latyshev and A A Yushkanov. Moment boundary conditions in rarefied gas slip-flow problems. Fluid Dynamics, 39(2):339–353, 2004.
- [55] V Boffi, De Socio L, Gaffuri G, and Pescatore. Rigorous constructive solution to monodimensional. Poiseuille and thermal creep flows. Meccanica, 11:183–190, 1976.
- [56] T T Bramlette. Plane Poiseuille flow of rarefied gas based on the finite element method. Phys. Fluids, 14(2):288–293, 1971.
- [57] C Cercignani and A Daneri. Flow of a rarefied gas between two parallel plates. J. Appl. Phys., 34:3509–3513, 1963.
- [58] C Cercignani and C D Pagani. Variational approach to boundary value problems in kinetic theory. Phys. Fluids, 9(10):1167–1173, 1966.
- [59] A B Huang, D P Giddens, and C W Bagual. Rarefied gas flow between parallel plates based on the discrete ordinate method. Phys. Fluids, 10(3):498–502, 1967.
- [60] S K Loyalka, N Petrellis, and T S Storvik. Some exact numerical results for the BGK model: Couette, Poiseuille and thermal creep flow between parallel plates. Z. Angew. Math. Phys (ZAMP), 30:514–521, 1979.

- [61] C Cercignani. Plane Poiseuille flow according to the method of elementary solutions. J. Math. Anal. Appl., 12:254–262, 1965.
- [62] C E Siewert and D Valougeorgis. An analytical discrete-ordinates solution of the S-model kinetic equation for flow in a cylindrical tube. J. Quant. Spectr. Rad. Tran., 72:351–550, 2002.
- [63] T Ohwada, Y Sone, and K Aoki. Numerical analysis of the Poiseuille and thermal transpiration flows between two parallel plates on the basis of the Boltzmann equation for hard sphere molecules. Phys. Fluids A, 1(12):2042–2049, 1989.
- [64] S K Loyalka and K A Hickey. Kinetic theory of thermal transpiration and the mechanocaloric effect: Planar flow of a rigid sphere gas with arbitrary accommodation at the surface. J. Vac. Sci. Technol. A, 9(1):158–163, 1991.
- [65] K A Hickey and S K Loyalka. Plane Poiseuille flow: Rigid sphere gas. J. Vac. Sci. Technol. A, 8(2):957–960, 1990.
- [66] S K Loyalka. Kinetic theory of thermal transpiration and mechanocaloric effect. II. J. Chem. Phys., 63(9):4054–4960, 1975.
- [67] C Cercignani and F Sernagiotto. Cylindrical Poiseuille flow of a rarefied gas. Phys. Fluids, 9(1):40–44, 1966.
- [68] S S Lo and S K Loyalka. An efficient computation of near-continuum rarefied gas flows. Z. Angew. Math. Phys (ZAMP), 33:419–424, 1982.
- [69] F Sharipov. Rarefied gas flow through a long tube at any temperature difference. J. Vac. Sci. Technol. A, 14(4):2627–2635, 1996.
- [70] S K Loyalka and S A Hamoodi. Poiseuille flow of a rarefied gas in a cylindrical tube: Solution of linearized Boltzmann equation. Phys. Fluids A, 2(11):2061–2065, 1990.
- [71] S S Lo, S K Loyalka, and T S Storvick. Kinetic theory of thermal transpiration and mechanocaloric effect. v. flow of polyatomic gases in a cylindrical tube with arbitrary accommodation at the surface. J. Chem. Phys., 81:2439–2449, 1984.
- [72] S K Loyalka. Kinetic theory of thermal transpiration and mechanocaloric effect. I. J. Chem. Phys., 55(9):4497–4503, 1971.
- [73] S K Loyalka. Comments on Poiseuille flow and thermal creep of a rarefied gas between parallel plates. Phys. Fluid, 17(5):1053–1155, 1974.
- [74] S S Lo and S K Loyalka. Flow of a rarefied polyatomic gas between parallel plates. J. Vac. Sci. Technol. A7, 4:2766–2773, 1989.

- [75] S K Loyalka and T S Storvick. Kinetic theory of thermal transpiration and mechanocaloric effect. III. Flow of a polyatomic gas between parallel plates. J. Chem. Phys., 71(1):339–350, 1979.
- [76] D Valougeorgis. An analytical solution of the s-model kinetic equation. Z. Angew. Math. Phys. (ZAMP), 54:112–124, 2003.
- [77] D Valougeorgis and J R Thomas. Exact numerical results for Poiseuille and thermal creep flow in a cylindrical tube. Phys. Fluids, 29(2):423–429, 1986.
- [78] S K Loyalka. Thermal transpiration in a cylindrical tube. Phys. Fluids, 12:2301–2305, 1969.
- [79] F M Sharipov and G M Kremer. On the frame-dependence of constitutive equations. i. heat transfer through a rarefied gas between two rotating cylinders. Continuum Mech. Thermodyn., 7(1):57–72, 1995.
- [80] F M Sharipov and G M Kremer. Heat conduction through a rarefied gas between two rotating cylinders at small temperature difference. Z. Angew. Math. Phys. (ZAMP), 46(5):680–692, 1995.
- [81] F M Sharipov and G M Kremer. Nonlinear Couette flow between two rotating cylinders. Transp. Theory Stat. Phys., 25(2):217–229, 1996.
- [82] F M Sharipov and Kremer G M. Non-isothermal Couette flow of a rarefied gas between two cylinders. Eur. J. Mech. B/Fluids, 18(1):121–130, 1999.
- [83] F M Sharipov and G M Kremer. Linear Couette flow between two rotating cylinders. Eur. J. Mech. B/Fluids, 15(4):493–505, 1996.
- [84] Y Sone and T Doi. Ghost effect and bifurcation in a gas between coaxial cylinders with different temperature. Phys. Fluids, 15(10):2903–2915, 2003.
- [85] L M de Socio, N Ianiro, and L Marino. Effects of the centrifugal forces on a gas between rotating cylinders. J. Thermophys. Heat Transfer, 14(2):269–275, 2000.
- [86] S K Stefanov, I D Boyd, and C P Cai. Monte Carlo analysis of macroscopic fluctuations in a rarefied hypersonic flow around a cylinder. Phys. Fluids, 12(5):1226–1239, 2000.
- [87] 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.
- [88] 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. Phys. Fluids, 10(12):3203–3208, 1998.

- [89] Y Sone and T Doi. Analytical study of bifurcation of a flow of a gas between coaxial circular cylinders with evaporation and condensation. Phys. Fluids, 12(10):2639–2660, 2000.
- [90] Y Sone, M Handa, and H Sugimoto. Bifurcation studies of flows of a gas between rotating coaxial circular cylinders with evaporation and condensation by the Boltzmann system. Transport Theor. Stat. Phys., 31(4-6):299–332, 2002.
- [91] S K Loyalka and K A Hickey. Velocity slip and defect: Hard sphere gas. Phys. Fluids A, 1(3):612–614, 1989.
- [92] T Ohwada, Y Sone, and K Aoki. Numerical analysis of the shear and thermal creep flows of a rarefied gas over a plane wall on the basis of the linearized Boltzmann equation for hard-sphere molecules. Phys. Fluids A, 1(9):1588–1599, 1989.
- [93] S Albertoni, C Cercignani, and L Gotusso. Numerical evaluation of the slip coefficient. Phys. Fluids, 6(7):993–996, 1963.
- [94] C Cercignani, P Foresti, and F Sernagiotto. Dependence of the slip coefficient on the form of the collision frequency. Nuovo Cimento, 57B(2):297–306, 1968.
- [95] S K Loyalka and J H Ferziger. Model dependence of the slip coefficient. Phys. Fluids, 10(8):1833–1839, 1967.
- [96] S K Loyalka. Momentum and temperature-slip coefficients with arbitrary accommodation at the surface. J. Chem. Phys., 48:5432–5436, 1968.
- [97] S K Loyalka. Approximate method in the kinetic theory. Phys. Fluids, 14(11):2291–2294, 1971.
- [98] M Wakabayashi, T Ohwada, and F Golse. Numerical analysis of the shear and thermal creep flows of a rarefied gas over the plane wall of a maxwell-type boundary on the basis of the linearized Boltzmann equation for hard-sphere molecules. Eur. J. Mech. and B/Fluids, 15(2):175–201, 1996.
- [99] S K Loyalka, N Petrellis, and T S Storvik. Some numerical results for the BGK model: thermal creep and viscous slip problems with arbitrary accommodation at the surface. Phys. Fluids, 18(9):1094–1099, 1975.
- [100] Y Sone. Thermal creep in rarefied gas. J. Phys. Soc. Japan, 21:1836–1837, 1966.
- [101] S K Loyalka. Slip in the thermal creep flow. Phys. Fluids, 14(11):21–24, 1971.
- [102] S K Loyalka. Temperature jump and thermal creep slip: Rigid sphere gas. Phys. Fluids A, 1:403–408, 1989.
- [103] J T Kriese, T S Chang, and C E Siewert. Elementary solutions of coupled model equations in the kinetic theory of gases. Int. J. Eng. Sci., 12:441–470, 1974.

- [104] L B Barichello, A C R Bartz, M Camargo, and C E Siewert. The temperature-jump problem for a variable collision frequency model. Phys. Fluids, 14(1):382–391, 2002.
- [105] L B Barichello and C E Siewert. The temperature-jump problem in rarefied-gas dynamics. Eur. J. Appl. Math., 11:353–364, 2000.
- [106] C E Siewert. Viscous-slip, thermal-slip and temperature-jump coefficients as defined by the linearized Boltzmann equation and the Cercignani-Lampis boundary condition. Phys. Fluids, 15(6):1696–1701, 2003.
- [107] C E Siewert. The linearized Boltzmann equation: A concise and accurate solution of the temperature-jump problem. J. Quant. Spec. Rad. Tran., 77:417–432, 2003.
- [108] H. Lang and S.K. Loyalka. An exact expression for the diffusion slip velocity in a binary gas mixture. Phys. Fluids, 13(7):1871–1873, 1970.
- [109] S K Loyalka. Velocity slip coefficient and the diffusion slip velocity for a multicomponent gas mixture. Phys. Fluids, 14(12):2599–2604, 1971.
- [110] H Lang and S K Loyalka. Diffusion slip velocity - theory and experiment. Z. Naturforsch Part A - Astrophysik, Physik und Physikalische Chemie, A27:1307–1319, 1972.
- [111] Y Onishi. On the behaviour of a slightly rarefied gas mixture over plane boundaries. Z. Angew. Math. Phys. (ZAMP), 37:573–596, 1986.
- [112] Y Onishi. On the diffusion-slip flow of a binary gas mixture over a plane wall with imperfect accommodation. Fluid Dynam.Res., 2(1):35–46, 1987.
- [113] F Sharipov and D Kalempa. Velocity slip and temperature jump coefficients for gaseous mixtures. IV. Temperature jump coefficient. xxxx, xx(xx):xxx–xxx, 2004. [submitted].
- [114] C E Siewert and D Valougeorgis. Concise and accurate solutions to half-space binary-gas flow problems defined by the McCormack model and specular-diffuse wall conditions. Eur. J. Mech. B/Fluid, 23:709–729, 2004.
- [115] C E Siewert and D Valougeorgis. The temperature-jump problem for a mixture of two gases. J. Quant. Spectr. Rad. Tran., 70:307–319, 2001.
- [116] I N Ivchenko, S K Loyalka, and R V Tompson. Slip coefficients for binary gas mixture. J. Vac. Sci. Technol. A, 15(4):2375–2381, 1997.
- [117] I N Ivchenko, S K Loyalka, and R V Tompson. Boundary slip phenomena in a binary gas mixture. Z. Angew. Math. Phys. (ZAMP), 53(1):58–72, 2002.
- [118] A Beskok, G E Karniadakis, and W Trimmer. Rarefaction and compressibility effects in gas microflows. Trans. ASME, 118(3):448–456, 1996.

- [119] 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. Int. J. Heat Mass Transfer, 27(8):1189–1196, 1984.
- [120] Siewert C E and Valougeorgis D. The McCormack model: Channel flow of a binary gas mixture driven by temperature, pressure and concentration gradients. Eur. J. Mech. B/Fluids, 23:645–664, 2004.
- [121] F Sharipov and D Kalempa. Gaseous mixture flow through a long tube at arbitrary Knudsen number. J. Vac. Sci. Technol. A, 20(3):814–822, 2002.
- [122] D Valougeorgis. Couette flow of a binary gas mixture. Phys. Fluids, 31(3):521–524, 1988.
- [123] K Aoki, S Takata, and S Kosuge. Vapor flows caused by evaporation and condensation on two parallel plane surfaces: Effect of the presence of noncondensable gas. Phys. Fluids, 10(6):1519–1533, 1998.
- [124] A Frezzotti. Numerical study of the strong evaporation of a binary mixture. Fluid Dynamics Research, 8(5-6):175–187, 1991.
- [125] S K Loyalka, T.S. Storvick, and H.S. Park. Poiseuille flow and thermal creep flow in long, rectangular channel in the molecular and transition flow regimes. J. Vac. Sci. Technol., 13(6):1188–1192, 1976.
- [126] S Colin, C Aubert, and R Caen. Unsteady gaseous flows in rectangular microchannels: frequency response of one or two pneumatic lines connected in series. Eur. J. Mech. B / Fluids, 17(1):79–104, 1998.
- [127] F Sharipov. Rarefied gas flow through a long rectangular channel. J. Vac. Sci. Technol. A, 17(5):3062–3066, 1999.
- [128] F Sharipov. Non-isothermal gas flow through rectangular microchannels. J. Micromech. Microeng., 9(4):394–401, 1999.
- [129] V D Akinshin, V D Seleznev, and F M Sharipov. Non-isothermal rarefied gas flow through a narrow slit. Izvestia Akademii Nauk SSSR, Mekhanika Zhidkosti i Gaza, 4:171–175, 1990. [in Russian].
- [130] G M Alder. The numerical solution of choked and supercritical ideal gas flow through orifices and convergent conical nozzles. J. Mech. Eng. Sci., 21(3):197–203, 1979.
- [131] A A Alexeenko, D A Levin, S F Gimelshein, M S Ivanov, and A D Ketsdever. Numerical and experimental study of orifice flow in the transition regime. AIAA Paper 2001-3072, 2001.
- [132] T Fujimoto and M Usami. Rarefied gas flow through a circular orifice and short tubes. J. Fluids Eng., 106(4):367–373, 1984.

- [133] F Sharipov. Rarefied gas flow into vacuum through a thin orifice. Influence of the boundary conditions. AIAA Journal, 40(10):2006–2008, 2002.
- [134] M Hasegawa and Y Sone. Rarefied gas flow through a slit. Phys.Fluids A, 3(3):466–477, 1991.
- [135] C Cercignani and F Sharipov. Gaseous mixture slit flow at intermediate Knudsen numbers. Phys. Fluids A, 4(6):1283–1289, 1992.
- [136] L Onsager. Reciprocal relations in irreversible processes. I. Phys. Rev., 37:405–426, 1931.
- [137] L Onsager. Reciprocal relations in irreversible processes. II. Phys. Rev., 38:2265–2279, 1931.
- [138] H B G Casimir. On Onsager's principle of microscopic reversibility. Rev. Mod. Phys., 17:343, 1945.
- [139] M Knudsen. Die fasetse der molecular Stromung und die inneren Reibungstromung der gase durch rohren. Ann. Phys. (Leipzig), 28:75–130, 1909.
- [140] A Beskok and G E Karniadakis. Simulation of slip flows in complex microgeometries. ASME DSC, 40:335–370, 1992.
- [141] A Beskok and G E Karniadakis. Simulation of heat and momentum transfer in complex micro-geometries. J. Thermophys. Heat Tr., 8(4):647–655, 1994.
- [142] E B Arkilic, M A Schmidt, and K S Breuer. Gaseous slip flow in long microchannels. J. Microelectromech. S., 6(2):167–178, 1997.
- [143] JC Harley, YF Huang, and HH Bau. Gas-flow in micro-channels. J. Fluid Mech., 284:257–274, 1995.
- [144] U Frisch, B Hasslacher, and Y Pomeau. Lattice gas automata for the Navier-Stokes equation. Phys. Rev. Lett., 56(14):1505–1508, 1986.
- [145] U Frisch, D d'Humieres, B Hasslacher, P Lallemand, Y Pomeau, and J P Rivet. Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions. Complex Syst., 1:649–707, 1986.
- [146] S Wolfram. Cellular automaton fluids 1. basic theory. J. Stat. Phys., 45(3-4):471–526, 1986.
- [147] X He and L S Luo. A priori derivation of the lattice Boltzmann equation. Phys. Rev. E, 55(6):6333–6336, 1997.
- [148] T Abe. Derivation of the lattice Boltzmann method by means of the discrete ordinates method for the Boltzmann equation. J. Comp. Phys., 131(1):241–246, 1997.

- [149] G R McNamara and G Zanetti. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. Phys. Rev. Lett., 61(20):2332–2335, 1988.
- [150] F J Alexander, S Chen, and Sterling J D. Lattice Boltzmann thermohydrodynamics. Phys. Rev. E, 47:2249–2252, 1993.
- [151] J G M Eggels and J A Somers. Numerical simulation of free convective flow using the lattice Boltzmann scheme. Int. J. Heat and Fluid Flow, 16:357–364, 1996.
- [152] O Filippova and D Hanel. A novel lattice BGK approach for low mach number combustion. J. Stat. Phys., 158(2):139–160, 2000.
- [153] X He, S Chen, and G Doolen. A novel thermal model for the lattice Boltzmann method in incompressible limit. J. Comp. Phys., 146(1):282–300, 1998.
- [154] F L Hinton, M N Rosenbluth, S K Wong, Y R Lin-Liu, and R L Miller. Modified lattice Boltzmann method for compressible fluid simulations. Phys. Rev. E, 63:art. no 61212, 2001.
- [155] T Ihle and D M Kroll. Thermal lattice-Boltzmann method for non-ideal gases with potential energy. Computer Phys. Comm., 129(1-3):1–12, 2000.
- [156] Qian Y H. Simulating thermohydrodynamics with lattice BGK models. J. Sci. Comp., 8:231–242, 1993.
- [157] B J Palmer and D R Rector. Lattice Boltzmann algorithm for simulating thermal flow in compressible fluids. J. Comp. Phys., 161(1):1–20, 2000.
- [158] P Pavlo, G Vahala, and L Valhala. Preliminary results in the use of energy-dependent octagonal lattices for thermal lattice Boltzmann simulations. J. Stat. Phys., 107(1-2):499–519, 2002.
- [159] Sun C. Simulations of compressible flows with strong shocks by an adaptive lattice Boltzmann model. J. Comp. Phys., 161(1):70–84, 2000.
- [160] X Shan. Simulation of Rayleigh-Benard convection using a lattice Boltzmann method. Phys. Rev. E, 55(3):2780–2788, 1997.
- [161] K Sankaranarayanan, X Shan, I G Kevrekidis, and S Sundaresan. Analysis of drag and virtual mass forces in bubbly suspensions using an implicit formulation of the lattice Boltzmann method. J. Fluid Mech., 452:61–96, 2002.
- [162] K Sankaranarayanan, I G Kevrekidis, S Sundaresan, J Lu, and G Tryggvason. A comparative study of lattice Boltzmann and front-tracking finite-difference methods for bubble simulations. Int. J. Multiph. Flows, 29:109–116, 2003.

- [163] P Ahlrichs and B Dunweg. Simulation of a single polymer chain in solution by combining lattice Boltzmann and molecular dynamics. J. Chem. Phys., 111(17):8225–8239, 1999.
- [164] P Ahlrichs, R Everaers, and B Dunweg. Screening of hydrodynamic interactions in semidilute polymer solutions: A computer simulation study. Phys. Rev. E, 64(4):art. no 040501(R), 2001.
- [165] X He, S Y Chen, and R Y Zhang. A lattice Boltzmann scheme for incompressible multiphase flow and its application in simulation of RayleighTaylor instability. J. Comp. Phys., 152(2):642–663, 1999.
- [166] I Ginzburg and K Steiner. Lattice Boltzmann model for free-surface flow and its application to filling process in casting. J. Comp. Phys., 185(1):61–99, 2003.
- [167] H W Xi and C Duncan. Lattice Boltzmann simulations of three-dimensional single droplet deformation and breakup under simple shear flow. Phys. Rev. E, 59(3):3022–3026, 1999.
- [168] M Krafczyk, J Tolke, and L S Luo. Large eddy simulations with a multiple-relaxation-time LBE model. Int. J. Mod. Phys. B, 17(1-2):33–39, 2003.
- [169] Z Lu, D Qian, J B McLaughlin, J J Derksen, and K Kontomaris. Large eddy simulations of a stirred tank using the lattice Boltzmann method on a nonuniform grid. J. Comp. Phys., 181:675–704, 2002.
- [170] D O Martinez, W H Matthaeus, and Chen S. Comparizon of spectral method and lattice Boltzmann simulations of two-dimensional hydrodynamics. Phys. Fluids, 6(3):1285–1298, 1994.
- [171] J G M Eggels. Direct and large-eddy simulation of turbulent fluid flow using the lattice Boltzmann scheme. Int. J. Heat Fluid Flow, 17:307–323, 1996.
- [172] R Benzi, M V Struglia, and Tripiccione R. Extended self-similarity in numerical simulations of three-dimensional anisotropic turbulence. Phys. Rev. E, 53(6):5565–5568, 1996.
- [173] Naris S. Advanced lattice Boltzmann methods for MHD flows. Master’s thesis, University of Thessaly, 2003.
- [174] J P Dellar. Lattice kinetic schemes for magnetohydrodynamics. J. Comp. Phys., 179:95–126, 2002.
- [175] S Chen, H Chen, D Martinez, and W Matthaeus. Lattice Boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics. Phys. Rev. Lett., 67(27):5565–5568, 1991.

- [176] A MacNab, G Vahala, L Valhala, P Pavlo, and M Soe. Some progress in the development of lattice Boltzmann methods for dissipative MHD. *Czech J. Phys.*, 52:59–64, 2002.
- [177] G Breyiannis and D Valougeorgis. Lattice kinetic simulations in three-dimensional magnetohydrodynamics. *Phys. Rev. E*, 69(6):art. no. 065702 Part 2, 2004.
- [178] D Yu, R Mei, L S Luo, and W Shyy. Viscous flow computations with the method of lattice Boltzmann equation. *Prog. Aerosp. Sci.*, 39:329–367, 2003.
- [179] C Y Lim, C Shu, X D Niu, and Chew Y T. Application of lattice Boltzmann method to simulate microchannel flows. *Phys. Fluids*, 14(7):2299–2308, 2002.
- [180] X Nie, G Doolen, and S Chen. Lattice Boltzmann simulations of fluid flows in MEMS. *J. Stat. Phys.*, 107(1-2):279–289, 2001.
- [181] O Kuksenok, J M Yeomans, and C Balazs. Using patterned substrates to promote mixing in microchannels. *Phys. Rev. E*, 65:art. no 31502 part 1, 2001.
- [182] O Kuksenok, J M Yeomans, and C Balazs. Creating localized mixing stations within microfluidic channels. *Langmuir*, 17:7186–7190, 2001.
- [183] S K Thamida and Chang H C. Nonlinear electrokinetic ejection and entrainment due to polarization at nearly insulated wedges. *Phys. Fluids*, 14(12):4315–4328, 2002.
- [184] C Cercignani. *The Boltzmann Equation and its Application*. Springer, New York, 1988.
- [185] M N Kogan. *Rarefied Gas Dynamics*. Plenum, New York, 1969.
- [186] G A Bird. Recent advances and current challenges for dsmc. *Comput. Math. Appl.*, 35(1-2):1–14, 1998.
- [187] J Fan and C Shen. Statistical simulation of low-speed rarefied gas flows. *J. Comp. Phys.*, 167:393–412, 2001.
- [188] F Sharipov. Rarefied gas flow through a slit: Influence of the gas-surface interaction. *Phys. Fluids*, 8(1):262–268, 1996.
- [189] D Valougeorgis and S Naris. Acceleration schemes of the discrete velocity method: Gaseous flows in rectangular microchannels. *SIAM J. Sci. Comp.*, 25:534–552, 2003.
- [190] F M Sharipov and E A Subbotin. On optimization of the discrete velocity method used in rarefied gas dynamics. *Z. Angew. Math. Phys. (ZAMP)*, 44:572–577, 1993.
- [191] D d’Humières, I Ginzburg, M Krafczuk, P Lallemand, and L S Luo. Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three dimensions. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, 360:437–451, 2002.

- [192] D d'Humierres, I Ginzburg, M Krafczuk, P Lallemand, and L S Luo. Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three dimensions. Technical report, ICASE, Hampton, Virginia, 2002.
- [193] Adams M L and Larsen E W. Fast iterative methods for discrete-ordinates particle calculations. Progress in Nuclear Energy, 40(1):3–159, 2002.
- [194] E E Lewis and W F Miller Jr. Computational Methods in Neutron Transport Theory. Wiley, 1984.
- [195] R E Alcouffe, Larsen E W, Miller Jr W F, and Wienke B R. Computational efficiency of numerical methods for the multigroup, discrete-ordinates neutron transport equations: The slab geometry case. Nuc. Sci. Eng., 71(2):111–127, 1979.
- [196] D Valougeorgis, M Williams, and Larsen E W. Stability analysis of synthetic acceleration methods with anisotropic scattering. Nucl. Sci. Eng., 99:91–98, 1988.
- [197] D Valougeorgis and S Naris. Acceleration schemes of the discrete velocity method: I. gaseous flows in rectangular microchannels. Imperial College, London, 2001. 17th International Conference on Transport Theory.
- [198] D Valougeorgis and S Naris. A fast iterative synthetic method for discrete velocity calculations. Bari, 2004. 24th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics.
- [199] S Naris and D Valougeorgis. Accelerated discrete velocity schemes for solving thermal flow problems in rarefied gas dynamics. Budapest, Hungary, 2005. 19th International Conference on Transport Theory.
- [200] D Valougeorgis. Boundary treatment of the diffusion synthetic acceleration method for fixed source discrete ordonates problems in x-y geometry. Nucl. Sci. Eng., 100:142–148, 1988.
- [201] M Bernashi, S Sussi, and Chen H. Accelerated Lattice Boltzmann schemes for steady state flow simulations. J. Sci. Comp., 16(2):135–144, 2001.
- [202] S Naris and D Valougeorgis. A fast iterative synthetic lattice Boltzmann method for steady-state calculations. Braunschweig, Germany, 2004. International Conference in Mesoscale Methods in Engineering and Science.
- [203] S R De Groot and P Mazur. Non-Equilibrium Thermodynamics. Dover Publications, Inc., New York, 1984.
- [204] F Sharipov. Onsager-Casimir reciprocity relations for open gaseous systems at arbitrary rarefaction. I. General theory for single gas. Physica A, 203:437–456, 1994.
- [205] F Sharipov. Onsager-Casimir reciprocity relations for open gaseous systems at arbitrary rarefaction. II. Application of the theory for single gas. Physica A, 203:457–485, 1994.

- [206] F Sharipov. Onsager-Casimir reciprocity relations for open gaseous systems at arbitrary rarefaction. III. Theory and its application for gaseous mixtures. Physica A, 209:457–476, 1994.
- [207] C L Pekeris. Solution of the Boltzmann-Hilbert integral equation. Proc. Natl. Acad. Sci., 41:661–669, 1955.
- [208] C L Pekeris and Z Alterman. Solution of the Boltzmann-Hilbert integral equation. II. The coefficients of viscosity and heat conduction. Proc. Natl. Acad. Sci., 43:998–1007, 1957.
- [209] S Naris, D Valougeorgis, Sharipov F, and Kalempa D. Discrete velocity modelling of gaseous mixture flows in MEMS. Volos, 2003. Eurotherm 75, France - 2003.
- [210] S Naris, D Valougeorgis, Sharipov F, and Kalempa D. Gas flow and heat transfer simulation in mems via a mesoscale approach. Patras, 2004. International Conference on Multiscaling in Applied Science and Emerging Technologies.
- [211] Sharipov F, D Valougeorgis, S Naris, and Kalempa D. Gaseous mixture flows through microchannels driven by pressure, temperature and concentration gradients. Hawaii, USA, 2004. Transport Phenomena in Micro and Nanodevices.
- [212] S Naris and D Valougeorgis. Shear driven flow of a gas in a cavity under low, medium and high vacuum conditions. Paris, France, 2005. 9th European Vacuum Conference.
- [213] Y Sone and T Takata. Discontinuity of the velocity distribution function in a rarefied gas around a convex body and the s layer at the bottom of the knudsen layer. Transp. Ther. Stat. Phys., 21:501–530, 1992.
- [214] 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.
- [215] P N Shankar and M D Deshpande. Fluid mechanics in the driven cavity. Annu. Rev. Fluid Mech., 32:93–136, 2000.
- [216] S Naris and D Valougeorgis. Shear driven micro-flows of gaseous mixtures. Brussels, 2004. EuroSIME 2004.



