

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ &
ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΑΝΤΙΡΡΥΠΑΝΣΗΣ

Διπλωματική εργασία

ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΓΕΝΙΚΕΥΜΕΝΩΝ ΟΡΙΑΚΩΝ ΣΥΝΘΗΚΩΝ ΟΛΙΣΘΗΣΗΣ ΣΕ
ΡΟΗ ΑΕΡΙΟΥ ΕΝΤΟΣ ΜΙΚΡΟΑΓΩΓΩΝ ΤΡΙΓΩΝΙΚΗΣ ΚΑΙ
ΤΡΑΠΕΖΟΕΙΔΟΥΣ ΔΙΑΤΟΜΗΣ

Επιμέλεια

Γουλιδάκης Εμμανουήλ

Επιβλέπων Καθηγητής

Δημήτρης Βαλουγεώργης

Υπεβλήθη για την εκπλήρωση μέρους των απαιτήσεων για την
απόκτηση του Διπλώματος Μηχανολόγου Μηχανικού

2014



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

Αριθ. Εισ.: 13217/1
Ημερ. Εισ.: 12-11-2014
Δωρεά: Συγγραφέα
Ταξιθετικός Κωδικός: ΠΤ - ΜΜ
2014
ΓΟΥ

© 2014 Γουλιδάκης Εμμανουήλ

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

Εγκρίθηκε από τα μέλη της τριμελούς εξεταστικής επιτροπής:

Πρώτος εξεταστής Βαλουγεώργης Δημήτριος

(επιβλέπων) Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο
Θεσσαλίας

Δεύτερος εξεταστής Μποντόζογλου Βασιλείος

Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο
Θεσσαλίας

Τρίτος εξεταστής Ανδρίτσος Νικόλαος

Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο
Θεσσαλίας

Ευχαριστίες

Πρώτα απ' όλα, θέλω να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα της διπλωματικής εργασίας μου, Καθηγητή κ. Δημήτριο Βαλουγεώργη, για την πολύτιμη βοήθεια και καθοδήγησή του κατά τη διάρκεια της δουλειάς μου, καθώς και τους κκ. Στέργιο Νάρη και Χρήστο Τάντο που με συμβούλεψαν κάθε φορά που τους ζητήθηκε. Επίσης, είμαι ευγνώμων στα υπόλοιπα μέλη της εξεταστικής επιτροπής της διπλωματικής εργασίας μου, Καθηγητές κκ. Βασίλης Μποντόζογλου και Νικόλαο Ανδρίτσο για την προσεκτική ανάγνωση της εργασίας μου. Ευχαριστώ τους φίλους μου για την ηθική υποστήριξή τους και κυρίως τους γονείς μου Αναστάσιο και Μαρία για όλα αυτά τα χρόνια που με στηρίζουν.

ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΩΝ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: ΕΙΣΑΓΩΓΗ	9
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΚΗ ΑΝΑΣΚΟΠΗΣΗ	
2.1 Κινητική θεωρία.....	11
2.2 Εξίσωση Boltzmann και μέθοδοι επίλυσης.....	13
2.3 Οριακές Συνθήκες.....	17
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ	
3.1 Γεωμετρία-Μοντελοποίηση.....	26
3.2 Οριακές συνθήκες Cercignani-Lampis.....	32
3.3 Ορισμός παροχών και κατανομής πίεσης.....	37
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ	
4.1 Αριθμητικό σχήμα.....	40
4.2 Διακριτοποίηση.....	42
4.3 Οριακή συνθήκη συμμετρίας.....	43
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΣΧΟΛΙΑΣΜΟΣ	
5.1 Πιστοποίηση αποτελεσμάτων – σύγκριση με ορθογώνιο αγωγό.....	46
5.2 Ροή σε αγωγό τριγωνικής διατομής.....	49
5.3 Ροή σε αγωγό τραπεζοειδούς διατομής.....	62
5.4 Σύγκριση με πειράματα.....	68
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6: ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ.....	75
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ.....	77
ΑΝΑΦΟΡΕΣ	

Κατάλογος Πινάκων

Πίνακας 1: Χρόνος επεξεργασίας και αριθμός επαναλήψεων για οριακές συνθήκες Maxwell ($\alpha = 1$) και Cercignani-Lampis ($a_t = 0.5, a_n = 1$) σε δύο είδη διατομών.....	45
Πίνακας 2: Σύγκριση αδιάστατων παροχών G για την περίπτωση $\frac{H}{W} = 1$	49
Πίνακας 3: Σύγκριση αδιάστατων παροχών G για την περίπτωση $\frac{H}{W} = 0.5$	50
Πίνακας 4: Αδιάστατη παροχή G για διάφορες περιπτώσεις παραμέτρων σε ισόπλευρο (αριστερά) και ορθογώνιο ισοσκελές τρίγωνο (δεξιά).....	52
Πίνακας 5: Αδιάστατη παροχή για ροή σε ισοσκελή τραπεζοειδή αγωγό	64

Κατάλογος Σχημάτων

Σχήμα 1: Κατοπτρική ανάκλαση για γωνίες πρόσπτωσης $\theta = -\pi/3$ (πράσινη γραμμή) και $\theta = -\pi/6$ (μπλε γραμμή).....	24
Σχήμα 2: Διαχυτική ανάκλαση για γωνία πρόσπτωσης $\theta = -\pi/6$	24
Σχήμα 3: Συνθήκη Maxwell με $\alpha = 0.8$ για γωνία πρόσπτωσης $\theta = -\pi/6$	24
Σχήμα 4: Συνθήκη CL όπου γωνία πρόσπτωσης $\theta = -\pi/6$ για τις περιπτώσεις $a_n = 1, a_t = 0.5$ (κόκκινη γραμμή) και $a_n = 0.5, a_t = 1$ (πράσινη γραμμή).....	25
Σχήμα 5: Σχεδόν κατοπτρική ανάκλαση ($a_t = a_n = 10^{-4}$) για γωνίες πρόσπτωσης $\theta = -\pi/3$ (πράσινη γραμμή) και $\theta = -\pi/6$ (μπλε γραμμή).....	25
Σχήμα 6: Σχεδόν ανάκλαση προς τα πίσω ($a_t = 1.999, a_n = 10^{-4}$) για γωνίες πρόσπτωσης $\theta = -\pi/3$ (πράσινη γραμμή) και $\theta = -\pi/6$ (μπλε γραμμή)..	25
Σχήμα 7: Εφαρμογή των ταχύτητων στις οριακές συνθήκες.....	34
Σχήμα 8 : Τριγωνικό πλέγμα σε τραπέζιο.....	41
Σχήμα 9: Υπολογιστική κυψέλη.....	41
Σχήμα 10 : Ορθογώνιο ως επαλληλία δυο αντισυμμετρικών ορθογωνίων.....	47
Σχήμα 11: Αδιάστατη παροχή στις συνθήκες Cercignani-Lampis για ισόπλευρο τρίγωνο.....	53
Σχήμα 12: Ισοψείς ταχύτητας σε ισόπλευρο τρίγωνο για $\delta = 0.1$ και συντελεστή $\alpha_t = 0.5$ (επάνω) $\alpha_t = 1$ (μέση) $\alpha_t = 1.5$ (κάτω).....	55
Σχήμα 13: Ισοψείς ταχύτητας σε ισόπλευρο τρίγωνο για $\delta = 1$ και συντελεστή $\alpha_t = 0.5$ (επάνω) $\alpha_t = 1$ (μέση) $\alpha_t = 1.5$ (κάτω).....	56
Σχήμα 14: Ισοψείς ταχύτητας σε ισόπλευρο τρίγωνο για $\delta = 5$ και συντελεστή $\alpha_t = 0.5$ (επάνω) $\alpha_t = 1$ (μέση) $\alpha_t = 1.5$ (κάτω).....	57
Σχήμα 15: Ισοψείς ταχύτητας σε ορθογώνιο ισοσκελές για $\delta = 0.1$ και συντελεστή	

$\alpha_t = 0.5$ (επάνω) $\alpha_t = 1$ (μέση) $\alpha_t = 1.5$ (κάτω).....	58
Σχήμα 16: Ισουψείς ταχύτητας σε ορθογώνιο ισοσκελές για $\delta = 1$ και συντελεστή $\alpha_t = 0.5$ (επάνω) $\alpha_t = 1$ (μέση) $\alpha_t = 1.5$ (κάτω).....	59
Σχήμα 17: Ισουψείς ταχύτητας σε ορθογώνιο ισοσκελές για $\delta = 5$ και συντελεστή $\alpha_t = 0.5$ (επάνω) $\alpha_t = 1$ (μέση) $\alpha_t = 1.5$ (κάτω).....	60
Σχήμα 18: Προφίλ ταχύτητας για ισόπλευρο τρίγωνο κατά μήκος του άξονα συμμετρίας όταν $\alpha_t = 0.5$ (επάνω) $\alpha_t = 1.5$ (κάτω).....	62
Σχήμα 19: Ισουψείς ταχύτητας σε ισοσκελές τραπέζιο όπου $f=63.43$, $\beta/B=0.5$ για $\delta = 0.1$ και συντελεστή $\alpha_t = 0.5$ (επάνω) $\alpha_t = 1$ (μέση) $\alpha_t = 1.5$ (κάτω)	65
Σχήμα 20: Ισουψείς ταχύτητας σε ισοσκελές τραπέζιο όπου $f=63.43$, $\beta/B=0.5$ για $\delta = 1$ και συντελεστή $\alpha_t = 0.5$ (επάνω) $\alpha_t = 1$ (μέση) $\alpha_t = 1.5$ (κάτω)	66
Σχήμα 21: Ισοϋψείς ταχύτητας σε ισοσκελές τραπέζιο όπου $f=63.43$, $\beta/B=0.5$ για $\delta = 5$ και συντελεστή $\alpha_t = 0.5$ (πάνω) $\alpha_t = 1$ (μέση) $\alpha_t = 1.5$ (κάτω).....	67
Σχήμα 22: Προφίλ ταχύτητας για ισοσκελές τραπέζιο όπου $f=63.43$, $\beta/B=0.5$ κατά μήκος του άξονα συμμετρίας όταν $\alpha_t = 0.5$ (επάνω) και $\alpha_t = 1.5$ (κάτω).....	68
Σχήμα 23 : Σύγκριση ογκομετρικών παροχών με πείραμα για άζωτο N_2 στους $23^\circ C$ σε ισόπλευρο τριγωνικό αγωγό (πάνω) και ισοσκελή τραπεζοειδή αγωγό όπου $f=63.43$, $\beta/B=0.5$ (κάτω).....	71
Σχήμα 24 : Μαζική παροχή αερίου N_2 στους $23^\circ C$ σε ισόπλευρο τριγωνικό (πάνω) και ισοσκελή τραπεζοειδή αγωγό όπου $f=63.43$, $\beta/B=0.5$ (κάτω) για συνθήκη CL και σύγκριση με πείραμα	73
Σχήμα 25 : Τοπικός αριθμός Mach για ροή αερίου N_2 στους $23^\circ C$ σε ισόπλευρο τριγωνικό(πάνω) και ισοσκελή τραπεζοειδη αγωγό όπου $f=63.43$, $\beta/B=0.5$ (κάτω)	74
Σχήμα 26 : Τοπικός αριθμός Reynolds για ροή αερίου N_2 στους $23^\circ C$ σε ισόπλευρο τριγωνικό(πάνω) και ισοσκελή τραπεζοειδη αγωγό όπου $f=63.43$, $\beta/B=0.5$ (κάτω).....	75

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η μελέτη της συμπεριφοράς των αερίων ήταν πάντοτε, ένα πολύ ενδιαφέρον και ζωηρό επιστημονικό θέμα. Η κατανόηση των φαινομένων που συνδέονται με ροές αερίων τους τελευταίους αιώνες μέσω θεωρητικής και πειραματικής θεμελίωσης, έχει οδηγήσει σε πλήθος τεχνολογικών επιτευγμάτων. Η θεωρία του συνεχούς μέσου και οι εξισώσεις διατήρησης της μάζας, ορμής και ενέργειας σε συνδυασμό με τις καταστατικές εξισώσεις Newton, Fourier, Fick αποτελούν τα βασικά εργαλεία αντιμετώπισης.

Σε περιπτώσεις όμως που η πίεση βρίσκεται κάτω της ατμοσφαιρικής ή το μέγεθος του αγωγού ή της συσκευής είναι της τάξης των μικρών, η ανάλυση Navier-Stokes καταρρέει. Ο λόγος είναι ότι ο περιορισμένος αριθμός μορίων που περιέχονται σε ένα διαφορικό όγκο ρευστού και οι περιορισμένες μοριακές αλληλεπιδράσεις, συνεπάγονται απομάκρυνση από την θερμοδυναμική ισορροπία. Ο κλάδος που ασχολείται με τέτοια φαινόμενα ονομάζεται δυναμική αραιοποιημένων ροών. Στην κατηγορία αυτή τοποθετούνται επίσης οι υπερηχητικές ροές καθώς και φαινόμενα, τα οποία συνοδεύονται από την εμφάνιση ωστικών κυμάτων. Οι εφαρμογές του κλάδου της δυναμικής αραιοποιημένων ροών αφορούν την ναυτεχνολογία καθώς και συστήματα που επικρατούν χαμηλές πυκνότητες, δηλαδή συστήματα σε μεγάλα υψόμετρα (δορυφόροι, διαστημικά οχήματα) ή σε συνθήκες κενού (αντλίες κενού).

Πρακτικά η αραιοποίηση της ροής παρουσιάζεται όταν οι τιμές της κλίσης των μακροσκοπικών μεγεθών της ροής μειώνονται τόσο πολύ, ώστε να γίνονται ανάλογες της μέσης ελεύθερης διαδρομής των μορίων του αερίου, δηλαδή της απόστασης που διανύει ένα μόριο μεταξύ δυο διαδοχικών συγκρούσεων. Η συσχέτιση αυτή ποσοτικοποιείται με τον τοπικό αριθμό Knudsen, ο οποίος ορίζεται ως $Kn = \lambda / L$, όπου λ είναι η μέση ελεύθερη διαδρομή και L μία χαρακτηριστική απόσταση του προβλήματος. Επομένως, αν $Kn < 10^{-3}$ βρισκόμαστε στο υδροδυναμικό όριο και ισχύει η κλασική ανάλυση.

Όσο μεγαλώνει ο αριθμός Knudsen, η ροή χαρακτηρίζεται περισσότερο αραιοποιημένη και οι συγκρούσεις των μορίων με το τοίχωμα γίνονται πιο σημαντικές. Επίσης τα φαινόμενα μη ισορροπίας γίνονται πιο έντονα. Όταν

$10^{-3} < Kn < 10^{-1}$ το συνεχές μοντέλο συνεχίζει να ισχύει, αλλά εμφανίζονται κάποια φαινόμενα όπως είναι η ολίσθηση της ταχύτητας και το άλμα της θερμοκρασίας στα τοιχώματα και η δημιουργία δευτερογενών ροών λόγω απότομων μεταβολών της θερμοκρασίας. Οι ροές αυτές μοντελοποιούνται μεταβάλλοντας κατάλληλα τις οριακές συνθήκες.

Στην περίπτωση που $0.1 < Kn < 10$, βρισκόμαστε στη λεγόμενη μεταβατική περιοχή και οι συγκρούσεις με τα τοιχώματα αποκτούν ίση σημασία με τις συγκρούσεις μεταξύ μορίων. Πλέον οι διατμητικές τάσεις και η ροή θερμότητας δεν μπορούν να οριστούν από τις μακροσκοπικές ποσότητες της ροής μέσω των σχέσεων για τους συντελεστές μεταφοράς (ιξώδες, θερμική αγωγιμότητα και διαχυτότητα ορμής). Εκεί απαιτείται να εφαρμοστεί η κινητική θεωρία όπως αυτή εκφράζεται από την εξίσωση Boltzmann.

Τέλος, η περιοχή στην οποία $Kn > 10$ ονομάζεται περιοχή ελεύθερης μοριακής κίνησης. Στην περιοχή αυτή, τα σωματίδια είναι πολύ λίγα σε αριθμό και εκπέμπονται από τα τοιχώματα με την κατανομή ισορροπίας του Maxwell. Σ' αυτή την περίπτωση μπορούμε να πάρουμε ακόμα και αναλυτικά αποτελέσματα για την ορμή και την ενέργεια του εισερχόμενου ρεύματος. Φυσικά απαιτείται να γίνουν ορισμένες παραδοχές για την αλληλεπίδραση του τοιχώματος με τα μόρια.

Σκοπός της παρούσας εργασίας είναι η μελέτη της ροής σε τριγωνική και τραπεζοειδή μικροαγωγό εφαρμόζοντας τις συνοριακές συνθήκες Cercignani-Lampis και η σύγκριση με πειραματικά δεδομένα. Η εργασία αποτελείται από πέντε ενότητες:

Στο Κεφάλαιο 2 παρουσιάζεται περιληπτικά η θεωρία που περιγράφει το επιστημονικό αντικείμενο, στο οποίο εντάσσεται και το παρών πρόβλημα και ταυτόχρονα περιγράφεται η πρόοδος που έχει συντελεστεί μέχρι στιγμής και η οποία βρίσκεται στη διεθνή βιβλιογραφία. Στο Κεφάλαιο 3 γίνεται αναλυτικά η διατύπωση του προβλήματος που εξετάζεται και στο Κεφάλαιο 4 περιγράφεται η υπολογιστική τεχνική που εφαρμόστηκε: το αριθμητικό σχήμα και η διακριτοποίηση που επιλέχθηκε. Στο Κεφάλαιο 5 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα που εξήχθησαν από την διαδικασία της επίλυσης και τέλος στο Κεφάλαιο 6 συνοψίζονται τα συμπεράσματα στα οποία οδήγησε η μελέτη της ροής.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΚΗ ΑΝΑΣΚΟΠΗΣΗ

2.1 Κινητική θεωρία

Η δυναμική αραιοποιημένων ροών θεμελιώνεται μέσω της κινητικής θεωρίας των αερίων. Η κινητική θεωρία αποτελεί την γενικότερη άποψη περί της συμπεριφοράς των αερίων αφού λαμβάνει υπόψη της την μοριακή φύση του αερίου.

Πραγματικά, οι εξισώσεις Navier-Stokes και η εξίσωση Euler, οι οποίες χρησιμοποιούνται κατά κόρον στα προβλήματα κλασικής μηχανικής ρευστών μπορούν να προκύψουν ως ασυμπτωτικές μορφές της εξίσωσης Boltzmann. Επίσης με δεδομένο το ενδομοριακό δυναμικό, δηλαδή το μοντέλο που προσομοιώνει τη φυσική των μορίων και των δυνάμεων που αναπτύσσονται μεταξύ τους, εξάγονται αναλυτικές εκφράσεις για τους συντελεστές μεταφοράς χωρίς την χρήση των νόμων Newton και Fourier.

Ο πρωτεργάτης της κινητικής θεωρίας ήταν ο James Clerk Maxwell, ο οποίος έδειξε ότι τα μόρια κινούνται προς τυχαίες κατευθύνσεις και όχι με την ίδια ταχύτητα. Επίσης ανέπτυξε εξισώσεις που περιγράφουν τον ρυθμό μεταβολής των μέσων μοριακών ποσοτήτων για αέρια που αποτελούνται από τα λεγόμενα μόρια Maxwell, δηλαδή από σημειακά κέντρα που αλληλοαπωθούνται με δυνάμεις αντιστρόφως ανάλογης της πέμπτης δύναμης της απόστασης τους.

Η στατιστική προσέγγιση που ακολούθησε ο Maxwell, οδήγησε στην εισαγωγή της συνάρτησης κατανομής $f(r, \xi, t)$, η οποία περιέχει πληροφορίες για την κατανομή των μορίων στο εργαζόμενο μέσο και για την κατανομή των ταχυτήτων τους. Ο ορισμός της έγινε έτσι ώστε η ποσότητα $f dr d\xi$ να δηλώνει τον αναμενόμενο αριθμό των μορίων που θα βρίσκονται στον διαφορικό όγκο dr με ταχύτητες στον χώρο ταχυτήτων $d\xi$ σε μια δεδομένη στιγμή t . Η συνάρτηση f αποτελεί τον κύριο άγνωστο στα προβλήματα αραιοποιημένων ροών, εφόσον οι ροπές της μας δίνουν τελικά τις μακροσκοπικές ποσότητες της ροής:

- Αριθμητική πυκνότητα $n(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} f d\vec{\xi}$
- Μακροσκοπική ταχύτητα $\vec{u}(\vec{r}, t) = \frac{1}{n(\vec{r}, t)} \int_{-\infty}^{\infty} \vec{r} f d\vec{\xi}$
- Πίεση $P(\vec{r}, t) = \frac{m}{3} \int_{-\infty}^{\infty} (\vec{\xi} - \vec{u})^2 f d\vec{\xi}$
- Τανυστής τάσεων $P_{ij}(\vec{r}, t) = m \int_{-\infty}^{\infty} (\xi_j - u_j)(\xi_i - u_i) f d\vec{\xi}$
- Θερμοκρασία $T(\vec{r}, t) = \frac{m}{3k_B n(\vec{r}, t)} \int_{-\infty}^{\infty} (\vec{\xi} - \vec{u})^2 f d\vec{\xi}$
- Θερμορροή $\vec{q}(\vec{r}, t) = \frac{m}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (\vec{\xi} - \vec{u})^2 (\vec{\xi} - \vec{u}) f d\vec{\xi}$

Την δουλειά του Maxwell συνέχισε ο Ludwig Boltzmann. Ο Boltzmann ανέπτυξε την βασική εξίσωση της κινητικής θεωρίας η οποία περιγράφει την εξάρτηση της συνάρτησης κατανομής από τις χωρικές μεταβλητές, τις μοριακές ταχύτητες και τον χρόνο. Επίσης διατύπωσε πιο αυστηρά τα ευρήματα του Maxwell μέσω του θεωρήματος -H, το οποίο αποδεικνύει την αναντιστρεπτότητα των φυσικών διεργασιών και επομένως την αύξηση της εντροπίας λόγω των μοριακών συγκρούσεων. Ο Boltzmann προέβη σε δύο βασικές παραδοχές για την εργασία του. Πρώτον ότι μόνο ζευγάρια μορίων μπορούν να αλληλοεπιδρούν ταυτόχρονα, με συγκρούσεις που θεωρούνται αμελητέας διάρκειας και δεύτερον ότι τα μόρια κατανέμονται στο χώρο με στατιστικό τρόπο (μοριακό χάος) και επομένως δεν υπάρχει συσχέτιση μεταξύ των θέσεων τους. Οι παραδοχές αυτές βέβαια στην πραγματικότητα δεν ισχύουν για στερεά και υγρά, ενώ περιορίζουν την ισχύ της θεωρίας σε αραιά αέρια.

2.2 Εξίσωση Boltzmann και μέθοδοι επίλυσης

Η εξίσωση Boltzmann:

$$\frac{df(r,t,\xi)}{dt} + \xi \frac{df(r,t,\xi)}{dr} + F \frac{df(r,t,\xi)}{d\xi} = Q(f, f^*) = \iiint (f_1' f_2' - f_2 f_1) g b d b d \varepsilon d \xi$$

μια μη-γραμμική ολοκληρωδιαφορική εξίσωση. Με f_1, f_2 συμβολίζεται η κατανομή των μορίων 1 και 2 πριν την κρούση και με f_1', f_2' τις κατανομές μετά την σύγκρουση. Ακόμη $g = |\xi_1 - \xi_2|$ είναι η σχετική ταχύτητα, η παράμετρος σύγκρουσης και ε η αζιμουθιακή γωνία. Η εξίσωση έχει την συνηθισμένη μορφή μιας κινητικής εξίσωσης. Το αριστερό μέλος περιγράφει την κίνηση των μορίων κατά μήκος της τροχιάς που σχετίζεται με την εξωτερική δύναμη F , ενώ το δεξί μέλος της εξίσωσης αντιπροσωπεύει το αποτέλεσμα των συγκρούσεων, οι οποίες εισάγουν μόρια σε ένα διαφορικό στοιχείο και εκτρέπουν άλλα από αυτό. Φυσικά για ροές στην ελεύθερη μοριακή περιοχή το δεξί μέλος ισούται με μηδέν, καθώς οι μοριακές συγκρούσεις αγνοούνται.

Η επίλυση της εξίσωσης Boltzmann παρουσιάζει αρκετές δυσκολίες. Πρώτον απαιτεί τεράστιο υπολογιστικό κόστος λόγω των επτά διαστάσεων της συνάρτησης κατανομής και της πολυπλοκότητας του όρου των συγκρούσεων. Δεύτερον η λύση της εξίσωσης δεν είναι μια «ομαλή» συνάρτηση του χώρου ή της ταχύτητας και συχνά παρουσιάζει ασυνέχειες. Τέλος η μαθηματική φύση της εξίσωσης, άρα και η μεθοδολογία της επίλυσης μεταβάλλεται σε διάφορες περιοχές του ίδιου προβλήματος. Μπορεί να συμπεριφέρεται σαν μια υπερβολική κυματική εξίσωση, σαν ελλειπτική εξίσωση όταν επικρατούν μόνιμες συνθήκες ή σαν παραβολική εξίσωση διάχυσης όταν υπάρχει εξάρτηση από τον χρόνο.

Γι' αυτούς τους λόγους συχνά χρησιμοποιούνται απλούστερες μορφές της εξίσωσης Boltzmann, όπως τα κινητικά μοντέλα με ποιο γνωστό το μοντέλο Bhatnagar, Gross, Krook (BGK) και η γραμμικοποιημένη εξίσωση Boltzmann με την παραδοχή των ανεπαίσθητων διαταραχών και των μικρών αποκλίσεων από την ισορροπία. Ο Cercignani [1,2] σε δύο εργασίες του καθώς και άλλοι, μελέτησαν τις ιδιότητες της γραμμικοποιημένης εξίσωσης. Ύστερα και από βελτιώσεις της θεωρίας, οι Sone, Ohwada, Aoki ανέπτυξαν αριθμητικές μεθόδους, ώστε να αντιμετωπίσουν κάποια προβλήματα οριακών τιμών όπως το πρόβλημα του άλματος θερμοκρασίας και του στρώματος Knudsen [3], το

πρόβλημα της συμπύκνωσης [4], του θερμικού ερπυσμού [5], της ροής Poiseuille [6] και της ροής Couette [7].

Από διαφορετική αφετηρία ξεκινάνε πολλές άλλες αριθμητικές μέθοδοι επίλυσης προβλημάτων στη μεταβατική περιοχή. Αυτές χωρίζονται σε δύο είδη:

- μέθοδοι ευθείας επίλυσης
- μοντελοποιήσεις της φυσικής της ροής

Το πρώτο είδος βασίζεται στη Boltzmann σε διάφορες μορφές της. Οι πιο γνωστές είναι η μέθοδος των διακριτών ταχυτήτων (DVM), η μέθοδος των ροπών και η μέθοδος των ολοκληρωμάτων.

Η πιο διαδεδομένη μέθοδος επίλυσης είναι η μέθοδος των διακριτών ταχυτήτων (DVM). Η κεντρική ιδέα είναι η επιλογή διακριτών πεπερασμένων τιμών της μοριακής ταχύτητας. Εφαρμόζοντας περαιτέρω μια διακριτοποίηση του φυσικού χώρου, συνηθέστερα με πεπερασμένες διαφορές, το εκάστοτε πρόβλημα γίνεται πολύ πιο απλό.

Η μέθοδος των ροπών ανήκει κατά βάση στις αναλυτικές μεθόδους, αλλά περιλαμβάνει και αριθμητικές διαδικασίες. Δεν κάνει χρήση της εξίσωσης Boltzmann, αλλά της εξίσωσης των ροπών της. Η εξίσωση αυτή προκύπτει πολλαπλασιάζοντας την Boltzmann με μια οποιαδήποτε μοριακή ποσότητα: μάζα, ορμή ή εσωτερική ενέργεια και στη συνέχεια ολοκληρώνοντας στο χώρο των μοριακών ταχυτήτων.

Η συνάρτηση κατανομής περιγράφεται μοναδικά σε κάθε πρόβλημα με συγκεκριμένες εκφράσεις που περιέχουν τις ταχύτητες και διάφορες ροπές, ενώ η εξάρτηση της από τις χωρικές μεταβλητές προκύπτει κατά τη διάρκεια της λύσης. Μία σημαντική εφαρμογή της μεθόδου ήρθε από τους Mott-Smith [8]. Εισάγοντας μία διωνυμική συνάρτηση κατανομής, επιτράπη η ανάλυση της δομής του ωστικού κύματος.

Γενικότερα όμως η μορφοποίηση της συνάρτησης κατανομής για περιπλοκές ροές έχει αποδειχθεί δύσκολη υπόθεση, οπότε η μέθοδος περιορίζεται κυρίως σε μονοδιάστατα προβλήματα μόνιμης κατάστασης, όπως η μετάδοση θερμότητας μεταξύ παράλληλων πλακών [9] και η ροή Couette [10]

Η μέθοδος των ολοκληρωμάτων αφορά την επίλυση της εξίσωσης Boltzmann στην ολοκληρωτική της μορφή. Ο πιο απλός τρόπος χειρισμού της μορφής αυτής, ο οποίος προτάθηκε από τον Vallender [11] είναι με μια επαναληπτική διαδικασία. Η επαναληπτική μέθοδος έχει εφαρμοστεί για την απόδειξη του θεωρήματος ύπαρξης λύσης της εξίσωσης Boltzmann.

Παρά την ανάπτυξη μεθόδων όπως οι ανωτέρω, υπάρχει ακόμα η ανάγκη να αντικαθίσταται η δυσεπίλυτη εξίσωση Boltzmann από πιο απλές εξισώσεις. Μία λύση προσφέρει ο αλγόριθμος Monte-Carlo, με τον οποίο μπορεί να υπολογιστεί ο όρος των συγκρούσεων. Σε συνδυασμό με τεχνικές προβολής και εκμεταλλευόμενοι την συμμετρία των δυαδικών συγκρούσεων, το πρόβλημα απλοποιείται αρκετά. Το μεγαλύτερο όμως πρακτικό ενδιαφέρον και μάλιστα σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen, παρουσιάζουν τα κινητικά μοντέλα. Όλα τα μοντέλα βασίζονται στην αντικατάσταση του όρου των συγκρούσεων από την διαφορά της συνάρτησης κατανομής και μιας συνάρτησης ισορροπίας πολλαπλασιασμένης επί μια σταθερά αναλογίας.

Ένα κινητικό μοντέλο θα πρέπει όπως ακριβώς και το ολοκλήρωμα των συγκρούσεων της εξίσωσης Boltzmann :

- Να ικανοποιεί τις 5 αναλλοίωτες των συγκρούσεων
- Να ικανοποιεί το θεώρημα H
- Να δίνει τις σωστές εκφράσεις για τους συντελεστές μεταφοράς

Το πιο απλό και επιτυχές κινητικό μοντέλο αναπτύχθηκε από τους Bhatnagar, Gross, Krook και ονομάζεται μοντέλο BGK [12]

Ο όρος $\mathcal{Q}(f_1, f_2)$ αντικαθιστάται από τον τελεστή $J(f) = \nu(f^M - f)$, όπου f^M η κατανομή Maxwell και ν η συχνότητα των συγκρούσεων, ώστε να εκφράσει την απομάκρυνση από την ισορροπία. Το μοντέλο BGK έχει αποδειχτεί αρκετά αξιόπιστο σε πλήθος πρακτικών εφαρμογών και χρησιμοποιείται ευρέως λόγω της απλότητας του. Στις εργασίες της διεθνούς βιβλιογραφίας στις οποίες έχει εφαρμοστεί το μοντέλο BGK, περιλαμβάνονται ροές λόγω διαφοράς πίεσης σε αγωγούς διάφορων διατομών π.χ. τριγωνικής [13] και ελλειπτικής [14]. Επίσης οι ροές Couette, Poiseuille, η ροή ανάμεσα σε παράλληλες πλάκες [15] ή μέσα σε

κυλινδρικό αγωγό [16] λόγω θερμικού ερπυσμού, καθώς και ροές σε κοιλότητα [17]. Ακόμα έχει γίνει προσπάθεια επίλυσης ροών με μετάδοση θερμότητας, όπως η μη ισοθερμοκρασιακή ροή Couette ανάμεσα σε δύο περιστρεφόμενους κυλίνδρους [18] καθώς και λιγότερο κλασικών προβλημάτων που σχετίζονται με εξάτμιση και συμπύκνωση [19].

Βέβαια το BGK παρουσιάζει κάποιες αξιοσημείωτες αδυναμίες:

Καταρχάς δεν μπορεί να δώσει ταυτόχρονα τις σωστές τιμές των συντελεστών μεταφοράς και γι' αυτό δεν εφαρμόζεται σε προβλήματα που οι συναλλαγές ορμής και ενέργειας έχουν εξίσου ίδια σημασία, όπως παραδείγματος χάρη τα προβλήματα μεταφοράς θερμότητας. Ανάλογα το πρόβλημα διαλέγεται

η κατάλληλη τιμή της συχνότητας συγκρούσεων. Ορίζοντας $\nu = \frac{P}{\mu}$ εξάγεται η

σωστή έκφραση για το ιξώδες μ , ενώ αν οριστεί $\nu = \frac{5kP}{2mk} = \frac{2P}{3\mu}$ εξάγεται

η σωστή θερμική αγωγιμότητα κ . Ο αριθμός Prandtl όμως ισούται πάντα με $Pr=1$ αντί για το σωστό $Pr = \frac{2}{3}$. Επίσης από την ισότητα του όρου των συγκρούσεων με τον τελεστή του BGK προκύπτει ότι η συχνότητα αποκτά σταθερή τιμή, ενώ στην πραγματικότητα αποτελεί συνάρτηση της μοριακής ταχύτητας. Να αναφερθεί τέλος ότι η μη γραμμική μορφή του μοντέλου συχνά παρουσιάζει χειρότερες ασυνέχειες από την εξίσωση Boltzmann και γι' αυτό αποφεύγεται.

Άλλα γνωστά κινητικά μοντέλα είναι το ελλειψοειδές μοντέλο [1], που αναπτύχθηκε σαν βελτίωση του BGK για το πρόβλημα του ωστικού κύματος και το μοντέλο Shakhov [20] το οποίο είναι καταλληλότερο για μη γραμμικές ροές και για προβλήματα με θερμοκρασιακή διαφορά [21], [22]. Φυσικά δίνουν σωστά αποτελέσματα και στα προβλήματα που έχουν λυθεί επιτυχημένα με το BGK. Τα μοντέλα αυτά επομένως, ξεπερνάνε αρκετές από τις αδυναμίες του BGK όντας όμως πιο περίπλοκα.

Το δεύτερο είδος αριθμητικών μεθόδων αφορά την μοντελοποίηση της φυσικής της ροής μέσω των αρχών της κινητικής θεωρίας παρακάμπτοντας την εξίσωση Boltzmann. Η σημαντικότερη από αυτές ονομάζεται μέθοδος DSMC (direct simulation monte Carlo). Έχει χρησιμοποιηθεί

με επιτυχία σε πολλά είδη προβλημάτων δίνοντας τα πιο ακριβή αποτελέσματα. Αντιμετωπίζει ακόμα και πιο πολύπλοκα προβλήματα, στα οποία η Boltzmann δεν έχει ισχύ. Τέτοια είναι για παράδειγμα οι ροές στις οποίες εμπλέκονται συγκρούσεις τριών σωματιδίων, δηλαδή υπερηχητικές ροές [23], [24] και ροές στις οποίες εμπεριέχεται χημική αντίδραση [25] ή μετάδοση θερμότητας με ακτινοβολία [26]. Στην μέθοδο DSMC αναπαρίσταται ένας μεγάλος αριθμός σωματιδίων. Η χρονική παράμετρος συμπίπτει με τον φυσικό χρόνο της ροής. Σε κάθε επανάληψη η θέση, η ταχύτητα και η εσωτερική ενέργεια του κάθε σωματιδίου αλλάζει και αποθηκεύεται, καθώς τα μόρια κινούνται και κάποια από αυτά έρχονται σε επαφή με τα τοιχώματα ή συγκρούονται μεταξύ τους.

Στην παρούσα διπλωματική έχει εφαρμοστεί το γραμμικό κινητικό μοντέλο BGK, το οποίο επιλύεται με τη μέθοδο DVM.

2.3 Οριακές συνθήκες

Τα συνηθέστερα πρακτικά προβλήματα εσωτερικής και εξωτερικής ροής εμπεριέχουν αλληλεπίδραση του ρευστού με κάποιο τοίχωμα. Φαινόμενα όπως η αντίσταση, η άνωση, η τριβή και η μετάδοση θερμότητας προέρχονται από αυτή την αλληλεπίδραση. Είναι φανερό λοιπόν ότι για τη πλήρη κατανόηση τέτοιων ροών, απαιτείται η εφαρμογή ρεαλιστικών συνοριακών συνθηκών.

Η δουλειά αυτή είναι αρκετά δύσκολη, καθώς η αλληλεπίδραση των μορίων του ρευστού χαρακτηρίζεται από αρκετή πολυπλοκότητα. Τα μόρια που συγκρούονται με τα τοιχώματα, απορροφώνται και ενδέχεται να σχηματίσουν χημικούς δεσμούς, να διασπαστούν ή να ιονιστούν πριν να επανεκπεμφθούν από ένα διαφορετικό σημείο. Επίσης το είδος της αλληλεπίδρασης εξαρτάται από πολλούς παράγοντες, όπως είναι η τραχύτητα, η καθαριότητα και η θερμοκρασία της επιφάνειας καθώς και από την ταχύτητα με την οποία απομακρύνονται τα μόρια μετά τη σύγκρουση.

Η ταχύτητα αυτή όμως μπορεί να υπολογιστεί μόνο αν προσομοιωθεί η ακριβής διαδρομή του μορίου μέσα στο τοίχωμα. Κάτι τέτοιο είναι δυνατό, αλλά

απαιτεί μεγάλο υπολογιστικό κόστος. Έτσι υιοθετούνται απλοποιημένα μοντέλα, τα οποία βέβαια έχουν βρεθεί αξιόπιστα στην πράξη.

Οι πιο δημοφιλείς συνθήκες είναι η συνθήκη ανάκλασης-διάχυσης ή αλλιώς συνθήκη Maxwell και η συνθήκη Cercignani-Lampis που δίνει μια πιο ακριβή φυσική περιγραφή του φαινομένου, αλλά είναι και πιο περιπλοκή. Χαρακτηριστικό των μοντέλων αυτών είναι η εμφάνιση ενός ή περισσότερων συντελεστών, οι οποίοι είναι μοναδικοί για κάθε ζεύγος αερίου-τοιχώματος και περιγράφουν την αλληλεπίδραση μεταξύ τους. Ένας από τους στόχους των επιλύσεων ροών και των πειραμάτων είναι ο υπολογισμός αυτών των συντελεστών, μέσω σύγκρισης των αποτελεσμάτων των δύο μεθοδολογιών. Εναλλακτικά οι συντελεστές μπορούν να υπολογιστούν μέσω παραμετρικής ανάλυσης, εάν είναι γνωστή η μαζική παροχή.

Για τις ανάγκες της ανάλυσης, θεωρείται η έννοια της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας $W(x \rightarrow x + dx, \xi' \rightarrow \xi, t \rightarrow t + \tau)$ των μορίων όταν αυτά φτάνουν στο τοίχωμα με ταχύτητα ξ' , απορροφώνται στο σημείο X τη στιγμή t και απομακρύνονται από το σημείο $x + dx$, με ταχύτητα ξ ύστερα από χρονικό διάστημα τ .

Επίσης γίνονται οι παρακάτω παραδοχές: Ο χρόνος απορρόφησης τ και η απόσταση dx θεωρούνται αμελητέες, τα μόρια του τοίχου δεν επηρεάζονται από τις συγκρούσεις με τα μόρια του αερίου, επομένως βρίσκονται σε θερμική ισορροπία και τέλος η οποιαδήποτε χημική αντίδραση και μεταβολή των μορίων αγνοείται. Επομένως ισχύει ότι $W = W(\xi' \rightarrow \xi)$ και ότι η εξάρτηση από το σημείο X εκφράζεται μονάχα από την χημική σύσταση του τοίχου και από τη θερμοκρασία του. Η ποσότητα $W(\xi' \rightarrow \xi)d\xi'$ είναι η πιθανότητα ένα μόριο με αρχική ταχύτητα ξ' να ανακλαστεί με ταχύτητα ξ

Η πυκνότητα πιθανότητας W έχει κάποιες ιδιότητες:

$$\text{Ισχύει ότι } \int_{\xi'_n > 0} W(\xi' \rightarrow \xi) = 1 \quad (2.3.1)$$

διότι όλα τα μόρια εκπέμπονται από την επιφάνεια με κάποια ταχύτητα. Επίσης εξορισμού ισχύει ότι $W = W(\xi' \rightarrow \xi)$. Τέλος, ισχύει ο κανόνας της αμοιβαιότητας

$$|\xi_n| f_o(\xi') \exp(-\xi'^2) W(\xi' \rightarrow \xi) = |\xi_n| f_o(\xi) \exp(-\xi^2) W(-\xi \rightarrow -\xi') \quad (2.3.2)$$

όπου με δείκτη l συμβολίζεται η κάθετη διεύθυνση στο τοίχωμα.

Ο νόμος εκφράζει την διατήρηση της μάζας. Η φυσική του σημασία είναι ότι αν ένα αέριο βρίσκεται σε ισορροπία σε μια συγκεκριμένη θερμοκρασία και έχει συνάρτηση κατανομής f_0 τότε ο αριθμός των μορίων που σκεδάζονται από ένα εύρος ταχύτητας $(\xi' \rightarrow \xi' + d\xi')$ σε ένα εύρος $(\xi \rightarrow \xi + d\xi)$ είναι ίσος με τον αριθμό όσων σκεδάζονται από $(-\xi \rightarrow -\xi - d\xi)$ σε $(-\xi' \rightarrow -\xi' - d\xi')$. Με άλλα λόγια, η συνάρτηση κατανομής Maxwell f_0 υπολογισμένη στις συνθήκες του τοιχώματος, διατηρείται σε αυτή την περίπτωση και στα εκπεμπόμενα μόρια μετά την απορρόφηση.

Με αυτά τα εργαλεία μπορεί να εξαχθεί η γενική σχέση για την συνοριακή τιμή, δηλαδή την κατανομή που απομακρύνεται από το τοίχωμα. Αν η κατανομή των μορίων πριν την σύγκρουση συμβολιστεί με f^- και με f^+ η κατανομή μετά, τότε ο αριθμός των μορίων που συγκρούονται με το τοίχωμα ανά μονάδα επιφάνειας κάθε χρονική περίοδο ισούται με $f^-(\xi) |\xi_n| d\xi'$ και ο αριθμός των μορίων που απομακρύνονται είναι $f^+(\xi) |\xi_n| d\xi$. Είναι φανερό ότι αυτές οι δύο ποσότητες πρέπει να ισούνται.

Πολλαπλασιάζοντας κάθε μέλος με $W(\xi' \rightarrow \xi)$ έχουμε ότι :

$$\begin{aligned} f^+(\xi) |\xi_n| W(\xi' \rightarrow \xi) d\xi &= f^-(\xi) |\xi_n| W(\xi' \rightarrow \xi) d\xi' \rightarrow \\ \int_{\xi_n > 0} f^+(\xi) |\xi_n| W(\xi' \rightarrow \xi) d\xi &= \int_{\xi_n > 0} f^-(\xi) |\xi_n| W(\xi' \rightarrow \xi) d\xi' \rightarrow \\ f^+(\xi) |\xi_n| &= \int_{\xi_n > 0} f^-(\xi) |\xi_n| W(\xi' \rightarrow \xi) d\xi' \rightarrow \\ f^+(\xi) &= A(f^-) = \frac{1}{\xi_n} \int_{\xi_n > 0} f^-(\xi) |\xi_n| W(\xi' \rightarrow \xi) d\xi \end{aligned} \quad (2.3.3)$$

Ανάλογα με το είδος συνοριακής συνθήκης που υιοθετείται, ισχύει η αντίστοιχη πυκνότητα πιθανότητας. Η πιο απλή συνθήκη είναι η συνθήκη ανάκλασης σύμφωνα με την οποία τα μόρια ανακλώνται κατοπτρικά, δηλαδή η κάθετη συνιστώσα της ταχύτητας γίνεται αντίθετη. Έχουμε ότι

$$W_s(\xi' \rightarrow \xi) = \delta_D[\xi' - \xi + 2n(n \cdot \xi)] \quad (2.3.4)$$

όπου το \mathbf{n} παριστάνει το μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα στην επιφάνεια στο σημείο r και $\delta(\mathbf{r}) = \delta_D(x)\delta_D(y)\delta_D(z)$ τη συνάρτηση Dirac. Η συνθήκη αυτή αφορά σε εξαιρετικά λείες επιφάνειες και ισχύει περισσότερο για ελαφρά μόρια.

Ο Maxwell στην ίδια εργασία του πρότεινε και μια άλλη συνθήκη για την περίπτωση διάχυσης των σωματιδίων.

$$W_D(\xi' \rightarrow \xi) = \frac{m^2 \xi^n}{2\pi(k_B T_w)^2} \exp\left(-\frac{m(\xi - u)^2}{2k_B T_w}\right) \quad (2.3.5)$$

(k_B είναι η σταθερά του Boltzmann, T_w θερμοκρασία του τοιχώματος, u η ταχύτητα του αερίου και m η μάζα του αερίου)

Το μέτρο των ταχυτήτων των επανεκπεμπόμενων μορίων ακολουθεί, όπως φαίνεται την κατανομή ισορροπίας του Maxwell, ενώ η κατανομή των διευθύνσεων είναι ομοιόμορφη. Θεωρείται ότι τα μόρια του αέρα έρχονται σε επαφή με αρκετά μόρια του τοιχώματος, ώστε να φτάνουν σε ισορροπία με αυτά. Η συνθήκη διάχυσης είναι η πιο γνωστή και ευρέως χρησιμοποιούμενη συνθήκη, διότι εφαρμόζεται στις κοινές τεχνικές επιφάνειες και συνδυάζει την ακρίβεια με την απλότητα και με μια εύκολα κατανοητή φυσική της αλληλεπίδρασης αερίου-τοιχώματος τόσο σε μικροσκοπικό και μακροσκοπικό επίπεδο. Ισχύει κυρίως για βαριά μόρια.

Αργότερα, και πάλι ο Maxwell διεύρυνε τις συνοριακές συνθήκες, ώστε τα αριθμητικά αποτελέσματα να συμπέσουν με πειραματικά. Είχε παρατηρηθεί ότι η θερμοκρασία των εκπεμπόμενων σωματιδίων του αερίου διέφερε συχνά είτε από την στατική θερμοκρασία του τοιχώματος είτε από την θερμοκρασία της ροής. Επομένως η συνάρτηση κατανομής απείχε από την κατανομή ισορροπίας. Έτσι εισήγαγε ένα συντελεστή μεταφοράς α , ο οποίος καταδεικνύει σε ποιο

βαθμό οι ιδιότητες $\varphi(\xi)$ του αερίου έχουν προσαρμόσει σε εκείνες του τοιχώματος.

$$a = \frac{\int_{\xi_n > 0} f^-(\vec{\xi}') |\xi_n'| \varphi(\vec{\xi}') d\vec{\xi}' - \int_{\xi_n > 0} f^+(\vec{\xi}) |\xi_n| \varphi(\vec{\xi}) d\vec{\xi}}{\int_{\xi_n > 0} f^-(\vec{\xi}') |\xi_n'| \varphi(\vec{\xi}') d\vec{\xi}' - \int_{\xi_n > 0} f_w(\vec{\xi}) |\xi_n| \varphi(\vec{\xi}) d\vec{\xi}} \quad (2.3.6)$$

Τα ολοκληρώματα εκφράζουν την ροή μιας ποσότητας φ σύμφωνα με τις κατανομές πριν και μετά την σύγκρουση και την κατανομή ισορροπίας f_w . Η ποσότητα φ μπορεί να αφορά ροή θερμότητας είτε μεταφορά ορμής και αντίστοιχα ορίζεται ο εκάστοτε συντελεστής. Η βασική έννοια όλων όμως είναι κοινή: Ένα ποσοστό α των μορίων που πέφτουν στο τοίχωμα, ανακλάται διαχυτικά και επομένως αποκτά τις ιδιότητες του τοιχώματος, ενώ το υπόλοιπο ανακλάται κατοπτρικά.

$$W_{DS}(\vec{\xi}' \rightarrow \vec{\xi}) = \alpha W_D(\vec{\xi}' \rightarrow \vec{\xi}) + (1 - \alpha) W_S(\vec{\xi}' \rightarrow \vec{\xi}) \quad (2.3.7)$$

Στα Σχήματα 1, 2, 3 παρουσιάζεται ο τρόπος που αλληλεπιδρά μια ακτίνα σωματιδίων με το τοίχωμα στις περιπτώσεις κατοπτρικής, διαχυτικής και ανάκλασης Maxwell αντίστοιχα. Η κατανομή σωματιδίων έχει πιο κατευθυνόμενη μορφή, όταν έχουμε συνδυασμό κατοπτρικής-διαχυτικής ανάκλασης σε σχέση με την πλήρη διάχυση.

Ακόμα όμως και η συνθήκη του Maxwell, δεν μπορεί πάντα να δώσει λογικά αποτελέσματα που να συμφωνούν με τα πειράματα. Συγκεκριμένα σε σύγκριση με πειραματικά δεδομένα [27] βρέθηκε ότι το α εξαρτάται από τον αριθμό Knudsen, το οποίο δεν θα έπρεπε να ισχύει. Επίσης σε μια σειρά εργασιών από τον Sharipov [28,29,30] βρέθηκε, ότι ανάλογα το πρόβλημα το α μεταβαλλόταν, παρόλο που ο συνδυασμός αερίου και επιφάνειας ήταν ο ίδιος.

Οι αδυναμίες αυτές οφείλονταν στο ότι το μοντέλο Maxwell περιγράφει το φαινόμενο με μη ρεαλιστικό τρόπο. Στην πραγματικότητα η ενέργεια μεταφέρεται πιο αργά από ότι η ορμή. Επομένως σε περιπτώσεις που η παρεχόμενη ενέργεια είναι πολύ υψηλή, ένας συντελεστής δεν αρκεί για να

χαρακτηρίσει τη μεταφορά. Τέτοιες περιπτώσεις αφορούν κυρίως επιφάνειες με μικρή τραχύτητα σε περιβάλλον υψηλού κενού. Το μοντέλο Cercignani-Lampis [31] διορθώνει το συγκεκριμένο αδόκιμο. Περιγράφεται από την συνάρτηση

$$W_{CL} = W_n(\xi'_n \rightarrow \xi_n)W_{t_1}(\xi'_{t_1} \rightarrow \xi_{t_1})W_{t_2}(\xi'_{t_2} \rightarrow \xi_{t_2}) \quad (2.3.8)$$

η οποία αποτελείται από δύο εφαπτόμενα

$$W_t(\xi'_t \rightarrow \xi_t) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_t(2-a_t)\left(\frac{2kT_w}{m}\right)}} \exp\left\{\frac{[\xi_t - (1-\alpha_t)\xi'_t]^2}{a_t(2-a_t)\left(\frac{2kT_w}{m}\right)}\right\} \quad (2.3.9)$$

και ένα κάθετο μέρος

$$W_n(\xi'_n \rightarrow \xi_n) = \frac{\xi_n}{a_n\left(\frac{kT_w}{m}\right)} \exp\left\{-\frac{\xi_n^2 + (1-\alpha_n)\xi_n'^2}{2a_n\left(\frac{kT_w}{m}\right)}\right\} I_0\left\{\frac{\sqrt{(1-a_n)\xi_n'\xi_n}}{a_n\left(\frac{kT_w}{m}\right)}\right\}$$

(2.3.10)

όπου $I_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp(x \cos \varphi) d\varphi$ είναι η συνάρτηση Bessel πρώτου είδους και μηδενικής τάξης.

Πλέον περιλαμβάνονται δύο παράμετροι $a_i \in (0,2)$ και $a_n \in (0,1)$, που ορίζονται από σχέσεις σαν τη (2.3.6). Οι ακραίες τιμές 0 και 2 αποκλείονται, καθώς οι εκφράσεις των συναρτήσεων απειρίζονται. Οι παράμετροι σχετίζονται με τη μεταφορά ορμής στην εφαπτόμενη διεύθυνση $\varphi(\xi_{ii}) = m\xi_{ii}$ $i=1,2$ και τη μεταφορά ενέργειας στην κατακόρυφη διεύθυνση $\varphi(\xi_n) = m\frac{\xi_n^2}{2}$ αντίστοιχα. Οι τιμές των παραμέτρων βάση των παραδοχών του μοντέλου εξαρτώνται μόνο από τη θερμοκρασία του τοίχου και από τις φυσικές ιδιότητες του αερίου και του τοίχου.

Η μεγάλη αξία του μοντέλου CL έγκειται στο ότι με κατάλληλη εκλογή των παραμέτρων, προσομοιώνονται τα υπόλοιπα μοντέλα αλληλεπίδρασης. Συγκεκριμένα:

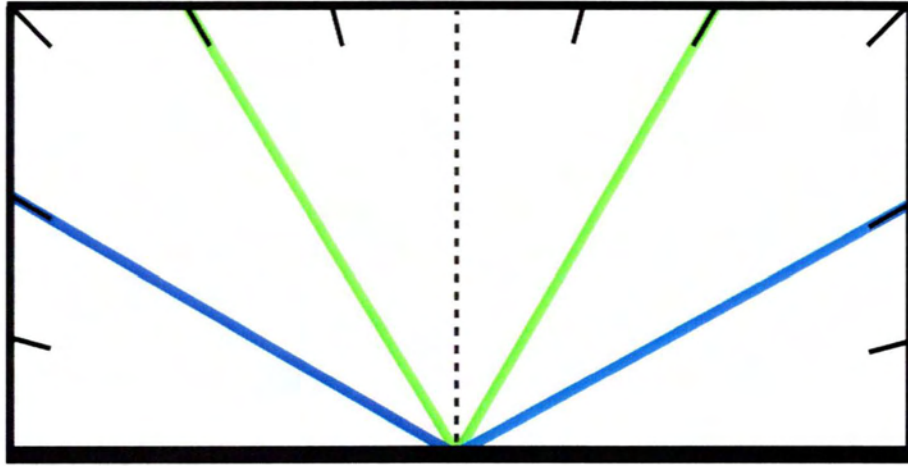
- Για $a_t = a_n \rightarrow 0$ έχουμε την κατοπτρική ανάκλαση
- Για $a_t = a_n = 1$ παίρνουμε το μοντέλο της διάχυσης, δηλαδή

$$W_{CL} \rightarrow W_D$$

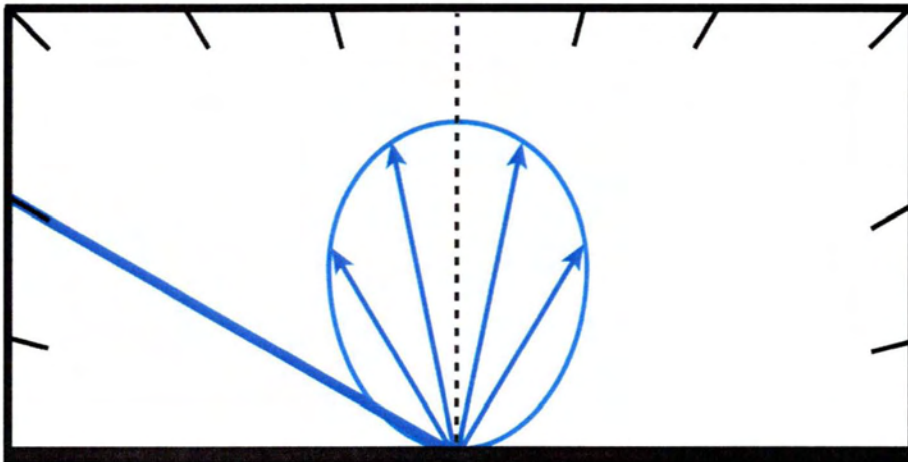
- Τέλος για $a_t \rightarrow 2, a_n \rightarrow 0$ αναπαρίσταται η συμπεριφορά κατά τη οποία το μόριο επανεκπέμπεται με αντίθετη φορά στην διεύθυνση με την οποία συγκρούστηκε. Η ανάκλαση των μορίων προς τα πίσω παρατηρείται σε τραχιές επιφάνειες.

Στα Σχήματα 4,5,6 φαίνονται πειράματα με την αλληλεπίδραση μιας ακτίνας μορίων με το τοίχωμα για διάφορες τιμές των παραμέτρων a_t, a_n . Η παράμετρος a_t καθορίζει την κατεύθυνση της κατανομής η οποία αναχωρεί από το τοίχωμα, ενώ η a_n καθορίζει την μορφή της. Στο Σχήμα 4, όταν $a_t = 1$ (πράσινο χρώμα) η κατανομή βρίσκεται στην κάθετη προς το τοίχωμα διεύθυνση ενώ όσο μειώνεται το a_t (κόκκινο χρώμα), η κατανομή απομακρύνεται από τη διεύθυνση πρόσκρουσης. Όσο αφορά τον συντελεστή a_n , φαίνεται ότι στην πρώτη περίπτωση όπου $a_n = 0.5$, η κατανομή καλύπτει μικρή επιφάνεια και έχει σχήμα ωοειδές, ενώ όταν αυξάνεται η τιμή του, τα μόρια απομακρύνονται σε μεγαλύτερη απόσταση. Στο Σχήμα 5 παρουσιάζεται ο εκφυλισμός των συνθηκών CL σε συνθήκη κατοπτρικής ανάκλασης, ενώ στο τελευταίο σχήμα παρουσιάζεται το φαινόμενο backscattering.

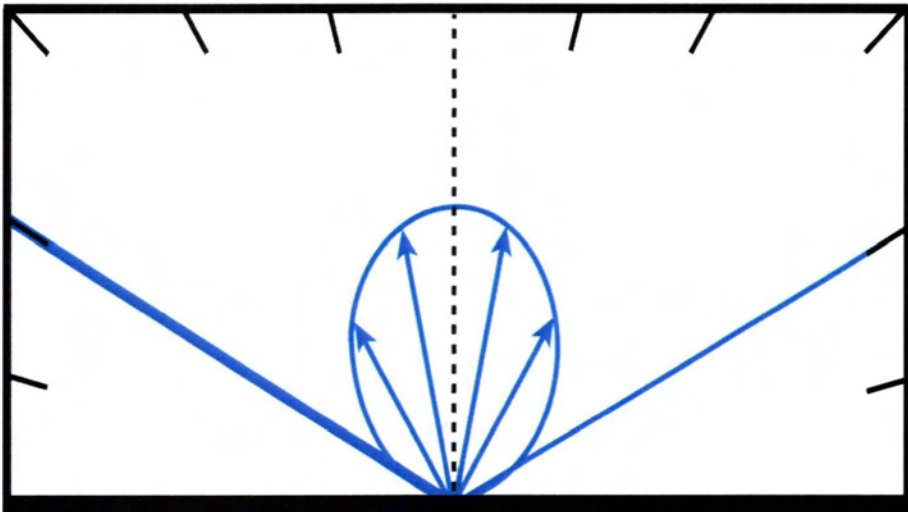
Είναι αλήθεια ότι η συνθήκη Cercignani-Lampis αν και η πλέον ρεαλιστική, έχει χρησιμοποιηθεί σε περιορισμένο βαθμό [32,33,34]. Αυτό οφείλεται στην πολυπλοκότητα της και στο μεγάλο υπολογιστικό κόστος που συνεπάγεται η χρήση της. Ένα ακόμη μειονέκτημα της έγκειται στην απουσία μεθόδου για την εύρεση των τιμών περισσότερων του ενός συντελεστών μεταφοράς.



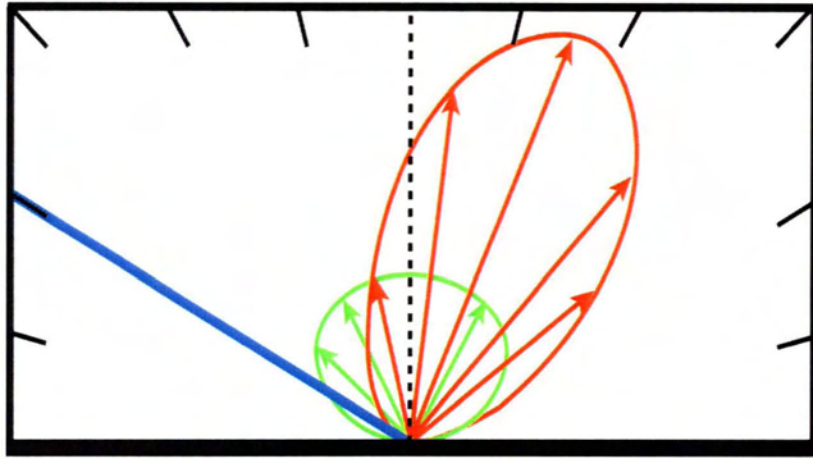
Σχήμα 1: Κατοπτρική ανάκλαση για γωνίες πρόσπτωσης $\theta = -\pi/3$ (πράσινη γραμμή) και $\theta = -\pi/6$ (μπλε γραμμή)



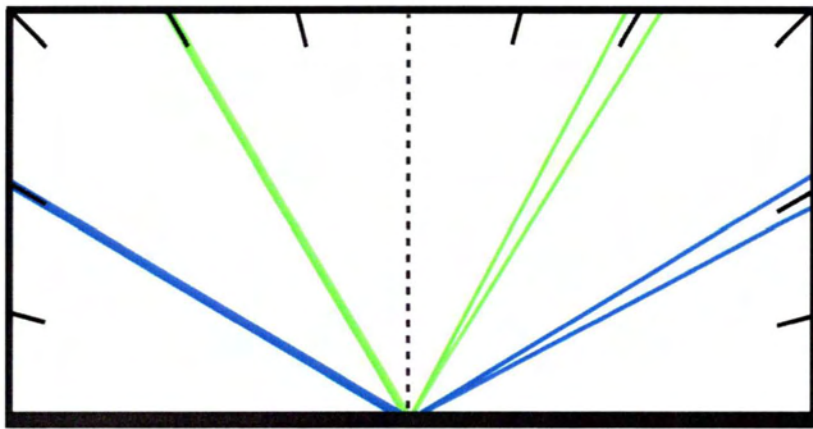
Σχήμα 2: Διαχυτική ανάκλαση για γωνία πρόσπτωσης $\theta = -\pi/6$



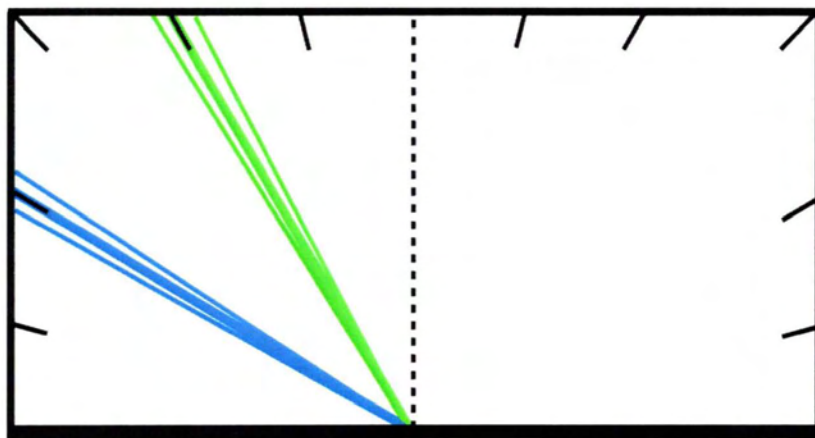
Σχήμα 3: Συνθήκη Maxwell με $\alpha = 0.8$ για γωνία πρόσπτωσης $\theta = -\pi/6$



Σχήμα 4: Συνθήκη CL όπου γωνία πρόσπτωσης $\theta = -\pi/6$ για τις περιπτώσεις $a_n=1, a_t=0.5$ (κόκκινη γραμμή) και $a_n=0.5, a_t=1$ (πράσινη γραμμή)



Σχήμα 5: Σχεδόν κατοπτρική ανάκλαση ($a_t = a_n = 10^{-4}$) για γωνίες πρόσπτωσης $\theta = -\pi/3$ (πράσινη γραμμή) και $\theta = -\pi/6$ (μπλε γραμμή)



Σχήμα 6: Σχεδόν ανάκλαση προς τα πίσω ($a_t = 1.999, a_n = 10^{-4}$) για γωνίες πρόσπτωσης $\theta = -\pi/3$ (πράσινη γραμμή) και $\theta = -\pi/6$ (μπλε γραμμή)

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ

3.1 Γεωμετρία-Μοντελοποίηση

Στην παρούσα εργασία επιλύεται η γραμμική ροή λόγω διαφοράς πίεσης σε μικροαγωγούς τριγωνικής και τραπεζοειδούς διατομής προσομοιώνοντας την αλληλεπίδραση αερίου-τοιχώματος μέσω της συνθήκης Cercignani-Lampis. Η εργασία βασίζεται σε προηγούμενη δουλειά [13] και αφορά τη ροή σε αγωγούς ίδιας διατομής, θεωρώντας όμως συνθήκες διάχυσης στο τοίχωμα. Η μελέτη μικροαγωγών με τέτοιες διατομές είναι σημαντική, γιατί πρακτικά είναι πιο απλοί στην κατασκευή. Μέχρι στιγμής η συνθήκη CL έχει εφαρμοστεί με επιτυχία για ροή σε αγωγούς ορθογώνιας [35] και κυλινδρικής διατομής. Αναμένεται η επίδραση των οριακών συνθηκών να είναι αντίστοιχη με αυτή στα δύο αυτά προβλήματα.

Θεωρείται λοιπόν η αραιοποιημένη ροή λόγω διαφοράς πίεσης ενός αερίου μέσα από μακρύ αγωγό μήκους L με σταθερή τριγωνική διατομή, ο οποίος συνδέει δύο δεξαμενές με πιέσεις P_1, P_2 όπου ισχύει $P_1 > P_2$. Η περίμετρος και το εμβαδόν της διατομής είναι Γ' και A' αντίστοιχα, ενώ η υδραυλική διάμετρος $D_h = 4 \frac{A'}{\Gamma'}$ αποτελεί το χαρακτηριστικό μακροσκοπικό μήκος του προβλήματος. Η ροή χαρακτηρίζεται ως πλήρως ανεπτυγμένη στη διεύθυνση κατά μήκος του καναλιού, επομένως φαινόμενα που παρουσιάζονται στα άκρα του αγωγού, όπως οι δευτερογενείς ροές, αγνοούνται. Η μακροσκοπική ταχύτητα ορίζεται μόνο στην κατεύθυνση z' και συμβολίζεται με $u(x', y')$

Αφού το μήκος του καναλιού είναι μεγάλο ($D_h \ll L$), η τοπική κλίση της πίεσης

(gradient) που ορίζεται ως $X_p = \frac{D_h}{P} \frac{dP}{dz}$ είναι μικρή και ανεξάρτητη του $\frac{P_1}{P_2}$

Σ' αυτό το σημείο είναι καλό να ορίσουμε κάποια ακόμη μεγέθη:

$P = \frac{P_1 + P_2}{2}$ είναι η πίεση αναφοράς, $U_o = 0$ η ταχύτητα αναφοράς, μ_o είναι το ιξώδες του αερίου στη θερμοκρασία αναφοράς T_o και $u_o = \sqrt{2RT_o}$ η πιο πιθανή μοριακή ταχύτητα όπου $R = \frac{k_B}{m}$ παριστάνει την σταθερά του αερίου (k_B η σταθερά του Boltzmann και m η μοριακή μάζα).

Επίσης ορίζονται οι αδιάστατες συντεταγμένες $x = \frac{x'}{D_h}$, $y = \frac{y'}{D_h}$, $z = \frac{z'}{D_h}$, το αδιαστατό εμβαδόν $A = \frac{A'}{D_h^2}$, η αδιάστατη περίμετρος $\Gamma = \frac{\Gamma'}{D_h}$ και η αδιάστατη μακροσκοπική ταχύτητα $\vec{u} = \frac{u'}{U_o X_p}$.

Η χαρακτηριστική παράμετρος της ροής είναι βέβαια ο αριθμός Knudsen

$Kn = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\mu_o U_o}{D_h P}$. Για πρακτικούς σκοπούς όμως στην διατύπωση του προβλήματος

και των αντίστοιχων εξισώσεων επιλέγουμε την λεγόμενη παράμετρο αραιοποίησης

$$\delta = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{D_h P}{\mu_o U_o} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{Kn} \quad (3.1.1)$$

Επιπρόσθετα υπάρχουν άλλοι δύο γνωστοί παράμετροι που χαρακτηρίζουν τη ροή, ο αριθμοί Reynolds και Mach που ορίζονται ως εξής:

$$Re = \frac{\rho U' D_h}{\mu_o} \quad (3.1.2)$$

$$Ma = \frac{U'}{c_o}$$

(3.1.3)

Εδώ $c_o = u_o \sqrt{\frac{\gamma}{2}}$ είναι η ταχύτητα του ήχου στη θερμοκρασία T_o και γ η ειδική

θερμότητα ($\frac{5}{3}$ για ιδανικά αέρια), ενώ με $U' = \frac{1}{A'} \int_{A'} u'(x', y') dA'$

συμβολίζεται η μέση μακροσκοπική ταχύτητα της ροής.

Στην περίπτωση που εξετάζεται, είναι λογικό να θεωρηθεί ότι το σύστημα βρίσκεται κοντά στη θερμοδυναμική ισορροπία και οι αποκλίσεις στην ταχύτητα και τη θερμοκρασία του αερίου είναι μικρές. Αυτό δίνει τη δυνατότητα να επιλυθεί η γραμμικοποιημένη μορφή της εξίσωσης BGK. Η συνάρτηση κατανομής γραμμικοποιείται ως προς μια κατανομή Maxwell f_o προσδιορισμένη στις συνθήκες αναφοράς, που ονομάζεται απόλυτη κατανομή.

Έτσι ισχύει ότι :

$$f = f_o \left[1 + X_p(h(x, y, \vec{\xi}) + z) \right] \quad (3.1.4)$$

$$\text{όπου } f_o = \frac{n_o}{(2\pi RT_o)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{(\vec{\xi} - v_o)^2}{2RT_o}\right)$$

Επίσης η διαδικασία γραμμικοποίησης περιλαμβάνει την ανάπτυξη της τοπικής κατανομής ισορροπίας σε ανάπτυγμα Taylor ως προς την απόλυτη κατανομή f_o . Κρατώντας τους όρους πρώτης τάξης έχουμε ότι :

$$f^M = f_o + (n - n_o) \frac{\partial f^M}{\partial n} + (u' - v_o) \frac{\partial f^M}{\partial u} + (T - T_o) \frac{\partial f^M}{\partial T}$$

$$\text{όπου } \frac{\partial f^M}{\partial n} = \frac{1}{(2\pi RT_o)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{(\vec{\xi} - v_o)^2}{2RT_o}\right) = \frac{f_o}{n_o}$$

$$\frac{\partial f^M}{\partial u} = \frac{n_o}{(2\pi RT_o)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{(\vec{\xi}-\nu_o)^2}{2RT_o}\right) \left(-\frac{2(\vec{\xi}-\nu_o)}{2RT_o}\right) (-1) = f_o \frac{\vec{\xi}}{RT_o}$$

$$\frac{\partial f^M}{\partial T} = \exp\left(-\frac{(\xi-\nu_o)^2}{2RT_o}\right) \left[-\frac{n_o}{(2\pi RT_o)^{\frac{3}{2}}} \frac{3}{2} T_o^{-\frac{5}{2}} + \frac{n_o}{(2\pi RT_o)^{\frac{3}{2}}} \frac{\xi^2}{2RT_o} \frac{1}{T_o^2} \right] = \frac{f_o}{T_o} \left[-\frac{3}{2} + \frac{\xi^2}{2RT_o} \right]$$

Τελικά

$$f^M = f_o \left[1 + \frac{n-n_o}{n_o} + (u'-\nu_o) \frac{\xi}{RT_o} + \frac{T-T_o}{T_o} \left(\frac{\xi^2}{2RT_o} - \frac{3}{2} \right) \right] \quad (3.1.5)$$

Αντικαθιστώντας τις σχέσεις (3.1.1) και (3.1.2) στην εξίσωση του μοντέλου BGK

χωρίς χρονομεταβολή $\xi \frac{\partial f}{\partial r'} = \nu(f^M - f)$, προκύπτει:

$$\vec{\xi} \frac{\partial [f_o + f_o(X_p + z)]}{\partial r'} = \nu f_o \left[1 + \frac{n-n_o}{n_o} + (u'-\nu_o) \frac{\vec{\xi}}{RT_o} + \frac{T-T_o}{T_o} \left(\frac{\xi^2}{2RT_o} - \frac{3}{2} \right) - 1 - X_p(h+z) \right] \rightarrow$$

$$\vec{\xi} f_o \left(\frac{\partial h}{\partial r'} + \frac{\partial z}{\partial r'} \right) = \nu f_o \left[\frac{n-n_o}{n_o X_p} + \vec{u}' \frac{\vec{\xi}}{RT_o X_p} + \frac{T-T_o}{T_o X_p} \left(\frac{\xi^2}{2RT_o} - \frac{3}{2} \right) - h - z \right]$$

Εισάγουμε τις μεταβλητές $\rho = \frac{n-n_o}{n_o X_p} - z$, $\tau = \frac{T-T_o}{T_o X_p}$, $\vec{c} = \frac{\vec{\xi}}{u_o} = \frac{\vec{\xi}}{\sqrt{RT_o}}$ και τις

αδιάστατες ποσότητες $\vec{u} = \frac{u'}{u_o X_p}$, $r = \frac{r'}{D_h}$

Επομένως

$$\vec{c} \frac{1}{D_h} \left(\frac{\partial h}{\partial r} + \frac{\partial z}{\partial r} \right) = \nu \left[\rho + \frac{\vec{u} \cdot \vec{c} u_o^2}{RT_o} + \tau \left(\frac{c^2 u_o^2}{2RT_o} - \frac{3}{2} \right) - h \right]$$

Η πυκνότητα και η θερμοκρασία του τοιχώματος παραμένουν σταθερές στις συνθήκες ισορροπίας, δηλαδή $\rho = \tau = 0$. Η επίλυση του προβλήματος αφορά

κάθε φορά μία διατομή κάθετη στην κατεύθυνση της ροής, όπου αντιστοιχεί μία πίεση P . Επομένως η συνάρτηση κατανομής εξαρτάται μόνο από τα x, y .

Τελικά:

$$\vec{c} \left(\frac{\partial h}{\partial r} + \frac{\partial z}{\partial r} \right) = v \frac{D_h}{v_o} [2\vec{u} \cdot \vec{c} - h] \rightarrow$$

$$c_x \frac{\partial(h+z)}{\partial x} + c_y \frac{\partial(h+z)}{\partial y} + c_z \frac{\partial(h+z)}{\partial z} = v \frac{D_h}{v_o} [2u_z c_z - h] \rightarrow$$

$$c_x \frac{\partial h}{\partial x} + c_y \frac{\partial h}{\partial y} = \delta [2c_z u - h] - c_z \quad (3.1.6)$$

Εδώ εμφανίζεται η παράμετρος αραιοποίησης $\delta = v \frac{D_h}{v_o}$. Η μη διαστατή μακροσκοπική ταχύτητα $u_z(x, y)$ υπολογίζεται, όπως έχει αναφερθεί ήδη, από την πρώτη ροπή της κατανομής h .

$$u(x, y) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_z h e^{-c^2} dc_x dc_y dc_z \quad (3.1.7)$$

Μια ακόμα μακροσκοπική ποσότητα με ενδιαφέρον στη συγκεκριμένη εφαρμογή είναι η μη διαστατή διατμητική τάση στις διευθύνσεις xz και yz . Η τάση εξάγεται ως η δεύτερη ροπή της h . Δηλαδή:

$$\Pi_{xz}(x, y) = \frac{\Pi'_{xz}}{2PX_p} = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x c_z h e^{-c^2} dc_x dc_y dc_z \quad (3.1.8)$$

$$\Pi_{yz}(x, y) = \frac{\Pi'_{yz}}{2PX_p} = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_y c_z h e^{-c^2} dc_x dc_y dc_z \quad (3.1.9)$$

Όπως αναφέρθηκε και νωρίτερα, η συνάρτηση κατανομής είναι ανεξάρτητη της κατεύθυνσης z και συνεπώς ανεξάρτητη της μικροσκοπικής ταχύτητας c_z . Για να μειωθεί το υπολογιστικό κόστος, επιλέγεται να εφαρμοστεί η διαδικασία της προβολής και να απαλειφθεί η ταχύτητα c_z . Η νέα συνάρτηση

κατανομής ϕ επιλέγεται με τέτοιο τρόπο, ώστε να απλοποιούνται οι εκφράσεις για τον υπολογισμό των μακροσκοπικών ποσοτήτων. Στην συγκεκριμένη περίπτωση:

$$\phi(x, c_x, c_y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} h(x, c_x, c_y, c_z) \exp(-c_z^2) c_z dc_z$$

Επομένως η εξίσωση (3.1.3) θα πολλαπλασιαστεί με $\frac{1}{\sqrt{\pi}} c_z e^{-c_z^2}$ και κατόπιν θα

ολοκληρωθεί στο $-\infty < c_z < \infty$. Έτσι προκύπτει:

$$\left(c_x \frac{\partial}{\partial x} + c_y \frac{\partial}{\partial y} \right) \int_{-\infty}^{\infty} h \frac{1}{\sqrt{\pi}} c_z e^{-c_z^2} dc_z = -\delta \int_{-\infty}^{\infty} h \frac{1}{\sqrt{\pi}} c_z e^{-c_z^2} dc_z + (2\delta u - 1) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{\pi}} c_z^2 e^{-c_z^2} dc_z \rightarrow$$

$$\left(c_x \frac{\partial}{\partial x} + c_y \frac{\partial}{\partial y} \right) \phi = -\delta \phi + (2\delta u - 1) \frac{1}{2} \rightarrow$$

$$c_x \frac{\partial \phi}{\partial x} + c_y \frac{\partial \phi}{\partial y} + \delta \phi = \delta u - \frac{1}{2} \quad (3.1.10)$$

Η νέα εξίσωση δεν περιέχει την μοριακή ταχύτητα c_z . Επιπρόσθετα είναι βολικότερο να περιγραφούν οι εναπομείνουσες συνιστώσες c_x και c_y σε πολικές συντεταγμένες. Ορίζεται το μέτρο της μοριακής ταχύτητας $c_p = \sqrt{c_x^2 + c_y^2}$ και την πολική γωνία $\theta = \tan^{-1} \frac{c_y}{c_x}$

Πλέον ο τελεστής που επενεργεί στην συνάρτηση κατανομής ϕ μπορεί να γραφτεί στην μορφή:

$$c_x \frac{\partial}{\partial x} + c_y \frac{\partial}{\partial y} = c_p \left[\cos \theta \frac{\partial}{\partial x} + \sin \theta \frac{\partial}{\partial y} \right] = c_p \frac{d}{ds}$$

Με $s = s(x, y, \theta)$ παριστάνονται οι χαρακτηριστικές του προβλήματος, που περνάνε από το σημείο (x, y) και ορίζονται από τη γωνία θ και το διάνυσμα της ταχύτητας.

Έτσι από τις εξισώσεις (3.1.3) και (3.1.7) και παίρνουμε την τελική μορφή, η οποία θα επιλυθεί αριθμητικά

$$c_p \frac{d\varphi}{ds} + \delta\varphi = \delta u - \frac{1}{2} \quad (3.1.11)$$

Μένει να εφαρμοστεί η προβολή και η αλλαγή συντεταγμένων στις εξισώσεις για τις μακροσκοπικές ποσότητες.

$$u(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{\pi}} h c_z e^{-c_z^2} dc_z \right] e^{-c_x^2} e^{-c_y^2} dc_x dc_y \rightarrow$$

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

$$u(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \varphi e^{-c_p^2} c_p dc_p d\theta \quad (3.1.12)$$

Αντίστοιχα προκύπτει ότι:

$$\Pi_{xz}(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \varphi c_p^2 \cos \theta e^{-c_p^2} dc_p d\theta \quad (3.1.13)$$

$$\Pi_{yz}(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \varphi c_p^2 \sin \theta e^{-c_p^2} dc_p d\theta \quad (3.1.14)$$

3.2 Οριακές Συνθήκες Cercignani-Lampis

Η γενική έκφραση για τις συνοριακές συνθήκες είναι $h^+ = Ah^- + h_w - Ah_w$ (3.2.1), όπου με + και - συμβολίζονται οι κατανομές των σωματιδίων που φεύγουν και προσπίπτουν αντίστοιχα στο τοίχωμα και με h_w η κατανομή στις συνθήκες του τοιχώματος. Στο πρόβλημα μας ο όρος h_w εξαφανίζεται, αφού όλα τα τοιχώματα έχουν θερμοκρασία ίση με τη θερμοκρασία αναφοράς.

Ο τελεστής A για τη συνθήκη Cercignani-Lampis έχει την εξής μορφή:

$$Ah^- = \frac{1}{c_n} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} c'_n W(-\vec{c} \rightarrow -\vec{c}') h^-(x, c'_n, c'_t, c'_z) dc'_n dc'_t dc'_z$$

,όπου με W παριστάνονται οι κάθετες ταχύτητες των σωματιδίων στο τοίχωμα και με t_1, t_2 οι εφαιπτόμενες ταχύτητες κατά μήκος και εγκάρσια του τοίχου. Οι ταχύτητες των σωματιδίων που προσπίπτουν στο τοίχωμα παριστάνονται με έναν παραπάνω τόνο σε σχέση με αυτές των σωματιδίων που απομακρύνονται. Είναι προφανές ότι στην προκειμένη περίπτωση η διεύθυνση t_2 συμπίπτει με την z .

Μετά την διαδικασία προβολής στην εξίσωση (3.2.1) έχουμε

$$\begin{aligned} \varphi^+(x, c_n, c_t) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} Ah^-(x, c'_x, c'_y, c'_z) \exp(-c_z'^2) c_z' dc_z' \rightarrow \\ \varphi^+(x, c_n, c_t) &= \frac{1}{c_n \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} h^-(x, c'_n, c'_t, c'_z) c'_n \left[\int_{-\infty}^{\infty} W(-\vec{c} \rightarrow -\vec{c}') \exp(-c_z'^2) c_z' dc_z' \right] dc'_n dc'_t dc'_z \quad (3.2.2) \end{aligned}$$

Η παραπάνω εξίσωση (3.2.2) απλοποιείται απομονώνοντας το ολοκλήρωμα

$$\begin{aligned} E(\vec{c}' \rightarrow \vec{c}) &= \int_{-\infty}^{\infty} W(-\vec{c} \rightarrow -\vec{c}') \exp(-c_z'^2) c_z' dc_z' \rightarrow \\ E(\vec{c}' \rightarrow \vec{c}) &= W(-c_n \rightarrow -c'_n) W(-c_t \rightarrow -c'_t) \int_{-\infty}^{\infty} W(-c_z \rightarrow -c'_z) \exp(-c_z'^2) c_z' dc_z' \rightarrow \\ E(\vec{c}' \rightarrow \vec{c}) &= W(-c_n \rightarrow -c'_n) W(-c_t \rightarrow -c'_t) (1 - a_t) \exp(-c_z'^2) c_z' \end{aligned}$$

Οι εκφράσεις για τους τελεστές W_n, W_t είναι:

$$W_t(-c_t \rightarrow -c'_t) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_t (2 - a_t)}} \exp \left\{ -\frac{[(1 - \alpha_t) c_t - c'_t]^2}{a_t (2 - a_t)} \right\} \quad (3.2.3)$$

και

$$W_n(-c_n \rightarrow -c'_n) = \frac{2c_n}{a_n} \exp \left\{ -\frac{(1 - \alpha_n) c_n^2 + c_n'^2}{2a_n} \right\} I_0 \left\{ \frac{2\sqrt{(1 - a_n) c_n c'_n}}{a_n} \right\} \quad (3.2.4)$$

Άρα η εξίσωση (3.2.2) καταλήγει στην:

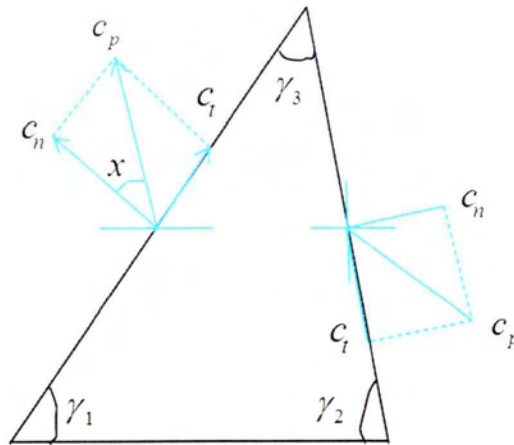
$$\varphi^+ = \frac{2(1-a_t)}{a_n \sqrt{\pi \alpha_t} (2-a_t)} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{1}{\sqrt{\pi}} c'_z \exp(-c'_z{}^2) h^-(x, c'_n, c'_t, c'_z) c'_n &$$

$$\exp \left\{ -\frac{(1-\alpha_n)c_n^2 + c_n'^2}{2a_n} - \frac{[(1-a_t)c_t - c_t']^2}{a_t(2-a_t)} \right\} I_o \left\{ \frac{2\sqrt{(1-a_n)c_n c_n'}}{a_n} \right\} dc'_n dc'_t dc'_z \rightarrow$$

$$\varphi^+(x, c_n, c_t) = \frac{2(1-a_t)}{a_n \sqrt{\pi \alpha_t} (2-a_t)} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^-(x, c'_n, c'_t) c'_n &$$

$$\exp \left\{ -\frac{(1-\alpha_n)c_n^2 + c_n'^2}{2a_n} - \frac{[(1-a_t)c_t - c_t']^2}{a_t(2-a_t)} \right\} I_o \left\{ \frac{2\sqrt{(1-a_n)c_n c_n'}}{a_n} \right\} dc'_n dc'_t \quad (3.2.5)$$

Για καθένα από τα τοιχώματα του πλέγματος, η σχέση (3.2.5) προσαρμόζεται ανάλογα με τις τιμές για την κάθετη και την εφαπτομενική μοριακή ταχύτητα. Με (c_p, θ') συμβολίζεται το μέτρο και η γωνία με την οποία προσκρούουν τα μόρια. Στο σχήμα 7 συμβολίζονται οι τρεις γωνίες του τριγώνου και η γωνία χ με την οποία υπολογίζονται οι C_n, C_t



Σχήμα 7: Εφαρμογή των ταχύτητων στις οριακές συνθήκες

Κάτω τοίχωμα: $c_n = c_y = c_p \sin \theta$, $c_t = c_x = c_p \cos \theta$

για $\theta \in [0, \pi]$

Επομένως θα ισχύει:

$$\begin{aligned} \varphi^+(x, c_p, \theta) = & -\frac{2(1-a_t)}{a_n \sqrt{\pi \alpha_t (2-a_t)}} \int_{-\pi}^0 \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^-(x, c_p', \theta') c_p'^2 \sin(\theta') & \\ & \exp \left\{ -\frac{(1-a_n)c_p^2 \sin^2(\theta^2) + c_p'^2 \sin^2(\theta'^2)}{2a_n} - \frac{[(1-a_t)c_p \cos(\theta) - c_p' \cos(\theta')]^2}{a_t(2-a_t)} \right\} & \\ & I_o \left\{ \frac{2\sqrt{(1-a_n)}c_p' \sin(\theta') c_p \sin(\theta)}{a_n} \right\} dc_p' d\theta' \end{aligned} \quad (3.2.6)$$

Δεξί τοίχωμα: $c_n = c_p \cos\left(\theta + \gamma_2 - \frac{\pi}{2}\right)$, $c_t = c_p \sin\left(\theta + \gamma_2 - \frac{\pi}{2}\right)$

για $\theta \in [\pi - \gamma_2, -\gamma_2]$

Επομένως:

$$\begin{aligned}
\varphi^+(x, c_p, \theta) &= \frac{2(1-a_t)}{a_n \sqrt{\pi \alpha_t (2-a_t)}} \int_{-\gamma_2}^{\pi-\gamma_2} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^-(x, c'_p, \theta') c'_p{}^2 \left| \cos\left(\theta' + \gamma_2 - \frac{\pi}{2}\right) \right| \\
&\exp \left[\frac{(1-\alpha_n) c_p{}^2 \cos^2\left(\theta + \gamma_2 - \frac{\pi}{2}\right) + c'_p{}^2 \cos^2\left(\theta' + \gamma_2 - \frac{\pi}{2}\right)}{2a_n} - \frac{\left[(1-a_t) c_p \sin\left(\theta + \gamma_2 - \frac{\pi}{2}\right) - c'_p \sin\left(\theta' + \gamma_2 - \frac{\pi}{2}\right) \right]^2}{a_t(2-a_t)} \right] \\
I_o &\left\{ \frac{2\sqrt{(1-a_n)} c'_p \cos\left(\theta' + \gamma_2 - \frac{\pi}{2}\right) c_p \cos\left(\theta + \gamma_2 - \frac{\pi}{2}\right)}{a_n} \right\} dc'_p d\theta \quad (3.2.7)
\end{aligned}$$

Αριστερό τοίχωμα: $c_n = -c_p \cos\left(\theta - \gamma_1 - \frac{\pi}{2}\right)$ $c_t = -c_p \sin\left(\theta - \gamma_1 - \frac{\pi}{2}\right)$

για $\theta \in [-\gamma_2, \gamma_1 + \gamma_3]$

Δηλαδή:

$$\begin{aligned}
\varphi^+(x, c_p, \theta) &= \frac{2(1-a_t)}{a_n \sqrt{\pi \alpha_t (2-a_t)}} \int_{\gamma_1}^{\pi+\gamma_1} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^-(x, c'_p, \theta') c'_p{}^2 \left| -\cos\left(\theta' - \gamma_1 - \frac{\pi}{2}\right) \right| \\
&\exp \left[\frac{(1-\alpha_n) c_p{}^2 \cos^2\left(\theta - \gamma_1 - \frac{\pi}{2}\right) + c'_p{}^2 \cos^2\left(\theta' - \gamma_1 - \frac{\pi}{2}\right)}{2a_n} - \frac{\left[-(1-a_t) c_p \sin\left(\theta - \gamma_1 - \frac{\pi}{2}\right) + c'_p \sin\left(\theta' - \gamma_1 - \frac{\pi}{2}\right) \right]^2}{a_t(2-a_t)} \right] \\
I_o &\left\{ \frac{2\sqrt{(1-a_n)} c'_p \cos\left(\theta' - \gamma_1 - \frac{\pi}{2}\right) c_p \cos\left(\theta - \gamma_1 - \frac{\pi}{2}\right)}{a_n} \right\} dc'_p d\theta \quad (3.2.8)
\end{aligned}$$

Στο πρόβλημα του αγωγού με τραπεζοειδή διατομή υπάρχει και ένα «πάνω» οριζόντιο τοίχωμα. Σε αυτό ισχύει: $c_n = c_y = c_p \sin \theta$, $c_t = c_x = c_p \cos \theta$

για $\theta \in [-\pi, 0]$

Άρα:

$$\varphi^+(x, c_p, \theta) = \frac{2(1-a_t)}{a_n \sqrt{\pi \alpha_t (2-a_t)}} \int_0^\pi \int_{-\infty}^\infty \varphi^-(x, c_p', \theta') c_p'^2 \sin(\theta')$$

$$\exp \left\{ -\frac{(1-a_n)c_p^2 \sin^2(\theta^2) + c_p'^2 \sin^2(\theta'^2)}{2a_n} - \frac{[(1-a_t)c_p \cos(\theta) - c_p' \cos(\theta')]^2}{a_t(2-a_t)} \right\} \&$$

$$I_o \left\{ \frac{2\sqrt{(1-a_n)}c_p' \sin(\theta')c_p \sin(\theta)}{a_n} \right\} dc_p' d\theta' \quad (3.2.9)$$

Τα ολοκληρώματα στις σχέσεις (3.2.6)-(3.2.9) υπολογίζονται εφαρμόζοντας την ολοκλήρωση κατά Gauss για τη μεταβλητή c_p και τον κανόνα του τραπεζίου για τη γωνία θ . Έτσι τα ολοκληρώματα μετατρέπονται σε διπλά αθροίσματα. Ο συντελεστής βαρύτητας W_m για τη μεταβλητή c_p προκύπτει από τις ρίζες του πολυωνύμου Gauss. Επιπλέον όμως ενσωματώνει και τον όρο $\exp(c_p'^2)$ τον αντίθετο δηλαδή του $\exp(-c_p'^2)$, που πρέπει να εμφανιστεί, ώστε να εφαρμοστεί η αριθμητική ολοκλήρωση.

3.3 Ορισμός παροχών και κατανομής πίεσης

Τα αποτελέσματα της εργασίας παρουσιάζονται σε αδιάστατη μορφή, ώστε να είναι εύκολα διαχειρίσιμα, να ταιριάζουν σε οποιαδήποτε πραγματική εφαρμογή και να μπορούν να συγκριθούν με αποτελέσματα πειραμάτων. Μιας και η λύση της κινητικής εξίσωσης ισχύει σε όλο το εύρος του αριθμού Knudsen, πληθώρα μακροσκοπικών ποσοτήτων παρουσιάζουν ενδιαφέρον. Μία από αυτές είναι η μέση διατμητική τάση

$$\tau'_w = \frac{1}{\Gamma'} \int_{\Gamma'} \Pi' dt'$$

όπου Π' είναι η διατμητική τάση κατά μήκος του τοιχώματος και το t' δηλώνει τη μεταβλητή ολοκλήρωσης. Λαμβάνοντας υπόψη βασικές αρχές και τις αδιάστατες ποσότητες καταλήγουμε [36] στο ότι:

$$\tau_w = \frac{\tau'_w}{2P_o X_p} = \frac{1}{\Gamma} \int_{\Gamma} \Pi dt = \frac{A}{2\Gamma} = \frac{1}{8} \quad (3.3.1)$$

όπου το Π είναι γραμμικός συνδυασμός των Π_{xz}, Π_{yz} που υπολογίζονται από τις σχέσεις (3.1.13) και (3.1.14). Όπως έχει αποδειχθεί η μέση τάση τ_w είναι ανεξάρτητη της παραμέτρου αραιοποίησης δ και ισούται πάντα με $A/2\Gamma$, δηλαδή στην περίπτωση μας με $1/8$.

Η πιο σημαντική όμως μακροσκοπική ποσότητα είναι η μαζική παροχή, η οποία ορίζεται ως:

$$\dot{M} = \int_{A'} \rho(x', y') u'(x', y') dA' \quad (3.3.2)$$

Αδιαστατοποιώντας την παραπάνω σχέση και χρησιμοποιώντας τη καταστατική

σχέση $\rho = \frac{2P}{v_o^2}$ καταλήγουμε στα εξής:

$$\dot{M} = D_h^2 \int_A \rho(x, y) u(x, y) v_o X_p dA \rightarrow$$

$$\dot{M} = D_h^2 \int_A \frac{2P}{\nu_o} u(x, y) X_p dA \rightarrow$$

$$\dot{M} = 2 \frac{A' P}{A \nu_o} X_p \int_A u(x, y) dA \rightarrow$$

$$\dot{M} = G \frac{A' P X_p}{\nu_o} = G \frac{A' D_h}{\nu_o} \frac{dP}{dz'} \quad (3.3.3)$$

$$\text{όπου } G = \frac{2}{A} \int_A u(x, y) dA$$

Το G ονομάζεται αδιάστατη παροχή και είναι αποτέλεσμα της λύσης. Σε κάθε επανάληψη υπολογίζεται η μακροσκοπική ταχύτητα και ύστερα το G προκύπτει από το διπλό ολοκλήρωμα. Όταν η διαφορά πίεσης στο κανάλι είναι μικρή, τότε είναι ακριβές να ορίσουμε μία μέση παράμετρο αραιοποίησης $\delta_o = \frac{\delta_1 + \delta_2}{2}$,

όπου τα δ_1, δ_2 αντιστοιχούν στις πιέσεις P_1, P_2 . Τότε η πραγματική παροχή μπορεί να εκτιμηθεί από την σχέση:

$$\dot{M} = G(\delta_o) \frac{A' D_h}{\nu_o} \frac{P_1 - P_2}{L} \quad (3.3.4)$$

Άλλη μία ποσότητα με πρακτική σημασία είναι η ογκομετρική παροχή C της ροής η οποία ορίζεται ως:

$$C = \frac{Q_m}{m} \frac{RT_o}{\Delta P}$$

(3.3.5)

όπου m είναι η μοριακή μάζα του ρευστού.

Επίσης στην παρούσα εργασία θα παρουσιαστούν οι αριθμοί Knudsen, Reynolds και Mach στις συνθήκες αναφοράς P_o και τιμή παραμέτρου δ_o . Από τις εξισώσεις (3.1.1)-(3.1.3) φαίνεται εύκολα ότι:

$$Kn_o = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{\delta_o} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\mu_o \nu_o}{D_h P_o} \quad (3.3.6)$$

$$Re_o = \frac{\rho_o U_o' D_h}{\mu_o} = 2\delta_o U_o \frac{D_h}{P_o} \frac{P_1 - P_2}{L} \quad (3.3.7)$$

$$Ma_o = \frac{U_o'}{c_o} = \sqrt{\frac{2}{\gamma}} U_o \frac{D_h}{L} \frac{P_1 - P_2}{P_o} \quad (3.3.8)$$

όπου $U_o = \frac{U_o'}{X_p} = \frac{1}{A} \int_A u dA$ η αδιάστατη μέση ταχύτητα.

Εφόσον έχει υπολογιστεί η παροχή από την κινητική εξίσωση μπορεί να εξαχθεί και η κατανομή πίεσης κατά μήκος του αγωγού. Γράφουμε την εξίσωση

(3.3.4) στη μορφή $\frac{dP}{dz} = \frac{M \nu_o L}{G(\delta) A' D_h}$. Η παραπάνω διαφορική εξίσωση πρώτης

τάξης με αρχική συνθήκη $P(0) = P_1$ επιλέγεται να λυθεί με ένα σχήμα Euler πρώτης τάξης. Χωρίζοντας το διάστημα $0 < z < 1$ σε N ίσα διαστήματα με μήκος Δz , προκύπτει η σχέση για την πίεση σε κάθε τμήμα του καναλιού.

$$P(z_i) = P(z_{i-1}) + \frac{M \nu_o L}{A' D_h} \frac{\Delta z}{G(\delta_{i-1})} \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (3.3.9)$$

Μπορούν να εφαρμοστούν φυσικά πιο πολύπλοκα αριθμητικά σχήματα, όπως η μέθοδος Runge-Kutta.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ

4.1 Διακριτοποίηση

Η εξίσωση που επιλύεται είναι η γραμμικοποιημένη διαφορική εξίσωση (3.1.8) μαζί με το ολοκλήρωμα για την ταχύτητα (3.1.9). Ο φυσικός χώρος αποτελείται από το χώρο των μοριακών ταχυτήτων και από τον φυσικό χώρο (x, y) . Στο χώρο των μοριακών ταχυτήτων εφαρμόζεται η μέθοδος DVM, δηλαδή η διακριτοποίηση γίνεται επιλέγοντας ένα κατάλληλο σύνολο διακριτών ταχυτήτων (c_m, θ_n) το οποίο ορίζεται ως εξής:

$$0 < c_m < \infty, \quad m = 1, 2, \dots, M$$

$$0 < \theta_n < \infty, \quad n = 1, 2, \dots, N$$

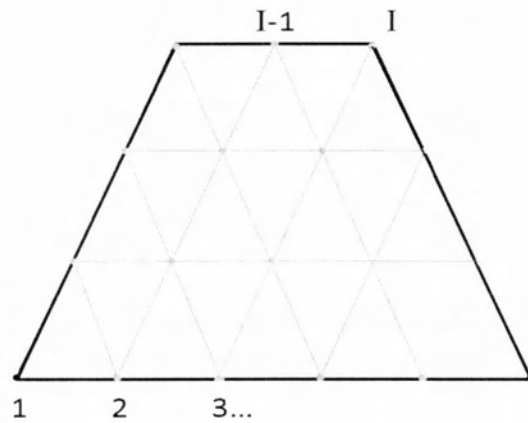
Το σύνολο των ταχυτήτων που προκύπτει αποτελείται από $M \times N$ διακριτές ταχύτητες. Η εξίσωση (3.1.11) μετατρέπεται σε ένα σύνολο συνήθων διαφορικών εξισώσεων της μορφής $c_m \frac{d\varphi_{m,n}}{ds} + \delta\varphi_{m,n}(x, y) = \delta u(x, y)$, και η (3.1.12) γίνεται ένα

$$\text{διπλό άθροισμα } u(x, y) = \frac{1}{\pi} \sum_m \sum_n w_m w_n \varphi_{m,n}$$

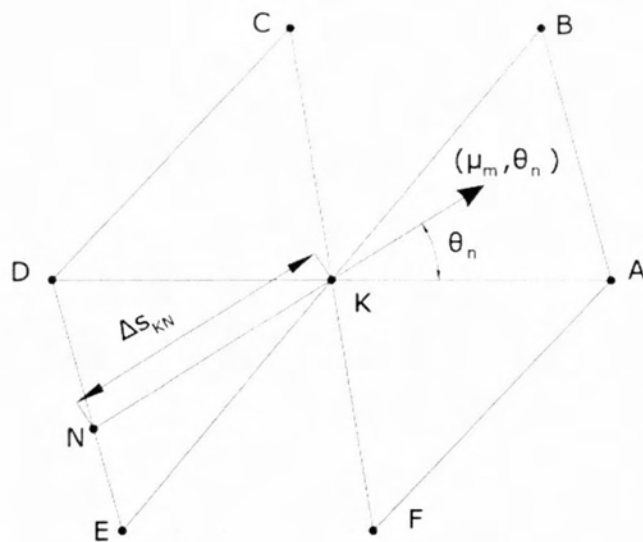
Στην μεταβλητή c_p έχει εφαρμοστεί η ολοκλήρωση Gauss ενώ στην μεταβλητή θ ο κανόνας του τραπεζίου, όπως δηλαδή και στην περίπτωση των εξισώσεων των οριακών συνθηκών. Οι αντίστοιχοι συντελεστές βαρύτητας συμβολίζονται με W_m, W_n .

Η διακριτοποίηση στο φυσικό χώρο περιλαμβάνει ένα τριγωνικό πλέγμα που συμπίπτει με τα φυσικά όρια της τριγωνικής ή της τραπεζοειδούς διατομής του αγωγού. Αυτή η μέθοδος εξασφαλίζει καλή ακρίβεια. Το πλέγμα κατασκευάζεται σχεδιάζοντας στην διατομή τρεις ομάδες παράλληλων γραμμών. Οι γραμμές είναι ισαπέχουσες και κάθε ομάδα είναι παράλληλη σε μία πλευρά του τριγώνου. Η αρίθμηση των κόμβων ξεκινάει από την κάτω αριστερή γωνία και συνεχίζει προς τα δεξιά σε κάθε οριζόντια γραμμή του πλέγματος. Στο Σχήμα 8 απεικονίζεται το υπολογιστικό πλέγμα αποτελούμενο από $i = 1, 2 \dots I$ κόμβους.

Ο κάθε κόμβος γειτονεύει με 6 κόμβους που σχηματίζουν εξάγωνο και διαμορφώνουν ουσιαστικά το υπολογιστικό κελί, το οποίο χαρακτηρίζεται από τις γωνίες γ_1, γ_2 της κάτω πλευράς του τριγώνου ή του τραπέζιου. Στο Σχήμα 9 παρουσιάζεται ένα τέτοιο εξάγωνο ABCDEF γύρω από τον κόμβο K .



Σχήμα 8 : Τριγωνικό πλέγμα σε τραπέζιο



Σχήμα 9: Υπολογιστική κυψέλη

4.2 Αριθμητικό σχήμα

Το σύνολο των εξισώσεων (4.1.1) διακριτοποιείται σε κάθε κόμβο i του φυσικού χώρου δημιουργώντας αλγεβρικές εξισώσεις. Η παράγωγος $d\varphi_{m,n}/ds$ αντιμετωπίζεται με ένα σχήμα πεπερασμένων διαφορών πρώτης τάξης. Αναφερόμενοι στον κόμβο K του σχήματος για ταχύτητες με διεύθυνση που τέμνει την πλευρά AB , η παράγωγος γράφεται ως:

$$c_m \left. \frac{d\varphi_{m,n}}{ds} \right|_K = c_m \frac{\varphi_{Km,n} - \varphi_{Nm,n}}{\Delta S_{KN}} \quad (4.2.1)$$

όπου το σημείο N και η απόσταση ΔS_{KN} εμφανίζονται επίσης στο σχήμα 8. Οι τιμές στο σημείο N υπολογίζονται από τις αντίστοιχες τιμές στα δύο γειτονικά σημεία του πλέγματος D και E μέσω γραμμικής παρεμβολής. Η διαδικασία αυτή επεκτείνεται για όλες τις τιμές των πολικών γωνιών θ_n που τέμνουν τις υπόλοιπες 5 πλευρές του εξαγώνου και επαναλαμβάνεται για όλα τα εξάγωνα που προκύπτουν για κάθε κόμβο ξεχωριστά. Με τον τρόπο αυτό, προκύπτουν $M \times N$ εξισώσεις για κάθε έναν από τους I κόμβους του πλέγματος.

Το πρόβλημα λοιπόν, επιλύεται μέσω μιας επαναληπτικής διαδικασίας μεταξύ της κινητικής εξίσωσης για τη φ και της ολοκληρωτικής έκφρασης για την ταχύτητα u . Τα βήματα που ακολουθούνται είναι τα εξής:

- Υπόθεση αρχικών τιμών για τη φ και τη u . Για κάθε διακριτή ταχύτητα c_m , θ_n η κατανομή $\varphi_{m,n,i}$ υπολογίζεται σε κάθε σημείο του πλέγματος. Η διαδικασία ξεκινάει πάντα από τους συνοριακούς κόμβους και ο τρόπος που σαρώνεται το πλέγμα εξαρτάται από την διεύθυνση της θ_n . Για παράδειγμα όταν το διάνυσμα της ταχύτητας τέμνει την πλευρά CD , η σάρωση ξεκινά από τον κάτω δεξιά κόμβο και ακολουθεί μία μία τις ευθείες του πλέγματος με κατεύθυνση πάντα προς τα αριστερά.
- Υπολογισμός της μακροσκοπικής ταχύτητας u_i με αριθμητική ολοκλήρωση

- Υπολογισμός της αδιάστατης παροχής G και των διατμητικών τάσεις τ_w βάση των νέων u_i
- Εύρεση των κατανομών $\bar{\varphi}$ που απομακρύνονται από τα τοιχώματα με βάση την οριακή συνθήκη.
- Νέα επανάληψη τοποθετώντας στην κινητική εξίσωση τις $\bar{\varphi}$ μαζί με τις ταχύτητες u_i .

Οι επαναλήψεις σταματούν όταν ικανοποιηθεί το κριτήριο σύγκλισης $\frac{G_{new} - G_{old}}{G_{old}} < 10^{-6}$. Ο χρόνος επεξεργασίας (σε ώρες) και ο αριθμός επαναλήψεων αντίστοιχα στις περιπτώσεις οριακής συνθήκης Maxwell (πλήρης διάχυση) και συνθηκών Cercignani-Lampis ($a_t = 0.5, a_n = 1$) για τη διατομή του ισόπλευρου τριγώνου και του ισοσκελούς τραπεζίου με τα οποία ασχολείται η εργασία, φαίνονται στον πίνακα 1. Κατά την επίλυση, όπως αναφέρεται σε επόμενη παράγραφο, θεωρήθηκαν για $\delta \leq 1$, 201 κόμβοι στο κάτω τοίχωμα του πλέγματος (20301 συνολικά) και 204 γωνίες μοριακών ταχυτήτων (208 στο τραπέζιο για προγραμματιστικούς λόγους), ενώ για $\delta > 1$ θεωρήθηκαν 271 κόμβοι στο κάτω τοίχωμα (δηλαδή 36856 συνολικά) και 120 γωνίες μοριακών ταχυτήτων. Έχουν επιλεγεί 16 μέτρα των μοριακών ταχυτήτων από τις ρίζες των πολυωνύμων Gauss, αριθμός που αποδεικνύεται αρκετός σε θέμα ακρίβειας αποτελεσμάτων.

Παρατηρείται ότι για μέσες και υψηλές τιμές του δ , ο χρόνος που απαιτείται για να ληφθούν τα αριθμητικά αποτελέσματα είναι αισθητά μικρότερος στην περίπτωση του τραπεζίου σε σχέση με αυτή του τριγώνου. Επίσης όσο μεγαλώνει η παράμετρος αραιοποίησης, ο χρόνος για τη συνθήκη Maxwell αυξάνεται πιο έντονα. Παρολαυτά, ο επιπλέον χρόνος που απαιτείται για τις πιο πολύπλοκες συνθήκες CL αυξάνεται περαιτέρω, καθώς ήδη για $\delta = 0.1$ οι συνθήκες CL απαιτούν περίπου 3 φορές περισσότερο χρόνο. Επίσης μεγαλύτερη είναι και η διαφορά στον αριθμό των επαναλήψεων.

Η διάρκεια της επίλυσης εξαρτάται κυρίως και σε μεγάλο βαθμό από τον αριθμό των μοριακών ταχυτήτων, λόγω του πλήθους των ολοκληρωμάτων που υπολογίζονται σε κάθε επανάληψη για τις κατανομές στα τοιχώματα καθώς και για την μακροσκοπική ταχύτητα. Χαρακτηριστικά, αν επιλεγούν στην περίπτωση $\delta = 5$ για τον τραπεζοειδή αγωγό, 208 γωνίες για τη μοριακή ταχύτητα αντί 120 και μειώνοντας αντ'αυτού τους κόμβους σε 201, ο χρόνος επίλυσης για τις συνθήκες CL εκτοξεύεται από 0.802 σε 2.891 ώρες. Αντίθετα, αν επιλεγούν στην περίπτωση $\delta = 0.1$ 120 γωνίες και 271 κόμβους, ο χρόνος μειώνεται από 0.525 σε 0.174 ώρες, στην περίπτωση των συνθηκών CL και από 0.168 σε 0.056 ώρες, όταν ισχύει η οριακή συνθήκη διάχυσης. Οι αρχικοί παράμετροι δίνουν ούτως ή άλλως ακριβέστερα αποτελέσματα και γι'αυτό προτιμώνται. Να σημειωθεί ότι ο αριθμός των επαναλήψεων δεν επηρεάζεται από τις παραμέτρους επίλυσης.

Ενδιαφέρον έχει τέλος να γίνει σύγκριση με τους χρόνους που αναγράφονται στο [35], για τη ροή σε ορθογώνιο αγωγό στην περίπτωση των συνθηκών Cercignani-Lampis με ίδιες παραμέτρους όπως παραπάνω. Εκεί χρησιμοποιήθηκαν 100X100 κόμβοι στο χώρο και 32X100 μοριακές ταχύτητες. Οι χρόνοι που απαιτούνται για ακριβή αποτελέσματα στην παρούσα εργασία, είναι πολύ χαμηλότεροι από εκείνους. Παρατηρήθηκε όμως μετά από δοκιμές στον κώδικα, ότι χρησιμοποιώντας ολοκλήρωση κατά Gauss με τις μισές ρίζες, δηλαδή 16, πετυχαίνουμε τα ίδια αποτελέσματα έως το τέταρτο δεκαδικό ψηφίο μειώνοντας τον χρόνο επίλυσης έως και μία τάξη μεγέθους. Για παράδειγμα στην περίπτωση διατομής $\frac{H}{W}=1$, όταν ισχύει $\delta = 5$, ο χρόνος για τη συνθήκη CL μειώνεται από 4.585 σε 0.431 ώρες και όταν $\delta = 10$, από 9.584 σε 0.926.

Πίνακας 1: Χρόνος επεξεργασίας και αριθμός επαναλήψεων για οριακές συνθήκες Maxwell (a=1) και Cercignani-Lampis ($a_t = 0.5, a_n = 1$) σε δύο είδη διατομών.

			δ			
			0.1	1	5	10
Ισόπλευρο τρίγωνο	Maxwell (a=1)	CPU time (hr)	0.176	0.436	0.603	1.465
		Επαναλήψεις	8	20	83	202
	CL	CPU time (hr)	0.544	0.986	1.065	2.262
		Επαναλήψεις	25	45	145	312
Ισοσκελές Τραπέζιο $\varphi = 63.43$ $b/B = 0.5$	Maxwell (a=1)	CPU time (hr)	0.168	0.399	0.451	1.079
		Επαναλήψεις	8	19	76	188
	CL	CPU time (hr)	0.525	0.918	0.802	1.686
		Επαναλήψεις	25	44	139	295

4.3 Οριακή συνθήκη συμμετρίας

Στην παράγραφο αυτή παρουσιάζεται αναλυτικότερα η εφαρμογή της συνθήκης συμμετρίας στην υποτείνουσα του ορθογωνίου ισοσκελούς τριγώνου, στην προσπάθεια για αναπαραγωγή της ροής μέσω μιας ορθογώνιας διατομής. Η οριακή συνθήκη περιγράφεται από τη σχέση:

$$\varphi(i, c_p, \theta) = \varphi(i', c_p, \theta - \pi) \quad (4.3.1)$$

όπου i ο αντισυμμετρικός κόμβος του i' ως προς το μέσο της πλευράς. Αν υπάρχουν N κόμβοι στο κάτω τοίχωμα και I συνολικά κόμβοι, τότε ο κόμβος

$i = N$ αντιστοιχεί στον κόμβο I , ενώ ο αμέσως επόμενος $i = N + (N - 1) = 2N - 1$ στον $i' = I - 1$. Η ισότητα επαναλαμβάνεται για κάθε κόμβο της υποτέινουσας και κάθε ζεύγος (c_p, θ) .

Παρακάτω ακολουθεί ο κώδικας σε Fortran που υπολογίζει τη συνάρτηση κατανομής στη σχέση (4.3.1) για την περίπτωση που $\gamma_1 = 90^\circ$

```

! NNo=Total number of nodes
! e=antisymmetrical node
! Nc=number of velocities
! Nt=number of velocity angles
! q1,q2,q3=number of velocity angles that correspond to each
! part of the computing hexagonal
t=-1
e=NNo
Do I=1,NNo
if (K1(I).lt.0.and.K2(I).lt.0) then
t=t+1
e=e-t
Do M=1,Nc
Do Lt=1,q1
F(I,M,Nt/2+q1+1-Lt)=F(e,M,q1+1-Lt)
enddo
do Lt=1,q3
F(I,M,Nt/2+q1+q3+1-Lt)=F(e,M,q1+q3+1-Lt)
enddo
do Lt=1,q2
F(I,M,q3+q1+Lt)=F(e,M,Nt/2+q1+q3+Lt)
enddo

enddo
endif
enddo

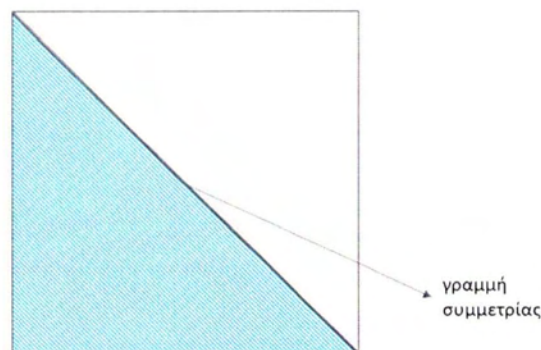
```


ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΣΧΟΛΙΑΣΜΟΣ

5.1 Πιστοποίηση αποτελεσμάτων-Σύγκριση με ορθογώνιο αγωγό

Η παράγραφος αυτή είναι αφιερωμένη στην απόδειξη της αξιοπιστίας των αποτελεσμάτων της παρούσας εργασίας. Ένα πρώτο στοιχείο είναι ότι η διατμητική τάση που υπολογίζει ο κώδικας συμφωνεί με τη σταθερή τιμή $1/8$ που προκύπτει αναλυτικά, με ακρίβεια στα δύο δεκαδικά ψηφία. Για μεγαλύτερη αξιοπιστία έχει γίνει ταυτοποίηση με τα αποτελέσματα παλαιότερης εργασίας [35] στην οποία έχει εφαρμοστεί η συνθήκη Cercignani-Lampis και αφορά την ροή σε αγωγό ορθογώνιας διατομής λόγω διαφοράς πίεσης. Στην εργασία εκείνη είχε επίσης υιοθετηθεί το κινητικό μοντέλο BGK και η μέθοδος DVM. Η σύγκριση έγινε επιλύοντας μια διατομή σχήματος ορθογωνίου τριγώνου με τη μέθοδο που περιγράφηκε στα προηγούμενα κεφάλαια και εφαρμόζοντας οριακή συνθήκη αντισυμμετρίας στην υποτείνουσα αντί για συνθήκη CL, ώστε να έχουμε τελικά ένα πρόβλημα ισοδύναμο με εκείνο του ορθογωνίου αγωγού. Στη διαδικασία αυτή, η ορθή γωνία θεωρήθηκε και στις τρεις δυνατές θέσεις (γωνίες) στο τρίγωνο και τα αποτελέσματα ήταν ακριβώς τα ίδια, όπως αναμενόταν.

Στο Σχήμα 10 αποτυπώνεται η διατομή που επιλύεται ως σκιασμένη περιοχή, σε σχέση με την ολόκληρη.



Σχήμα 10: Ορθογώνιο ως επαλληλία δυο αντισυμμετρικών ορθογωνίων

Στη συνθήκη συμμετρίας θεωρείται ότι η κατανομή που απομακρύνεται από το τοίχωμα με μία γωνία θ , έχει την ίδια τιμή με εκείνη που προσκρούει αντισυμμετρικά. Περισσότερες πληροφορίες για το συγκεκριμένο θέμα δίνονται στην παράγραφο 4.3

Η αδιαστατοποίηση στο [35] έχει γίνει ως προς το ύψος H του ορθογωνίου, ενώ στην παρούσα εργασία ως προς την υδραυλική διάμετρο D_h . Έτσι πρέπει να γίνουν κάποιες συσχετίσεις ανάμεσα στις αδιάστατες ποσότητες των δύο προβλημάτων, ώστε να έχει νόημα η σύγκριση των παροχών G .

Στο [35] η μαζική παροχή για το ορθογώνιο αγωγό δίνεται από τη σχέση

$$\dot{M}_{ort} = G(\delta_{ort}) \frac{H^2 W}{\nu_o} \frac{dP}{dz'}$$

$$\text{ενώ εδώ ισχύει } \dot{M}_t = G(\delta_t) \frac{A_t D_h}{\nu_o} \frac{dP}{dz'}$$

όπου H, W το μήκος και το ύψος της διατομής ενώ $\delta_{ort} = \frac{PH}{\mu \nu_o}$ και $\delta_t = \frac{PD_h}{\mu \nu_o}$

Το εμβαδόν του ορθογωνίου τριγώνου ισούται με $A_t = \frac{HW}{2}$ και η υδραυλική

$$\text{διάμετρος με } D_h = 4 \frac{A}{\Gamma} = \frac{2HW}{H+W+\sqrt{H^2+W^2}}$$

Αφού το ορθογώνιο έχει δύο φορές το εμβαδόν του τριγώνου, θα ισχύει

$$\dot{M}_{ort} = 2 \dot{M}_t \rightarrow$$

$$G(\delta_{ort}) \frac{H^2 W}{\nu_o} \frac{dP}{dz'} = G(\delta_t) \frac{HW}{\nu_o} \frac{dP}{dz'} \frac{2HW}{H+W+\sqrt{H^2+W^2}} \rightarrow$$

$$G(\delta_{ort}) = G(\delta_t) \frac{2W}{H+W+\sqrt{H^2+W^2}} \quad (5.1.1)$$

Για τις αντίστοιχες τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης ισχύει :

$$\delta_t = \frac{PD_h}{\mu \nu_o} = \frac{PH}{\mu \nu_o} \frac{2W}{H+W+\sqrt{H^2+W^2}} = \delta_{ort} \frac{2W}{H+W+\sqrt{H^2+W^2}}$$

Στους πίνακες 2 και 3 φαίνεται η σύγκριση μεταξύ των τιμών του [35] και της παρούσας μεθόδου για δυο περιπτώσεις ορθογωνίων με λόγους διαστάσεων $\frac{H}{W}=1$ και $\frac{H}{W}=0.5$. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται για διάφορες περιπτώσεις του δ και των συντελεστών μεταφοράς μάζας και ορμής. Οι τιμές για τον ορθογώνιο αγωγό έχουν μεταβληθεί σε σχέση με αυτές στη βιβλιογραφία, σύμφωνα με τις σχέσεις (5.1.1) και (5.1.2), ώστε να γίνει απευθείας σύγκριση. Παρατηρείται ότι ειδικά στην περίπτωση ορθογωνίας διατομής υπάρχει πολύ μικρή απόκλιση, η οποία δικαιολογείται από τις διαφορές στην πυκνότητα του πλέγματος και στην μορφή του. Το μέγιστο σφάλμα που βρέθηκε ήταν μόλις 0.77%

Πίνακας 2: Σύγκριση αδιάστατων παροχών G για την περίπτωση $\frac{H}{W} = 1$

		Τετράγωνος αγωγός			Ορθογώνιος ισοσκελής αγωγός		
δ_s	α_t / α_n	0.5	0.75	1	0.5	0.75	1
0.1	0.5	2.877	2.854	2.836	2.898	2.876	2.858
	1	1.354	1.354	1.354	1.350	1.350	1.350
	1.5	0.778	0.792	0.806	0.771	0.785	0.799
1	0.5	2.798	2.794	2.790	2.817	2.813	2.809
	1	1.31	1.31	1.31	1.307	1.307	1.307
	1.5	0.759	0.763	0.766	0.753	0.757	0.76
5	0.5	3.192	3.189	3.186	3.201	3.200	3.198
	1	1.685	1.685	1.685	1.681	1.681	1.681
	1.5	1.14	1.141	1.142	1.131	1.132	1.134

Πίνακας 3: Σύγκριση αδιάστατων παροχών G για την περίπτωση $\frac{H}{W} = 0.5$

δ	α_t / α_n	Ορθογώνιος αγωγός			ορθογώνιος ισοσκελής αγωγός		
		0.5	0.75	1	0.5	0.75	1
0.1	0.5	2.973	2.949	2.925	2.993	2.969	2.945
	1	1.405	1.405	1.405	1.401	1.401	1.401
	1.5	0.814	0.832	0.848	0.807	0.825	0.841
1	0.5	2.899	2.895	2.891	2.91	2.906	2.902
	1	1.364	1.364	1.364	1.359	1.359	1.359
	1.5	0.804	0.808	0.812	0.796	0.800	0.804
5	0.5	3.434	3.432	3.43	3.423	3.423	3.423
	1	1.853	1.853	1.853	1.842	1.842	1.842
	1.5	1.291	1.293	1.294	1.293	1.295	1.296
10	0.5	4.190	4.185	4.179	4.160	4.155	4.149
	1	2.564	2.564	2.564	2.54	2.54	2.54
	1.5	1.989	1.995	2	1.971	1.977	1.982

5.2 Ροή σε αγωγό τριγωνικής διατομής

Στα πλαίσια της εργασίας έχουν γίνει υπολογισμοί για διατομές σε σχήμα ισόπλευρου και ορθογωνίου τριγώνου. Αφορούν όλο το εύρος της παραμέτρου αραιοποίησης δ και διάφορους συνδυασμούς των παραμέτρων a_t, a_n . Από την πυκνότητα του πλέγματος στο φυσικό χώρο και στο χώρο των μοριακών ταχυτήτων εξαρτάται η ακρίβεια των αποτελεσμάτων κατά το τρίτο δεκαδικό ψηφίο. Γενικά για τιμές $\delta < 1$ απαιτείται μεγάλος αριθμός μοριακών ταχυτήτων, ενώ το πλέγμα στο χώρο μπορεί να είναι λιγότερο πυκνό. Αντίθετα για υψηλές

τιμές του δ , η πυκνότητα του πλέγματος στο φυσικό χώρο παίζει τον σημαντικότερο ρόλο. Έτσι για $\delta \leq 1$ θεωρήθηκαν 201 σημεία στο κάτω τοίχωμα του πλέγματος και 204 γωνίες μοριακών ταχυτήτων, ενώ για $\delta > 1$ 271 σημεία στο κάτω τοίχωμα και 120 γωνίες μοριακών ταχυτήτων. Η περαιτέρω αύξηση των κόμβων του πλέγματος δεν προσδίδει μεγαλύτερη ακρίβεια. Σε όλες τις περιπτώσεις χρησιμοποιήθηκαν 16 μέτρα για τις ταχύτητες.

Στον πίνακα 4 παρουσιάζονται αποτελέσματα για την αδιάστατη παροχή ανάλογα με τις τιμές των παραμέτρων για δύο περιπτώσεις τριγώνων. Παρατηρείται και στις δύο περιπτώσεις όμοια συμπεριφορά. Τα αποτελέσματα εξαρτώνται κυρίως από την παράμετρο a_i . Συγκεκριμένα όσο μειώνεται η παράμετρος, η παροχή αυξάνεται. Η μεταβολή της παροχής είναι πολύ πιο απότομη για μικρές τιμές του a_i . Η παράμετρος a_n απ'την άλλη επιδρά ελάχιστα στην παροχή. Πρέπει να σημειωθεί όμως ότι στην περίπτωση $\delta = 0.1$, η επίδραση αυτή είναι αρκετά πιο έντονη σε απόλυτους αριθμούς, αν και πάλι αμελητέα. Παραδείγματος χάρη όταν $a_i = 0.25$ και $a_n = 0.5$, η παροχή είναι μεγαλύτερη κατά 0.066 σε σχέση με την τιμή όταν $a_n = 1$. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι όταν $\delta = 0.1$, κινούνται λιγότερα μόρια και επομένως η αλληλεπίδραση τους με το τοίχωμα είναι σχετικά συχνότερη οπότε συμβάλλει περισσότερο στο αποτέλεσμα. Γενικά για $a_i < 1$, η παράμετρος a_n έχει αντιστρόφως ανάλογη σχέση με την παροχή, ενώ στην αντίθετη περίπτωση έχει ανάλογη σχέση.

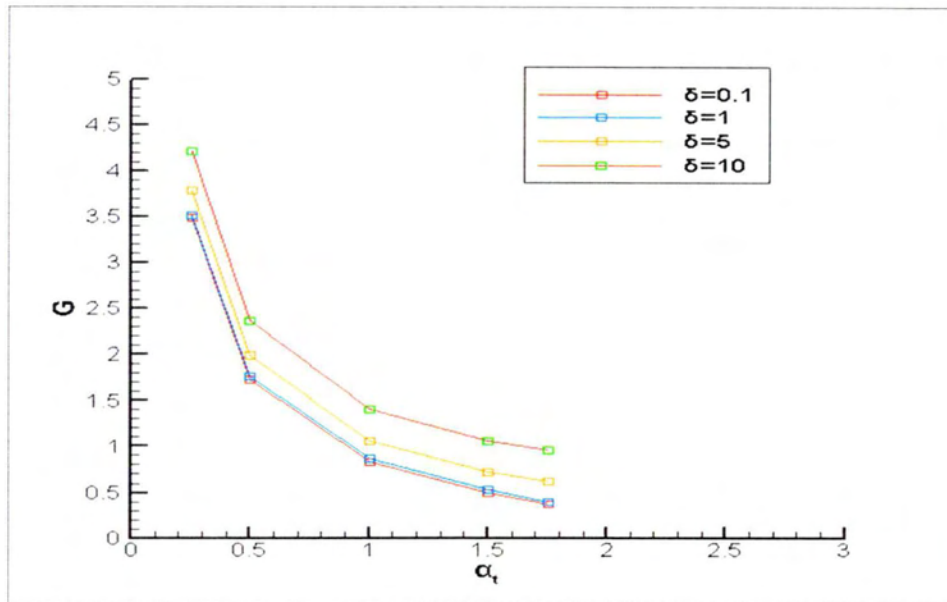
Όσο αφορά την σύγκριση μεταξύ των δύο τριγώνων, φαίνεται ότι το ορθογώνιο τρίγωνο δίνει μεγαλύτερες παροχές. Για μικρές τιμές του a_i η διαφορά στις τιμές είναι μεγαλύτερη υπέρ του ορθογωνίου, αλλά όταν ο συντελεστής αυξάνεται πάνω από τη μονάδα, οι παροχές ταιριάζουν περισσότερο. Επίσης όσο μειώνεται η αραιοποίηση του αερίου, η διαφορά των παροχών αυξάνεται.

Η σχέση της παροχής με τον συντελεστή a_i φαίνεται συνοπτικότερα στο Σχήμα 11 για διάφορες περιπτώσεις αραιοποίησης της ροής. Φαίνεται ότι η επίδραση του συντελεστή στην παροχή, δεν εξαρτάται από το βαθμό αραιοποίησης ούτε ποιοτικά αλλά ούτε και ποσοτικά. Μπορεί να ειπωθεί επίσης

αντίστροφα, ότι η αύξηση της παροχής ανάλογα το δ είναι δεδομένη και σχετικά σταθερή για οποιαδήποτε τιμή του α_i

Πίνακας 4: Αδιάστατη παροχή G για διάφορες περιπτώσεις παραμέτρων σε ισόπλευρο (αριστερά) και ορθογώνιο ισοσκελές τρίγωνο (δεξιά)

δ	α_t / α_n	0.5	0.75	1	0.5	0.75	1
0.1	0.25	3.575	3.542	3.509	3.621	3.59	3.559
	0.5	1.782	1.767	1.753	1.827	1.811	1.796
	1	0.871	0.871	0.871	0.902	0.902	0.902
	1.5	0.509	0.52	0.532	0.529	0.542	0.556
	1.75	0.366	0.381	0.396	0.386	0.403	0.420
1	0.25	3.493	3.487	3.481	3.546	3.542	3.537
	0.5	1.731	1.728	1.724	1.773	1.769	1.765
	1	0.83	0.83	0.83	0.854	0.854	0.854
	1.5	0.487	0.490	0.494	0.499	0.504	0.508
	1.75	0.365	0.369	0.374	0.379	0.385	0.391
5	0.25	3.791	3.79	3.790	3.878	3.877	3.876
	0.5	1.995	1.994	1.994	2.04	2.039	2.038
	1	1.057	1.057	1.057	1.08	1.08	1.08
	1.5	0.717	0.717	0.718	0.727	0.728	0.729
	1.75	0.611	0.612	0.613	0.623	0.623	0.624
10	0.25	4.211	4.209	4.207	4.307	4.305	4.303
	0.5	2.37	2.368	2.366	2.414	2.412	2.41
	1	1.41	1.41	1.41	1.43	1.43	1.43
	1.5	1.054	1.056	1.058	1.068	1.07	1.073
	1.75	0.951	0.954	0.958	0.964	0.967	0.971



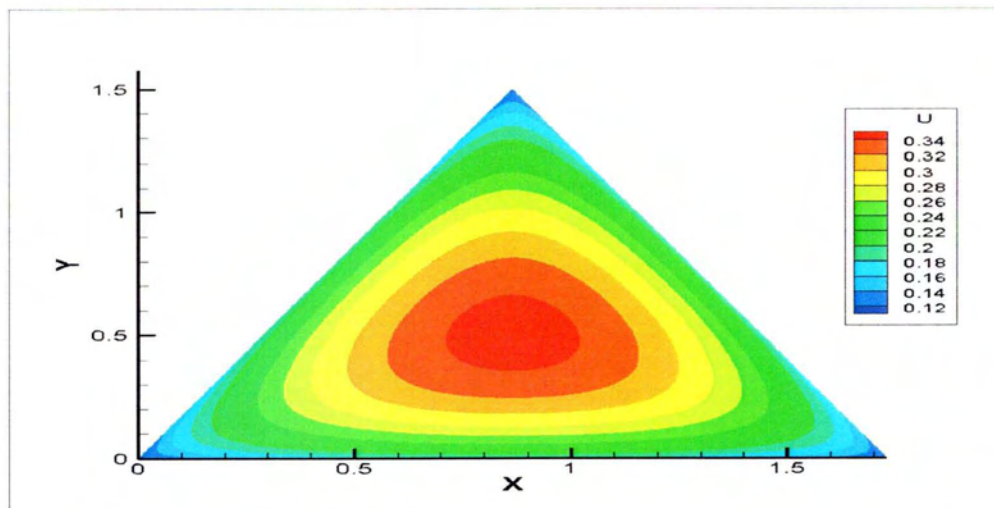
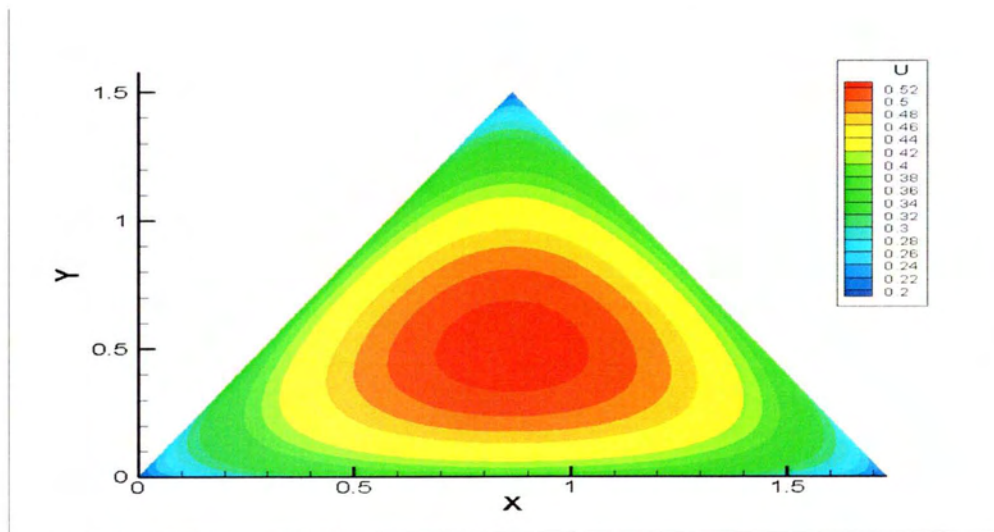
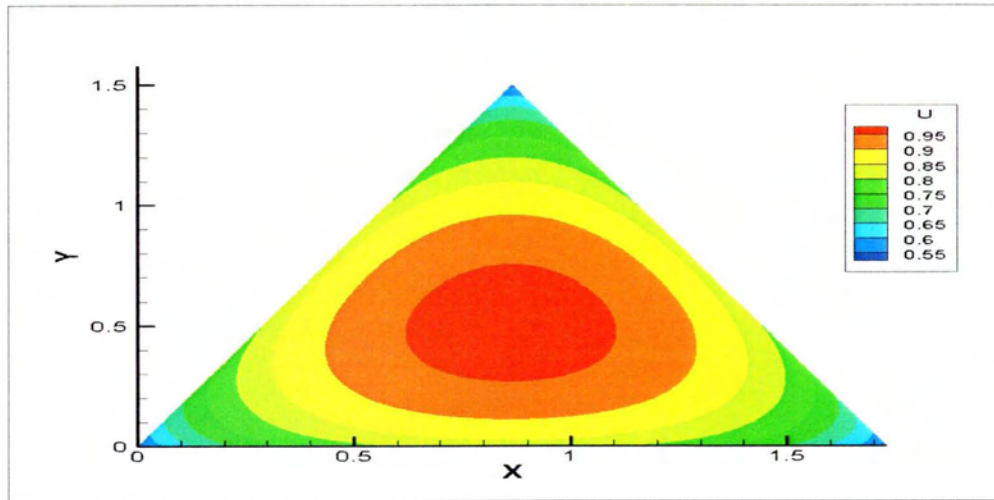
Σχήμα 11: Αδιάστατη παροχή στις συνθήκες Cercignani-Lampis για ισόπλευρο τρίγωνο

Επιπρόσθετα παρουσιάζονται κάποια αποτελέσματα για την κατανομή ταχύτητας. Τα Σχήματα 12-17 δείχνουν τις ισοϋψείς της ταχύτητας για το ισόπλευρο και το ορθογώνιο τρίγωνο. Η συμπεριφορά της λύσης στα δύο τρίγωνα είναι πανομοιότυπη. Οι μικρότερες τιμές παρατηρούνται προφανώς στις γωνίες του τριγώνου και οι υψηλότερες στο μέσο. Για σταθερές τιμές των συντελεστών a_t, a_n όσο αυξάνεται το δ , οι ταχύτητες κοντά στο τοίχωμα μειώνονται. Αυτό συμβαίνει διότι το αέριο έχει μικρότερο βαθμό αραιοποίησης και έτσι περισσότερα μόρια συγκρούονται με το ακίνητο τοίχωμα μεταφέροντας την πληροφορία. Επίσης οι μεταβολές της ταχύτητας από σημείο σε σημείο γίνονται πιο έντονες και η μέγιστη ταχύτητα αυξάνεται αρκετά.

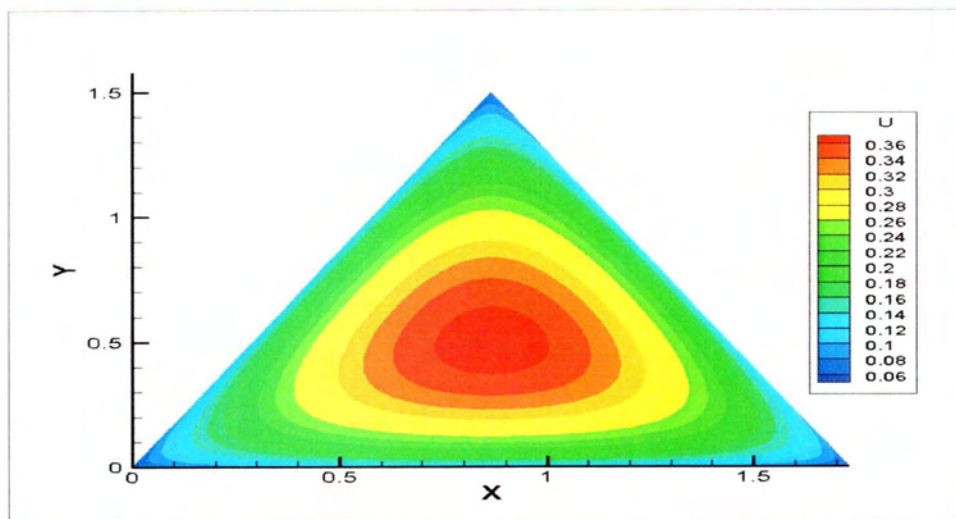
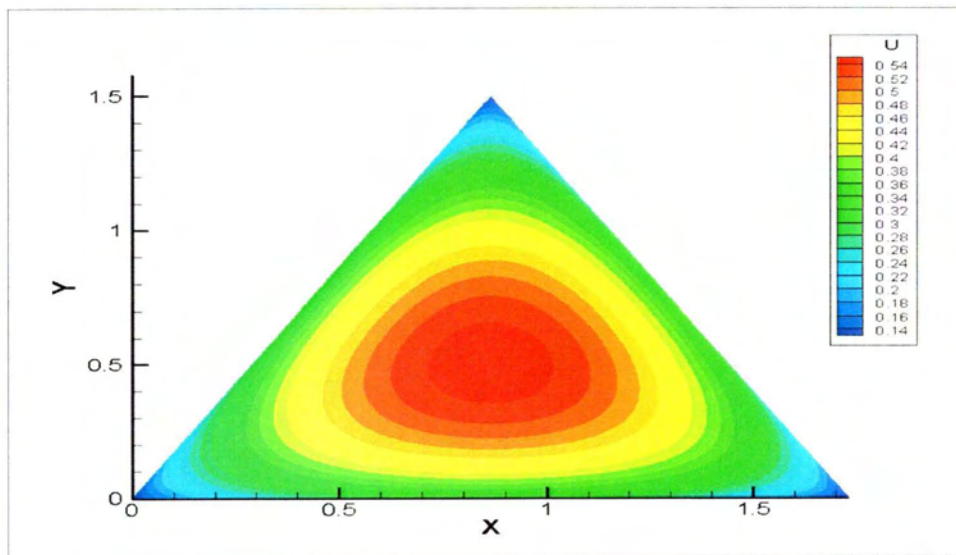
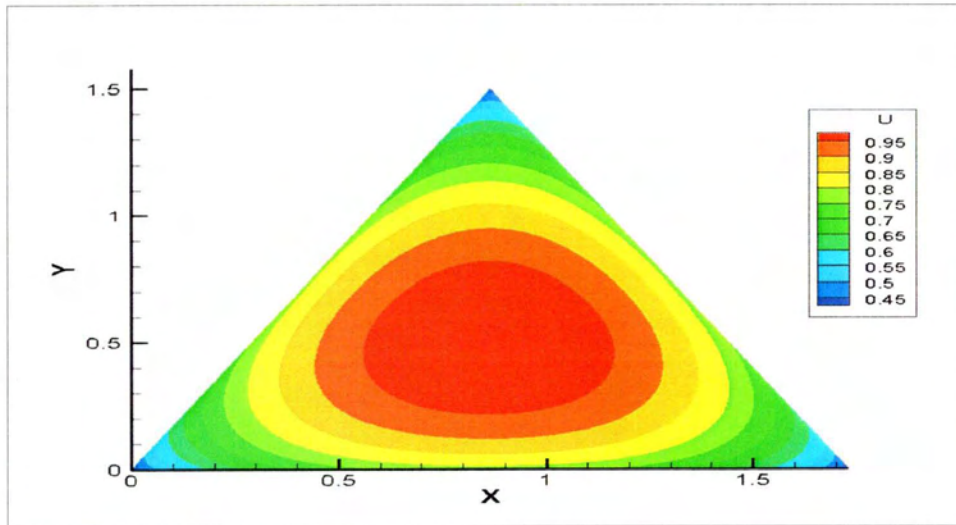
Οι μεταβολές αυτές αυξάνονται ειδικά για μικρές τιμές του a_t . Αντίθετα όταν $a_t=1.5$ οι αποκλίσεις είναι πιο ομαλές. Όσο για την ολίσθηση της ταχύτητας στο τοίχωμα, αυξάνεται για μικρό a_t και διαφέρει σημαντικά κατά μήκος των τοιχωμάτων (υψηλή στο μέσο του τοιχώματος και μικρή στα άκρα), ενώ μειώνεται εντυπωσιακά για $a_t=1.5$ και αποκτά σχεδόν σταθερή τιμή κατά

μήκος. Μάλιστα μόλις στην τιμή $\delta = 5$, που προδίδει ακόμα αξιοσημείωτο βαθμό αραιοποίησης, η ολίσθηση μηδενίζεται ουσιαστικά.

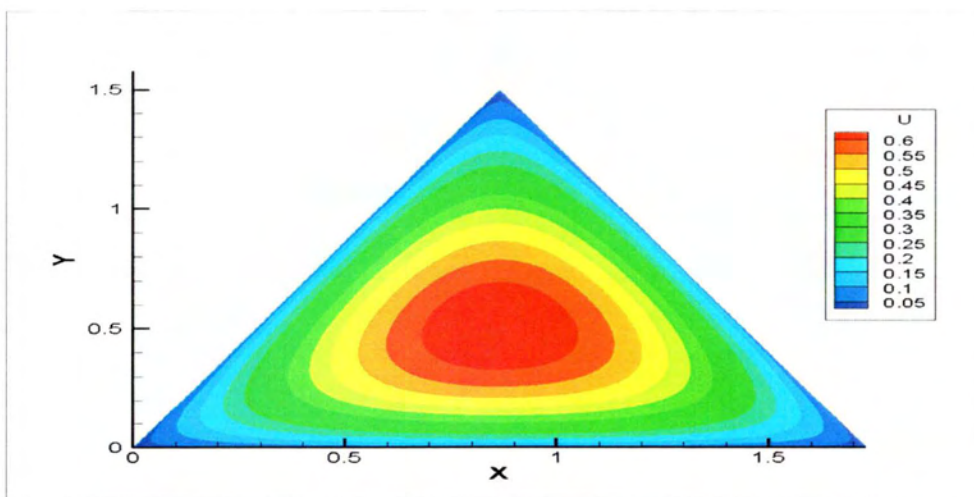
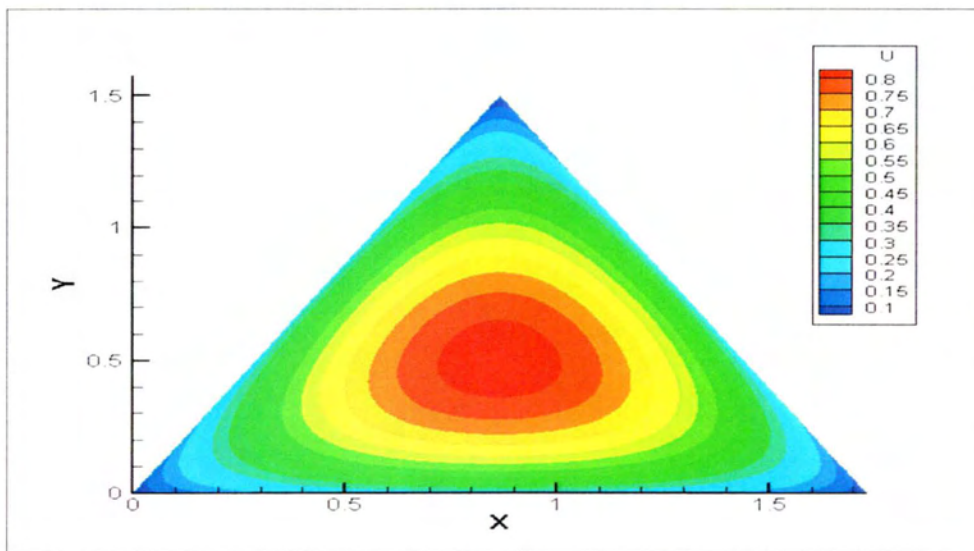
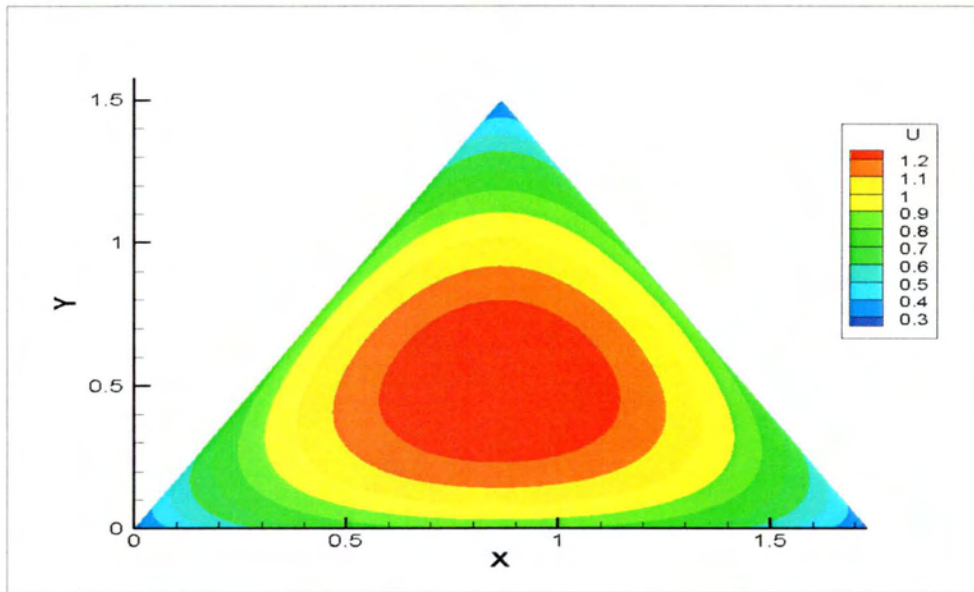
Τέλος παρατηρείται ότι στην ορθή γωνία στην περίπτωση του ισοσκελούς τριγώνου, η ταχύτητα είναι πιο υψηλή από ότι στις υπόλοιπες γωνίες με αποτέλεσμα η μέγιστη ολίσθηση στα κάθετα τοιχώματα να μην εμφανίζεται στο μέσο όπως στην υποτείνουσα, αλλά πριν από αυτό. Η ροή παρεμποδίζεται λιγότερο στην περιοχή της ορθής γωνίας λόγω ασθενέστερων διατμητικών τάσεων, ειδικά όταν $a_t = 0.5$ όπου η ταχύτητα εκεί είναι αισθητά υψηλότερη.



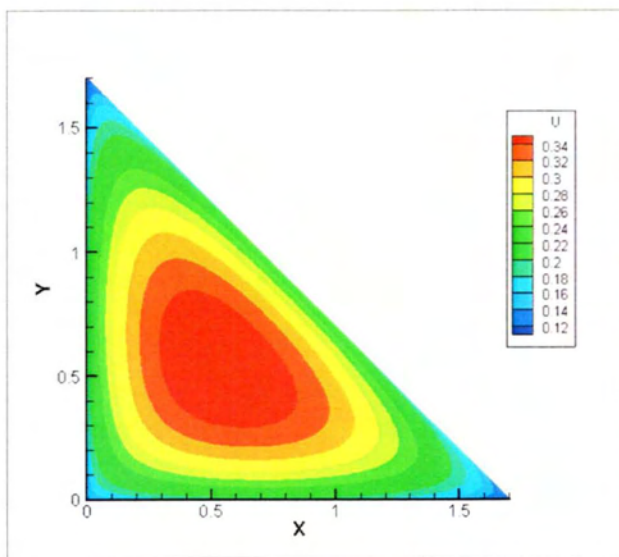
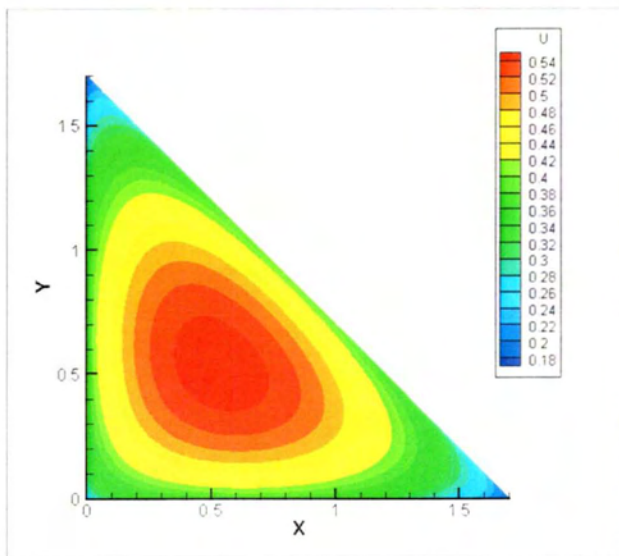
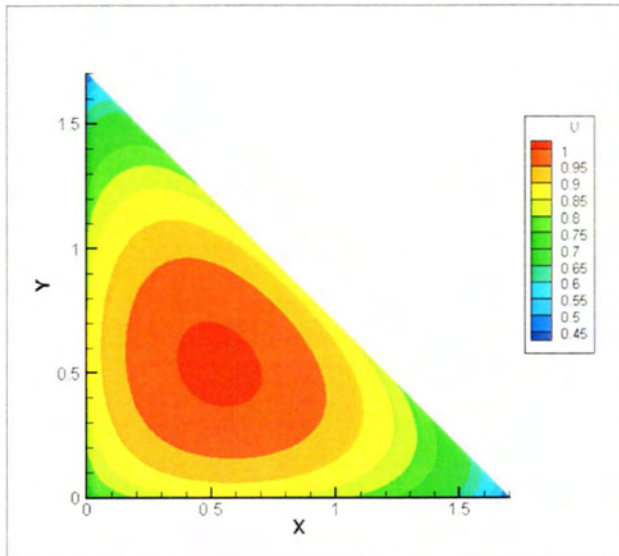
Σχήμα 12: Ισοϋψείς ταχύτητας σε ισόπλευρο τρίγωνο για $\delta = 0.1$ και συντελεστή $\alpha_i = 0.5$ (επάνω) $\alpha_i = 1$ (μέση) $\alpha_i = 1.5$ (κάτω)



Σχήμα 13: Ισοϋψείς ταχύτητας σε ισόπλευρο τρίγωνο για $\delta = 1$ και συντελεστή $\alpha_i = 0.5$ (κάτω) $\alpha_i = 1$ (μέση) $\alpha_i = 1.5$ (επάνω)

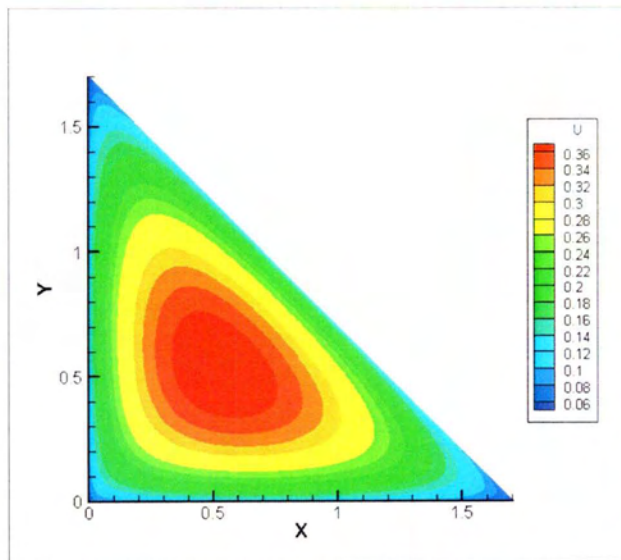
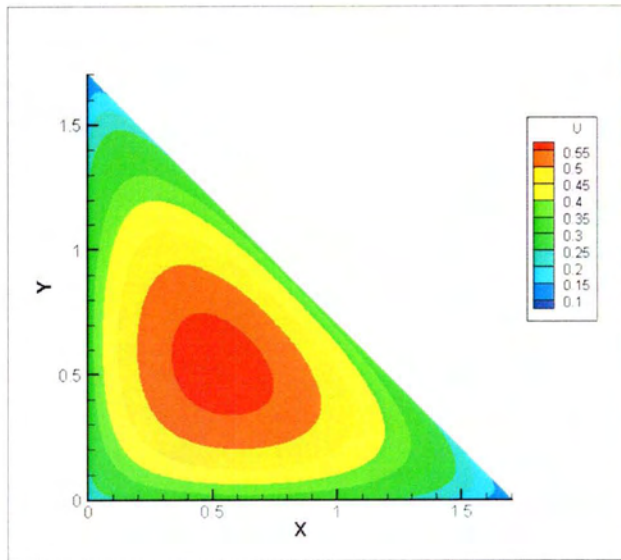
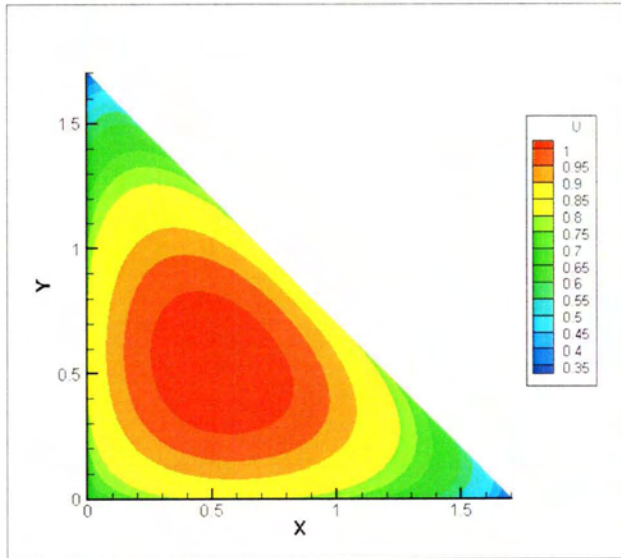


Σχήμα 14: Ισοϋψείς ταχύτητας σε ισόπλευρο τρίγωνο για $\delta = 5$ και συντελεστή $\alpha_i = 0.5$ (κάτω) $\alpha_i = 1$ (μέση) $\alpha_i = 1.5$ (επάνω)



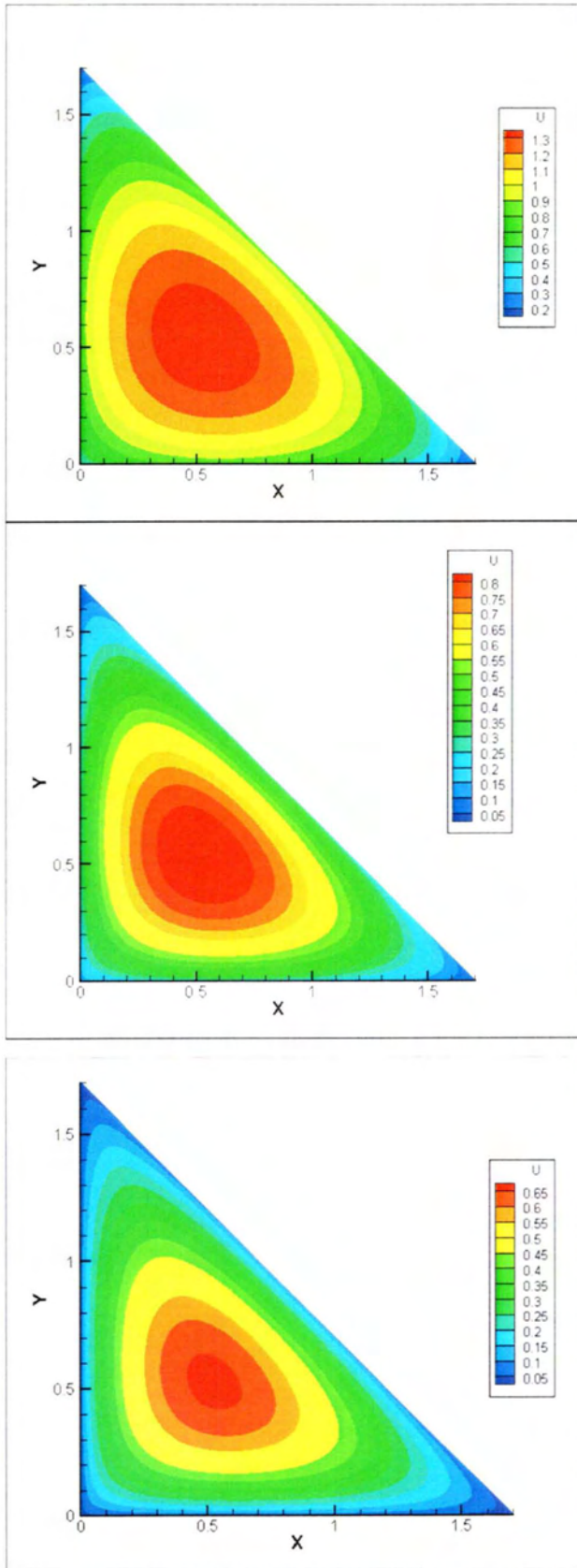
Σχήμα 15: Ισοψείς ταχύτητας σε ορθογώνιο ισοσκελές για $\delta = 0.1$ και συντελεστή

$\alpha_i = 0.5$ (επάνω) $\alpha_i = 1$ (μέση) $\alpha_i = 1.5$ (κάτω)



Σχήμα 16: Ισοψείς ταχύτητας σε ορθογώνιο ισοσκελές για $\delta = 1$ και συντελεστή

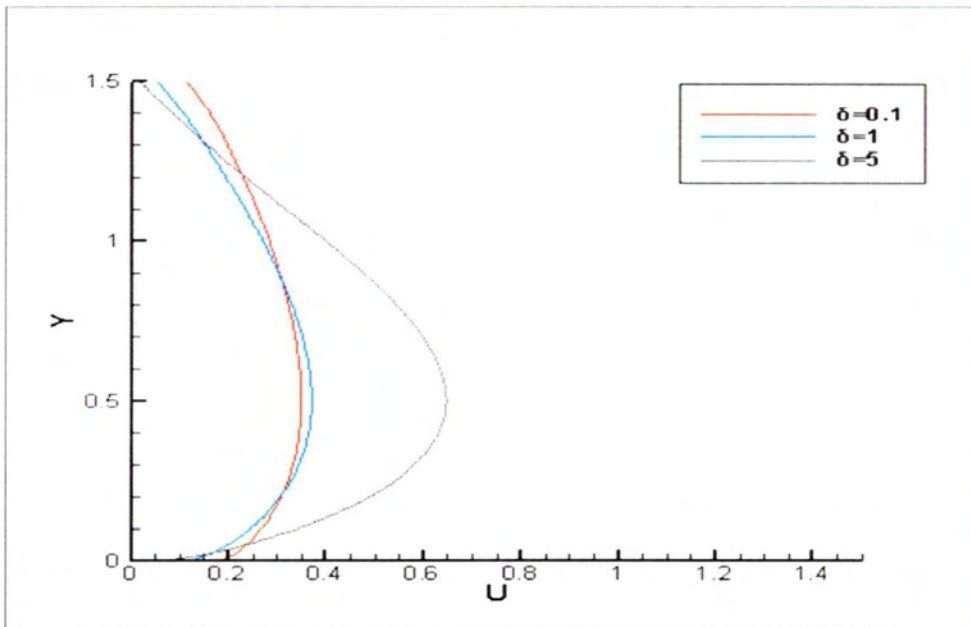
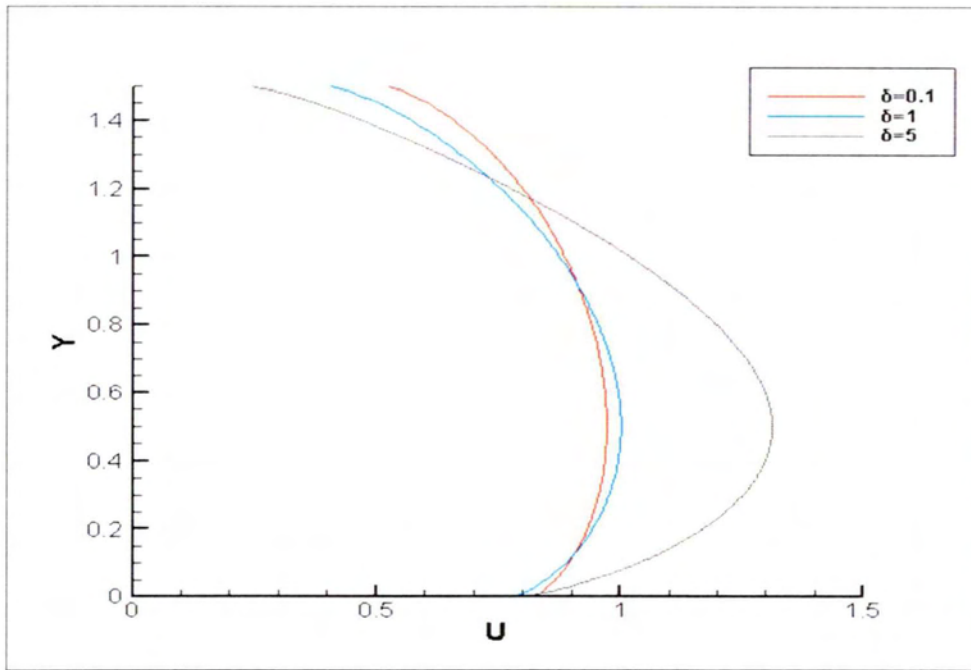
$\alpha_t = 0.5$ (επάνω) $\alpha_t = 1$ (μέση) $\alpha_t = 1.5$ (κάτω)



Σχήμα 17: Ισοψείς ταχύτητας σε ορθογώνιο ισοσκελές για $\delta = 5$ και συντελεστή

$\alpha_t = 0.5$ (επάνω) $\alpha_t = 1$ (μέση) $\alpha_t = 1.5$ (κάτω)

Τέλος στο Σχήμα 18 φαίνεται το προφίλ της ταχύτητας κατά μήκος του άξονα συμμετρίας για το ισόπλευρο τρίγωνο και τις περιπτώσεις όπου $\alpha_t = 1.5$ και $\alpha_t = 0.5$. Και στις δύο περιπτώσεις οι μορφές των καμπυλών είναι παρόμοιες με εκείνες που αντιστοιχούν σε συνθήκες Maxwell: για $\delta = 5$ η καμπύλη είναι παραβολοειδής ενώ για μικρά δ γίνεται πιο ευθύγραμμη. Επίσης όσο μεγαλώνει το δ , η ολίσθηση στην κορυφή μειώνεται αισθητά σε σχέση με το κάτω τοίχωμα στο οποίο παραμένει στα ίδια επίπεδα. Η επίδραση της παραμέτρου αραιοποίησης στην ολίσθηση είναι εντονότερη στην περίπτωση $\alpha_t = 0.5$. Όταν ισχύει $\alpha_t = 1.5$, η ολίσθηση είναι σε κάθε περίπτωση 3-4 φορές μικρότερη από την περίπτωση $\alpha_t = 0.5$ και τελικά στην κορυφή παίρνει αμελητέες τιμές. Είδικα για $\delta = 5$.



Σχήμα 18: Προφίλ ταχύτητας για ισόπλευρο τρίγωνο κατά μήκος του άξονα συμμετρίας
 όταν $\alpha_f = 0.5$ (επάνω) και $\alpha_f = 1.5$ (κάτω)

5.3 Ροή σε αγωγό τραπεζοειδούς διατομής

Οι υπολογισμοί που διεξήχθησαν για τον αγωγό τριγωνικής διατομής στην προηγούμενη παράγραφο έχουν γίνει και για την περίπτωση μιας διατομής με σχήμα ισοσκελούς τραπεζίου με γωνία 63.43 και λόγο μικρής προς μεγάλης βάσης ίσο με $1/2$. Οι παράμετροι που ίσχυαν προηγουμένως ισχύουν και τώρα. Στον πίνακα 5 παρουσιάζονται αποτελέσματα για την αδιάστατη παροχή ανάλογα με τις τιμές των παραμέτρων. Η συμπεριφορά τους σε σχέση με τους συντελεστές μεταφοράς και το δ είναι πανομοιότυπη με αυτή για την τριγωνική διατομή αλλά οι τιμές της παροχής σε κάθε περίπτωση είναι μικρότερες, κυρίως για μικρές τιμές του α_i και υψηλά δ

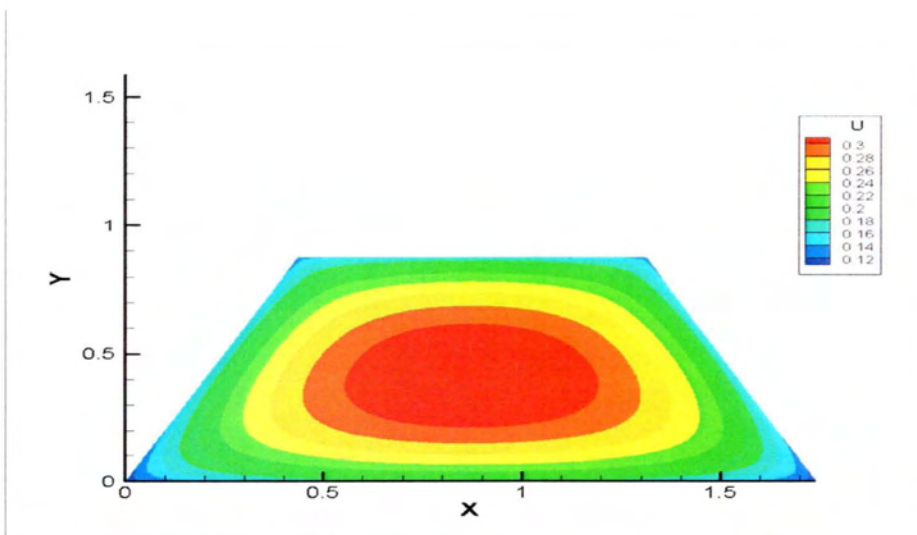
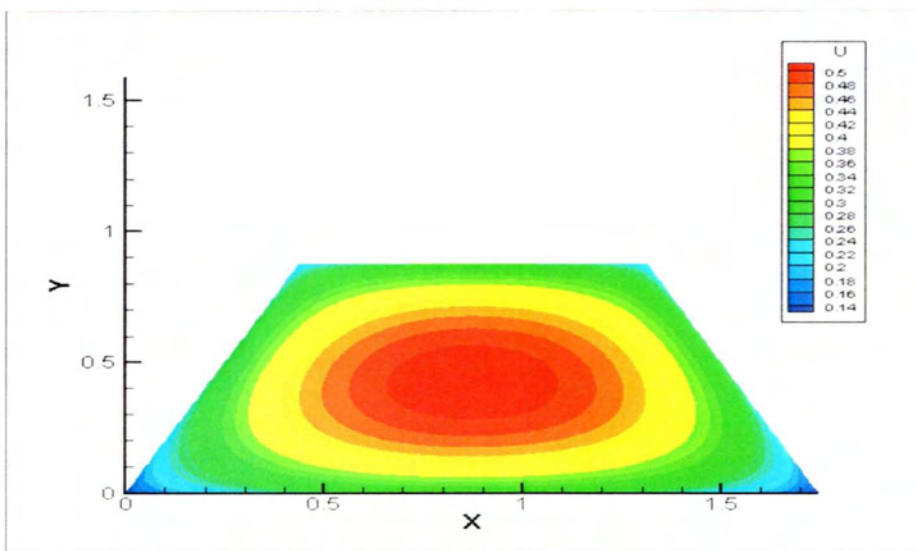
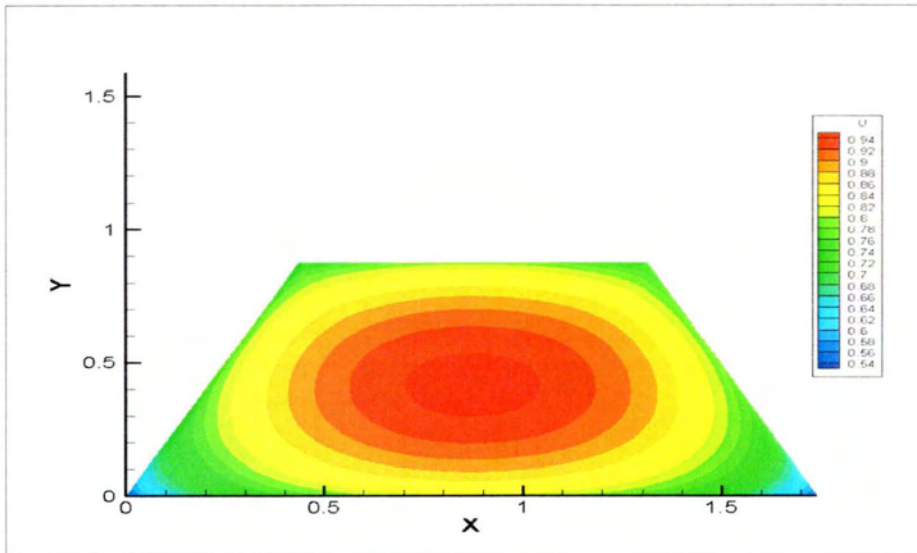
Στα Σχήματα 19-21 φαίνονται οι ισοϋψείς της ταχύτητας για τη τραπεζοειδή διατομή. Προφανώς οι μέγιστες ταχύτητες εμφανίζονται στο μέσο του αγωγού και οι ελάχιστες στα άκρα. Φαίνεται ότι η ταχύτητα μεταβάλλεται από σημείο σε σημείο πιο ομαλά σε σχέση με το τρίγωνο ειδικά όταν $\alpha_i = 1.5$. Στο πάνω τοίχωμα οι γωνίες είναι αμβλείες επομένως παρατηρείται το ίδιο φαινόμενο που ισχύει για την ορθή γωνία του τριγώνου, δηλαδή οι ταχύτητες στην περιοχή είναι υψηλότερες από ότι στις κάτω γωνίες για μικρές τιμές του δ . Για αυτό το λόγο στα πλευρικά τοιχώματα η μέγιστη ταχύτητα εμφανίζεται πάνω από το μέσο και κοντά στην οροφή. Επιπρόσθετα η ταχύτητα στο πάνω τοίχωμα μεταβάλλεται ελάχιστα όταν $\alpha_i = 1$ και το δ είναι μεγαλύτερο ή ίσο του 1. Όταν αυξάνεται περαιτέρω το δ η ίδια συμπεριφορά παρατηρείται και για την μικρότερη τιμή $\alpha_i = 0.5$

Επιπρόσθετα παρουσιάζεται στο Σχήμα 22 το προφίλ της ταχύτητας κατά μήκος του άξονα συμμετρίας για τις περιπτώσεις $\alpha_i = 1.5, \alpha_i = 0.5$ και διαδοχικές τιμές της παραμέτρου αραιοποίησης δ . Η ολίσθηση της ταχύτητας είναι πάντοτε σχεδόν ίση στα δύο οριζόντια τοιχώματα. Επίσης φαίνεται να εξαρτάται ελάχιστα από το δ , ειδικά στην περίπτωση $\alpha_i = 1.5$. Τέλος το προφίλ της ταχύτητας πλησιάζει στο παραβολικό σχήμα ακόμα και για την τιμή $\delta = 0.1$. Αυτή η συμπεριφορά έρχεται σε αντίθεση με τα αποτελέσματα για το ισόπλευρο τρίγωνο, όπου η ολίσθηση μειωνόταν αρκετές φορές όσο αυξανόταν το δ και το

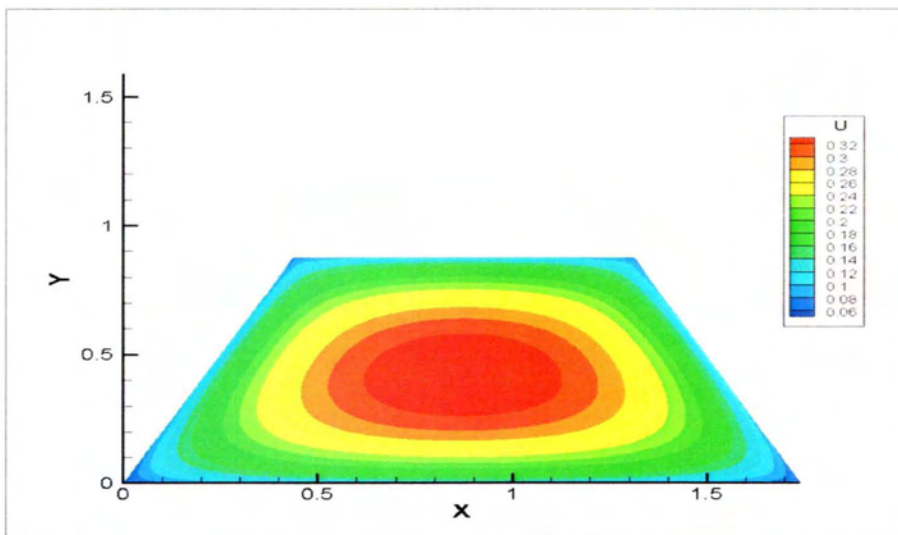
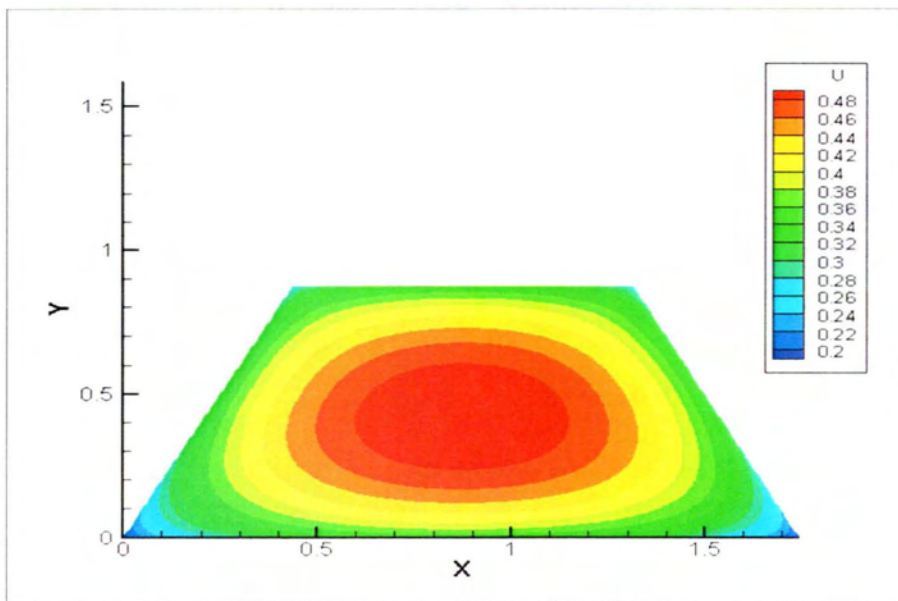
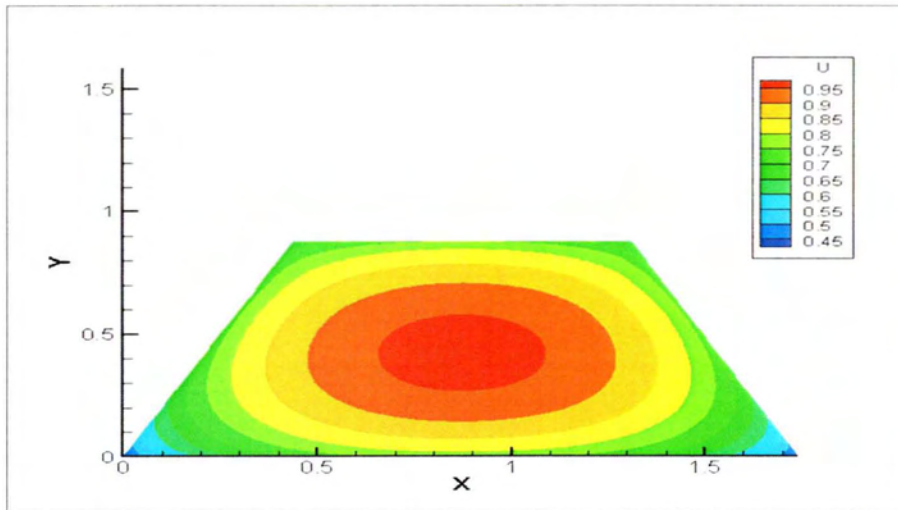
προφίλ της ταχύτητας έτεινε προς μία γραμμή στις μικρές τιμες του δ . Επίσης η ολίσθηση στο μέσο του αγωγού ήταν μικρότερη από ότι στο ισόπλευρο τρίγωνο σε όλες τις περιπτώσεις.

Πίνακας 5 : Αδιάστατη παροχή για ροή σε αγωγό με διατομή ισοσκελούς τραπεζίου
($f=63.43$, $\beta/B=0.5$)

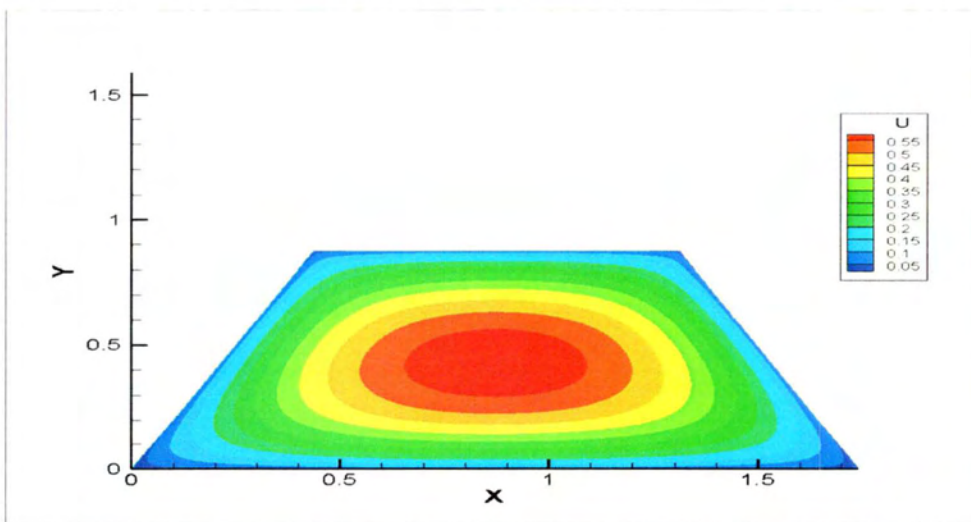
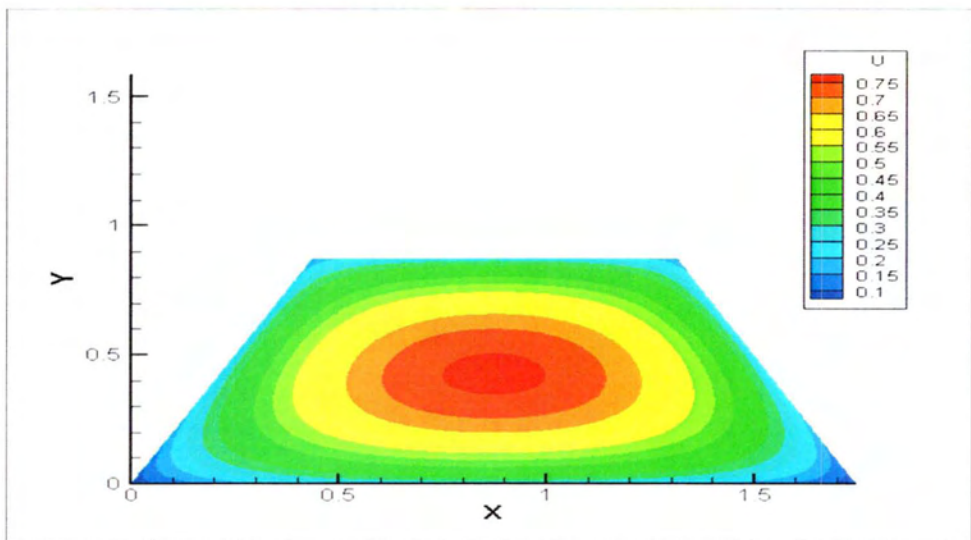
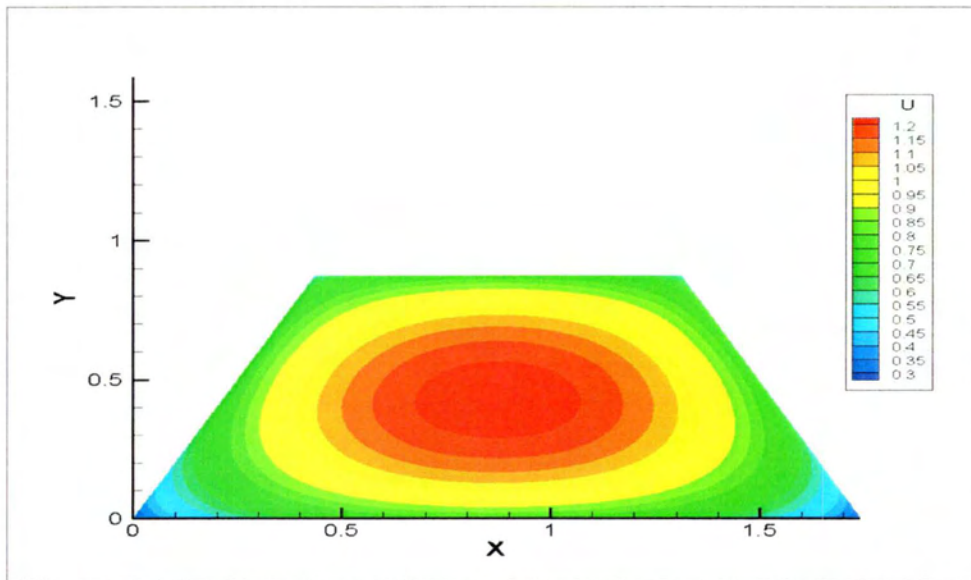
δ	α_t / α_n	0.5	0.75	1
0.1	0.25	3.565	3.535	3.504
	0.5	1.748	1.734	1.721
	1	0.827	0.827	0.827
	1.5	0.477	0.487	0.498
	1.75	0.341	0.356	0.371
1	0.25	3.474	3.469	3.463
	0.5	1.695	1.692	1.689
	1	0.792	0.792	0.792
	1.5	0.459	0.463	0.466
	1.75	0.343	0.348	0.353
5	0.25	3.712	3.711	3.711
	0.5	1.926	1.925	1.924
	1	1.000	1.000	1.000
	1.5	0.677	0.678	0.679
	1.75	0.576	0.577	0.578
10	0.25	4.079	4.077	4.075
	0.5	2.269	2.267	2.265
	1	1.33	1.33	1.33
	1.5	0.999	1.001	1.003
	1.75	0.898	0.901	0.905



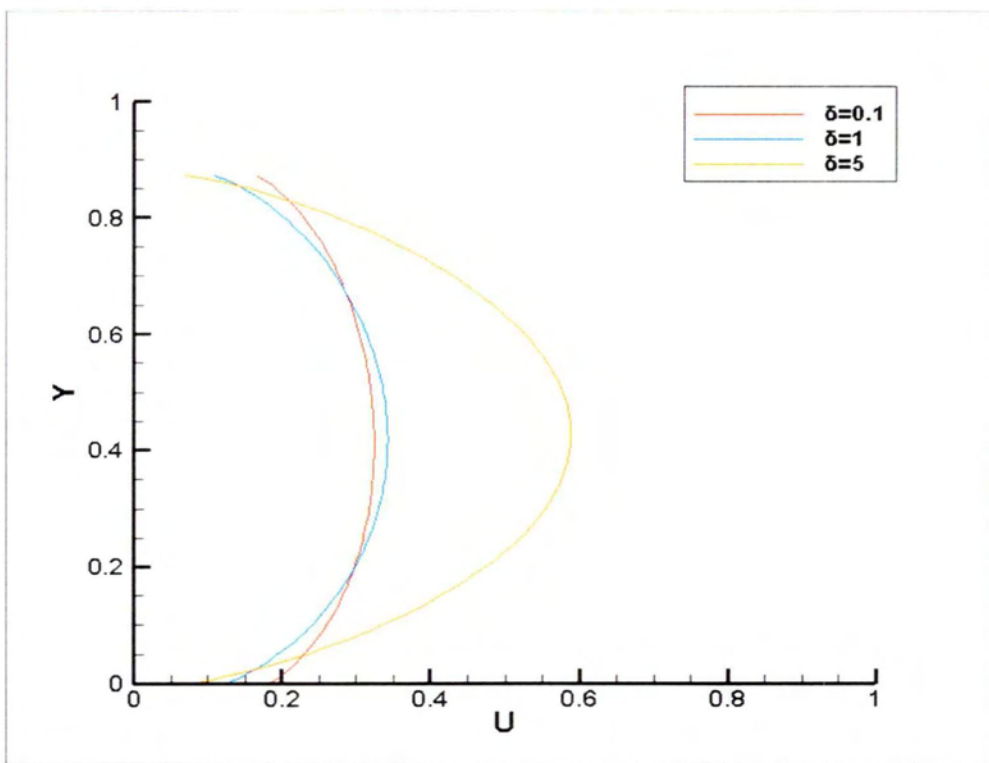
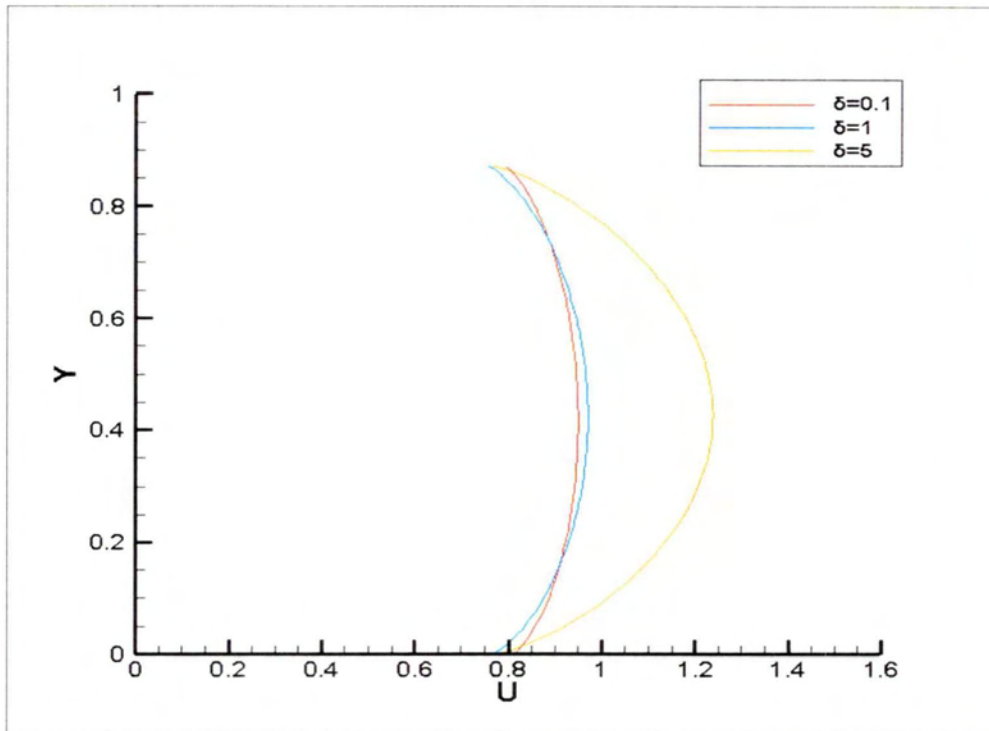
Σχήμα 19: Ισοψείς ταχύτητας σε ισοσκελές τραπέζιο για $\delta = 0.1$ και συντελεστή $\alpha_t = 0.5$ (επάνω) $\alpha_t = 1$ (μέση) $\alpha_t = 1.5$ (κάτω)



Σχήμα 20: Ισοψείς ταχύτητας σε ισοσκελές τραπέζιο για $\delta = 1$ και συντελεστή $\alpha_l = 0.5$ (επάνω) $\alpha_l = 1$ (μέση) $\alpha_l = 1.5$ (κάτω)



Σχήμα 21: Ισοϋψείς ταχύτητας σε ισοσκελές τραπέζιο για $\delta = 5$ και συντελεστή $\alpha_t = 0.5$ (επάνω) $\alpha_t = 1$ (μέση) $\alpha_t = 1.5$ (κάτω)



Σχήμα 22: Προφίλ ταχύτητας για ισοσκελές τραπέζιο όπου $\varphi=63.43$, $\beta/B=0.5$ κατά μήκος του άξονα συμμετρίας όταν $\alpha_t = 0.5$ (επάνω) και $\alpha_t = 1.5$ (κάτω)

5.4 Σύγκριση με πειράματα

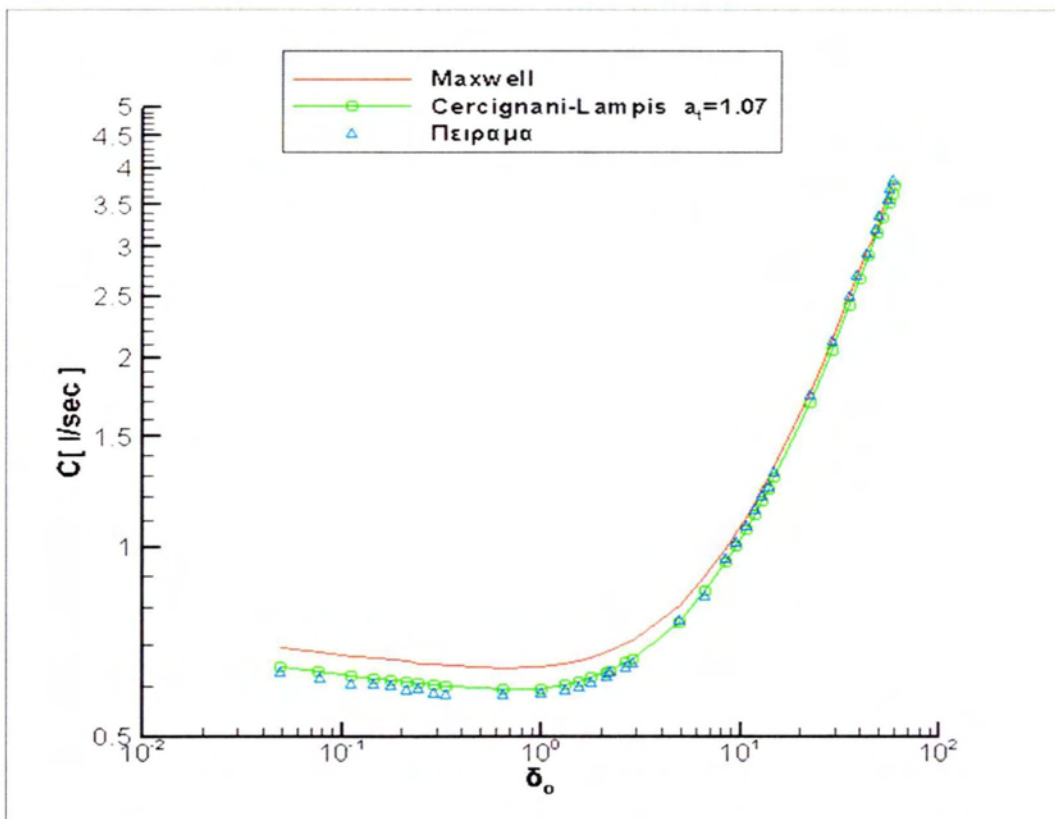
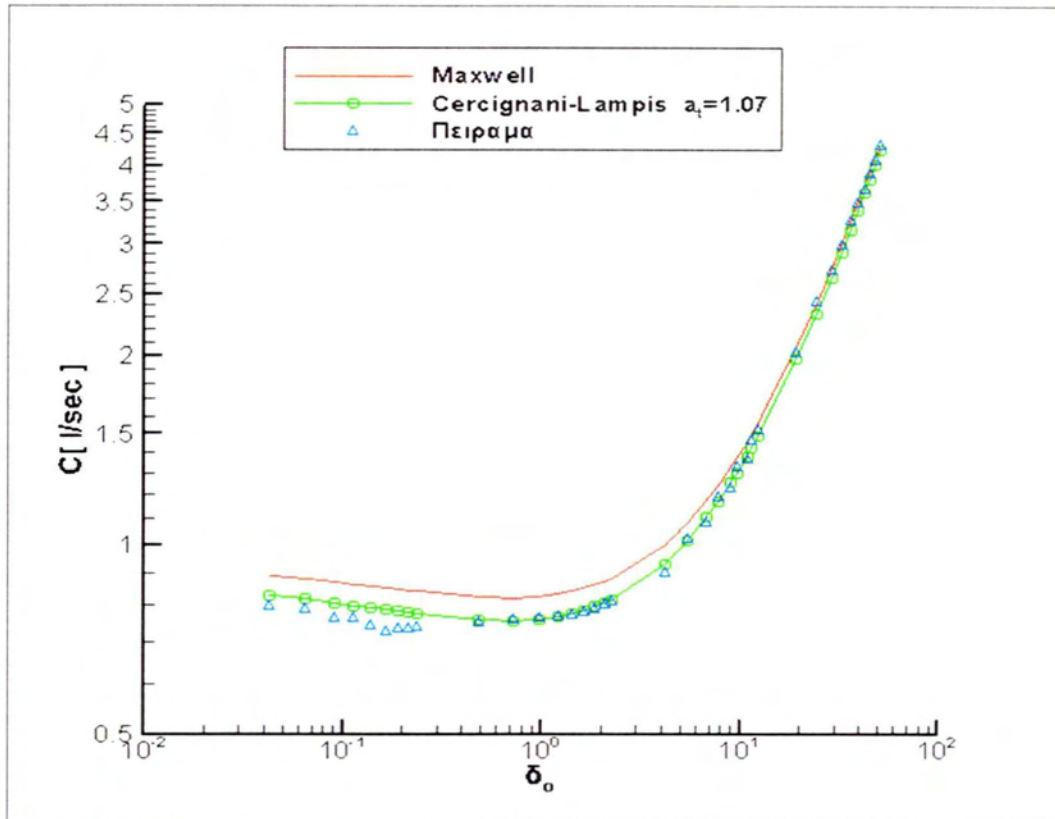
Η ροή στη μεταβατική περιοχή διαμέσου διάφορων μικροαγωγών έχει διερευνηθεί θεωρητικά και πειραματικά στο [37]. Η πειραματική διάταξη περιγράφεται εκτενώς στην εργασία εκείνη. Επιβάλλει μια σταθερή μαζική παροχή διαμέσου ενός μικροαγωγού και μετράει την διαφορά πίεσης στην είσοδο και στην έξοδο του. Με τα δεδομένα που λαμβάνονται μπορεί να υπολογιστεί η ογκομετρική παροχή μέσω της σχέσης (3.3.5). Η σταθερή παροχή στη σήραγγα δοκιμών δίνεται από μια μονάδα τροφοδοσίας που συνδέεται με μια δεξαμενή αποθήκευσης όπου μετράται η θερμοκρασία και η πίεση του ρευστού. Η μονάδα αποτελείται από πέντε ελεγκτές ροής που τοποθετούνται παράλληλα. Συνολικά επιτυγχάνεται παροχή μεταξύ 0.02 και 11111 $\frac{\text{cm}^3}{\text{min}}$. Στη δεξαμενή βρίσκονται τρία μανόμετρα που μετρούν πιέσεις της τάξης των 1000, 10 και 1 Torr αντίστοιχα, ενώ υπάρχει και ένα όργανο Bayard-Alpert με κλίμακα μεταξύ 10^{-2} και 10^{-10} mbar. Η ενεργή διατομή στην έξοδο της δεξαμενής είναι πολύ μεγαλύτερη από αυτή του αγωγού, ώστε να ελαχιστοποιείται η διαφορά πίεσης μεταξύ των δύο. Είναι εξοπλισμένη με μια τετράγωνη φλάντζα εσωτερικής διαμέτρου 600 mm στην οποία συνδέεται η σήραγγα. Αν η διατομή του αγωγού είναι μικρότερη, εφαρμόζεται ειδικός αντάπτορας. Η έξοδος της σήραγγας συνδέεται με κύλινδρο ο οποίος φέρει επίσης τρία μανόμετρα, πανομοιότυπο όργανο Bayard-Alpert καθώς και τις αντλίες κενού που διατηρούν τη σήραγγα σε συνθήκες υποπίεσης. Ο κύλινδρος τοποθετείται κατάλληλα, ώστε να μπορεί να μετακινηθεί σε σχέση με την δεξαμενή τροφοδοσίας και να επιτυγχάνεται σύνδεση η οποία μπορεί να μην είναι ευθύγραμμη. Η όλη εγκατάσταση μπορεί να χρησιμοποιηθεί για πειράματα διάφορων εξαρτημάτων κενού σε κλίμακα 1:1.

Στην κινητική επίλυση εφαρμόστηκε η συνοριακή συνθήκη Maxwell με αποτελέσματα αρκετά κοντά στα πειραματικά. Η παρούσα εργασία έχει στόχο να υπολογίσει τις σωστές τιμές των παραμέτρων της συνθήκης Cercignani-Lampis για τις διατομές σε σχήμα ισοπλεύρου τριγώνου και ισοσκελούς τραπεζίου, οι οποίες θα επιτύχουν καλύτερη συμφωνία με τα πειράματα. Τα πειράματα έγιναν για αέριο άζωτο σε θερμοκρασία δωματίου 23°C . Οι χρησιμοποιημένοι αγωγοί

είχαν μήκος $L=1277\text{mm}$. Η τριγωνική διατομή είχε υδραυλική διάμετρο $D_h=17.06\text{mm}$ και η τραπεζοειδής $D_h=16.48\text{mm}$.

Αρχικά παρουσιάζεται στο Σχήμα 23 η σύγκριση των πειραμάτων και των κινητικών ογκομετρικών παροχών για συνθήκες CL και Maxwell. Οι πειραματικές τιμές συμβολίζονται με μπλε χρώμα και οι τιμές βάση του μοντέλου Maxwell με κόκκινο. Σε όλες τις καμπύλες η παροχή αυξομειώνεται ελάχιστα για $\delta < 3$. Ύστερα καθώς το αέριο γίνεται πιο πυκνό και αποκτά μεγαλύτερο όγκο, η παροχή παίρνει μια απότομη αύξηση.

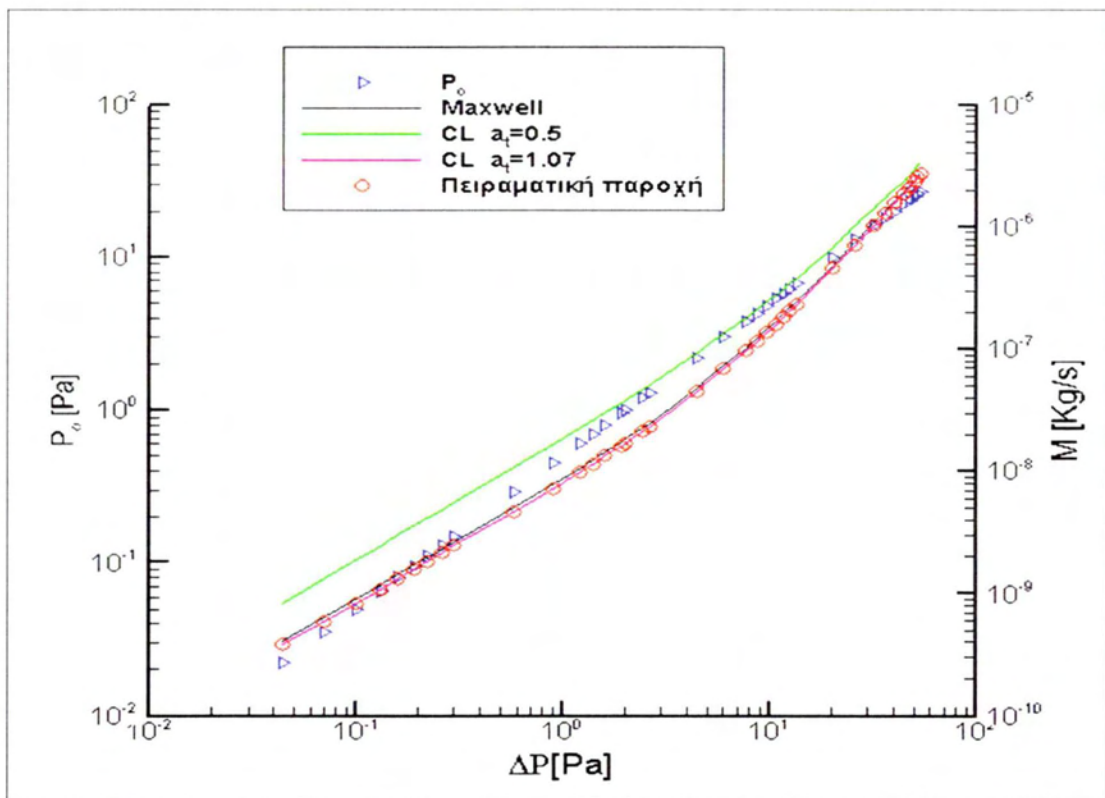
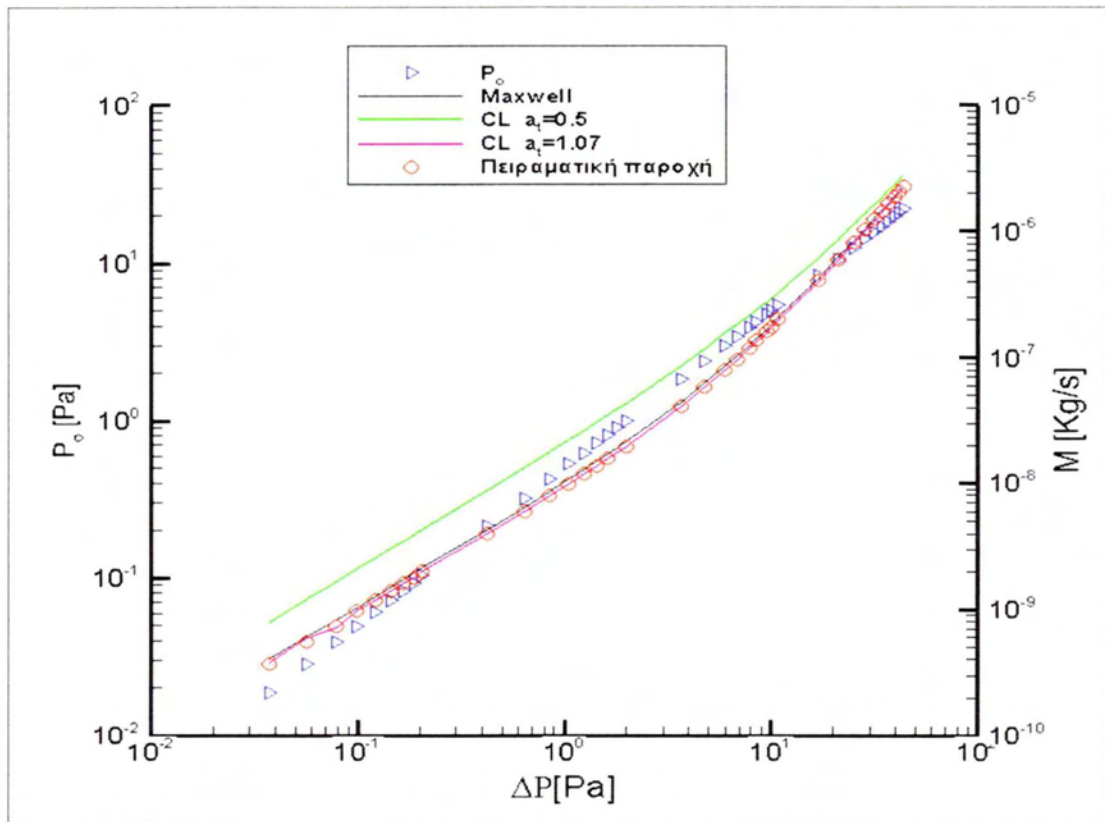
Φαίνεται ότι κυρίως για μικρά δ , οι παροχές που υπολογίζονται από το μοντέλο Maxwell είναι μεγαλύτερες των πραγματικών. Θεωρώντας ότι $\alpha_n=1$, (λόγω της αμελητέας επίδρασης του συντελεστή α_n στην παροχή) και ύστερα από δοκιμές, βρέθηκε ότι για $\alpha_f=1.07$ τα αποτελέσματα ταιριάζουν απόλυτα και στις δύο περιπτώσεις αγωγών. Για τον τετράγωνο αγωγό είχε βρεθεί η τιμή $\alpha_f=1.06$ στο [34]. Μπορεί να ειπωθεί λοιπόν ότι σε αγωγούς με τεχνολογικά λεία επιφάνεια εμφανίζεται το φαινόμενο του backscattering, δηλαδή τα μόρια του ρευστού που συγκρούονται στο τοίχωμα να ακολουθούν πορεία αντίθετη από αυτή της ροής. Όσο ο αριθμός Knudsen μειώνεται και πλησιάζουμε προς το υδροδυναμικό όριο, η συμπεριφορά αυτή παύει.



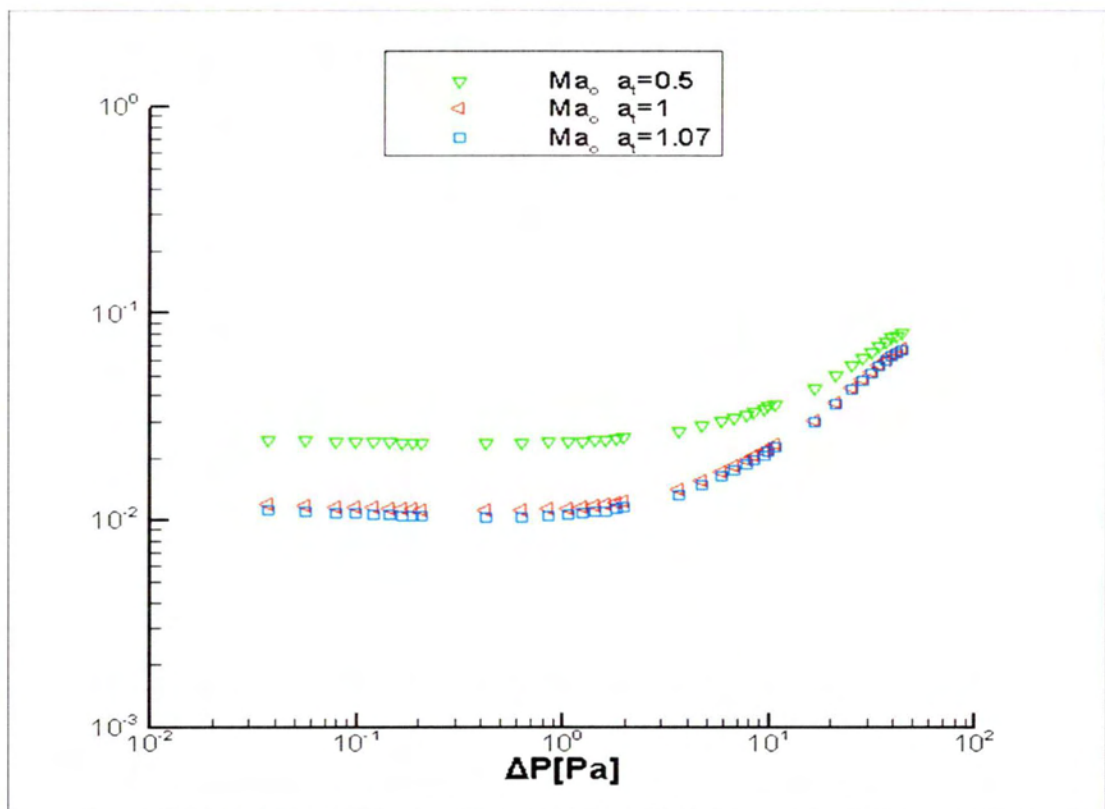
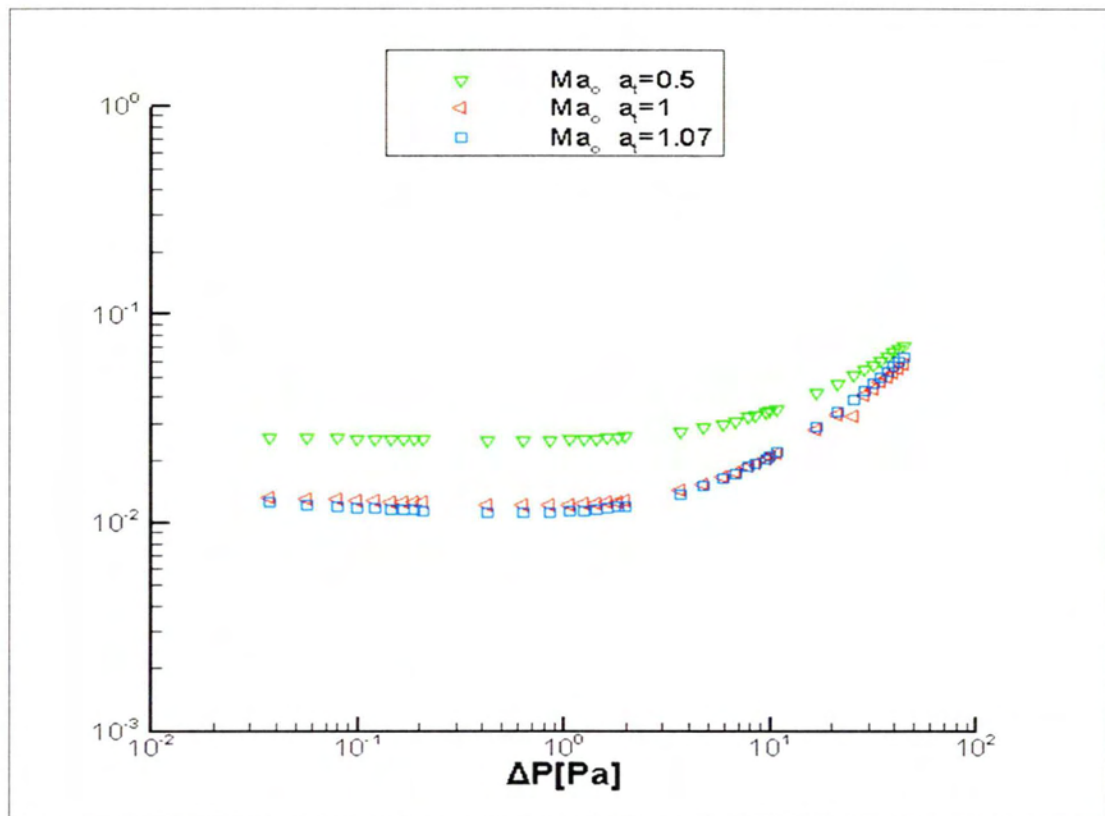
Σχήμα 23 : Σύγκριση ογκομετρικών παροχών με πείραμα για άζωτο N_2 στους $23^\circ C$ σε
ισόπλευρο τριγωνικό αγωγό (πάνω) και ισοσκελή τραπεζοειδή αγωγό
όπου $\varphi=63.43$, $\beta/B=0.5$ (κάτω)

Ακολουθεί η σύγκριση των μαζικών παροχών στο Σχήμα 24. Παρόλο που η αδιάστατη παροχή του τραπεζίου είναι μικρότερη από του ισόπλευρου τριγώνου, η πραγματική μαζική παροχή είναι λίγο υψηλότερη. Καταδεικνύονται με τα μικρά τριγωνάκια, τα ζευγάρια της διαφοράς πίεσης ΔP και της πίεσης αναφοράς P_o από κάθε εκτελεσμένο πείραμα. Για τις τιμές αυτές έχουν υπολογιστεί οι μαζικές παροχές στις περιπτώσεις $\alpha_i = 0.5$ (πράσινη γραμμή), $\alpha_i = 1$ (μαύρη γραμμή), $\alpha_i = 1.07$ (κόκκινη γραμμή). Βλέπουμε ότι και στις δύο διατομές η παροχή αυξάνεται μονότονα με την διαφορά πίεσης. Όσο μικρότερος είναι ο συντελεστής α_i , τόσο υψηλότερη η επιτευχθείσα παροχή. Όμως σε υψηλές διαφορές πίεσης η διαφορά μεταξύ των παροχών μειώνεται. Μια λογική εξέλιξη καθώς το αέριο γίνεται λιγότερο αραιοποιημένο. Τέλος φαίνεται πως για $\alpha_i = 1.07$ και πάλι οι κινητικές τιμές συμπίπτουν με εκείνες του πειράματος, τουλάχιστον για $\delta < 10$.

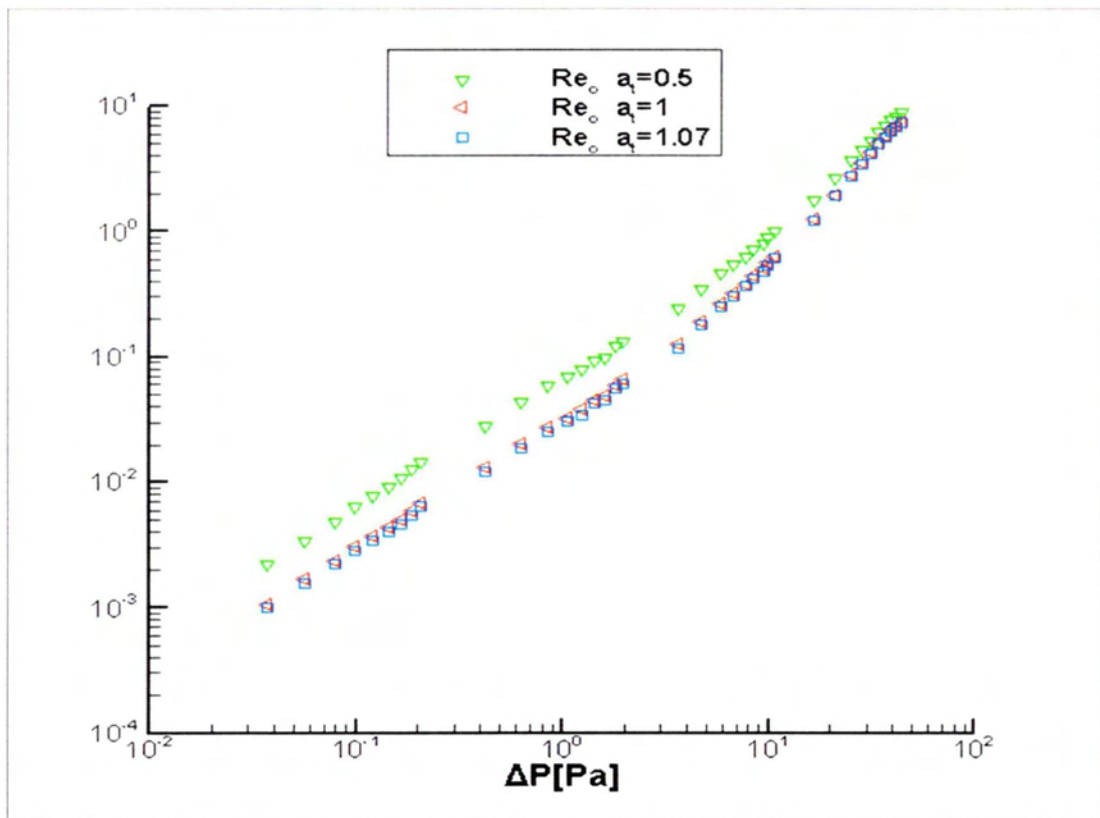
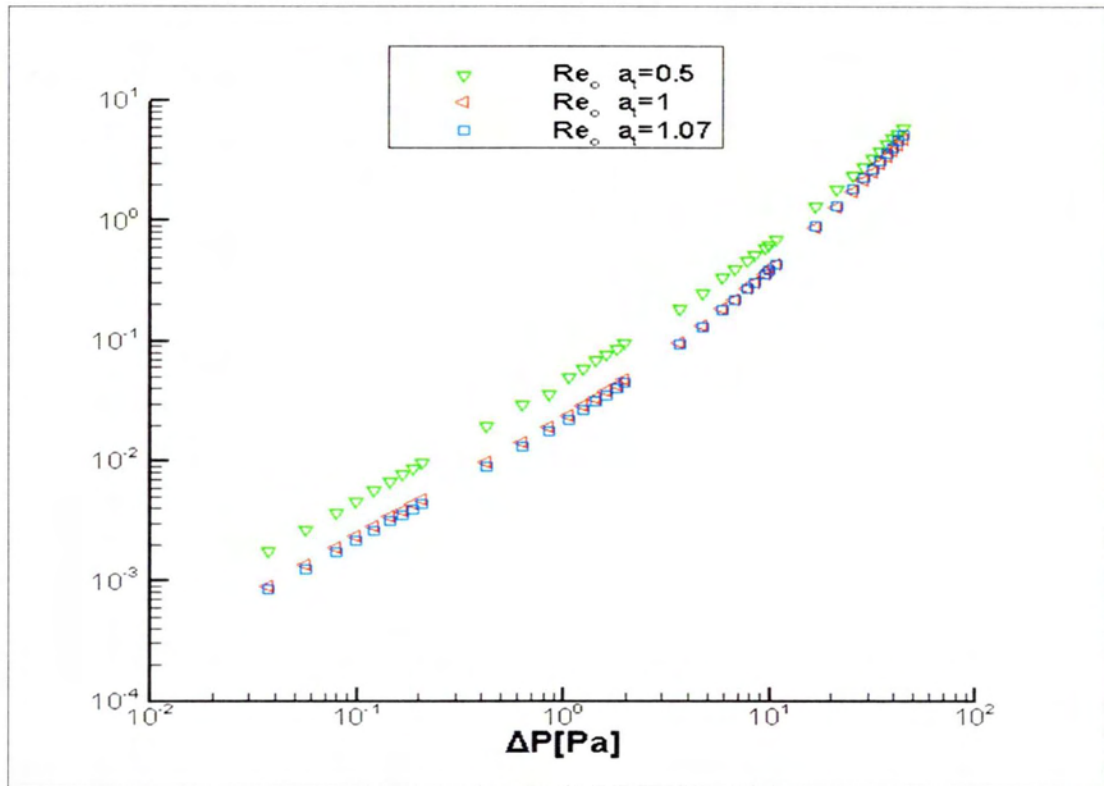
Τέλος έχουν υπολογιστεί στα Σχήματα 25, 26 οι αριθμοί Ma_o και Re_o στις συνθήκες αναφοράς μέσω των σχέσεων (3.3.7) και (3.3.8) για τις δύο διατομές και για κάθε ζευγάρι δεδομένων ΔP , P_o . Ο αριθμός Reynolds αυξάνεται όσο αυξάνεται το ΔP αλλά οι τιμές του είναι γενικά χαμηλές. Κυμαίνονται από 10^{-3} έως κόντα στο 6 για τρίγωνο και 8,5-9 για το τραπέζιο. Ο αριθμός Mach έχει επίσης ανοδική τάση. Στην περίπτωση όπου $\alpha_i = 0.5$ αυξάνεται πιο ομαλά ώσπου τελικά συμπίπτει με τις άλλες καμπύλες. Οι καμπύλες συμπίπτουν και για αριθμό Reynolds αφού το αέριο γίνεται πυκνό και ισχύει η κλασική ανάλυση. Αξίζει να σημειωθεί επίσης ότι για μεγάλα ΔP , οι αριθμοί Ma_o και Re_o αυξάνονται λίγο όταν $\alpha_i = 1.07$ σε σχέση με τις τιμές για $\alpha_i = 1$.



Σχήμα 24 : Μαζική παροχή αερίου N_2 στους $23^\circ C$ σε ισόπλευρο τριγωνικό (πάνω) και
 ισοσκελή τραπεζοειδή αγωγό όπου $\varphi=63.43$, $\beta/B=0.5$ (κάτω) για συνθήκη
 CL και σύγκριση με πείραμα.



Σχήμα 25 : Τοπικός αριθμός Mach για ροή αερίου N_2 στους $23^\circ C$ σε ισόπλευρο τριγωνικό (πάνω) και ισοσκελή τραπεζοειδή αγωγό όπου $\phi=63.43$, $\beta/B=0.5$ (κάτω)



Σχήμα 26 : Τοπικός αριθμός Reynolds για ροή αερίου N_2 στους $23^\circ C$ σε ισόπλευρο τριγωνικό (πάνω) και ισοσκελή τραπεζοειδή αγωγό όπου $\phi=63.43$, $\beta/B=0.5$ (κάτω)

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6: ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Ερευνήθηκε η επίδραση των συνθηκών Cercignani-Lampis στη ισοθερμοκρασιακή ροή διαμέσου τριγωνικού και τραπεζοειδή αγωγού λόγω διαφοράς πίεσης. Θεωρήθηκε το κινητικό μοντέλο BGK, το οποίο επιλύθηκε με τη μέθοδο των διακριτών ταχυτήτων. Η αξιοπιστία της εργασίας ελέγχθηκε μέσω σύγκρισης με παλαιότερη εργασία που αφορούσε ορθογώνιο αγωγό και τα αποτελέσματα ήταν παρόμοια. Παρατηρήθηκε ότι η εφαρμογή των γενικευμένων οριακών συνθηκών αυξάνει το υπολογιστικό κόστος και τη διάρκεια της επίλυσης, αλλά όχι σε απαγορευτικά μεγάλο βαθμό. Τα χαρακτηριστικά της ροής εξαρτώνταν κυρίως από τον συντελεστή μεταφοράς a_t και ελάχιστα από τον συντελεστή a_n . Συγκεκριμένα για σταθερό a_n , η αδιάστατη παροχή αυξάνοταν όσο μικραίνει το a_t . Όταν $a_t < 1$, η επίδραση του a_n στην παροχή ήταν αντιστρόφως ανάλογη της τιμής του, ενώ ήταν ανάλογη όταν $a_t > 1$. Βέβαια όσο αυξάνεται η παράμετρος αραιοποίησης και πλησιάζουμε στο συνεχές μέσο, η επίδραση των συντελεστών παύει. Συγκριτικά ο τραπεζοειδής αγωγός έδωσε μεγαλύτερες μαζικές παροχές σε ίδιες συνθήκες και λιγότερη ολίσθηση της ταχύτητας. Η διαφορά αυτή γινόταν ιδιαίτερα αισθητή σε ακραίες τιμές του συντελεστή a_t και $\delta > 10$. Σε προβλήματα μεταφοράς θερμότητας έχει παρατηρηθεί η αντίθετη συμπεριφορά. Σημαντικότερο ρόλο στα αποτελέσματα διαδραματίζει ο συντελεστής a_n .

Ύστερα από σύγκριση με πειραματικά δεδομένα, διαπιστώθηκε ότι η ροή αζώτου σε αγωγούς τέτοιων διατομών με "καθαρή" επιφάνεια περιγράφεται από ένα συντελεστή $\alpha = 1.07$ ελάχιστα μεγαλύτερο από εκείνο για τετράγωνη διατομή. Αυτό σημαίνει ότι στην πραγματικότητα προκαλείται το φαινόμενο του backscattering με αποτέλεσμα μια πιο «αργή» ροή. Τέλος στα πλαίσια της εργασίας παρουσιάστηκαν οι τοπικοί αριθμοί Knudsen, Mach και Reynolds συναρτήσει των δεδομένων πιέσεων σε διάφορες περιπτώσεις παραμέτρων. Φάνηκε ότι η ροή περνά από όλα τα στάδια αραιοποίησης εφόσον ο Knudsen

μειώνεται δραστικά. Επίσης η ροή είναι στρωτή σε όλες τις περιπτώσεις και οι τιμές του αριθμού Mach είναι σχετικά μικρές. Όταν $\alpha < 1$ για την ακρίβεια $\alpha_r = 0.5$, η αύξηση του Mach λόγω αύξησης της διαφοράς πίεσης είναι πιο ομαλή γεγονός που αιτιολογείται από τις μειωμένες τριβές και τελικά τη μικρότερη μέση ταχύτητα που επιτυγχάνεται.

Με τα δεδομένα της παρούσας εργασίας μπορεί να συνεχιστεί η δουλειά για τον προσδιορισμό των συντελεστών CL που χαρακτηρίζουν και άλλους συνδιασμούς αερίου-επιφάνειας. Επίσης μπορούν να διερευνηθούν περαιτέρω και να κατανοηθούν τα πλεονεκτήματα και τα μειονεκτήματα στη χρήση αγωγών με διαφορετικές γεωμετρίες.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

Παρακάτω παρα τίθεται ολόκληρος ο προγραμματιστικός κώδικας που αναπτύχθηκε για τις ανάγκες της εργασίας όσο αφορά την περίπτωση των τριγωνικών αγωγών μετα από αλλαγές στον υπάρχοντα κώδικα.

```
!
*****
*****
!-----
-----
!
1.      Parameter(Ns=3,NNs=201,Nt=208,NStep=360)
2.      Parameter(Int_type=2,NDV=16)
3.      Parameter(num_of_dimen_in=6)

4.      !      Ns:Number of sides
5.      !      NNs:Nodes per side
6.      Parameter(NNo=NNs*(NNs+1)/2)
7.      Parameter(NNel=(NNs-1)**2)

8.      Double precision, Dimension(50):: Rerf_par
9.      Double precision, Dimension(NNo):: X,Y,Cof,Ws
10.     Double precision,
11.     Dimension(NNo)::U,U_old,Strx,Strx_old,Stry,Stry_old
12.     Double precision, Dimension(NNo):: Ufor,Strxfor,Stryfor
13.     Double precision, Dimension(Ns):: X_Corner,Y_corner
14.     Double precision, Dimension(Ns):: A1,B1,C1
15.     Integer, Dimension(NNo):: K1,K2,K3,K4,K5,K6,N3,L1
16.     Double precision, Dimension(Nt):: Theta,S,Per
17.     Double precision Length1,Length2,Length3
18.     Real(8):: at,an,FiBC
19.     Integer::q1,q,q2,q3,M,K
20.     Real(8),allocatable::cx(:,:),cy(:,:),wclx(:,:,:),&
21.     wclx3(:,:,:),wcly(:,:,:),F(:,:,:)&
22.     ,cy2(:,:),cx2(:,:),cy3(:,:),cx3(:,:)
23.     Double precision, Allocatable, Dimension(:):: C,W

!      #####
!      ##      Discrete velocities calculation      ##
!      #####
!

24.     Call CPU_time(time_begin)
25.     Xp=1.0
26.     K_index=0
27.     BC=2
28.     Open(5, File='Results.dat')
```

```

!   Definicion of Pi
28.  Pi=ACos(-1.D0)
29.  SPi=Sqrt(Pi)
30.  Nc=16
31.  Open(1,File='Gauss_16.dat')
32.  Allocate(C(Nc),W(Nc))
33.  Do K=1,Nc
34.  Read(1,*) C(K),W(K)
35.  Enddo

36.  Allocate(F(NNo,Nc,Nt))
37.  if (BC==2) then
38.  Allocate(wclx(Nc,Nc,Nt,Nt),wclx3(Nc,Nc,Nt,Nt),wcly(Nc,Nc,&
39.  Nt,Nt),cx(Nc,Nt),cy(nc,Nt),cx2(Nc,Nt),cy2(Nc,Nt), &
40.  cx3(Nc,Nt),cy3(Nc,Nt))
41.  endif

42.  at=1
43.  an=1
44.  call sort(c,w,Nc)

!           #####
!           ##   User Input Data   ##
!           #####
!

! Definition of Angles
45.  Phi1=90d0*Pi/180d0
46.  Phi2=45d0*Pi/180d0
! Various valious for Delta
47.  Rerf_par(1)=0.0d-6
48.  Rerf_par(2)=1.0d-3
49.  Rerf_par(3)=1.0d-2
50.  Rerf_par(4)=1.0d-1
51.  Rerf_par(5)=5.0d-1
52.  Rerf_par(6)=1.0d+0
53.  Rerf_par(7)=1.5d+0
54.  Rerf_par(8)=2.0d+0
55.  Rerf_par(9)=3.0d+0
56.  Rerf_par(10)=4.0d+0
57.  Rerf_par(11)=5.0d+0
58.  Rerf_par(12)=8.0d+0
59.  Rerf_par(13)=1.0d+1
60.  Rerf_par(14)=2.0d+1
61.  Rerf_par(15)=5.0d+1
62.  Rerf_par(16)=1.0d+2
! Initial and final values for delta
63.  Open(2,File='Tec_data.dat')
64.  Write(2,*) 'TITLE = "Results"'
65.  Write(2,1012)
66.  write(2,1011) Ns,NNo
67.  Open(3,File='Ang_data.dat')
68.  Write(3,*) 'TITLE = "Results"'
69.  Write(3,1015)
70.  write(3,1014) Nt,Nt
71.  Open(4,File='Output_file.dat')
72.  Write(4,*) 'TITLE = "Results"'
73.  Write(4,1016)

```

```

! maximun number of iterations  Max=1.D+6
74.  Dt=2d0*Pi/Real (Nt)
75.  Err_ini=1.d-6 ! Convergence of scheme
!
!-----
-----
76.  Phi3=Pi-Phi1-Phi2

77.  Length1=5d-
78.  1*(DSin(Phi1)+DSin(Phi2)+DSin(Phi3))/(DSin(Phi2)*DSin(Phi3))
79.  Length2=5d-
80.  1*(DSin(Phi1)+DSin(Phi2)+DSin(Phi3))/(DSin(Phi1)*DSin(Phi3))
81.  Length3=5d-
82.  1*(DSin(Phi1)+DSin(Phi2)+DSin(Phi3))/(DSin(Phi1)*DSin(Phi2))

! Definition of corner points
83.  X_Corner(1)=0d0
84.  Y_Corner(1)=0d0
85.  X_Corner(2)=Length3
86.  Y_Corner(2)=0.0d0
87.  X_Corner(3)=Length2*DCos(Phi1)
88.  Y_Corner(3)=Length2*DSin(Phi1)

89.  Step1=Length1/Real (NNS-1)
90.  Step2=Length2/Real (NNS-1)
91.  Step3=Length3/Real (NNS-1)
92.  Emv=Step3*Step2*DSin(Phi1)*5d-1
93.  EmvT=Emv*(Real (NNS) -1d0)**2d0

!-----
-----
94.  I=0
95.  Do L1=1,NNS
96.  Xin=X_Corner(1)+Real (L1-1)*(X_Corner(3) -
97.  X_Corner(1))/Real (NNS-1)
98.  Yin=Y_Corner(1)+Real (L1-1)*(Y_Corner(3) -
99.  Y_Corner(1))/Real (NNS-1)
100. Do L2=1,NNS-L1+1
101. I=I+1
102. N3(I)=L1*NNS-L1*(L1-1)/2-(I-(L1-1)*NNS+(L1-1)*(L1-2)/2)+1
103. X(I)=Xin+(L2-1)*(X_Corner(2)-X_Corner(1))/Real (NNS-1)
104. Y(I)=Yin+(L2-1)*(Y_Corner(2)-Y_Corner(1))/Real (NNS-1)
105. L1(I)=L1

106. K1(I)=I+1
107. If(K1(I).gt.(L1*NNS-L1*(L1-1)/2))K1(I)=-2
108. K2(I)=I+NNS-L1+1
109. If(K2(I).gt.((L1+1)*NNS-L1*(L1+1)/2))K2(I)=-2
110. K3(I)=I+NNS-L1
111. If(K3(I).le.(L1*NNS-L1*(L1-1)/2))K3(I)=-2
112. K4(I)=I-1
113. If(K4(I).le.((L1-1)*NNS-(L1-1)*(L1-2)/2))K4(I)=-2
114. K5(I)=I-NNS+L1-2
115. If(K5(I).le.0)K5(I)=-2
116. K6(I)=I-NNS+L1-1
117. If(K6(I).le.0)K6(I)=-2

118. Write(2,1010)
119. I,L1,K1(I),K2(I),K3(I),K4(I),K5(I),K6(I),X(I),Y(I)

```

```

120. End Do
121. End Do
!-----
!Weights for the spatial integration
122. Do I=1,NNo
123. Ws(I)=6
124. if(K1(I).le.0.or.K2(I).le.0.or.K3(I).le.0.or.K4(I).le.0.
125. or.K5(I).le.0.or.K6(I).le.0)Ws(I)=Ws(I)/2d0
126. if(I.eq.1)Ws(I)=6d0*Phi1/(2d0*Pi)
127. if(I.eq.NNs)Ws(I)=6d0*Phi2/(2d0*Pi)
128. if(I.eq.NNo)Ws(I)=6d0*Phi3/(2d0*Pi)
129. End do
!-----
130. Do Lt=1,Nt
131. Theta(Lt)=(Real(Lt)-5d-1)*Dt
132. If(Theta(Lt).ge.0.and.Theta(Lt).lt.Phi1)then
133. Step=Step3
134. Par=Step1
135. Phi=Phi2
136. The=Theta(Lt)
137. Endif
138. If(Theta(Lt).ge.Phi1.and.Theta(Lt).lt.Phi1+Phi3)then
139. Step=Step2
140. Par=Step3
141. Phi=Phi1
142. The=Theta(Lt)-Phi1
143. Endif
144. If(Theta(Lt).ge.Phi1+Phi3.and.Theta(Lt).lt.Pi)then
145. Step=Step1
146. Par=Step2
147. Phi=Phi3
148. The=Theta(Lt)-Phi1-Phi3
149. Endif
150. If(Theta(Lt).ge.Pi.and.Theta(Lt).lt.Phi1+Pi)then
151. Step=Step3
152. Par=Step1
153. Phi=Phi2
154. The=Theta(Lt)-Pi
155. Endif
156. If(Theta(Lt).ge.Phi1+Pi.and.Theta(Lt).lt.Pi+Phi1+Phi3)then
157. Step=Step2
158. Par=Step3
159. Phi=Phi1
160. The=Theta(Lt)-Pi-Phi1
161. Endif
162. If(Theta(Lt).ge.Pi+Phi1+Phi3.and.Theta(Lt).lt.2d0*Pi)then
163. Step=Step1
164. Par=Step2
165. Phi=Phi3
166. The=Theta(Lt)-Pi-Phi1-Phi3
167. Endif
168. S(Lt)=Step*DSin(Phi)/DSin(Phi+The)
169. Per(Lt)=1d0-Step*DSin(Phi)*(DCos(Phi)/DSin(Phi)-
170. DCos(Phi+The)/DSin(Phi+The))/Par
171. Write(3,1013) Lt,S(Lt),Per(Lt)
172. End Do
!
```



```

!-----
-
!
173.  ii=num_of_dimen_in
!
174.  Delta=Rerf_par(ii)

175.  It=0

      !tangential and normal components of velocity for each wall
176.  Do M=1,Nc
177.  Do Lt=1,Nt
178.  cx(M,Lt)=c(M)*dcos(Theta(Lt))
179.  cy(M,Lt)=c(M)*dsin(Theta(Lt))
180.  cx2(M,Lt)=-c(M)*dcos(Theta(Lt)-Phi1-Pi/2)
181.  cy2(M,Lt)=-c(M)*dsin(Theta(Lt)-Phi1-Pi/2)
182.  cx3(M,Lt)=c(M)*dcos(Theta(Lt)+Phi2-Pi/2)
183.  cy3(M,Lt)=c(M)*dsin(Theta(Lt)+Phi2-Pi/2)
184.  End do
185.  End do

      ! weights for the Cercignani-Lampis BC

186.  Do M=1,Nc          !departing velocity magnitude
187.  Do K=1,Nc          !impinging velocity magnitude

188.  Do Lt=1,Nt        !departing velocity angle
189.  Do Lt2=1,Nt       !impinging velocity angle

190.  wclx(M,K,Lt,Lt2)=c(k)*dexp(C(k)**2)*dabs(cx2(k,Lt2))* &
191.  dexp(-( dabs(cx2(k,Lt2)) - dsqrt(1d0-
192.  an)*dabs(cx2(M,Lt)) )**2d0/an &
193.  + ( (1d0-at)*cy2(M,Lt)-cy2(k,Lt2))**2d0 / (at*(2d0-at)) &
194.  ))* I0E( 2d0*dsqrt(1d0-an)/an*cx2(M,Lt)*cx2(k,Lt2) ) *w(k) &
195.  *dt*(1d0-at)/(an*dsqrt(pi*at*(2d0-at)))

196.  wclx3(M,K,Lt,Lt2)=c(k)*dexp(C(k)**2)*dabs(cx3(k,Lt2))* &
197.  dexp(-( dabs(cx3(k,Lt2)) - dsqrt(1d0- &
198.  an)*dabs(cx3(M,Lt)) )**2d0 / an &
198.  + ( (1d0-at)*cy3(M,Lt)- cy3(k,Lt2) )**2d0 / (at*(2d0-at)) &
199.  ))* I0E( 2d0*dsqrt(1d0-an)/an*cx3(M,Lt)*cx3(k,Lt2) ) *w(k) &
200.  *dt*(1d0-at)/(an*dsqrt(pi*at*(2d0-at)))

201.  wcly(M,k,Lt,Lt2)=c(k)*dexp(C(k)**2)*cy(k,Lt2)* &
202.  dexp(-( dabs(cy(k,Lt2)) - dsqrt(1d0-an)*dabs(cy(M,Lt))
203.  )**2d0 / an + ( (1d0-at)*cx(M,Lt) - cx(k,Lt2) )**2d0 / &
204.  (at*(2d0-at)) ))* I0E( 2d0*dsqrt(1d0- an)/an*cy(M,Lt) &
205.  *cy(k,Lt2) ) *w(k) *dt*(1d0-at)/(an*dsqrt(pi*at*(2d0-at)))
206.  End do
207.  End do
208.  End do
209.  End do

!-----
210.  do I=1,NNo
211.  U(I)=0
212.  enddo

213.  q1=Phi1/Dt

```

```

214. q2=Phi2/Dt
215. q3=Phi3/Dt

216. If ((Phi1/Dt-q1).gt.0.5) then
217. q1=Phi1/Dt+1
218. endif

219. If ((Phi2/Dt-q2).gt.0.5) then
220. q2=Phi2/Dt+1
221. endif

222. If ((Phi3/Dt-q3).gt.0.5) then
223. q3=Phi3/Dt+1
224. endif

225. F(:, :, :)=0

226. 6 Continue      !Iteration loop
227. It=It+1
228. Do I=1,NNo
229. U_old(I)=U(I)
230. U(I)=0d0
231. Strx(I)=0d0
232. Stry(I)=0d0
233. End Do

      !compute departing distribution function
      !right wall
234. Do I=1,NNo
235. if (K1(I).lt.0.and.K2(I).lt.0) then
236. Do M=1,Nc
237. Do Lt=1,Nt
238. If (Theta(Lt).ge.Phi1+Phi3.and.Theta(Lt).lt.Pi+phi1+phi3) then
239. FiBC=0

240. Do K=1,Nc
241. q=0
242. Do Lt2=1,Nt
243. If ((Theta(Lt2).ge.Pi+Phi1+Phi3.and.Theta(Lt2).
244. lt.2d0*Pi).or.(Theta(Lt2).ge.0.and.Theta(Lt2).
245. lt.Phi1+phi3)) then
246. q=q+1

247. if (q==q1+q3.or.q==q1+q3+1) then
248. FiBC=FiBC+1*F(I,K,Lt2)*wclx3(M,K,Lt,Lt2)
249. else
250. FiBC=FiBC+2*F(I,K,Lt2)*wclx3(M,K,Lt,Lt2)
251. endif

252. endif
253. enddo !Lt2
254. enddo !K
255. F(I,M,Lt)=FiBC
256. endif
257. enddo !Lt
258. enddo !M
259. endif
260. enddo !I

```

```

!left wall
261. Do I=1,NNo
262. if (K3(I).lt.0.and.K4(I).lt.0) then
263. Do M=1,Nc
264. Do Lt=1,Nt

265. If((Theta(Lt).ge.pi+phi1.and.Theta(Lt).lt.2*pi).
266. or.(Theta(Lt).ge.0.and.Theta(Lt).lt.phi1)) then
267. FiBc=0
268. Do K=1,Nc
269. q=0
270. Do Lt2=1,Nt

271. If(Theta(Lt2).ge.Phi1.and.Theta(Lt2).lt.Pi+Phi1) then
272. q=q+1
273. if (q==1.or.q==q1+q2+q3) then
274. FiBC=FiBC+1*F(I,K,Lt2)*wclx(M,K,Lt,Lt2)
275. else
276. FiBC=FiBC+2*F(I,K,Lt2)*wclx(M,K,Lt,Lt2)
277. endif
278. endif

279. enddo !K
280. enddo !Lt2
281. F(I,M,Lt)=FiBC
282. endif
283. enddo !Lt
284. enddo !M
285. endif
286. enddo !I

! lower wall
287. Do I=1,NNS
288. Do M=1,Nc
289. Do Lt=1,Nt
290. If(Theta(Lt).ge.0.and.Theta(Lt).lt.Pi) then
291. FiBc=0

292. Do K=1,Nc
293. q=0
294. Do Lt2=1,Nt
295. If(Theta(Lt2).ge.Pi.and.Theta(Lt2).lt.2*pi) then
296. q=q+1
297. if (q==1.or.q==q1+q2+q3) then
298. FiBC=FiBC+1*F(I,K,Lt2)*wcly(M,K,Lt,Lt2)
299. else
300. FiBC=FiBC+2*F(I,K,Lt2)*wcly(M,K,Lt,Lt2)
301. endif
302. endif

303. enddo !Lt2
304. enddo !K
305. F(I,M,Lt)=-FiBC
306. endif
307. enddo
308. enddo
309. enddo

```

```

!-----
310. Do Lt=1,Nt
311. Do M=1,Nc
312. Td1=C(M)/S(Lt)+Delta*5d-1
313. Td2=C(M)/S(Lt)-Delta*5d-1

314. If(Theta(Lt).ge.0.and.Theta(Lt).lt.Phi1)then
315. Do I=1,NNo
316. If(K4(I).ge.0.and.K5(I).ge.0)then
317. Cof(I)=Delta*(U_old(I)+U_old(K4(I))*Per(Lt)+
318. U_old(K5(I))*(1d0-Per(Lt)))/2d0+Xp*5d-1
319. F(I,M,Lt)=(Td2*(F(K4(I),M,Lt)*Per(Lt)+(F(K5(I),M,Lt))
320. *(1d0-Per(Lt)))+Cof(I))/Td1
321. Endif
322. End Do
323. Call Macro !function for velocity and stress integrals
324. Endif

325. If(Theta(Lt).ge.Phi1.and.Theta(Lt).lt.Phi1+Phi3)then
326. Do I=1,NNo
327. If(K5(I).ge.0.and.K6(I).ge.0)then
328. Cof(I)=Delta*(U_old(I)+U_old(K5(I))*Per(Lt)+U_old(K6(I))&
329. *(1d0-Per(Lt)))/2d0+Xp*5d-1
330. F(I,M,Lt)=(Td2*(F(K5(I),M,Lt)*Per(Lt)+F(K6(I),M,Lt)*(1d0- &
331. Per(Lt)))+Cof(I))/Td1
332. Endif
333. End Do
334. Call Macro !function for velocity and stress integrals
335. Endif

336. If(Theta(Lt).ge.Phi1+Phi3.and.Theta(Lt).lt.Pi)then
337. Do I=1,NNo
338. If(K6(N3(I)).ge.0.and.K1(N3(I)).ge.0)then
339. Cof(N3(I))=Delta*(U_old(N3(I))+U_old(K6(N3(I)))*Per(Lt)+ &
340. U_old(K1(N3(I)))*(1d0-Per(Lt)))/2d0+Xp*5d-1
341. F(N3(I),M,Lt)=(Td2*(F(K6(N3(I)),M,Lt)*Per(Lt)+F(K1(N3(I)) &
342. ,M,Lt)*(1d0-Per(Lt)))+Cof(N3(I)))/Td1
343. Endif
344. End Do
345. Call Macro
346. Endif

347. If(Theta(Lt).ge.Pi.and.Theta(Lt).lt.Phi1+Pi)then
348. Do I=NNo,1,-1
349. If(K1(I).ge.0.and.K2(I).ge.0)then
350. Cof(I)=Delta*(U_old(I)+U_old(K1(I))*Per(Lt)+U_old(K2(I)) &
351. *(1d0-Per(Lt)))/2d0+Xp*5d-1
352. F(I,M,Lt)=(Td2*(F(K1(I),M,Lt)*Per(Lt)+F(K2(I),M,Lt)* &
353. (1d0-Per(Lt)))+Cof(I))/Td1
354. Endif
355. End Do
356. Call Macro
357. Endif

358. If(Theta(Lt).ge.Phi1+Pi.and.Theta(Lt).lt.Pi+Phi1+Phi3)then
359. Do I=NNo,1,-1
360. If(K2(I).ge.0.and.K3(I).ge.0)then
361. Cof(I)=Delta*(U_old(I)+U_old(K2(I))*Per(Lt)+U_old(K3(I)) &
362. *(1d0-Per(Lt)))/2d0+Xp*5d-1

```

```

363. F(I,M,Lt)=(Td2*(F(K2(I),M,Lt)*Per(Lt)+F(K3(I),M,Lt)* &
364. (1d0-Per(Lt)))+Cof(I))/Td1
365. Endif
366. End Do
367. Call Macro
368. Endif

369. If(Theta(Lt).ge.Pi+Phi1+Phi3.and.Theta(Lt).lt.2d0*Pi)then
370. Do I=NNo,1,-1
371. If(K3(N3(I)).ge.0.and.K4(N3(I)).ge.0)then
372. Cof(N3(I))=Delta*(U_old(N3(I))+U_old(K3(N3(I)))*Per(Lt)
373. +U_old(K4(N3(I)))*(1d0-Per(Lt)))/2d0+Xp*5d-1
374. F(N3(I),M,Lt)=(Td2*(F(K3(N3(I)),M,Lt)*Per(Lt)+F(K4(N3(I),
375. M,Lt)*(1d0-Per(Lt)))+Cof(N3(I)))/Td1
376. Endif
377. End Do
378. Call Macro
379. Endif
380. End Do
381. End Do
!-----
382. G_old=G
383. G=0d0
384. Do I=1,NNo
385. U(I)=U(I)/Pi
386. If(K_index.eq.1)then
387. Strx(I)=Strx(I)/Pi
388. Stry(I)=Stry(I)/Pi
389. Endif
390. G=G+U(I)*Ws(I)
391. End Do
392. G=2d0*G*Emv/3d0/EmvT
393. Print *, It, Error,G
394. Error=Abs(G-G_old)
395. If(Error.ge.Err_ini.and.K_index.ne.1)Goto 6
396. If(K_index.ne.1)then
397. K_index=1
398. Goto 6
399. Endif
400. write(4,1017) NNo,NNel
401. Do I=1,NNo
402. Write(4,1018) I,X(I),Y(I),U(I),Strx(I),Stry(I)
403. End do
404. Do I=1,NNo
405. If(K1(I).ne.-2)then
406. Write(4,1019) I,K1(I),K2(I)
407. End if
408. End do
409. Do I=NNo+1,NNo
410. If(K6(I).ne.-2.and.K1(I).ne.-2)then
411. Write(4,1019) I,K1(I),K6(I)
412. End if
413. End do

414. Drag=0d0
415. Drag1=0d0
416. Drag2=0d0
417. Drag3=0d0

```

```

418. Do I=2,NNs
419. Drag=Drag+Step3*(Stry(I-1)+Stry(I))*5d-1
420. Drag3=Drag3+Step3*(Stry(I-1)+Stry(I))*5d-1
421. End do
422. Drag3=Drag3/(Length3)
423. Do I=2,NNo-1
424. If(K4(I).le.(-2))then
425. Drag=Drag+Step2*(Strx(I)*DSin(Phi1)-Stry(I)*DCos(Phi1))
426. Drag2=Drag2+Step2*(Strx(I)*DSin(Phi1)-Stry(I)*DCos(Phi1))
427. Endif
428. End do
429. Drag=Drag+Step2*(Strx(1)*DSin(Phi1)-Stry(1)* &
430. DCos(Phi1))*5d-1
431. Drag=Drag+Step2*(Strx(NNo)*DSin(Phi1)- &
432. Stry(NNo)*DCos(Phi1))*5d-1
433. Drag2=Drag2+Step2*(Strx(1)*DSin(Phi1) &
434. Stry(1)*DCos(Phi1))*5d-1
435. Drag2=Drag2+Step2*(Strx(NNo)*DSin(Phi1)- &
436. Stry(NNo)*DCos(Phi1))*5d-1
437. Drag2=Drag2/(Length2)
438. Do I=2,NNo-1
439. If(K1(I).le.(-2).and.(I.ne.NNs))then
440. Drag=Drag+Step1*(-Strx(I)*DSin(Phi2)-Stry(I)*DCos(Phi2))
441. Drag1=Drag1+Step1*(-Strx(I)*DSin(Phi2)-Stry(I)*DCos(Phi2))
442. Endif
443. End do
444. Drag=Drag+Step1*(-Strx(NNs)*DSin(Phi2)- &
445. Stry(NNs)*DCos(Phi2))*5d-1
446. Drag=Drag+Step1*(-Strx(NNo)*DSin(Phi2)- &
447. Stry(NNo)*DCos(Phi2))*5d-1
448. Drag1=Drag1+Step1*(-Strx(NNs)*DSin(Phi2)- &
449. Stry(NNs)*DCos(Phi2))*5d-1
450. Drag1=Drag1+Step1*(-Strx(NNo)*DSin(Phi2)- &
451. Stry(NNo)*DCos(Phi2))*5d-1
452. Drag1=Drag1/(Length1)
453. Drag=Drag/(Length1+Length2+Length3)

454. Print*, Drag,Drag1,Drag2,Drag3
455. Call CPU_time(time_end)
456. Time=time_end-time_begin
457. Write(5,1020) Int_type,NDV,Nt,NStep,NNs
458. Write(5,1021) Delta,G,Drag,Time
459. Write(5,1022) Drag1,Drag2,Drag3
460. Write(5,1023) Omega,It,Error
!-----
461. 12 continue

462. 1001 Format(2(E24.17))
463. 1010 Format(8(2x,I7),2(2x,F15.10))
464. 1011 Format('ZONE T="'I8'", I='I8', F=POINT ')
465. 1012 Format('VARIABLES =
466. "I","I_L","K1","K2","K3","K4","K5","K6","X","Y"')
467. 1013 Format((2x,I7),2(2x,F15.10))
468. 1014 Format('ZONE T="'I8'", I='I8', F=POINT ')
469. 1015 Format('VARIABLES = "I","Step","Par"')
470. 1016 Format('VARIABLES = "I","X","Y","U","Strx","Stry"')
471. 1017 Format('ZONE N='I8', E='I8', F=FEPOINT, ET=TRIANGLE')
472. 1018 Format(1X,1(I8),5(F19.14))

```



```

473. 1019 Format(1X,3(I8))
474. 1020 Format(1X,'Integration=',I1,1X,', Velocities=',I4 &
475. ,1X,'Angles=',I4,1X,', Analytical Angles=',I4,1X,', Side&
476. nodes=',I4)
477. 1021 Format(1X,'Delta=',E10.3,1X,'Flow Rate=',E15.8,1X,', &
478. Drag=',E15.8,1X,', Time=',E15.8)
479. 1022 Format(1X,'Mean shear side1=',E15.8,1X,', Mean shear &
480. side 2=',E15.8,1X,', Mean shear side3=',E15.8)
481. 1023 Format(1X,'Omega=',F10.3,1X,', Iterations=',I6,1X,', &
482. Error=',E11.4)
483. Stop
484. contains

485. subroutine Macro
486. Do I=1,NNo
487. U(I)=U(I)+W(M)*F(I,M,Lt)*C(M)*Dt
488. If(K_index.eq.1)then
489. Strx(I)=Strx(I)+W(M)*F(I,M,Lt)*Dt*C(M)**2d0*DCos(Theta(Lt))
490. Stry(I)=Stry(I)+W(M)*F(I,M,Lt)*Dt*C(M)**2d0*DSin(Theta(Lt))
491. End if
492. End do
493. End Subroutine Macro

494. Subroutine Sort(c,w,Nc)
495. Integer::i,j,Nc
496. Real(8),Dimension(Nc)::c,w
497. Do i=2,Nc
498. Do j=i,2,-1
499. If (c(j)<c(j-1)) then
500. c(j-1:j)=c(j:j-1:-1)
501. w(j-1:j)=w(j:j-1:-1)
502. Else
503. Exit
504. End If
505. End do
506. End do
507. End Subroutine Sort

508. Real(8) Function IOE(x)
509. Real(8)::x,xx,sum1,sum2,P(15),Q(5),PP(8),QQ(7)
510. Integer::i

511. DATA P/-5.2487866627945699800D-18,-1.5982226675653184646 &
512. D-14,&
513. -2.6843448573468483278D-11,-3.0517226450451067446D-08,&
514. -2.5172644670688975051D-05,-1.5453977791786851041D-02,&
515. -7.0935347449210549190D+00,-2.4125195876041896775D+03,&
516. -5.9545626019847898221D+05,-1.0313066708737980747D+08,&
517. -1.1912746104985237192D+10,-8.4925101247114157499D+11,&
518. -3.2940087627407749166D+13,-5.5050369673018427753D+14,&
519. -2.2335582639474375249D+15/

520. DATA Q/-3.7277560179962773046D+03,6.51585064186 &
521. 55165707D+06,-6.5626560740833869295D+09,3.7604188 &
522. 704092954661D+12,-9.7087946179594019126D+14/

```

```

523. DATA PP/-3.9843750000000000000D-01,2.920538459633 &
524. 6793945D+00,-2.4708469169133954315D+00,4.79148894 &
525. 22856814203D-01,-3.7384991926068969150D-03,-2.68015 &
526. 20353328635310D-03,9.9168777670983678974D-05,
527. 2.1877128189032726730D-06/

528. DATA QQ/-3.1446690275135491500D+01,8.55395632 &
529. 58012929600D+01,-6.0228002066743340583D+01,1.39825 &
530. 95353892851542D+01,-1.1151759188741312645D+00,3.2547 &
531. 697594819615062D-02,-5.5194330231005480228D-04/

532. X = dABS(x)
533. IF (X .LT. 1d-8) THEN
534. IOE = 1d0

535. ELSE IF (X .LT. 15d0) THEN
536. XX = X**2d0
537. SUM1 = P(1)
538. DO I = 2, 15
539. SUM1 = SUM1 * XX + P(I)
540. End do
541. XX = XX - 225d0
542. SUM2 = (((((XX+Q(1))*XX+Q(2))*XX+Q(3))*XX+Q(4))*XX+Q(5)
543. IOE = SUM1 / SUM2 * DEXP(-X)

544. ELSE IF (X .GE. 15) THEN
545. XX = 1d0 / X - 1d0/15d0
546. SUM1 = ((((((PP(1)*XX+PP(2))*XX+PP(3))*XX+PP(4))*XX+&
547. PP(5))*XX+PP(6))*XX+PP(7))*XX+PP(8)
548. SUM2 = ((((((XX+QQ(1))*XX+QQ(2))*XX+QQ(3))*XX+&
549. QQ(4))*XX+QQ(5))*XX+QQ(6))*XX+QQ(7)
550. IOE = (SUM1 / SUM2 - PP(1)) / SQRT(X)
551. End If

552. End Function
553. end

```

ΑΝΑΦΟΡΕΣ

- [1] C. Cercignani (1969) "Mathematical Methods in Kinetic Theory", *Plenum Press*
- [2] C. Cercignani (1975,1987) "Theory and Application of the Boltzmann Equation", *Springer*
- [3] Y. Sone, T. Ohwada and K. Aoki (1989) "Temperature jump and Knudsen Layer in a rarefied gas over a plane wall," *Phys. of Fluids, A1*: 363-370
- [4] Y. Sone, T. Ohwada and K. Aoki (1989) "Evaporation and condensations of plane condensed phase," *Phys. of Fluids, A1*: 1398-1405
- [5] Y. Sone, T. Ohwada, and Aoki K (1989) "Numerical analysis of the shear and thermal creep flows of a rarefied gas over a plane wall," *Phys. of Fluids A1*: 1588-1599
- [6] Y. Sone, T. Ohwada, and K. Aoki (1989) "Numerical analysis of the Poiseuille and thermal transpiration flows of a rarefied gas between two parallel plates," *Phys. of Fluids A1*: 2042-2049
- [7] Y. Sone, S. Takata and T. Ohwada (1990) "Numerical analysis of the plane Couette flow of a rarefied gas," *Eur J Mech, B/Fluids, 9*: 273-288
- [8] Mott-Smith HM (1951) "The solution of the Boltzmann equation for a shock wave," *Phys. Re.v*, 82:855-892
- [9] C.Y. Liu and L. Lees (1961) "Kinetic theory description of plane compressible Couette flow," in: *L Talbot edited Rarefied Gas Dynamics*, Academic Press, NY
- [10] E.P. Gross and S. Ziering (1958) "Kinetic theory of linear shear flow," *Phys. of Fluids*, 1:213-224
- [11] S.V. Vallander (1963-) "Aerodynamics of Rarefied Gases, collected works," *Leningrad Univ. Press*, vol.1-vol.10
- [12] P.L. Bhatnagar, E.P. Gross and M.A. Krook (1954) "A model for collision

- processes in gases," *Phys. Rev.* , 94:511-525
- [13] S. Naris and D. Valougeorgis (2008) "Rarefied gas flow in a triangular duct based on a boundary fitted lattice," *European Journal of Mechanics B/Fluids*, 27 810-822.
- [14] I. Graur, F. Sharipov "Gas flow through an elliptical tube over the Whole range of gas rarefaction," *Eur. J. Mech. B Fluids*, 10.1016
- [15] S.K. Loyalka, N. Petrellis and T.S. Storvik (1979) "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
- [16] D.Valougeorgis and J.R. Thomas (1986) "Exact numerical results for Poiseuille and thermal creep flow in a cylindrical tube," *Phys. Fluids*, 29(2) :423-429
- [17] S. Naris and D. Valougeorgis (2005) "The driven cavity flow over the whole range of the Knudsen number," *Phys. Fluids* , 17(9):907106
- [18] F.M. Sharipov and G.M. Kremer (1999) "Non-isothermal Couette flow of a rarefied gas between two cylinders," *Eur. J. Mech. B/Fluids* , 18(1):121-130
- [19] L.M.G. Cumin, F. M. Sharipov and G. M. Kremer (1998) "Rarefied gas flow between two cylinders caused by the evaporation and condensation on their surfaces" *Phys. Fluids*, 10(12):3203-3208
- [20] E.M. Shakhov (1974) "Method of Investigation of Rarefied Gas Flows," Nauka, Moscow
- [21] F. Sharipov (1996) "Rarefied gas flow through a long tube at any temperature difference," *J. Vac. Sci. Technol. A*, 14(4):2627-2635
- [22] D Valougeorgis (2003) "An analytical solution of the s-model kinetic equation," *Z. Angew. Math. Phys. (ZAMP)*, 54:112-124
- [23] S.K. Stefanov, I.D. Boyd and C.P. Cai (2000) "Monte Carlo analysis of macroscopic fluctuations in a rarefied hypersonic flow around a cylinder," *Phys. Fluids*, 12(5):1226-1239

- [24] A. Beskok, G. E. Karniadakis and W. Trimmer (1996) "Rarefaction and compressibility effects in gas microflows," *Trans. ASME*, 118(3):448-456
- [25] G.A. Bird (1994) "Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows," *Clarendon Press*, Oxford
- [26] J.K Haviland and M.L Lavin (1962) "Applications of the Monte Carlo method to heat transfer in a rarefied gas," *Phys. of Fluids*, 5 : 1399-1405
- [27] B.T. Porodnov, P.E. Suetin, S.F. Borisov, V.D. Akinshin (1974) "Experimental investigation of rarefied gas flow in different channels," *Journal of Fluid Mechanics*, 64,417-437
- [28] F. Sharipov (2002) "Application of the Cercignani–Lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows: Plane flow between two parallel plates" *Eur. J. Mech. B/Fluids* 21 , 113–123
- [29] F. Sharipov (2003) "Application of the Cercignani–Lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows: Slip and jump coefficients," *European Journal of Mechanics - B/Fluids*, 22, 133-143
- [30] F. Sharipov (2003) "Application of the Cercignani–Lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows: Poiseuille flow and thermal creep through a long tube," *Eur. J. Mech. B/Fluids* 22, 145–154
- [31] C. Cercignani and M. Lampis (1971) "Kinetic models for gas-surface interactions, Transport theory and statistical physics" 1(2), 101-114
- [32] A. Frezzotti , C. Cercignani (1989) "Numerical simulation of supersonic rarefied gas flow past a flat plate-Effects of the Gas-Surface interaction model on the flow field," *Rarefied Gas Dynamics: Theoretical and computational techniques*, 552-566
- [33] F. Sharipov, G. Bertoldo (2006) "Heat transfer through a rarefied gas confined between two coaxial cylinders with high radius ratio," *Journal of Vacuum Science and Technology A*, 24(6),2087-2093
- [34] W.F.N. Santos (2006) "Gas-Surface Interaction Effect on Round Leading

Edge," *Aerothermodynamics, Brazilian Journal of Physics*, 37, 337-348

- [35] S. Pantazis, D. Valougeorgis (2009) "The Cercignani-Lampis Boundary conditions in rectangular micro-channel flows," *DRAFTGASMEMS* 09-16
- [36] D.Valougeorgis (2007) "The friction factor of a rarefied gas flow in a circular tube," *Phys. Fluids* 19(9), 091702
- [37] S. Varoutis, S. Pantazis, V. Hauer, C. Day, D. Valougeorgis (2009) "Computational and experimental study of gas flows through long channels of various cross sections in the whole range of the Knudsen number," *J. Vac. Sci. Technol.*, 27 (1), 89-100

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ



004000124083

