

İSTANBUL TEKNİK ÜNİVERSİTESİ ★ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**MİKRO GAZ AKIŞLARININ DSMC (DOĞRUDAN BENZETİM
MONTE CARLO) YÖNTEMİ İLE ÇÖZÜMLENMESİ**

DOKTORA TEZİ

Nevsan ŞENGİL

Anabilim Dalı : Uzay Mühendisliği

Programı : Uzay Mühendisliği

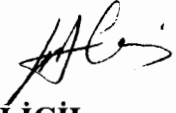
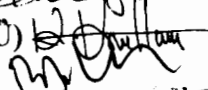
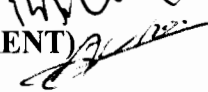
KASIM 2008

MİKRO GAZ AKIŞLARININ DSMC (DOĞRUDAN BENZETİM MONTE CARLO) YÖNTEMİ İLE ÇÖZÜMLENMESİ

DOKTORA TEZİ
Nevsan ŞENGİL
(511012030)

Tezin Enstitüye Verildiği Tarih : 30 Nisan 2008

Tezin Savunulduğu Tarih : 14 Kasım 2008

Tez Danışmanı : Doç. Dr. Fırat O. EDİS (İTÜ) 
Diğer Jüri Üyeleri : Prof. Dr. Mehmet C. CELENLİGİL
(ODTÜ) 
Prof. Dr. Kadir KIRKKÖPRÜ (İTÜ) 
Prof. Dr. Rüstem ASLAN (İTÜ) 
Yd. Doç. Dr. Özgür AKTAŞ (BİLKENT) 

KASIM 2008

ÖNSÖZ

Doktora eğitimine başladığım ilk günden itibaren kısıtlı vaktine rağmen hiçbir yardımı benden esirgemeyen doktora tez danışmanım Doç. Dr. Fırat Oğuz Edis başta olmak üzere tez jürimde yer alan Prof. Dr. Kadir Kırkköprü ve Prof. Dr. Rüstem Aslan'a teşekkür ederim. Bu uzun süreçte beni daima destekleyen sevgili eşim Bahar Yeşim Şengil'e de müteşekkirim. Ayrıca her türlü anlayışı gösteren İTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü ve hesaplamalarım için gereken kaynakları bana sağlayan İTÜ-UUBF-ROTAM ve HPC-Europa'yı da burada belirtmek istiyorum.

Nisan 2008

Nevsan Şengil

Y. Eln. Müh.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET.....	xix
SUMMARY	xxi
1. GİRİŞ	1
1.1 Mikro Akış Çözüm Yöntemleri.....	2
1.1.1 Sürekli ortam modelleri	5
1.1.2 Moleküler modeller	9
1.1.2.1 Moleküler dinamik yöntem	9
1.1.2.2 Boltzmann denklemi ve çözüm yöntemleri.....	11
1.1.2.3 DSMC yöntemi	15
1.2 DSMC Yönteminin Gelişimi.....	16
1.3 Çalışmanın Amacı	24
2. DSMC YÖNTEMİNİN MİKRO GAZ AKIŞLARINA UYGULANMASI.....	29
2.1 DSMC Yönteminin Genel Esasları	29
2.1.1 Verilerin okunması.....	31
2.1.2 DSMC moleküllerinin yerleştirilmesi ve hızlarının atanması.....	32
2.1.3 DSMC moleküllerinin hareket safhası	37
2.1.3.1 Duvar sınır koşulları.....	39
2.1.3.2 Akım sınır koşulları	43
2.1.4 DSMC molekül çarpışmaları	48
2.1.4.1 Hücrelerde çarpışacak moleküllerin ve sayılarının hesaplanması	50
2.1.4.2 İkili molekül çarpışma modelleri	52
2.1.4.3 Katı küre modeli.....	54
2.1.4.4 Değişken katı küre modeli	58
2.1.4.5 Değişken yumuşak küre modeli	58
2.1.4.6 Elastik olmayan molekül çarpışmaları	60
2.1.5 Makroskobik değerlerin hesaplanması.....	62
2.1.6 Daimi ve daimi olmayan akışlar için ortalamaların alınması	64
2.2 DSMC Moleküllerinin Hücre Esaslı Sıraya Dizilmesi.....	65
2.3 Basit Geometrilik Akışlarda Genelleştirilmiş Koordinatların Kullanılması	67
2.4 Molekül Rezervuarları.....	72
2.4.1 Yüzey üretim rezervuar yöntemi.....	73
2.4.2 Hacim üretim rezervuar yöntemi	78
2.4.3 Rezervuar yöntemlerinin karşılaştırılması	79
2.4.4 Düzeltilmiş hacim üretim rezervuar yöntemi.....	80
2.5 Hareketli ve Değişken Çözüm Ağları Uygulaması	85
2.6 DSMC Yönteminin Parallellleştirilmesi.....	90
2.7 Farklı Hücre Ebatları ve Fiziksel-Temsilci Molekül Oranları Kullanılması....	95
3. UYGULAMA AYRINTILARI	103
3.1 Maxwell Dağılımı	103
3.2 Ters-Birikimli Örneklem Yöntemi	105
3.3 Kabul-Red Yöntemi	107

3.4 Bir DSMC Molekülünün Hücre İçinde Olup Olmadığının Hesaplanması.....	109
3.5 DSMC Hücrelerinin İçine DSMC Moleküllerinin Yerleştirilmesi	110
3.6 DSMC Moleküllerinin Hücreden-Hücreye Takibi	111
3.7 Alt Bölgelerin ve Sınırların Markalanması	112
3.8 MPI Uygulamaları	113
3.9 Bölgeler Arasında Farklı Fiziksel-Temsilci Molekül Oranı Kullanılması	115
3.10 DSMC Yönteminde 3-Boyutlu Hesaplamalar	117
4. ÇÖZÜM NETİCELERİ VE DOĞRULANMASI	125
4.1 2-Boyutlu Mikro-Kanalda Gaz Akışı	125
4.1.1 Pouiselle akışı.....	125
4.1.2 Couette akışı	127
4.2 2-Boyutlu Mikro-Lülede Gaz Akışı	129
4.3 T-Şeklinde Mikro-Manifold İçinde Gaz Akışı	134
4.4 Isıl Sürünme Problemi	137
4.5 Adyabatik Piston Problemi	140
4.5.1 Boyutsuzlaştırılmış hidrodinamik model denklemleri	141
4.5.2 Sonuçlar.....	142
4.6 3-Boyutlu Mikro-Lülede Gaz Akışı	146
5. SONUÇ VE DEĞERLENDİRMELER.....	151
KAYNAKLAR.....	155

KISALTMALAR

BGK	: Bhatnagar-Gross-Krook
CFD	: Computational Fluid Dynamics
CLL	: Cercignani-Lampis-Lord
DD	: Domain Decomposition
DSMC	: Direct Simulation Monte Carlo
GHS	: Generalized Hard Sphere
GSS	: Generalized Soft Sphere
HPC	: High Performance Computing
IP	: Information Preservation
LBM	: Lattice-Boltzmann Method
MD	: Molecular Dynamics
MEMS	: Micro Electro Mechanical Systems
MPI	: Message-Passing Interface
NMAC	: Normal Momentum Accommodation Coefficient
NTC	: No-Time Counter
PIC	: Particle-In-Cell
RSF	: Randomly Sampled Frequency
SPDM	: Single Program Multiple Data
TC	: Time Counter
TMAC	: Tangential Momentum Accommodation Coefficient
VHS	: Variable Hard Sphere
VS	: Variable Sphere
VSS	: Variable Soft Sphere

ÇİZELGE LİSTESİ

	<u>Sayfa</u>
Çizelge 1.1 : Farklı Knudsen sayılarına göre akış bölgeleri.....	4
Çizelge 2.2 : Farklı basınçlarda azot gazı için (T=300 K) DSMC hücresinde yer alan fiziksel molekül sayıları.....	33
Çizelge 2.3 : Azot gazı için standart değerler.....	50
Çizelge 2.4 : Mikro-lüle gaz akışı için toplam çözüm süresi.	71
Çizelge 2.5 : Alt bölgelerin farklı işlemcilerde çözümü sonucunda elde edilen çözüm süreleri.	101
Çizelge 3.6 : Alt bölgelerin farklı işlemcilerde çözümü sonucunda elde edilen işlemci başına normalize edilmiş yük paylaşımı.....	124
Çizelge 4.2 : 32 adet Itanium II (1.3 GHz) işlemcili ve 64 Gbyte RAM kapasiteli SGI Altix 3000 serisi yüksek başarılı bilgisayarda yakınsak-ıraksak lüle için hesaplama zamanları.	133

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa

Şekil 1.1 : Sıvı argon için Lennard-Jones potansiyel enerjisi.....	10
Şekil 1.2 : ISI Web of Science yıllara göre DSMC konulu yayın sayısı.....	24
Şekil 2.1 : DSMC akış şeması. TS akışın hemen hemen daimi hale gelmesi için gereken zaman, TE ise hesaplamanın sonlandırılacağı zamandır. Paralel çalışmada P1 ve P2 noktaları arasında ek işlemler kullanılır.....	30
Şekil 2.2 : Bir DSMC temsilci molekülü birden çok fiziksel molekülü temsil eder.	35
Şekil 2.3 : Molekül 1 numaralı konumundan 2 numaralı konuma hareket eder. [m,n] hücresinde olmadığı anlaşılan molekül önce hücreyi terk ettiği kenara komşu hücrede aranır. [m+1,n] hücresinde de bulunamayan molekülün, hücreyi terk ettiği kenar tekrar hesaplanır ve komşu [m+1,n+1] hücresinde aranır.	38
Şekil 2.4 : Düzgün yansıma modelinde moleküllerin duvara geliş ve duvardan yansıma açıları eşittir.	39
Şekil 2.5 : Dağınık yansıma modelinde molekülün duvara geliş açısı α ile yansıma açısı β birbirinden bağımsızdır.	41
Şekil 2.6 : CLL yansıma modelinde yansıyan moleküllerin yansıma açısı belli bir değer etrafında dağılım göstermektedir.	42
Şekil 2.7 : Gaz akış bölgesine sınırdan gaz girişi.	43
Şekil 2.8 : İç akışta basınç sınır koşulları.	46
Şekil 2.9 : Bağlı hızları c_r , çapları d olan iki molekülün toplam etki kesitinin Δt zaman aralığında taradığı hacim.	51
Şekil 2.10 : İkili çarpışmada c_r bağlı hız vektörünün yaptığı χ açısı sapması (Bird, 1994).	53
Şekil 2.11 : Katı küre molekül çarpışma modeli (Bird, 1994).	55
Şekil 2.12 : Katı küre modelinde θ_A açısı ile en yakın geçiş mesafesi b ve molekül merkezleri arasındaki mesafe d 'yi gösteren bağlantı üçgeni.	55
Şekil 2.13 : Geleneksel DSMC molekül veri yapısı.	65
Şekil 2.14 : Geleneksel DSMC molekül veri yapısı kullanılarak moleküllerin hücre esaslı olarak sıraya dizilmesi. Molekül sayıları üst sırada, hücre sayıları ise alt sırada gösterilmektedir.	66
Şekil 2.15 : DSMC yönteminde 2-boyutlu hesaplamalar için yeni molekül veri yapısının kullanılması.	66
Şekil 2.16 : Akış alanındaki DSMC molekülleri hareket safhası içinde MOL(M,N,L) veri yapısından YMOL(M,N,L) veri yapısına taşınırlar.....	67
Şekil 2.17 : Koordinat dönüşümü ile bir 2-boyutlu yakınsak-ıraksak mikro-lüle geometrisinin (x, y) , boyutsuz kare geometriye dönüşümü $(\bar{x}, \bar{y})$	68

Şekil 2.18 : DSMC molekülleri 1 numaralı başlangıç konumundan, 2 numaralı konuma doğru hareket ederler. (a) Fiziksel bölge. (b) Hesaplama bölgesi.	69
Şekil 2.19 : Genelleştirilmiş koordinatların uygulandığı test problemi.....	70
Şekil 2.20 : Akış alanını akım sınırlarından terk eden moleküller.	72
Şekil 2.21 : Akış alanına akım sınırlarından yeni molekül ilave edilmesi.	72
Şekil 2.22 : Molekül sayı akısının $S = 0$ için normalize edilmiş değerinin moleküler hız oranına (S) bağlı olarak değişimi.	74
Şekil 2.23 : Moleküllerin sınır rezervuarlarından akış alanına eklenmesi.....	75
Şekil 2.24 : Hız dağılım fonksiyonları. (a) Farklı S değerleri için sınıra dik hız bileşeni. (b) $V = W = 0$ için sınıra paralel hız bileşenleri.....	76
Şekil 2.25 : Hacim üretim rezervuar yönteminde moleküllerin rezervuarlardan gaz akış alanına geçmesi.	78
Şekil 2.26 : Hacim üretim rezervuar yönteminde rezervuar uzunluğunun çok hızlı molekül sayısına etkisi. (a) $L = L_R$. (b) $L = 2 L_R$ için içeriye bir fazla molekül girer.	81
Şekil 2.27 : Hacim üretim rezervuar yönteminde ve düzeltilmiş hacim üretim rezervuar yönteminde gaz akış alanına kabul edilen ortalama molekül sayısının moleküler hız oranı (S) ve rezervuar boyu ile değişimi. Molekül akısı değerleri $S = 0$ için normalize edilmiştir.....	82
Şekil 2.28 : Molekül kabul oranlarının moleküler hız oranı, kullanılan zarf teknikleri ve rezervuar boyu ile değişimi.	83
Şekil 2.29 : Düzeltilmiş hacim ve yüzey üretim rezervuar yöntemlerine ait bağlı hesaplama etkinlikleri. Değerler $S = 1$ için kutu zarf kullanan yüzey üretim yöntemi değeri ile normalize edilmiştir.....	84
Şekil 2.30 : Düzeltilmiş hacim üretim rezervuar yöntemi ile $L = L_R / 16$ rezervuar uzunluğu için elde edilen u hız bileşen değerlerinin teorik değerler ile karşılaştırılması. (a) $S = 1$ için. (b) $S = 5$ için.	85
Şekil 2.31 : Adyabatik piston.....	86
Şekil 2.32 : Adyabatik piston probleminde zamana bağlı olarak değişen piston pozisyonu için yeni çözüm ağlarının üretilmesi. (a) $t = t_1$. (b) $t = t_2$	87
Şekil 2.33 : Adyabatik pistonda moleküllerin hareket safhası.....	89
Şekil 2.34 : Paralel çalışmada makroskobik değerlerin hesaplanmasında, grup ortalamalarının alınması.	90
Şekil 2.35 : Paralel DSMC yönteminde gaz akış bölgesinin alt bölgelere bölünmesi. (a) 8 parçaya bölünmüş 2-boyutlu mikro-lüle. (b) 96 parçaya bölünmüş 3-boyutlu mikro-lüle.	91
Şekil 2.36 : Paralel çalışma “tek program çok veri” (SPMD) yönteminde her işlemci aynı programı farklı veri girdileri ile kullanır. İşlemciler arasında her zaman adımı (Δt) sonunda molekül aktarımları için bir haberleşme kanalı kullanılır.	92
Şekil 2.37 : Paralel DSMC yönteminde moleküllerin bölge değiştirme işlemleri hareket (P1) ve sıraya dizilme (P2) safhaları arasında tamamlanır. Genel şema Şekil 2.1’de gösterilmektedir.....	94
Şekil 2.38 : 2-boyutlu yakınsak-ıraksak bir mikro-lüle ve sınır koşulları.	98
Şekil 2.39 : 2-boyutlu yakınsak-ıraksak mikro-lülenin tek işlemci için oluşturulan yapısal ağ.....	99

Şekil 2.40 : 2-boyutlu ıraksak-yakınsak bir mikro-lülede 4 alt bölgede farklı boyutta yapısal çözüm ağı uygulaması.....	100
Şekil 2.41 : 2-boyutlu ıraksak-yakınsak bir mikro-lülede 4 alt bölgede hem farklı boyutta yapısal ağı hem de fiziksel-temsili molekül oranı kullanılması.	100
Şekil 3.1 : Moleküllerin ısı hız (c') ve ısı hız bileşenleri (u') için Maxwell hız dağılım fonksiyonları.	105
Şekil 3.2 : Moleküllerin sınıra paralel ısı hız bileşenlerinin ters-birikimli örnekleme yöntemi ile saptanması. (a) Hız vektörü büyüklüğü. (b) Hız vektörü yönü.	107
Şekil 3.3 : Kabul-red yönteminde hız örnekleme yönteminin hız dağılım fonksiyonu kullanılarak gerçekleştirilmesi.	109
Şekil 3.4 : Bir DSMC molekülü için hücre bilgisi kontrolü. (a) Molekül hücre içinde ve toplam açılar = 360^0 . (b) Molekül hücre içinde değil ve toplam açılar $\neq 360^0$	110
Şekil 3.5 : Bir DSMC hücresine molekül yerleştirilmesi. İçeri siyah ile gösterilen molekül ABCD dörtgeni içinde olduğu için kabul edilirken, içi boş olarak gösterilen molekül red edilmiştir.	111
Şekil 3.6 : Bir DSMC molekülünün hangi kenardan hücreyi terk ettiği biliniirse yapısal ağı özelliği kullanılarak hangi hücreye geçtiği bulunabilir. Bu örnekte molekül N, M hücresini sağ kenardan terk ettiği için N, M+1 hücresine geçmiştir.	112
Şekil 3.7 : 2-boyutlu ıraksak-yakınsak mikro-lüle. (a) Paralel çalışma için alt bölgelere ayrılması. (b) Sağda alt bölge ve hücre kenarlarının markalanması.	113
Şekil 3.8 : MPI kütüphanesi başlangıç komutları.	113
Şekil 3.9 : MPI kütüphanesi yeni veri yapıları oluşturma komutları.	114
Şekil 3.10 : İşlemciler arasında FTMO (F_N) bilgisinin aktarılması.	114
Şekil 3.11 : İşlemciler arasında önce aktarılabilecek molekül sayılarının, takiben molekül bilgilerinin gönderilip/alınması.	115
Şekil 3.12 : Bölge değiştirecek toplam molekül sayısının kontrol edilmesi.	115
Şekil 3.13 : $F_{N,1} < F_{N,2}$ durumunda, $F_{N,1}$ bölgesinden gelen N adet molekül, $F_{N,2}$ bölgesine ΔN kadar molekül eksiltiyle aktarılmaktadır.	116
Şekil 3.14 : $F_{N,1} > F_{N,2}$ durumunda, $F_{N,1}$ bölgesinden gelen N adet molekül, $F_{N,2}$ bölgesine ΔN kadar molekül ilave edilerek aktarılmaktadır.	117
Şekil 3.15 : Basınç sınır koşulları uygulanan 3-boyutlu bir soğuk gaz mikro-lülesi.	118
Şekil 3.16 : Mikro-lüle geometrisi. (a) Tam lüle. (b) Simetri düzlemleri. (c) Hesaplama bölgesi.	119
Şekil 3.17 : Hesaplama bölgesinin 24 (24x1x1) alt bölgeye, 1-boyutlu bölgelere ayırma yöntemi ile ayrılması.	120
Şekil 3.18 : Statik yük dengeleme yöntemi ile 24 işlemci arasında eşit olarak paylaştırılan toplam yükünün, akışın daimi hale gelmesi ile paylaşımında meydana gelen değişim.	121
Şekil 3.19 : Hesaplama bölgesinin 48 (24x2x1) alt bölgeye 2-boyutlu bölgelere ayırma yöntemi ile ayrılması.	122

Şekil 3.20 : Statik yük dengeleme yöntemi ile 48 işlemci arasında eşit olarak paylaştırılan toplam yükün, akışın daimi hale gelmesi ile paylaşımında meydana gelen değişim.	122
Şekil 3.21 : Hesaplama bölgesinin 96 (24x2x2) alt bölgeye 3-boyutlu bölgelere ayırma yöntemi ile ayrılması.	123
Şekil 3.22 : Statik yük dengeleme yöntemi ile 96 işlemci arasında eşit olarak paylaştırılan toplam yükün akışın daimi hale gelmesi ile paylaşımında meydana gelen değişim.	123
Şekil 4.1 : 2-boyutlu mikro-kanalda Poisselle akışı.	125
Şekil 4.2 : 2-boyutlu mikro-kanalda sıcaklık değerleri. (a) Bu çalışma. (b) Fang ve Liou çalışması. Her iki çalışmada da aynı çevre çizgisi (kontur) değerleri temel alınmıştır.	126
Şekil 4.3 : 2-boyutlu mikro-kanalda kanal boyunca gaz akış hızı değerleri. (a) Bu çalışma. (b) Fang ve Liou çalışması. Her iki çalışmada da aynı çevre çizgisi (kontur) değerleri temel alınmıştır.	126
Şekil 4.4 : 2-boyutlu mikro-kanalda kanal duvarı boyunca hesaplanan kayma hızı değerleri.	127
Şekil 4.5 : Couette akış problemi ve gazın kanal boyunca hız değerleri.	128
Şekil 4.6 : Coutte akışında DSMC yöntemi ile hesaplanan akış yönündeki hız kesiti ile alt ve üst duvarlarda oluşan kayma hızları değerleri.	128
Şekil 4.7 : 2-boyutlu yakınsak-ıraksak mikro-lüle geometrisi ve sınır koşulları.	130
Şekil 4.8 : 2-boyutlu yakınsak-ıraksak mikro-lülenin paralel çalışma için 8 alt bölgeye ayrılması.	130
Şekil 4.9 : Ses altı hızları ($P_o = P_i / 5$) için Mach sayısı çevre çizgileri. (a) Bu çalışma. (b) Wu ve Tseng çalışması.	131
Şekil 4.10 : Ses altı hızları ($P_o = P_i / 5$) için sıcaklık çevre çizgileri. (a) Bu çalışma. (b) Wu ve Tseng çalışması.	131
Şekil 4.11 : Ses üstü hızları ($P_o = P_i / 15$) için Mach sayısı çevre çizgileri. (a) Bu çalışma. (b) Wu ve Tseng çalışması.	132
Şekil 4.12 : Ses üstü hızları ($P_o = P_i / 15$) için sıcaklık çevre çizgileri. (a) Bu çalışma. (b) Wu ve Tseng çalışması.	133
Şekil 4.13 : Ses altı hız için yapılan 8 işlemcili hesaplamada akışın daimi hale gelmesi ile işlemci başına düşen bağıl yük miktarı. Yük değerleri en düşük yük değeri ile normalize edilmiştir.	134
Şekil 4.14 : T-şeklindeki mikro-manifoldun geometrisi ve sınır koşulları.	135
Şekil 4.15 : T-şeklinde mikro-manifoldun içinden akan argon gazına ait Mach sayısı çevre çizgi değerleri. (a) Bu çalışma. (b) Wu ve Tseng çalışması.	136
Şekil 4.16 : T-şeklinde mikro-manifoldun içinden akan argon gazına ait basınç çevre çizgi değerleri. (a) Bu çalışma. (b) Wu ve Tseng çalışması.	137
Şekil 4.17 : Ebatları boyutsuzlaştırılmış geometride ısıl sürünme test problemi. ...	138
Şekil 4.18 : Isıl sürünme ile oluşan ksenon gazı akışına ait çevre çizgisi değerleri. (a) $P_o = 75.6 \text{ kPa}$. için basınç değerleri. (b) $To = 800 \text{ K}$ için sıcaklık değerleri. (c) $D_i = 2,76 \text{ kg} / \text{m}^3$ için yoğunluk değerleri. (d) m/s cinsinden yatay gaz akış hızı değerleri boyutlu geometride verilmiştir.	139
Şekil 4.19 : $Kn = 0.05$ için ksenon gazına ait ısıl sürünme hız vektörleri. (a) Bu çalışma. (b) Papadopoulos ve Rosner (1995) çalışması.	140

Şekil 4.20 : Adyabatik piston başlangıç değerleri.	141
Şekil 4.21 : Piston konumunun zamanla değişimi. (a) $M_p = 0.1 M_g$. (b) $M_p = M_g$. (c) $M_p = 10 M_g$	143
Şekil 4.22 : Gaz sıcaklığının zamanla değişimi. (a) $M_p = 0.1 M_g$. (b) $M_p = M_g$. (c) $M_p = 10 M_g$	144
Şekil 4.23 : Farklı zamanlarda gaz hız kesitleri. (a) $M_p = 0.1 M_g$. (b) $M_p = M_g$. (c) $M_p = 10 M_g$	145
Şekil 4.24 : $t = 4 ns$ için basınç çevre çizgileri. (a) $M_p = 0.1 M_g$. (b) $M_p = M_g$. (c) $M_p = 10 M_g$	146
Şekil 4.25 : Mikro-lüle geometrisi. (a) Fiziksel bölge. (b) Hesaplama bölgesi.....	147
Şekil 4.26 : Basınç sınır koşulları uygulanan 3-boyutlu mikro-lüle.....	148
Şekil 4.27 : Mikro-lüle hesaplama bölgesi 3-boyutlu olarak 96 adet alt bölgeye ayrılmış durumda.....	148
Şekil 4.28 : Kanal ekseni boyunca gaz akış hızı değerleri.	149
Şekil 4.29 : Gaz akış hızının kanal ekseni boyunca, mikro-lülenin farklı kesitlerinde hesaplanan Mach sayısı değerleri. (a) Kanal girişi. (b) Kanal boğazı. (c) Kanal çıkışı.	149
Şekil 4.30 : Kanal ekseni boyunca gaz sıcaklık değerleri.	150

SEMBOL LİSTESİ

a	: Ses hızı
c	: Molekül hızı
c'	: Isıl hız
c_p	: Özgül ısı (sabit basınçta)
c_r	: Bağıl hız
c_v	: Özgül ısı (sabit hacimde)
$\mathbf{c}$	: Molekül hız vektörü
d	: Molekül çapı
E_t	: Öteleme enerjisi
f	: Hız dağılım fonksiyonu
f_0	: Maxwell hız dağılım fonksiyonu
$\mathbf{F}$	: Kuvvet vektörü
F_N	: Fiziksel-temsili molekül oranı
h	: Pertürbasyon dağılım fonksiyonu
k_B	: Boltzmann sabiti ($1.380658 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$)
k	: Isı iletim katsayısı
Kn	: Knudsen sayısı
m	: Molekül kütlesi
m_r	: Azaltılmış kütle
n	: Molekül sayı yoğunluğu
L	: Karakteristik uzunluk
l_h	: Hücre boyutu
Ma	: Mach sayısı
n	: Molekül sayı yoğunluğu
N	: Molekül sayısı, örnekleme sayısı
N^o	: Molekül sayı akısı
N_c	: İkili çarpışma sayısı
N_h	: Hücredeki molekül sayısı
N_{tm}	: Hücredeki temsili molekül sayısı
p, P	: Basınç
q	: Enerji akısı
$\mathbf{q}$	: Isı akı vektörü
r	: Konum
R	: Gaz sabiti
R_f	: 0 ile 1 arasında düzgün dağılmış rasgele bir sayı
S	: Yüzey alanı
S_D	: Yayınım etki kesiti yumuşaklık katsayısı

S_{μ}	: Viskozite etki kesiti yumuşaklık katsayısı
S	: Moleküler hız oranı
s	: İstatistiksel sapma
t	: Zaman
T	: Sıcaklık
T_r	: Dönme sıcaklığı
T_{tr}	: Öteleme sıcaklığı
T_{ov}	: Toplam sıcaklık
u, v, w	: Molekül hız bileşenleri
u', v', w'	: Molekül ısı hız bileşenleri
U, V, W	: Gaz akış hızı bileşenleri
V	: Hacim
$\mathbf{x}$	: Konum vektörü
x, y, z	: Kartezyen eksenler
α	: Isıl barınma katsayısı, molekül sapma açısı kosinüs üssü
α_N	: Dik enerji barınma katsayısı
α_T	: Teğetsel enerji barınma katsayısı
β	: En olası molekül hızının tersi
χ	: Molekül sapma açısı
γ	: Özgül ısılar oranı
δ	: Ortalama moleküler uzaklık
ε	: Moleküler enerji, kuyu-derinliği değişkeni, referans düzlemde açı
ξ	: Serbestlik derecesi
θ	: Açı
λ	: Ortalama serbest yol, ikincil viskozite katsayısı
μ	: Birincil viskozite katsayısı
ρ	: Yoğunluk
σ	: Etki kesiti, teğetsel momentum barınma katsayısı
σ'	: Dik momentum barınma katsayısı
σ_T	: Toplam etki kesiti
σ_{μ}	: Viskozite etki kesiti
σ_D	: Yayınım etki kesiti
τ	: Viskoz gerilme tensörü
Γ	: Gamma fonksiyonu
ω	: Viskozite sıcaklık üssü

MİKRO GAZ AKIŞLARININ DSMC (DOĞRUDAN BENZETİM MONTE CARLO) YÖNTEMİ İLE ÇÖZÜMLENMESİ

ÖZET

Son 25 senedir çok sayıda MEMS (Mikro Elektriksel Mekanik Sistemler) aparatı geliştirilmiştir. Bu MEMS aparatları sadece mekanik sistemleri değil, aynı zamanda çeşitli akışları da içerirler. Fakat bu akışlar hakkındaki bilgimiz mekanik kısımlar için olduğu kadar fazla değildir. Bu aparatların boyutları 1 mm ile 1 mikron arasında değişmektedir. MEMS aparatlarında bulunan akışların Knudsen sayıları (Kn) yüksek irtifa uçuşlarında rastlanan seyreltik gaz akışlarında olduğu gibi yüksektir. Yüksek Knudsen sayısı içeren ($Kn > 0.1$) seyreltik gaz akışlarında, yetersiz molekül çarpışmaları nedeni ile akışkan yerel olarak ısıl denge durumundan uzaklaşmaktadır. Bu durumda gerilme tensörünün ve ısı akı vektörünün sırayla gaz akış hızı gradyeni ve sıcaklık gradyeni ile olan doğrusal ilişkisi sona erdiği için, bünye denklemlerinde doğrusal ilişkileri kullanan Euler veya Navier-Stokes gibi geleneksel sürekli ortam denklemlerini kullanmak mümkün olmamaktadır. Ek olarak mikro boyutlu akışlarda akışkan yüzey alanının akışkan hacmine oranı çok fazla artar ve bu nedenle yüzey kuvvetleri hacim kuvvetlerine nazaran daha önemli duruma gelirler. Mikro gaz akışlarında seyrelme etkilerine ek olarak sıkışma ve viskoz saçılma (dissipation) etkileri de önem kazanırlar. Düşük Mach sayılarında bile büyük sıcaklık ve yoğunluk gradyenleri oluşmaya başlar. Yapılan deneyler de göstermiştir ki mikro boyutlu gaz akışları genelde hidrodinamik modeller kullanılarak yapılan çözümlemelerden daha farklı davranmaktadırlar. Mikro gaz akışlarını incelemek için seyreltik gaz akışlarında kullanılan yöntemlere başvurmak gerekmektedir.

Knudsen sayısının yüksek olduğu ($Kn > 0.1$) seyreltik gaz akışlarında, Burnett gibi yüksek dereceden doğrusal olmayan bünye denklemleri içeren sürekli ortam denklemleri kullanılabileceği gibi moleküler temelli yöntemler de kullanılabilmektedir. Burnett denklemlerinin çözümü içerdikleri karmaşık sınır şartları ve kararlılık problemleri nedeniyle çok zordur. Bu nedenle kullanımları yaygınlaşmamıştır. Seyreltik gaz akışlarında daha çok moleküler yöntemler kullanılmaktadır. Moleküler yöntemlerin temelinde Boltzmann denklemi vardır. Boltzmann denklemi matematiksel bir model olup analitik ve sayısal çözümü çok zordur. Bu nedenle genelde basitleştirilerek çözümü yoluna gidilmeye çalışılmaktadır. Fiziksel temelli moleküler yöntemlerin en bilineni moleküler dinamik (MD) olup genelde çok fazla sayıda molekülü takip etmeyi gerektirdiği için, akışkan incelemeleri çok küçük hacimlerde ve sınırlı zaman aralıkları için yapılabilmektedir. Genelde sıvıların ve yoğun gazların çözülmesinde kullanılmaktadır. Fiziksel temelli bir diğer yöntem ise doğrudan benzetim Monte Carlo (DSMC) yöntemidir. Molekül hareket ve çarpışma safhalarının birbirinden ayrıştırıldığı bu yöntemde, tek bir DSMC molekülü çok sayıda fiziksel molekülü temsil edebilmektedir.

DSMC yöntemi yüksek irtifa uçuşlarında ve mikro gaz akışlarında rastlanan seyreltik gazları çözümlmek için kullanılan, olasılıksal karakterli moleküler bir yöntemdir. DSMC yöntemi dört ana safhadan oluşmaktadır. Bunlar moleküllerin akış alanı içinde hareket ettikleri “hareket safhası”, moleküllerin hücre esaslı olarak sıraya dizildikleri “sıraya dizilme safhası”, moleküllerin çarpışmaya tabi tutuldukları “çarpışma safhası” ve son olarak da moleküllerin mikroskobik bilgilerinden akışa ait makroskobik değerlerin hesaplandığı “makroskobik değer hesaplama” safhasıdır.

DSMC yönteminde hesaplama zamanını kısaltacak yeni tekniklere ihtiyaç duyulmaktadır. Bu çalışmada öncelikle yöntemin hesaplama verimini arttıracak yeni katkılar üzerinde çalışılmıştır. İlk olarak yeni veri yapıları kullanılarak, DSMC yönteminin dört ana safhasından biri olan “sıraya dizilme safhası”na olan gereksinime son verilmiştir. Moleküllerin hücre temelli sıraya dizilmeleri işlemi “hareket safhası” içinde ayrı bir safhaya gerek olmadan gerçekleştirilmektedir. İkinci olarak mikro-lüle gibi basit geometrilerde, gaz akışlarında koordinat dönüşümleri kullanılmış ve moleküllerin hareket safhası sonunda ihtiyaç duyulan hücre bilgisine basit aritmetik işlemler ile ulaşma olanağı elde edilmiştir. Böylelikle moleküllerin hücreden hücreye takip edilmesine gerek kalmadığından dolayı yöntemin hesaplama süresi kısalmıştır. Üçüncü olarak daimi olmayan gaz akışlarının da incelenebilmesi için, gaz molekülleri ve hareketli duvar arasında momentum temelli bir çarpışma modeli geliştirilmiştir. Bu modelde moleküller ve duvar zamanda ilerletilirken, her molekül-duvar çarpışmasından sonra hareketli duvarın konum ve hız bilgileri yeniden güncellenmiştir. Önce hangi molekülün duvara çarpacağını hesaplamak için, her seferinde tüm moleküllerin hareketli duvara çarpma sürelerini hesaplayıp, en kısa sürede çarpacak molekülü hareketli duvar ile çarpıştırmak ve bu işlemi her çarpışmadan sonra tekrarlamak yerine, hesaplama verimliliğini arttırmak için, DSMC zaman adımı (Δt) belirli bir oranda küçültülmüş ve moleküllerin bu küçültülmüş zaman adımı içinde birer birer duvara çarpması modellenmiştir. Son katkı olarak da DSMC yönteminde akım sınır koşullarında en çok kullanılan iki yöntemden birisi olan hacim molekül üretim rezervuar yöntemi, yeni bir yaklaşım kullanılarak hem daha hızlı çalışacak hale getirilmiş hem de molekül üretim sayısında yaşanan sorun giderilmiştir.

Bu çalışmada aynı zamanda daha sonra yapılacak çalışmalara temel oluşturacak yeni bir DSMC çözücüsü geliştirmek de amaçlanmıştır. Çözüm süresini kısaltmak için DSMC çözücüsüne birden çok işlemcinin paralel çalışabildiği yüksek başarılı hesaplama (HPC) sistemlerinde de çalışabilme yeteneği kazandırılmıştır. DSMC çözücüsünde 2- ve 3-boyutlu geometrileri de içerecek bölgelere ayırma tekniği (DD) kullanılabilir. Her bir alt bölgede farklı fiziksel temsilci molekül oranları (F_N) kullanma imkanı da mevcuttur. Bölgeler arası bilgi aktarımı için mesaj geçme arayüzü (MPI) kullanılmaktadır. DSMC çözücüsünde hesaplama sürati ve programlama kolaylığı açısından statik yük dengeleme yöntemi ve yapısal ağlar kullanılmıştır.

Yeni DSMC çözücüsü 2- ve 3-boyutlu mikro-lülelere, 2-boyutlu mikro-kanallara, ısıl sürünme problemine ve son olarak da daimi olmayan adyabatik piston problemine uygulanmıştır. Elde edilen neticeler literatürden alınan sonuçlar ile karşılaştırılmış ve benzer oldukları görülmüştür.

ANALYSIS OF MICRO GAS FLOWS WITH DSMC (DIRECT SIMULATION MONTE CARLO) METHOD

SUMMARY

In the last 25 years a number of Micro Electro Mechanical System (MEMS) have been developed. These MEMS devices include not only the mechanical systems but also the fluids. Knowledge about these fluid flows in this scale is not as mature as the mechanical properties of the MEMS. As their dimensions vary between 1 mm and 1 micron, gas flows related with the MEMS devices have high Knudsen numbers (Kn) similar to rarefied gases of high atmosphere flights. Rarefied gas flows with high Knudsen number ($Kn > 0.1$) depart from local thermal equilibrium because of the inadequate molecule collisions. Consequently, the linear relations between not only shear stress and velocity gradient but also heat conduction and temperature gradient are lost. As a result continuum based Navier-Stokes and Euler equations cannot be used because these equations use linear constitutive equations. Additionally, the ratio of flow surface area to flow volume is dramatically increased in micro gas flow conditions. Thus surface forces dominate the volume forces. As a direct consequence of this, compressibility and viscous heating (dissipation) effects become more important in micro gas flows in addition to rarefaction effects. Even in low Mach numbers, large density and temperature gradients prevail. Experimental studies show that micro scale gas flows behave differently from large scale ones, which is generally studied with hydrodynamic models. In order to study micro gas flows, rarefied gas analyzing methods should be used.

In rarefied gas flows with high Knudsen number ($Kn > 0.1$), both continuum equations with high order non-linear constitutive equations, like Burnett equations, and molecular based methods can be used. Burnett equations are not used widely because these equations are difficult to solve and have both stability and complicated boundary condition problems. In rarefied gas flows, generally molecular methods are preferred. Molecular methods are based on the Boltzmann equation, which is a mathematical model and difficult to solve both analytically and numerically. Only its simplified versions can be solved. Molecular dynamic (MD) is the best-known physical molecular method. MD is generally used to analyze liquid and dense gas flows. Because of the huge number of the molecules, only very small flow volumes can be analyzed for very small time durations. Direct simulation Monte Carlo (DSMC) is another physical molecular model. In this method molecule movements and collisions are decoupled and one DSMC molecule represents many physical molecules.

DSMC is a stochastic molecular method to analyze rarefied gas flows, like high altitude and micro scale gas flows. DSMC consists of four main steps. The first step is “molecule movement” step. In this step, molecules move inside the flow area. The second step is “molecule indexing” step. Molecules are indexed based on their cell information. The third step is “molecule collisions” step. Here molecules in the same

cells undergo collisions with each other. The fourth step is “calculation of macroscopic properties” step. In this step, using microscopic molecule information, macroscopic values in each cell are calculated.

New techniques are needed in DSMC method to shorten the calculation time. In this study primarily new techniques are worked on to accomplish this goal. Firstly, using new data structures molecule indexing is realized implicitly in the “molecule movement” step. Secondly, in simple geometries like micro-nozzles, molecule cell information is calculated with simple arithmetic operations using generalized coordinates. Consequently, molecules are not traced from cell to cell, and calculation time is saved. Thirdly, to analyze unsteady gas flows with moving boundaries, a new momentum based collision model between gas and moving wall is developed. In this approach, molecules and wall are advanced in time and after each molecule-wall collision the position and velocity of the wall is updated. Instead of calculating the collision times of all the molecules with wall and realized the quickest one and repeat this procedure after each molecule-wall collision is not very time efficient. Instead, DSMC time step (Δt) is further divided smaller values and molecules hit the wall one-by-one. Finally, volume generation molecule reservoir method which is one of the two method used to generate molecules on the stream boundaries, is modified to correct the molecule production rate with a high calculation efficiency.

In this study a new DSMC solver is also developed to be a base for the future works. DSMC solver is capable of running on high performance calculation (HPC) systems with multi processors working parallel. Using domain decomposition (DD) method, gas flow area is divided into smaller sub-regions. Each sub-region can have different physical-representative molecule ratios (F_N). Data transfers among sub-regions are accomplished by message-passing interface (MPI) libraries. Structured meshes and static load balancing is employed in this DSMC solver because of reliability and speed issues.

New DSMC solver is applied to 2-D/3-D micro-nozzles, 2-D micro-channels, thermal creep problems and finally unsteady adiabatic piston problem. Results are compared with the literature and similar results are found.

New DSMC codes are applied to steady 2-D/3-D micro cold gas nozzles, 2-D micro channels, 2-D thermal creep problems and finally unsteady 2-D adiabatic pistons problem. Calculations are compared with the literature and similar results are found.

1. GİRİŞ

Yarı iletkenlerin üretim tekniklerinde yaşanan hızlı gelişmeler, üretiminde benzer tekniklerin kullanıldığı mikron boyutlu aparatların üretiminin de önünü açmıştır. Son 25 senedir mikron boyutlarında mekanik parça üretim yeteneğimizin artmasına paralel olarak, bu yetenek kullanılarak üretilen aparatlar biyoloji, tıp, optik, havacılık ve uzay, elektronik gibi bir çok alanda geniş bir kullanım yeri bulmuşlardır (Ho ve Tai, 1998). Ebatları 1 mm. ile 1 mikron arasında değişen bu aparatlar MEMS (Mikro Elektriksel Mekanik Sistemler) olarak adlandırılmaktadırlar (Gad-el-Hak, 2001). MEMS aparatları basınç, sıcaklık, kütle akışı ve ses duyargaları olarak kullanılabildiği gibi, mikro-robot, mikro-ısı-makineleri, mikro-ısı-pompaları ve mikro-itki-sistemleri gibi karmaşık sistemlerden de oluşabilmektedirler. MEMS aparatları sadece mekanik ve elektronik aksamaları değil, aynı zamanda çeşitli akışkanları da içerirler. Akışkan içeren MEMS cihazları arasında mikro boyutlarda imal edilen lüleler, kanallar, valflar, yataklar ve türbo-makineler bulunmaktadır.

Mikro boyutlu aparatların içinde veya çevresinde oluşan akışlar, mikro akışlar olarak tanımlanmaktadır (Liou ve Fang, 2006). Mikro gaz akışlarında akış geometrisinden hesaplanan karakteristik uzunluk (L), atmosferik şartlarda ortalama serbest yol (λ) ölçeğine yaklaşmaktadır. Bu durum atmosferin yüksek kesimlerinde karşılaşılan seyreltik gaz akışları ile bir benzerlik göstermektedir. Gazın seyrelmesi sonucunda, gaz değerlerinin hesaplandığı yerel hacimlerde molekül çarpışma sayısı azalır. Gaz moleküllerinin çevresindeki moleküller ile öteleme sıcaklığı (T_{tr}) bakımından ısı dengeye gelebilmesi için 3-4 adet çarpışmanın gerçekleşmesine ihtiyaç vardır (Reese ve diğ., 2003). Bu nedenle az sayıda gerçekleşen molekül çarpışmaları sonucunda yeteri kadar enerji ve momentum aktarımı yapılamaz ve akışkan yerel ısı dengeden uzaklaşır. Önce sınır koşullarında hız kaymaları ve sıcaklık sıçramaları oluşur. Gazın daha da seyrelmesi durumunda gerilme tensörü ile gazın akış hız gradyeni, ısı akı vektörü ile sıcaklık gradyeni arasındaki doğrusal ilişki sona erer. Bu durumda Euler ve Navier-Stokes denklemlerinde kullanılan bünye denklemleri geçerliliklerini yitirirler (Chapman ve Cowling, 1970). Bu nedenle mikro gaz

akışlarının analizi için geleneksel sürekli ortam denklemleri yerine seyreltik gaz akışlarında kullanılan hesaplama yöntemlerinin kullanılmasına ihtiyaç duyulmaktadır (Liou ve Fang, 2006).

Mikro boyutlu akışlarda, akışkan yüzey alanının akışkan hacmine olan oranı büyük oranda artar. Bu nedenle yüzey kuvvetleri hacimsel kuvvetlere nazaran baskın hale gelir ve akışkan beklenenden daha farklı özellikler göstermeye başlar. Deneylerden elde edilen sonuçlar da bize mikro boyutlardaki akışkan özelliklerinin büyük boyutlu akışkanlardan farklı olduğunu söylemektedir. Yapılan ölçümler göstermiştir ki uzun mikro-kanal gaz akışlarında basınç gradyenleri sabit olmamakta ve akı debisi geleneksel sürekli ortam yöntemleri ile hesaplanandan daha fazla olmaktadır (Karniadakis ve Beskok, 2002). Yine buna ek olarak mikro boyutlu yataklarda yük kapasitesi beklenenden az olmakta, mikro-motorlar ise beklenenden daha fazla akım çekmektedirler (Beskok, 2001). Mikro boyutlu akışlarda görülen bu farklılıklar gaz ve sıvı için değişik nedenlere dayanmaktadır. Gaz akışlarında seyreltiklik, viskoz ısınma, sıkıştırılabilirlik ve ısıl sürünme etkileri gözlenirken, sıvılarda ıslanma, yüzeye tutunma, ve elektro-kinetik etkiler görülür. Dolayısı ile MEMS aparatlarının doğru olarak tasarlanabilmeleri için deneylerle uyumlu sonuçlar veren, yeni akışkan çözümleme yöntemlerine ihtiyaç duyulmaktadır.

1.1 Mikro Akış Çözüm Yöntemleri

Mikro akışların modellenmesinde başlıca iki farklı yöntem vardır. Birinci yöntemde sürekli ortam kabulünden yola çıkılarak geliştirilen matematiksel modeller kullanılmaktadır. Sürekli ortam modelinde akışkanın her konumunda ve zamanda bir yoğunluk (ρ), basınç (p), sıcaklık (T) ve hız bileşenleri (U, V, W) tarif edilmektedir. Bu makro özellikleri hesaplamak için kütle, momentum ve enerjinin korunumunu temel alan doğrusal olmayan kısmi diferansiyel denklemler kullanılmaktadır. Bu denklemlerle çözüm yapabilmek için, bilinmeyen özellik sayısının denklem sayısına eşitlenmesine ihtiyaç vardır. Bu amaçla sürekli ortam denklemlerinde bünye denklemleri kullanılmaktadır. Bünye denklemlerinde bazı makro değerler, diğer makro değerler veya onların türevleri cinsinden ifade edilmektedirler. Bünye denklemleri sayesinde bilinmeyen makro değer sayısı denklem sayısına eşitlenmekte, başka bir deyişle denklem sistemi kapanmaktadır. Bu sürekli ortam denklemleri kullanılan bünye denklemlerine göre Euler, Navier-Stokes

veya Burnett denklemleri olarak adlandırılmaktadırlar. İkinci bir seçenek ise akışkanı oluşturan molekülleri esas alan moleküler dinamik (MD), doğrudan benzetim Monte Carlo (DSMC) gibi fiziksel modeller ile matematiksel bir model olan Boltzmann denklemini kullanmaktır.

Sürekli ortam modelleri matematiksel olarak daha kolay anlaşılır olup, çeşitli analitik ve sayısal yöntemler kullanılarak, moleküler modellere nazaran daha kısa sürede çözülebilirler. Bu nedenle akışın yerel ısıl denge konumunda veya yakın olduğu durumlarda, akışkan çözümlmeleri için mümkün olduğu kadar Euler veya Navier-Stokes gibi doğrusal bünye denklemleri içeren sürekli ortam modellerini kullanmak gerekir. Seyreltikliğin artması ile birlikte önce duvarlarda kayma hızları ve sıcaklık sıçraması oluşur. Sürekli ortam denklemlerinde bu etkilerin göz önüne alınması ve sınır şartlarında gereken düzeltmelerin yapılması gerekmektedir. Seyreltikliğin daha da yükselmesi durumunda ise ya Burnett denklemlerinde olduğu gibi yüksek dereceden doğrusal olmayan bünye denklemlerinin kullanılması ya da moleküler modellere yönelinmesi gerekmektedir.

Gaz akışlarında seyreltikliğin ölçüsü boyutsuz Knudsen sayısı (Kn) ile belirlenmektedir. Knudsen sayısı,

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \quad , \quad (1.1)$$

bağıntısı ile verilmekte olup, bu bağıntıda yer alan λ değeri moleküllerin birbirleri ile çarpışmak için kat ettikleri uzaklığın ortalaması olup ortalama serbest yol olarak tanımlanmaktadır. L değeri ise akışın karakteristik boyutunu ifade eder. L değerinin akış geometrisinin bütününden tek bir değer olarak alınması yerine, akışa ait yerel makroskobik değerlerin ve bu değerlere ait düşümlerin (gradyenlerin) oranından aşağıdaki bağıntı,

$$L = \frac{\rho}{|d\rho/dy|} \quad , \quad (1.2)$$

kullanılarak elde edilmesi daha doğru bir yaklaşım olarak değerlendirilmektedir (Bird, 1994). Burada ρ yoğunluk, y ise uzaklıktır.

Denklem (1.1)'den görüleceği üzere L küçüldükçe veya λ büyüdükçe Knudsen sayısı büyür. Gazın yoğunluğu (ρ) veya gazın molekül sayı yoğunluğu (n)

azaldıkça, gaz molekülleri birbirinden uzaklaşır ve birbirleri ile çarpışmak için daha uzun yol kat ederler. Bu nedenle ortalama serbest yol ile gaz yoğunluğu arasında ters bir orantı ($\lambda \approx n^{-1}$) mevcuttur. λ değerinin büyümesi gaz yoğunluğunun azaldığı anlamına gelmektedir. Mikro gaz akışlarında ise karakteristik boyut çok küçük değerler almaktadır. Bu nedenlerden dolayı yüksek Knudsen sayıları içeren seyreltik gaz akışlarına genelde, karakteristik boyutun küçük olduğu mikro akış ortamlarında veya gaz yoğunluğunun düşük olduğu yüksek irtifalı uçuşlarda rastlanmaktadır.

Farklı Knudsen sayılarına göre sınıflandırılan akış bölgeleri Çizelge 1.1’de verilmektedir. Knudsen sayısının sıfıra yakın olduğu durumlarda sürekli ortam modellerinde viskozite (μ) ve ısı iletim katsayısı (k) terimleri ihmal edilir ($\mu = 0, k = 0$) ve Navier-Stokes denklemleri sürtünmesiz Euler denklemlerine dönüşür. Bu durumda akış makroskobik açıdan eşentropili, mikroskobik açıdan ise yerel ısı dengededir. $Kn < 0.01$ bölgesinde Navier-Stokes denklemleri kayma hızsız sınır koşulları ile kullanılabilir. Kayma hızlı akış bölgesi olan $0.01 < Kn < 0.1$ aralığında Navier-Stokes denklemleri hala geçerli olmakla birlikte, sınır koşullarında hız kayması ve sıcaklık sıçraması düzeltmeleri yapılmasına ihtiyaç duyulur. Geçiş bölgesinde ($0.1 < Kn < 10$) yüksek dereceden bünye denklemleri içeren Burnett denklemleri veya moleküler modelleri kullanmak mümkündür. Burnett denklemleri son derece karmaşık olup, hem içerdikleri kararlılık problemleri hem de sorunlu sınır koşulları nedeni ile çözümleri son derece güçtür (Shen, 2005). Molekül çarpışmalarının olmadığı varsayılan serbest-molekül bölgesinde ise moleküler yöntemler kullanılmaktadır.

Çizelge 1.1 : Farklı Knudsen sayılarına göre akış bölgeleri.

$Kn < 0.01$	Kayma Hızsız Akış Bölgesi
$0.01 < Kn < 0.1$	Kayma Hızlı Akış Bölgesi
$0.1 < Kn < 10$	Geçiş Bölgesi
$Kn > 10$	Serbest-Molekül Bölgesi

1.1.1 Sürekli ortam modelleri

Sürekli ortam modellerinde akışa ait kütle, momentum ve enerji uzayın ve zamanın her noktasında kısmi diferansiyel denklemler ile tarif edilmektedir. Aşağıda viskoz akış için diferansiyel denklemler verilmiştir:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (1.3)$$

$$\rho \left(\frac{Du_i}{Dt} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad (1.4)$$

$$\rho \left(\frac{De}{Dt} \right) = -p \frac{\partial u_i}{\partial x_i} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}. \quad (1.5)$$

Süreklilik denklemi (1.3), momentum denklemi (1.4), enerji denklemi (1.5) ile verilmektedir. Burada u hızı, e iç enerjiyi, T sıcaklığı, t zamanı, x mesafeyi, p basıncı, ρ yoğunluğu, τ_{ij} viskoz gerilim tensörünü, q ise ısı akı vektörünü belirtmektedir.

$Kn \rightarrow 0$ koşullarında mikroskobik açıdan akış yerel olarak ısı dengededir. Bu durum makroskobik açıdan eşentropili akışa karşılık gelmektedir. Bu koşullarda sürekli ortam denklemlerinde $\tau_{ij} = 0$ ve $q_i = 0$ alınır ve sürtünmesiz akışa karşılık gelen Euler denklemleri kullanılır. Euler denklemlerini kapamak için sadece, aşağıdaki ek bağıntılara ihtiyaç duyulmaktadır:

$$de = c_v dT, \quad (1.6)$$

$$p = \rho R T. \quad (1.7)$$

Yukarıdaki denklemlerde c_v sabit hacimde özgül ısı, R ise gaz sabitidir. Sınır koşullarında hız ve sıcaklık düzeltilmesine gerek yoktur. Kn sayısı arttıkça akış mikroskobik olarak yerel ısı denge durumundan uzaklaşmaya başlar ve bu durum makroskobik olarak sürtünmeli akışa karşılık gelir. Artık sürekli ortam denklemlerinde yer alan viskoz gerilme tensörü ve ısı akı vektörü hesaba katılmak durumundadır.

$Kn < 0.01$ bölgesinde korunum denklemlerinde yer alan viskoz gerilme tensörü ve ısı akı vektörü, denklemlerin kapanabilmesi için akış hızı gradyenlerine ve sıcaklık

gradyenlerine doğrusal olarak ilişkilendirilir. Bu terimlerin ilave edilmesi ile oluşan sürekli ortam denklemleri Navier-Stokes denklemleri olarak adlandırılır. Bu ilave denklemlere ise bünye denklemleri adı verilir. Bu bünye denklemleri aşağıda verilmiştir:

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \delta_{ji} \lambda \frac{\partial u_i}{\partial x_k}, \quad (1.8)$$

$$q = -k \frac{\partial T}{\partial x_j}. \quad (1.9)$$

μ ve λ ise sırası ile birincil viskozite ve ikincil viskozite katsayılarını, δ_{ji} Kronecker tensörünü ($\delta = 1 (i = j)$, $\delta = 0 (i \neq j)$), k ise ısı iletim katsayısını göstermektedir. Stokes Hipotezi ile μ ve λ katsayıları,

$$\lambda + \frac{2}{3} \mu = 0, \quad (1.10)$$

bağıntısında olduğu gibi ilişkilendirilmiştir. Yine bu bölgede sınır koşullarında hız ve sıcaklık düzeltmesi yapılmasına gerek bulunmamaktadır.

$0.01 < Kn < 0.1$ bölgesinde artık gaz ile duvar arasında bir hız ve sıcaklık farkı oluşmaya başlar. Bunun nedeni gazın seyreltik hale gelmesi ve sınır ile gaz molekülleri arasında artık yeteri kadar molekül çarpışmasının olmamasıdır. Bu nedenle moleküllerin çarpması ile sağlanan momentum ve enerji aktarımları artık yeteri kadar hızlı yapılamaz ve sınır yakınında gaz akışı ile sınır arasında bir hız ve sıcaklık farkı oluşmaya başlar. Bu nedenle $0.01 < Kn < 0.1$ aralığında Navier-Stokes denklemlerinin sınır koşullarında bir düzeltme yapılmasına ihtiyaç vardır. Eşsıcaklıklı duvar koşullarında Maxwell (1879) tarafından önerilen bu kayma hızı,

$$u_s - u_w = \frac{2 - \sigma}{\sigma} \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial n} \right)_w, \quad (1.11)$$

bağıntısı ile ifade edilmektedir. u_s ve u_w sırası ile kayma hızını ve duvar hızını,

$\left(\frac{\partial u}{\partial n} \right)_w$ duvar yakınında duvara teğet gaz akış hızının duvara dik yöndeki gradyenini

ifade eder. σ değeri ise teğetsel momentum barınma katsayısı (TMAC) olup, değeri hareket etmeyen duvar için aşağıdaki bağıntıdan hesaplanmaktadır:

$$\sigma = \frac{\tau_i - \tau_r}{\tau_i}. \quad (1.12)$$

Yukarıda yer alan bağıntıda τ_i ve τ_r sırası ile moleküllerin duvara çarpmadan önceki ve çarptıktan sonraki momentum akı değerlerini ifade etmektedirler. Eğer duvardan yansıyan moleküllerin duvara teğet momentum akı değerleri ile duvara çarpmadan önceki duvara teğet momentum değerleri aynı ise ($\tau_i = \tau_r$), $\sigma = 0$ değerini alır. Eğer duvardan yansıyan moleküllerin duvara teğet momentum akısının toplam değeri $\tau_r = 0$ olursa, $\sigma = 1$ değerini alır.

Kayma hızı sadece duvara teğet akış hızının duvara dik gradyeninden değil, duvar boyunca oluşan sıcaklık gradyeninden de kaynaklanabilmektedir. Bu ilave kayma hızı “ısıl sürünme” olarak ifade edilir. Bu ilişki Von Smoluchowski (1898) tarafından,

$$u_s - u_w = \frac{2 - \sigma}{\sigma} \lambda \frac{\partial u}{\partial n} + \frac{3}{4} \frac{\mu}{\rho T_g} \left(\frac{\partial T}{\partial s} \right)_w, \quad (1.13)$$

bağıntısı ile verilmiştir. Burada μ birincil viskozite katsayısı, λ ortalama serbest yol, ρ yoğunluk, T_g gaz sıcaklığıdır. $\left(\frac{\partial T}{\partial s} \right)_w$ ise duvar boyunca oluşan sıcaklık gradyenini belirtir. Bağıntı yoğunluğun tersi ile orantılı olduğundan, ısıl sürünme gaz seyredikçe daha fazla önem kazanmaktadır. Aynı ifadeler duvar ile duvara yakın gaz sıcaklıkları arasındaki fark ($= T_g - T_w$) için de geçerlidir. Bu sıcaklık farkı aşağıdaki,

$$T_g - T_w = \frac{2 - \alpha}{\alpha} \left[\frac{2\gamma}{(\gamma + 1)} \right] \frac{\lambda}{P_r} \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_w, \quad (1.14)$$

bağıntısı ile ifade edilmektedir (Gad-el-Hak, 2001). Yukarıda Pr Prandtl sayısı $\left(= \frac{c_p \mu}{k} \right)$ olup, γ özgül ısı oranıdır. c_p sabit basınçta özgül ısıyı, μ viskozite katsayısını, k ise ısı iletim katsayısını ifade etmektedir. α ısıl barınma katsayısı ise aşağıda verilmiştir:

$$\alpha = \frac{q_i - q_r}{q_i - q_w}. \quad (1.15)$$

Yukarıdaki ifadelerde i duvara çarpan molekülleri, r duvardan yansıyan molekülleri, w duvarı, q ise enerji akısını belirtmektedir. Duvardan yansıyan moleküller duvara çarpmadan önceki enerjilerini korudukları takdirde ($q_i = q_r$), ısıl barınma katsayısı $\alpha = 0$ olur. Eğer duvara çarpan moleküller tamamen duvarın sıcaklığını örneklerse ($q_r = q_w$) ısıl barınma katsayısı $\alpha = 1$ olur.

$0.1 < Kn < 10$ bölgesinde ise gaz akışı artık geçiş bölgesinde yer almakta olup, bu şartlar altında sürekli ortam denklemlerine ikinci veya daha yüksek dereceden kayma hızı ve sıcaklık sıçraması sınır koşullarının uygulanması gerekmektedir. Yüksek dereceden sınır koşulları kullanılsa bile Navier-Stokes denklemlerine ait bünye denklemleri geçerliliklerini yitirdikleri için Navier-Stokes denklemleri bu geçiş bölgesinde kullanılmazlar. Navier-Stokes denklemleri ile ilgili bir diğer problem de Stokes hipotezinden kaynaklanmaktadır. Gaz akışı ısıl dengeden uzaklaştıkça $\lambda + \frac{2}{3}\mu$ toplamı artık sıfır olmaz (Gad-El-Hak, 1995). Bu bölgede yüksek dereceden bünye denklemleri içeren Burnett denklemleri kullanılmalıdır (Burnett, 1935). Burnett denklemlerinde kullanılan bünye denklemleri aşağıda verilmektedir:

$$\begin{aligned} \tau_{ij} = & K_1 \frac{\mu^2}{p} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + K_2 \frac{\mu^2}{p} \left[-\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_j} - \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} - 2 \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right] + \\ & K_3 \frac{\mu^2}{\rho T} \frac{\partial^2 T}{\partial x_i \partial x_j} + K_4 \frac{\mu^2}{\rho p T} \frac{\partial p}{\partial x_i} \frac{\partial T}{\partial x_j} + K_5 \frac{\mu^2}{\rho T^2} \frac{\partial T}{\partial x_i} \frac{\partial T}{\partial x_j} + K_6 \frac{\mu^2}{p} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \frac{\partial u_k}{\partial x_j} + \\ & \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \delta_{ji} \lambda \frac{\partial u_i}{\partial x_k} , \end{aligned} \quad (1.16)$$

$$\begin{aligned} q_i = & -k \frac{\partial T}{\partial x_i} + \theta_1 \frac{\mu^2}{\rho T} \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \frac{\partial T}{\partial x_i} + \theta_2 \frac{\mu^2}{\rho T} \left[\frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(T \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) + 2 \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right] + \\ & \left[\theta_3 \frac{\mu^2}{\rho p} \frac{\partial p}{\partial x_j} + \theta_4 \frac{\mu^2}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} + \theta_5 \frac{\mu^2}{\rho T} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right] \frac{\partial u_j}{\partial x_i} . \end{aligned} \quad (1.17)$$

Yukarda yer alan bağıntılarda kullanılan sabitler, katı küre moleküller için hesaplanmış olup, aşağıda yer almaktadır.

$$\begin{aligned} K_1 = 4.056, \quad K_2 = 2.028, \quad K_3 = 2.418, \quad K_4 = 0.681, \quad K_5 = 0.219, \\ K_6 = 7.424, \quad \theta_1 = 11.644, \quad \theta_2 = -5.822, \quad \theta_3 = -3.090, \quad \theta_4 = 2.418, \\ \theta_5 = 25.157 . \end{aligned} \quad (1.18)$$

İkinci dereceden düzeltmeleri de içeren kayma hızları ile ilgili çalışmalar Karniadakis ve Beskok (2002) tarafından yapılmış olup, kayma hızını boyutsuz olarak veren bağıntı,

$$U_s - U_w = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \left[\frac{Kn}{1 - b Kn} \left(\frac{\partial U}{\partial n} \right)_s \right], \quad (1.19)$$

ile verilmektedir. Bu kayma hızı ikinci dereceden düzeltmeleri de içerdiği için $Kn > 0.1$ bölgesinde kullanılabilmektedir. Burada b genel kayma katsayısı olup,

$$b = \frac{1}{2} \left[\frac{\left(\frac{\partial w}{\partial n} \right)_0}{w_0} \right]_s, \quad (1.20)$$

kayma olmayan çözümde çevrinti akısının, duvar çevrintisine oranıdır.

1.1.2 Moleküler modeller

1.1.2.1 Moleküler dinamik yöntem

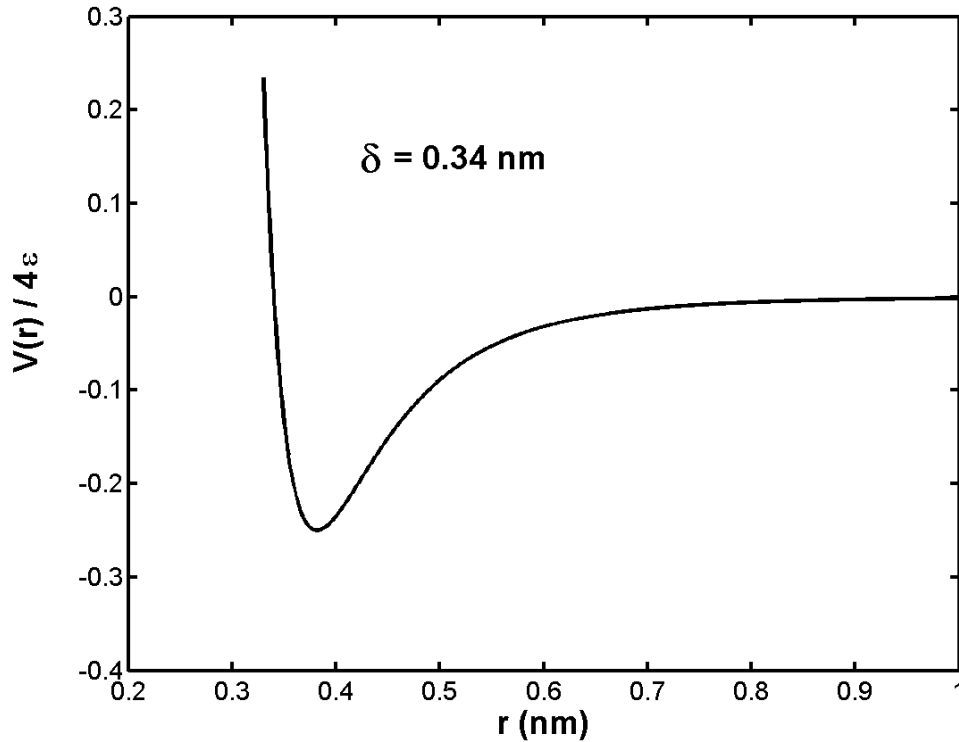
Moleküler modellerde sürekli ortam modellerinin tersine, akışkanın bir veya daha fazla atomun bir araya gelmesinden oluşan çok sayıda moleküllerden oluştuğu görülmektedir. Moleküler modellerde amaç, incelenecek bölgede yer alan moleküllerin konum ve hız bilgilerinin zamanda değişimini takip etmek ve bu surette mikroskobik bilgilerden basınç, sıcaklık, akış hızı ve yoğunluk gibi daha kolay anlaşılır makroskobik değerlerin elde edilmesidir. Moleküler modeller moleküler dinamik (MD) gibi belirlenimsel (deterministik) veya doğrudan benzetim Monte Carlo (DSMC) gibi olasılıksal (stokastik) yaklaşımlı olabilir. Moleküler modellerin sadece MD ve DSMC gibi fiziksel modeller olduğu düşünülmemelidir. Boltzmann denklemi moleküler temelli matematiksel bir modeldir.

Moleküler dinamik moleküller arası mesafelerin büyük olduğu seyreltik gaz akışları için verimli bir hesaplama yöntemi değildir. Daha çok 100 nm'den daha küçük boyutlardaki sıvı ve yoğun gazların, bir kaç nano saniyelik hesaplamalarında kullanılmaktadır (Karniadakis ve Beskok, 2002). En güncel MD uygulamalarından birisi de karbon nano tüplerin akışkan-ısı davranışlarının incelenmesidir. Bu modelde moleküller önce çalışılacak boyut sayısına uygun olarak iki veya üç boyutlu örgülere konumlandırılırlar. Hızları ise belirlenen başlangıç sıcaklığına uygun olarak Maxwell

hız dağılımından hesaplanır. İkinci aşamada moleküller arası potansiyel enerji fonksiyonu belirlenir ve moleküller birbirleri ile seçilen bu potansiyel enerji modeli uyarınca etkileşirler. Aşağıda verilen Lennard-Jones 6-12 potansiyel modeli,

$$V(r) = 4 \varepsilon \left[\left(\frac{r}{\delta} \right)^{-6} - \left(\frac{r}{\delta} \right)^{-12} \right], \quad (1.21)$$

deneyler ile uyum gösterdiği için en çok kullanılan modellerden birisidir. Burada farklı akışkanlar için farklı değerler içeren ε ve δ değerleri sırası ile potansiyel kuyu değeri ile karakteristik uzaklıktır. Moleküller arası uzaklık δ olduğunda potansiyel işaret değişir. ε değeri ise potansiyel enerjinin alabileceği en küçük değeri ifade eder. r değişkeni ise moleküller arasındaki uzaklığı verir. Bu denklemde ikinci terim kısa mesafeli itme kuvvetini oluşturur. Böylece moleküller birbiri üzerine düşmezler. İlk terim ise uzak mesafelerde etkili olan moleküller arası çekme kuvvetini belirtir. Sıvı argon için boyutsuz Lennard-Jones potansiyeli $V(r)/4 \varepsilon$ Şekil 1.1’de sunulmuştur.



Şekil 1.1 : Sıvı argon için Lennard-Jones potansiyel enerjisi.

Üçüncü aşamada, moleküller üzerlerindeki hız ve Lennard-Jones potansiyelinin oluşturduğu kuvvet alanının etkisi altında hareket ederler. Hareketleri Newton'un ilkeleri uyarınca olup, birbirleri veya duvar molekülleri ile çarpışarak yollarına devam ederler. Bir molekülün izleyeceği yörünge tüm diğer moleküllere bağlı olduğu için N adet molekül için yaklaşık N^2 kadar hesaplama gerektirir. Hesaplama yükünü oldukça arttıran bu sorunu gidermek için belirli bir uzaklıktan sonra (örneğin $r_c = 2.5 \delta$) potansiyel enerjinin etkisi sıfırlanmakta ve sadece birbirine r_c uzaklığından daha yakın olan moleküllerin birbiri ile etkileşeceği kabul edilmektedir. Böylece etkileşime giren molekül sayısı azaltılarak hesaplama süresinin kısaltılması amaçlanmıştır.

1.1.2.2 Boltzmann denklemi ve çözüm yöntemleri

Boltzmann denklemi hız dağılım fonksiyonunun (f) zamanda değişimini vermekte olup,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} \equiv \int \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{4\pi} (f^* f_1^* - f f_1) c_r \sigma d\Omega d\mathbf{c}_1, \quad (1.22)$$

bağıntısı ile verilmektedir (Boltzmann, 1872). Burada $\mathbf{c}$ molekül süratini, $\mathbf{r}$ konumu, $\mathbf{F}$ dış kuvveti, c_r çarpışan iki molekül arasındaki bağıl hızı, σ etki kesitini, Ω açıyı ifade etmektedir. Boltzmann denkleminin sol tarafında yer alan ilk terim hız dağılım fonksiyonunun zamana bağlı olarak değişme hızını, ikinci terim moleküllerin hızları nedeni ile konum değişikliğini, üçüncü terim ise dış kuvvet nedeni ile molekül hız değişikliklerini ifade eder. Denklemin sağ tarafında ise çarpışma terimi yer alır. Çarpışma teriminde aynı konumdaki $\mathbf{c}$ ve $\mathbf{c}_1$ gibi farklı süratlere sahip moleküllerin çarpışması formüle edilmektedir. Bu hızlara sahip moleküller çarpıştıkları zaman bir momentum ve enerji aktarımı oluşur. Bu nedenle çarpışan moleküllerin hızları, çarpışmadan sonra $\mathbf{c}^*$ ve $\mathbf{c}_1^*$ değerlerini alır. Bu hızlara sahip moleküllerin hız dağılım fonksiyonları ise sırası ile f , f_1 , f^* ve f_1^* olarak ifade edilmektedir. İkili çarpışma kısıtlaması Boltzmann denklemindeki ilk kabuldür. Moleküler kaos ise ikinci kabuldür. Moleküler kaos ile moleküllerin hız ve konumları arasında bir ilişki bulunmadığı ve hız dağılım fonksiyonlarının birbiri üzerinde bir etkisi olmadığı anlatılmaktadır (Bird, 1994).

Hız dağılım fonksiyonu $f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)$, t zamanında, $\mathbf{x} + d\mathbf{x}$ konumunda, $\mathbf{c} + d\mathbf{c}$ hızında kaç tane molekül olduğunu hesaplamakta kullanılır. Eğer Boltzmann denklemini kullanarak f hız dağılım fonksiyonu hesaplanabiliyorsa, aşağıdaki denklemleri kullanarak bu gaza ait makroskobik değerleri hesaplamak mümkündür (Karniadakis ve Beskok, 2002):

$$\rho(\mathbf{x}, t) = m \int f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c}, \quad (1.23)$$

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}, t) = \frac{m}{\rho} \int \mathbf{c} f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c}, \quad (1.24)$$

$$T(\mathbf{x}, t) = \frac{m}{3 n k_B} \int c'^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c}. \quad (1.25)$$

Bu denklemlerde $\mathbf{x}$ konumu, ρ yoğunluğu, m molekül kütlesini, $\mathbf{U}$ gaz akış hızını, c molekül hızını, T sıcaklığı, n molekül sayı yoğunluğunu, k_B Boltzmann sabitini, $\mathbf{c}'$ ise ısı hız vektörünü ($= \mathbf{c} - \mathbf{U}$) gösterir.

Her ne kadar Boltzmann denkleminde sadece bir tane bağımlı değişken olan f hız dağılım fonksiyonu yer almış olsa bile, hız dağılım fonksiyonun kendisi 3 boyutlu bir ortamda üç tanesi konum, üç tanesi hız ve bir tanesi zaman olmak üzere yedi adet bağımsız değişkene bağlıdır. Boltzmann denkleminin sağ tarafında yer alan çarpışma terimi denklemin çözümü için bir engel teşkil eder. Analitik çözüm genelde ısı dengede olan gazlar ve çarpışmasız akışlar için mümkündür. Bunun dışında Boltzmann denkleminin analitik çözümü imkansızdır (Shen, 2005). Sayısal çözümlere ulaşmak bile kolay değildir. Bu nedenle Boltzmann denkleminin çözümü için denklemin basitleştirilmesi ve bu basit hali ile yaklaşık çözümlerinin elde edilmesine çalışılmaktadır.

En yaygın kullanılan yöntemlerin bazılarında öncelikle Boltzmann denkleminin yaklaşık biçimleri geliştirilmekte ve bu biçimlerinin çözülmesine çalışılmaktadır. Grad moment yöntemi Boltzmann denkleminin çözümü için kullanılan ilk yaklaşık biçimlerinden biridir (Grad, 1949). Bu yöntemde hız dağılım fonksiyonu dikey Hermit çokterimlileri (polinomları) kullanılarak, Maxwell dağılımı (f_0) etrafında serilere açılmaktadır:

$$f = f_0(a^0 H^0 + a^1 H^1 + \frac{1}{2} a^2 H^2 + + \frac{1}{N!} a^N H^N ..). \quad (1.26)$$

Boltzmann denkleminin yerleştirilen bu serilerden faydalanılarak çeşitli dereceden çözüm yolları geliştirilmektedir. Grad 13-moment denklemleri önceleri üçüncü dereceden açılım için önemli bir gelişme olarak görülmüş ise de daha sonra geçiş bölgesinde yeterli olamadıkları anlaşılmıştır (Bird, 1994). Chapman-Enskog yönteminde ise hız dağılım fonksiyonunun Maxwell dağılımı (f_0) etrafında açılımı Knudsen sayısı temel alınarak gerçekleştirilmektedir (Chapman ve Cowling, 1972).

$$f = f_0(1 + a_1 Kn + a_2 Kn^2 + \dots) \quad (1.27)$$

Bu açılımın birinci dereceden çözümü Euler denklemlerini, ikinci dereceden çözümü Navier-Stokes denklemlerini, üçüncü dereceden çözümü ise Burnett denklemlerini vermektedir. Yüksek Knudsen sayılarında Burnett denklemlerini çözmek bir sonraki bölümde yer verilen doğrudan benzetim yöntemlerine göre çok daha fazla bir çaba gerektirmektedir (Bird, 1994).

Bazı yöntemlerde ise Boltzmann denkleminin sağ tarafında yer alan çarpışma terimi modellenerek denklemin çözümü basitleştirilmeye çalışılır. Bunlar içinde en yaygın olanı Bhatnagar ve diğ. (1954) tarafından önerilen BGK (Bhatnagar, Gross, Krook) yöntemidir. BGK yönteminde ısı dengede olmayan bir sistemin ısı dengesine varma yönünde davranacağı varsayılır. Sistemin bu davranışı kendini Boltzmann denkleminin çarpışma teriminde aşağıda olduğu gibi ifade eder:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} = \frac{1}{\tau} (f_0 - f). \quad (1.28)$$

Bu bağıntıda $\frac{1}{\tau}$ moleküllerin çarpışma frekansı, f_0 ise Maxwell hız dağılım fonksiyonudur. BGK yaklaşımı eşsıcaklıklı akışlarda oldukça doğru sonuçlar vermekle birlikte, eşsıcaklık şartlarının oluşmadığı koşullarda ilave düzeltmeler yapılmasını gerektirir (Karniadakis ve Beskok, 2002). Doğrusal olmayan bu integral-diferansiyel denklemin çözümü yine de çok zordur.

Cercignani (1988) tarafından önerilen doğrusallaştırılmış Boltzmann denklemi yönteminde ise hız dağılım fonksiyonu Maxwell hız dağılım fonksiyonu etrafında (f_0) doğrusallaştırılır:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) = f_0 [1 + h(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)]. \quad (1.29)$$

Yukarıda yer alan bağıntıda $h(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$ bozuntu (perturbasyon) dağılım fonksiyonudur.

Bu yeni değişkeni Boltzmann denkleminde yerine koyarsak,

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}} = \int \int_{R^3 S^+} f_0(c_*) (h' + h_*' - h - h_*) dn dc_* , \quad (1.30)$$

elde ederiz. Genelde düşük hızlı akışlara uygulanan doğrusallaştırılmış Boltzmann denklemi aslına oranla oldukça basitleşmiş olmasına karşın, çözümü genelde sadece basit sınır koşullarında mümkündür (Shen, 2005).

Boltzmann denkleminin çözümü için geliştirilen bir diğer yöntemde Lattice-Boltzmann (LBM) yöntemidir (McNamara ve Zanetti, 1988). BGK yaklaşımı uygulanan Boltzmann denkleminde, esas zorluğu yaratan çarpışma terimi konumsal bir çözüm ağı üzerine yerleştirilerek çözüme gidilir:

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\tau} (f_i - f_i^0). \quad (1.31)$$

Bu denklemde f_i^0 Maxwell hız dağılım fonksiyonunu göstermektedir. f_i hesaplandığı takdirde yoğunluk ve akış hızları,

$$\rho = \sum_i f_i , \quad (1.32)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_i \mathbf{c}_i f_i , \quad (1.33)$$

bağıntılarından hesaplanabilmektedir. Bu yöntemde sadece zaman ve molekül konumları değil aynı zamanda molekül hızları ve molekül hareket yönleri de sabit ve küçük bir sayıya indirgenerek ayrıklaştırılmaktadır. Örnek vermek gerekirse 2 boyutlu bir akış geometrisi için sadece 9 tane hız kullanmak yeterli olmaktadır. Bu ayrık hızlardan 8 tanesinin yönleri 360 derecelik bir ölçek içinde 0, 45, 90, 135, 180, 225, 270, 315 derecelerdir. Son hızın büyüklüğü ise 0'dır. Bu yöntemde görüldüğü üzere basit aritmetik işlemler kullanılmaktadır. Parallellendirmeye uygun olan bu yöntem, karmaşık sınır koşullarına ve geometrilere başarı ile uygulanabilir (Shen, 2005). Sıkıştırılabilirlik etkilerinin önem kazandığı mikro gaz akışlarına uygulanması için yapılan çalışmalarda tam bir başarı ile sağlanmamıştır. Bu nedenle LBM yöntemi genelde sıkıştırılamaz akışların çözülmesinde kullanılmaktadır.

1.1.2.3 DSMC yöntemi

Bird (1994) tarafından geliştirilen DSMC yöntemi, moleküler temelli fiziksel bir benzetim yöntemi olup, olasılıksal bir karakter içermektedir. Esaslarını gazların kinetik teorisinden almaktadır (Chapman ve Cowling, 1970). DSMC ve Boltzmann denklemi aynı fiziksel esasları temel almakta olup, aralarındaki bağlantı Wagner (1992) tarafından verilmektedir. DSMC yöntemi fiziksel temelli bir model olduğu için matematiksel yöntemlerin sayısal çözümlerinde karşımıza çıkan yapay kararsızlık problemlerini de içermez (Bird, 2000). Her ne kadar Alexandre ve diğ. (1995) tarafından yoğun gazlara uygulanabileceği gösterilmişse de genelde gazın yoğun olmadığı ortamlarda ve mikro boyutlu gaz akışlarının incelenmesinde kullanılmaktadır. Bu tip akışların yer aldığı akış bölgeleri, içerdikleri yüksek Knudsen sayısı ($0.1 < Kn < 10$) nedeni ile geleneksel sürekli ortam denklemlerinin kullanılmasına olanak sağlamazlar. DSMC yöntemi tüm Knudsen sayıları için geçerli olmakla birlikte, $Kn < 0.1$ 'den küçük olduğu durumlarda çözüm süresi göz önüne alındığında diğer yöntemlere oranla pahalı bir yöntem haline gelmektedir. Bu nedenle gazın seyreltik olmadığı durumlarda, sürekli ortam modellerinin kullanılması daha uygun olmaktadır.

DSMC yönteminde gaz akış alanı aynen hesaplamalı akışkanlar dinamiğinde (CFD) olduğu gibi çözüm ağları ile kaplanmaktadır. Çözüm ağları arasında kalan bu hacimler DSMC yönteminde hücre olarak adlandırılmaktadır. DSMC yönteminin temelini oluşturan molekül hareketleri, moleküllerin hücrelerine göre sıraya dizilmesi, molekül çarpışmaları ve makro değer hesaplamaları hep bu hücreler esas alınarak yapılmaktadır. Hücre boyutları ortalama serbest yol (λ) yani ardışık molekül çarpışmalarının ortalama mesafesi ile ilişkilendirilir. Bunun nedeni çarpışacak moleküllerin seçiminde aynı hücre içinde yer almanın şart olması ve böylece sadece birbirine ortalama serbest yol mesafesinden daha yakın olan moleküllerin çarpışmalarının garantilenmesidir. Sadece birbirine yakın moleküllerin çarpıştırılmaları fiziksel olarak gerçekçi bir yaklaşımdır.

Hücrelerin oluşturulmasının ardından gaz akış alanı, başlangıç makro değerlerine uygun olarak birden çok sayıda fiziksel molekülü temsil eden DSMC molekülleri ile doldurulur. DSMC molekülleri hücrelere konum olarak rasgele yerleştirilirken, hızları hücre sıcaklığı ve gaz akış hızı bilgileri kullanılarak hesaplanmaktadır. Gerektiğinde DSMC moleküllerinin iç enerjisini oluşturan dönme ve titreşim

enerjileri de hücre sıcaklığından hesaplanır. Hesaplanan konum, momentum ve enerji değerleri veri yapıları kullanmak sureti ile DSMC moleküllerine atanır.

DSMC yönteminin ilk safhası hareket safhasıdır. Bu safhada tüm moleküller zamanda bir zaman adımı kadar (Δt) ilerletilirler ve üzerlerinde taşıdıkları hızla orantılı olarak konum değiştirirler. Bu zaman adımı moleküllerin ortalama çarpışma zamanından daha küçük ($\Delta t < t_c$) seçilmelidir. Bunun nedeni DSMC yönteminde molekül hareket ve çarpışma safhalarının birbirinden ayrılaşmış olmasıdır. Bu nedenle moleküllerin ortalama çarpışma zamanı ile orantılı bir zaman adımı içinde çarpışmalarına olanak sağlamak gerekmektedir. Bu safhada eğer moleküllerin duvar sınırlarını geçtikleri anlaşılırsa seçilen modele göre yansımaya tabi tutulurlar. Akım giriş/çıkış sınırlarından çıkan moleküller sadece silinirler. Bu safhada akım sınırlarından içeriye molekül ilavesi de yapılmaktadır.

İkinci safhada DSMC molekülleri hücre bazında sıraya dizilirler. Böylece aynı hücre içinde yer alan moleküller belirlenmiş olur. Bu sıralama bilgisi bir sonraki çarpışma safhasında kullanılmaktadır.

DSMC yönteminin üçüncü safhası ise olasılıksal karakterli molekül çarpışma safhasıdır. Bu safhada aynı hücrede yer alan moleküllerin çarpışmaları seçilen model uyarınca yapılır. Çarpışmalarda toplamda momentum ve enerji korunmakta fakat moleküller arasında momentum ve enerji aktarımı olabilmektedir. Çarpışan moleküllerin konumlarında ise bir değişiklik olmadığı varsayılmaktadır. DSMC yönteminde molekül çarpışmaları seyreltik gaz ortamlarında ikili çarpışma olarak modellenmektedir.

Son safhada ise hücrelerde yer alan molekül sayı bilgisi ve molekül hız bilgisi ortalamaları kullanılarak hücre temelinde basınç, sıcaklık, yoğunluk, gaz akış hız bileşenleri gibi makro değerler hesaplanır. Akış daimi ise bu değerlerin zaman ortalamaları, akış daimi değil ise bu değerlerin grup ortalamaları alınarak istatistiksel hatalar kabul edilebilir düzeylere indirgenir.

1.2 DSMC Yönteminin Gelişimi

DSMC yönteminin ilk önemli uygulaması normal şok dalgası için olmuş ve bu çalışma 1964 yılında Toronto'da yapılan Dördüncü Uluslararası Seyreltik Gaz Dinamiği Sempozyumunda sunulmuştur (Bird, 1998). DSMC yöntemi başlarda fazla

bir ilgi uyandırmamıştır. Bunun en büyük nedenlerinden biri yöntemin büyük bir bilgisayar hesaplama gücüne ihtiyaç duyması ve o dönemde bu olanağa sahip araştırmacı sayısının çok az olmasıdır. İkinci neden zamanın kinetik teori esaslı DSMC algoritmalarının ve moleküler modellerin şimdi olduğu kadar gelişmiş olmamasıdır. Üçüncü neden ise bazı grupların DSMC yöntemini geleneksel matematiksel bir model olmaması nedeni ile yeteri kadar güvenilir bulmamasından kaynaklanmaktadır (Bird, 2000). Bu nedenle DSMC yöntemi önce NASA gibi büyük bütçeli uzay araştırma kuruluşlarının tasarılarında geleneksel yöntemlerin uygulanamadığı durumlarda kullanılmıştır. 1975 yılına kadar çok az sayıda araştırmacı tarafından kullanılan DSMC yöntemi, bu tarihten sonra artan sayısal hesaplama olanakları paralelinde daha fazla tercih edilmeye başlanmıştır. Kullanıcı sayısının artması ile birlikte yöntemin gelişme hızı da artmıştır (Bird, 1998).

DSMC yönteminde elastik molekül çarpışmalarının benzetimi için ilk kullanılan molekül çarpışma modeli katı küre (HS) modelidir (Bird, 1994). Katı küre modeli en basit molekül çarpışma modeli olup, burada moleküller birbirine değene kadar hiçbir etkileşime girmezler. İki molekül yörüngesi arasındaki en yakın mesafe molekül yarıçaplarının toplamından küçük olduğu zaman çarpışma gerçekleşir. Çarpışan iki molekül arasında bir momentum ve enerji aktarımı yaşanır. Bu modelde moleküllerin çarpışma öncesi $\mathbf{c}_r$ ve sonrası $\mathbf{c}_r^*$ bağıl hız vektörünün şiddeti aynı olmakla $(|\mathbf{c}_r| = |\mathbf{c}_r^*|)$ birlikte, bağıl hız vektörlerinin yönleri farklıdır. Çarpışma sonrası bağıl hız vektörünün yönü tüm yönler için eşit olasılıktadır. Molekül çapları için sabit değerlerin kullanıldığı bu modelde viskozite katsayısı her çeşit gaz için sıcaklığın kare kökü ile orantılı $(\mu \propto T^{0.5})$ olup, çok gerçekçi bir yaklaşım değildir. Bu sorunu aşmak için daha sonra değişken katı küre (VHS) modeli geliştirilmiştir (Bird, 1998). Bu modelde çarpışma sonrası bağıl hız vektörünün şiddeti ve yönü, katı küre modelinde olduğu gibi hesaplanır. VHS modelinde gaz viskozitesinin sıcaklıkla olan ilişkisi, katı küre modelinde olduğu gibi sıcaklığın karekökü ile değil, bir ω değişkeni ile orantılıdır $(\mu \propto T^\omega)$. Bunu sağlamak için, çarpışan molekül çaplarının bağıl hız vektörüne ve ω parametresine bağlı olarak değişmesi sağlanır $(d = d(c_r, \omega))$. ω değeri her gaz çeşidi için farklı bir değer içermekte olup, deneysel verilerden elde edilen tablolardan bulunmaktadır. VHS modeli aynı cins moleküllerden oluşan gaz akışlarının benzetiminde başarı ile kullanılmıştır. Molekül

kütleleri arasında büyük farklar olan gaz karışımlarında ise doğru yayılma (difüzyon) katsayısına ulaşamamaktadır (Bird, 1998). Doğru yayılma katsayısını elde etmek için Koura ve Matsumoto (1991) tarafından değişken yumuşak küre (VSS) modeli önerilmiştir. Bu modelde çarpışma sonrası moleküllerin yönlerinin hesaplanmasında ilave bir α değişkeni kullanılır. Bu ilave değişken sayesinde gaz karışımları için doğru yayılma katsayısı elde edilebilmektedir. Bu yöntem VHS modeline oranla daha fazla bir hesaplama yükü getirmektedir. Daha sonra bu modellerin moleküller arası çekim kuvvetlerini ihmal etmesi nedeni ile düşük sıcaklıklarda yeteri kadar iyi sonuç vermediğinden hareketle Hassan ve Hash (1993) genel katı küre (GHS) modelini, Fan (2002) genel yumuşak küre (GSS) modelini ve takiben Matsumoto (2002) değişken küre (VS) modelini geliştirmişlerdir.

İki veya daha fazla atomdan oluşan moleküllerin öteleme ve iç enerjileri arasında yaşanan enerji aktarımlarının benzetimi için elastik çarpışma modelleri yeterli olmamaktadırlar. Bu nedenle ikiden fazla atom içeren moleküllerin elastik olmayan çarpışmalarının modellenmeleri için 1900’lü yılların başından itibaren önce “kaba küre” ve “ağırlıklı küre” modelleri ortaya konmuştur (Bird, 1994). Daha sonra Muckenfus ve Curtis (1958) tarafından “küresel-silindir” modeli geliştirilmiştir. Tüm bu önerilen modeller her ne kadar bazı iyileşmeler sağlamışsa da soruna tam bir çözüm getirememişlerdir. 1975 yılında Larsen ve Borgnakke (1975) tarafından önerilen yeni bir molekül çarpışma modeli, molekül çarpışmalarının benzetiminde yaşanan sorunların çoğunu çözmüş ve günümüzde en yaygın olarak kullanılan yöntem haline gelmiştir. Bu modelde ortam sıcaklığı temel alınarak molekül çarpışmalarının bir bölümü elastik çarpışma, geri kalan bölümü ise elastik olmayan çarpışma şeklinde gerçekleştirilmektedir. Elastik olmayan çarpışmada toplamda enerji korunmakla birlikte öteleme, dönme ve titreşim enerjileri arasında bir enerji aktarımı yaşanabilmektedir. Yerel ısı denge durumundan uzaklaşıldıkça sıcaklık tarifi anlamını kaybettiğini ifade eden Vijayakumar ve diğ. (1999) Borgnakke-Larsen modelinde ortam sıcaklığı yerine bağıl hızın temel alındığı bir değişikliğe gitmişlerdir.

DSMC yönteminde, molekül çarpışmalarında birbiri ile çarpıştırılmak için seçilen moleküllerin öncelikle birbirine yakın olması şartı mevcuttur (Bird, 2000). Geleneksel DSMC yönteminde bu şartı sağlamak için sadece aynı hücre içinde bulunan moleküllerin birbiri ile çarpışmasına izin verilir. Çarpışma için rasgele

seilen molek ller aynı h crede yer alıyorsa, arpıřacak molek llerin seiminde birbirine olan baėıl uzaklıėının bir etkisi bulunmaz. Meiburg (1986) b yle bir arpıřmada aısal momentumun korunamayacaėını belirtmiřtir. Bu olumsuzluėun etkisini azaltmak amacı ile DSMC h creleri kendi iinde daha ufak alt h crelere b l n rl r. arpıřma iin seilen ilk molek l h cre iindeki her hangi bir molek l olabilirken, diėer molek l  ncelikle aynı alt h cre iinden seilir. Bu y ntemin sakıncası ise daha fazla bilgisayar bellek kapasitesine ve hesaplama s resine gereksinim duymasıdır.

DSMC y nteminde molek l arpıřmaları iin aynı h cre iinden rasgele iki molek l seilmesi sadece gerek řart olup, arpıřmanın gerekleřmesi iin yeterli olmamaktadır (Bird, 1994). arpıřma iin seilen iki molek l n arpıřma olasılıėı baėıl hızları ile doėru orantılıdır. Bir h cre iinde mevcut t m molek llerin birbirleri ile olan arpıřma olasılıklarıнын hesaplanıp, arpıřmaların en y ksek olasılıėa sahip molek llerden bařlayarak gerekleřtirilmesi molek l sayısının karesi oranında bir iřlem y k  getireceėi iin tercih edilen bir y ntem deėildir. Bu amala Bird (1976) tarafından zaman sayacı (TC) y ntemi  nerilmiřtir. Her zaman adımında her h crede ka adet molek l arpıřması olacaėı  nceden hesaplanmaz. Bu y ntemde aynı h cre iinde yer alan ve rasgele seilen iki molek l arpıřma olasılıkları da hesaba katılarak arpıřtırılırlar. H creye ait bir zaman sayacı arpıřma olasılıėı ile ters orantılı olarak zamanda ilerletilir. H cre zaman sayacı DSMC zaman adımı (Δt) kadar ilerlediėinde bu h crede arpıřma iřlemi durdurulur ve bir diėer h creye geilir. arpıřmalara t m h crelerde iřlemler tamamlanıncaya kadar devam edilir. Bu y ntem ile hesaplanan arpıřma frekansının teori ile aynı olduėu analitik olarak belirlenmiřtir. Bazı istisna durumlarda h cre zamanı DSMC zaman adımına nazaran birka kat b y k olabilmektedir. Bu nedenle daha sonraki zaman adımlarında arpıřma gerekleřtirilememekte ve arpıřma frekansı sapmalar g stermektedir. Bu problemin  n ne gemek iin yine Bird (1989) tarafından zaman sayasız (NTC) y ntemi geliřtirilmiřtir. Bu y ntem mevcut DSMC uygulamalarında en ok kullanılan y ntem haline gelmiřtir. Bu y ntemde her h cre iin ka tane arpıřma olacaėı kinetik teoriden faydalanılarak  nceden hesaplanmakta, h cre iinden rasgele seilen iki molek l n baėıl hız ve toplam etki kesitinin arpımı ($c_r \sigma_T$), o h cre iin o ana kadar hesaplanmış azami deėer $(c_r \sigma_T)_{\max}$ ile karřılařtırılmaktadır. Eėer bu

oran $\left(\frac{c_r \sigma_T}{(c_r \sigma_T)_{\max}} \right)$, 0 ile 1 arasında düzgün dağılmış rasgele bir sayıdan (R_f) daha

büyük ise $\left(\frac{c_r \sigma_T}{(c_r \sigma_T)_{\max}} > R_f \right)$, çarpışma gerçekleştirilmekte ve döngü hesaplanan

çarpışma sayısına erişinceye kadar devam ettirilmektedir. Daha sonra Shen (2005) tarafından rasgele örneklenmiş frekans (RSF) yöntemi önerilmiştir. Bu yöntemde amaç hücre içinde çarpışacak molekül sayısı için o zamana kadar hesaplanan ortalama bağıl hız ve toplam etki kesitinin çarpımı değil de o anda hücrede mevcut moleküllerin bağıl hız ve toplam etki kesiti çarpımının ortalama değerini kullanmaktır. Bu yöntem NTC yöntemi kadar yaygın kullanılmamaktadır.

DSMC yönteminde moleküller arası çarpışmalarda olduğu gibi molekül ve katı yüzeyler arasındaki çarpışmalar için de çeşitli modeller kullanılmaktadır. En yaygın olarak kullanılan model dağınık yansıma modelidir. Bu modelde molekül duvardan yansırken duvara çarpmadan önce geldiği açıyı, üzerinde taşıdığı momentumu ve enerjiyi unuttur. Yansıma açısı rasgele seçilirken, hızı duvarın sıcaklığı esas alınarak Maxwell dağılımından örneklenir. Bu model çoğu mühendislik uygulamaları için yeterli görülmekle birlikte, yüzeyi çok iyi işlenmiş ve temizlemiş duvarlar için yeterli olmamaktadır (Karniadakis ve Beskok, 2002). Özellikle de gaz molekül kütlesinin duvar molekül kütlesine oranı çok az ise. Bu durumda her yansıma dağınık yansıma olmaz ve bu çarpışmaların daha farklı bir şekilde modellenmesi gerekir. Maxwell tipi yansıma modeli ile bu soruna bir çözüm getirilmeye çalışılmıştır. Bu modelde duvara çarpan moleküllerin ısıl barınma katsayısı α kadarlık bir oranı dağınık yansıtılırken, $1 - \alpha$ kadarlık oranı ise düzgün yansımaya tabi tutulur. Düzgün yansımada duvara çarpan molekülün duvara dik hız bileşeni işaret değiştirirken, duvara yatay hız bileşenlerinde herhangi bir değişim olmaz. Maxwell yansıma modeli de deneysel değerler ile tam uyuşmamıştır. Devam eden çalışmalar sonucunda Cercignani ve Lampis (1971) tarafından, molekül demetleri ile yapılan deneylerle uyumlu yeni bir model önerilmiştir. Bu model Lord (1991) ve Lord (1995) tarafından geliştirilmiş ve DSMC yöntemine uygun bir hale getirilmiştir. Araştırmacılarının baş harflerinden oluşturulan CLL (Cercignani-Lampis-Lord) kısaltmasıyla adlandırılan bu yöntem, yüzeylere ait ayrıntılı bilgi eksikliği ve hesaplama yükü nedeni ile günümüzde geniş bir uygulama alanı bulamamıştır (Bird, 2000).

DSMC yönteminde iç akışlarda kullanılan basınç sınır koşulları için ilk çalışmalar Piekos ve Breuer (1996) tarafından ses altı hızlar için yapılmıştır. Eksik sınır koşulları sınıra komşu iç bölgelerden zaman ortalaması alınarak hesaplanmaktadır. Nance ve diğ. (1998) ise yine ses altı hızlar için daha farklı bir yöntem önermektedirler. Çalışmalarında eksik sınır koşullarını hesaplamak için giriş bölgesinde gaz akış debisinden, çıkış bölgesinde ise sürekli ortam denklemlerinde de kullanılan karakteristik teoriden yararlanmışlardır. Wu ve Tseng (2001) ise daha çabuk yakınsama sağladığı için hem giriş, hem de çıkış bölgesinde gaz akış debisi yöntemini kullanmışlardır. Fang ve Liou (2002) daha önce önerilen yöntemlerden yararlanmışlar ve girişte içerden ortalama alınmasını, çıkışta ise ses altı hızlar için karakteristik teorinin kullanılmasını önermişlerdir. Çelenligil (2008) yüksek Knudsen sayıları için, çıkış sınır şartlarının belirlenmesinde sadece Mach sayısının değil aynı zamanda Knudsen sayısının da önemli bir rol oynadığını belirtmiştir.

DSMC yönteminde akım sınırlarından içeri giren moleküllerin debisini ve üzerlerinde taşıdıkları enerjileri sınır koşulları belirlemektedir. DSMC yönteminde akım sınırlarında önce yüzey molekül rezervuar yöntemi kullanılmıştır (Bird, 1994). Bu yöntemde moleküller sanki sınır yüzeyinde bir molekül kaynağı varmış gibi sınırdan içeriye doğru atılmaktadırlar. İçeri atılan moleküllerin sayısı gaz akış hızı temel alınarak teorik olarak belirlenir. Moleküllerin sınır yüzeyine paralel hız bileşenleri için Maxwell hız dağılım fonksiyonu, yüzeye dik hız bileşeni için ise kabul-red yöntemi kullanılmaktadır. Daha sonra Lilley ve Macrossan (2003) tarafından, yüksek gaz akış hızlarında daha verimli çalışan hacim rezervuar yöntemi geliştirilmiştir. Bu yöntemde sınırın dış kısmında oluşturulan hacimsel bir rezervuarda moleküller rasgele konumlandırılırlar. Hızları da yine bir önceki yöntemde olduğu gibi Maxwell hız dağılımına uygun atanır. Her bir molekül DSMC zaman adımı içinde hareket eder. Sınırı geçen moleküller akış alanına kabul edilirler. Bu yöntem yavaş akışlarda oldukça verimsiz çalışmakta ve içeri kabul edilen yüksek hızlı molekül sayısı ise teorik sayıdan düşük olmaktadır (Lilley ve Macrossan, 2003). Garcia ve Wolfgang (2006) yüzey molekül rezervuar yönteminde yeni örnekleme teknikleri kullanarak, yöntemin verimliliğini yüksek gaz akış hızları dahil hacim yönteminin üzerine çıkarmışlardır.

DSMC çözücülerinin hesaplama süresini kısaltmak ve uygulama alanını genişletmek için kullanılan en önemli yöntemlerden birisi de yöntemin paralelleştirilmesidir.

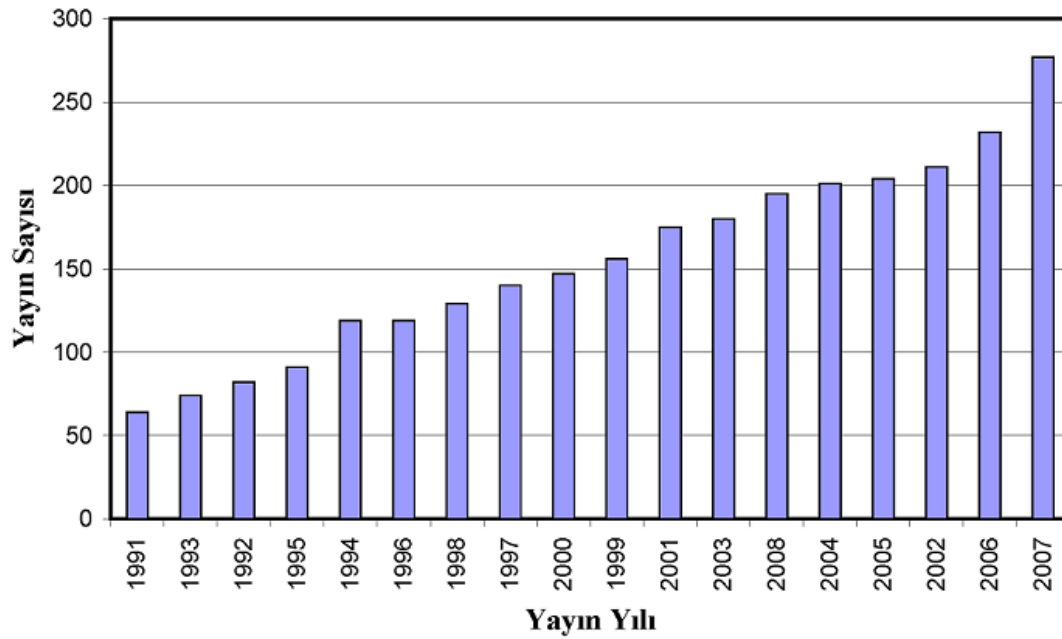
DSMC yönteminde hareket safhasında moleküller birbirleri ile bir etkileşime girmedikleri ve sadece aynı hücrede olan moleküllerin çarpıştığı varsayıldığı için DSMC yöntemi paralelleştirmeye çok uygun bir yöntemdir (Le Beau, 1999). DSMC yönteminin paralelleştirilmesi için yapılan öncü çalışmalarda yapısal ağ ve statik yük dengelemesi kullanılmıştır (Nance ve diğ., 1994; Ota ve diğ., 1995; Matsumoto ve Tokumasu, 1997). İşlemciler arasında moleköl aktarımları ve fiziksel zaman eşgüdümü genelde yazılımların farklı ortamlarda kullanılabilmesi için daha esnek bir yapı sergileyen mesaj geçme arayüzü (MPI) kütüphaneleri kullanılarak yapılmaktadır. Zaman ilerledikçe hem DSMC yönteminde kullanılan veri yapıları geliştirilmiş, hem de karmaşık geometrilerin çözümünü kolaylaştıran yapısal olmayan ağ kullanımına geçilmiştir (Kim ve diğ., 2004). DSMC yönteminin değişken karakteri nedeniyle yük dengelemesi de dinamik olarak yapılmaya başlanmıştır (LeBeau ve Lumpkin, 2001). Bu çalışmalar kapsamında geliştirilen ve günümüzde en yaygın olarak kullanılan DSMC yöntemi esaslı çözücüler arasında MONACO, SMILE, DAC, PDMC, DS2V/3V yazılımlarını sayabiliriz. MONACO Boyd ve gurubu tarafından geliştirilmiş olup Amerika Birleşik Devletleri dışında kullanılmasına kısıtlama getirilmiştir (Dietrich ve Boyd, 1996). SMILE ise Rus Novosibirsk Teorik ve Uygulamalı Matematik Enstitüsü çalışanları tarafından geliştirilmiş olup, en yaygın olarak kullanılan DSMC çözücülerinden biri konumundadır (Ivanov ve diğ., 1998). NASA tarafından geliştirilen ve kullanılan bir DSMC yazılımı olan DAC ise akış ve yüzeyler için farklı ağ yapıları kullanmaktadır (LeBeau ve Lumpkin, 2001). PDMC ise Taiwan'lı araştırmacılar tarafından geliştirilmiş olup, akış alanına bölgelere ayırma yöntemi (DD) uygulamak için grafik temelli tekniklerden yararlanılmaktadır (Wu ve diğ., 2003). Bird tarafından geliştirilen ve ticari bir yazılım olan DS2V/3V ile iki ve üç boyutlu gaz akışları çözümlenebilmektedir (Bird, 2005).

Küçük Knudsen sayılarında hesaplama yükü olarak diğer yöntemlere oranla pahalı bir yöntem olan DSMC yönteminin, tüm akış bölgesinde değil de sadece kullanılmasının kaçınılmaz olduğu büyük Knudsen sayıları içeren bölgelerde kullanılması, geri kalan bölgelerde ise sürekli ortam denklemlerinin kullanılması konusu gündeme gelmiştir. Roveda ve diğ. (1998) DSMC/Euler denklemlerinden oluşan melez bir yöntem geliştirmiştir. Bunu takiben Hash ve Hassan (1997), DSMC/Navier-Stokes denklemlerinin ortaklaşa kullanıldığı bir diğer melez yöntem

önermiştir. Burada göz önüne alınması gereken iki önemli konu, hangi bölgede hangi yöntemin uygulanacağına nasıl karar verileceği ve iki farklı yöntem tarafından hesaplama yapılan bölgeler arasındaki bilgi iletişimin nasıl sağlanacağıdır. Hangi bölgede hangi yöntemin uygulanacağına yerel Kn sayısına bakılarak karar verilmektedir. Farklı çözüm yöntemleri tarafından hesaplamaların yapıldığı iki bölge arasında önce bir ara bölge oluşturulmakta ve bu ara bölgede süreklilik sağlayacak bir geçiş sağlanmaktadır. Garcia (1999) tarafından yapılan çalışmalar sonucunda melez yöntemlerde iki bölge arasında yapılan geçişler daha da etkin bir duruma gelmiştir. Wang ve diğ. (2002) ve Wijesinghe ve Hadjiconstantinou (2004) tarafından yapılan çalışmalar neticesinde DSMC-CFD melez yöntemleri daha da fazla bir uygulama alanı bulmuşlardır.

DSMC yönteminde karşılaşılan en büyük sorunlardan biri de mikro boyutlu kanal akışlarında karşılaşılan istatistiksel dağılımlardır. Bunun nedeni bu tip akışların yavaş oluşu nedeni ile molekül hızları ile gaz akış hızı arasındaki oranın açılmasıdır. Gaz akış hızı molekül hızlarının ortalamasından hesaplandığı için örnekleme sayısının küçük tutulması durumunda, düşük hızlarda istatistiksel sapma gaz akış hızına oranla büyük olmaktadır. Bu durumun önüne geçmek için çok fazla sayıda örnekleme yapmak gerekmekte, bu da zaten hesaplama yükü fazla olan DSMC yönteminin yükünün daha da fazla artmasına neden olmaktadır. Bu durumun önüne geçmek için Rajasanow ve Wagner (1996), Kaplan ve Oran (2002) ve Baker ve Hadjiconstantinou (2005) gürültü azaltma yöntemlerini, Fan ve Shen (2001) ise bilgi koruma (IP) yöntemini önermişlerdir. IP yönteminde DSMC molekülleri sadece mikroskobik bilgileri değil makroskobik gaz akış hızı bilgisini de üzerinde taşımaktadırlar. Moleküller çarpıştıkça bu bilgi, basınç alanının etkisi de hesaba katılarak güncellenmekte ve yerel gaz akış bilgisi bu bilginin ortalaması olarak hesaplanmaktadır. Ancak bu yöntem sıcaklık değişikliklerinin olduğu akışlarda başarılı olamamıştır. IP yöntemini daha da geliştirmek için çalışan Sun ve Boyd (2002), yeni bir enerji aktarım yöntemi ile sıcaklık değişiklikleri olan gaz akışlarının da incelenmesini olası hale getirdiklerini belirtmişlerdir. Fakat elde ettikleri sonuçlar ile standart DSMC sonuçları arasında gaz yoğunluğu bakımından farklar olduğu ve sorunun ilerleme gösterilmesine rağmen tam olarak çözülemediği belirtilmektedir (Shen, 2005).

ISI Web of Knowledge veri tabanında "direct simulation Monte Carlo" veya "DSMC" anahtar kelimeleri ile yapılan taramada 1991 ve 2007 yılları arasındaki yayın sayısına ait grafik Şekil 1.2’de sunulmuştur. Grafik incelendiğinde DSMC ile ilgili yayın sayısının her geçen sene daha da arttığı görülmektedir. Yabancı üniversitelerde görevli Türk bilim adamları tarafından yayınlanmış Çelenligil ve diğ. (1989); Çelenligil ve diğ. (1991); Çelenligil ve Moss (1992); Aktas ve diğ. (2001); Aktas ve Aluru (2002) yayınlar mevcut olup, bilginiz dahilinde doğrudan Türk üniversiteleri çıkışlı bir dergi makalesine rastlanmamıştır.



Şekil 1.2 : ISI Web of Science yıllara göre DSMC konulu yayın sayısı.

1.3 Çalışmanın Amacı

Bu çalışmada amaç yüksek Knudsen sayılı mikro gaz akışlarının çözümlenmesi için verimli hesaplama yöntemleri geliştirmektir. Genelde geçiş bölgesinde ($0.1 < Kn < 10$) yer alan mikro gaz akışlarının sürekli ortam kabulüne dayanan geleneksel yöntemlerle çözümlenmeleri uygun olmamaktadır. Geçiş bölgesinde deneylerle uyumlu sonuçlar veren moleküler yöntemleri kullanmak gerekmektedir. Önceleri sadece yüksek irtifada seyreltik gaz akış problemlerini çözümlmek için geliştirilen DSMC yönteminin, mikro gaz akışlarının incelenmesi için de uygun bir

yöntem olduğu anlaşılmıştır. Temellerini gazların kinetik teorisinden alan DSMC yöntemi gaz akışlarının fiziksel modellemesini yaparak çözümleme olanağı sağlar. DSMC her moleküler yöntem gibi çözüm süresi açısından özellikle de küçük Kn sayılarında pahalı bir yöntemdir. İlaveten olasılıksal karakteri nedeni ile de istatistiksel bir hata payı içerir.

Bu çalışmada iç mikro gaz akışlarının çözülmesi için kullanılan DSMC yönteminin hesaplama verimini arttırmak amacı ile, DSMC yöntemi paralel bilgisayar mimarisinde çalıştırılmıştır. Geliştirilen paralel DSMC yöntemi esaslı çözücüde, bölgelere ayırma (DD) yöntemi kullanılarak her bir alt bölge farklı bir işlemcide hesaplanabilmektedir. Alt bölgeler arası bilgi aktarımı için farklı işlemci ve işletim sistemlerinde çalışma kolaylığı sağlayan MPI kütüphanesi kullanılmaktadır. Böylelikle DSMC çözücüsünün farklı çalışma ortamlarında da sorunsuz kullanılması amaçlanmaktadır.

DSMC moleküllerini hücrelerine göre sıraya dizme işlemi, DSMC yönteminin dört ana safhasından biridir. Molekülleri hücrelerine göre sıraya dizme işleminin nedeni, DSMC yönteminde sadece aynı hücre içinde yer alan moleküllerin birbirleri ile çarpışmasına izin verilmesidir. En hızlı işlemleyiciler (algoritmalar) kullanıldığında bile bu işlem, molekül sayısına bağlı olarak hesaplama süresinin uzamasına ve yöntemin veriminin düşmesine neden olmaktadır. Bu safhaya olan ihtiyacın ortadan kaldırılması toplam çözüm süresinde önemli bir kısaltmaya yol açmaktadır. Bu çalışmada dinamik veri yapıları kullanılarak moleküllerin hücre temelli sıraya dizilmesi işlemi, ayrı bir safhaya gerek duyulmaksızın hareket safhasının içinde gerçekleştirilmektedir. Böylelikle hesaplama zamanı kısaltılabilmektedir.

DSMC yönteminde moleküller hareket safhası içinde konum değiştirirler. Konum değişikliğine bağlı olarak moleküller aynı zamanda hücre de değiştirirler. Molekül çarpışmaları ve makro değer hesaplamaları için, her hareket safhası sonunda her molekülün konuşlandığı hücrenin de bilinmesi gerekmektedir. Hücre bilgisi için geleneksel DSMC yönteminde moleküller hücreden-hücreye takip edilirler. Bu işlemler için trigonometrik hesaplamalar ve hücre arama işlemleyicileri kullanılmaktadır. Koordinat dönüşümleri kullanılarak 2-boyutlu mikro-lüle gibi basit geometrili akış bölgelerini kare şeklinde boyutsuz hesaplama bölgelerine dönüştürme olanağı vardır. Bu durumda moleküllerin hücre bilgilerini basit aritmetik işlemler ile

hesaplamak mümkün olabilmektedir. Böylelikle DSMC yönteminin hesaplama verimliliği artmaktadır.

Mikro gaz akışlarında, sadece daimi akışlarla değil, daimi olmayan akışlarla da karşılaşmaktadır. Bu nedenle mikro gaz akışlarını incelemek için kullanılacak DSMC yöntemi esaslı çözücünün bu tip akışları da hesaplayabilecek bir yapı içermesi gerekmektedir. Bu tip akışlar DSMC yönteminde hem hareketli sınır şartları, hem de şekil değiştiren çözüm ağları kullanılmasına gereksinim duyarlar. Daimi olmayan akışlar incelendiği zaman, DSMC yönteminde ek olarak grup ortalaması alınması da gerekir. Bu çalışmada DSMC yönteminin daimi olmayan akışlara uygulanması ve bu uygulamaların hesaplama verimliliğini yükseltecek yeni çözüm önerileri üzerinde çalışılmıştır.

Geleneksel DSMC yönteminde kullanılan akım sınır şartları incelendiğinde yüzey ve hacim molekül rezervuarları kullanıldığı görülmektedir. Bu çalışmada hacim molekül rezervuar yönteminin geliştirilerek hem daha verimli çalışması hem de teoriye uygun sayıda ve özellikle molekül üretmesi sağlanmıştır.

Yine bu çalışmada kullanılan DSMC yöntemi temelli çözücünün küçük bazı değişiklikler ile mümkün olduğunca farklı tipte mikro gaz akış problemine uyarlanabilmesi de hedeflenmiştir. DSMC temelli çözücü akış geometrisini ve sınır koşullarını önce veri dosyalarından okumakta ve program içinde bir değişikliğe gitmeden farklı tipte problemlere uygulanabilmektedir. Elde edilen sonuçlar yaygın kullanılan çizim programları tarafından herhangi bir ek işleme gerek kalmadan doğrudan görüntülenebilmektedir.

DSMC yöntemini kullanan çözücü ile elde edilen sonuçlar, literatürde yayınlanmış DSMC sonuçları ile karşılaştırılmış ve istatistiksel hatalar dahilinde uyumlu oldukları görülmüştür.

Çalışmanın ana hatları ise aşağıda olduğu gibidir. Bölüm 2’de öncelikle DSMC yönteminin genel esasları ayrıntılı olarak ele alınmaktadır. Takiben bu çalışma kapsamında DSMC yöntemi için geliştirilen yeni katkılar hakkında bilgi verilmektedir. İlk olarak DSMC molekül izlemesinin hücre temelli olarak nasıl yapıldığı ve bu yöntemin yeni veri yapıları kullanarak nasıl daha hızlı bir hale getirilebileceği gösterilmektedir. Takiben DSMC yönteminin hesaplama yükünü azaltmak için basit geometri akışlarda koordinat dönüşümlerinden nasıl

yararlanabileceği gösterilmektedir. Daha sonra DSMC sınır şartları incelenmiş ve özellikle basınç sınır şartı uygulamalarında en yaygın olarak kullanılan hacim üretim rezervuar yönteminin daha verimli ve doğru çalışabilmesi için nasıl değiştirileceği ayrıntılı olarak açıklanmıştır. Bir sonraki başlıkta DSMC yönteminin daimi olmayan gaz akışlarına uyarlanması ve çözümlenmesi konusu ele alınmıştır. En son olarak ta DSMC yönteminin paralelleştirilmesi konusu ele alınmış ve bu konuda yapılan çalışmalar ile uygulanan yöntemler anlatılmıştır.

Bölüm 3’de uygulama ayrıntıları anlatılmaktadır. Bu bölümde Maxwell hız dağılımı, Ters-birikimli örnekleme yöntemi, kabul-red örnekleme yöntemi, DSMC hücrelerine molekül yerleştirilmesi, moleküllerin hücre temelli takibi, MPI uygulamaları ve paralel çalışmada farklı temsilci molekül oranları (F_N) kullanılması gibi konuların ayrıntıları yer almaktadır.

Bölüm 4’de, mikro gaz akışlarını çözümlmek için DSMC yöntemi esas alınarak geliştirilen çözücü ile örnek problemler çözülmekte ve sonuçlar literatürden alınan sonuçlar ile karşılaştırılarak çözümlerin doğruluğu gösterilmektedir. İlk olarak 2-Boyutlu mikro bir kanalda gaz akışı incelenmektedir. Gaz akışı hem basınç farkı (Poiseuille) hem de hareketli sınır koşulu (Couette) ile sağlanmaktadır. İkinci olarak T-şeklinde bir manifold da basınç farkı ile oluşan gaz akışı çözümlenmektedir. Üçüncü uygulamada kapalı bir hacimde ısıl sürünme problemi ele alınmaktadır. Dördüncü uygulamada ise mikro-lülede oluşan soğuk gaz akışları incelenmektedir. Bu incelemede DSMC çözücüsü, bölgelere ayırma tekniği kullanılarak çok işlemcili bir ortamda paralel mimaride çalıştırılmaktadır. Beşinci uygulama ise hem hareketli sınır koşullarının uygulandığı, hem de paralel çalışma yapılarak grup ortalamalarının alındığı daimi olmayan bir gaz akışının çözümlendiği adyabatik piston problemidir. En son olarak da mikro-lüle de gerçekleşen soğuk gaz akışı 3-boyutlu olarak ele alınmaktadır.

Son bölüm olan Bölüm 5’te ise yapılan çalışmaların bir değerlendirilmesi yapılarak, bu tez çalışması ile sağlanan katkılar hakkında özet bilgi sunulmaktadır.

2. DSMC YÖNTEMİNİN MİKRO GAZ AKIŞLARINA UYGULANMASI

2.1 DSMC Yönteminin Genel Esasları

DSMC (Doğrudan benzetim Monte Carlo) gaz akışlarının fiziksel benzetimini temel alan moleküler yapıda olasılıksal bir yöntemdir. Gazı oluşturan moleküllerin konum değişiklikleri ve çarpışmaları parçacık temelinde izlenerek, moleküllerin mikroskobik özelliklerinden gaz akışına ait makroskobik özellikler hesaplanmaktadır. Her gaz molekülü bir kütleyle (m), sahip olduğu hız (c) dolayısı ile de bir momentuma ve kinetik enerjiye sahiptir. Birden fazla atomdan oluşan gaz molekülleri ise, ilaveten iç enerji olarak ifade edilen dönme ve titreşim enerjilerine de sahiptirler.

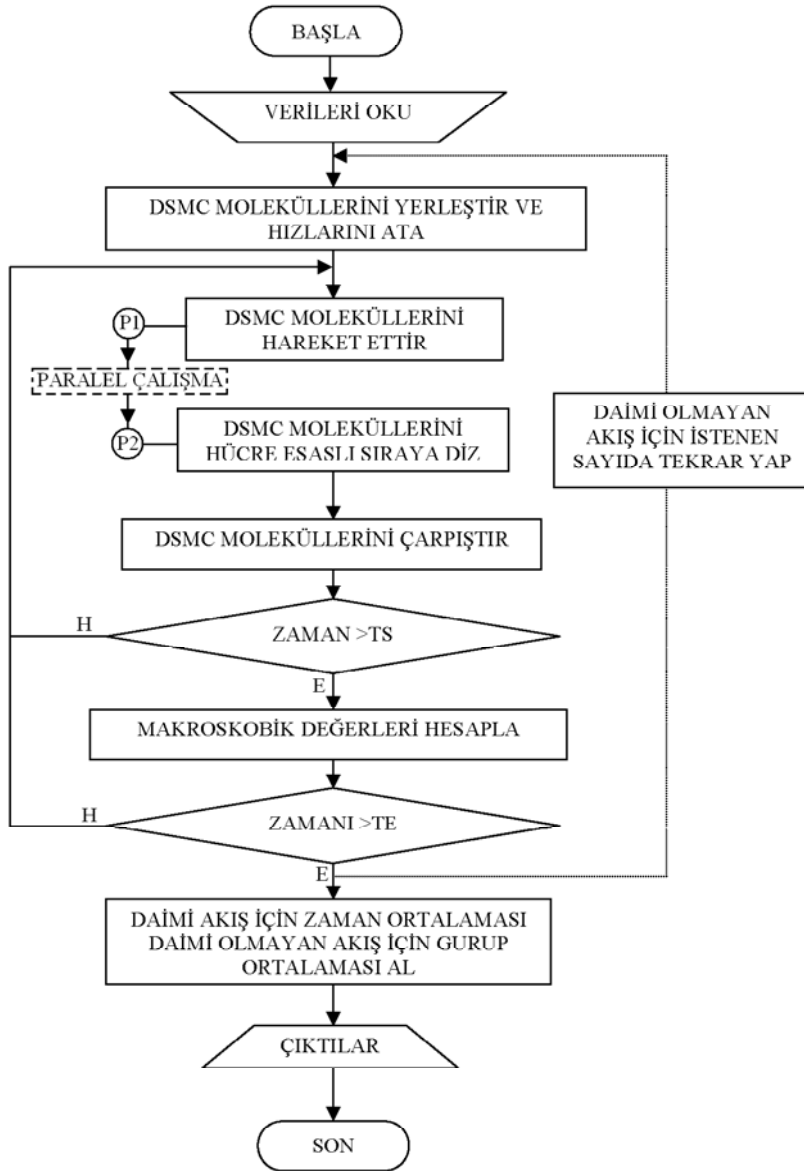
DSMC yönteminde hesaplama kolaylığı açısından birden fazla fiziksel molekül tek bir DSMC molekülü ile temsil edilirler. Bu nedenle DSMC yöntemi ile elde edilen sonuçlar bir istatistiksel sapma değeri içerirler. Bu istatistiksel sapma değerini kabul edilebilir bir seviyede tutmak için, DSMC yönteminde yeteri kadar temsilci molekül kullanılmalıdır.

DSMC yönteminde bazı farklılıklar içermekle birlikte hesaplamalı akışkanlar dinamiği (CFD) benzeri bir çözüm ağı yapısı kullanılmaktadır. Çözüm ağları arasında kalan küçük bölgeler hücre olarak adlandırılmakta olup, moleküller arası çarpışmalar ve makro değer hesaplamaları için temel oluştururlar.

Benzetimin başlangıcında DSMC molekülleri Şekil 2.1’de belirtilen akış şeması uyarınca önce gaz akış alanı için belirlenmiş başlangıç koşullarına uygun olarak hücrelere yerleştirilirler. İlk hızları bulundukları hücrenin başlangıç sıcaklığından Maxwell dağılımına uygun olarak örneklenen bu DSMC molekülleri, zamanda bir zaman adımı süresince (Δt) ilerletilirler. Bu hareket safhasında diğer moleküller ile etkileşime girmeyen DSMC molekülleri bir duvar ile karşılaşırlarsa seçilen yansıma modeline uygun olarak yansımaya tabi tutulurlar. Eğer moleküller bu zaman adımı (Δt) içinde sınırı geçip akış bölgesini terk ederlerse, artık takip edilmezler ve silinirler. Akış bölgesinde akım sınır şartları mevcut ise, bu sınırlardan içeriye

molekül ilavesi yapılır. Bu moleküllerin sayı ve hızları sınır şartlarından yararlanarak hesaplanmaktadır.

Hareket safhasının sonunda tüm moleküller konumlandıkları hücelere göre sıraya dizilirler. Böylece aynı hücrede yer alan moleküller belirlenmiş olur. Bu bilgiye moleküller arası çarpışma ve hücrelerin makroskobik bilgilerinin hesaplanması safhasında gereksinim duyulmaktadır.



Şekil 2.1 : DSMC akış şeması. TS akışın hemen hemen daimi hale gelmesi için gereken zaman, TE ise hesaplamanın sonlandırılacağı zamandır. Paralel çalışmada P1 ve P2 noktaları arasında ek işlemler kullanılır.

Paralel çalışmada molekül hareket ve sıraya dizme safhaları arasında ilave işlemler yapılmasına ihtiyaç duyulur. Bu işlemler DSMC yönteminin paralelleştirilmesine ait bölümde ayrıntılı olarak açıklanmıştır. Moleküller arası çarpışma safhasında, gazların kinetik teorisinden yola çıkılarak önce her hücre için ayrı ayrı, çarpışacak molekül sayısı hesaplanır. Daha sonra hesaplanan sayıda çarpışma için aynı hücrede yer alan ve çarpışma olasılıkları belirli bir değerin üstünde iki molekül seçilen bir model uyarınca ikili çarpışmaya tabi tutulur. Molekül çarpışmalarında moleküllerin momentum ve enerjileri değişmekte, konumlarında ise bir değişiklik olmadığı varsayılmaktadır.

Son safhada ise aynı hücrede yer alan moleküllerin taşıdıkları mikroskobik özelliklerinden yararlanarak, o hücrenin basınç, sıcaklık, yoğunluk gibi makroskobik değerleri hesaplanmaktadır. Daimi akış hesaplamaları için uzun bir dilimde zaman ortalaması almak gerekmektedir. Daimi olmayan akış hesaplamaları için ise grup ortalamaları kullanılmaktadır.

2.1.1 Verilerin okunması

DSMC yöntemi ile çözüm yapılırken akışta kullanılacak gazın özelliklerine, sınır koşullarına, başlangıç koşullarına, akış değerlerinin hesaplanacağı bölgenin fiziksel sınırlarına gereksinim duyulur. Bu bilgilerin DSMC çözücüsüne uygun bir yapıda ve tam olarak sağlanması gerekir. Akış bölgesinde hesaplama yapmak için kullanılacak hücrelere ait koordinat bilgileri de, yine bu safhada DSMC çözücüsüne sağlanmaktadır.

DSMC yöntemi tarafından ihtiyaç duyulan gaz özellikleri arasında gaz molekülünde mevcut atom sayısı, gaz molekülünün kütlesi (m), gaz molekülünün çapı (d), gaz molekül ağırlığı (w), gaz viskozitesinin gaz sıcaklığının kaçınıcı üssü ile orantılı olduğu bilgisi (ω) yer almaktadır.

Sınır koşulu bilgisi olarak, eğer sınır duvar ise duvar sıcaklığı, ısıl barınma katsayısı (α) ve duvarın hızı sağlanır. Akım sınır koşulları için ise basınç (p), sıcaklık (T) ve gaz akış hızı bilgileri (U, V, W) gerekli olmaktadır.

Başlangıç koşulları olarak gaz akış bölgesine ait yerel sıcaklık (T_i), basınç (p_i) ve gaz akış hızı (U, V, W) bilgilerinin sağlanması yeterli olmaktadır.

Gaz akış değerlerinin elde edilebilmesi için, hesaplamaların yapılacağı bölgenin fiziksel sınırları da DSMC yönteminin ihtiyacı duyduğu bilgiler arasındadır.

2.1.2 DSMC moleküllerinin yerleştirilmesi ve hızlarının atanması

DSMC yönteminde ilk olarak, gaz akış bölgesinin hesaplamalı akışkanlar dinamiği (CFD) benzeri çözüm ağları ile donatılması gerekmektedir. DSMC yönteminde hesaplamalar için çözüm ağlarının arasındaki hücreler kullanılmaktadır. Moleküller arası çarpışmalar sadece aynı hücre içinde yer alan moleküller arasında gerçekleşmekte ve hücre temelinde hesaplanan tüm makroskobik değerler hücre merkezlerine atanmaktadır.

DSMC yönteminde gaz akışlarının benzetiminin fiziksel olarak gerçekçi olması için, bu hücrelerin boyutlarının hesaplanmasında gazların kinetik teorisinden gelen bazı ölçekleri göz önüne almak gerekmektedir. Göz önünde bulundurulması gereken en önemli ölçeklerden birisi ortalama serbest yol (λ)'dur. İdeal gazlarda, ısı dengesi ve katı küre (HS) modeli için aşağıda verilen,

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2} \pi d^2 n}, \quad (2.1)$$

bağıntı ile hesaplanmaktadır (Bird, 1994). Burada d molekül çapını, n ise molekül sayısı yoğunluğunu belirtmektedir. DSMC yönteminde moleküllerin hareket safhası ve moleküllerin çarpışma safhası birbirinden ayrıştırıldığı için, moleküllerin hareket safhasında ortalama serbest yol civarında bir yol alması ve takiben moleküllerin birbirleri ile çarpıştırılması amaçlanmaktadır. Göz önüne alınan bir diğer önemli fiziksel gerçeklik ise, benzetimde sadece birbirine yakın olan moleküllerin birbiri ile çarpışmalarına izin verilmesidir. Bu nedenle DSMC yönteminde hücrelerin doğrusal boyutları (l_h) ortalama serbest yol ile ilişkilendirilmektedir. Tipik bir DSMC hücresi doğrusal boyutunun makroskobik düşümlerin (gradyanların) büyük olduğu yönlerde, ortalama serbest yolun üçte biri kadar olması ($l_h = \lambda/3$) gerektiği anlaşılmıştır. Daha büyük bir hücre boyutu viskozite katsayısının olması gerekenden daha fazla hesaplanmasına yol açmaktadır (Alexandre ve diğ., 1998).

DSMC hücreleri sadece molekül çarpışmaları için değil, aynı zamanda gaz akış alanının makroskobik değerlerinin hesaplanmasında da kullanılmaktadırlar. Bu hesaplamalarda hücrelerde yer alan moleküllerin konum, hız ve kütle değerlerinden,

istatistiksel yöntemler kullanılarak hücelere ait sıcaklık, yoğunluk, basınç ve akış hızı gibi makroskobik değerler elde edilmektedir. İstatistiksel yöntemler kullanılarak elde edilen değerlerde oluşan istatistiksel sapma (s) ile, hesaplamaya katılan örnek sayısı (N) arasındaki ilişki,

$$s = 1/\sqrt{N}, \quad (2.2)$$

bağıntısı ile verilmiştir. Hesaplamalarda oluşan istatistiksel sapma değeri örnekleme alınan sayının kare kökü oranında küçülmektedir. Hesaplanan makroskobik değerlerin, %1'lik bir istatistiksel sapma içinde kalması için DSMC hücresinde en az 10000 adet fiziksel molekülden örnekleme alınmasına ihtiyaç olduğu yukarıda yer alan bağıntıdan anlaşılmaktadır. Durumu bir örnek ile açıklamak için $T = 300 \text{ K}$ sıcaklığında ve üç farklı basınçta ($p_1 = 1 \text{ atm.}$) ($p_2 = p_1 / 3$), ($p_3 = p_1 / 10$) azot gazı için yapılan hesaplamalarda elde edilen değerler Çizelge 2.2'de gösterilmektedir.

Çizelge 2.2 : Farklı basınçlarda azot gazı için ($T=300 \text{ K}$) DSMC hücresinde yer alan fiziksel molekül sayıları.

Basınç	1-Boyutlu Hücrede Molekül Sayısı	2-Boyutlu Hücrede Molekül Sayısı	3-Boyutlu Hücrede Molekül Sayısı
P= 1 atm.	4.3×10^{17}	7.6×10^9	1.3×10^2
P= 1/3 atm.	4.3×10^{17}	2.3×10^{10}	1.2×10^3
P= 0.1 atm.	4.3×10^{17}	7.6×10^{10}	1.3×10^4

Yukarıdaki tablodan da anlaşılaçağı üzere 1-boyutlu ve 2-boyutlu hesaplamalarda makroskobik değerlerin kabul edilebilir bir istatistiksel sapma içinde kalması için DSMC hücrelerinde yeterli sayıda fiziksel molekül bulunmakla birlikte, yoğun gazlar için 3-boyutlu hesaplamalarda bu kısıtlamanın dikkate alınması gerektiğı görölmektedir. Gazın yoğunluğu arttıkça, makroskobik değer hesaplamaları için temel oluşturan hücrelerde mevcut fiziksel molekül sayısı azalmaktadır. Bunun nedeni, hücre boyutunun (l_h), aşağıdaki bağıntıda olduğu gibi gaz yoğunluğu ile ters orantılı olan ortalama serbest yol (λ) tarafından belirlenmesidir:

$$l_h \propto \frac{1}{n}. \quad (2.3)$$

Bu nedenle 3-boyutlu hesaplamalarda yoğunluğun artması ile birlikte, hücre hacminin $\left(V_h \propto \left(\frac{1}{n} \right)^3 \right)$ yoğunluğun küp kökü oranında küçüldüğünü görmekteyiz.

Hücre içinde yer alacak molekül sayısı için ise $(N_h = n \cdot V_h)$ bağıntısı kullanılırsa, hücrede yer alan fiziksel molekül sayısının,

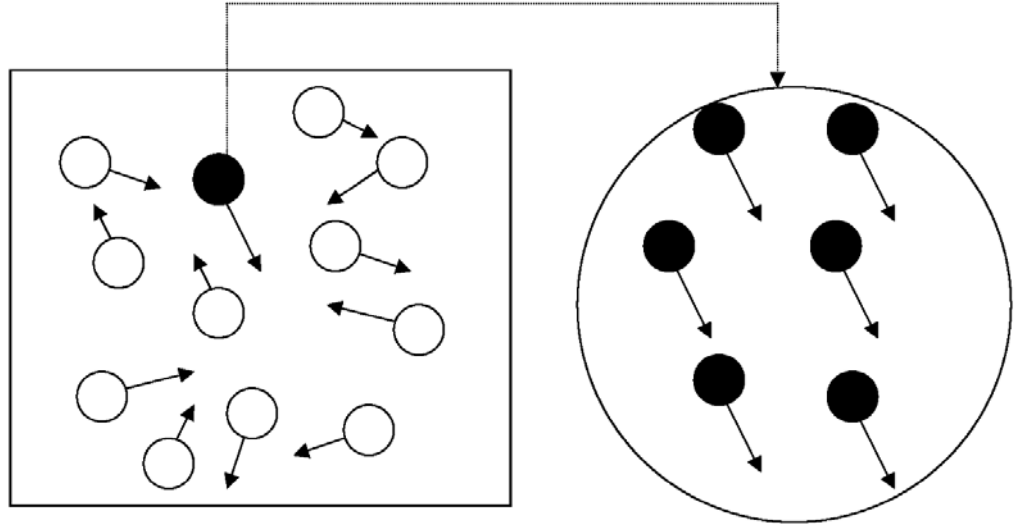
$$N_h \propto \frac{1}{n^2}, \quad (2.4)$$

bağıntısındaki gibi, gaz yoğunluğunun karesi ile ters orantılı olduğu görülmektedir. Tam tersi durumda ise gazın yoğunluğu azaldıkça DSMC hücresi içinde yer alan fiziksel molekül sayısı artar. Bu oran 2-boyutlu hesaplamalarda $N_h \propto \frac{1}{n}$ iken, 1-boyutlu hesaplamalarda molekül sayı yoğunluğundan bağımsız, sabit bir sayı olmaktadır.

Hesaplamaların DSMC yöntemi kullanılarak yapılacağı gaz akış bölgesi, çözüm ağları üretim yöntemleri kullanılarak istenen boyutlarda hücrelere ayrılır. Oluşturulan çözüm ağları yapısal olabileceği gibi yapısal olmayan ağlarda olabilmektedir. Yapısal ağlar uygulama kolaylığı ve hesaplama zamanından tasarruf sağlamakla birlikte, uygulanabildikleri problem çeşitleri itibarı ile yapısal olmayan ağlara göre daha kısıtlı kalmaktadırlar (Wu ve diğ., 2003).

Gaz akış alanının hücrelere bölünmesinin ardından, benzetimde kullanılacak moleküller verilen başlangıç koşullarına uygun olarak gaz akış alanına yerleştirilirler. DSMC yönteminde hesaplama kolaylığı açısından Şekil 2.2’de görüldüğü birden çok sayıda fiziksel molekülü temsil eden temsilci moleküller kullanılmaktadır. Eğer temsilci moleküller yerine fiziksel moleküller kullanılsaydı, $V_h = 10 \mu m \times 10 \mu m \times 10 \mu m$ olan küp şeklindeki bir hacimde normal şartlar altında, yaklaşık 2.5×10^{10} adet molekül yerleştirilmesi ve bunların hepsinin izlenmesi gerekecekti. Bu sayıda molekülün hareketlerini izlemek ve moleküller arası çarpışmaları hesaplamak mümkün olamamaktadır (Karniadakis ve Beskok, 2002). Bu nedenle DSMC yönteminde birden fazla fiziki molekülü temsil eden temsilci

moleküller kullanmak suretiyle, hesaplama yükünü kabul edilebilir seviyelere indirme olanağı elde edilebilmektedir.



Şekil 2.2 : Bir DSMC temsilci molekülü birden çok fiziksel molekülü temsil eder.

Hücrelerde makroskobik değer hesaplamalarında temsilci molekül kullanılması, daha az sayıda örnekleme alınmasına, bu nedenle de istatistiksel hata payının artmasına neden olmaktadır. Bu istatistiksel hata payının kabul edilebilir bir değerde tutulması için hücrelerde ortalama olarak 20 adet temsilci molekül kullanılması gerektiği hesaplanmıştır (Oran ve diğ., 1998). Bir DSMC temsilci molekülünün, kaç adet fiziksel molekülü temsil etmesi gerektiğini hesaplamak için önce hücrede mevcut fiziksel molekül sayısı hesaplanmakta ve takiben bu sayı hücrede bulunmasını istediğimiz temsilci molekül sayısına bölünmektedir. Eğer N_h adet fiziksel molekül bulunan hücrede, N_{tm} adet temsilci molekül kullanmak isteniyorsa, fiziksel- temsilci molekül sayı oranını (F_N) hesaplamak için,

$$F_N = \frac{N_h}{N_{tm}}, \quad (2.5)$$

bağıntısı kullanılır. Gaz akış alanında yer alan her hücre için farklı bir fiziksel-temsilci molekül oranı kullanmak mümkün olmakla birlikte, hücre değiştiren her temsilci molekül için ilave bir hesaplama yükü ve ilave istatistiksel hatalar getirmesinden dolayı tercih edilen bir yöntem değildir. Bu nedenle DSMC

yönteminde bölgelere ayırma yöntemi uygulanmayacak ise tek bir F_N kullanılmaktadır. Bu değer hesaplanırken, hücrelerde konumlanan temsilci molekül sayısının en az 20 civarında olması gerektiği göz önünde tutulmalıdır. Gaz yoğunluğunun akış bölgesi içinde büyük değişiklikler göstermesi halinde, gazın az ve çok yoğun olduğu bölgelerde yer alan hücrelerde temsilci molekül sayıları çok farklı olabilmektedir. Bu koşullarda yapısal olmayan ağlardan faydalanarak gaz yoğunluğuna göre farklı hücre boyutları kullanılabilen veya tüm akış bölgesi çok sayıda alt bölgeye ayrılarak her bir bölge paralel çalışan farklı bir işlemcide hesaplanmaktadır (LeBeau, 1999). Her bir alt bölgede farklı F_N kullanma imkanı sayesinde, hesaplama yükünde tasarrufa gitme imkanı da doğmaktadır. Çok bölgeli çalışmada, bölge değiştiren moleküller için silme veya kopyalayarak çoğaltma gibi ilave işlemlerin uygulanması gerekmektedir.

DSMC yönteminde gaz akış alanı hücrelere bölündükten ve fiziksel temsilci molekül oranı F_N saptandıktan sonra, hesaplamalarda kullanılacak temsilci moleküllerin başlangıç koşullarından istifade edilerek gaz akış bölgesine yerleştirilmesi yapılır. Bir hücreye yerleştirilecek temsilci molekül sayısını hesaplamak için,

$$N_{im} = \frac{n \cdot V_h}{F_N}, \quad (2.6)$$

bağıntısı kullanılmakta olup, bu bağıntıda hücreye ait molekül sayı yoğunluğundan $\left(n = \frac{p}{k_B T} \right)$ ve hücre hacim değerinden (V_h) yararlanılır. Burada p ve T hücrenin gaz basıncı ve sıcaklığı, k_B ise Boltzmann sabitidir. DSMC molekülleri hücrelere, konumları hücre içinde rasgele olacak şekilde yerleştirilir. Bu yerleştirmeye ait ayrıntılı bilgi Bölüm 3'te verilmiştir. Ayrıca hücre içine yerleştirilen her temsilci moleküle,

$$\begin{aligned} u' &= \sqrt{-\ln(R_{f1})} \sqrt{2 k_B T / m} \sin(2 \pi R_{f2}) , \\ v' &= \sqrt{-\ln(R_{f3})} \sqrt{2 k_B T / m} \sin(2 \pi R_{f4}) , \\ w' &= \sqrt{-\ln(R_{f5})} \sqrt{2 k_B T / m} \sin(2 \pi R_{f6}) , \end{aligned} \quad (2.7)$$

bağıntıları ile, Maxwell dağılımından örneklenmiş bir ısı hız bileşeni atanır. Burada R_{f_n} , 0 ile 1 arasında düzgün dağılmış rasgele bir sayıyı, T hücre sıcaklığını, m

molekül kütlelerini, k_B Boltzmann sabitini belirtmektedir. Moleküllerin toplam hızları ise, hücrelere başlangıç koşulu olarak atanan gaz akış hızı bileşenleri (U, V, W) kullanılarak,

$$\begin{aligned} u &= u' + U, \\ v &= v' + V, \\ w &= w' + W, \end{aligned} \quad (2.8)$$

bağıntılarından hesaplanmaktadır.

2.1.3 DSMC moleküllerinin hareket safhası

DSMC yönteminde moleküllerin konum değişiklikleri, ilk konumları ve hız bileşenlerinden yararlanılarak hesaplanmaktadır. 3-boyutlu bir hesaplamada moleküller,

$$\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1 + \mathbf{v} \cdot \Delta t, \quad (2.9)$$

bağıntısında olduğu gibi, ilk konumlarından ($\mathbf{x}_1$) başlayarak, sahip oldukları hız ($\mathbf{v}$) ile Δt zaman adımının çarpımı kadar zamanda ilerletilirler. 1- ve 2-boyutlu hesaplamalarda moleküllerin konumları sırası ile sadece 1- ve 2-boyutta takip edilirken, molekül hızları her durumda 3-boyutlu olarak takip edilmektedirler.

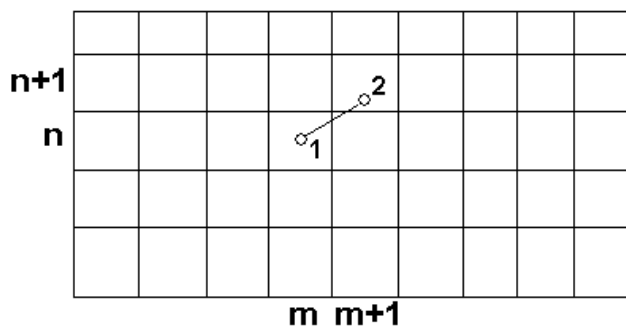
DSMC yönteminde molekül hareket safhası ve çarpışma safhası birbirinden ayrıklaştırıldığı için Δt zaman adımının, moleküllerin ortalama çarpışma zamanı olan t_c ’den daha küçük alınması gerekmektedir (Bird, 1994). Moleküllerin ortalama çarpışma zamanı t_c ,

$$t_c = \frac{\lambda}{\bar{c}}, \quad (2.10)$$

bağıntısında olduğu gibi ortalama serbest yol (λ) ve moleküllerin ortalama ısı hızı ($\bar{c}$) kullanılarak hesaplanmaktadır. t_c ’den daha büyük seçilen zaman adımları, moleküllerin hareket safhasında ortalama serbest yola nazaran daha fazla yol almasına ve dolayısı ile birkaç hücre boyunca ilerlemesine neden olur. Bu durum viskozite katsayısı değerinde zaman adımı Δt ’nin karesi oranında bir hataya neden olmaktadır (Hadjiconstantinou, 2000). DSMC yönteminde kullanılan zaman adımı $\Delta t < t_c$ kısıtlamasının, matematiksel modellerin sayısal çözümlerinde karşılaşılan

CFL (Courant-Friederichs-Lewy) kısıtlaması ile bir benzerliği bulunmamaktadır. DSMC yöntemi her zaman karardır (Karniadakis ve Beskok, 2002).

DSMC molekülleri zamanda bir zaman adımı Δt kadar ilerleyip, hareketlerini tamamlarlar. Bu safhada moleküllerin en son konuştandıkları hücre bilgisinin tespit edilmesine ve akış bölgesi sınırlarını geçen moleküllerin sınır-molekül etkileşimlerinin hesaplanmasına ihtiyaç duyulmaktadır. Bu amaçla öteleme hareketi yapan moleküllerin izleri Şekil 2.3'te görüldüğü gibi başlangıçtan itibaren son konumlarına kadar takip edilir. DSMC moleküllerini öteleme safhasında takip etmek için önce molekülün harekete geçtiği hücreyi terk edip etmediği kontrol edilir. Molekül hücreğini terk etmiş ise hücreyi hangi kenar/yüzeyden terk ettiği ve bu kenar/yüzeyin sınır özelliği taşıyıp taşımadığı tespit edilir. Eğer sınır duvar ise molekül seçilen yansıma modeli uyarınca yansımaya tabi tutulur. Sınırın akım sınırı olması halinde sınırı geçtiği saptanan molekül silinir. Bir molekül sınır özelliği taşımayan bir hücre kenar/yüzeyi ile karşılaştığında herhangi bir etkileşime girmez ve hareketine serbestçe devam eder. Bu molekül izleme işlemine, molekül hareketini tamamlayana kadar devam edilir. Akış bölgesi sınırları içinde kalan DSMC moleküllerinin en son konuştandığı hücre bilgisi hesaplanarak kaydedilir. Molekül izleri takip edilerek gerçekleştirilen bu işleme ait sayısal uygulamalar, detayları ile birlikte Bölüm 3'te, molekül-duvar ve molekül-akım sınırı etkileşimleri ise aşağıda sunulmuştur.



Şekil 2.3 : Molekül 1 numaralı konumundan 2 numaralı konuma hareket eder. $[m,n]$ hücreğinde olmadığı anlaşılan molekül önce hücreyi terk ettiği kenara komşu hücrede aranır. $[m+1,n]$ hücreğinde de bulunamayan molekülün, hücreyi terk ettiği kenar tekrar hesaplanır ve komşu $[m+1,n+1]$ hücreğinde aranır.

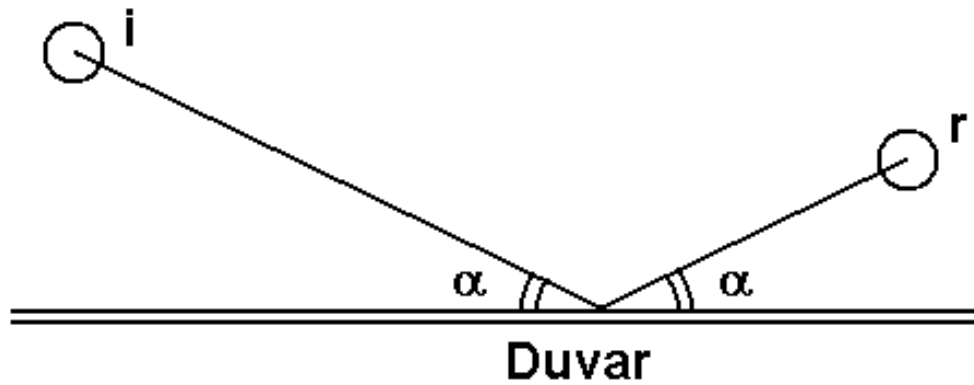
2.1.3.1 Duvar sınır koşulları

Gaz-duvar ilişkisi DSMC yönteminde oldukça önemli bir yer tutmaktadır. Sürtünme kuvveti, kaldırma kuvveti ve ısı aktarımı bu gaz-duvar etkileşiminden kaynaklanmaktadır. Fiziksel açıdan karmaşık bir konu olan gaz-duvar etkileşimi geliştirilen tüm teoriler ve yapılan deneysel çalışmalara rağmen mükemmel bir temele oturtulamamıştır (Shen, 2005). DSMC yönteminde molekül-duvar etkileşimi için çeşitli modeller kullanılmaktadır. Bu modeller içinde düzgün yansıma modeli, dağınık yansıma modeli, Maxwell modeli ve Cercignani-Lampis-Lord (CLL) modeli en yaygın kullanılanlar modellerdir.

Düzgün yansıma modelinde duvara çarpan gaz molekülleri Şekil 2.4’de olduğu gibi aynen geldiği açıda yansır ve gaz molekülleri ile duvar arasında bir enerji aktarımı yaşanmaz. Eğer duvara çarpan molekülün çarpmadan önceki paralel hız bileşenlerini u_i, v_i , duvara dik hız bileşenini ise w_i ile ifade edersek, yansıma sonrası hız bileşenleri aşağıdaki değerleri alırlar:

$$\begin{aligned} u_r &= u_i, \\ v_r &= v_i, \\ w_r &= -w_i. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Düzgün yansımada duvardan yansıyan molekülün iç enerjilerinde de bir değişiklik olmadığı varsayılmaktadır.



Şekil 2.4 : Düzgün yansıma modelinde moleküllerin duvara geliş ve duvardan yansıma açıları eşittir.

Dağınık yansıma modelinde ise (Şekil 2.5) duvara çarpan gaz moleküllerinin yansdıktan sonraki hız bileşenleri ve iç enerjisi, yansdıkları duvarın sıcaklığından Maxwell dağılımına uygun olarak örneklenir. Dağınık yansıma ugrayan moleküllerin yansıma açıları, hem yansıma öncesi duvarla yaptıkları açıdan bağımsız olur, hem de duvara çarpmadan önceki toplam enerjileri duvara çarptıktan sonraki toplam enerjiden farklı olur. Dağınık yansıma modelinde molekül hız bileşenlerini hesaplamak için,

$$\begin{aligned}
 u_r &= A \sin \theta \quad , \\
 v_r &= A \cos \theta \quad , \\
 w_r &= \sqrt{-\ln(R_f)} / \beta \quad , \\
 A &= \sqrt{-\ln(R_f)} / \beta \quad , \\
 \theta &= 2 \pi (R_f) \quad , \\
 \beta^{-1} &= \sqrt{2 R T} \quad ,
 \end{aligned}
 \tag{2.12}$$

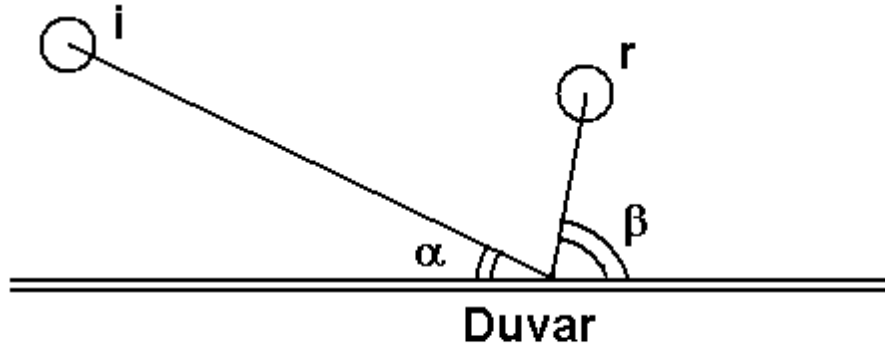
bağıntıları kullanılmakta olup, burada T duvar sıcaklığını, R gaz sabitini, β^{-1} ise en olası molekül hızı göstermektedir. u_r ve v_r molekülün yansmadan sonraki duvara paralel hız bileşenleri, w_r ise yansmadan sonraki duvara dik hız bileşenidir. Duvara dik hız bileşeni (w_r) molekül duvardan geçemeyeceği için, hesaplanırken tek yönlü olmak durumundadır ve bu nedenle duvara dik hız bileşeni yarım Maxwell dağılımından örneklenmektedir. Tüm yönler için eşit olasılığa sahip paralel hız bileşenleri (u_r, v_r) ise Maxwell dağılımından örneklenirler. Burada iç enerji açısından dikkat edilmesi gereken husus, moleküllerin sahip oldukları iç serbestlik dereceleri ile ilgilidir. Bir atomdan oluşan bir molekül sadece $\xi_{tr} = 3$ öteleme serbestlik derecesine sahip iken, iki veya daha fazla atom içeren moleküller ilaveten iç serbestlik derecelerine de sahiptirler. Moleküllerin iç serbestlik dereceleri dönme serbestlik ξ_r ve titreşim serbestlik ξ_v derecelerinden oluşmaktadır. Titreşim serbestlik derecesi birden çok atomlu moleküller için $\xi_v = 2$ olup, 1.000 K altında sıcaklıklarda titreşim serbestlik derecesi ihmal edilebilmektedir (Bird, 1994). Dönme serbestlik derecesi 2 atomlu moleküllerde $\xi_r = 2$, daha fazla atomlu moleküllerde ise $\xi_r = 3$ olarak alınmaktadır. $\xi_r = 2$ için, T sıcaklığındaki bir duvardan molekülün iç dönme enerjisi örneklenirken,

$$\varepsilon_r = -\ln(R_f) k_B T \quad ,
 \tag{2.13}$$

bağıntısı kullanılmaktadır. Üç veya daha fazla atomlu moleküller için ise daha farklı bir yöntem kullanılmasına ihtiyaç vardır. Yansıyan molekülün dönme enerjisi aşağıda yer alan enerji dağılım fonksiyonundan,

$$f(\varepsilon_r) = \frac{1}{\Gamma(\xi_r/2)} \left(\frac{\varepsilon_r}{k_B T} \right)^{\xi_r/2-1} e^{-\varepsilon_r/k_B T}, \quad (2.14)$$

detaylı sayısal uygulaması Bölüm 3'te verilen kabul-red yöntemi ile örneklenmektedir (Gimelshein ve diğ., 1996). Dağınık yansıma modeli genelde çok özel işlemlerden geçmemiş duvarlar ve aşırı hızla hareket eden moleküllerin söz konusu olmadığı durumlarda mühendislik uygulamaları için yeterli doğrulukta sonuçlar vermektedir. Fakat çok temiz ve özel işlemlerden geçmiş duvarlar, vakum koşulları, çok hızlı hareket eden moleküller söz konusu olduğunda ise dağınık yansıma modeli yeterli olmamaktadır (Karniadakis ve Beskok, 2002).

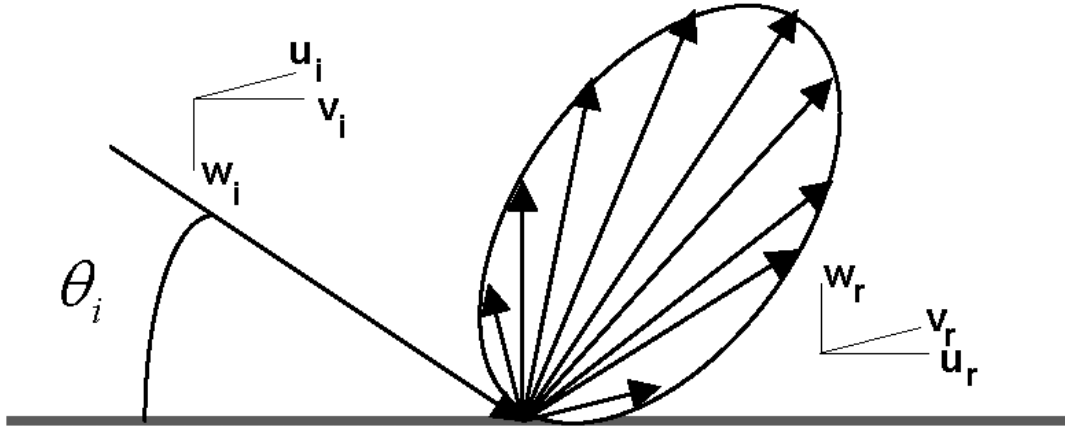


Şekil 2.5 : Dağınık yansıma modelinde molekülün duvara geliş açısı α ile yansıma açısı β birbirinden bağımsızdır.

Maxwell yansıma modeli ise daha önce açıklanan düzgün ve dağınık yansıma modellerin bir karışımıdır. Önceden deneysel olarak belirlenen α ısıl barınma katsayısı uyarınca, duvara çarpan moleküllerin α oranında bir kısmı dağınık, $1-\alpha$ oranında bir kısmı ise düzgün yansımaya tabi tutulmaktadır.

Daha önce ifade edilen yansıma modelleri duvardan yansıyan moleküllerin taşıdığı enerji ve çarpma açısı ile duvar sıcaklığı arasında bir ilişki kurulmasına imkan tanımaz (Shen, 2005). Fakat yapılan moleküler demet deneyleri bunun böyle

olmadığını, yansıyan moleküllerin belirli bir açı etrafında dağıldığını göstermektedir. Bu noktadan hareketle CLL (Cercignani-Lampis-Lord) yansıma modeli geliştirilmiştir (Cercignani ve Lampis, 1971; Lord, 1991; Lord, 1995). Bu model şu an için en kapsamlı ve gelişmiş yansıma modelidir. Bu model de Şekil 2.6’da görüleceği üzere, yansıma açısı molekülün taşıdığı enerji, çarpma açısı ve duvar sıcaklığına bağlı bir değer etrafında dağılma göstermektedir.



Şekil 2.6 : CLL yansıma modelinde yansıyan moleküllerin yansıma açısı belli bir değer etrafında dağılım göstermektedir.

CLL yansıma modelinde duvardan yansıyan moleküllerin duvara teğet hız bileşenleri aşağıda yer alan bağıntılar,

$$\begin{aligned} \theta &= 2 \pi R_f \quad , \\ r &= \sqrt{-\alpha_T \ln(R_f)} \quad , \\ u_r &= \sqrt{1-\alpha_T} u_i + r \cos \theta \quad , \\ v_r &= r \sin \theta \quad , \end{aligned} \tag{2.15}$$

kullanılarak hesaplanmaktadır. Duvardan yansıyan moleküllerin duvara dik hız bileşenini hesaplamak için ise aşağıda yer alan bağıntılardan,

$$\begin{aligned} \theta &= 2 \pi R_f \quad , \\ r &= \sqrt{-\alpha_N \ln(R_f)} \quad , \\ w_r &= \sqrt{r^2 + (1-\alpha_N) w_i^2 + 2 r \sqrt{1-\alpha_N} w_i \cos \theta} \quad , \end{aligned} \tag{2.16}$$

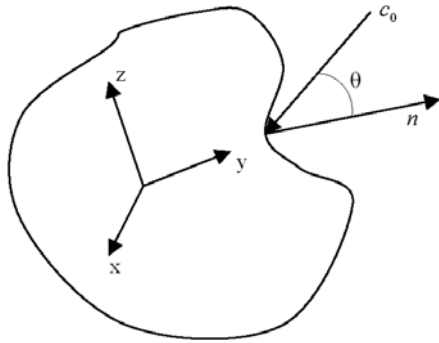
yararlanılmaktadır. Yukarıdaki bağıntılarda kullanılan teğetsel enerji barınma katsayısı α_T ve dik enerji barınma katsayısı α_N , sırası ile teğetsel momentum barınma katsayısı σ ve dik momentum barınma katsayısından σ' aşağıda yer aldığı gibi,

$$\begin{aligned}\alpha_T &= \sigma (2 - \sigma) \quad , \\ \alpha_N &= \sigma' (2 - \sigma') \quad ,\end{aligned}\tag{2.17}$$

bağıntıları kullanılarak hesaplanmaktadır.

2.1.3.2 Akım sınır koşulları

Duvarlar dışında geometrimiz içinde yer alan akışkana uygulanan bir diğer sınır koşulu da gazın giriş ve çıkış yaptığı sınırlardadır. Gazın molekül sayı yoğunluğu (n), akış hızı (c_0), ve sıcaklığından (T) içeri giren moleküllerin sayısı hesaplanırken, bu moleküllere ait hız bileşenleri ise gaz akış hızı bileşenleri ve gaz sıcaklığından yararlanılarak hesaplanmaktadır. Moleküllerin sınırın giriş yüzeyine dik hızları (u) kabul-red örnekleme yöntemi ile hesaplanırken, molekül hızlarının yatay bileşenleri (v, w) Maxwell hız dağılım fonksiyonu kullanılarak hesaplanmaktadır. Şekil 2.7'den görüleceği üzere Kartezyen koordinat sistemi sınır yüzeyi yz-düzleminde, gaz akış hız vektörü ise xy-düzleminde kalacak şekilde seçilebilir. Sınır yüzeyine dik eksen x-ekseni olup, gaz giriş hız vektörünün x-ekseni ile yaptığı açı θ ile gösterilmektedir. Dolayısı ile gaz akış hız vektörünün x-ekseni yönündeki sınır yüzeyine dik bileşeni $U = c_0 \cos(\theta)$ olurken, diğer yatay bileşenler $V = c_0 \sin(\theta)$ ve $W = 0$ olmaktadır.



Şekil 2.7 : Gaz akış bölgesine sınırdan gaz girişi.

Sınırdan içeri giren molekül sayı akısı N^0 , gazın hız dağılım fonksiyonunu f ve molekül dik hız bileşeninin u çarpımının entegrasyonundan elde edilmektedir,

$$N^0 = n \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} u f \, du \, dv \, dw. \quad (2.18)$$

Moleküllerin sınırdan içeriye giriş hızları, ısı hızları (u', v', w') ile gazın içeri giriş hız bileşenlerinin toplamına eşittir:

$$\begin{aligned} u &= u' + c_0 \cos \theta, \\ v &= v' + c_0 \sin \theta, \\ w &= w'. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Sınırdan içeri giriş yapan gazın ısı dengede olduğu varsayımından hareketle, hız dağılım fonksiyonu f , Maxwell hız dağılım fonksiyonu f_0 ile eşdeğerdir:

$$\begin{aligned} f_0 &= n \left(\frac{m}{2 \pi k_B T} \right)^{3/2} \exp \left[- \frac{m}{2 k_B T} (u'^2 + v'^2 + w'^2) \right], \\ f_0 &= n \frac{\beta^3}{\pi^{3/2}} \exp \left(- \beta^2 (u'^2 + v'^2 + w'^2) \right), \\ \beta &= \sqrt{\frac{m}{2 k_B T}}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Molekül sayı akısı N^0 için aşağıda belirtilen bağıntı,

$$N^0 = n \frac{\beta^3}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-c_0 \cos(\theta)}^{+\infty} (u' + c_0 \cos(\theta)) \exp(-\beta^2 (u'^2 + v'^2 + w'^2)) \, du \, dv \, dw, \quad (2.21)$$

kullanılmaktadır. Denklem integralin alınması ile aşağıdaki şekli,

$$N^0 = \frac{n}{2\sqrt{\pi}\beta} \left[\exp(-s^2 \cos^2 \theta) + s \sqrt{\pi} \cos \theta \{1 + \operatorname{erf}(s \cos \theta)\} \right], \quad (2.22)$$

almaktadır. Denklemde erf ile hata fonksiyonu ifade edilmektedir. Moleküler hız oranı olan s ise,

$$s = c_0 \beta = \frac{c_0}{\sqrt{2RT}}, \quad (2.23)$$

gaz akış hızının en olası moleküler hıza oranıdır. Gaz akış hızının yüzeye dik bileşeninin ($c_0 \cos \theta$), en olası moleküler hıza (β^{-1}) oranı S ile ifade edildiğinde Denklem (2.22) aşağıdaki duruma,

$$N^o = \frac{n}{2\sqrt{\pi}\beta} \left[\exp(-S^2) + S \sqrt{\pi} \{1 + \operatorname{erf}(S)\} \right] , \quad (2.24)$$

$$S = c_0 \cos(\theta) \beta ,$$

gelir. N^o birim alandan, birim zamanda geçen gerçek molekül sayısını verdiğinden, ΔS sınır yüzey alanından, Δt zaman aralığında, F_N fiziksel- temsilci molekül oranı için sınırı geçen temsilci molekül sayısı aşağıda olduğu gibidir:

$$N_T^o = N^o \frac{\Delta S \cdot \Delta t}{F_N} . \quad (2.25)$$

Moleküllerin sınıra paralel ısı hızları v', w' , Maxwell dağılımından,

$$\begin{aligned} v' &= r \cos \theta , \\ w' &= r \sin \theta , \\ \theta &= 2 \pi R_f , \\ r &= \sqrt{-\ln R_f} / \beta , \end{aligned} \quad (2.26)$$

bağıntıları kullanılarak hesaplanır. Yukarıda yer alan bağıntılarda ifade edilen θ açısı, 0 ile 2π arasında düzgün olarak dağılmış rasgele bir açı, R_f ise 0 ile 1 arasında düzgün dağılmış rasgele bir sayıdır. β değeri ise en olası moleküler hızın ($\sqrt{2 R T}$) tersidir.

Moleküllere içeri girişte atanan sınıra dik hız bileşeni (u) ise, en yaygın yöntem olan kabul-red yöntemi kullanılarak hesaplanır (Lilley ve Macrossan, 2003). Öncelikle bu u hızının dağılım fonksiyonu hesaplanır:

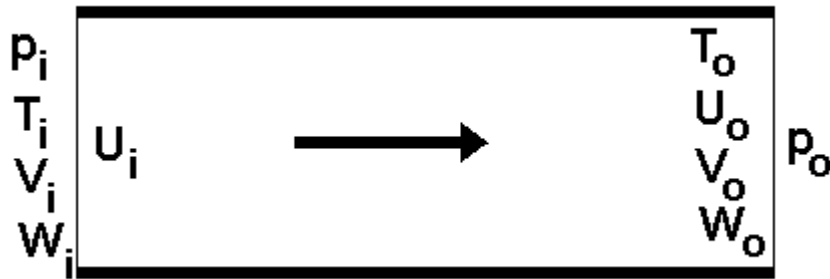
$$f_u = \alpha u \exp(-\beta^2 u^2) . \quad (2.27)$$

Burada α değeri bir normalleştirme katsayısı olup,

$$\alpha = \frac{2\beta^2}{S\sqrt{\pi}(1 + \operatorname{erf} S) + \exp(-S^2)} , \quad (2.28)$$

değerine eşittir. Moleküllerin sınıra dik hız bileşenleri (u), ayrıntılı uygulaması Bölüm 3'te açıklanan kabul-red yöntemi kullanılarak f_u hız dağılım fonksiyonunun örneklenmesi ile hesaplanmaktadır. Kabul-red yöntemi ile hız örnekleme istenen sayıda moleküle hız atanana kadar sürdürülür. Bu yöntemde dikkat edilmesi gereken en önemli husus alt ve üst hız sınır değerlerinin seçilmesidir. Eğer hız aralığı çok büyük seçilirse, kabul edilme şansı çok düşük hızlarda eşit olasılıkla test hızı olarak seçildiği için, test hızlarının büyük bir kısmı red edilir ve yöntemin verimliliği düşer. Bunun tam tersi olarak hız sınır aralığı çok dar seçilirse, bu seferde moleküllere atanan hızlar, hız dağılım fonksiyonunu tam olarak örnekleyememiş olur. Hesaplama verimliliği ve örnekleme etkinliği açısından, hız sınır değerlerinin $u_{\min} = (S - 3) \beta^{-1}$ ve $u_{\max} = (S + 3) \beta^{-1}$ olarak seçilmesi önerilmektedir (Lilley ve Macrossan, 2003).

Gaz mikro iç akışlarında, akışın giriş/çıkış yaptığı sınırlarda bir kısım koşullar kullanıcı tarafından belirlenirken, eksik sınır koşulları akış alanından tamamlanmak durumundadır (Piekos ve Breuer, 1996). Gazın giriş yaptığı sınırda (Şekil 2.8) basınç p , sıcaklık T ve sınır yüzeyine paralel gaz akış hız bileşenleri (V, W), kullanıcı tarafından belirlenirken, sadece gaz akış hızının sınıra dik bileşeni (U) akış alanının iç kısmından hesaplanır. Çıkışta ise sadece basınç kullanıcı tarafından belirlenir. Diğer tüm eksik sınır koşulları iç akış alanından hesaplanır. Çıkışta gaz akış hızı ses hızından daha büyük ise ($U_0 > a$), bu sınırdan içeri giren molekül sayısı ihmal edilebilir bir düzeye gelmektedir. Bu durumda gaz çıkış sınırından içeri molekül ekleme işlemi tamamen iptal edilebilmektedir (Piekos ve Breuer, 1996).



Şekil 2.8 : İç akışta basınç sınır koşulları.

Eksik sınır koşullarının iç akış alanından tamamlanmasında farklı yöntemler önerilmektedir. Piekos ve Breuer (1996) eksik sınır koşullarını sınıra komşu akış alanında yer alan hücrelerin makroskobik değerlerinden,

$$(U_i)_m = U_m, \quad (2.29)$$

bağıntısını kullanarak tamamlamaktadır. Burada m hücre bilgisini, U ise gaz akış hızının sınıra dik bileşenini ifade etmektedir. Nance ve diğ. (1998) ise girişte sınıra dik gaz akış hızı bileşenini her hücre için o hücrenin gaz akış debisinden hesaplamaktadırlar. Önce akış hızının hesaplanacağı sınırdan her iki tarafa doğru geçen molekül sayısı debisi hesaplanmakta ve bu iki değer arasındaki fark, o hücre sınırının kesit alanına ve hücrenin molekül sayısı yoğunluğuna bölünerek gaz akış hızı,

$$(U_i)_m = \frac{\left(\overset{0}{N}_+ - \overset{0}{N}_- \right)_m}{n_m A_m \Delta t}, \quad (2.30)$$

bağıntısı ile hesaplanmaktadır. Burada $\overset{0}{N}$ sayı debisini, m hücre bilgisini, n molekül sayısı yoğunluğunu, A yüzey kesit alanını, Δt ise zaman adımını göstermektedir. Bu yöntem Ikegawa ve Kobayashi (1989) de belirtilen yöntemle benzetmekle birlikte, hesaplamalar hücre esaslı yapıldığı için bir farklılık arz etmektedir. Yine bir diğer farklılık ise sınırı akış alanından dışarı doğru geçen moleküllerin benzetim içinde teker teker sayılması yerine Maxwell dağılımından hesaplanmasıdır. Çıkış sınırında ise eksik sınır koşulları ses altı hızlar için sürekli ortam denklemlerinde sıkça kullanılan karakteristik teoriden yararlanılarak, aşağıda yer alan,

$$\begin{aligned} (\rho_o)_m &= \rho_m + \frac{(p_o)_m - (p)_m}{a_m^2}, \\ (U_o)_m &= U_m + \frac{(p)_m - (p_o)_m}{\rho_m a_m}, \\ (T_o)_m &= \frac{(p_o)_m}{(\rho_o)_m R}, \\ (V_o)_m &= V_m, \\ (W_o)_m &= W_m, \end{aligned} \quad (2.31)$$

bağıntılar yardımıyla hesaplanır. Burada m hücre bilgisini, ρ yoğunluğu, p basıncı, a yerel ses hızını, R gaz sabitini, U, V, W ise gaz akış hızlarını

belirtmektedir. Wu ve Tseng (2001) ise sadece giriş sınırında değil, hem giriş hem de çıkış sınırında molekül sayı akı değerlerinin kullanılarak gaz akış hızının hesaplanmasının daha doğru bir yaklaşım olacağını ve böylelikle karakteristik teoriden gelen ses altı hız sınırlamasının da kalkacağını ifade etmişlerdir. Fang ve Liou (2002) ses altı hızlar için mikro kanallarda çıkış sınırında karakteristik teorelin uygulanmasının uygun olduğunu ama giriş sınırında gaz akış hızının molekül sayı akısı yerine içerden birinci dereceden dışdeğerbiçim (ekstrapolasyon) ile bulunmasını önermiştir. Çelenligil (2008) yüksek Kn sayılarında sadece Mach sayısının değil, Kn sayısının da çıkış sınır şartlarında etkisi olduğunu göstermiştir.

Gaz molekülleri eğer tek atom yerine iki veya daha fazla atomdan oluşuyorsa moleküller öteleme enerjisi ε_{tr} , yanında dönme ε_r ve titreşim ε_v enerjilerine de sahiptirler. İki atomlu bir molekül için dönme serbestlik derecesi $\xi_r = 2$ olurken, bu sayı üç veya daha fazla atomdan oluşan moleküller için $\xi_r = 3$ olur. Titreşim serbestlik derecesi birden çok atomlu moleküller için $\xi_v = 2$ olup, genelde yüksek sıcaklık derecelerinde ($T > 1.000^0 K$) hesaplamaya katılmaktadır (Bird, 1994).

Sınırdan giriş yapan iki atomlu moleküllerin dönme enerjileri,

$$\varepsilon_r = -\ln(R_f) \frac{\xi_r k_B T}{2}, \quad (2.32)$$

bağıntısından örneklenirken, üç veya fazla atomlu moleküllerin ($\xi_r > 2$) dönme enerjileri,

$$f(\varepsilon_r) = \frac{1}{\Gamma(\xi_r/2)} \left(\frac{\varepsilon_r}{k_B T} \right)^{\xi_r/2-1} e^{-\varepsilon_r/k_B T}, \quad (2.33)$$

dağılım fonksiyonundan kabul-red yöntemi ile örneklenmektedir. Burada ξ_r dönme serbestlik derecesini, T gaz sıcaklığını göstermektedir. Γ ise gamma fonksiyonudur.

2.1.4 DSMC molekül çarpışmaları

DSMC yönteminde moleküllerin hareket safhasının tamamlanmasının ardından sıra moleküllerin çarpıştırılmaları safhasına gelir. Fiziksel benzetimin gerçeğe yakın olması için sadece birbirine yakın olan moleküllerin çarpışmalarına izin verilmektedir. DSMC yönteminde hücre içindeki tüm moleküllerin birbirleri ile olan

çarpışma olasılıklarını hesaplamak ve en yüksek çarpışma olasılığı olan molekülleri çarpıştırmak hesaplama yükü açısından verimli olmamaktadır (Bird, 1994). Hesaplama yükünü azaltmak amacı DSMC hesaplamalarında daha farklı yöntemler uygulanmaktadır.

DSMC yönteminde molekül çarpışmaları genelde ikili çarpışma olarak modellenmektedir. Bunun nedeni DSMC yönteminin gaz akışlarında özellikle de seyreltik gaz akışlarında kullanılmasıdır. Çok yoğun gazlar haricinde, moleküller arasındaki ortalama uzaklık (δ) ile gaz molekül çapı (d) karşılaştırıldığında, $\delta \gg d$ olduğu görülmektedir. Seyreltik gazlarda moleküller arası mesafenin büyük olması nedeni ile molekül çarpışmaları çok büyük bir olasılıkla ikili çarpışma şeklinde olmaktadır (Shen, 2005). Örneğin azot gazı ele alındığında, moleküller arası ortalama mesafe ve molekül çapına ait oranlar aşağıda olduğu gibidir. Azot gazının atmosferik basınç altında ($p = 101325 \text{ Pa}$) ve 300 K sıcaklıkta molekül sayı yoğunluğu,

$$n = p / k_B T , \quad (2.34)$$

bağıntısından, $n \cong 2.44 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}$ olarak bulunur. Moleküller arası ortalama mesafe δ buradan,

$$\delta = n^{-1/3} \quad (2.35)$$

bağıntısı kullanılarak, $\delta \cong 3.44 \times 10^{-9} \text{ m}$ olarak hesaplanır. Azot gazı moleküllerinin çapı $d = 4.17 \times 10^{-10}$ olarak alındığında, $\delta / d \cong 8.25 \gg 1$ olduğu görülür. Bu orandan gazın seyreltik olduğu ve bu seyreltik gaz ortamında molekül çarpışmalarının büyük bir olasılıkla ikili çarpışmalar olacağı anlaşılır. Daha önceki örnekte belirtilen şartlar ortalama serbest yol formülüne uygulandığında ise $\lambda = 5.28 \times 10^{-8} \text{ m}$ değeri elde edilir ve kolayca görüleceği gibi $\lambda / \delta \cong 15 \gg 1$ olarak bulunur. Yine aynı şekilde $\lambda \gg \delta \gg d$ bağlantısı görülmektedir. Bu değerler özet olarak Çizelge 2.3’de sunulmaktadır.

Çizelge 2.3 : Azot gazı için standart değerler.

Basınç (Pa)	Sıcaklık (K)	Molekül Sayı Yoğunluğu (1/m ³)	Azot Molekül Çapı (m)	Moleküller Arası Ortalama Mesafe (m)	Ortalama Serbest Yol (m)
101325	300	2.44x10 ²⁵	4.17x10 ⁻¹⁰	3.44x10 ⁻⁹	5.28x10 ⁻⁸

2.1.4.1 Hücrelerde çarpışacak moleküllerin ve sayılarının hesaplanması

DSMC yöntemi çarpışma safhasında bir zaman adımı Δt süresince aynı hücre içinde konumlanmış moleküllerden kaçının birbirleri ile çarpışacağı genelde Bird (1989) tarafından geliştirilen zamansız sayaç yöntemi (NTC) ile belirlenmektedir. Şekil 2.9'dan görüleceği üzere V_h hacmindeki bir DSMC hücresinde Δt süresince, c_r bağıl hızı ile yol alan iki katı küre (HS) molekülünün çarpışma olasılığı, toplam etki kesitlerinin $(\sigma_T = \pi d^2)$ taradığı hacim $(V_r = F_N \sigma_T c_r \Delta t)$ ile hücre hacminin (V_h) oranına eşit olmaktadır:

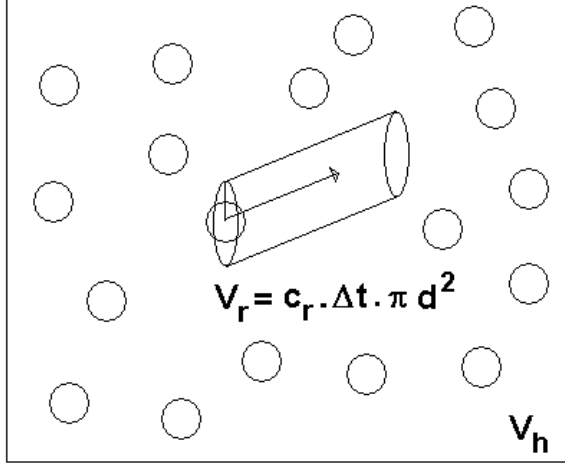
$$P = F_N \sigma_T c_r \Delta t / V_h. \quad (2.36)$$

F_N burada bir temsilci molekülün temsil ettiği fiziki molekül sayısını belirtmektedir. DSMC yönteminde her çarpışma safhasında her hücre için en büyük $(\sigma_T c_r)_{\max}$ değeri kaydedilir. Bu değer hem çarpışacak molekül çifti sayısının hesaplanmasında, hem de çarpışma için seçilecek moleküllerin seçim kriterinde kullanılmaktadır.

DSMC hücresinde eğer N_{tm} adet temsilci molekül bulunuyorsa, $\frac{N_{tm}(N_{tm}-1)}{2}$ adet farklı sayıda ikili çarpışma ihtimali mevcuttur. N_{tm} sayısının büyük değerleri için $\frac{N_{tm}(N_{tm}-1)}{2} \approx \frac{N_{tm}^2}{2}$ kabulü yapıldığında, V_h hacmindeki bir DSMC hücresinde bir zaman adımı süresince oluşacak ikili çarpışma sayısı N_c aşağıdaki bağıntıdan hesaplanabilmektedir:

$$N_c = (1/2) N_{tm} \overline{N_{tm}} F_N (\sigma_T c_r)_{\max} \Delta t / V_h. \quad (2.37)$$

DSMC yönteminin dinamik karakteri nedeni ile N_{tm} değeri her zaman adımında farklı bir değer alır. İstatistiksel anlamda bir değer karesinin ortalaması, o değer ortalamasının karesinden farklıdır. Bu nedenle denklemde N_{tm}^2 yerine $N_{tm} \bar{N}_{tm}$ ifadesi kullanılmıştır (Bird, 1994). Bu bağıntıda ifade edilen $\bar{N}_{tm}$ değeri o hücrede konumlanan DSMC hücrelerinin zaman veya grup ortalamasıdır.



Şekil 2.9 : Bağıl hızları c_r , çapları d olan iki molekülün toplam etki kesitinin Δt zaman aralığında taradığı hacim.

DSMC hücresi içinde kaç adet molekül çiftinin çarpışacağını hesaplanmasının ardından hangi moleküllerin çarpışacağını tespit edilmesi gerekmektedir. Önce hücre içinden rasgele bir temsilci molekül seçilir. Daha sonra yine aynı hücre içinden rasgele ikinci bir temsilci molekül seçilir. Seçilen moleküllerin çarpışma şartını sağlayıp sağlamadıklarını görmek için kabul-red yöntemi kullanılmaktadır. Önce çarpışma için seçilen iki molekülün bağıl hız (c_r) ve toplam etki kesiti (σ_T) çarpımı hesaplanır. Bu değer aşağıda belirtilen bağıntı uyarınca o hücre için o ana kadar kaydedilen en büyük bağıl hız ve toplam etki kesiti çarpımına bölünür ve 0 ile 1 arasında düzgün dağılmış rasgele bir sayı (R_f) ile karşılaştırılır:

$$\frac{c_r \sigma_T}{(c_r \sigma_T)_{\max}} > R_f. \quad (2.38)$$

Bölüm değeri R_f değerinden büyük ise, moleküller seçilen modele uygun olarak çarpıştırılırlar. Aksi durumda bu kriteri sağlayacak yeni molekül çiftlerine geçilir. Bu işleme hesaplanan sayıda molekül çarpışması gerçekleşene kadar devam edilir.

2.1.4.2 İkili molekül çarpışma modelleri

Moleküller arasındaki kuvvetler kısa mesafelerde itme, uzun mesafelerde ise çekme şeklinde olmaktadır. Elastik çarpışma ifadesi ile çarpışan moleküllerin toplamda hem enerji hem de momentumlarının korunduğu ve ilaveten sahip oldukları öteleme enerjileri ile dönme ve titreşim enerjileri arasında bir enerji alış veriş olmadığı belirtilmektedir. Daha önce de belirtildiği gibi gaz molekülleri arasındaki ortalama mesafenin gaz molekülünün çapından çok daha büyük olduğu ($\delta \gg d$) seyreltik gazlarda ikiden fazla molekülün aynı anda birbirleri ile çarpışma ihtimali çok düşüktür (Shen, 2005). Bu nedenle DSMC yönteminde genelde ikili molekül çarpışma modelleri kullanılmaktadır. İkili elastik molekül çarpışmalarında kütle, doğrusal momentum ve öteleme enerjisi korunmaktadır

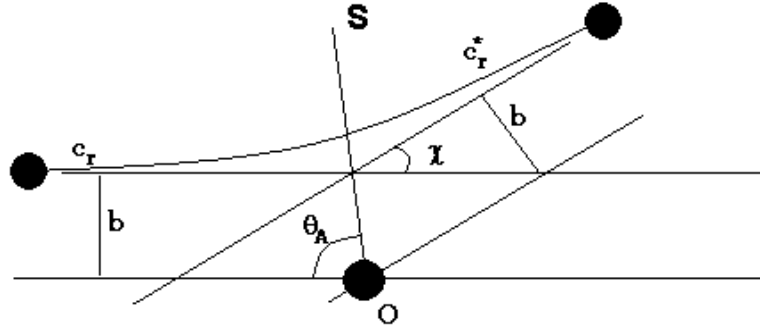
$$\begin{aligned} m_1 \mathbf{c}_1 + m_2 \mathbf{c}_2 &= m_1 \mathbf{c}_1^* + m_2 \mathbf{c}_2^* = (m_1 + m_2) \mathbf{c}_m \quad , \\ m_1 c_1^2 + m_2 c_2^2 &= m_1 c_1^{*2} + m_2 c_2^{*2} \quad . \end{aligned} \quad (2.39)$$

Bu denklemlerde m kütle, c hızı, $*$ ise çarpışma sonrası değerleri ifade etmektedir. $\mathbf{c}_m$ kütle merkezi hız vektörü, m_r azaltılmış kütle, $\mathbf{c}_r$ ve $\mathbf{c}_r^*$ sırası ile çarpışma öncesi ve sonrası bağıl hız vektörleri olup,

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_m &= \frac{m_1 \mathbf{c}_1 + m_2 \mathbf{c}_2}{m_1 + m_2} \quad , \\ m_r &= \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad , \\ \mathbf{c}_r &= \mathbf{c}_1 - \mathbf{c}_2 \quad , \\ \mathbf{c}_r^* &= \mathbf{c}_1^* - \mathbf{c}_2^* \quad , \end{aligned} \quad (2.40)$$

bağıntıları ile ifade edilirler. Denklem (2.39)'da 6 bilinmeyen hız bileşenine karşılık, 3 tanesi momentum, 1 tanesi enerji olmak üzere 4 adet denklem vardır. Denklem sistemini kapatmak için 2 eksik değer bulunmasına ihtiyaç duyulmaktadır. Bunlardan ilki olan χ açısı çarpışma öncesi bağıl hız vektörünün $\mathbf{c}_r$, çarpışma sonrası bağıl hız vektörü $\mathbf{c}_r^*$ ile yaptığı sapma açısıdır (Şekil 2.10). İkinci bilinmeyen değer ise çarpışmanın yer aldığı düzleminin, referans seçilen her hangi bir düzlem ile

yaptığı ε açısıdır. Bu iki eksik değeri hesaplamak için katı küre (HS) modeli, değişken katı küre (VHS) modeli, değişken yumuşak küre (VSS) modeli gibi çarpışma modelleri geliştirilmiştir.



Şekil 2.10 : İkili çarpışmada c_r bağıl hız vektörünün yaptığı χ açısı sapması (Bird, 1994).

Hesaplama kolaylığı sağladığı için moleküllerin çarpışma öncesi ve sonrası hız vektörleri $\mathbf{c}_m, \mathbf{c}_r, \mathbf{c}_r^*, m_r$ değerleri cinsinden ifade edilirler:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_1 &= \mathbf{c}_m + \frac{m_r}{m_1} \mathbf{c}_r \quad , \\ \mathbf{c}_2 &= \mathbf{c}_m - \frac{m_r}{m_2} \mathbf{c}_r \quad , \\ \mathbf{c}_1^* &= \mathbf{c}_m + \frac{m_r}{m_1} \mathbf{c}_r^* \quad , \\ \mathbf{c}_2^* &= \mathbf{c}_m - \frac{m_r}{m_2} \mathbf{c}_r^* \quad . \end{aligned} \tag{2.41}$$

Buradan görüleceği üzere kütle merkezli sistemde, $\mathbf{c}_1 - \mathbf{c}_m$ ve $\mathbf{c}_2 - \mathbf{c}_m$ hız vektörleri birbirine ters yönlü paralel olup aynı düzlemde yer alırlar. Dolayısı ile çarpışan moleküllerin çarpışma sonrası hız vektörleri de bu düzlemde yer alacaktır. Bu değerleri enerjinin korunumu denklemine yerleştirsek,

$$\begin{aligned} m_1 c_1^2 + m_2 c_2^2 &= (m_1 + m_2) c_m^2 + m_r c_r^2 \quad , \\ m_1 c_1^{*2} + m_2 c_2^{*2} &= (m_1 + m_2) c_m^2 + m_r c_r^{*2} \quad , \end{aligned} \tag{2.42}$$

elde ederiz. Buradan görüleceği üzere çarpışma öncesi ve sonrası bağıl hız vektörlerinin genlikleri birbirine eşit $c_r = c_r^*$ olarak bulunur. Şekil 2.10'dan da

görüreceği üzere χ sapma açısı ile θ_A (bağıl hız vektörü ile simetri eksenine OS arasındaki açı) açısı arasında aşağıdaki,

$$\chi = \pi - 2 \theta_A, \quad (2.43)$$

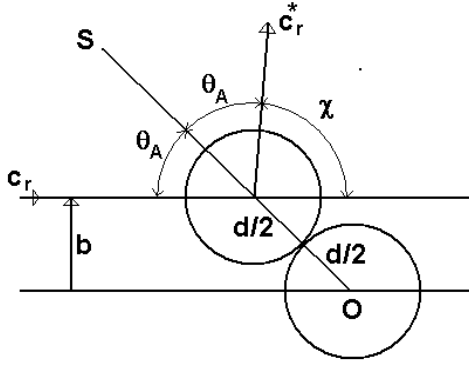
bağıntı mevcuttur. Yukarıda yer alan bağıntı ve çeşitli molekül çarpışma modellerini kullanarak χ sapma açısı hesaplama imkanı mevcuttur.

Molekül çarpışmalarında sapma açısı dışında kullanılan bir diğer önemli parametre de etki kesitidir (σ). Molekül çarpışma modelleri etki kesitinden yola çıkarak toplam etki kesiti σ_T , viskozite etki kesiti σ_μ ve yayılım (difüzyon) etki kesiti σ_D değerlerinin hesaplanmasını sağlarlar. Bu değerler kullanılarak gaz akışına ait viskozite, ısı iletim ve yayılma katsayılarını hesaplamak mümkün olmaktadır. Bu değerlerin hesaplanmasını sağlayacak bağıntılar aşağıda verilmektedir:

$$\begin{aligned} \sigma &= (b / \sin(\chi)) |db / d\chi|, \\ \sigma_T &= \int_0^{4\pi} \sigma \sin(\chi) d\chi d\varepsilon, \\ \sigma_\mu &= \int_0^{4\pi} \sigma \sin^3(\chi) d\chi d\varepsilon, \\ \sigma_D &= \int_0^{4\pi} \sigma (1 - \cos(\chi)) \sin(\chi) d\chi d\varepsilon. \end{aligned} \quad (2.44)$$

2.1.4.3 Katı küre modeli

Katı küre (HS) modeli hesaplamalarının basitliği nedeniyle en çok kullanılan çarpışma modellerinden biridir. Bu modelde Şekil 2.11'de görüleceği üzere moleküllerin çarpışması, bilyardo topları gibi birbirlerine değdikleri an gerçekleşmektedir. Benzer iki molekülün çarpışması için moleküller arası en yakın geçiş mesafesinin (b), yarıçaplarının toplamından $\left(= \frac{d}{2} + \frac{d}{2}\right)$ daha küçük ($b < d$) olması gerekmektedir.



Şekil 2.11 : Katı küre molekül çarpışma modeli (Bird, 1994).

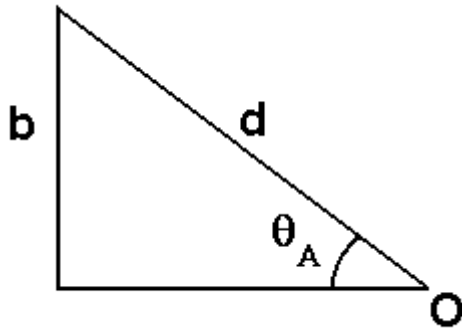
Daha önce elde edilen $\theta_A = \frac{\pi}{2} - \frac{\chi}{2}$ bağıntısı da (Şekil 2.12) hesaba katıldığında,

$$b = d \sin \theta_A ,$$

$$b = d \sin \left(\frac{\pi}{2} - \frac{\chi}{2} \right) , \quad (2.45)$$

$$b = d \cos \left(\frac{\chi}{2} \right) ,$$

bağıntıları elde edilir.



Şekil 2.12 : Katı küre modelinde θ_A açısı ile en yakın geçiş mesafesi b ve molekül merkezleri arasındaki mesafe d 'yi gösteren bağlantı üçgeni.

Trigonometrik bağlantılar kullanılarak aşağıdaki bağıntılar,

$$\begin{aligned}
\cos^2(\chi/2) &= (b/d)^2, \\
\frac{1 + \cos \chi}{2} &= (b/d)^2, \\
\cos \chi &= 2 \cdot (b/d)^2 - 1,
\end{aligned} \tag{2.46}$$

elde edilir. Katı küre çarpışma modelinde $(b/d)^2$ değerinin 0 ila 1 arasında düzgün olarak dağılmış rasgele bir sayı (R_f) olduğu varsayılmaktadır (Shen, 2005). Çarpışan moleküllerin çarpışma sonrası hız bileşenlerini hesaplamak için gereken $\cos \chi$, $\sin \chi$ ve ε değerleri için aşağıdaki bağıntılar,

$$\begin{aligned}
\cos \chi &= 2 R_{f1} - 1, \\
\sin \chi &= \sqrt{1 - \cos^2 \chi}, \\
\varepsilon &= 2 \pi R_{f2},
\end{aligned} \tag{2.47}$$

kullanılmaktadır. ε açısı çarpışma düzlemi ile referans bir düzlem arasındaki açıdır. Bu açı katı küre (HS) modelinde 0 ile 2π arasında düzgün dağılmış rasgele bir açı olarak alınır.

Katı küre modelinde çarpma sonrası bağıl hız vektörü için tüm yönler eşit olasılıktadır. Bu nedenle çarpışma sonrası bağıl hız vektörü bileşenleri hesaplanırken çarpışma öncesi bağıl hız vektörünün sadece büyüklüğü hesaba katılmakta, yönü göz önüne alınmamaktadır (Bird, 1994). Bu nedenle $\mathbf{c}_r^*$ vektörünün bileşenleri aşağıda verildiği gibi,

$$\begin{aligned}
c_{r,x}^* &= c_r \cos \chi, \\
c_{r,y}^* &= c_r \sin \chi \cos \varepsilon, \\
c_{r,z}^* &= c_r \sin \chi \sin \varepsilon,
\end{aligned} \tag{2.48}$$

belirlenmektedir. Özel bir örnek olarak eğer çarpışan gaz moleküllerinin kütleleri eşit olarak alınırsa ($m_1 = m_2$), çarpışan moleküllere ait çarpışma sonrası hız bileşenleri ise aşağıdaki gibi,

$$\begin{aligned}
u_{1,2}^* &= 0.5(u_1 + u_2) \mp 0.5 c_{r,x}^*, \\
v_{1,2}^* &= 0.5(v_1 + v_2) \mp 0.5 c_{r,y}^*, \\
w_{1,2}^* &= 0.5(w_1 + w_2) \mp 0.5 c_{r,z}^*,
\end{aligned} \tag{2.49}$$

bulunur. Burada 1 ve 2 çarpışmaya giren moleküllerin numaralarını, u, v, w ise moleküllerin hız bileşenlerini ifade etmektedir.

Denklem (2.44) kullanılarak katı küre modeli için etki kesiti σ , toplam etki kesiti σ_T , viskozite etki kesiti σ_μ ve yayılım etki kesiti σ_D hesaplanabilmektedir:

$$\begin{aligned} |db/d\chi| &= \left(\frac{1}{2}\right) d \sin\left(\frac{\chi}{2}\right), \\ \sigma &= d^2/4, \\ \sigma_T &= \pi d^2, \\ \sigma_\mu &= \frac{2}{3} \sigma_T, \\ \sigma_D &= \sigma_T. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Viskozite ve ısı iletim katsayıları ise Chapman-Enskog teorisinden aşağıda olduğu gibi,

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{(5/8)(\pi m k_B T)}{(m/(4k_B T))^4 \int_0^\infty (c_r)^7 \sigma_\mu \exp(-m c_r^2/(4k_B T)) dc_r}, \\ k &= (15/4)(k_B/m) \mu, \end{aligned} \quad (2.51)$$

hesaplanmaktadır (Bird, 1994). İki farklı molekülden oluşan bir gaz için yayılım (difüzyon) katsayısı ise yine Chapman-Enskog teorisinden aşağıdaki bağıntı,

$$D_{12} = \frac{(3/16)(2\pi k_B T/m_r)^{1/2}}{(m_r/(2k_B T))^3 \int_0^\infty c_r^5 \sigma_D \exp(-m_r c_r^2/(2k_B T)) dc_r}, \quad (2.52)$$

ile verilmektedir (Bird, 1994). Katı küre (HS) modelinde μ viskozite katsayısını hesaplamak için Denklem (2.51)'de σ_μ değeri için Denklem (2.50)'de hesaplanmış

$$\begin{aligned} \sigma_\mu &= \frac{2}{3} \pi d^2 \text{ bağıntısı kullanılırsa,} \\ \mu_{HS} &= (5/16)(R T/\pi)^{1/2}(m/d^2), \end{aligned} \quad (2.53)$$

olarak bulunur. Yukarıdaki denklemden görüleceği üzere ($\mu_{HS} \propto T^{0.5}$), viskozite sıcaklığın karekök üstü ile orantılı olarak değişmektedir. Bu değer örneğin azot gazı için 0.74 olup, katı küre modeli için hesaplanan viskozite-sıcaklık bağıntısı gerçekçi olmamaktadır (Bird, 1994).

2.1.4.4 Değişken katı küre modeli

Katı Küre Modelinde sapma açısının rasgele alınması, toplam etki kesitinin bağıl hızdan bağımsız olması, ve bu modelde gazın viskozitesi ile gazın sıcaklığı arasındaki ilişkinin $\mu \propto T^{0.5}$ olması gerçekçi değildir. Hem Katı Küre modelinin hesaplama kolaylığını muhafaza etmek, hem de fiziksel açıdan daha gerçekçi bir model oluşturmak amacı ile Bird (1994) tarafından değişken katı küre (VHS) modeli geliştirilmiştir. Fazla bir etkisi olmadığı anlaşıldığı için bu modelde katı küre (HS) modelinde olduğu gibi bağıl hız vektörünün sapma açısı yine tüm yönler için eşit olasılıktadır. Farklı olarak moleküllerin çapları moleküller arasındaki bağıl hız vektörünün büyüklüğü ve bir ω parametresi ile orantılı hale getirilmektedir. Değişken katı küre (VHS) modelinde molekül çaplarını hesaplamak için aşağıda verilen bağıntı,

$$d = d_{ref} [\{k_B T_{ref} / (m c_r^2)\}^{\omega-1/2} / \Gamma(5/2 - \omega)]^{1/2}, \quad (2.54)$$

kullanılmaktadır. Her gaza ait d_{ref} ve T_{ref} ve ω değerleri belirlenmiş olup, referans tablolardan her gaz için o gaza özel değerler kullanılmaktadır. Γ burada gamma fonksiyonunu ifade etmektedir. VHS modelinde viskozite katsayısı ise aşağıda yer alan bağıntı,

$$\mu_{VHS} = \frac{15/8 (\pi m k_B)^{1/2} (4 k_B / m)^{\omega-1/2} T^{\omega}}{\Gamma(4 - \nu) \pi d^2 c_r^{2\omega-1}}, \quad (2.55)$$

ile hesaplanmaktadır. VHS modelinde yukarıdaki denklemden görüleceği üzere viskozite ile sıcaklık bağıntısı $\mu_{VHS} \propto T^{\omega}$ olarak ifade edilmektedir.

2.1.4.5 Değişken yumuşak küre modeli

HS ve VHS modellerinde viskozite ve yayılım etki kesit oranları $\sigma_D / \sigma_{\mu} = 1.5$ gibi sabit bir değere sahiptir. Bu oranın yayılımın (difüzyon) önem kazandığı gaz karışımlarında gerçekçi olmadığı anlaşıldığından, Koura ve Matsumoto (1991) değişken yumuşak küre (VSS) adı ile yeni bir model önermişlerdir. Bu yeni modelde molekül çapları yine VHS modelinde olduğu gibi (Denklem (2.54)) bağıl hız vektörünün büyüklüğüne bağlı olmakta, fakat çarpışma sonrası bağıl hız vektörü sapma açısı χ için $b = d \cos(\chi/2)$ bağıntısı yerine daha farklı bir bağıntı,

$$\begin{aligned}
b &= d \cos^\alpha(\chi/2) \quad , \\
\cos(\chi/2) &= (b/d)^{1/\alpha} \quad , \\
\cos(\chi) &= 2((b/d)^2)^{1/\alpha} - 1 \quad ,
\end{aligned}
\tag{2.56}$$

kullanılmaktadır. VSS modelinde hem molekül çapı d , hem de sapma açısı kosinüs üssü α değişkeni, çarpışma bağıl hızına bağlı değerlerdir. χ açısı bağıntısındaki α parametresi nedeni ile VSS modelinde bağıl hız vektörü sapma açısı χ , VHS modeline göre daha küçük olmaktadır. α değişken değeri ($1 \leq \alpha \leq 2$) arasında değişmektedir. Deneysel yöntemlerle hesaplanan viskozite katsayıları veya yayılım katsayılarına uyum gösteren α değerleri farklı gazlar veya gaz karışımları için Tablolarda verilmektedir (Shen, 2005).

VSS modelinde yine VHS modelinde olduğu gibi $(b/d)^2$ değeri 0 ile 1 arasında düzgün dağılmış rasgele bir sayı olarak alınmaktadır. Bu nedenle sapma açısının kosinüs ve sinüs değerleri ve referans düzlemden olan açı değeri (ε) için aşağıdaki bağıntılar,

$$\begin{aligned}
\cos \chi &= 2 (R_{f1})^{1/\alpha} - 1 \quad , \\
\sin \chi &= \sqrt{1 - \cos^2 \chi} \quad , \\
\varepsilon &= 2 \pi R_{f2} \quad ,
\end{aligned}
\tag{2.57}$$

kullanılmaktadır. VSS modelinde çarpışma sonrası bağıl hız vektörü sapma açısı, tüm yönlerde eşit olasılıklı bir dağılım göstermediği için, $\mathbf{c}_r^*$ bağıl hız vektörü bileşenlerinin hesaplanmasında, $\mathbf{c}_r$ bağıl hız vektörü yönünün de göz önüne alınması gerekmektedir:

$$\begin{aligned}
c_{r,x}^* &= \cos \chi c_{r,x} + \sin \chi \sin \varepsilon (c_{r,y}^2 + c_{r,z}^2)^{1/2} \quad , \\
c_{r,y}^* &= \cos \chi c_{r,y} + \sin \chi (c_r c_{r,z} \cos \varepsilon - c_{r,x} c_{r,y} \sin \varepsilon) / (c_{r,y}^2 + c_{r,z}^2)^{1/2} \quad , \\
c_{r,z}^* &= \cos \chi c_{r,z} - \sin \chi (c_r c_{r,y} \cos \varepsilon + c_{r,x} c_{r,z} \sin \varepsilon) / (c_{r,y}^2 + c_{r,z}^2)^{1/2} \quad .
\end{aligned}
\tag{2.58}$$

Çarpışma sonrası bağıl hız vektörü bileşen $c_{r,x}^*$, $c_{r,y}^*$, $c_{r,z}^*$ değerleri, (2.49) denkleminde yerine konarak, çarpışan moleküllerin çarpışma sonrası hız bileşenleri u_1^* , v_1^* , w_1^* , u_2^* , v_2^* , w_2^* hesaplanmaktadır.

VSS modelinde toplam etki kesiti σ_T , viskozite etki kesiti σ_μ ve yayılım etki kesiti σ_D etki kesiti ise aşağıdaki bağıntılarda,

$$\begin{aligned}\sigma_T &= \pi d^2, \\ \sigma_\mu &= S_\mu \left(\frac{2}{3}\right) \sigma_T, \\ \sigma_D &= S_D \sigma_T,\end{aligned}\tag{2.59}$$

verilmektedir (Shen, 2005). Bu denklemlerde yer alan S_μ ve S_D katsayıları, viskozite ve yayılım etki kesitlerinin yumuşaklık katsayıları olarak adlandırılmakta olup, α cinsinden değerleri aşağıda olduğu gibi,

$$\begin{aligned}S_\mu &= \frac{6\alpha}{(\alpha+1)(\alpha+2)}, \\ S_D &= \frac{2}{\alpha+1},\end{aligned}\tag{2.60}$$

verilmektedir. VSS modelinde viskozite katsayısı ve molekül çapı aşağıda verilen bağıntılar,

$$\begin{aligned}\mu_{VSS} &= \frac{1}{S_\mu} \mu_{VHS}, \\ d_{VSS} &= d_{VHS} / \sqrt{S_\mu},\end{aligned}\tag{2.61}$$

ile hesaplanmaktadır (Shen, 2005). VSS modelinde viskozite katsayısı, VHS modelinde olduğu gibi sıcaklığın ω üssü ile orantılı olmaktadır ($\mu_{VSS} \propto T^\omega$).

2.1.4.6 Elastik olmayan molekül çarpışmaları

Elastik olmayan molekül çarpışmalarında, moleküllerin öteleme enerjileri (E_{tr}) ile dönme (E_r) ve titreşim (E_v) enerjilerinden oluşan iç enerjileri (E_i) arasında bir enerji değişimi yaşanabilmektedir. Moleküllerin iç titreşim enerjisi çok yüksek gaz sıcaklıkları ($T > 1.000\text{ K}$) dışında önemini kaybettiği için, $T < 1.000\text{ K}$ sıcaklık koşullarında moleküllerin iç enerjisinin sadece dönme enerjisinden oluştuğu varsayılmaktadır (Bird, 1994). Elastik olmayan ikili molekül çarpışmalarında çarpışma öncesi ve sonrası enerjiler aşağıda yer verilen,

$$\begin{aligned}
E_T &= E_{tr} + E_r \quad , \\
E_T^* &= E_{tr}^* + E_r^* \quad , \\
E_{tr} &= \varepsilon_{tr,1} + \varepsilon_{tr,2} \quad , \\
E_{tr}^* &= \varepsilon_{tr,1}^* + \varepsilon_{tr,2}^* \quad , \\
E_r &= \varepsilon_{r,1} + \varepsilon_{r,2} \quad , \\
E_r^* &= \varepsilon_{r,1}^* + \varepsilon_{r,2}^* \quad ,
\end{aligned} \tag{2.62}$$

bağıntılarda gösterilmektedir. Bu denklemlerde * çarpışma sonrası durumu, ε çarpışmaya iştirak eden moleküllerin bireysel enerjilerini göstermektedir. Larsen ve Borgnakke (1975) tarafından geliştirilen yöntem uyarınca önce ilk adım olarak, moleküllerin çarpışma sonrası öteleme enerjileri toplamı E_{tr}^* , aşağıdaki dağılım fonksiyonundan,

$$\begin{aligned}
\frac{P}{P_{\max}} &= \left\{ \frac{\xi + 1/2 - \omega \left(\frac{E_{tr}}{E_T} \right)}{3/2 - \omega} \right\}^{3/2 - \omega} \left\{ \frac{\xi + 1/2 - \omega \left(1 - \frac{E_{tr}}{E_T} \right)}{\xi - 1} \right\}^{\xi - 1} \quad , \\
E_{tr}^* &= (R_f) E_T \quad ,
\end{aligned} \tag{2.63}$$

kabul-red yöntemi ile örneklenir. Yukarıdaki denklemlerde ξ dönme serbestlik derecesi, ω ise viskozite katsayısı hesabında kullanılan sıcaklığın üstü değişkenidir. R_f ise 0 ile 1 aralığında düzgün dağılmış rasgele bir sayıdır. Hesaplanan E_{tr}^* değeri toplam enerjiden çıkarılarak,

$$E_r^* = E_T - E_{tr}^* \tag{2.64}$$

çarpışma sonrası toplam dönme enerjisi bulunur. Çarpışma sonrası toplam dönme enerjisinin E_r^* çarpışan moleküllere pay edilmesi işlemi, yine aşağıdaki verilen enerji dağılım fonksiyonuna,

$$\begin{aligned}
\frac{P}{P_{\max}} &= 2^{\xi-2} \left(\frac{\varepsilon_{r,1}^*}{E_r^*} \right)^{\xi/2-1} \left(1 - \frac{\varepsilon_{r,1}^*}{E_r^*} \right)^{\xi/2-1} \quad , \\
\varepsilon_{r,1}^* &= R_f E_r^* \quad ,
\end{aligned} \tag{2.65}$$

kabul-red yöntemi uygulanması ile gerçekleştirilir. Yine örneklenen $\varepsilon_{r,1}^*$ değeri toplam dönme enerjisinden çıkartılarak,

$$\varepsilon_{r,2}^* = E_r^* - \varepsilon_{r,1}^* \tag{2.66}$$

ikinci moleküle ait dönme enerjisi hesaplanır. Çarpışma sonrası moleküllerin öteleme bağıl hız vektörünün büyüklüğü ise,

$$c_{tr}^* = \sqrt{\frac{2E_{tr}^*}{m_r}}, \quad (2.66)$$

daha önce hesaplanan E_{tr}^* değerinden ve kinetik enerji bağıntısından hesaplanır. Yukarıdaki denklemde m_r çarpışmaya iştirak eden moleküllerin azaltılmış kütesidir. Moleküllerin çarpışma sonrası hız vektör bileşenleri ise, bu bağıl hız vektöründen esnek çarpışmada olduğu gibi hesaplanır.

2.1.5 Makroskobik değerlerin hesaplanması

DSMC moleküllerinin sayı yoğunluğu, enerji ve momentum gibi mikroskobik bilgilerinden yararlanarak, akışa ait yoğunluk (ρ), akış hız bileşenleri (U, V, W), sıcaklık (T) ve basınç (p) gibi makroskobik değerler hesaplanmaktadır. Bu değerler hücre temelli olduğundan, hücre merkezlerine ilişkilendirilirler. Hesaplama yapılırken daimi akışlarda zaman ortalaması, daimi olmayan akışlarda ise grup ortalaması alınmaktadır.

Bir DSMC hücresinde yoğunluk hesabı yapmak için önce hücrede bulunan temsilci moleküller N_{tm} sayılmalıdır. Daha sonra bu sayı fiziksel-temsilci molekül oranı F_N ile çarpılarak o hücrede bulunan fiziksel molekül sayısı N_h hesaplanır. Bu sayının hücre hacmine (V_h) bölünmesi ile bulunan molekül sayı yoğunluğunun (n), molekül kütlesi (m) ile çarpımından akışın yoğunluğu,

$$\rho = n \cdot m, \quad (2.67)$$

hesaplanabilmektedir. Hücre içinde gaz akış hızı bileşenlerini U, V, W hesaplamak için, hücrede yer alan tüm temsilci moleküllerin hız vektörlerinin ($\mathbf{c}$) bileşenleri (u, v, w), ilk molekülden başlanarak toplanır ve elde edilen sonuç o hücredeki molekül sayısına N_{tm} bölünür:

$$\begin{aligned}
U &= \frac{1}{N_{tm}} \sum_{n=1}^{N_{tm}} u_n \quad , \\
V &= \frac{1}{N_{tm}} \sum_{n=1}^{N_{tm}} v_n \quad , \\
W &= \frac{1}{N_{tm}} \sum_{n=1}^{N_{tm}} w_n \quad .
\end{aligned} \tag{2.68}$$

Hücre öteleme sıcaklığı T_{tr} ise,

$$\frac{3}{2} k_B T_{tr} = \frac{m}{2} \overline{c'^2} \quad , \tag{2.69}$$

yine hücrede yer alan moleküllerin ısı hız vektöründen $\mathbf{c}'$ hesaplanmaktadır. Bir molekülün ısı hız vektörü $\mathbf{c}'$,

$$\mathbf{c}' = \mathbf{c} - \mathbf{c}_0 \quad , \tag{2.70}$$

o molekülün hızından $\mathbf{c}$, gaz akış hızı $\mathbf{c}_0$ çıkarılarak hesaplanır. Gaz akış hızı ise molekül hızlarının ortalaması alınarak $\mathbf{c}_0 = \bar{\mathbf{c}}$ bulunmaktadır. Hücre sıcaklığını hesaplamak için gereken $\overline{c'^2}$ değeri ise,

$$\overline{c'^2} = \overline{c^2} - 2 \bar{\mathbf{c}} \cdot \mathbf{c}_0 + c_0^2 = \overline{c^2} - c_0^2 \quad , \tag{2.71}$$

bağıntısı kullanılarak bulunur. Molekül hız bileşenlerinin karelerinin ortalamaları $(\overline{u^2}, \overline{v^2}, \overline{w^2})$ aşağıda verilen bağıntılar,

$$\begin{aligned}
\overline{u^2} &= \frac{1}{N_{tm}} \sum_{n=1}^{N_{tm}} u_n^2 \quad , \\
\overline{v^2} &= \frac{1}{N_{tm}} \sum_{n=1}^{N_{tm}} v_n^2 \quad , \\
\overline{w^2} &= \frac{1}{N_{tm}} \sum_{n=1}^{N_{tm}} w_n^2 \quad ,
\end{aligned} \tag{2.72}$$

kullanılarak hesaplanır. $\overline{c^2} = \overline{u^2} + \overline{v^2} + \overline{w^2}$ ve $c_0^2 = U^2 + V^2 + W^2$ bağıntıları göz önüne alındığında, T_{tr} öteleme sıcaklık değerini hesaplamak için,

$$T_{tr} = \frac{m}{3 k_B} \left(\overline{c^2} - c_0^2 \right) \quad , \tag{2.73}$$

bağıntısı kullanılır. Gaz molekülleri birden fazla atomdan oluşmakta iseler, moleküller sadece öteleme serbestlik derecesine (ξ_{tr}) değil, aynı zamanda dönme serbestlik derecesine de (ξ_r), sahiptirler. Molekülerin sahip oldukları bu ilave iç enerjiden (ε_r) dolayı her hücre için ayrıca bir iç sıcaklık,

$$T_r = \frac{2}{\xi_r k_B} \overline{\varepsilon_r}, \quad (2.74)$$

hesaplanması da gerekmektedir. DSMC hücrelerinde mevcut moleküllerin ortalama iç enerjileri $\overline{\varepsilon_r}$ ile gösterilmektedir. Eğer yüksek sıcaklıklar için ($T > 1.000 K$) titreşim serbestlik derecesi oluşursa, bu enerjinin de aynı şekilde sıcaklık hesabında göz önüne alınması gerekir.

Isıl dengede olan bir gaz hücresinde enerjinin eş paylaşımı prensibi gereğince $T_{tr} = T_r$ koşulu bulunmaktadır. Eğer gaz ısıl dengede değil ise, hücre için genel sıcaklık T_{ov} tarifi,

$$T_{ov} = \frac{\xi_{tr} T_{tr} + \xi_r T_r}{\xi_{tr} + \xi_r}, \quad (2.75)$$

yapılmaktadır (Bird, 1994). Hücre basıncını hesaplamak için,

$$p = \frac{1}{3} \rho \overline{c'^2}, \quad (2.76)$$

daha önce hesaplanan yoğunluk (ρ) ve ısıl hızların karesinin ortalaması $\overline{c'^2}$ değeri kullanılmaktadır. Gaz karışımlarından oluşan akışlara ait makroskobik değerlerin bulunmasında daha farklı bir yol izlemek gerekmektedir. Bu konu ile ilgili daha ayrıntılı bilgi Bird (1994) tarafından verilmektedir.

2.1.6 Daimi ve daimi olmayan akışlar için ortalamaların alınması

DSMC yönteminde kullanılan temsilci moleküllerin her birisi çok sayıda fiziksel molekülü temsil etmektedir. Bu nedenden dolayı DSMC yöntemi ile hücre temelinde anlık olarak hesaplanan makroskobik gaz akış değerleri istatistiksel bir hata payı içermektedir. Bu istatistiksel hata payı değeri (s),

$$s \propto \frac{1}{\sqrt{N}}, \quad (2.77)$$

hesaplamalarda kullanılan örnek sayısının (N) kare kökü ile ters orantılı olmaktadır. Makroskobik değerlerin hesaplanmasında, örnekleme sayısının arttırılarak istatistiksel hata payını düşürecek yöntemlere ihtiyaç duyulmaktadır. Daimi akışlarda örnekleme sayısını arttırmak için, zamanda ortalama alınmaktadır. Daimi olmayan akışlarda ise, örnekleme sayısı grup ortalaması alınarak arttırılmaktadır.

2.2 DSMC Moleküllerinin Hücre Esaslı Sıraya Dizilmesi

Bu çalışmada yeni bir molekül numaralama yöntemi kullanılmak sureti ile molekül hareket safhasından sonra moleküllerin hücre temelli olarak sıraya dizilme işlemine olan ihtiyaca son verilmesi amaçlanmıştır. Böylece DSMC yönteminde hesaplama zamanından tasarruf sağlamak mümkün olmaktadır. Geleneksel DSMC yönteminde önce akış alanında yer alacak en fazla DSMC molekül sayısı ($N_{\max}$) belirlenmekte, takiben Şekil 2.13’de görüldüğü gibi üzerinde hız, konum ve iç enerji bilgileri taşıyan her bir DSMC molekülü farklı bir sayı ($1 < N < N_{\max}$) ile tarif edilmektedir. DSMC molekülleri akış alanı dışına çıkana kadar aynı sayıyı muhafaza etmektedirler (Bird, 1994). Akış alanı dışına çıkan moleküllere ait sayılar ise, akış alanına akım sınırlarından giren yeni moleküller için kullanılmaktadır.



Şekil 2.13 : Geleneksel DSMC molekül veri yapısı.

Molekül hareket safhası sonunda DSMC moleküllerinin konumlandıkları yeni hücreler belirlenerek, moleküller Şekil 2.14’de olduğu gibi hücre esaslı olarak sıraya dizilirler. Bu sıraya dizme işlemi DSMC molekül sayısı ile orantılı bir hesaplama yükü getirmektedir.

Moleküllerin Hücre Esaslı Sıraya Dizilmesi

3	9	11	55	29	1	14	N	2		12	8	N-1	15	5	13
1			2				3			H-1			H		

Şekil 2.14 : Geleneksel DSMC molekül veri yapısı kullanılarak moleküllerin hücre esaslı olarak sıraya dizilmesi. Molekül sayıları üst sırada, hücre sayıları ise alt sırada gösterilmektedir.

Bu çalışmada kullanılan yeni bir yöntem ile, Şekil 2.15’de olduğu gibi molekül veri yapısında bir değişiklik yapılarak, her molekül içinde bulunduğu hücre bilgisi ve o hücredeki kaçıncı molekül olduğunu içeren bir etiket ile tanımlanmaktadır. Yapısal ağların kullanıldığı bu 2-boyutlu örnekte, molekülleri tanımlamak için kullanılan ilk iki rakam o molekülün içinde bulunduğu hücre bilgisini, üçüncü rakam ise molekülün o hücre içindeki sırasını vermektedir.

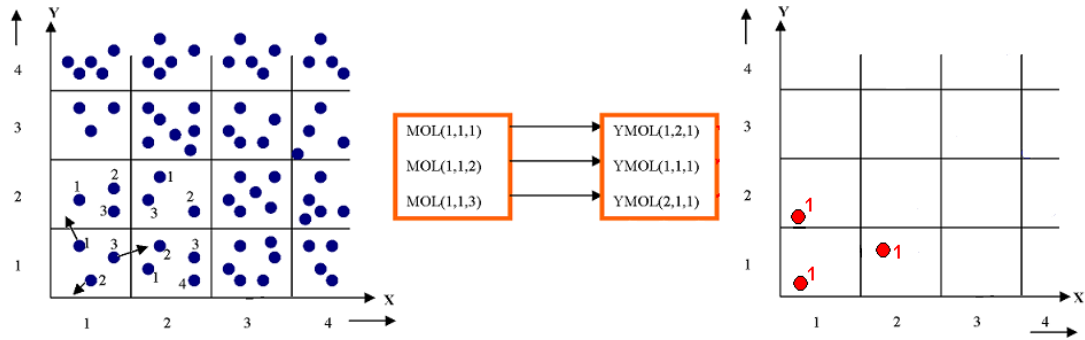
Yeni Molekül Veri Yapısı

1,1,1	1,1,2	1,1,3	1,2,1	1,2,2	M,N,K
Hız	Hız	Hız	Hız	Hız	Hız
Konum	Konum	Konum	Konum	Konum	Konum
İç Enerji	İç Enerji	İç Enerji	İç Enerji	İç Enerji	İç Enerji

Şekil 2.15 : DSMC yönteminde 2-boyutlu hesaplamalar için yeni molekül veri yapısının kullanılması.

Hareket safhası boyunca akış alanında yer alan DSMC molekülleri konum değiştirirler. Şekil 2.16’da görüldüğü gibi, 2-boyutlu yapısal ağ kullanılan bir DSMC çözücüsünde konum değiştiren moleküller sıra ile MOL(M,N,L) veri yapısından safha başında içi boş olan YMOL(M,N,L) veri yapısında taşınırlar. Örneğin (1,1) hücresinde birinci sırada yer alan ve MOL(1,1,1) olarak tanımlanan molekül hareket ederek, (1,2) hücresine ilk molekül olarak yerleştiği için, YMOL(1,2,1) molekülü

olur. $MOL(1,1,2)$ molekülü ise konumu değişmesine karşın, aynı hücre içinde kaldığından $YMOL(1,1,1)$ molekülü olarak tanımlanır. $(2,1)$ hücresine geçen $MOL(1,1,3)$ ise artık yeni veri yapısında $YMOL(2,1,1)$ olarak tanımlı olacaktır. Tüm moleküller $YMOL(M,N,L)$ veri yapısına yerleşince, $YMOL(M,N,L)$ veri yapısı eski $MOL(M,N,L)$ veri yapısı üzerine kopyalanır ve $YMOL(M,N,L)$ veri yapısının içi yeni bir hareket safhasında kullanılmak üzere boşaltılır. Bu işlem tüm benzetim safhası boyunca devam eder.



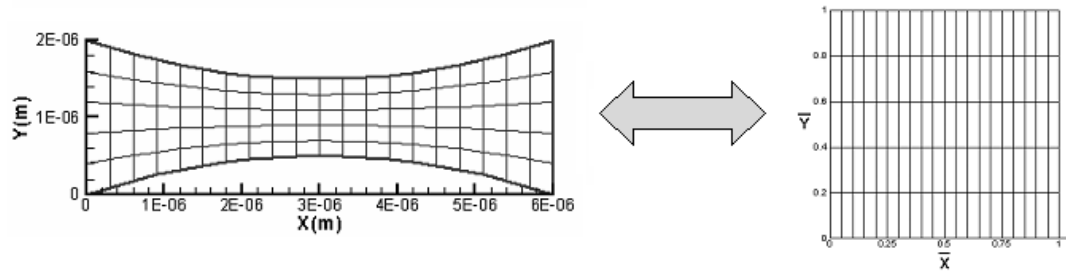
Şekil 2.16 : Akış alanındaki DSMC molekülleri hareket safhası içinde $MOL(M,N,L)$ veri yapısından $YMOL(M,N,L)$ veri yapısına taşınırlar.

Aynı zamanda akım sınırlarından gaz akış alanına yeni giren moleküller içinde $YMOL(M,N,L)$ veri yapısı kullanılır. Bu yöntem sayesinde her hareket safhası sonunda tüm moleküllerin yeniden hücre esaslı olarak sıraya dizilmesi işlemine gerek kalmamakta ve önemli bir hesaplama zamanı tasarrufu sağlanmaktadır (Sengil ve Edis, 2006). Aynı yöntem Tskhakaya ve Schneider (2007) tarafından plazma akışlarını incelemek için kullanılan parçacık-hücre (PIC) çözücüsüne uygulanmış ve hesaplama verimliliğinde yaklaşık %50 artış olduğu görülmüştür.

2.3 Basit Geometrilili Akışlarda Genelleştirilmiş Koordinatların Kullanılması

DSMC yönteminde çözüm süresinin mümkün olduğunca kısaltılması için bazı önlemler alınmasına ihtiyaç duyulur. Bunu gerçekleştirmenin bir yolu gaz akış alanını alt bölgelere bölmek ve her bir alt bölgeyi paralel çalışan farklı bir işlemcide çözerek toplam çözüm süresini kısaltılmaktır. İkinci önlem olarak ta her bir işlemcide çalışan DSMC programının bu çözümlemeyi mümkün olduğunca kısa

sürede tamamlamasını sağlamaktır. Geleneksel DSMC yöntemlerinde hareket eden moleküller hücreden hücreye takip edilmekte ve bir zaman adımı (Δt) sonunda gittikleri hücre saptanmaktadır. Eğer moleküllerin bir zaman adımı sonunda gittiği son hücre herhangi bir ara işleme gerek kalmadan doğrudan bulunabilirse işlem süresi oldukça kısılacaktır. Bunu yapabilmenin bir yolu da Hoffmann ve Chiang (2000) tarafından 2-boyutlu CFD çözümlemeleri için önerilen gaz akış alanı geometrisinin genelleştirilmiş koordinatları kullanarak boyutsuz kare bir geometriye dönüştürülmesi tekniğinin DSMC yönteminde de kullanılmasıdır. Bu aynı zaman da cebirsel yöntemle oluşturulmuş çözüm ağlarının da kare geometri üzerinde (Şekil 2.17) dikdörtgen çözüm ağlarına dönüşümü ile sonuçlanır. Bu çözüm ağı noktaları üzerine kurulu hücrelerin boyutları da eşit olur. Dolayısı ile her iki koordinat sistemi arasındaki dönüşüm ilişkilerini kullanarak bir DSMC molekülünün gittiği son hücre daha kısa sürede hesaplanabilir.



Şekil 2.17 : Koordinat dönüşümü ile bir 2-boyutlu yakınsak-ıraksak mikro-lüle geometrisinin (x, y) , boyutsuz kare geometriye dönüşümü $(\bar{x}, \bar{y})$.

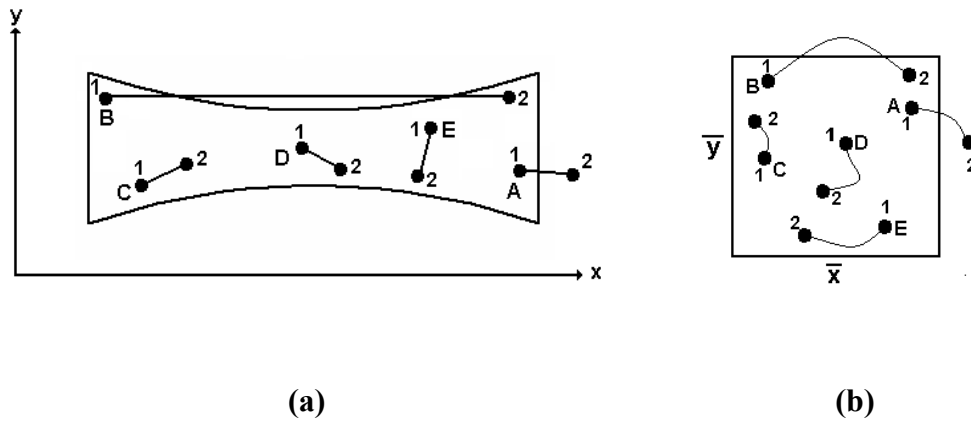
Moleküller fiziksel bölgedeki hareketlerini üzerlerindeki hız bileşenleri (u, v, w) ve başlangıç konumlarının (x_1, y_1, z_1) koordinatlarına uygun olarak gerçekleştirirler. DSMC molekülleri önceden belirlenmiş bir zaman adımı (Δt) boyunca hareketlerini sürdürürler. Zaman adımı sonunda ise geldikleri noktada dururlar. Eğer moleküller 2-boyutlu bir kartezyen koordinat sisteminde hareket ediyorsa ve hareketlerine x_1 ve y_1 başlangıç konumlarından başlıyorsa, x_2, y_2 son konumları aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$\begin{aligned}x_2 &= x_1 + u \cdot \Delta t \\y_2 &= y_1 + v \cdot \Delta t\end{aligned}\tag{2.78}$$

Fiziksel bölgede x_2, y_2 konumuna gelen molekülün yeni koordinat sistemindeki konumu ise koordinat dönüşüm ilişkilerinden hesaplanır.

$$\overline{x}_2 = \overline{x}_2(x_2, y_2) \quad \overline{y}_2 = \overline{y}_2(x_2, y_2)\tag{2.79}$$

Şekil 2.18’de görüleceği üzere, eğer son konum $0 < \overline{x}_2 < 1$ ve $0 < \overline{y}_2 < 1$ değerleri arasında yer almış ise molekülün tamamen akış alanı içinde hareket ettiği, sınırlar dışına çıkmadığı varsayılmaktadır. Eğer DSMC molekülünün son konumunun gaz akış bölgesinde olmadığı belirlenirse, yapılacak işlem bu molekülün hangi sınırdan bölge dışına çıktığını bulmaktır. Eğer molekül bölgeyi gaz giriş veya çıkış bölgesinden terk etmiş ise molekül silinir. Eğer molekül duvar sınırından çıkmış ise seçilen bir model uyarınca duvardan yansıtılır. Yansıma fiziksel bölgede gerçekleştirilir. Tüm moleküllerin hücre bilgilerinden yararlanarak molekül veri yapıları güncellenir ve molekül hareket safhası tamamlanır. Bu yöntemde molekül hareketleri, yansımalar, çarpışmalar tamamen fiziksel bölgede gerçekleştirilirken, molekül hücre bilgileri genelleştirilmiş koordinatlarla üretilen hesaplama bölgesinden faydalanılarak bulunur. Bir molekülün (Şekil 2.18’de B molekülü) ilk ve son konumları hesaplama bölgesi içinde kalmasına karşın yörüngenin bir kısmında akış bölgesi sınırları dışına çıkıp tekrar bölge içine girme olasılığının çok düşük olacağı kabul edilmiş ve bu tip moleküller hesaplama katılmamıştır.



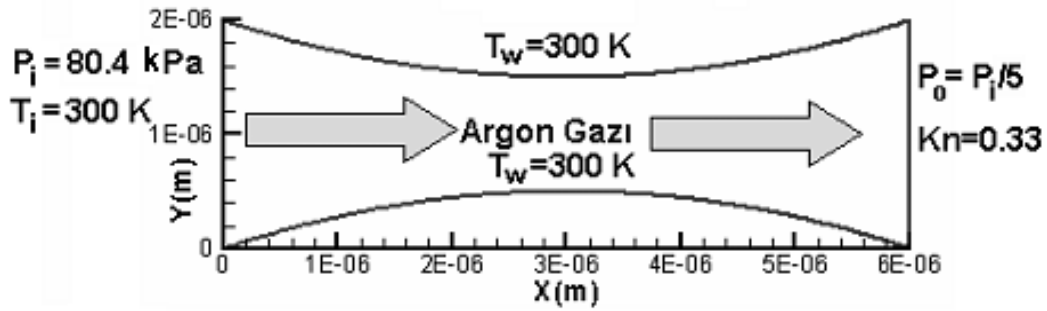
Şekil 2.18 : DSMC molekülleri 1 numaralı başlangıç konumundan, 2 numaralı konuma doğru hareket ederler. (a) Fiziksel bölge. (b) Hesaplama bölgesi.

Son konumu hesaplama bölgesi içinde kaldığı anlaşılan DSMC moleküllerinin hangi hücrede olduğu bilgisinin bulunması gerekir. Bu bilgi aşağıdaki bağıntılardan,

$$\begin{aligned} M &= \bar{x}_2 * CM + 1 \\ N &= \bar{y}_2 * CN + 1 \end{aligned} \quad (2.80)$$

hesaplanır. Burada M ve N hücre bilgisini verirken, CM ve CN ise x ve y koordinatları boyunca hücre sayılarını belirtir.

Literatürden bir test problemi seçilerek (Şekil 2.19), molekül hücre bilgisinin hem hücreden-hücreye takip, hem de genelleştirilmiş koordinat sistemi ile hesaplandığı yöntemler birbirleri ile karşılaştırıldı. Bu test probleminde basınç farkından dolayı mikro-lülede akan argon gazı çözümlenmektedir. Gazın giriş ve çıkış basınçları 80400 Pa ve 5387 Pa olarak belirlidir. Gazın mikro-lüleye giriş sıcaklığı 300 K' dir. Basınç sınır koşullarının uygulandığı problemde eksik sınır koşulları akış bölgesinden tamamlanmaktadır.



Şekil 2.19 : Genelleştirilmiş koordinatların uygulandığı test problemi.

Önce her iki koordinat sistemi arasındaki dönüşüm denklemleri bulunur. Bu dönüşüm bilgilerinden yararlanarak fiziksel bölge ve buna ait yapısal ağ sistemi, kare şeklinde hesaplama bölgesine dönüştürülür. Dönüşüm denklemleri aşağıda verilmiştir:

$$\begin{aligned}
\bar{x} &= (x - x_L)/(x_R - x_L) \quad , \\
\bar{y} &= (y - y_D)/(y_U - y_D) \quad , \\
x_R &= x_R(y) \quad , \\
x_L &= x_L(y) \quad , \\
y_U &= y_U(x) \quad , \\
y_D &= y_D(x) \quad .
\end{aligned}
\tag{2.81}$$

Yukarıdaki denklemlerde x_R, x_L, y_D, y_U sırası ile sol, sağ, alt ve üst kenarların analitik fonksiyonlarını, x, y ise molekülün pozisyonunu ifade etmektedir. Bu kenarlara ait analitik fonksiyonlar ve katsayılar ise aşağıda verilmiştir:

$$\begin{aligned}
x_R &= 6 \times 10^{-6} \quad , \\
x_L &= 0 \quad , \\
y_U &= a_U x^2 + b_U x + c_U \quad , \\
y_D &= a_D x^2 + b_D x + c_D \quad .
\end{aligned}
\tag{2.82}$$

Yukarıdaki bağıntılarda $a_U = (1.8 \times 10^{-5})^{-1}$, $b_U = -(1/3)$, $c_U = 2 \times 10^{-6}$, $a_D = (1.8 \times 10^{-5})^{-1}$, $b_D = (1/3)$, $c_D = 0$ olarak alınmıştır.

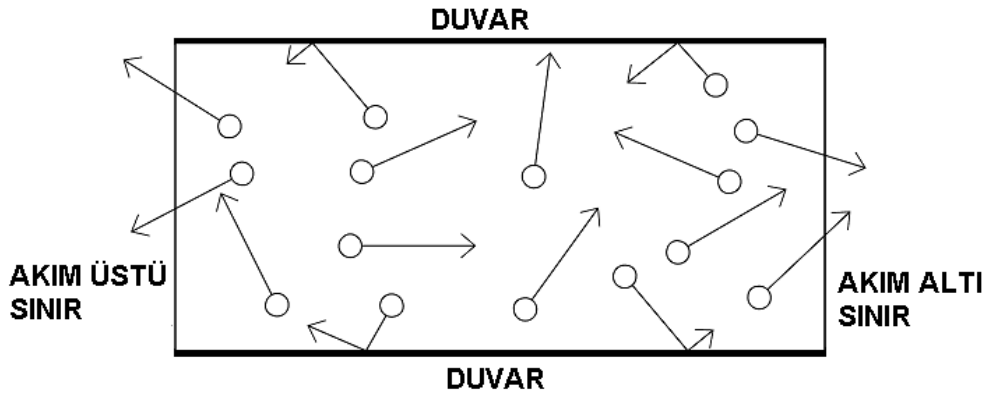
Aynı sayıda DSMC molekülü, hücre sayısı ve zaman adımı kullanılarak gerçekleştirilen çözümlemelerde, farklı çözüm süreleri elde edilmiştir. Çizelge 2.4’de yer alan sonuçlar göstermektedir ki genelleştirilmiş koordinat sistemleri kullanılarak molekül hücre bilgisinin elde edildiği yöntemle, bu bilginin hücre-hücre takip edilerek elde edildiği yöntemle kıyasla yaklaşık yarı yarıya daha kısa sürede sonuç alınabilmektedir.

Çizelge 2.4 : Mikro-lüle gaz akışı için toplam çözüm süresi.

Akış Bilgisi	DSMC Molekül Sayısı	Hücre Sayısı	Adım Sayısı	Toplam Çözüm Süresi (dk)
Hücreden-Hücreye	1434000	12150	5000	1321
Genelleştirilmiş Koordinatlar	1434000	12150	5000	684

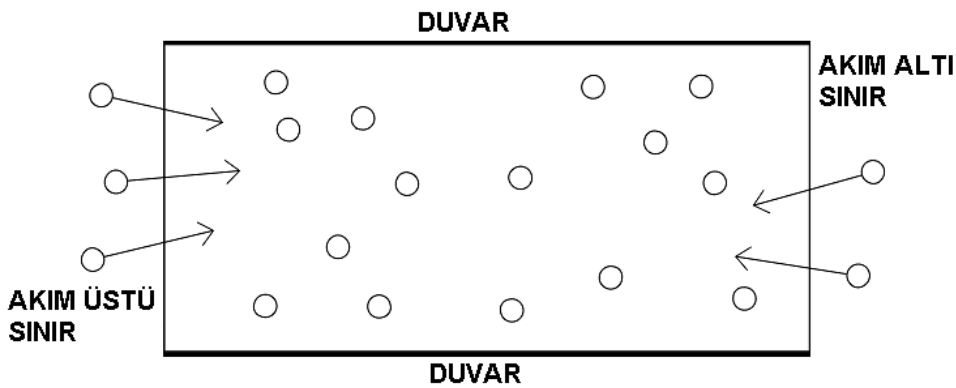
2.4 Molekül Rezervuarları

DSMC yöntemi ile çözümlenen bir gaz akışında, gazın akış alanına girdiği veya çıktığı sınırlarda molekül hareketlerinin benzetiminin fiziksel açıdan gerçekçi olması, akışın doğru hesaplanması için önemlidir. Gaz akış alanı içinde yer alan DSMC moleküllerinin bir kısmı Şekil 2.20’ de olduğu gibi bu sınırlardan dışarı çıktıklarında silinirler.



Şekil 2.20 : Akış alanını akım sınırlarından terk eden moleküller.

Sınır koşullarına bağlı olarak oluşturulan molekül rezervuarlarından ise gaz akış alanına Şekil 2.21’de görüldüğü üzere her zaman adımında (Δt) yeni moleküller ilave edilir. Akış alanına ilave edilen moleküllerin sayıları ve hız bileşenleri sınır koşullarından hesaplanmaktadır.



Şekil 2.21 : Akış alanına akım sınırlarından yeni molekül ilave edilmesi.

Molekül rezervuarlarından gaz akış alanına molekül ilavesi için başlıca 2 farklı yöntem uygulanmaktadır. Bunlar yüzey ve hacim üretim rezervuar yöntemleridir (Lilley ve Macrossan, 2003). Bu iki yöntemden her birinin diğerine kıyasla üstünlükleri olduğu gibi, zayıf yanları da mevcuttur. Hacim üretim rezervuar yönteminin en önemli iki sakıncası, bu yöntemle elde edilen molekül sayısının teorik sayıdan az olması ve hesaplama süratinin yüzey üretim rezervuar yöntemine nazaran daha yavaş olmasıdır. Bu çalışmada hacim üretim rezervuar yönteminde yapılan değişiklik ile hem yöntemin hesaplama hızı arttırılmakta, hem de teoriye eşit sayıda molekül üretimi gerçekleştirilmektedir.

Gaz akış alanına geçen moleküllerin sayıları ve hız bileşenleri daha öncede belirtildiği üzere sınır koşullarına uygun olarak belirlenmektedir. Basınç sınır koşulları söz konusu olduğunda gazın akış alanına girdiği sınırdaki sıcaklık (T_i), basınç (p_i), ve gaz akış hızının sınıra paralel bileşenleri (V_i, W_i) bilinen değerlerdir. Gazın akış alanını terk ettiği bölümde ise sadece basınç (p_o) önceden belirlenmiş değerdir. Diğer değerler (T_o, U_o, V_o, W_o) ve girişte gaz akış hızının sınıra dik bileşeni (U_i) gaz akış alanında sınıra komşu bölge değerlerinden yararlanılarak hesaplanmaktadır (Wu ve Tseng, 2001). Sınır bölgede gaz moleküllerinin sayı yoğunluğu hesaplamak için durum denkleminde,

$$n = \frac{p}{k_B T}, \quad (2.83)$$

faaydalanılmaktadır.

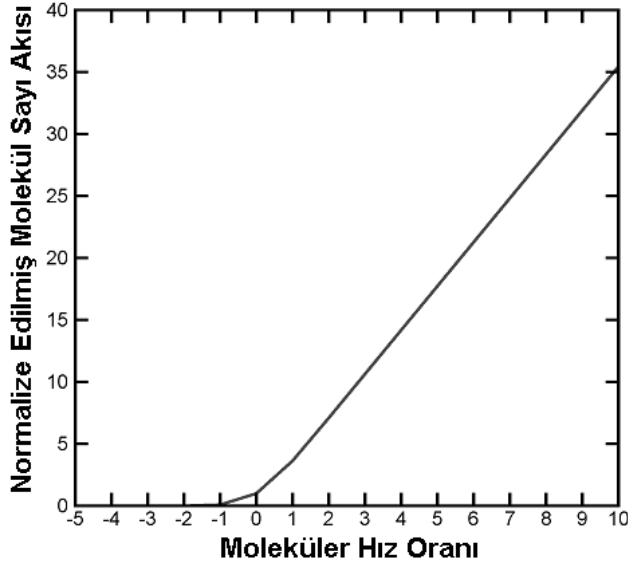
2.4.1 Yüzey üretim rezervuar yöntemi

Bu yöntem aynı zamanda standart yöntem olarak ta adlandırılmaktadır (Lilley ve Macrossan, 2003). Bu yöntemde boyutsuz molekül sayı akışı, teorik olarak aşağıda olduğu gibi,

$$\frac{N^0 \beta}{n} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left[S\sqrt{\pi}(1 + \text{erf } S) + \exp(-S^2) \right], \quad (2.84)$$

verilmektedir (Bird, 1994). Burada $\beta^{-1} = \sqrt{2 R T}$ en olası moleküler hızı ifade etmekte olup, bağıntıda yer alan R gaz sabitini, T ise gaz sıcaklığını ifade etmektedir. S ise moleküler hız oranı ($= \beta U$) olup, U gazın sınır yüzeyine dik hız

bileşenidir. Molekül sayı akısının molekül hız oranına bağlı grafiği Şekil 2.22’de sunulmuştur.

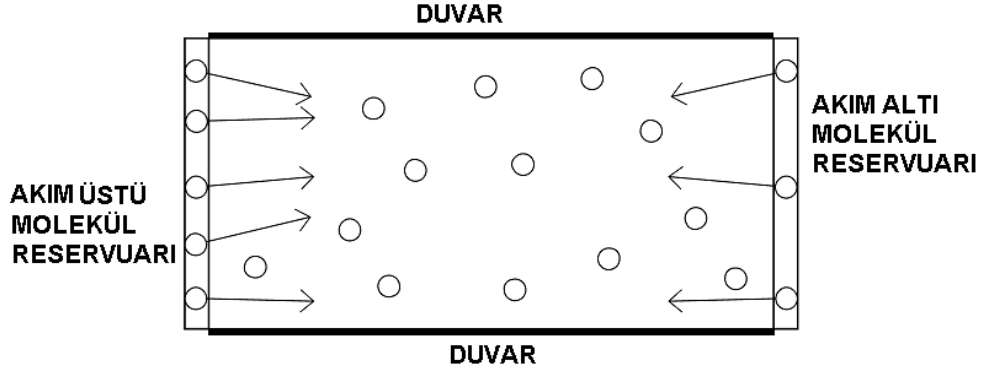


Şekil 2.22 : Molekül sayı akısının $S = 0$ için normalize edilmiş değerinin molekül hız oranına (S) bağlı olarak değişimi.

DSMC yönteminde içeri giren molekül sayısı (N) hesabında,

$$N = N^0 \frac{\Delta t \cdot \Delta S}{F_N}, \quad (2.85)$$

ek olarak, zaman adımı (Δt), fiziksel-temsilci molekül oranı (F_N) ve sınır kesit alanı (ΔS)’da hesaba katılmalıdır. Şekil 2.23’de görüldüğü gibi bu yöntemin yüzey üretim rezervuar yöntemi olarak adlandırılmasının nedeni, moleküllerin sanal bir yüzeyden gaz akış alanına doğru fırlatılmasıdır.



Şekil 2.23 : Moleküllerin sınır rezervuarlarından akış alanına eklenmesi.

Moleküllerin hız bileşenleri (u, v, w) hız dağılım fonksiyonundan örneklenmektedir. Daha önce görüldüğü gibi molekül hız bileşenleri iki ana parçadan oluşmaktadır. Bunlardan ilki ortam sıcaklığından dolayı molekülün kazandığı ısı hızdan (u', v', w') , diğeri ise gaz akış hızından (U, V, W) dolayı oluşan ilave hızdan kaynaklanmaktadır. Molekül hız bileşenleri bu yeni tanım gereği aşağıda olduğu gibi gösterilir:

$$\mathbf{c} = \mathbf{c}' + \mathbf{c}_0. \quad (2.86)$$

DSMC yönteminde gaz akış hızları,

$$\begin{aligned} U &= \bar{u} \quad , \\ V &= \bar{v} \quad , \\ W &= \bar{w} \quad , \end{aligned} \quad (2.87)$$

moleküllerin anlık hızlarının bir ortalamasıdır. Özel bir durum olarak eğer gaz hareketsiz ise $u = u'$, $v = v'$ ve $w = w'$ olur. Sınıra dik hız bileşeni için boyutsuz hız dağılım fonksiyonu aşağıda olduğu gibi,

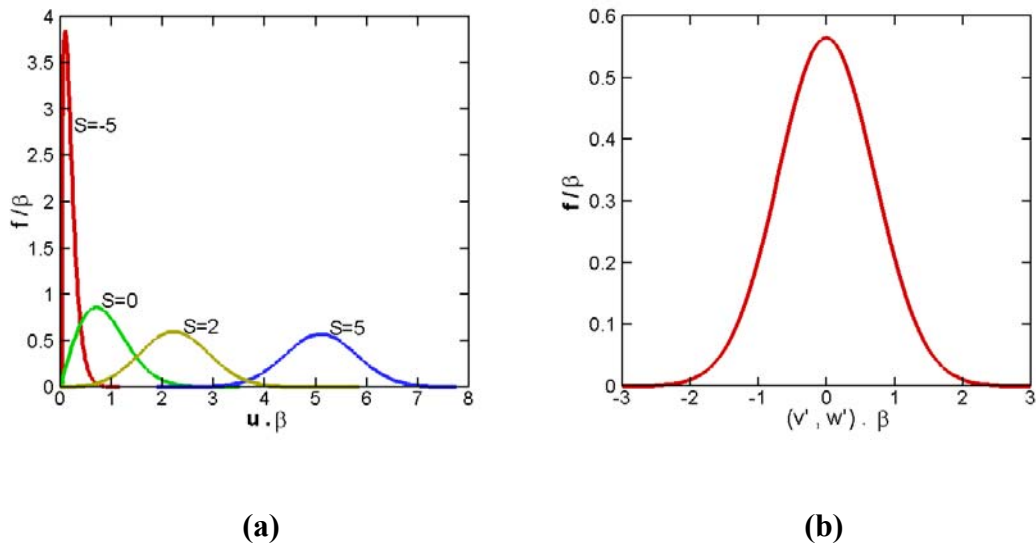
$$\frac{f_u}{\beta} = \alpha u \exp(-\beta^2 u'^2), \quad (2.88)$$

verilmektedir (Bird, 1994). Bu bağıntıda $\alpha = \frac{2\beta}{S\sqrt{\pi}(1 + \operatorname{erf} S) + \exp(-S^2)}$ olarak

belirlenmiştir. Takiben sınıra paralel hız bileşenlerinin boyutsuz hız dağılım fonksiyonları ise,

$$\begin{aligned}\frac{f_v}{\beta} &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-\beta^2 v'^2) , \\ \frac{f_w}{\beta} &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-\beta^2 w'^2) ,\end{aligned}\tag{2.89}$$

olarak verilmiştir (Bird, 1994). Boyutsuz hız dağılım fonksiyonlarının grafikleri Şekil 2.24'de sunulmuştur.



Şekil 2.24 : Hız dağılım fonksiyonları. (a) Farklı S değerleri için sınıra dik hız bileşeni. (b) $V = W = 0$ için sınıra paralel hız bileşenleri.

Isıl denge söz konusu olduğunda, moleküllerin sınıra paralel hız bileşenlerini hesaplamak için aşağıda verilen bağıntılar,

$$\begin{aligned}v' \beta &= \sqrt{-\ln(R_{f1})} \sin(2 \pi R_{f2}) , \\ w' \beta &= \sqrt{-\ln(R_{f1})} \cos(2 \pi R_{f2}) ,\end{aligned}\tag{2.90}$$

kullanılır. Bu denklemler Maxwell dağılımından elde edilmiştir (Bird, 1994). Burada R_{f1} ve R_{f2} , 0-1 arasında düzgün dağılmış rasgele bir sayılardır. Molekül hız bileşenlerini bulmak için gaz akış hızı bileşenlerinin Denklem (2.86)'de olduğu gibi bu ısı hız bileşenlerine ilave edilmesi gerekmektedir. Moleküllerin sınıra dik hız bileşenlerini hesaplamak daha farklı bir yaklaşım gerektirmektedir. Gaz akış hızının sınıra dik bileşeni $U = 0$ değil ise, yarım Maxwell dağılımından örneklenemez.

Bunun yerine ayrıntıları Bölüm 3'te verilen kabul-red yöntemine başvurmak gerekmektedir. Bu yöntemde kısaca hız dağılım fonksiyonu (f_u) önce azami değerine ($f_{\max}$) bölünerek, 0-1 arasında bir değer verecek şekilde yeni bir fonksiyona dönüştürülür:

$$f_n = \frac{f_u}{f_{\max}}. \quad (2.91)$$

Geleneksel kabul-red yönteminde hız dağılım fonksiyonunu örneklemek için sınırlı bir hız aralığında eş olasılıklı hızlar içeren kutu tipi zarflar kullanılmaktadır. Önce bu hız aralığından,

$$u_t = u_{\min} + (u_{\max} - u_{\min}) R_f, \quad (2.92)$$

bir test hızı (u_t) değeri seçilir. Bu değer (2.91) bağıntısında yerine konarak f_n değeri bulunur. 0-1 arasında olan bu değer, yine 0-1 arasında düzgün dağılmış rasgele bir sayı (R_f) ile karşılaştırılır:

$$f_n(u_t) > R_f. \quad (2.93)$$

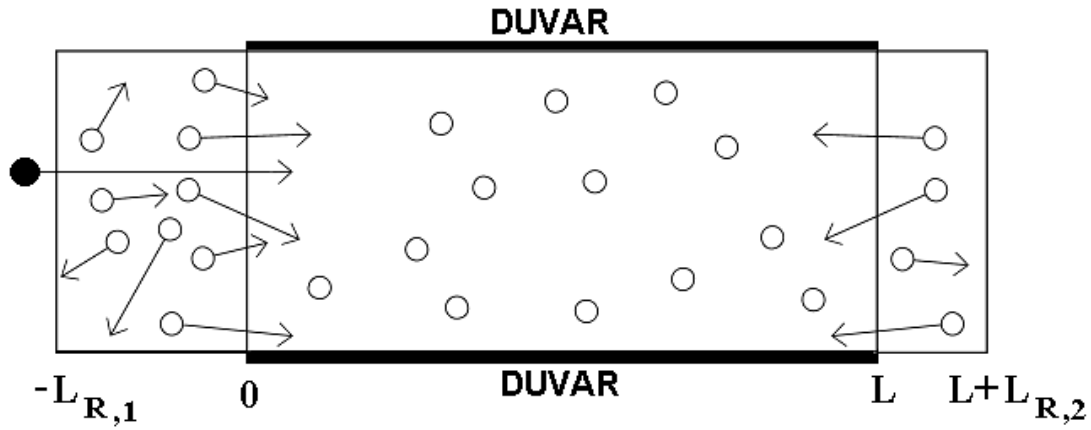
Eğer $f_n > R_f$ ise bu hız değeri kabul edilir. Aksi durumda bu hız değeri red edilir ve döngü yeni baştan yeni bir test hızı (u_t) ile tekrarlanır. İstenen sayıda moleküle hız değeri atanana kadar bu işleme devam edilir. Geleneksel kabul-red yönteminde alt ve üst hız sınırları belirlenirken dikkatli olunmalıdır. Eğer alt ve üst hız sınırları çok geniş bir aralığı kapsayacak şekilde belirlenirse, seçilen hız değerinin red olunma olasılığı yüksek olacak ve istenen sayıda hız değeri bulmak için çok fazla deneme yapmak gerekecektir. Aksine hız seçme aralığı çok daraltırsa, bu sefer de kabul edilen hızlar yüksek/alçak hız bileşenlerinin süzgeçlenmesi sebebiyle hız dağılım fonksiyonunu tam olarak örneklemeyiz. Geleneksel kabul-red yönteminde test sınır değerlerinin, kabul edilebilir bir hesaplama verimliliği ve örnekleme doğruluğu açısından $u_{\min} = (S - 3) \beta^{-1}$ ve $u_{\max} = (S + 3) \beta^{-1}$ arasında olması önerilmektedir (Lilley ve Macrossan, 2003).

Son zamanlarda kabul-red yöntemi için tüm hız aralıklarını kapsayan yeni tipte zarflar kullanan teknikler geliştirilmiştir. Bu yeni tip zarflarda test hızlarının seçilme olasılıkları eşit olmamakta, kabul olasılığı daha yüksek olan hızların seçilme olasılığı da yüksek tutulmaktadır. Bu yeni teknikler sayesinde hem kabul-red yönteminin

hesaplama hızında artışlar sağlandığı, hem de mümkün olan tüm hız değerlerinin seçimine olanak tanındığı belirtilmektedir (Garcia ve Wolfgang, 2006).

2.4.2 Hacim üretim rezervuar yöntemi

Bu yöntem alternatif yöntem olarak ta adlandırılmakta olup, Şekil 2.25’de olduğu gibi gaz akış alanının giriş ve çıkış bölümlerinde belli bir hacmi olan molekül rezervuarları oluşturulmaktadır (Lilley ve Macrossan, 2003; Garcia ve diğ, 1999).



Şekil 2.25 : Hacim üretim rezervuar yönteminde moleküllerin rezervuarlardan gaz akış alanına geçmesi.

Rezervuarlara yerleştirilen molekül sayısı, sınır koşulları kullanılarak aşağıda yer alan bağıntı,

$$N = \frac{p}{k_B T} V_R, \quad (2.94)$$

ile hesaplanır. Bu denklemde p gaz basıncı, k_B Boltzmann sabiti, T gaz sıcaklığı, V_R ise rezervuar hacmidir. Her moleküle (2.86) bağıntısında olduğu gibi ısı hız ve gaz akış hızının toplamından oluşan bir hız atanır. Isıl hız bileşenleri ısıl denge kabulü ile,

$$\begin{aligned} u' \beta &= \sqrt{-\ln(R_f)} \sin(2 \pi R_f) , \\ v' \beta &= \sqrt{-\ln(R_f)} \sin(2 \pi R_f) , \\ w' \beta &= \sqrt{-\ln(R_f)} \sin(2 \pi R_f) , \end{aligned} \quad (2.95)$$

denklemlerinden elde edilmektedir. Moleküllerin rezervuar içindeki pozisyonları ise rasgele seçilir. DSMC yönteminin hareket safhasında rezervuarda bulunan moleküller, bulundukları konumlardan ($\mathbf{x}_1$) başlayarak,

$$\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1 + \mathbf{c}_1 \cdot \Delta t, \quad (2.96)$$

sahip olduğu hız ($\mathbf{c}_1$) ve DSMC zaman adımı (Δt) süresi ile orantılı bir öteleme hareketi yaparlar. Δt zaman adımı sonunda bu moleküllerin sınırı geçip gaz akış alanına geçip geçmedikleri kontrol edilir. Sınır geçen moleküller diğer gaz akış alanı içindeki moleküllere ilave edilirler. Sınırı geçmeyen tüm rezervuar molekülleri silinir. Her yeni hareket safhasının başlangıcında rezervuarlara yeni moleküller yerleştirilir. Bu işlem tüm benzetim boyunca devam eder.

Hacim üretim yönteminde rezervuar boyu önemli bir değişken olup, işlem yükü açısından rezervuar boyunun sonlu alınması gerekmektedir. Rezervuar boyunun gereğinden uzun alınması rezervuara kabul edilecek molekül sayısının ve hesaplama yükünün artmasına neden olurken, gereğinden kısa bir rezervuar boyu akış alanına kabul edilen yüksek hızlı molekül sayısının gerçek değerden az olmasına neden olmaktadır. Şekil 2.25’de görüleceği üzere rezervuarın sol tarafında yer alan ve siyah renk ile gösterilen yüksek hızlı bir molekül gaz akış alanına girebilecekken, rezervuar boyu kısıtlaması nedeniyle içeri kabul edilememektedir. Seçilecek rezervuar boyu hem akış alanına kabul edilecek molekül sayısını kabul edilebilecek bir doğrulukta vermeli, hem de yüksek bir hesaplama verimliliği sunmalıdır. Bu gereksinimleri sağlayacak bir rezervuar boyu Lilley ve Macrossan, (2003) tarafından $L_R = (U + 3 \beta^{-1}) \Delta t$ olarak önerilmiştir.

Aynı sınır koşulları kullanılsa bile hacim yöntemi ile elde edilen molekül sayısı her zaman adımında farklı olmakta ve akış bölgesine ilave edilecek molekül sayısının zamanda dağılımı Poisson dağılımına benzemektedir. Bu durum fiziksel olarak, aynı sınır koşulları için her zaman adımında sabit bir molekül sayısı veren yüzey yöntemine kıyasla daha gerçekçidir.

2.4.3 Rezervuar yöntemlerinin karşılaştırılması

Eğer ilk karşılaştırmayı hesaplama verimliliği açısından yapacak olursak, kutu tipi zarflar kullanıldığında yüzey yöntemi, hacim yöntemine kıyasla akış altı sınır bölgesinde $S < 2.5$ aralığında ve akış üstü sınır bölgesinde daha verimlidir (Lilley ve

Macrossan, 2003). Son zamanlarda geliştirilen yeni tip zarflar ile yüzey yöntemi, mevcut durumuna kıyasla birkaç misli daha verimli hale gelmiştir (Garcia ve Wolfgang, 2006).

İkinci olarak moleküllere atanan hızlar açısından bir karşılaştırma yapıldığında, kutu tipi zarflar kullanıldığında yüzey yönteminde bir kısıtlamaya gidildiğini, ama hacim yönteminde böyle bir kısıtlama olmadığını görmekteyiz. Her ne kadar kabul olasılıkları % 0.01'den daha düşük olmakla birlikte, geleneksel yüzey üretim yönteminde yüksek ve alçak molekül hızları süzgeçlenmektedir. Yüzey yönteminde yeni tip zarf kullanılarak bu kısıtlamanın önüne geçilebilmektedir (Garcia ve Wolfgang, 2006).

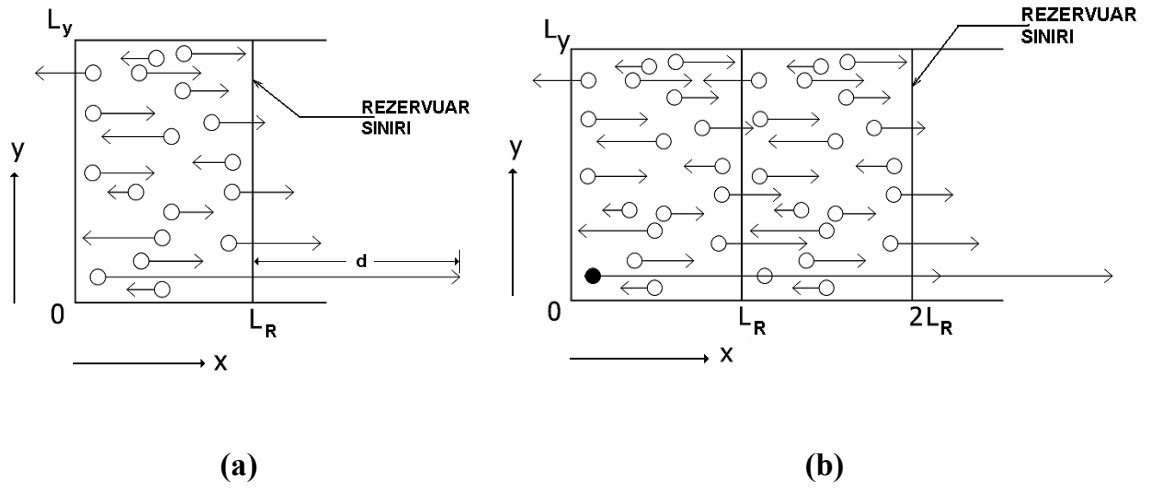
Bir zaman dilimi içinde üretilen ortalama molekül sayısı açısından duruma baktığımızda ise, hacim yönteminde üretilen molekül sayısının zaman ortalamasının olması gerekenden daha az olduğu hesaplanmıştır (Lilley ve Macrossan, 2003). Bunun fiziksel nedeni rezervuar hacminin sınırlı tutulması nedeniyle bazı yüksek hızlı moleküllerin hesaba katılamamasıdır. İçeri giren molekül sayısını düzeltmek için önerilen 2 farklı yöntem detayları ile Lilley ve Macrossan (2003)'te sunulmaktadır. İncelendiğinde, önerilen bu yöntemlerin sadece içeri giren molekül sayısında düzeltme sağladığı, yüksek hızlı molekül açığına bir çözüm getiremediği anlaşılmaktadır.

Son olarak her adımda üretilen molekül sayısına baktığımızda, bu sayı teorik bir bağıntı kullanan yüzey yönteminde sınır koşulları değişmemek şartı ile sabittir. Halbuki hacim yönteminde sınır koşulları sabit kalsa bile her zaman adımında farklı sayıda molekül sayısı elde edilebilmektedir. Bu fiziksel olarak daha gerçekçidir. Her zaman adımında akış alanına aynı sayıda molekül ilave edilmesinin gaz akış hızında ısı dengede olmayan gaz akışlarına benzer etkileri olduğu belirtilmektedir (Tysanner ve Garcia, 2005).

2.4.4 Düzeltilmiş hacim üretim rezervuar yöntemi

Bu çalışmada hacim üretim rezervuar yönteminde bazı değişiklikler yapılarak yüksek hızlı molekül sayısı açığının kapatılması yolu ile doğru ortalama molekül sayısının elde edilmesi ve ilaveten önerilen rezervuar boyundan daha kısa rezervuar boyları kullanarak hesaplama verimliliğinin artırılması amaçlanmıştır. Şekil 2.26'da görüleceği üzere hacim yönteminde rezervuar uzunluğu (L_R) önemli bir değişkendir.

Sınırı geçerek gaz akış alanına katılan molekül sayısı bu değişkene bağlıdır. Eğer Şekil 2.26'da olduğu gibi rezervuar uzunluğu $L = L_R$ den $L = 2 L_R$ 'ye çıkarılırsa ve ikinci bölgeye de birinci bölgede bulunan aynı moleküller ilave edilirse, ilave olarak siyah renk ile gösterilen çok hızlı ilave bir molekülün de gaz akış alanına geçebileceği görülmektedir.



Şekil 2.26 : Hacim üretim rezervuar yönteminde rezervuar uzunluğunun çok hızlı molekül sayısına etkisi. (a) $L = L_R$. (b) $L = 2 L_R$ için içeriye bir fazla molekül girer.

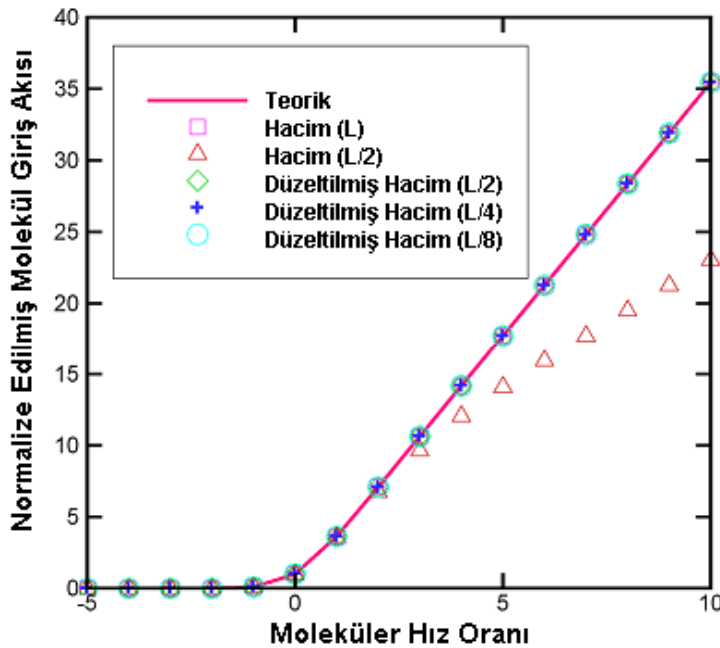
Doğru molekül sayısına erişebilmek için rezervuarın periyodik olarak sonsuza kadar tekrarlanması gerekmekte olup, hesaplama verimi açısından buna olanak bulunmamaktadır. Burada bizim önerimiz aynı rezervuarı periyodik olarak sonsuza kadar uzatmak yerine tek bir rezervuar kullanmak, fakat moleküllerin akış bölgesi içinde rezervuar sınırından itibaren kat ettikleri uzaklığı (d), rezervuar boyu (L_R) ile karşılaştırarak, içeriye aşağıda verilen bağıntıya,

$$N = \text{int} \left(\frac{d}{L_R} \right) + 1 , \quad (2.97)$$

uygun sayıda molekül yerleştirmektir. Yukarıdaki bağıntıda yer alan int fonksiyonu parantez içinde yer alan işlem sonucundan daha küçük veya ona eşit bir tam sayıyı hesaplamaktadır. Eğer rezervuar sınırından itibaren ölçülen uzaklık d , rezervuar uzunluğundan L_R daha fazla ise, içeriye uzaklık-rezervuar boyu oranına bağlı olarak

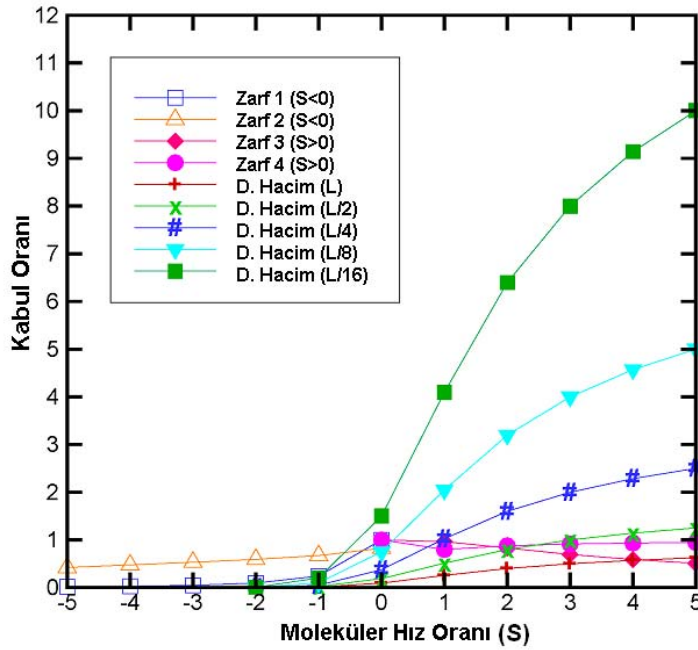
birden daha fazla sayıda molekül yerleştirilmektedir. Her zaman adımında rezervuar içindeki tüm moleküllerin konum ve hız olarak yenilendiği göz önüne alındığında, bu işlem uygulamada rezervuar uzunluğunun etkili bir yöntemle sonsuza kadar uzatılması ile aynı anlama gelmektedir.

Bu yeni yöntemle gerçekleştirilen benzetimlerin sonuçları aşağıda sunulmuştur. Yeni geliştirilen yöntem ile akış alanına kabul edilen ortalama molekül sayısı akısının, moleküler hız oranı (S) ile değişimi Şekil 2.27’de gösterilmektedir. Mevcut hacim yönteminde $L_R = (U + 3 \beta^{-1}) \Delta t$ uzunluğu ile teorik sonuca yakın bir sonuç elde edilirken, rezervuar boyutunun (L) yarıya düşürülmesi durumunda ($L = L_R / 2$) molekül sayısı akısı yaklaşık $S > 2$ değerinden itibaren teorik değerden sapma göstermektedir. Yeni geliştirilen yöntemde ise, rezervuar uzunluğunun $L_R / 2$, $L_R / 4$, $L_R / 8$ ve $L_R / 16$ değerleri için bile, kabul edilen molekül sayısı akısı teorik değeri takip etmektedir. Her farklı rezervuar uzunluğu için 10^4 adet örnekleme alınmıştır.



Şekil 2.27 : Hacim üretim rezervuar yönteminde ve düzeltilmiş hacim üretim rezervuar yönteminde gaz akış alanına kabul edilen ortalama molekül sayısının moleküler hız oranı (S) ve rezervuar boyu ile değişimi. Molekül akısı değerleri $S = 0$ için normalize edilmiştir.

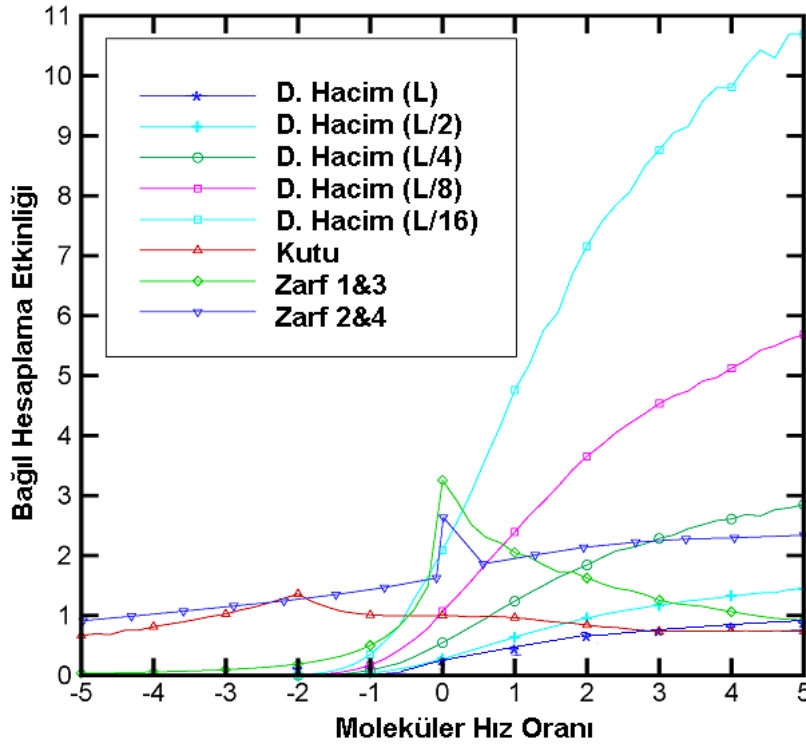
İkinci olarak, rezervuarlar için üretilen her bir molekül için gaz akış alanına kaç adet molekül kabul edildiğini (kabul oranı) gösteren uygulama yapılmıştır. Bu uygulamada önerdiğimiz yöntem ile Garcia ve Wolfgang (2006) tarafından yüzey yöntemi için geliştirilen ve Şekil 2.28’de (Zarf 1, Zarf 2, Zarf 3, Zarf 4) olarak gösterilen yeni tip zarf teknikleri karşılaştırılmıştır. Şekil 2.28’den de görüleceği üzere değişiklik yaptığımız hacim üretim rezervuar yöntemi, rezervuar boyu kısaldıkça daha yüksek kabul oranlarına erişmektedir. Yüzey üretim rezervuar yöntemi en fazla teorik sınırı olan 1 değerine ulaşırken, hacim yöntemi önerdiğimiz değişiklik ile 1’den daha yüksek değerlere ulaşabilmektedir. $L = L_R / 16$ değeri için, önerdiğimiz düzeltilmiş hacim rezervuar yöntemi $-0.5 < S < 5$ aralığında yüzey yöntemine oranla daha yüksek bir molekül kabul oranına sahiptir.



Şekil 2.28 : Molekül kabul oranlarının molekül hız oranı, kullanılan zarf teknikleri ve rezervuar boyu ile değişimi.

Üçüncü olarak düzeltilmiş hacim rezervuar üretim yöntemi ile yeni zarf teknikleri kullanan yüzey rezervuar üretim yöntemi, bağlı hesaplama etkinliği bakımından karşılaştırıldı. Bağlı hesaplama etkinliği Lilley ve Macrossan (2003) tarafından gaz

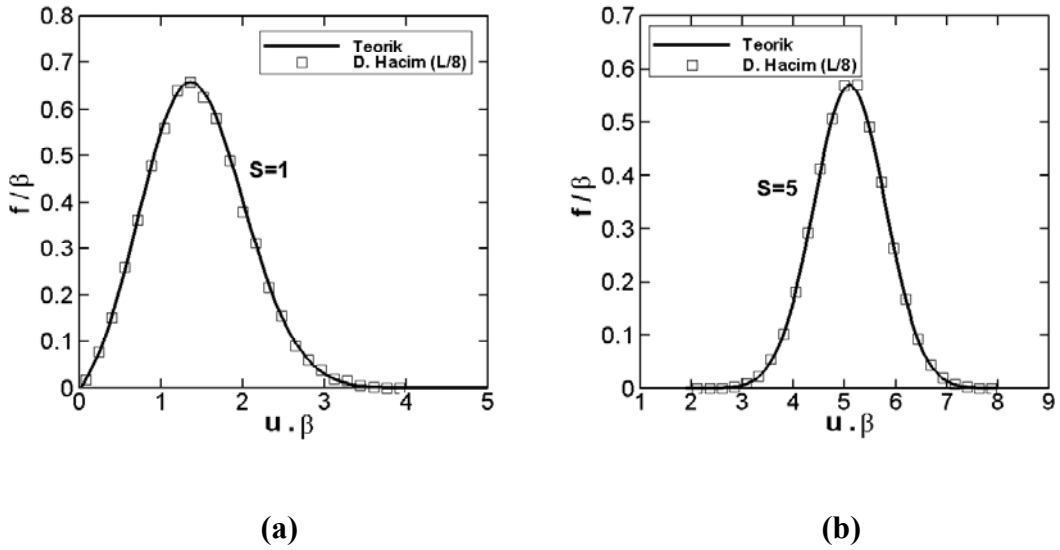
akış alanına kabul edilen molekül başına harcanan CPU zamanının tersi olarak tanımlanmaktadır. Bu değerler daha rahat bir karşılaştırma yapmak amacı ile daha sonra kutu tipi zarf tekniğinde $S = 1$ değeri için hesaplanan değer ile normalize edilmektedirler. Bağlı hesaplama etkinlik değerleri farklı yöntemler için dokümanlarında verilen işlemleyiciler kullanılarak hesaplanmıştır. Sadece Zarf 2 ve Zarf 4 için doğrudan Garcia ve Wolfgang (2006)'dan okunmuştur. Hesaplamalarda 0-1 arasında düzgün dağılmış rasgele sayılar Mersenne-Twister üreticinin Fortran için yazılmış sürümünden elde edilmiştir (Matsumoto ve Nishimura, 1998). Normal dağılmış rasgele sayılar ise Box-Muller yöntemi kullanılarak hesaplanmıştır (Box ve Muller, 1958). Hesaplar Fortran 90 ile hazırlanmış yazılımın, Intel Fortran 8.1 derleyicisi kullanılarak Intel Centrino 1.4 GHz. işlemcide koşulması ile yapılmıştır. Derleme esnasında /O1 optimizasyonu kullanılmıştır. Şekil 2.29'da belirtildiği gibi, $L = L_R / 16$ rezervuar uzunluğu için düzeltilmiş hacim üretim rezervuar yöntemi $S > 0.3$ 'den itibaren en verimli hesaplama yöntemi olmaktadır.



Şekil 2.29 : Düzeltilmiş hacim ve yüzey üretim rezervuar yöntemlerine ait bağlı hesaplama etkinlikleri. Değerler $S = 1$ için kutu zarf kullanan yüzey üretim yöntemi değeri ile normalize edilmiştir.

Son olarak $L = L_R / 16$ rezervuar uzunluđu için düzeltilmiş hacim üretim rezervuar yöntemi ile elde edilen sınıra dik hız bileşen (u) örneklerinin, teorik değler ile karşılaştırılması yapılmaktadır. Değerler Şekil 2.30’de sunulmuş olup, düzeltilmiş hacim üretim rezervuar yöntemi ile elde edilen değler ile teorik değler birbirleri ile uyumludur. Bu çalışmada $S = 1$ için 5×10^5 adet örnekleme, $S = 5$ için ise 7×10^5 adet örnekleme kullanılmıştır.

Sonuç olarak hacim üretim rezervuar yöntemine yapılan değışiklik ile, geleneksel yöntemde yüksek hızlı molekül sayı azlığı nedeni ile oluşan molekül üretim problemi giderilmiştir. İlaveten geliştirilen hacim yönteminin hesaplama etkinliği, $S > 0.3$ ’ten itibaren çeşitli zarf teknikleri ile kullanılan yüzey üretim rezervuar yöntemlerinden daha yüksek olmaktadır.

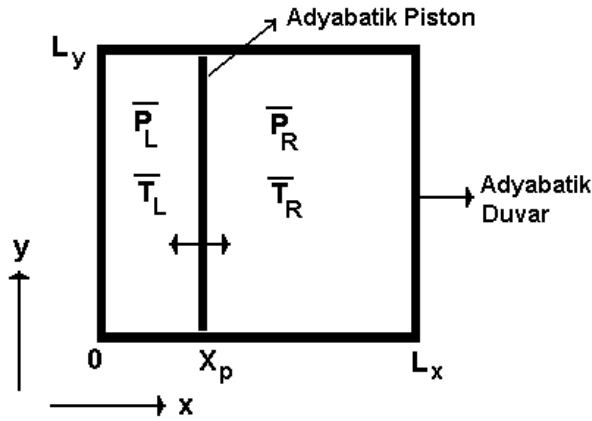


Şekil 2.30 : Düzeltilmiş hacim üretim rezervuar yöntemi ile $L = L_R / 16$ rezervuar uzunluđu için elde edilen u hız bileşen değlerinin teorik değler ile karşılaştırılması. (a) $S = 1$ için. (b) $S = 5$ için.

2.5 Hareketli ve Değişen Çözüm Ağları Uygulaması

Geliştirilen DSMC yöntemi temelli çözücü ile sadece daimi akışların değil aynı zamanda daimi olmayan mikro gaz akışlarının da incelenebilmesine olanak sağlanmıştır. Bu amaçla Callen (1985) tarafından ortaya atılan ve adyabatik piston

problemi olarak adlandırılan bir problem çalışma konusu olarak seçilmiştir. Yapısı Şekil 2.31’de verilen adyabatik piston probleminde dış ortam ile ısı ve madde alışverişi olmayan kapalı bir hacim ve bu hacmin içinde de bir gaz kütlesi mevcuttur. Gaz kütlesi içine yerleştirilen ve ısı iletmeyen sürtünmesiz bir piston, her iki tarafında yer alan gaz kütlesinin başlangıçtaki farklı basınçları nedeni ile, belirli bir nokta etrafında sönümlenen bir salınım hareketi yapmaktadır. Bu problem temel termodinamik bağıntılar kullanılarak çözülememektedir. Çözüm için hidrodinamik veya moleküler modellerin kullanılması gerekmektedir.

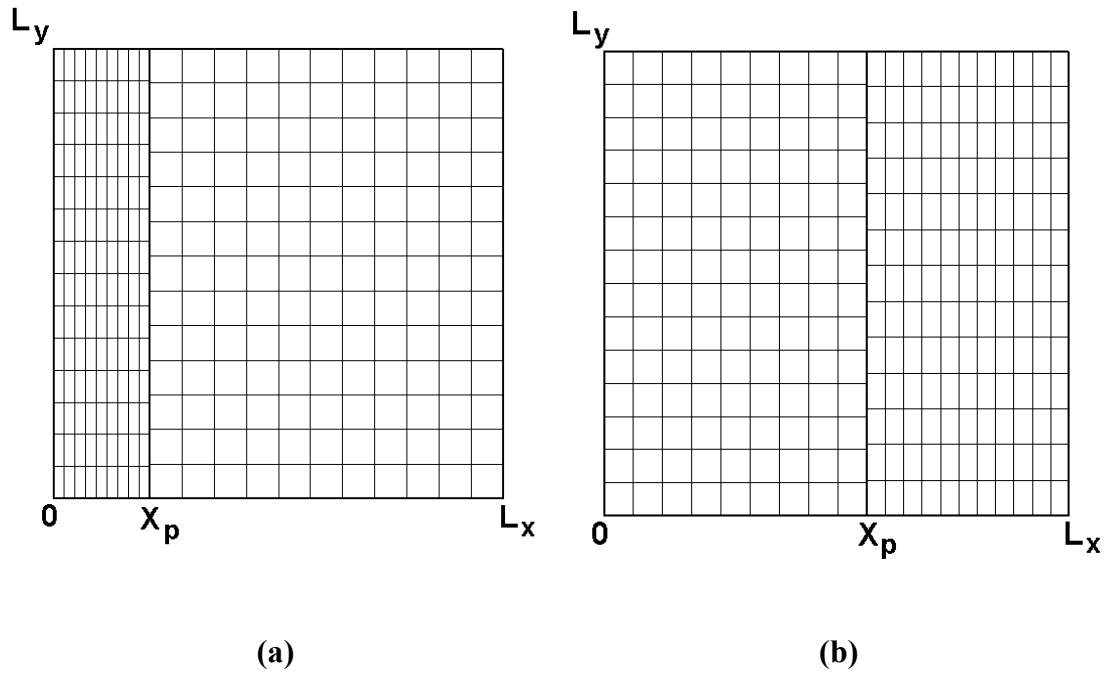


Şekil 2.31 : Adyabatik piston.

Bu problem literatürde yoğun bir ilgi görmektedir (Crosignani ve diğ., 1996; Munakata ve Ogawa, 2001; Crosignani ve diğ., 2004; Neishtadt ve Sinai, 2004; Gruber ve diğ., 2004; Brito ve diğ., 2005; Mansour ve diğ., 2005). Hidrodinamik yöntemler ile elde edilen sonuçlar, pistonunun sönümlenen salınım hareketi sonunda her iki tarafında da gaz basıncının eşit olduğu bir “Mekanik Denge”ye geldiğini göstermektedir. Bölmeler arasında sıcaklık farkının olması pistonun hareketi için yeterli olmamaktadır. Moleküler dinamik yöntemler kullanılarak yapılan hesaplamalarda ise piston ağırlığına bağlı olarak sistem ya doğrudan hem basıncın hem de sıcaklığın eşit olduğu bir “Termodinamik Denge” konumuna gelmekte veya önce “Mekanik Denge” ve sonra çok daha uzun bir zaman diliminde ise “Termodinamik Denge” konumuna gelmektedir. Yapılan çalışmalar göstermektedir ki piston ağırlığının sistemde mevcut gaz ağırlığından çok büyük ($M_p \gg M_g$)

olmaması durumunda, hidrodinamik ve moleküler dinamik çözümler farklı sonuçlar vermektedir (Mansour ve diğ., 2006).

Bu problemin DSMC yöntemi ile çözümlenmesi için, hareketli sınır koşulları nedeni ile gaz akış alanı içinde oluşturulan çözüm ağlarının hem hareket etmesi hem de şekillerinin değişmesine gerek duyulmaktadır. Bunu gerçekleştirmek için DSMC çözücüsünde Şekil 2.32’de görüleceği üzere her zaman adımında yeni çözüm ağları üretilmektedir.



Şekil 2.32 : Adyabatik piston probleminde zamana bağlı olarak değişen piston pozisyonu için yeni çözüm ağlarının üretilmesi. (a) $t = t_1$. (b) $t = t_2$.

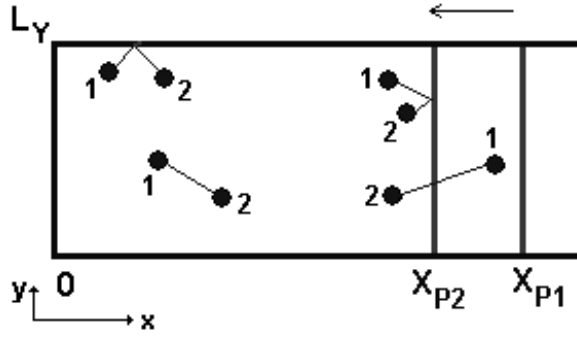
Tüm duvarlar adyabatik olduğu için duvar ve moleküller arasında bir enerji değişimi olmamaktadır. Bu nedenle molekül-duvar etkileşiminde sol ve sağ sınırlarda simetri sınır koşulları, alt ve üst sınırlarda ise periyodik sınır koşulları kullanılmaktadır. Piston ile moleküller arasında ise momentum esaslı bağıntılar oluşturulmuştur. Bu bağıntılar aşağıda,

$$\begin{aligned}
U_p' &= U_p - \frac{2m}{M_p + m} (U_p - u_m) , \\
u_m' &= u_m + \frac{2M_p}{M_p + m} (U_p - u_m) ,
\end{aligned}
\tag{2.98}$$

yer almaktadırlar. Burada U_p' , u_m' çarpışma sonrası, U_p , u_m ise çarpışma öncesi piston ve molekül hızlarını ifade etmektedirler. M_p ve m ise sırası ile piston ve molekül kütlesidir. Moleküllerin piston ile çarpışmaları için gereken Δt_c süresi ise aşağıdaki bağıntı da olduğu gibidir:

$$\Delta t_c = \frac{X_p - x_m}{U_p - u_m} .
\tag{2.99}$$

Burada X_p ve x_m piston ve molekülün konumunu, U_p ve u_m ise hızlarını belirtmektedir. Burada bir diğer önemli hususta, bir DSMC zaman adımı Δt içinde moleküllerin piston ile olan çarpışma sırasıdır. Önce tüm moleküllerin çarpışma zamanlarının hesaplanması ve en önce çarpışacak molekülün piston ile çarpıştırılması ve daha sonra bu işlemin tüm çarpışmalar tamamlanıncaya kadar tekrarlanması gerekmektedir. Bu hesaplama süresi açısından pahalı bir yöntemdir. Bu çalışmada bu işlemi gerçekleştirmek için Δt zaman adımı, bir zaman adımı içinde çarpışacak molekül sayısından biraz daha büyük bir tam sayıya bölündü. Moleküller bu küçük zaman adımları içinde ilerlerken, en kısa sürede çarpışacak olan molekül pistonla diğerlerinden daha çabuk varmaktadır. Her ne kadar küçük bir olasılık olsa da, eğer aynı adımda birden daha fazla molekül pistonla erişirse, çarpışma rasgele seçilen molekül ile yapılmakta, diğer moleküllerin çarpışmaları ise bir sonraki adıma bırakılmaktadırlar. Böylelikle molekül-piston çarpışmaları hızlı ve basit bir teknik ile gerçeğe en uygun şekilde gerçekleştirilmektedir. Şekil 2.33'de olduğu gibi moleküller öteleme hareketlerini ve duvarlar ile çarpışmalarını tamamladıktan sonra, seçilen bir model uyarınca kendi aralarında çarpışma işlemine tabi tutulurlar.

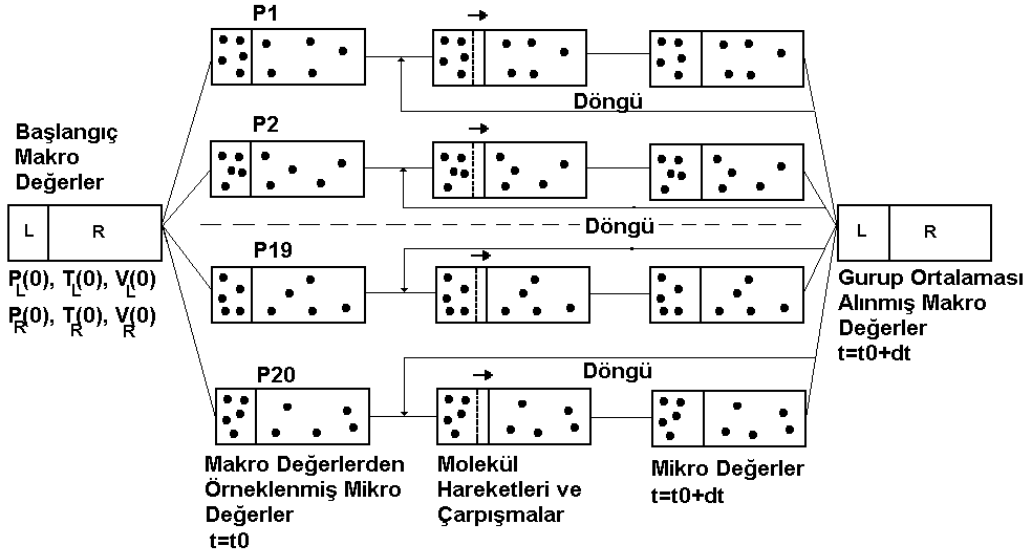


Şekil 2.33 : Adyabatik pistonda moleküllerin hareket safhası.

Tüm moleküller sınır bölgeleri içindeki yeni konumlarını alınca, sıra moleküller arası çarpışma safhasına gelir. Bu safhada sadece aynı hücre içinde yer alan moleküller birbirleri ile çarpıştırılırlar. Çarpışmada toplam momentum ve toplam enerji korunur. DSMC yönteminde çarpışan moleküllerin hızlarının değiştiği, konumlarının ise sabit kaldığı varsayılmaktadır. Çarpışma safhası tamamlanınca her hücrede mevcut DSMC moleküllerinin mikro özellikleri kullanılarak, o hücreye ait basınç, sıcaklık ve yoğunluk gibi makro değerler hesaplanır. Adyabatik piston probleminde daimi olmayan bir gaz akışı söz konusu olduğundan, makro değerlerde oluşan istatistiksel sapmaları azaltmak için daimi akışlarda kullanılan zaman ortalaması yerine gurup (ensemble) ortalamalarına ihtiyaç duyulmaktadır. Gurup ortalaması almak için aynı bölge aynı başlangıç şartları ve sınır koşulları ile aynı işlemcide farklı rasgele sayı dizgeleri kullanılarak ard arda çözülür. Bu çözümlerin istenen zaman aralıklarında makro değer hesaplamaları kaydedilir. İstenen sayıda çözümün ardından tüm çözümlerin gurup ortalamaları alınarak gaz akışına ait daimi olmayan makroskobik değerler hesaplanır. Bu yöntem hesaplama süresi açısından pahalı olduğundan, bu çalışmada adyabatik piston probleminde gurup ortalamalarını hesaplamak için, birbiri ile paralel çalışan çok sayıda işlemciden yararlanacak bir yöntem kullanılmıştır.

Adyabatik piston problemi paralel çalışmaya uygundur. Şekil 2.34’de olduğu gibi aynı başlangıç koşulları ve sınır şartları içeren problem çok sayıdaki farklı işlemcilere gönderilir. Farklı rasgele sayı dizgeleri üretecek şekilde çalışan işlemciler nedeniyle, başlangıçta aynı makro değerler içermesine karşın her bir akış bölgesine

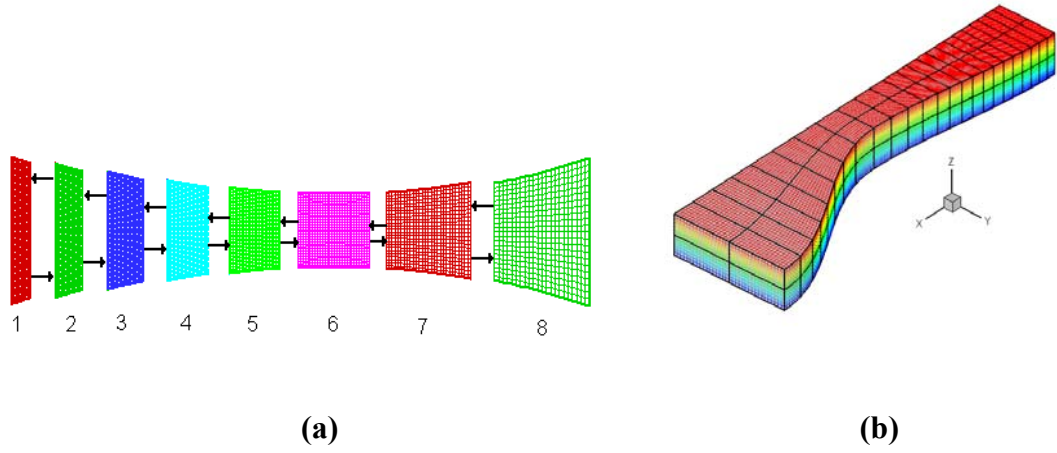
farklı mikroskobik bilgiler içeren DSMC molekülleri yerleştirilir. Moleküllerin DSMC zaman adımı ile birbirlerinden ayrıklaştırıldığı hareket ve çarpışma safhaları birbirini takip eder. İstenen zaman aralıklarında eş zamanlı olarak, moleküllerin mikroskobik bilgilerinden grup ortalamaları alınması yoluyla makroskobik değerler hesaplanır.



Şekil 2.34 : Paralel çalışmada makroskobik değerlerin hesaplanmasında, grup ortalamalarının alınması.

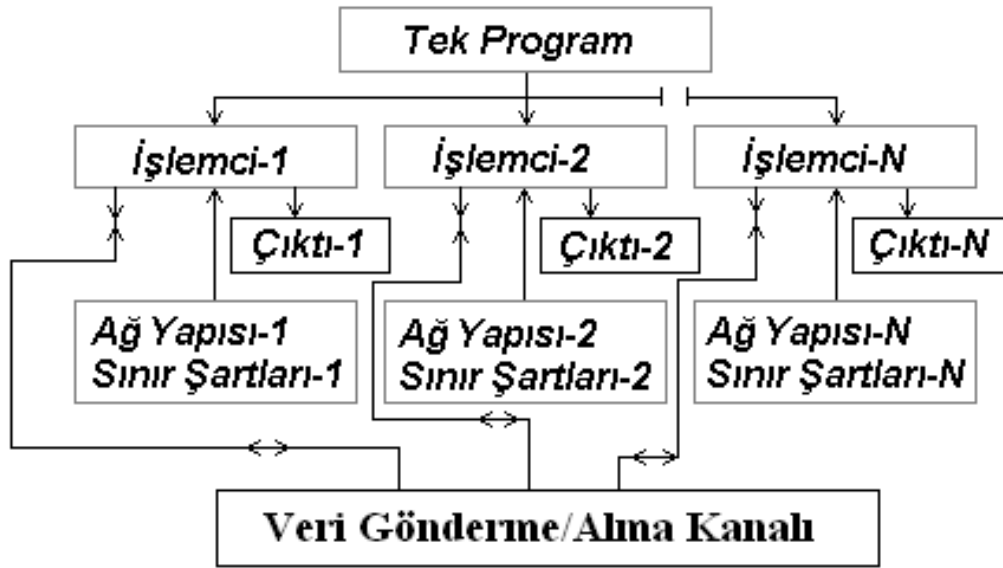
2.6 DSMC Yönteminin Paralelleştirilmesi

DSMC yöntemi özellikle gaz yoğunlaştıkça çözüm süresi bakımından pahalı bir yöntemdir (Dietrich ve Boyd, 1996). Bu çözüm süresini kabul edilebilir bir seviyeye getirmek için bazı önlemler almak gerekmektedir. Bu amaçla en çok kullanılan yöntemlerden birisi de Şekil 2.35’de olduğu gibi gaz akış bölgesini daha küçük alt bölgelere (DD) ayırmak ve her bir alt bölgeyi paralel çalışan farklı bir işlemcide çözümlenektir.



Şekil 2.35 : Paralel DSMC yönteminde gaz akış bölgesinin alt bölgelere bölünmesi. (a) 8 parçaya bölünmüş 2-boyutlu mikro-lüle. (b) 96 parçaya bölünmüş 3-boyutlu mikro-lüle.

Kullanılacak işlemci sayısının belirlenmesinin akabinde her bir işlemci için farklı bir ağ yapısı dosyası ve sınır koşulları dosyası oluşturulur. Bu sınır koşulları dosyasında alt bölgeye ait geometrik bilgiler, çalışılacak gaza ait bilgiler, fiziksel-temsilci molekül sayısı oranı (F_N), çıktı alma aralığı ve programın hangi koşulda sonlandırılacağı gibi bilgiler yer almaktadır. Her işlemcide aynı DSMC çözücüsü, o alt bölgeye ait veri dosyalarından aldığı bilgiler doğrultusunda çalışır. Bu paralel program akış yapısı Şekil 2.36'dan da görüleceği üzere kısaca “*tek program çok veri*” (SPMD) olarak adlandırılmaktadır.



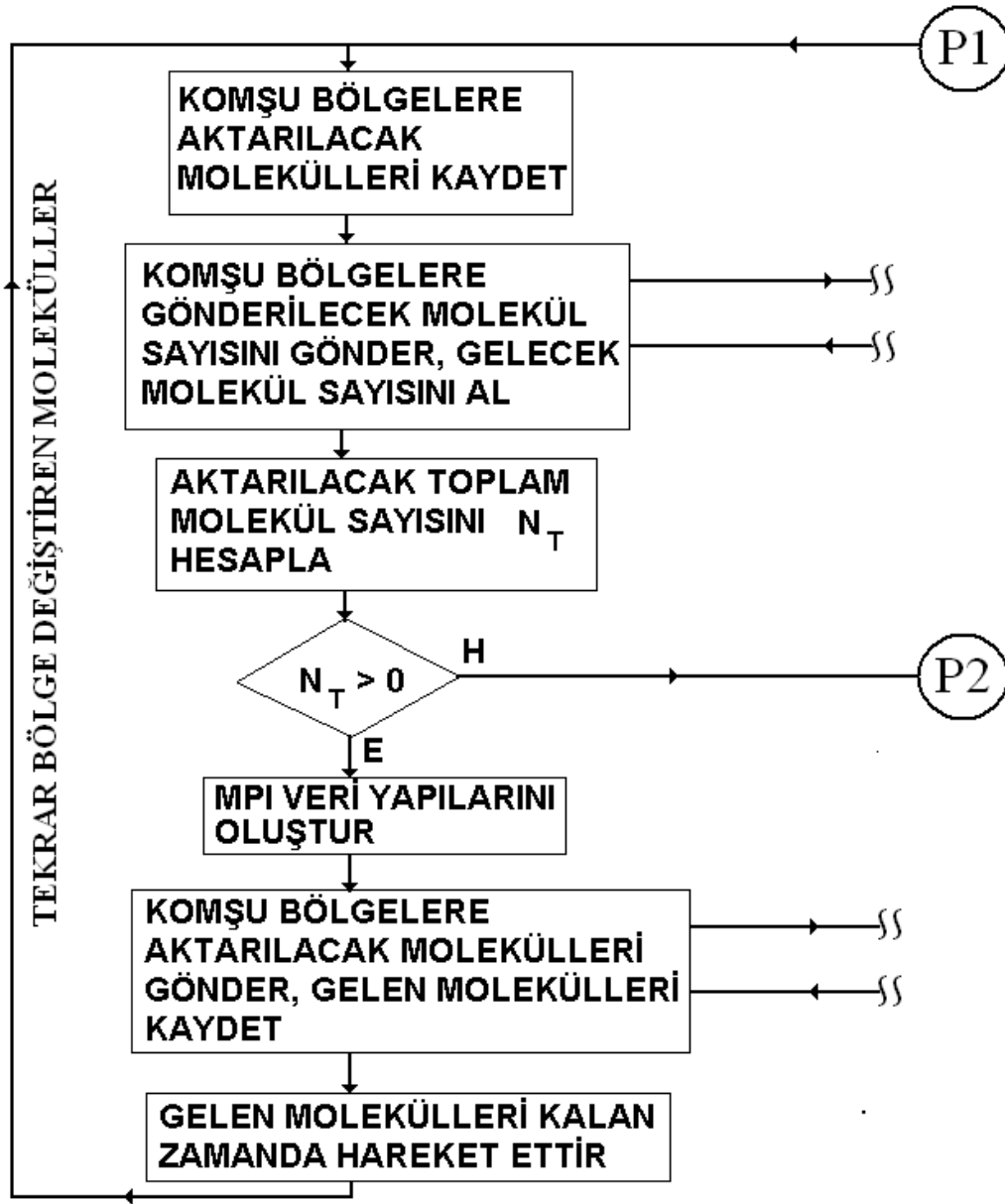
Şekil 2.36 : Paralel çalışma “tek program çok veri” (SPMD) yönteminde her işlemci aynı programı farklı veri girdileri ile kullanır. İşlemciler arasında her zaman adımı (Δt) sonunda molekül aktarımları için bir haberleşme kanalı kullanılır.

Bölgelere ayırma (DD) yönteminde her alt bölge çözüm için paralel çalışan farklı bir işlemciye gönderilir. Paralel çalışan işlemciler alt bölgelerde konuşlanmış molekülleri hem hareket ettirirler, hem de çarpıştırırlar. İlaveten önceden belirlenmiş zaman aralıkları (Δt) sonunda da aynen tek işlemcili çalışmada olduğu gibi makroskobik değerleri hesaplarlar. Bölge sınırlarından dışarı çıktığı saptanan molekül ise gittiği alt bölgeden sorumlu işlemciye aktarılırlar. Bölgeler arası molekül aktarmaları tek tek değil, her bir zaman adımı (Δt) sonunda toptan yapılarak aktarma zamanından tasarruf sağlanır. Bu çalışmada işlemciler arası bilgi aktarımı için mesaj geçme arayüzü (MPI) kütüphaneleri tercih edilmiştir. MPI kütüphaneleri diğer yöntemlere nazaran, geliştirilen çözücülerin farklı işlemci, programlama lisansı ve işletim sistemlerine taşınması konusunda daha esnektir (Wu ve diğ., 2003).

Bölgeler arası bilgi transferleri için MPI_SEND komutu ve MPI_RECV komutu ayrı ayrı kullanıldığında alt bölgelerin markalanması önem kazanmaktadır. 2-boyutlu çalışmalarda bir alt bölge eğer tek sayı ile markalanmış ise bu alt bölgeye komşu alt bölgeler çift sayı ile markalanmalıdır. Çift sayı ile markalanmış bölgeler içinde

bunun tersi geçerlidir. Bunun amacı alt bölge değiştirecek moleküllerin bir veri yapısında toplandıktan sonra önce tüm tek numaralı alt bölgelerin bu bilgileri çift numaralı alt bölgelere göndermesi ve çift numaralı alt bölgelerden gelecek bilgiler için beklemeye geçmesidir. Çift numaralı alt bölgeler kendilerine gönderilen bu bilgileri aldıktan sonra kendi çıktılarını tek numaralı alt bölgelere gönderirler. Son işlem tek numaralı alt bölgelerin bu bilgileri alması ve haberleşmenin sona erdirilmesidir. Böylelikle bilgilerin aktarımında bir çakışma yaşanmadan tüm bilgiler eş zamanlı olarak alt bölgeler arasında karşılıklı olarak aktarılabilir. 3-boyutlu çalışmalarda ise alt bölge sayısının artması nedeni ile alt bölgeleri doğru olarak markalamak daha zor olmaktadır. Bu nedenle 3-boyutlu çalışmalarda MPI_SENDRECV komutu kullanılmıştır. Bu komut özel yapısı nedeni ile alt bölgeler arasında özel bir markalama çalışması yapılmasına gerek duymamaktadır. Bu nedenle herhangi iki alt bölge arasında, bir eş güdüm sorunu yaşanmadan veri aktarımı yapılabilir.

Paralel DSMC yönteminde Şekil 2.37’de görüleceği üzere, hareket safhasının tamamlanmasının ardından bölge dışına çıkan moleküller bir veri yapısına kaydedilirler. İlk adımda işlemciler birbirlerine bölge değiştirecek molekülleri değil, molekül sayılarını aktarırlar. Bu bilgidен yararlanarak tüm işlemciler toplamda kaç molekülün bölge değiştireceği bilgisini (N_T) hesaplarlar. Yine bu bilgi kullanılarak her işlemci kendine gönderilecek molekülleri kaydetmek için boş bir veri yapısı hazırlar. $N_T > 0$ koşulunda tüm işlemciler bölge değiştirecek molekülleri, gidecekleri alt bölgeden sorumlu işlemciye gönderirler. Bölge değiştiren moleküller geldikleri bölgede hareketlerini tamamlamadıkları için gönderildikleri bölgede de kalan zaman parçası süresince hareketlerine devam ederler. Her işlemci kendine gönderilen molekülün kalan zaman parçası boyunca sorumlu olduğu bölge içinde hareketini izler. Bir alt bölgeden diğerine aktarılan moleküllerden bazılarının az da olsa gönderildiği alt bölgeye gerisin geriye yansıtılma veya başka bir alt bölgeye aktarılma olasılığı da bulunmaktadır. Bu nedenle alt bölgeler arası molekül aktarımı için ilave bir kontrol çevrimine ihtiyaç duyulmaktadır. Tüm molekül aktarımları tamamlanınca kadar her alt bölge diğer alt bölgelere kendini rapor eder. Alt bölgeler arası haberleşme molekül hareketleri tamamlanınca sona erer.



Şekil 2.37 : Paralel DSMC yönteminde moleküllerin bölge değiştirme işlemleri hareket (P1) ve sıraya dizilme (P2) safhaları arasında tamamlanır. Genel şema Şekil 2.1’de gösterilmektedir.

Paralel programlama açısından en önemli hususlardan biri de işlemcilere dağıtılan hesaplama yükünün dengeli olmasıdır. Eğer işlemci yükleri arasında bir fark oluşursa, hesaplamasını tamamlayan işlemcilerin diğerlerini beklemesi gerekecek ve bu boşta bekleme durumu, işlemini en son tamamlayan işlemciye kadar sürecektir. Bu durum hesaplama süresinin uzamasına neden olacaktır. Bu nedenle işlemcilere yükün dengeli bir şekilde dağıtılması ve sonucunda her işlemcinin kendine verilen

hesaplamaları hemen hemen aynı zamanda tamamlaması gerekmektedir. Bu amaçla işlemciler arasında yükün dengelenmesi için yük dengeleme yöntemleri kullanılmakta olup, bunlar statik ve dinamik olarak ikiye ayrılmaktadır. Statik dengeleme yönteminde yük, programın çalışmaya başlamasından önce bazı veriler kullanılarak elde edilen bilgiler kapsamında işlemciler arasında bölüştürülür. Koşullar değişse bile program çalışırken yükün işlemcilere yeniden bölüştürülmesi mümkün olmaz. Dinamik yük dağıtımında ise işlemci yükleri programın her safhasında kontrol edilerek işlemciler arasında sürekli bir yük paylaşımı sağlanmaktadır. DSMC yönteminin dinamik karakteri nedeni ile başlangıçta eşit olan yük paylaşımı zaman içinde değişebilmektedir. Böyle durumlarda dinamik yük dengelemesi yöntemi, yükün program akışı içinde dağılımı açısından daha uygun bir yöntem olmakla birlikte, hem programlama açısından ilave zorluklar getirmekte hem de hesaplama verimi düşük olmaktadır. Bu çalışmada statik yük dengeleme yöntemi kullanılmıştır. DSMC yönteminde işlemcilere düşen yük alt bölgede yer alan molekül ve hücre sayısına bağlıdır (Kim ve diğ., 2004). DSMC çözücüsünde molekül ve hücre sayısının hesaplama zamanı üzerindeki ağırlık katsayıları birbirinden bağımsız olarak saptanmaktadır. Bu katsayılar yardımı ile toplam yük işlemciler arasında mümkün olduğunca eşit olarak dağıtılmaktadır (Sengil ve Edis, 2006). Paralel çalışma için gaz akış alanının alt bölgelere ayrılmasının bir diğer önemli faydası da değişen molekül sayı yoğunluğu nedeni ile her bir alt bölgede farklı fiziksel-temsili molekül oranları (F_N) ve hücre boyutları (l_h) kullanabilme olanağı sağlamasıdır. Böylelikle çok işlemci için hesaplanan toplam hesaplama yükü, tek işlemci için hesaplanan toplam hesaplama yükünden daha az olabilmektedir. Bu nedenlerden dolayı DSMC paralel hesaplama için ideal bir yöntemdir (LeBeau, 1999). Burada dikkat edilmesi gereken husus alt bölge değiştiren bazı moleküllerin kopyalanarak sayılarının artırılması veya tam tersi silinerek sayılarının azaltılmasının gerekli olabilmesidir (Dietrich ve Boyd, 1996).

2.7 Farklı Hücre Ebatları ve Fiziksel-Temsili Molekül Oranları Kullanılması

DSMC yönteminde gaz akış alanı içinde yer alan fiziksel moleküller daha az sayıdaki temsili moleküller ile temsil edilirler. Çözümlenen bölgede oluşturulan hücrelerin doğrusal boyutları (l_h),

$$l_h \approx \lambda \propto n^{-1}, \quad (2.100)$$

ortalama serbest yol (λ) ölçeğindedir. DSMC hücre boyutunun (l_h), ortalama serbest yol (λ) ile orantılı olduğu göz önüne alındığında, DSMC hücre hacmi ve molekül sayı yoğunluğu arasındaki ilişki 2-boyut için $V_h \propto \left(\frac{1}{n}\right)^2$, 3-boyut için ise $V_h \propto \left(\frac{1}{n}\right)^3$ olmaktadır. Dolayısı ile DSMC hücresi başına düşen fiziksel molekül sayısı N , 3-boyutlu ve 2-boyutlu geometriler için aşağıda olduğu gibi hesaplanır:

$$\begin{aligned} N_{2D} &\propto n \cdot V_h \propto n \cdot \left(\frac{1}{n}\right)^2 \propto \frac{1}{n}, \\ N_{3D} &\propto n \cdot V_h \propto n \cdot \left(\frac{1}{n}\right)^3 \propto \frac{1}{n^2}. \end{aligned} \quad (2.101)$$

Yukarıdaki bağıntılardan da görüleceği üzere gazın yoğunluğu azaldıkça, beklenenin tersine hücre başına düşen fiziksel molekül sayısı artmaktadır. Bunun nedeni hücre hacminin büyüme hızının, molekül sayı yoğunluğundan daha hızlı artmasıdır. Bu denklemlerde n ve V_h sırası ile molekül sayı yoğunluğunu ve hücre hacmini ifade etmektedirler. Dolayısı ile çözümlenen bir bölgede hem hücre boyutları hem de hücre başına düşen molekül sayısı gaz yoğunluğu ile orantılı olarak belirlenmek durumundadır. Eğer gazın yoğunluğu yerel olarak değişkenlik gösteriyor, ama hücre boyutları değişmiyor ise, bazı hücrelerde gereğinden az molekül konumlanırken, bazı hücrelerde bu durumun tam tersi görülebilmektedir. Bu durumu gaz yoğunluğun değişiklik gösterdiği bir akış alanında incelersek, anlaşılması daha kolay olabilecektir. Fiziksel-temsili molekül oranını F_N sembolü ile gösterirsek,

$$F_N = \frac{N_h}{N_{im}}, \quad (2.102)$$

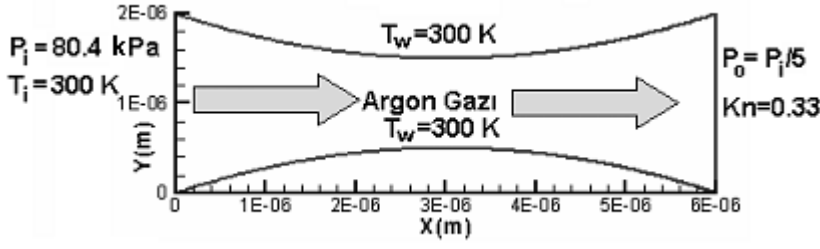
olarak hesaplanır. N_h hücre içindeki fiziksel molekül sayısı iken, N_{im} hücre içinde bunları temsil eden temsili molekül sayısını ifade etmektedir. N_{im} istatistiksel hataları makul bir seviyede tutacak bir sayı olmalıdır. Bu değer genelde 20 civarında bir sayı olarak belirlenmektedir (Oran ve diğ., 1998). Farklı gaz yoğunlukları için bu sayıların oranı 2- ve 3-boyutlu ortamlar için incelendiğinde,

$$\frac{F_N^{2-D,1}}{F_N^{2-D,2}} \propto \frac{1/n_1}{1/n_2} \propto \frac{n_2}{n_1} , \quad (2.103)$$

$$\frac{F_N^{3-D,1}}{F_N^{3-D,2}} \propto \frac{(1/n_1)^2}{(1/n_2)^2} \propto \left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2 ,$$

olarak bulunmaktadır. Yukarıdaki denklemlerden de görüleceği üzere farklı yoğunlukta bir ortamda tüm hücrelerde hücre başına sabit bir temsilci molekül sayısı elde etmek için her hücre de farklı fiziksel-temsilci molekül sayısı oranı F_N kullanmak gerekmektedir. Bu yapılmayıp tüm bölge için sabit bir F_N kullanıldığında ise hücre başına düşen temsilci molekül sayısı hücreden hücreye farklılık gösterebilmektedir. Bu oran özellikle 3-boyutlu uygulamalarda yoğunluk oranlarının tersinin karesi kadar olmaktadır. Molekül sayısının gereğinden fazla artması işlemci yükünü arttırırken, hücrede mevcut molekül sayısının belirli bir sayının altına düşmesi de istatistiksel sapmaları çoğaltır. Bu sorunun önüne geçmek için ya her hücrenin boyutları gazın yerel yoğunluğuna uygun hale getirilmeli, ya da her hücre için farklı bir temsilci molekül oranı kullanılmalıdır. Her hücre için farklı bir F_N kullanılması hücre değiştiren moleküllerin bazılarının silinmesi veya çoğaltılmasını gerektirecektir. Bunu yapabilmek için, beraberinde istatistiksel hataları da getiren oldukça karmaşık teknikleri kullanmak gerekir. Yapısal olmayan çözüm ağırları kullanmak sureti ile hücre boyutları yoğunluğa göre ayarlanabilir. Buna karşın paralel çalışma bu sorunları gidermek için kullanıcıya kolaylıklar sağlamaktadır. Böylece farklı işlemcilerde çözümlenen alt bölgelerde farklı temsilci molekül oranları ve farklı hücre boyutları kullanılabilir. Böyle bir durumda bir alt bölgeden diğerine temsilci moleküller geçtiğinde, bu alt bölge değiştiren temsilci moleküllerin sayılarında bazı değişiklikler yapılmasına ihtiyaç vardır. Bölge değiştiren bazı moleküllerin silinmesi, bazılarının da kopyalanarak sayısının arttırılması gerekmektedir. Bu konudaki uygulama detayları Bölüm 3'te sunulmaktadır.

Farklı alt bölgelerde farklı fiziksel-temsilci molekül oranları kullanarak, hesaplama verimi arttırılabilmektedir. Bu durumu bir örnek ile açıklamak için, literatürde mevcut (Şekil 2.38) ve basınç sınır koşulları uygulanan bir mikro-lüle gaz akışı ele alınıp, tek işlemci ile çözümlenmiştir.



Şekil 2.38 : 2-boyutlu yakınsak-ıraksak bir mikro-lüle ve sınır koşulları.

Argon gazının en yoğun olduğu giriş bölümünde molekül sayı yoğunluğu n_i ve ortalama serbest yol λ_i hesaplandığında,

$$n_i = \frac{p_i}{k_B T_i} = \frac{80.400}{1.38 \times 10^{-23} \cdot 300} = 1.94 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}, \quad (2.104)$$

$$\lambda_i = \frac{1}{\sqrt{2} \pi d^2 n_i} = \frac{1}{\sqrt{2} \pi (4.17 \times 10^{-10})^2 1.94 \times 10^{25}} = 6.67 \times 10^{-8} \text{ m},$$

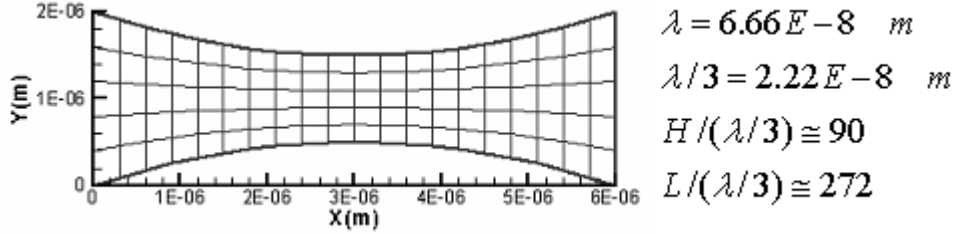
değerleri elde edilir. Bu denklemlerde p_i gaz giriş basıncını, T_i gaz giriş sıcaklığını, k_B Boltzmann sabitini, d ise Argon gazı molekül çapını belirtir. Hücre boyutu $\lambda_i / 3$ olarak alındığında, yapısal ağda x-ekseni ve y-ekseni boyunca CM ve CN adet hücre yer alır. Bu sayılar ise,

$$CM = L / (\lambda_i / 3) \cong 272, \quad (2.105)$$

$$CN = H / (\lambda_i / 3) \cong 90,$$

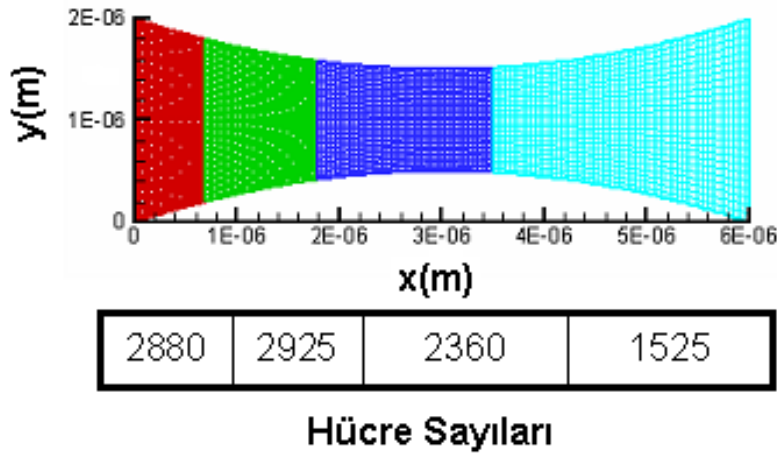
olarak hesaplanmaktadır. Çıkış bölgesi gazın en az yoğun olduğu bölge olarak kabul edilir ve bu bölgedeki hücrelerde 20 temsilci molekül bulunacak şekilde bir temsilci molekül oranı belirlenir. Bunun doğal bir sonucu olarak aynı hacimdeki giriş bölgelerindeki hücrelerde ise çok daha fazla temsilci molekül toplanır. Eşsıcaklık varsayımı kullanıldığı takdirde giriş hücrelerinde yaklaşık 100 adet kadar temsilci molekül oluştuğu (2.103) denklemi kullanılarak belirlenir. Bu nedenle tüm bölge hesaba katıldığında hücre başına düşen ortalama temsilci molekül sayısı 20'den fazla olur. Yukarıda belirtilen örnek göz önüne alındığında gaz akış bölgesinde (Şekil 2.39) 24480 (272x90) adet hücre bulunur. Akışın daimi hale gelmesinden sonra temsilci molekül oranı $F_N = 10^8$ için, bölge içinde yaklaşık 995000 adet temsilci

molekül yer aldığı belirlenmiştir. Bu bilgiden hücre başına ortalama 41 temsilci molekül düştüğü anlaşılmaktadır. 5000 zaman adımı için toplam çözüm süresi ise 63666 sn. olarak hesaplanmıştır.



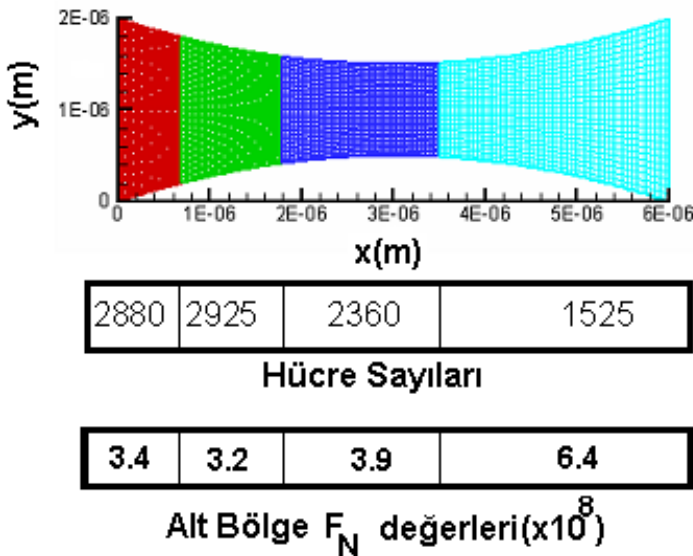
Şekil 2.39 : 2-boyutlu yakınsak-ıraksak mikro-lülenin tek işlemci için oluşturulan yapısal ağ.

Hesaplama zamanını azaltmak için gaz akış bölgesinin alt bölgelere ayrılarak her bir bölgenin farklı bir işlemcide paralel olarak çözülmesine ihtiyaç vardır. Mikro-lüle içinde basınç değişiminin hemen hemen doğrusal olduğu varsayımından yola çıkılarak bir ön-işlemci geliştirildi. Bu ön-işlemci istenen alt bölge sayısı, fiziksel-temsilci molekül oranı, hücre ve molekül sayısı yük katsayı bilgilerini kullanarak, gaz akış bölgesi içinde oluşturulacak alt bölgelerin konum, hücre boyutu ve hücre sayısı bilgilerini hesaplayabilmektedir. Bu bilgiler daha sonra yapısal bir ağ üreticine beslenerek, istenen özellikte ağ dosyaları yaratılır. Eğer DSMC çözücüsünde farklı bölgelerde farklı fiziksel-temsilci molekül oranları kullanma olanağı yok ise, toplam yükteki iyileşme sadece hücre sayındaki azalmadan ileri gelir. Azalan bu toplam yük ilaveten paralel çalışma ile birden çok işlemci arasında bölünür. Aynı problem 4 alt bölge için, 4 farklı işlemcide (Şekil 2.40) paralel olarak çözüldü. Yine bir önceki örnekte olduğu gibi temsilci molekül oranı $F_N = 10^8$ alınarak, 995000 adet temsilci molekül ve 9690 adet hücre kullanıldı. Çözüm süresi 5000 zaman adımı için 12789 sn. olarak gerçekleşmiştir.



Şekil 2.40 : 2-boyutlu ıraksak-yakınsak bir mikro-lülede 4 alt bölgede farklı boyutta yapısal çözüm ağı uygulaması.

DSMC çözücüsüne farklı bölgelerde farklı temsilci molekül oranı kullanma imkanı kazandırıldıktan sonra, yine aynı örnek problem yine 4 işlemcide paralel olarak çözüldü. Bu sefer 9690 adet hücre sayısına karşın (Şekil 2.41) yaklaşık 260000 temsilci molekül kullanıldı. Bu sefer 5000 zaman adımı için toplam çözüm süresi 4444 sn. olarak gerçekleşti.



Şekil 2.41 : 2-boyutlu ıraksak-yakınsak bir mikro-lülede 4 alt bölgede hem farklı boyutta yapısal ağ hem de fiziksel-temsilci molekül oranı kullanılması.

Yukarda elde edilen tüm sayısal değerler aşağıda Çizelge 2.5’de toplanırsa, gaz akış bölgesinin alt bölgelere ayrılarak, paralel çalışan işlemcilerde çözümlenmesi sonucunda sağlanan hesaplama zamanı tasarrufu daha belirgin olarak görülebilmektedir.

Çizelge 2.5 : Alt bölgelerin farklı işlemcilerde çözümü sonucunda elde edilen çözüm süreleri.

No	Temsilci Molekül Sayısı	Hücre Sayısı	Toplam Adım	İşlemci Sayısı	Çözüm Süresi (sn)
1	~995000	24480	5000	1	63666
2	~995000	9690	5000	4	12789
3	~260000	9690	5000	4	4444

DSMC yönteminin paralel uygulamasında farklı F_N kullanan bölgelere geçiş yapan temsilci moleküllerin silinmesi veya çoğaltılmasına ait sayısal uygulamalar Bölüm 3’te ayrıntıları ile birlikte sunulmaktadır.

3. UYGULAMA AYRINTILARI

3.1 Maxwell Dağılımı

Başlangıçta bölgesel sıcaklık farkları bulunan bir sistem dışardan tamamen yalıtılmış bir şekilde yeteri kadar uzun bir süre kendi haline bırakılırsa, zaman içinde tüm noktalarda sıcaklıklar eşit olacaktır. Bu sistemin “ısıl denge” konumuna geldiğini göstermektedir. Bir sistemin farklı nedenlerden dolayı bazı parçaları hareket edebilir. Bu nedenler ortadan kalktığında ise sistem parçalarının hareketi duracaktır. Bu durum sistemin “mekanik denge” de olduğunu göstermektedir. Eğer bir sistemde kimyasal tepkimeler sona ermişse veya ürünlerin derişimi (konsantrasyonu) zaman içinde değişmiyorsa sistemin “kimyasal denge” de olduğu söylenir. Isıl, mekanik ve kimyasal dengede olan bir sistem “termodinamik denge”’’ dedir (Ünal, 2002).

Isıl dengede bulunan gaz moleküllerinin hız dağılım fonksiyonu ilk defa Maxwell tarafından 1859 yılında hesaplanmıştır. Maxwell bu çıkarımı yaparken bazı kabullerde bulunmuştur. İlk kabul gazların sonsuz sayıda elastik çarpışma yapan katı kürelerden oluştuğudur. İkinci kabul çarpışan moleküllerin yönlerinin dağılımının rasgele olacağıdır. Üçüncü kabul moleküllerin bireysel hızlarının değişebileceği ama aynı hız aralığında mevcut molekül sayısının zamanda sabit kalacağıdır. Dördüncü kabul ise molekül hız bileşenlerinin istatistiksel olarak birbirinden bağımsız olacağıdır (Gombosi, 1994). Daha sonra aynı çıkarım kendi adıyla anılan denklemi kullanarak Boltzmann tarafından da 1877 senesinde tekrarlanmıştır. Isıl dengede olan bir sistemde gaz moleküllerinin ısı hız dağılım fonksiyonu aşağıda verilmiştir:

$$\begin{aligned} f_0 &= n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp \left(- \frac{m}{2 k_B T} c'^2 \right) , \\ c' &= \sqrt{u'^2 + v'^2 + w'^2} , \\ f_0 &= n \left(\frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \right)^3 \exp \left(- \beta^2 c'^2 \right) , \\ \beta^{-1} &= (2 k_B T / m). \end{aligned} \tag{3.1}$$

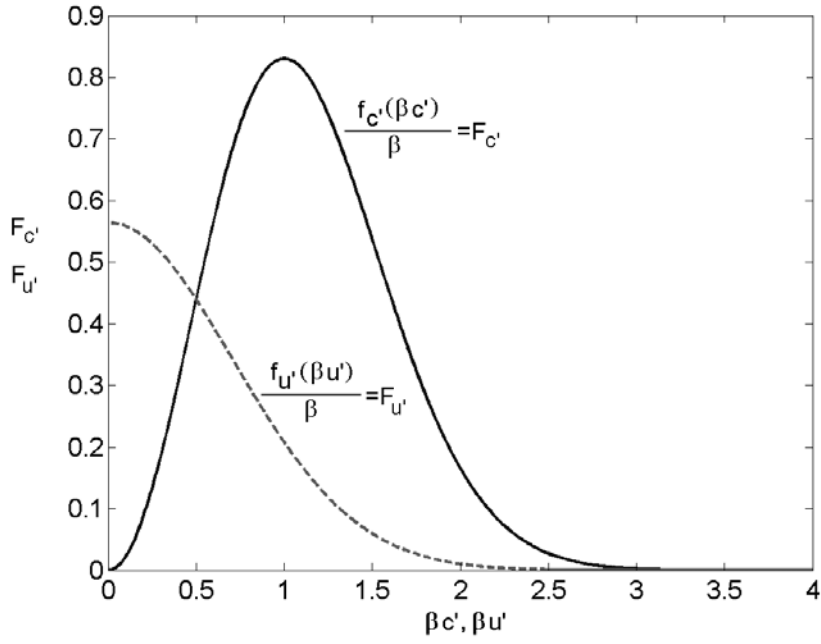
Burada n molekül sayı yoğunluğu, m molekül kütlesi, T gaz sıcaklığı, k_B Boltzmann sabiti, c' molekül ısı sürati, (u', v', w') ise molekül ısı hız bileşenleridir. β ise en olası molekül hızının tersidir. f_0 fonksiyonu ile u' ile $u'+du'$, v' ile $v'+dv'$ ve w' ile $w'+dw'$ hızları aralığında molekül bulunma olasılığı ifade edilmektedir. Küresel koordinat (c', θ, φ) sisteminde c' ile $c'+dc'$ hız aralığında, θ' ile $\theta'+d\theta'$ ve φ' ile $\varphi'+d\varphi'$ açıları arasında yer alan moleküllerin toplam molekül sayısına oranını $\left(\frac{dn}{n}\right)$ hesaplamak için, f_0 fonksiyonu diferansiyel hacim $(dc' = c'^2 dc' \sin \theta d\theta d\varphi)$ ile çarpılmaktadır:

$$\begin{aligned} \frac{dn}{n} &= \frac{\beta^3}{\sqrt{\pi^3}} c'^2 \exp(-\beta^2 c'^2) dc' \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \quad , \\ \frac{dn}{n} &= \left(\frac{4}{\sqrt{\pi}}\right) \beta^3 c'^2 \exp(-\beta^2 c'^2) dc' \quad , \\ f_{c'} &= \left(\frac{4}{\sqrt{\pi}}\right) \beta^3 c'^2 \exp(-\beta^2 c'^2) \end{aligned} \quad (3.2)$$

Isıl hız vektörü bileşenleri birbirinden bağımsız oldukları için, Kartezyen koordinat (x, y, z) sisteminde ısı hız bileşenleri molekül oranları Maxwell hız dağılım fonksiyonundan (f_0) hesaplanabilmektedir. Örneğin u' ve $u'+du'$ aralığında mevcut molekül oranı,

$$\begin{aligned} \frac{dn}{n} &= \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \exp(-\beta^2 u'^2) du' \quad , \\ f_{u'} &= \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \exp(-\beta^2 u'^2) \quad , \end{aligned} \quad (3.3)$$

bağıntılarından hesaplanmaktadır. $f_{c'}$ ve $f_{u'}$ hız dağılım fonksiyonlarının boyutsuzlaştırılmış çizgeleri Şekil 3.1'de yer almaktadır.



Şekil 3.1 : Moleküllerin ısı hız (c') ve ısı hız bileşenleri (u') için Maxwell hız dağılım fonksiyonları.

3.2 Ters-Birikimli Örneklem Yöntemi

Moleküllere atanan hız bileşenlerinin hız dağılım fonksiyonlarından örneklenmesi için çeşitli yöntemler kullanılmaktadır. Ters-birikimli yöntemi de bu yöntemlerden birisidir (Bird, 1994). DSMC yönteminde duvardan yansıyan veya rezervuarlardan içeri giriş yapan moleküllerin Maxwell dağılımına uygun sınıra paralel ısı hız bileşenlerini hesaplamak için kullanılmaktadır. Bu yöntemde önce v' ile $v'+dv'$ ve w' ile $w'+dw'$ arası ısı hız bileşenlerine sahip moleküllerin sayısal oranları $\left(\frac{n}{dn}\right)$

önce Kartezyen koordinatlar için hesaplanır:

$$\begin{aligned} \frac{n}{dn} &= f_{v'} dv' f_{w'} dw' , \\ f_{v'} dv' f_{w'} dw' &= \left(\frac{\beta}{\sqrt{\pi}}\right) \exp(-\beta^2 v'^2) dv' \left(\frac{\beta}{\sqrt{\pi}}\right) \exp(-\beta^2 w'^2) dw' . \end{aligned} \quad (3.4)$$

Daha sonra hız dağılım fonksiyonu kutupsal koordinatlara (r, θ) çevrilmektedir:

$$\begin{aligned}
v' &= r \cos \theta \quad , \\
w' &= r \sin \theta \quad , \\
f_{v'} dv' f_{w'} dw' &= \left(\frac{\beta^2}{\pi} \right) \exp(-\beta^2 r^2) r dr d\theta = \exp(-\beta^2 r^2) d(\beta^2 r^2) d(\theta/2\pi) \quad .
\end{aligned} \tag{3.5}$$

Kutupsal koordinat sisteminde hesaplanan dağılım fonksiyonları,

$$\begin{aligned}
f_{\theta} &= 1/(2\pi) \quad , \\
f_{\beta^2 r^2} &= \exp(-\beta^2 r^2) \quad ,
\end{aligned} \tag{3.6}$$

bağıntıları ile verilmektedir. Bu dağılım fonksiyonlarından faydalanarak birikimli dağılım fonksiyonları,

$$\begin{aligned}
F_{\theta} &= \theta/(2\pi) \quad , \\
F_{\beta^2 r^2} &= 1 - \exp(-\beta^2 r^2) \quad ,
\end{aligned} \tag{3.7}$$

hesaplanmaktadır. Birikimli dağılım fonksiyonları Şekil 3.2’de olduğu gibi 0-1 arasında düzgün dağılmış rasgele bir sayıya (R_f) eşitlenerek,

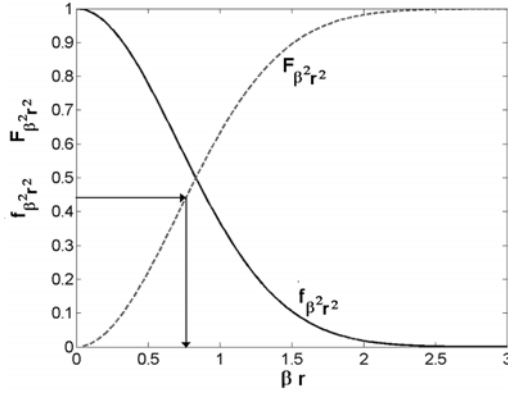
$$\begin{aligned}
\theta &= 2\pi R_{f1} \quad , \\
r &= \beta^{-1} \sqrt{-\ln(R_{f2})} \quad ,
\end{aligned} \tag{3.8}$$

θ ve r değerlerinin örneklenmesi için gereken bağıntılar tamamlanmış olmaktadır. Hesaplanan değerler tekrar Kartezyen koordinat sistemine çevrilerek,

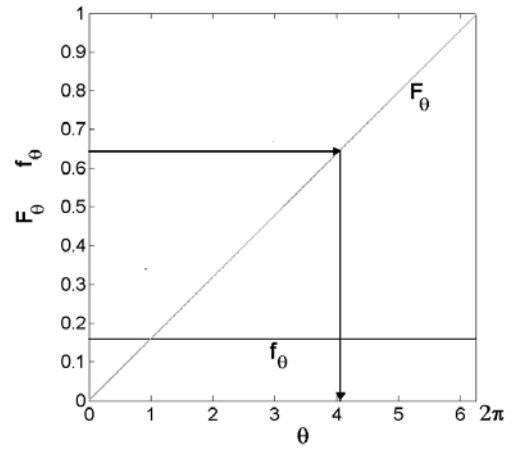
$$\begin{aligned}
v' &= r \cos \theta \quad , \\
w' &= r \sin \theta \quad ,
\end{aligned} \tag{3.9}$$

hız bileşenleri elde edilmektedir. Bu yöntem ek olarak duvardan sıcaklık örnekleyerek dağınık yansıyan veya akım sınırlarında gazın sınıra dik bir akış hızı bileşenine sahip olmadığı durumlarda (yarım-Maxwell dağılımı) molekülerin sınıra dik hız bileşenlerini (u) örneklemek için de kullanılmaktadır.

$$u = \beta^{-1} \sqrt{-\ln(R_f)} \tag{3.10}$$



(a)



(b)

Şekil 3.2 : Moleküllerin sınıra paralel ısı hız bileşenlerinin ters-birikimli örnekleme yöntemi ile saptanması. (a) Hız vektörü büyüklüğü. (b) Hız vektörü yönü.

3.3 Kabul-Red Yöntemi

Kabul-red yöntemi belli bir $f_u(u)$ hız dağılım fonksiyonunun ters-birikimli örnekleme yöntemi kullanılarak örneklenmesine olanak olmadığı durumlarda kullanılmaktadır (Bird, 1994). Kabul-red yöntemi DSMC yönteminde genellikle duvardan dağınık yansıyan veya rezervuardan akış bölgesine geçen moleküllerin sınıra dik hız bileşenlerini hesaplamak için kullanılmaktadır. Hız dağılım fonksiyonu,

$$\int_{u_{\min}}^{u_{\max}} f_u(u) du = 1 \quad , \quad (3.11)$$

bağıntısında gösterildiği gibi sınır değerler $(u_{\min}, u_{\max})$ arasında normalize edilmiş olmalıdır. f_u hız dağılım fonksiyonunun $u_{\min} < u < u_{\max}$ aralığı içindeki en büyük değeri $f_{\max}$ hesaplanarak,

$$f_n = f_u / f_{\max} \quad , \quad (3.12)$$

kendine bölünür. Böylece $f_u(u)$ hız dağılım fonksiyonundan, değeri 0 ile 1 arasında değişen $f_n(u)$ hız dağılım fonksiyonu elde edilir. f_n hız dağılım fonksiyonuna

uygun hız örneklemek için, ilk adımda $u_{\min} < u < u_{\max}$ aralığı içinde düzgün dağılmış rasgele bir u_t hız değeri hesaplanır,

$$u_t = u_{\min} + (u_{\max} - u_{\min}) R_{f,1} \quad (3.13)$$

$R_{f,1}$, 0 ile 1 arasında düzgün dağılmış rasgele bir değerdir. Daha sonra bu u_t hız değeri kullanılarak, f_n değeri hesaplanır. İkinci adımda yine 0 ile 1 arasında düzgün dağılmış ikinci bir rasgele sayı $R_{f,2}$ hesaplanarak f_n değeri ile karşılaştırılır. Eğer

$$f_n > R_{f,2} \quad (3.14)$$

koşulu sağlanırsa, hesaplanan u_t hız değeri kabul edilir. Aksi halde red edilir. Bu döngüye istenen sayıda hız değeri elde edilinceye kadar devam edilir. Kabul-red yöntemi kullanarak çok sayıda hız örneklediğinde, elde edilen hızların dağılımı f_u hız dağılım fonksiyonu ile hemen hemen aynı olmaktadır.

Bu yöntemi $0 < u < \infty$ bölgesinde yer alan $f_u(u) = 2e^{-2u}$ gibi örnek bir hız dağılım fonksiyonu kullanarak açıklamak gerekirse, önce hız dağılım fonksiyonunun en büyük değeri hesaplanır. Şekil 3.3'den görüleceği üzere bu değer $f_{\max} = 2$ dir. $f_n(u) = e^{-2u}$ olarak bulunur. Kabul-red yönteminin ilk adımında hız hesaplayabilmek için, hız seçim aralığının sınırlarının belirlenmesi gerekmektedir. Bu hız seçim aralığı çok geniş belirlenirse, ilk adımda hesaplanan hızların çoğu reddedilecek ve yöntemin hesaplama verimi düşecektir. Eğer hız seçim aralığı çok dar seçilirse, bu sefer de hız aralığı dışında kalan hızlar örneklenmemiş olacaklardır. $f_u(u)$ hız dağılım fonksiyonu için, $u_t \geq 4$ 'den daha büyük bir hızın seçilme olasılığı % 0.034'ten daha düşük bir olasılıktır. Bu nedenle hız seçim aralığının $0 < u_t < 4$ olarak belirlenmesi hem hız dağılım fonksiyonunu oldukça doğru örneklemek, hem de hesaplama verimliliği açısından uygun olmaktadır. Dolayısı ile önce u_t ,

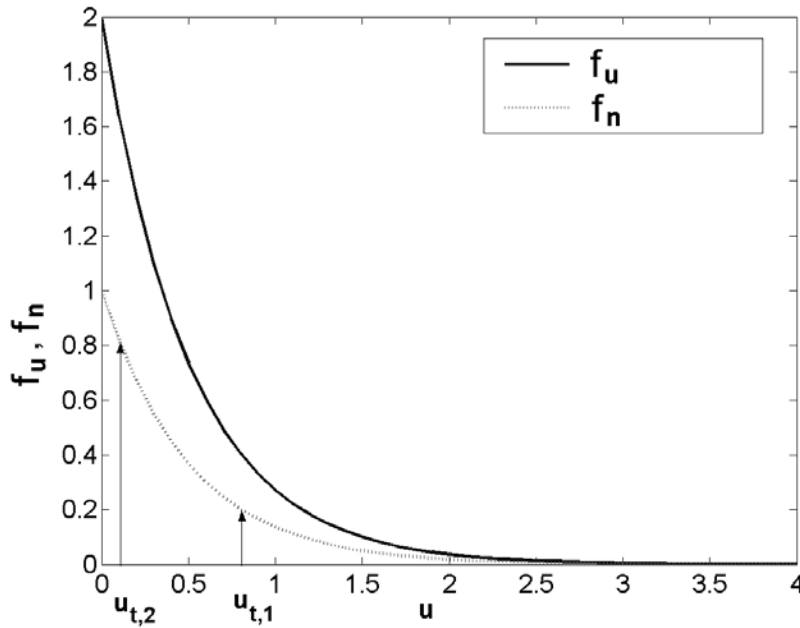
$$u_t = 4 R_{f,1} \quad (3.15)$$

bağıntısı ile hesaplanır. Eğer ilk hesaplamada $u_{t,1} \cong 0.11$ olduğu varsayılırsa, Şekil 3.3'den de görüleceği üzere bu değer $f_n \cong 0.8$ değerine karşılık gelmektedir. Bir

diğer hesaplamada ise $u_{t,2} \cong 0.8$ 'nin olduğu varsayılırsa, bu değer de $f_n \cong 0.2$ değerine karşılık gelmektedir. Test hızının kabul edilebilmesi için,

$$f_n(u_t) > R_{f,2} , \quad (3.16)$$

şartını karşılaması gerekmektedir. Dolayısı ile $u_{t,1}$ ve $u_{t,2}$ test hızları karşılaştırıldığında, daha büyük bir $f_n(u_{t,1}) \cong 0.8$ değeri veren $u_{t,1}$ test hızının kabul edilme olasılığının, daha küçük bir $f_n(u_{t,2}) \cong 0.2$ değeri veren $u_{t,2}$ test hızına oranla daha yüksek olduğu görülmektedir. Bu çıkarım düşük hızların daha yüksek olasılıkta olduğu f_u hız dağılım fonksiyonu ile benzerlik göstermektedir. Kabul-red yönteminin çok sayıda test hızına uygulanması ile f_u hız dağılım fonksiyonu büyük bir oranda örneklenebilmektedir.

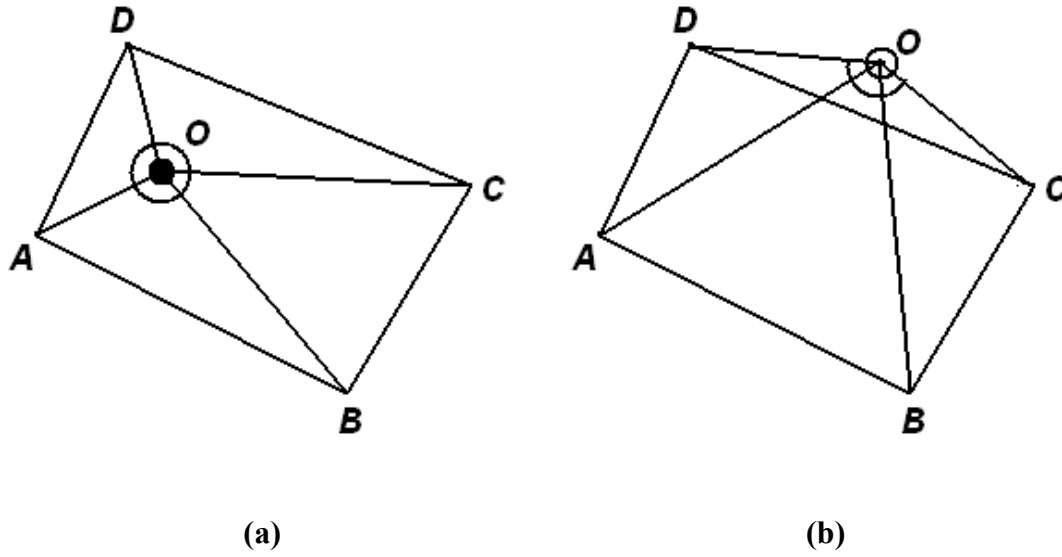


Şekil 3.3 : Kabul-red yönteminde hız örneklemeinin hız dağılım fonksiyonu kullanılarak gerçekleştirilmesi.

3.4 Bir DSMC Molekülünün Hücre İçinde Olup Olmadığının Hesaplanması

DSMC yönteminde her molekül hareket safhası sonunda, temsilci moleküllerin konuşlandığı hücreler hesaplanmaktadır. Çarpışma safhasında bu bilgi kullanılarak

aynı hücrede yer alan DSMC molekülleri birbirleri ile çarpıştırılırlar. Yine makroskobik değerlerin hesaplanması safhasında da aynı hücrede yer alan DSMC moleküllerinin mikroskobik bilgilerinden yararlanılmaktadır. Bu çalışmada bir DSMC molekülünün dörtgen şeklinde bir hücre içinde olup olmadığını anlamak için açı yöntemi kullanılmaktadır. Yöntemin daha kolay anlaşılabilmesi için kullanılan dörtgen hücreler ve DSMC molekülleri Şekil 3.4’de gösterilmiştir.



Şekil 3.4 : Bir DSMC molekülü için hücre bilgisi kontrolü. (a) Molekül hücre içinde ve toplam açılar $= 360^\circ$. (b) Molekül hücre içinde değil ve toplam açılar $\neq 360^\circ$.

Bir hücre içinde olup olmadığı araştırılacak DSMC molekülünün merkezi ile o hücrenin köşeleri doğrular kullanılarak birleştirilir. İkinci aşamada bu doğrular arasında kalan açılar toplamı hesaplanır,

$$\alpha = \hat{A}OB + \hat{B}OC + \hat{C}OD + \hat{D}OA \quad . \quad (3.17)$$

Eğer bu açı $\alpha = 360^\circ$ ise DSMC molekülü hücre içindedir, $\alpha \neq 360^\circ$ durumunda ise, DSMC molekülünün hücre dışında olduğu anlaşılır.

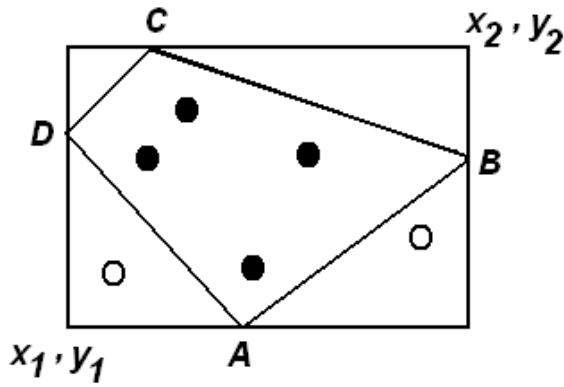
3.5 DSMC Hücrelerinin İçine DSMC Moleküllerinin Yerleştirilmesi

DSMC yönteminde hesaplamaya her hücreye başlangıç koşullarına uygun olarak molekül yerleştirilmesi ile başlanır. İlk aşamada moleküller hücre içine konum olarak

rasgele yerleştirilirler. Bu yerleştirme aşamasında uygulanan yöntem aşağıda olduğu gibidir. Önce içine DSMC molekülleri yerleştirilecek hücrenin en küçük ve en büyük x_1, y_1 ve x_2, y_2 koordinat değerleri tespit edilir. Daha sonra DSMC molekülleri bu koordinatlar arasında kalacak şekilde aşağıda yer alan,

$$\begin{aligned} x_m &= x_1 + (x_2 - x_1) R_{f,1} \quad , \\ y_m &= y_1 + (y_2 - y_1) R_{f,2} \quad , \end{aligned} \quad (3.18)$$

bağıntılar kullanılarak Şekil 3.5’de olduğu gibi rasgele yerleştirilir. Yerleştirilen DSMC molekülün $ABCD$ hücresinde yer alıp almadığı bir önceki bölümde açıklanan aç yöntemini kullanılarak hesaplanır. Eğer bu molekül aynı zamanda hücre içinde de yer alıyorsa kaydedilir. Eğer hücre dışında ise o molekül red edilir. Bu işleme hücreye olması gereken sayıda molekül yerleştirilene kadar devam edilir.

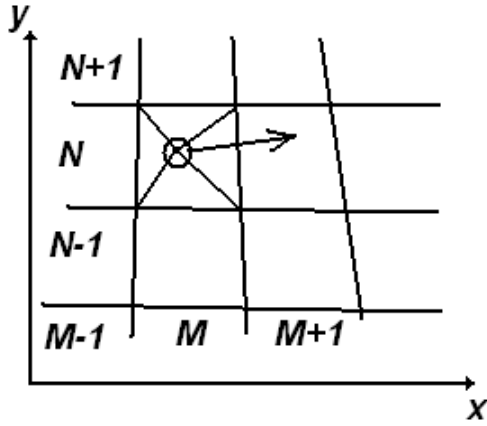


Şekil 3.5 : Bir DSMC hücresine molekül yerleştirilmesi. İçleri siyah ile gösterilen moleküller $ABCD$ dörtgeni içinde olduğu için kabul edilirken, içi boş olarak gösterilen moleküller red edilmişlerdir.

3.6 DSMC Moleküllerinin Hücreden-Hücreye Takibi

Bu çalışmada yapısal ağlar kullanıldığı için önce molekülün aynı hücrede kalıp kalmadığı araştırılmakta ve eğer hücreyi terk etmişse hangi kenardan terk ettiği bulunmakta ve yapısal ağ özelliği kullanılarak molekül artık o kenara komşu hücrede aranmaktadır. Molekülün hücreyi hangi kenardan terk ettiği ise Şekil 3.6’dan

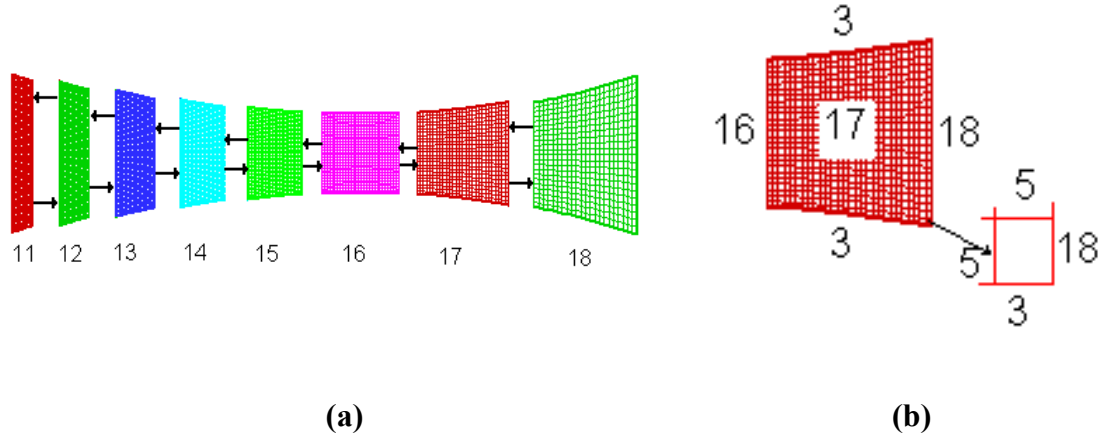
görülebileceği üzere yine molekülün hız vektörünün, o molekülü hücre köşelerine birleştiren açılardan hangisinin içinde kaldığı bilgisinden hesaplanmaktadır.



Şekil 3.6 : Bir DSMC molekülünün hangi kenardan hücreyi terk ettiği biliniirse yapısal ağ özelliği kullanılarak hangi hücreye geçtiği bulunabilir. Bu örnekte molekül N, M hücrelerini sağ kenardan terk ettiği için N, M+1 hücresine geçmiştir.

3.7 Alt Bölgelerin ve Sınırların Markalanması

Gaz akış alanı önce paralel çalışacak işlemci sayısına göre alt bölgelere ayrılır. Takiben her bir alt bölge $N > 10$ olacak şekilde bir tam sayı ile tanımlanır. Bunun nedeni daha sonra da görüleceği üzere 10 dan daha ufak tam sayıların sınır koşulları için ayrılmasıdır. Örneğin 1 akım sınır koşulunu, 3 duvar sınır koşulunu, 5 ise boşluk sınırı ifade etmektedir. Şekil 3.7’den de görüleceği gibi alt bölgeleri birbirine bağlayan sınır kenarlara, komşu alt bölgenin numarası verilir. Böylelikle sınır bölgeden dışarı çıkan molekülün hangi alt bölgeye geçtiği bilgisi kolayca elde edilir. Örneğin 17 numaralı alt bölgeyi sağ kenarından terk eden molekül, 18 numaralı kenardan geçtiği için bu molekül 18 numaralı alt bölgeden sorumlu işlemciye aktarılır. Aynı şekilde 17 numaralı alt bölgeyi 16 numaralı kenardan terk eden molekül ise 16 numaralı alt bölgeden sorumlu işlemciye gönderilir. 3 numaralı kenara gelen molekül ise bu sayının temsil ettiği duvar sınır koşuluna uygun bir şekilde yansımaya tabi tutulur. 5 numaralı kenara gelen molekül herhangi bir engelle karşılaşmadan sınırdan geçer. 1 numaralı kenarı geçen molekül ise silinir.



Şekil 3.7 : 2-boyutlu ıraksak-yakınsak mikro-lüle. (a) Paralel çalışma için alt bölgelere ayrılması. (b) Sağda alt bölge ve hücre kenarlarının markalanması.

3.8 MPI Uygulamaları

Bu çalışmada DSMC yöntemi paralelleştirilerek, her bir alt bölgenin paralel çalışan farklı işlemcilerde hesaplanması sağlanmaktadır. Paralel çalışma için farklı işlemci mimarilerinde çalışma kolaylığı sağlayan mesaj geçme arayüzü (MPI) kütüphanelerinden faydalanılmaktadır. MPI başlangıç komutları Şekil 3.8’de gösterilmektedir. Bu çalışmada Fortran geliştirme ortamı için hazırlanmış MPIF.H kütüphanesi kullanılmaktadır. MPI_INIT komutu ile MPI kütüphanesi devreye alınmaktadır. MPI_COMM_RANK komutu ile her işlemciye 0 ile N-1 arasında bir numara atanmaktadır. Böylece her işlemci donanım içinde kaçınıcı işlemci olduğundan bağımsız olarak bir MPI numarası almaktadır. N kullanılacak işlemci sayısını ifade etmektedir. MPI_COMM_SIZE komutu ile kaç tane işlemci kullanıldığını hesaplanmaktadır.

```

INCLUDE 'MPIF.H'
CALL MPI_INIT(IERR)
CALL MPI_COMM_RANK(MPI_COMM_WORLD,RANK,IERR)
CALL MPI_COMM_SIZE(MPI_COMM_WORLD,SIZE,IERR)

```

Şekil 3.8 : MPI kütüphanesi başlangıç komutları.

Daha sonra Şekil 3.9’da görüldüğü gibi MPI tarafından işlemciler arasında kullanılması planlanan veri yapılarının oluşturulması gerekmektedir. Bu MPI’a özel veri yapıları Fortran tarafından kullanılan veri yapılarından türetilmektedir. Amaç çok sayıda veriyi tek seferde göndermek ve veri aktarım süresini mümkün olduğunca kısaltmaktır.

```
CALL MPI_TYPE_CONTIGUOUS(10,MPI_REAL8,MTYPE,IERR)
CALL MPI_TYPE_COMMIT(MTYPE,IERR)
```

Şekil 3.9 : MPI kütüphanesi yeni veri yapıları oluşturma komutları.

MPI_SENDRECV komutu ile işlemciler arasında bilgi akışı ve eş zamanlı çalışma ortamı sağlanmaktadır. Paralel DSMC yönteminde alt bölgelerde farklı FTMO (fiziksel-temsilci molekül oranları (F_N)) kullanılabildiğinden dolayı ilk aşamada Şekil 3.10’da olduğu gibi tüm komşu alt bölgeler birbirleri ile bu bilgiyi paylaşırlar. Bu bilgi ilerde komşu alt bölgeden aktarılabilecek molekül sayısının hesaplanmasında kullanılacaktır.

```
CALL MPI_SENDRECV(FNUM,1,MPI_REAL8,LLN,TAG,FTMO(KK),1,MPI_REAL8,LLN,TAG,
MPI_COMM_WORLD,STATUS,IERR)
```

Şekil 3.10 : İşlemciler arasında FTMO (F_N) bilgisinin aktarılması.

DSMC moleküler esaslı bir yöntem olduğundan, alt bölge değiştiren DSMC moleküllerinin işlemciler arasında aktarımı gerekmektedir. Molekül hareket safhası sonunda alt bölge sınırı dışına çıktığı saptanan her molekül gidecekleri alt bölgeden sorumlu işlemciye aktarılırlar. Aynı anda bu bölgeden gelen moleküllere ait bilgiler de alınır. Bu bilgi aktarımını sağlamak için önce komşu işlemcilere aktarılabilecek molekül sayı bilgisi eş zamanlı olarak Şekil 3.11’de olduğu gibi gönderilir ve alınır. Bu bilgilerin ışığı altında molekül bilgilerinin aktarımı için yeni veri yapıları hazırlanır. Yeni veri yapılarına kaydedilen bu moleküller, yine eşzamanlı olarak işlemciler arasında gönderilir ve alınırlar.

```

CALL MPI_SENDRECV(CIKANMOLSAY(KK), 1, MPI_INTEGER4, LLN, TAG, GIRENMOLSAY(KK), 1,
                  MPI_INTEGER4, LLN, TAG, MPI_COMM_WORLD, STATUS, IERR)
CALL MPI_TYPE_VECTOR(CIKANMOLSAY(KK), 1, 6, MTYPE, VM2TYPE, IERR)
CALL MPI_TYPE_COMMIT(VM2TYPE, IERR)
CALL MPI_TYPE_VECTOR(GIRENMOLSAY(KK), 1, 6, MTYPE, VM2TYPE, IERR)
CALL MPI_TYPE_COMMIT(VM2TYPE, IERR)
CALL MPI_SENDRECV(CIKANMOLLS(KK, 1), 1, VM2TYPE, LLN, TAGG, GIRENMOLLS(KK, 1), 1, VM2TYPE,
                  LLN, TAGG, MPI_COMM_WORLD, STATUS, IERR)

```

Şekil 3.11 : İşlemciler arasında önce aktarılabacak molekül sayılarının, takiben molekül bilgilerinin gönderilip/alınması.

Bölgeler arası molekül transferlerinin tek işlem ile tamamlanamama durumu mevcuttur. Bunun nedeni bölge değiştiren bazı moleküllerin duvardan yansımalar nedeni ile geldiği bölgeye geri dönmesi veya hareket safhası içinde bir üçüncü bölgeye geçebilmesidir. Bu nedenle molekül aktarımları bir döngü içine yerleştirilir ve her aktarım safhası sonunda bölge değiştirmesi gereken toplam molekül sayısı Şekil 3.12’de görüldüğü üzere MPI_ALLREDUCE komutu ile kontrol edilir. Bölgeler arası molekül aktarım döngüsüne bölge değiştirecek molekül kalmayana kadar devam edilir.

```

CALL
MPI_ALLREDUCE(CIKANMOLSAY, TSAY, 6, MPI_INTEGER4, MPI_SUM, MPI_COMM_WORLD, IERR)

```

Şekil 3.12 : Bölge değiştirecek toplam molekül sayısının kontrol edilmesi.

MPI kütüphanelerinin kullanımına ihtiyaç kalmaması durumunda MPI_FINALIZE komutu kullanılmaktadır.

3.9 Bölgeler Arasında Farklı Fiziksel-Temsilci Molekül Oranı Kullanılması

Böylece farklı işlemcilerde çözümlenen alt bölgelerde, farklı fiziksel-temsilci molekül oranları (F_N) ve farklı hücre boyutları kullanılabilmektedir. Böyle bir durumda bir alt bölgeden diğer bir alt bölgeye geçen temsilci moleküllerin sayılarında bazı değişiklikler yapılmasına ihtiyaç vardır. Bölge değiştiren bazı

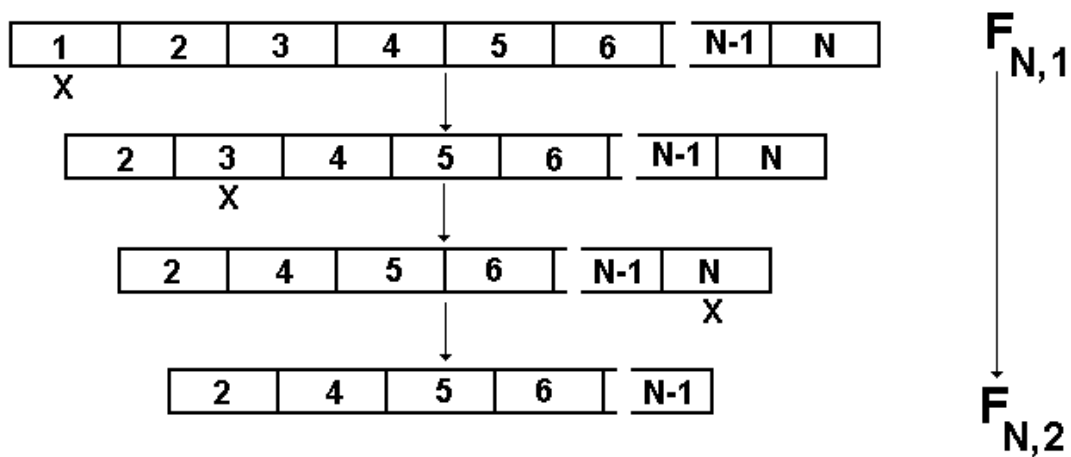
moleküllerin silinmesi, bazılarının da kopyalanarak sayısının artırılması gerekmektedir.

Eğer molekül aktarımı yapılacak iki bölgenin fiziksel-temsili molekül oranları (F_N) birbirinden farklı ise, ilk aşamada moleküllerin aktarılacağı bölge ile moleküllerin gönderildiği bölgenin (F_N) 'leri arasında bir karşılaştırma yapılır. Eğer moleküllerin aktarıldığı bölgede (F_N) daha büyük ise, aktarılan molekül sayısının küçültülmesi gerekmektedir. Bu amaçla da bazı moleküllerin silinmesi gerekmektedir. Silinecek molekül sayısı ΔN için,

$$N_2 = \text{int} \left(N_1 \cdot \frac{F_{N,1}}{F_{N,2}} + 0.5 \right) , \quad (3.19)$$

$$\Delta N = N_1 - N_2 ,$$

bağıntıları kullanılmaktadır. Burada N_2 , N_1 , ($F_{N,1}$), ($F_{N,2}$) sırası ile yeni bölgeye aktarılan molekül sayısı, eski bölgeden çıkan molekül sayısı, eski bölge ve yeni bölge fiziksel-temsili molekül oranlarıdır. int fonksiyonu gerçek bir sayının kesir kısmını silerek sadece tam sayı kısmını veren fonksiyonu göstermektedir. $F_{N,1}$ bölgesinden $F_{N,2}$ bölgesine aktarılması gereken N_1 adet molekülden, rasgele seçilen ΔN adet molekül silinir. Şekil 3.13'de görüldüğü gibi yeni bölgeye sadece N_2 adet molekül yerleştirilir.



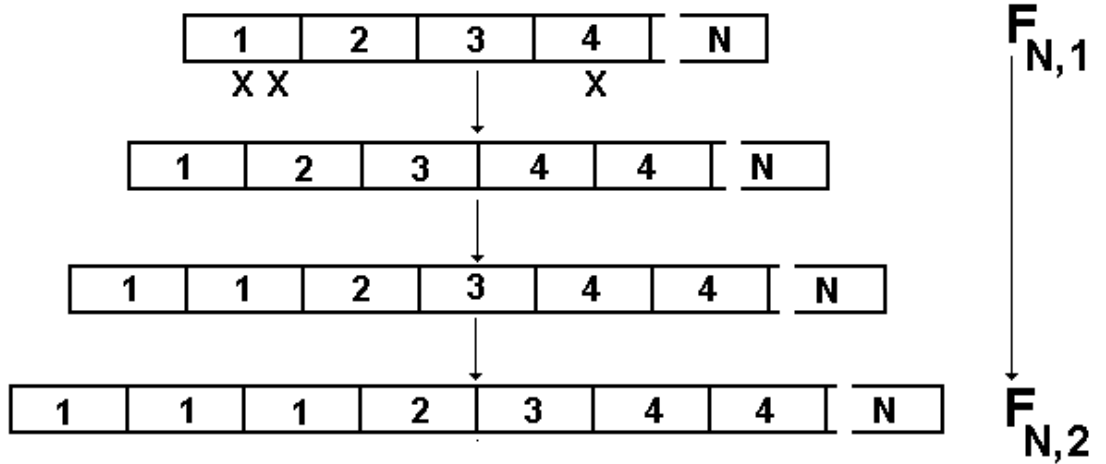
Şekil 3.13 : $F_{N,1} < F_{N,2}$ durumunda, $F_{N,1}$ bölgesinden gelen N adet molekül, $F_{N,2}$ bölgesine ΔN kadar molekül eksiltilerek aktarılmaktadır.

Eğer moleküllerin aktarılacağı bölgede $F_{N,2}$, moleküllerin geldiği bölgenin $F_{N,1}$ 'sından daha düşük ise bu sefer de aktarılacak molekül sayısının artırılması gerekmektedir. Molekül arttırma işlemi için önce kaç adet molekül ilave edilmesi (ΔN) gerektiği aşağıdaki bağıntılar,

$$N_2 = \text{int} \left(N_1 \cdot \frac{F_{N,1}}{F_{N,2}} + 0.5 \right) , \quad (3.20)$$

$$\Delta N = N_2 - N_1 ,$$

ile hesaplanmaktadır. Bu hesaplanan ΔN kadar molekül, bölgeyi terk eden moleküller arasından rasgele seçilir ve tüm moleküller Şekil 3.14'de görüldüğü gibi yeni bölgeye aktarılırlar.



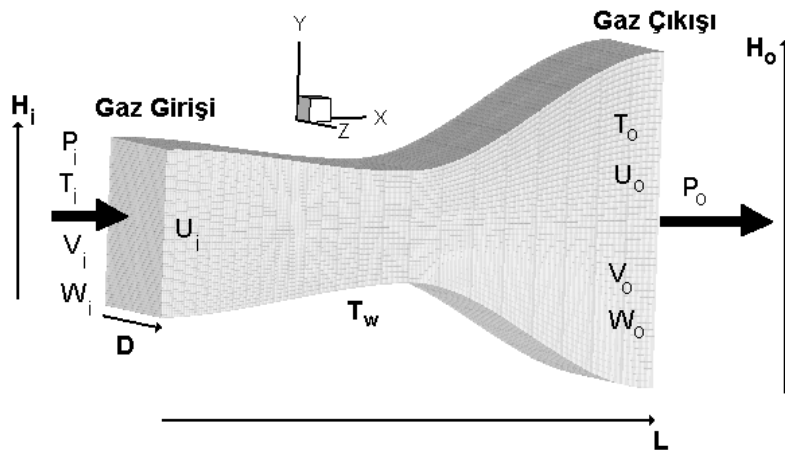
Şekil 3.14 : $F_{N,1} > F_{N,2}$ durumunda, $F_{N,1}$ bölgesinden gelen N adet molekül, $F_{N,2}$ bölgesine ΔN kadar molekül ilave edilerek aktarılmaktadır.

3.10 DSMC Yönteminde 3-Boyutlu Hesaplamalar

MEMS cihazlarının kapasite ve yetenekleri arttıkça mikro-uydu, nano-uydu ve piko-uydular kullanıcılar için geleneksel uydulara kıyasla daha çekici hale gelmeye başlamışlardır. Küçük boyutta uyduların yörünge ayarları için geliştirilen ve önerilen itki sistemleri arasında soğuk gaz esaslı mikro itki sistemleri de bulunmaktadır (Alexeenko ve diğ., 2002; Alexeenko ve diğ., 2006; Wang ve Li, 2004; Menzies ve

diğ., 2002). Mikro-lüleler de bu mikro itki sistemlerinin doğal bir parçasıdır. Güvenilir itki sistemleri geliştirmek için mikro-lülelerin tasarım değerlerinin güvenilir yöntemlerle hesaplanmasına gereksinim vardır. Özgül itme ve itki değerlerinin en etkin değerlere getirilebilmesi için mikro-lüle geometrisinin ve kullanılması tasarlanan gazın en doğru şekilde belirlenmesi konusunda yoğun bir çalışma sürdürülmektedir. Mikro-lüleler daima 3-boyutlu yapılar olup, yüzey alanlarının hacimlerine oranı geleneksel ve simetrik eksenli lülelere kıyasla oldukça yüksektir (Wang ve Li, 2004). Bunun sonucunda diğer mikro akışlarda olduğu gibi viskozitenin etkisi artar ve verimlilik 2-boyutlu lülelere nazaran daha az olur. Dolayısı ile mikro-lüleler için 3-boyutlu çözümleme yeteneği olan DSMC yöntemi esaslı çözümler geliştirilmesine ve kullanılmasına ihtiyaç duyulmaktadır.

3-boyutlu DSMC çözücüsü, 2-boyutlu DSMC çözücüsünde kullanılan yöntemler temel alınarak geliştirilmekle birlikte, ilave boyuttan dolayı bazı ayrımlar da içermektedir. 3-boyutlu DSMC çözücüsünde artan hesaplama süresini kısaltmak için ayrıntıları daha önce Bölüm 2’de belirtilen koordinat sistemleri dönüşümünden de faydalanılmıştır. Wang ve Li (2004)’den alınan ve hesaplama süresini kısaltmak amacı ile her bir boyutta 1/10 oranında küçültülen soğuk gaz mikro-lülesi Şekil 3.15’de gösterilmiştir .



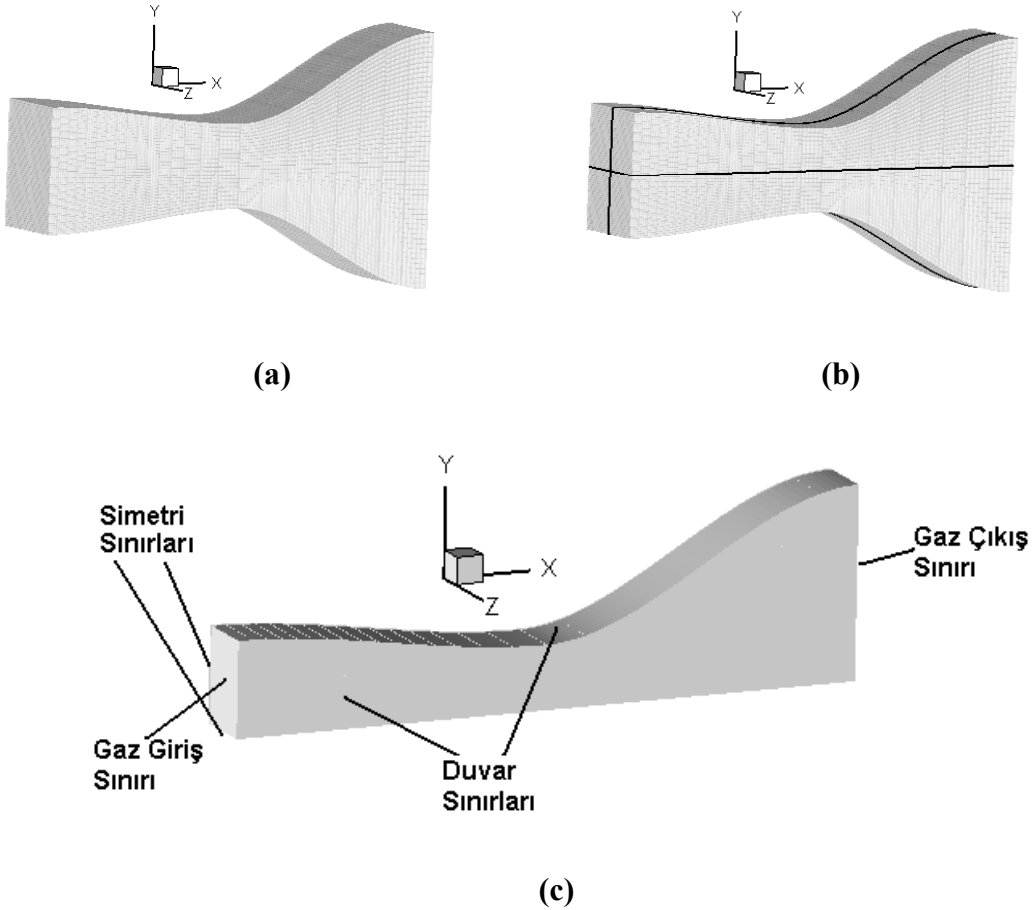
Şekil 3.15 : Basınç sınır koşulları uygulanan 3-boyutlu bir soğuk gaz mikro-lülesi.

Bu mikro-lülenin boyutları $L = 20 \mu m$, $D = 4 \mu m$ olup, yüksekliği $H = Y(x)$,

$$Y = a_3 x^3 + a_2 x^2 + a_1 x + a_0 \quad ,$$

$$\left(\frac{dY}{dx} \right)_{x=0}^{x=10 \mu m} = 0 \quad , \quad \left(\frac{dY}{dx} \right)_{x=10 \mu m}^{x=20 \mu m} = 0 \quad , \quad (3.21)$$

Hermite çokterimlisi (polinomu) ile ifade edilir. Bu çokterimlinin katsayıları, $0 \leq x \leq 10 \mu m$ arasında, $a_3 = 2 \times 10^9$, $a_2 = -3 \times 10^4$, $a_1 = 0$, $a_0 = 3 \times 10^{-6}$, $10 \mu m \leq x \leq 20 \mu m$ arasında, $a_3 = -8 \times 10^9$, $a_2 = 3.6 \times 10^5$, $a_1 = -4.8$, $a_0 = 2.2 \times 10^{-5}$ olarak verilmektedir. Mikro-lüle x-z ve x-z düzlemlerine göre simetriktir ve y-z düzleminde kesit alanı dikdörtgendir (Şekil 3.16). DSMC yönteminde simetri sınır şartlarının uygulanması ile mikro-lülenin sadece $\frac{1}{4}$ kısmında hesaplama yaparak çözümlemeyi tamamlamak mümkün olmaktadır.

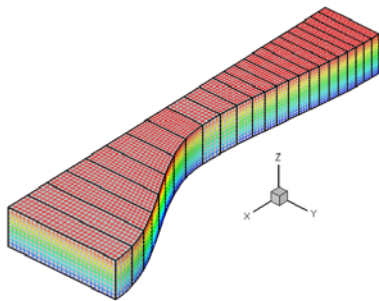


Şekil 3.16 : Mikro-lüle geometrisi. (a) Tam lüle. (b) Simetri düzlemleri. (c) Hesaplama bölgesi.

3-boyutlu DSMC çözücüsü daha önce ayrıntıları belirtilen koordinat sistemi dönüşümünü kullanmaktadır. Bu koordinat sistemi dönüşümü sayesinde x-y düzleminde mikro-lülenin y-ekseni boyunca olan sınırları $y = y(x)$ analitik fonksiyonu olarak ifade edilebildiği ve bu mikro-lülenin x-z ve y-z düzlemindeki kesit alanları dikdörtgen olduğu için, mikro-lülenin $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$ koordinat sistemindeki şekli kenar uzunlukları 0-1 arasında olan boyutsuz bir küpe dönüştürmek mümkündür. Daha önce olduğu gibi molekül hareket safhası fiziksel x-y-z koordinat sisteminde gerçekleştirilirken, moleküllerin hücre bilgisi ise basit aritmetik işlemler kullanılarak $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$ koordinat sisteminde hesaplanmaktadır.

3-boyutlu DSMC çözücüsüne yüksek hesaplama yükü nedeni ile paralel mimarili sistemlerde çalışma yeteneği sağlanması gerekir. 2-boyutlu DSMC çözücüsüne kıyasla daha fazla hesaplama yükü getirdiği için, 3-boyutlu DSMC çözücüsünde hem daha çok sayıda alt bölge kullanmak, hem de bu alt bölgeleri sadece tek eksende değil, yükün paralel çalışan işlemcilere daha dengeli dağıtılabilmesi için diğer 2 eksen boyunca da oluşturmak gerekmektedir. Bu alt bölgelere ayırma işleminde eksen sayısı arttıkça alt bölgelerin komşu bölge sayısı da artmakta ve bu komşu alt bölgeler arası haberleşme için çok boyutlu mesaj geçme arayüzü teknikleri kullanmak gerekmektedir (Sengil ve Edis, 2007a).

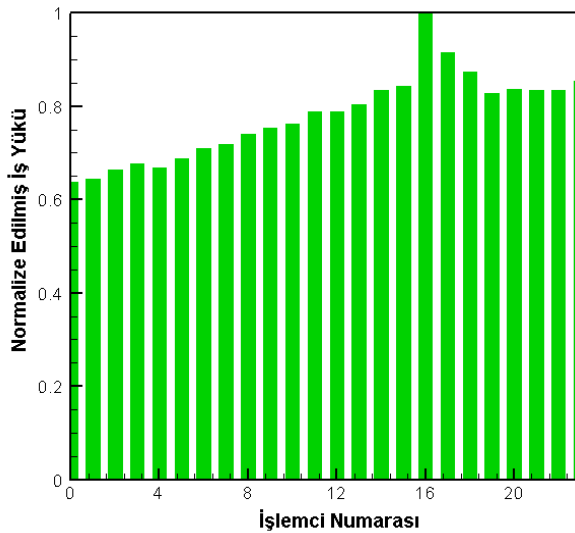
Başlangıçta bir ön program kullanarak, kullanılacak işlemci sayısı ve kaç eksen boyunca alt bölge oluşturulacağına bağlı olarak, gaz akış bölgesi alt bölgelere ayrılır. 3-boyutlu mikro-lüleye ait hesaplama bölgesi Şekil 3.17’de görüldüğü üzere x-ekseni boyunca önceden belirlenen işlemci sayısı kadar alt bölgeye ayrılır (Sengil ve Edis, 2007b) .



Şekil 3.17 : Hesaplama bölgesinin 24 (24x1x1) alt bölgeye, 1-boyutlu bölgelere ayırma yöntemi ile ayrılması.

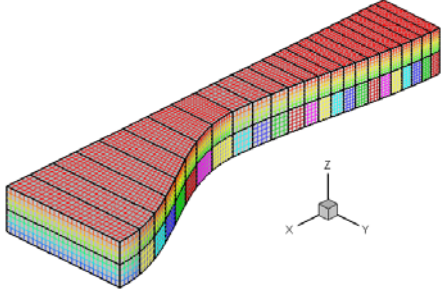
Her alt bölgenin molekül aktarımları için sınır komşusu 2 alt bölge ile haberleşmesi yeterli olmaktadır. Yine her alt bölgede farklı hücre boyutları ve fiziksel-temsilci molekül sayısı oranları kullanılabilmekte ve alt bölge değiştiren moleküllerin sayısı alt bölgelere bağlı olarak azaltılmakta veya çoğaltılmaktadır.

DSMC yönteminin dinamik karakteri nedeni ile ön program tarafından işlemciler arasında eşit olarak paylaştırılan iş yükü zaman içinde değişmektedir. Akışın daimi hale gelmesi ile işlemci temelinde hesaplanan iş yükü her işlemci için farklı olabilmektedir. Akışın başında ön program tarafından 24 adet işlemciye eşit olarak dağıtılan iş yüklerinin akışın daimi hale gelmesi ile geçirdiği değişim Şekil 3.18’de gösterilmektedir. İşlemci başına düşen iş yükü alt bölgede akışın daimi hale gelmesi ile hesaplanan temsilci molekül sayısına ilişkilendirilmiştir (Kim ve diğ, 2004).



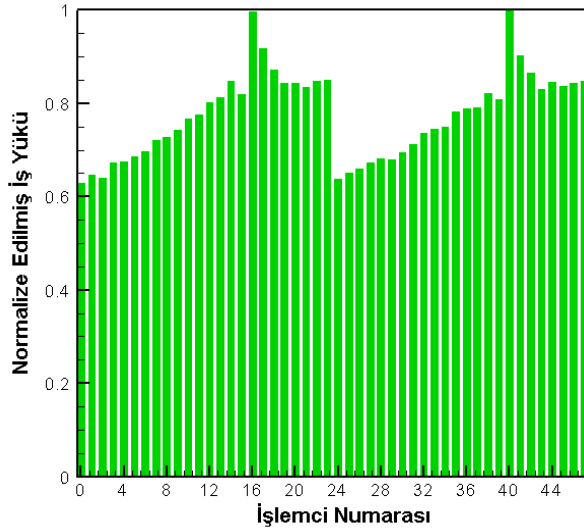
Şekil 3.18 : Statik yük dengeleme yöntemi ile 24 işlemci arasında eşit olarak paylaştırılan toplam yükünün, akışın daimi hale gelmesi ile paylaşımında meydana gelen değişim.

İkinci aşamada ikinci eksen boyunca da alt bölgeler oluşturularak alt bölge sayısı 48’e çıkartılmıştır. Bu alt bölge yapısında moleküller sadece gaz akış yönünde değil aynı zamanda akış yönüne dik bir eksen de alt bölgeler arasında aktarılabilirler. Bu 48 alt bölge (Şekil 3.19), 48 adet paralel çalışan işlemcide çözümlenmektedir.



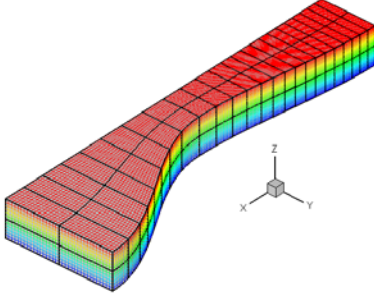
Şekil 3.19 : Hesaplama bölgesinin 48 (24x2x1) alt bölgeye 2-boyutlu bölgelere ayırma yöntemi ile ayrılması.

Yine 48 işlemci arasında ön program tarafından başlangıçta eşit olarak paylaştırılan yükün, akışın daimi hale gelmesi ile aldığı son durum Şekil 3.20’de gösterilmektedir.



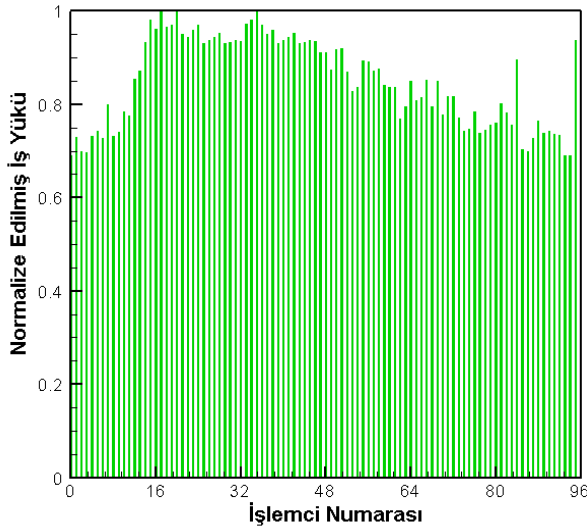
Şekil 3.20 : Statik yük dengeleme yöntemi ile 48 işlemci arasında eşit olarak paylaştırılan toplam yükün, akışın daimi hale gelmesi ile paylaşımında meydana gelen değişim.

En son olarak hesaplama bölgesi yine bir ön program kullanarak işlemciler arasında yükün eşit dağılımı temelinde hem gaz akış yönünde, hem de bu yöne dik 2 ekseninde daha bölünerek Şekil 3.21’de olduğu gibi 96 alt bölgeye ayrıldı. Her bir alt bölge yine paralel çalışan 96 işlemcide akış daimi hale gelene kadar çözümlendi.



Şekil 3.21 : Hesaplama bölgesinin 96 (24x2x2) alt bölgeye 3-boyutlu bölgelere ayırma yöntemi ile ayrılması.

Yine 96 işlemci arasında ön program tarafından akışın başında eşit olarak paylaştırılan yükün, akışın daimi hale gelmesi ile aldığı son durum Şekil 3.22’de gösterilmektedir.



Şekil 3.22 : Statik yük dengeleme yöntemi ile 96 işlemci arasında eşit olarak paylaştırılan toplam yükün akışın daimi hale gelmesi ile paylaşımında meydana gelen değişim.

3-boyutlu DSMC çözücüsünde de görüldüğü üzere statik yük dengeleme yöntemi kullanılarak programın başında eşit olarak dağıtılan yük, daha sonra zaman ilerledikçe DSMC yönteminin dinamik karakteri nedeni ile değişim göstermektedir.

Çok boyutlu alt bölgelere ayırma yöntemi ile Çizelge 3.6'den de görüleceği üzere yük dengelemesinde bir iyileşme sağlamak mümkün olmaktadır.

Çizelge 3.6 : Alt bölgelerin farklı işlemcilerde çözümü sonucunda elde edilen işlemci başına normalize edilmiş yük paylaşımı.

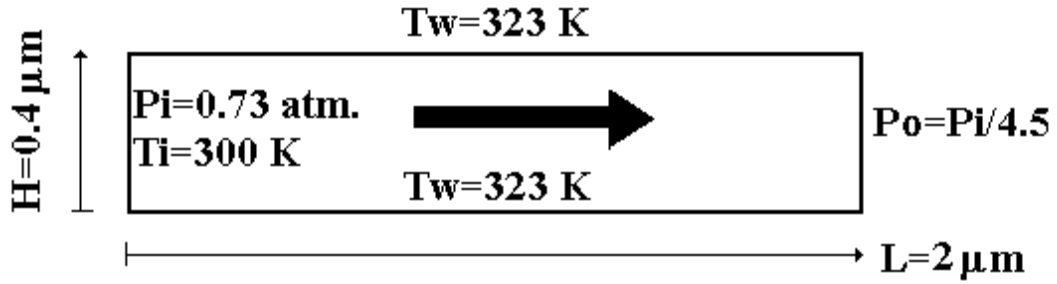
Boyut	İşlemci Sayısı	DSMC Molekül Sayısı	Zaman Adımı	Ortalama İşlemci Yüğü
1	24	555000	9000	0.78
2	48	499000	9000	0.78
3	96	4224000	50000	0.85

4. ÇÖZÜM NETİCELERİ VE DOĞRULANMASI

4.1 2-Boyutlu Mikro-Kanalda Gaz Akışı

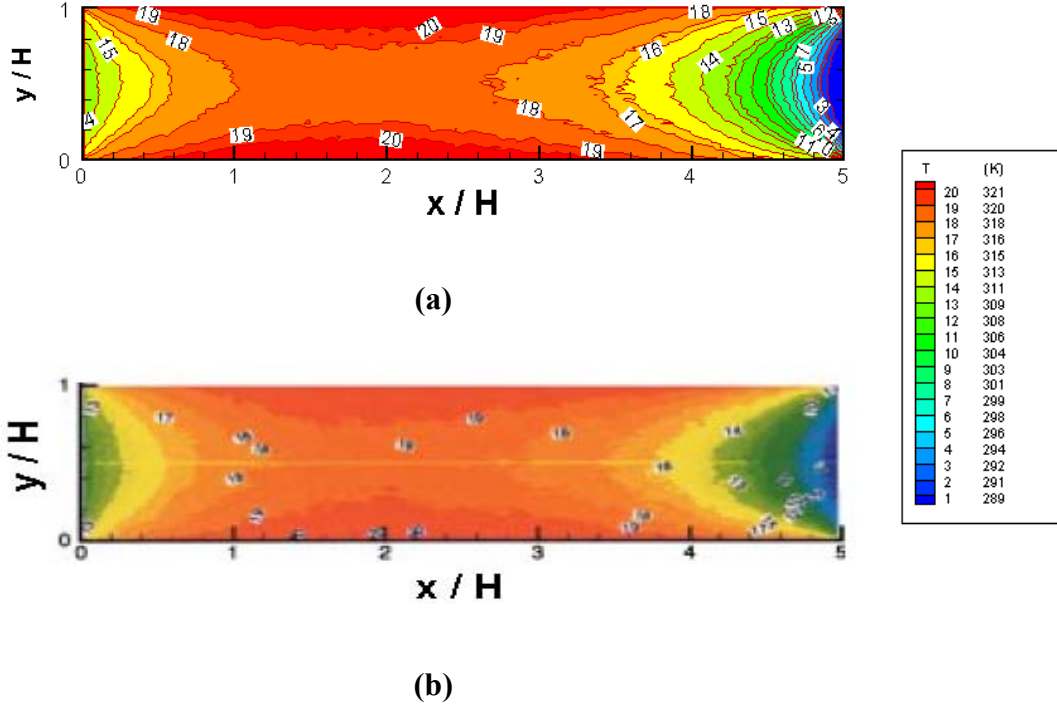
4.1.1 Pouiselle akışı

Bu çalışmada Fang ve Liou (2002)'den alınan ve 2 paralel levha arasında basınç farkından kaynaklanan azot gaz akışı ile ilgili bir örnek problem incelenmiş olup, gaz giriş ve çıkış bölgesinde oluşan eksik sınır koşulları içerden gaz akış bölgesinden tamamlanmıştır. Kanalın yüksekliği $H = 0.4 \mu m$, boyu ise $L = 2 \mu m$ dir. Girişte gazın sıcaklığı $T_i = 300 K$ olup, kanal boyunca duvar sıcaklığı $T_w = 323 K$ dir. Gazın kanala giriş basıncı $P_i = 0.72 atm.$, çıkış basıncı ise $P_o = P_i / 4$ olarak alınmaktadır. Akış geometrisi ve sınır koşulları Şekil 4.1'de gösterilmiştir. Molekül çarpışmalarında VHS modeli, gaz-duvar etkileşimi için ise dağınık yansıma modeli kullanılmıştır.

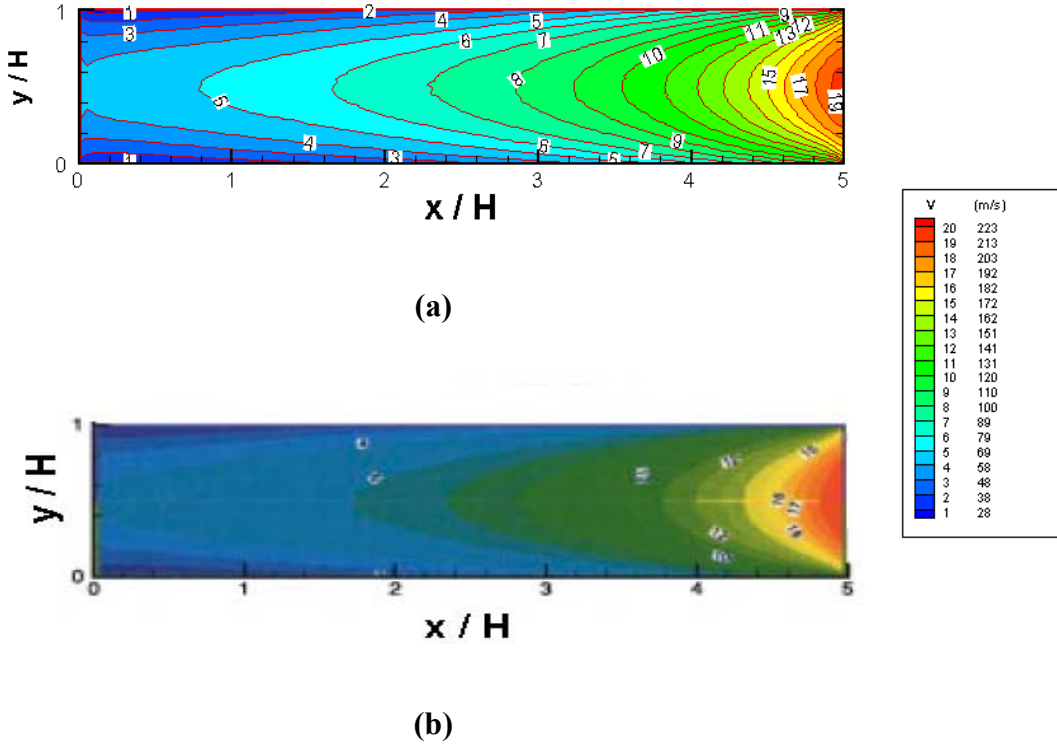


Şekil 4.1 : 2-boyutlu mikro-kanalda Poisselle akışı.

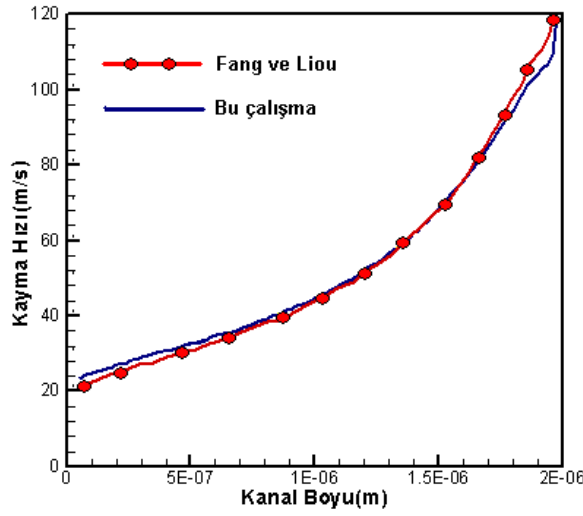
Sonuçlar Şekil 4.2'de olduğu gibi önce sıcaklık ve daha sonra Şekil 4.3'de gösterildiği gibi gaz akış hızının akış yönündeki bileşeni cinsinden çevre çizgileri (kontur) kullanılarak karşılaştırılmıştır. Kanal duvarı boyunca oluşan kayma hızları ise Şekil 4.4'de karşılaştırmalı olarak gösterilmiştir.



Şekil 4.2 : 2-boyutlu mikro-kanalda sıcaklık değerleri. (a) Bu çalışma. (b) Fang ve Liou çalışması. Her iki çalışmada da aynı çevre çizgisi (kontur) değerleri temel alınmıştır.



Şekil 4.3 : 2-boyutlu mikro-kanalda kanal boyunca gaz akış hızı değerleri. (a) Bu çalışma. (b) Fang ve Liou çalışması. Her iki çalışmada da aynı çevre çizgisi (kontur) değerleri temel alınmıştır.

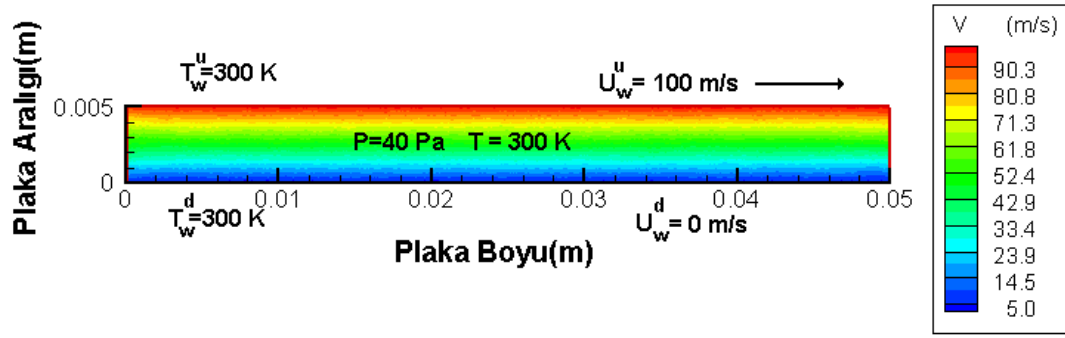


Şekil 4.4 : 2-boyutlu mikro-kanalda kanal duvarı boyunca hesaplanan kayma hızı değerleri.

Hesaplanan değerler referans çalışmada elde edilen neticeler ile karşılaştırıldığında benzer sonuçlar elde edildiği görülmektedir. Bu çalışmada hesaplama alanı içinde 6000 adet hücre oluşturularak yaklaşık 300000 adet DSMC molekülü kullanılmıştır. Akışın daimi hale gelerek hesaplamaların tamamlanması tek Centrino işlemcili (1.4 GHz.) bilgisayarda 40 saat sürmüştür.

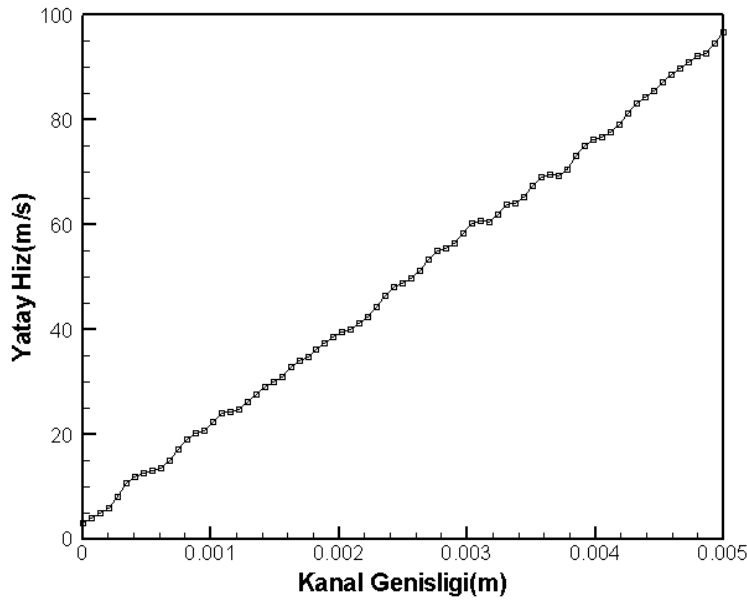
4.1.2 Couette akışı

Bu çalışmada Couette akışlarda oluşan kayma hızları DSMC yöntemi ile hesaplandı ve referans çalışmadan alınan analitik sonuçlarla karşılaştırıldı. Couette akışta birbirine paralel iki levha arasında bağıl bir hız farkı vardır. Bu çalışmada levhalardan biri sabit bir hızla hareket ederken ($U_w^u = 100 \text{ m/s}$), diğer levha hareket etmemektedir ($U_w^d = 0 \text{ m/s}$). Bu iki plaka arasında kalan gazın özellikleri 2-boyutlu olarak çözümlenmiştir. Plakaların boyu (L) 5 cm., plakalar arasındaki mesafe (H) ise 5 mm'dir. Ortam basıncı (P) 40 Pa., ortam sıcaklığı (T) ve levha sıcaklığı (T_w) ise 300 K dir. Ortamda argon gazı kullanılmaktadır. Akış geometrisi Şekil 4.5'te gösterilmiştir.



Şekil 4.5 : Couette akış problemi ve gazın kanal boyunca hız değerleri.

Çalışmada basınç sınır koşulları uygulandı. DSMC yöntemi ile hesaplanan alt ve üst duvarlardaki kayma hızları ve akış yönündeki hız kesiti ise Şekil 4.6'da gösterilmiştir.



Şekil 4.6 : Couette akışında DSMC yöntemi ile hesaplanan akış yönündeki hız kesiti ile alt ve üst duvarlarda oluşan kayma hızları değerleri.

Alt duvarda kayma hızı $u_s^d = 3.2 \text{ m/s}$, üst duvarda ise $u_s^u = 3.3 \text{ m/s}$ olarak hesaplandı. Referans çalışmadan McNenly ve diğ. (2003) alınan ve analitik olarak duvar kayma hızını veren bağıntı,

$$u_s = C(Kn) L \frac{2-\sigma}{\sigma} \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_d, \quad (4.1)$$

ile verilmektedir. Burada u_s gazın plaka üzerindeki yatay hız bileşenini göstermektedir. $C(Kn)$, L ve σ_v ise sırası ile Knudsen sayısına bağlı bir katsayı, sistemin karakteristik uzunluğu ve teğetsel momentum barınma katsayısıdır. Knudsen sayısına bağlı C katsayısı,

$$C_{amp}(Kn) = 1.253 Kn, \quad (4.2)$$

görgül (ampirik) olarak verilmektedir. Bu görgül değer duvar kayma hızı denkleminde yerine konursa,

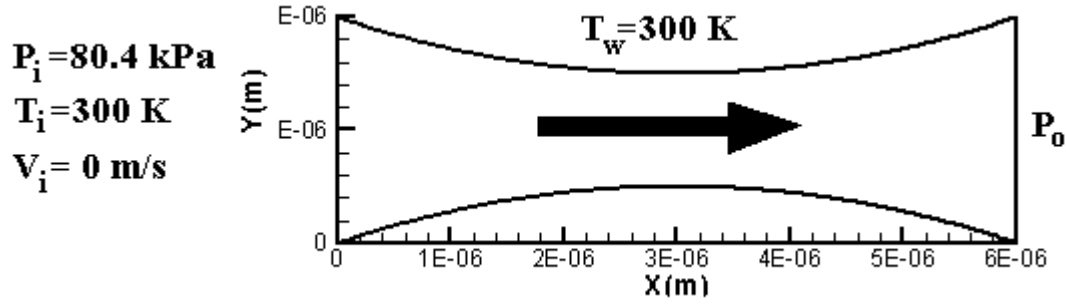
$$u_s = 1.253 \lambda \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_d = 1.253 \frac{k_B T}{\sqrt{2} \pi P d^2} \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_d, \quad (4.3)$$

bulunur. Eğer bu denklemde $\frac{\partial u}{\partial n} \Big|_d = \frac{100}{0.005} = 2 \times 10^4 \text{ s}^{-1}$, $k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$,

$T = 300 \text{ K}$, $P = 40 \text{ Pa}$, $d = 4.17 \times 10^{-10} \text{ m}$ olarak alınırsa, duvar kayma hızı $u_s \cong 3.3 \text{ m/s}$ olarak bulunur. Bu analitik kayma hızı, DSMC yöntemi ile bulunan kayma hızı ile eşittir.

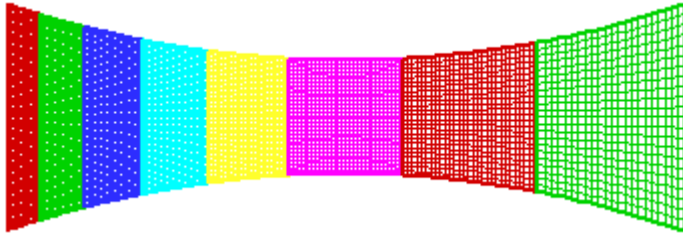
4.2 2-Boyutlu Mikro-Lülede Gaz Akışı

Bu çalışmada Wu ve Tseng (2001)'in bir çalışmasından alınan (Şekil 4.7) 2-boyutlu bir yakınsak-ıraksak mikro-lülede farklı giriş ve çıkış basınçlarında argon gazı akışı incelenmiştir. Basınç sınır şartlarının kullanıldığı bu çalışmada hem ses altı hızlar, hem de ses üstü hızlar için elde edilen neticeler yine referans çalışma ile karşılaştırılmış ve benzer sonuçlar elde edildiği görülmüştür (Sengil ve Edis, 2006).



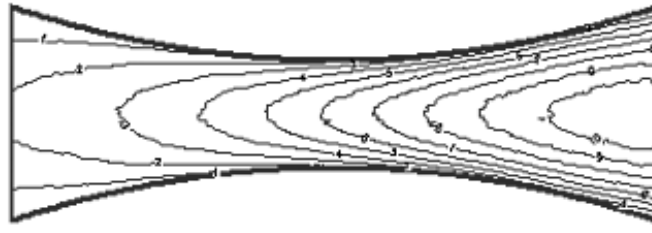
Şekil 4.7 : 2-boyutlu yakınsak-ıraksak mikro-lüle geometrisi ve sınır koşulları.

İlk olarak gaz akış hızının ses altı hız bölgesinde kaldığı, giriş ve çıkış basınçlarının $P_o = P_i / 5$ olarak seçildiği örnek problem DSMC çözücüsünde hesaplanmıştır. Bu çalışmada DSMC çözücüsü 1, 2, 4 ve Şekil 4.8’de olduğu gibi 8 işlemci ile paralel olarak çalıştırılmıştır. Gaz akış geometrisi işlemci sayısına uygun olarak sadece 1 boyutta alt bölgelere bölünmüş ve her bir alt bölge farklı bir işlemcide paralel olarak çözümlenmiştir.

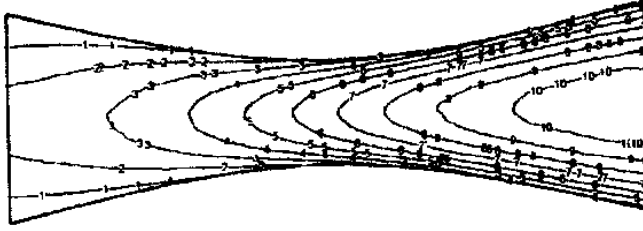


Şekil 4.8 : 2-boyutlu yakınsak-ıraksak mikro-lülenin paralel çalışma için 8 alt bölgeye ayrılması.

Yine bir ön program kullanılarak statik yük dengelemesi yöntemi ile akışın başında yük işlemciler arasında eşit olarak paylaştırılmıştır. Yük hesaplamasında hücre sayıları ve DSMC molekül sayılarına ait yük katsayıları kullanılmıştır. Bu örnek problemde gaz akış Mach sayıları ve gaz akış sıcaklıkları için hesaplanan çevre çizgi değerleri ve referans çalışma ile karşılaştırılmaları sırası ile Şekil 4.9 ve Şekil 4.10’da sunulmuştur. Karşılaştırmalarda aynı çevre çizgi değerleri kullanılmıştır.



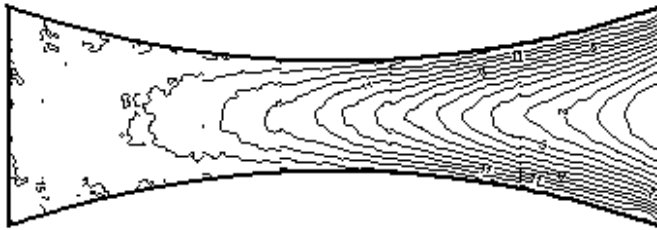
(a)



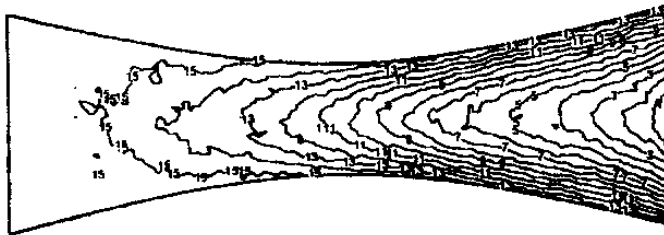
(b)

L	Ma
10	0.658
9	0.595
8	0.532
7	0.469
6	0.406
5	0.343
4	0.28
3	0.217
2	0.154
1	0.091

Şekil 4.9 : Ses altı hızları ($P_o = P_i / 5$) için Mach sayısı çevre çizgileri. (a) Bu çalışma. (b) Wu ve Tseng çalışması.



(a)

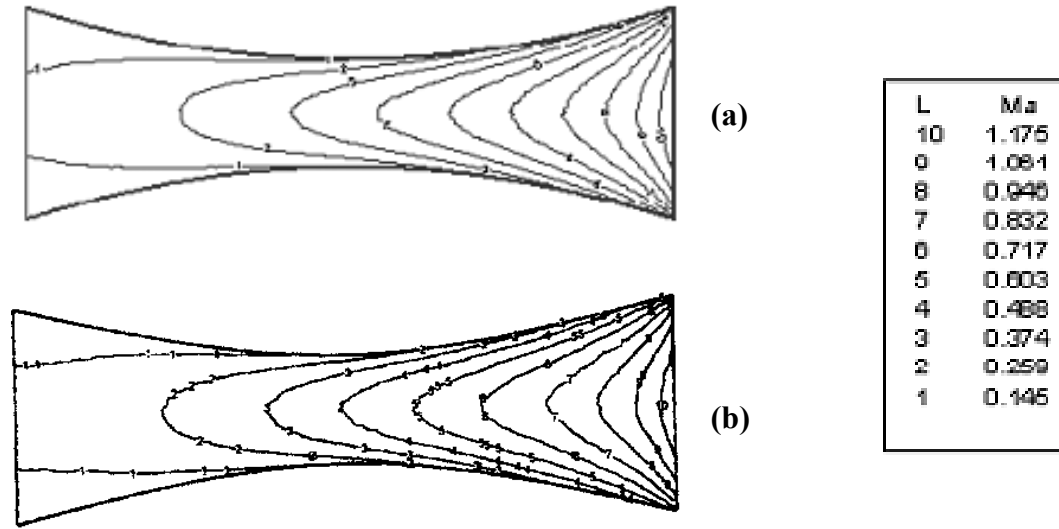


(b)

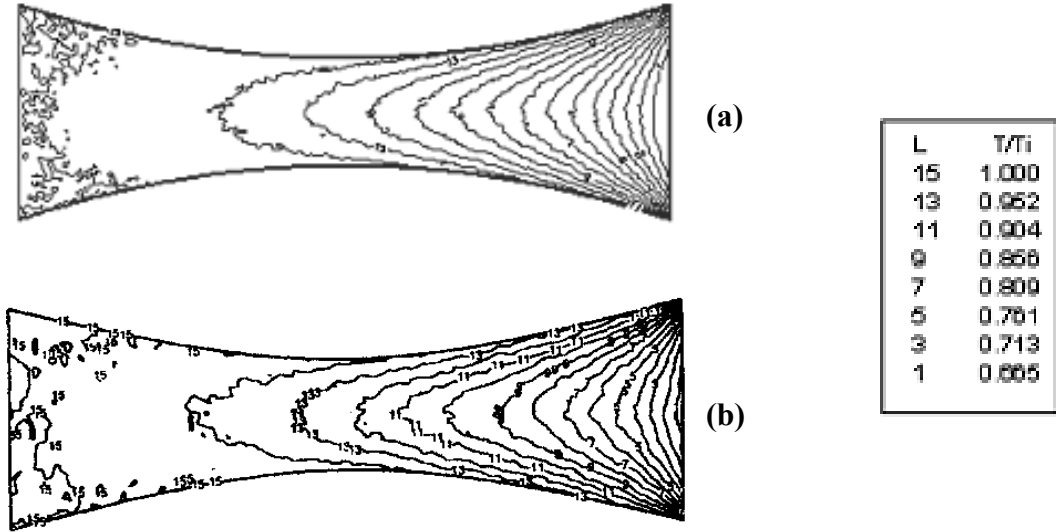
L	T/Ti
15	0.993
13	0.972
11	0.951
9	0.930
7	0.910
5	0.889
3	0.868
1	0.847

Şekil 4.10 : Ses altı hızları ($P_o = P_i / 5$) için sıcaklık çevre çizgileri. (a) Bu çalışma. (b) Wu ve Tseng çalışması.

İkinci problemde gaz akış hızını ses üstü hızlara çıkartmak için daha yüksek bir giriş ve çıkış basınç oranı ($P_o = P_i / 15$) kullanılmıştır. Bu örnek problemde bir önceki problemde olduğu gibi gaz akış alanı 8 alt bölgeye ayrılarak her bir alt bölge paralel çalışan 8 farklı işlemcide çözümlenmiştir. Bu örnek problemde gaz akış Mach sayıları ve gaz akış sıcaklıklarının çevre çizgi değerleri ve referans çalışma ile karşılaştırmaları sırası ile Şekil 4.11 ve Şekil 4.12’de sunulmuştur. Karşılaştırmalarda aynı çevre çizgi değerleri kullanılmıştır.



Şekil 4.11 : Ses üstü hızları ($P_o = P_i / 15$) için Mach sayısı çevre çizgileri. (a) Bu çalışma. (b) Wu ve Tseng çalışması.



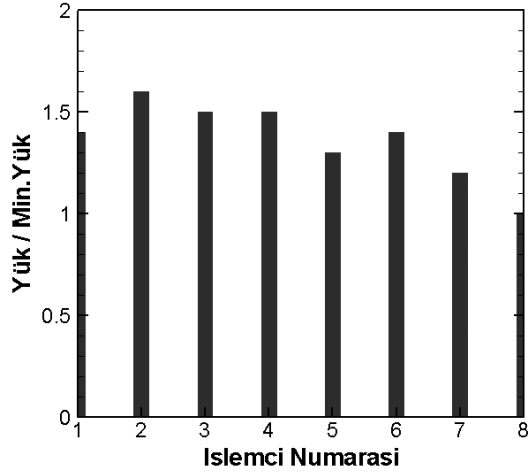
Şekil 4.12 : Ses üstü hızları ($P_o = P_i / 15$) için sıcaklık çevre çizgileri. (a) Bu çalışma. (b) Wu ve Tseng çalışması.

Farklı işlemci sayılarında çözüm zamanı, kullanılan DSMC molekül sayısı ve hücre sayısı aşağıda yer alan Çizelge 4.1’de gösterilmiştir.

Çizelge 4.1 : 32 adet Itanium II (1.3 GHz) işlemcili ve 64 Gbyte RAM kapasiteli SGI Altix 3000 serisi yüksek başarılı bilgisayarda yakınsak-ıraksak lüle için hesaplama zamanları.

İşlemci Sayısı	1	2	4	8
Hesaplama Zamanı (s)	63666	26103	12879	7096
DSMC Molekül Sayısı	~990000	~990000	~990000	~990000
Hücre Sayısı	24843	13580	10111	7835

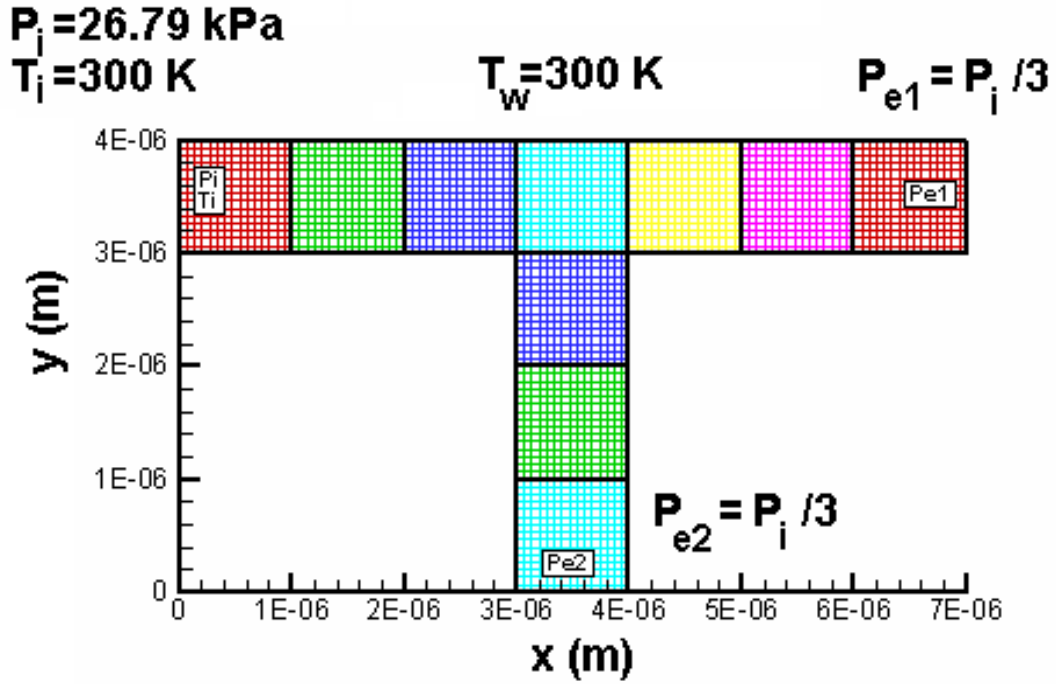
Çizelge 4.1’den de görüleceği üzere tüm alt bölgelerde aynı fiziksel-temsilci molekül oranı kullanılmakla birlikte hücre sayıları kullanılan işlemci sayısına bağlı olarak değişmektedir. Ses altı hız için yapılan hesaplama da işlemci başına düşen bağlı yük miktarı ise Şekil 4.13’de verilmiştir.



Şekil 4.13 : Ses altı hız için yapılan 8 işlemcili hesaplamada akışın daimi hale gelmesi ile işlemci başına düşen bağlı yük miktarı. Yük değerleri en düşük yük değeri ile normalize edilmiştir.

4.3 T-Şeklinde Mikro-Manifold İçinde Gaz Akışı

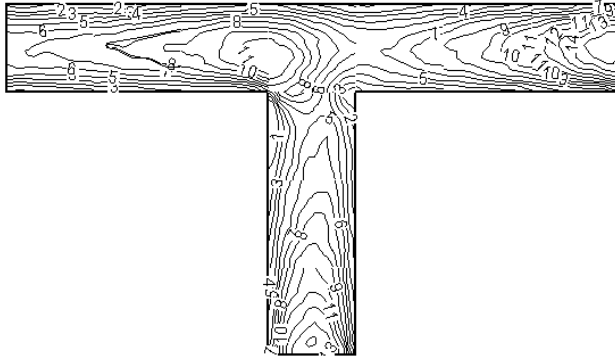
Bu örnek problemde boyutları ve sınır koşulları Wu ve Tseng (2001)'den alınan bir mikro-manifold içinden akan argon gazı çözümlenmektedir. Mikro-manifoldlar tıp teknolojisinde akış kontrol amaçlı olarak kullanım alanı bulmaktadırlar. Geometrisi Şekil 4.14'de verilen T-şeklindeki manifoldun bir girişi ve iki çıkışı bulunmaktadır. Gaz akışı basınç farkı ile sağlanmaktadır. Kullanılan gaz argon gazı olup girişte basınç ve sıcaklık $P_i = 26.79 \text{ kPa}$ ve $T_i = 300 \text{ K}$ olarak verilmektedir. Çıkış bölümlerinde ise gaz basıncı $P_{e,1} = P_{e,2} = P_i / 3$ olarak verilmektedir.



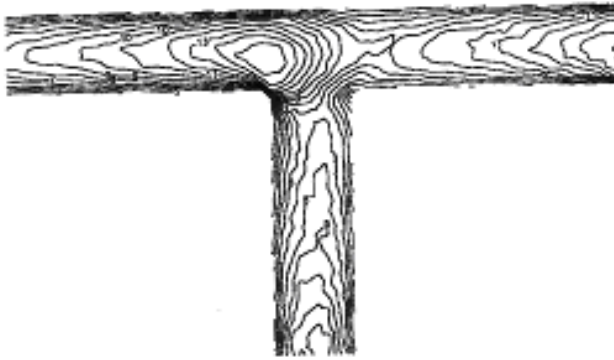
Şekil 4.14 : T-şeklindeki mikro-manifoldun geometrisi ve sınır koşulları.

DSMC çözücüsü ile bu problemi çözümlmek için gaz akış alanı 10 alt bölgeye ayrılmış ve her bir alt bölge paralel çalışan 10 adet işlemciden birine atanmıştır. Alt bölgeler Şekil 4.14’de gösterilmiştir. Çözümleme neticesinde elde edilen Mach sayısı ve basınç çevre çizgileri, Şekil 4.15 ve Şekil 4.16 referans çalışma ile karşılaştırılmış ve sonuçların benzer olduğu belirlenmiştir (Sengil ve Edis, 2006). Karşılaştırmalarda aynı çevre çizgi değerleri kullanılmıştır.

T-şeklinde mikro-manifold için genel akış özelliklerine bakıldığında, gazın dönüş köşesinde en yüksek hıza eriştiği daha sonra hızla yavaşladığı ve takiben kanal çıkışına doğru tekrar en yüksek hıza eriştiği görülmektedir. Bir diğer dikkate değer konuda yatay kanal çıkış Mach sayısının (≈ 0.2), dikey kanal çıkış Mach sayısından daha fazla olmasıdır.



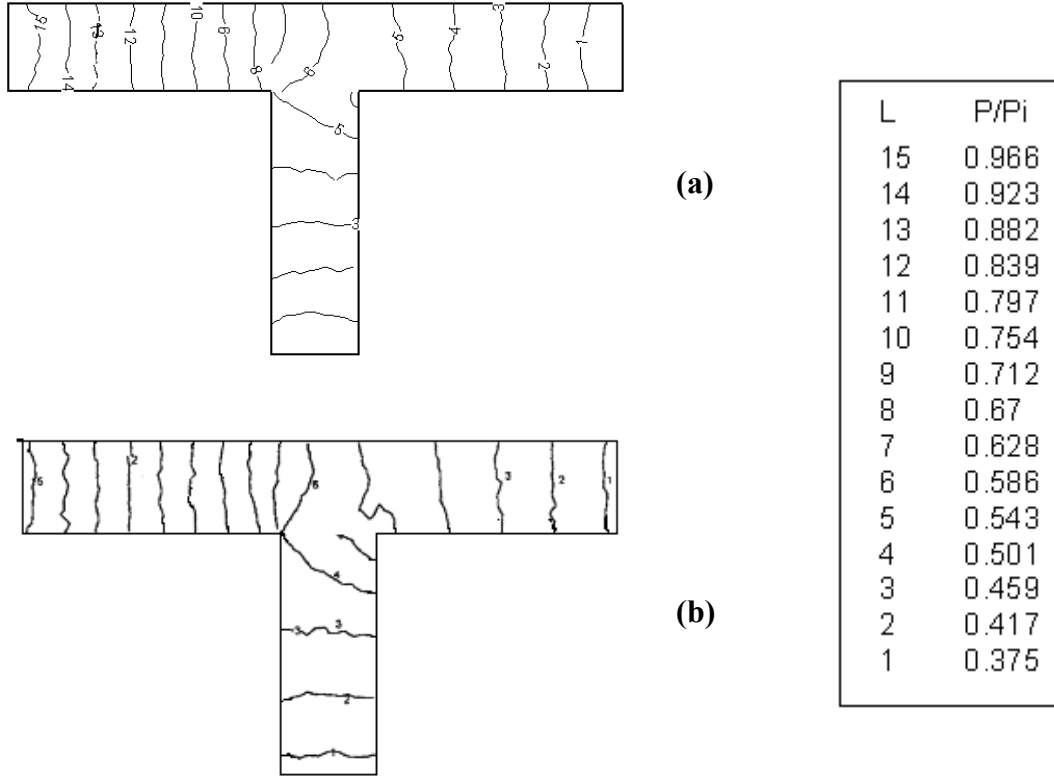
(a)



(b)

L	Ma
15	0.197
14	0.187
13	0.178
12	0.168
11	0.158
10	0.148
9	0.139
8	0.129
7	0.119
6	0.110
5	0.100
4	0.090
3	0.080
2	0.071
1	0.061

Şekil 4.15 : T-şeklinde mikro-manifoldun içinden akan argon gazına ait Mach sayısı çevre çizgi değerleri. (a) Bu çalışma. (b) Wu ve Tseng çalışması.



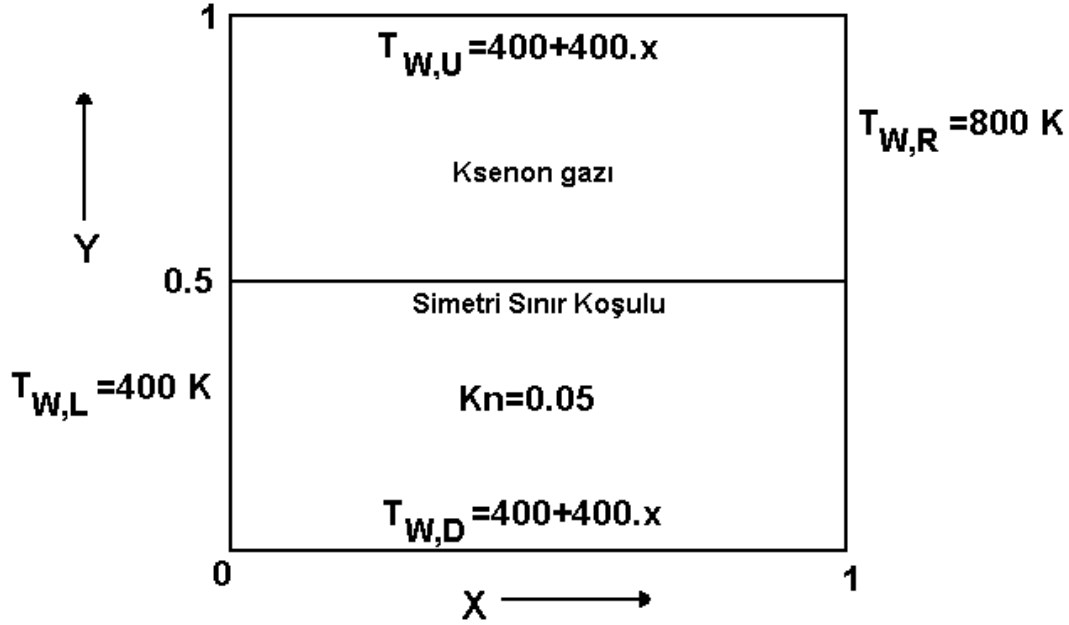
Şekil 4.16 : T-şeklinde mikro-manifoldun içinden akan argon gazına ait basınç çevre çizgi değerleri. (a) Bu çalışma. (b) Wu ve Tseng çalışması.

4.4 Isıl Sürünme Problemi

Isıl sürünme gaz seyreltikliğinin bir sonucudur (Karniadakis ve Beskok, 2002). Seyreltik gazlarda bölge duvarı boyunca oluşturulan bir sıcaklık düşümü (gradyeni) ile soğuktan ısıya doğru bir gaz akışı meydana gelir. Seyreltik gazın bu özelliğinden yararlanarak hareketli parçası olmayan mikro boyutlu gaz tulumları (Knudsen kompresörü) yapmak mümkündür (Pham-Van-Diep ve diğ., 1995) .

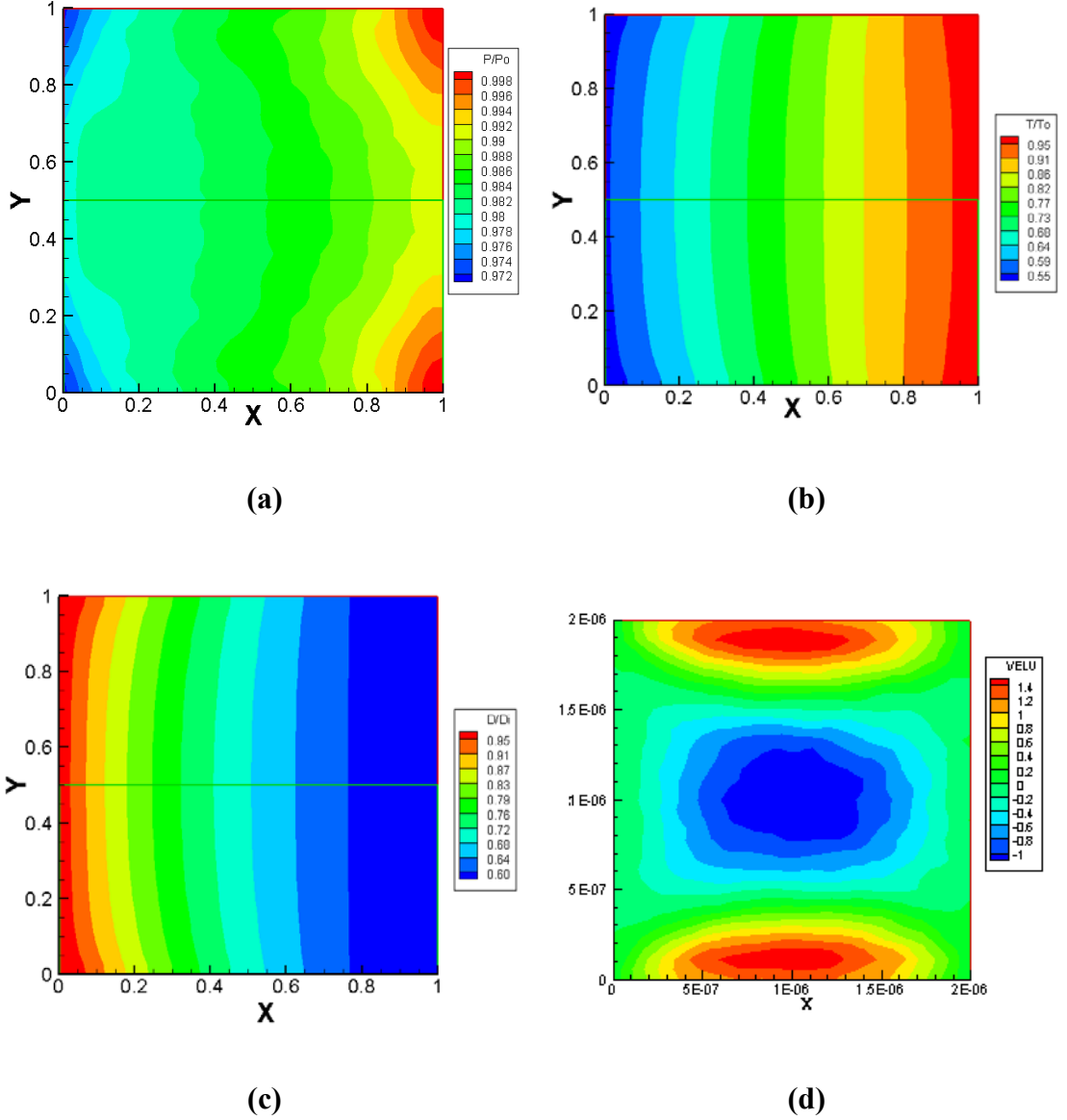
Bu çalışmada 2-boyutlu ve 4 tarafı duvarlar ile çevrili kare şeklinde bir bölge içinde mevcut seyreltik ksenon gazının, alt ve üst duvarlarda yer alan sıcaklık düşümü ile nasıl etkilendiği incelenmiştir. İçi seyreltik ksenon gazı ile dolu kapalı bölgenin, boyutsuz $x = 0$ ve $x = 1$ değerlerinde duvar sıcaklıkları sırası ile $T_{W,L} = 400 K$ ve $T_{W,R} = 800 K$ olarak verilmektedir. Alt ve üst duvarlarda ise sıcaklık doğrusal olarak $T_{W,U} = T_{W,D} = 400 + 400.x$ bağıntısı uyarınca değişmektedir. Hesaplama bölgesi

Şekil 4.17’de görüleceği üzere $y = 0.5$ boyunca simetri sınır koşulları kullanılarak yarı yarıya azaltılmıştır. Daha sonra simetri sınır şartı kaldırılarak hesaplamalar tekrar yapılmış ve simetri sınır şartı ile gerçekleştirilen hesaplamalar ile bir ayrım olmadığı görülmüştür.



Şekil 4.17 : Ebatları boyutsuzlaştırılmış geometride ısıl sürünme test problemi.

Yapılan çözümleme neticesinde bölgenin alt ve üst kısımlarında birbirine simetri 2 adet gaz akışı belirlendi. Bu gaz akışının yönü ısıl sürünme kuralları doğrultusunda duvar boyunca soğuktan sığağa doğru olurken, bölgenin tam orta kısmında ise ters yönlü paralel bir gaz akışı görüldü. $Kn = 0.05$ sayısı için elde edilen basınç, sıcaklık, yoğunluk ve gaz akış hızı değerleri Şekil 4.18’de sunulmuştur.



Şekil 4.18 : Isıl sürünme ile oluşan ksenon gazı akışına ait çevre çizgisi değerleri. (a) $P_0 = 75.6 \text{ kPa}$. için basınç değerleri. (b) $T_0 = 800 \text{ K}$ için sıcaklık değerleri. (c) $D_i = 2,76 \text{ kg/m}^3$ için yoğunluk değerleri. (d) m/s cinsinden yatay gaz akış hızı değerleri boyutlu geometride verilmiştir.

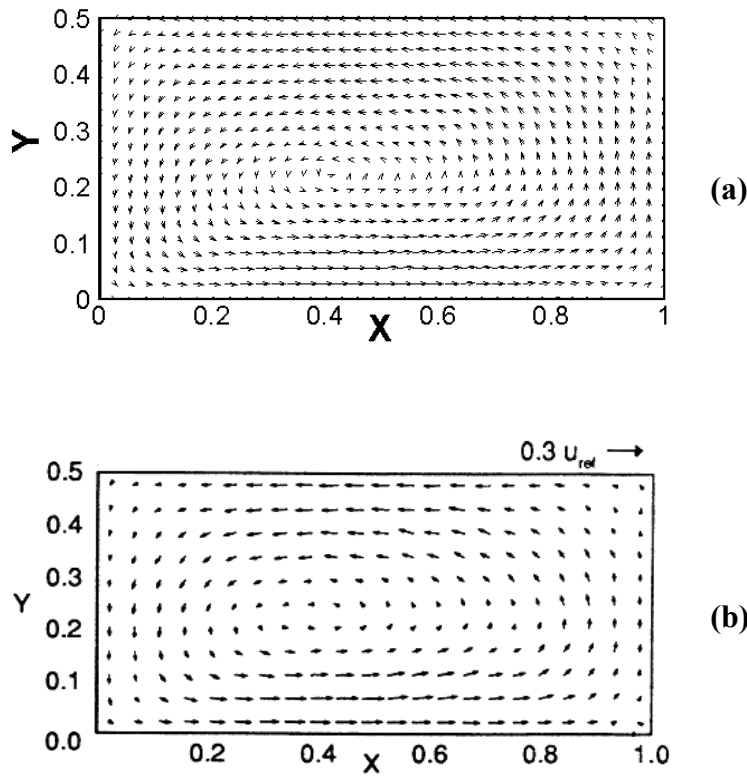
Papadopoulos ve Rosner (1995)'in yayınladığı sonuçlar sadece hız vektörü ile ilgili değerleri kapsadığından dolayı, Şekil 4.19'de görüleceği üzere karşılaştırma sadece bu veri cinsinden yapılmıştır. Bu şekilde ifade edilen u_{ref} ısı sürünme hızı, teorik olarak aşağıda belirtilen,

$$u_{ref} = 0.5 A_T \lambda_T (2 \kappa T_0 / m)^{1/2} T_o^{-1} (dT / dx), \quad (4.4)$$

bağıntıdan hesaplanmaktadır. Dağınık yansıma için $A_T = 0.7662$ değeri kullanılmaktadır. Isıl ortalama serbest yol denklemi ise aşağıda olduğu gibi,

$$\lambda_T \equiv 4/5 (\kappa / p) (m T_0 / 2 k)^{1/2} , \quad (4.5)$$

verilmektedir (Papadopoulos ve Rosner, 1995). Yukarda yer alan denklemde κ ısı iletim katsayısı olup, ksenon gazı için $\kappa = 0.0056 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ değeri kullanılmıştır. Ksenon gazına ve probleme ait değerler denklemlerde yerine yerleştirildiğinde, $u_{ref} = 5.76 \text{ m/s}$ olarak bulunur. Elde edilen neticeler referans çalışma ile benzerlik göstermektedir.

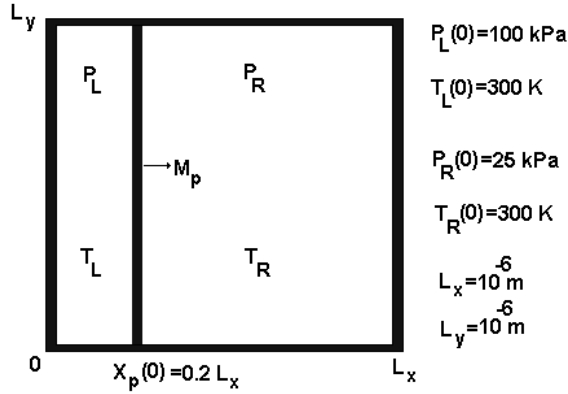


Şekil 4.19 : $Kn = 0.05$ için ksenon gazına ait ısıl sürünme hız vektörleri. (a) Bu çalışma. (b) Papadopoulos ve Rosner (1995) çalışması.

4.5 Adyabatik Piston Problemi

Daimi olmayan DSMC çözücüsü, literatürde oldukça geniş bir şekilde ele alınan adyabatik piston problemine (Şekil 4.20) uygulandı. Mansour ve diğ. (2006)

tarafından geliştirilen hidrodinamik model ve bu çalışmada geliştirilen DSMC çözücüsü ile elde edilen sonuçlar ve bu sonuçların karşılaştırması aşağıda sunulmuştur.



Şekil 4.20 : Adyabatik piston başlangıç değerleri.

Adyabatik pistonun uzunluğu (L_x) ve yüksekliği (L_y) eşit olarak $1 \mu m$ olarak alınmıştır. Pistonun her iki tarafında da aynı miktarda ($M_g = 2.25 \times 10^{-13} \text{ kg}$) azot gazı bulunmaktadır. Her iki bölümde de gaz sıcaklığı başlangıçta aynı ($T_L(0) = T_R(0) = T_0 = 300 \text{ K}$) olmakla birlikte basınçlar farklıdır ($P_L(0) = 100 \text{ kPa}$, $P_R(0) = 25 \text{ kPa}$). Pistonun başlangıç konumunun piston uzunluğuna oranı ise ($X_p(0) = 0.2 L_x$) olarak verilmektedir. Azot molekül kütlesi (m), gaz sabiti (R), ve molekül çapı (d) sırası ile $46.5 \times 10^{-27} \text{ kg}$, 296.95 J K^{-1} , $3.78 \times 10^{-10} \text{ m}$ olarak alınmıştır. Test probleminin kapsamı genişletmek amacı ile 3 farklı piston kütlesi ($M_{p,1} = 0.1 M_g$, $M_{p,2} = M_g$, ve $M_{p,3} = 10 M_g$) kullanılmaktadır. Başlangıçta pistonun her iki tarafındaki bölümlerde Knudsen sayısı $Kn_L = Kn_R = 0.27$ olarak hesaplanmıştır.

4.5.1 Boyutsuzlaştırılmış hidrodinamik model denklemleri

Mansour ve diğ. (2006) tarafından verilen, adyabatik piston pozisyonu ve pistonun her iki tarafında oluşan sıcaklık değerleri,

$$\begin{aligned}
\frac{d^2 x_p}{d\tau^2} &= \frac{x_0^{\gamma-1}}{x_p^\gamma} - \frac{(1-x_0)^{\gamma-1}}{(1-x_p)^\gamma} - \mu \left(\frac{x_0^{\gamma/2-0.5}}{x_p^{\gamma/2+0.5}} + \frac{(1-x_0)^{\gamma/2-0.5}}{(1-x_p)^{\gamma/2+0.5}} \right) \frac{dx_p}{d\tau} , \\
\frac{dt_L}{d\tau} &= (\gamma-1) \left[-\frac{t_L}{x_p} x_p^0 + \mu \sqrt{t_L} \frac{(x_p^0)^2}{x_p} \right] , \\
\frac{dt_R}{d\tau} &= (\gamma-1) \left[\frac{t_R}{(1-x_p)} x_p^0 + \mu \sqrt{t_R} \frac{(x_p^0)^2}{(1-x_p)} \right] ,
\end{aligned} \tag{4.6}$$

3 bağılı adi diferansiyel denklem ile ifade edilebilmektedir. Burada $x_p = \frac{X_p}{L_x}$,

$$x_0 = \frac{X_p(0)}{L_x}, \quad t_L = \frac{T_L}{(T_L(0) + T_R(0))/2}, \quad t_R = \frac{T_R}{(T_L(0) + T_R(0))/2} \quad \text{ve}$$

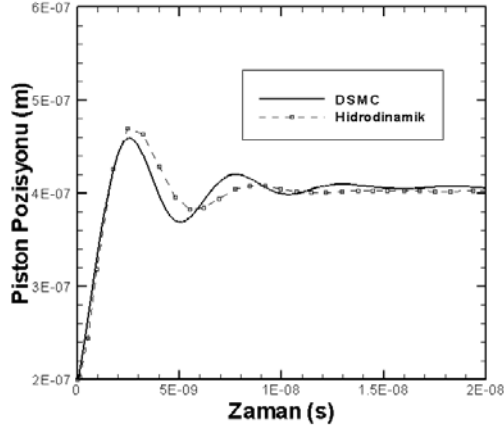
$$\tau = \frac{1}{L_x} \sqrt{\frac{R T_0 M_g}{\hat{M}}} t \text{ ile verilmektedirler. } \mu \text{ ise } \mu = \frac{L_y \Gamma_0}{\sqrt{R \hat{M} M_g}} \text{ olarak ifade edilen}$$

boyutsuz bir katsayıdır. Başlangıçta $T_L(0) = T_T(0) = T_0$ birbirine eşittir. L_x ve L_y piston uzunluğu ve piston yüksekliğidirler. $\Gamma = \Gamma_0 \sqrt{T} = 4/3\eta + \xi$ ise bir boyutlu Navier-Stokes denklemlerinde yer alan viskozite katsayısıdır. Azot gazı için ikinci viskozite katsayısı $\xi = 0.704 \eta$ olarak hesaplanmaktadır (Elizarova ve diğ, 2007). Bölümlerde mevcut gazın da piston ile birlikte hızlandığından hareketle piston kütlesi için $\hat{M} = M_p + \left(\frac{2 M_g}{3} \right)$ bağıntısı kullanılmaktadır.

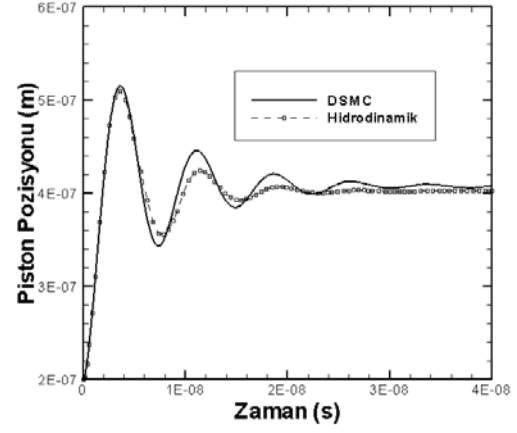
4.5.2 Sonuçlar

Azot gazı için özgül ısı oranı $\gamma = 1.4$ ve $\Gamma_0 = 2.04 \times 10^{-6} \text{ Pa s K}^{-1}$ alınarak Denklem (4.6) da yerine yerleştirilir. Bu 3 bağılı adi diferansiyel denklem MATLAB ile üç farklı piston kütlesi ($M_p \ll M_g, M_p = M_g, M_p \gg M_g$) için çözülür ve piston konumu ile pistonun her iki tarafındaki sıcaklık değişimleri kaydedilir. Yine aynı problem bu defa DSMC yöntemi ile çözülür. $M_p \ll M_g$ ve $M_p = M_g$ durumunda, DSMC yöntemi ve hidrodinamik model arasında Şekil 4.21 ve Şekil 4.22’de görüleceği üzere hem piston konumu, hem de sıcaklıkların zamanla değişiminde farklılıklar gözlenmektedir. $M_p \gg M_g$ durumunda ise , her iki yöntemden de benzer neticeler elde edilmektedir. Her iki yöntemde de tüm durumlar için

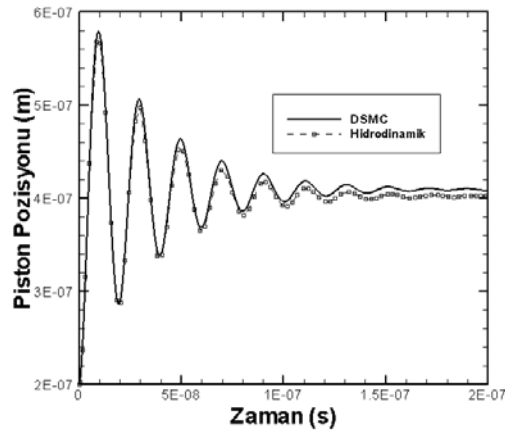
sıcaklıkların toplamı sabit $T_L + T_R = 2 T_0$ olmaktadır. Bu da sistemde enerjinin korunduğunu göstermektedir.



(a)

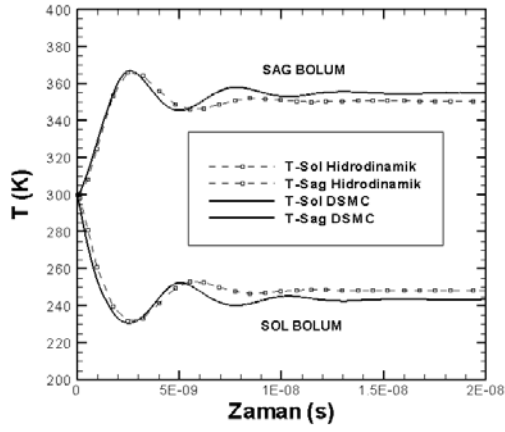


(b)

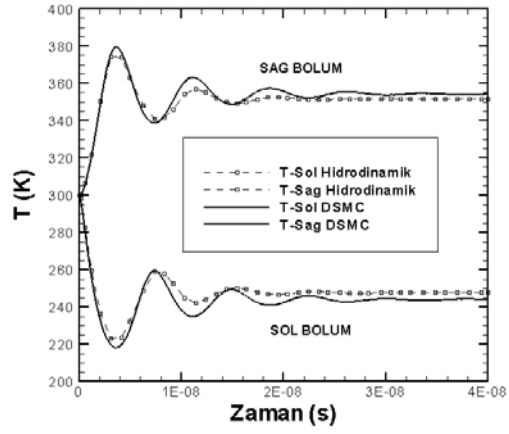


(c)

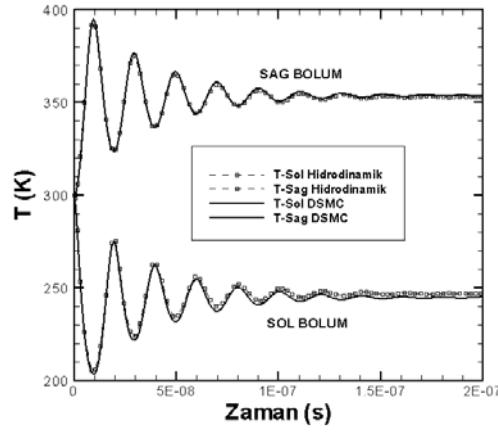
Şekil 4.21 : Piston konumunun zamanla değişimi. (a) $M_p = 0.1 M_g$. (b) $M_p = M_g$.
(c) $M_p = 10 M_g$.



(a)



(b)



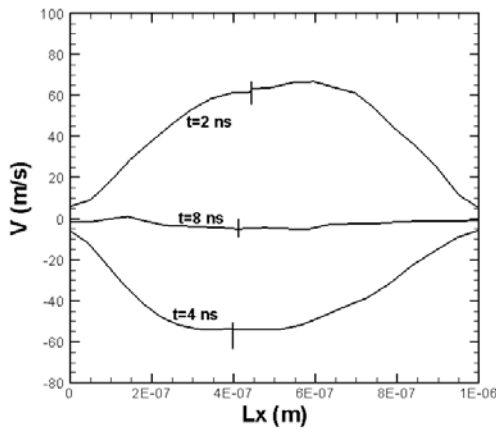
(c)

Şekil 4.22 : Gaz sıcaklığının zamanla değişimi. (a) $M_p = 0.1 M_g$. (b) $M_p = M_g$.
(c) $M_p = 10 M_g$.

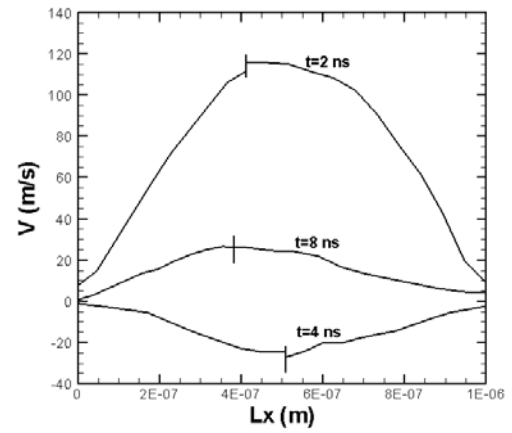
DSMC ve hidrodinamik yöntemler arasında oluşan farkın nedeni araştırıldığında aşağıda belirtilen sonuca ulaşılmıştır. Hidrodinamik model geliştirilirken pistonun her iki tarafında yer alan gazın doğrusal bir hız kesitine sahip olacağı ve bunun sonucunda gaz basınç, sıcaklık ve yoğunluğunun benzer yapıda (homojen) olacağı varsayımından hareket edilmiştir. Bu varsayım Şekil 4.23 ve Şekil 4.24'den de görüleceği üzere sadece $M_p \gg M_g$ koşulunda geçerli olmakta, aksi halde

geçerliliğini yitirmektedir. Bu nedenle $M_p \gg M_g$ koşulunda DSMC ve hidrodinamik model benzer sonuçlar verirken, bu koşulun geçerli olmadığı durumlarda sonuçlar farklı olmaktadır.

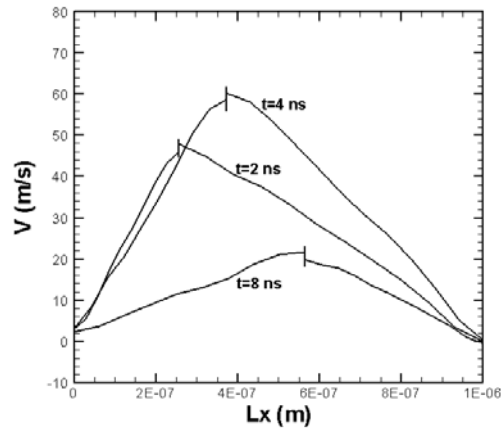
Adyabatik pistonun mekanik dengeye ulaştığı durumda tüm piston kütleleri için piston pozisyonu $X_p \cong 0.41 L_x$, bölüm sıcaklıkları ise $T_L \cong 245 K$ ve $T_R \cong 355 K$ değerini almaktadır. Yine Şekil 4.21’de görüldüğü gibi piston kütlesi arttıkça mekanik dengeye ulaşmak için gereken süre uzamaktadır.



(a)

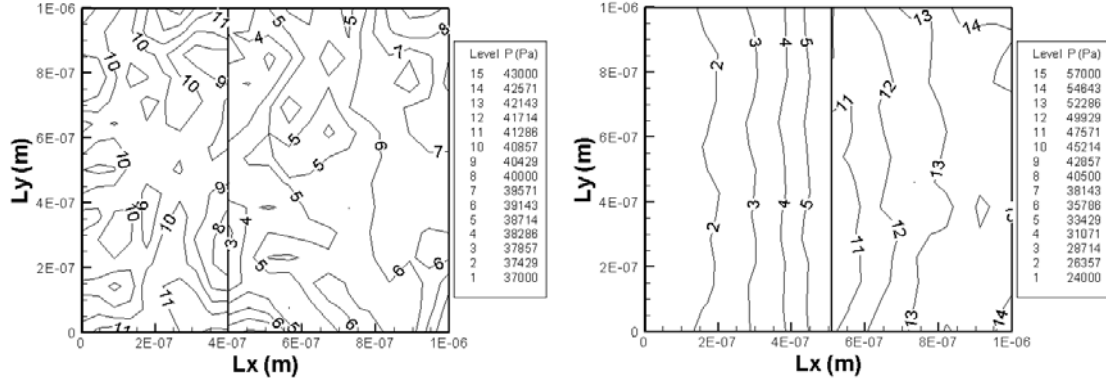


(b)



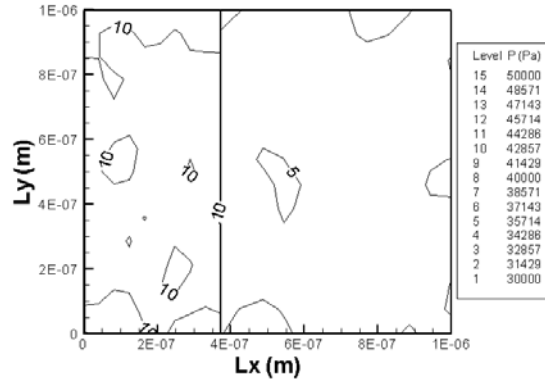
(c)

Şekil 4.23 : Farklı zamanlarda gaz hız kesitleri. (a) $M_p = 0.1 M_g$. (b) $M_p = M_g$.
(c) $M_p = 10 M_g$.



(a)

(b)



(c)

Şekil 4.24 : $t = 4 \text{ ns}$ için basınç çevre çizgileri. (a) $M_p = 0.1 M_g$. (b) $M_p = M_g$.
(c) $M_p = 10 M_g$.

4.6 3-Boyutlu Mikro-Lülede Gaz Akışı

Bu bölümde içinden soğuk azot gazı akan 3-boyutlu bir mikro-lüle DSMC yöntemi kullanılarak çözümlenmiştir. Mikro-lülenin boyutları Şekil 4.25’de olduğu gibi x-yönünde $L = 20 \mu m$, z-yönünde $W = 4 \mu m$ ’dir. y-ekseni yönünde yüksekliği ise bir Hermite çokterimlisi (polinom) olup, bağıntısının kendisi ve katsayı değerleri,

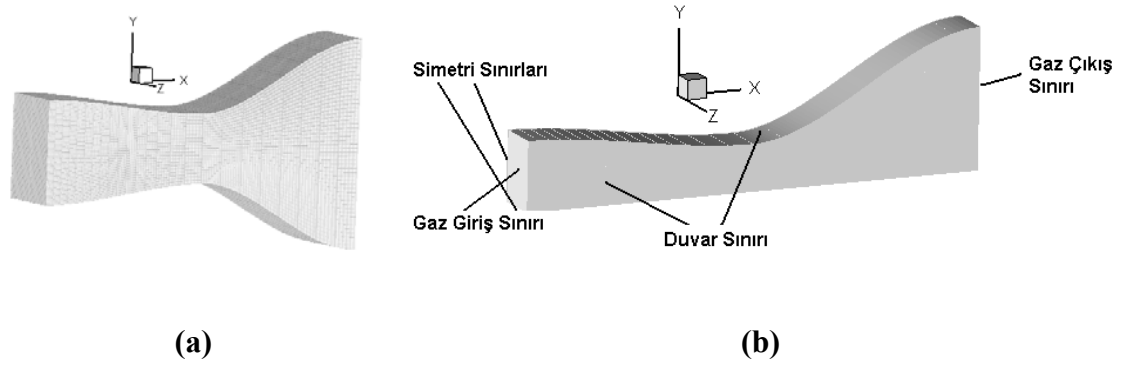
$$Y = a_3 x^3 + a_2 x^2 + a_1 x + a_0,$$

$$\left(\frac{dY}{dx} = 0 \right)_{\substack{x=0 \\ x=10 \mu m \\ x=20 \mu m}}, \quad (4.7)$$

$$a_3 = 2 \times 10^9, a_2 = -3 \times 10^4, a_1 = 0, a_0 = 3 \times 10^{-6} \quad 0 \leq x \leq 10 \mu m,$$

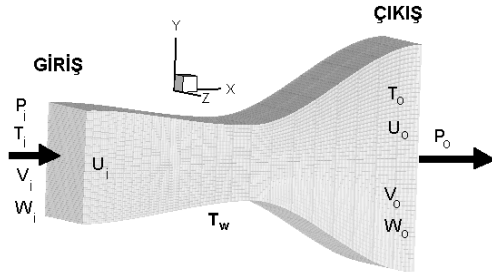
$$a_3 = -8 \times 10^9, a_2 = 3.6 \times 10^5, a_1 = -4.8, a_0 = 2.2 \times 10^{-5} \quad 10 < x \leq 20 \mu m,$$

olarak verilmiştir (Sengil ve Edis, 2007a; Sengil ve Edis, 2007b). Mikro-lüle x-z düzlemine ve x-y düzlemine göre simetrik olup, y-z düzleminde dikdörtgen şeklinde bir ara kesite sahiptir. Simetri sınır şartı kullanılarak hesaplama bölgesi Şekil 4.25'da verildiği gibi fiziksel bölgenin dörtte birine kadar küçültülmüştür.



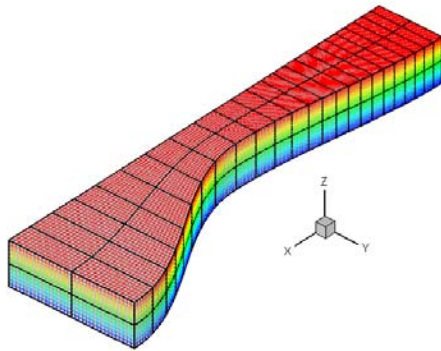
Şekil 4.25 : Mikro-lüle geometrisi. (a) Fiziksel bölge. (b) Hesaplama bölgesi.

Çalışma için azot gazı kullanılmıştır. Gazın girdiği ve çıktığı sınırlarda basınç sınır şartı kullanılmıştır (Wu ve Tseng, 2001). Girişte gazın sıcaklığı ve basıncı $T_i = 300 K$, $P_i = 50 kPa$. olup, çıkışta sadece basınç değeri $P_o = 15 kPa$. sabit tutulmuştur. Yine giriş sınırında gazın sınır düzlemine paralel hız bileşenleri $V_i = 0 m/s$, $W_i = 0 m/s$. olarak verilmektedir. Eksik sınır koşulları Şekil 4.26'de olduğu gibi gaz akış alanından tamamlanmaktadır.



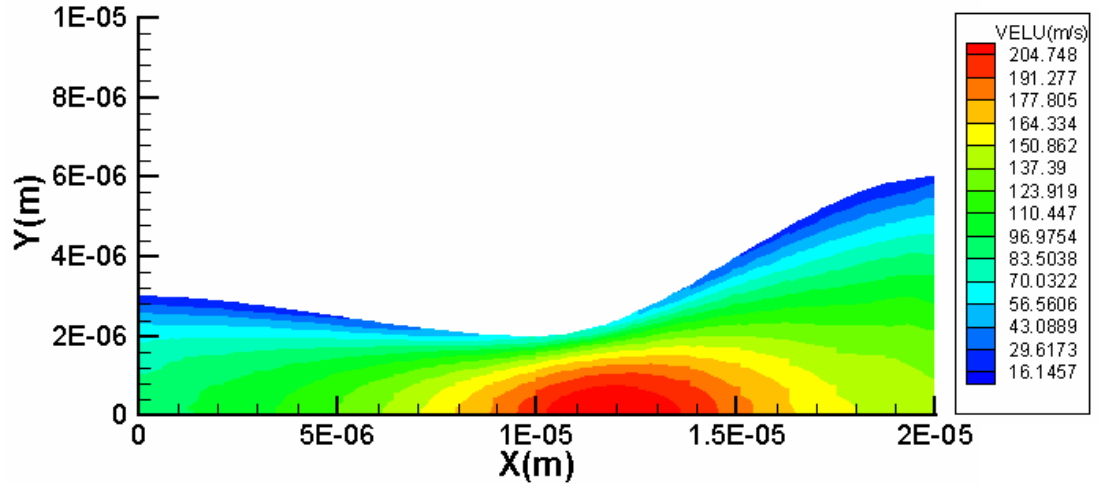
Şekil 4.26 : Basınç sınır koşulları uygulanan 3-boyutlu mikro-lüle.

Mikro-lüle 3-boyutlu bölgeler ayırma tekniği kullanılarak Şekil 4.27’de olduğu gibi 96 adet alt bölgeye ayrılmış ve her bir alt bölge paralel çalışan farklı bir işlemcide çözümlenmektedir. Alt bölgeler arasında bilgi aktarımı için mesaj geçme arayüzü (MPI) kütüphaneleri kullanılmıştır. Alt bölgeler sadece tek yönde değil, her 3 yöndeki komşu alt bölgeler ile de haberleşme yeteneğine sahip kılınmıştır.

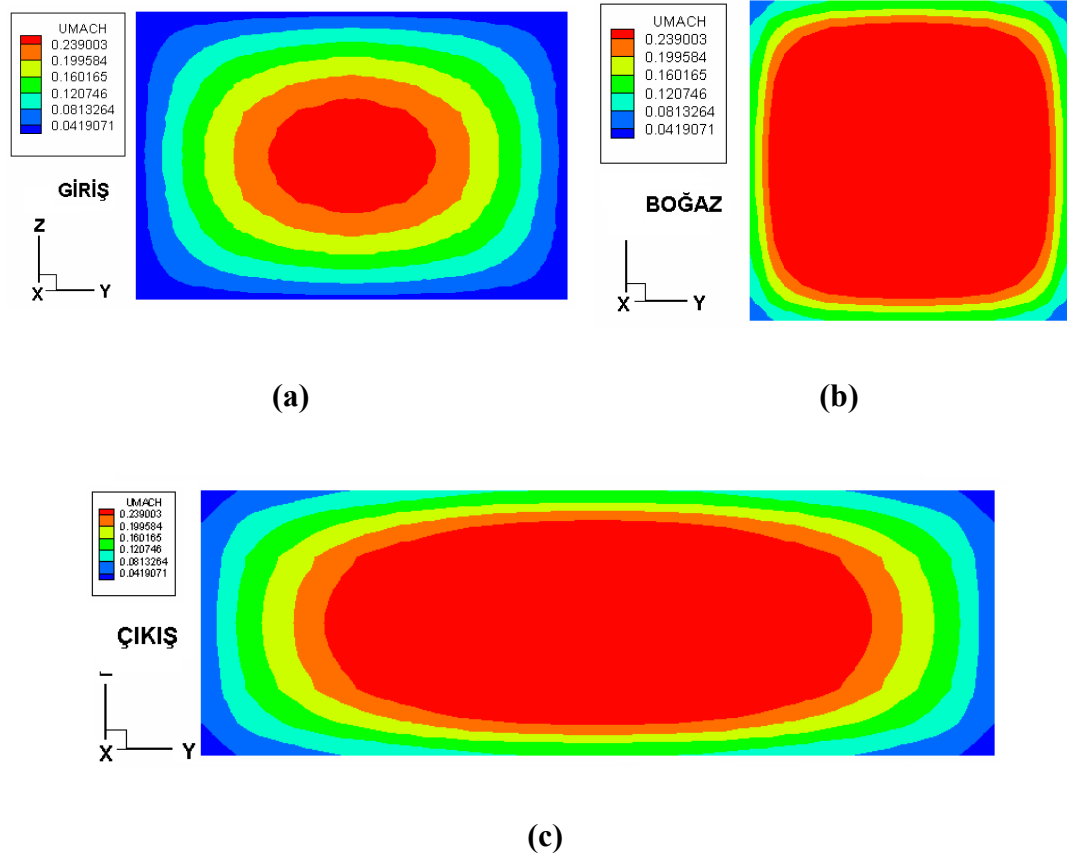


Şekil 4.27 : Mikro-lüle hesaplama bölgesi 3-boyutlu olarak 96 adet alt bölgeye ayrılmış durumda.

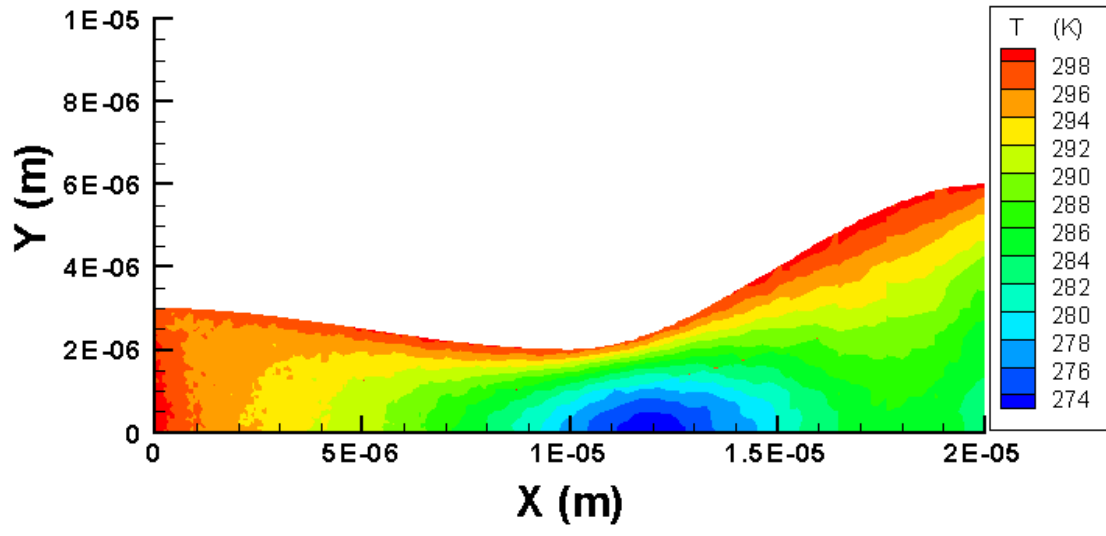
Çözüm için hesaplama bölgesinde toplam 4.2 milyon DSMC molekülü kullanılmış olup, 50000 zaman adımı için 390 dakikalık bir çözüm süresi gerekmiştir. Gazın kanal eksenini yönündeki akış hızlarına ait çizgeler Şekil 4.28 ve Şekil 4.29’da, sıcaklık çizgesi ise Şekil 4.30’de sunulmuştur.



Şekil 4.28 : Kanal ekseni boyunca gaz akış hızı değerleri.



Şekil 4.29 : Gaz akış hızının kanal ekseni boyunca, mikro-lülenin farklı kesitlerinde hesaplanan Mach sayısı değerleri. (a) Kanal girişi. (b) Kanal boğazı. (c) Kanal çıkışı.



Şekil 4.30 : Kanal eksenî boyunca gaz sıcaklık değerleri.

5. SONUÇ VE DEĞERLENDİRMELER

Bu çalışmada mikro boyutlu gaz akışlarının çözümlenmesinde moleküler temellere dayanan ve olasılıksal bir yapı taşıyan DSMC yöntemi kullanılmıştır. Temellerini gazların kinetik teorisinden alan DSMC yöntemi, gaz akışlarının fiziksel modellemesini yaparak çözümleme olanağı sağlamaktadır. Gaz akış değerleri gaz moleküllerinin sahip oldukları kütle, enerji ve momentum bilgisinden yararlanarak hesaplanmaktadır. Her bir gaz molekülünün bire bir izlenmesi mevcut hesaplama olanakları ile mümkün olmadığından, DSMC yönteminde çok sayıda fiziksel molekülü temsil eden temsilci moleküller kullanılmaktadır. Zamanda ilerletilen temsilci moleküllerin hareket ve çarpışma safhaları ise birbirinden ayrılmıştır. Molekül çarpışmaları ve makro değer hesaplamaları hücre olarak adlandırılan ve doğrusal boyutları ortalama serbest yol ölçeğinde olan küçük hacimlerde olasılıksal modeller kullanılarak gerçekleştirilmektedir.

DSMC yöntemi çözüm süresi açısından, özellikle de yoğun gazlar için pahalı bir yöntemdir. Bu çalışmada DSMC yönteminin hesaplama verimliliğini arttırmak için yeni çözüm katkıları geliştirilmiştir. İlk çözüm önerisi geleneksel DSMC yönteminin dört ana safhasından biri olan moleküllerin hücre esaslı sıraya dizilme işleminin, yeni veri yapıları kullanılarak ayrı bir safhaya gerek kalmadan molekül hareket safhası içinde gerçekleştirilmesi olmuştur. Böylelikle gelişmiş tekniklere rağmen uzun bir hesaplama zamanı gerektiren molekülleri hücrelerine göre sıraya dizme işlemine olan gereksinime son verilmiştir. İkinci çözüm önerisi mikro-lüle gibi basit geometrilili gaz akışlarında koordinat dönüşümleri kullanılarak fiziksel gaz akış bölgesinin kare şeklinde boyutsuz bir hesaplama bölgesine dönüştürülmesidir. Molekül hareketleri ve çarpışmalar fiziksel bölgede gerçekleştirilmekte, sadece moleküllerin hangi hücrede konumlandığı bilgisini hesaplamak için hesaplama bölgesi kullanılmaktadır. Fiziksel bölgede moleküllerin hareket safhası sonunda hangi hücrede konumlandıklarını hesaplamak için kullanılan işlemler çok sayıda karmaşık hesaplama gerektirirken, aynı işlemi hesaplama bölgesinde yapmak için basit aritmetik bağıntılar yeterli olmaktadır. Bu yöntemle hesaplama verimi artırılabilir. Üçüncü olarak

hareketli sınır şartlarının bulunduğu bir ortamda daimi olmayan gaz akışlarının incelenebilmesi için momentum esaslı bir molekül-hareketli duvar çarpışma modeli geliştirilmiştir. Bu modelde moleküllerin hareketli sınıra çarpma zamanları göz önünde tutulmuş ve çarpışmalar öncelik sırası gözetilerek hesaplama verimliliği yüksek bir yöntemle gerçekleştirilmiştir. Dördüncü olarak yine günümüz DSMC çözücülerinde kullanılan molekül rezervuarları incelenmiş ve bu rezervuarlarda görülen sınırlamaları ve eksikleri kaldırmak için yeni çözüm önerileri getirilmiştir. Yeni bir yaklaşım kullanmak sureti ile hem hacim molekül üretim rezervuarlarının verimliliği artırılmış hem de molekül üretim sayısında yaşanan problem giderilmiştir. Bunun sonucunda DSMC yönteminin hesaplama hızında ve doğruluğunda gelişme sağlanmıştır.

Bu çalışma sadece DSMC yönteminin verimliliğini arttıracak çözümlerin geliştirilmesi ile sınırlı tutulmamıştır. Ek olarak hem bu çözüm önerilerinin doğruluğunun gösterilmesi, hem de ileride yapılacak aynı konudaki çalışmalara bir temel teşkil etmesi için yeni bir DSMC yöntemi esaslı çözücü geliştirilmesi de amaçlanmıştır. Birimsel (modüler) bir yapıda geliştirilen DSMC yöntemi esaslı çözücü az bir değişiklik ile mikro-kanal, mikro-lüle, T-şeklinde mikro-manifold ve hareketli piston gibi ayrı yapıda 2- ve 3-boyutlu mikro gaz akışlarına uygulanabilmektedir. DSMC çözücüsü akış geometrisini ve sınır koşullarını önce veri dosyalarından okumakta olup, program içinde bir değişikliğe gitmeden farklı koşullar içeren problemleri çözebilmektedir. DSMC çözücüsünden alınan sonuçlar, yaygın kullanılan çizim programları tarafından doğrudan görüntülenebilmektedir. Geliştirilen DSMC çözücüsü sadece tek işlemcili bilgisayarlarda değil, çok işlemciye sahip paralel mimarili yüksek başarılı hesaplama (HPC) yapabilen sistemlerde de çalışabilmektedir. Geliştirilen DSMC çözücüsünde, bölgelere ayırma (DD) yöntemi kullanılarak her bir alt bölge ayrı bir işlemcide hesaplanabilmektedir. İlaveten farklı alt bölgelerde ayrı fiziksel-temsili molekül oranları kullanılabilmektedir. Alt bölgeler arası bilgi aktarımı için ise ayrı işlemci ve işletim sistemlerinde çalışma kolaylığı sağlayan mesaj geçme arayüzü (MPI) kütüphanesi kullanılmaktadır. Böylelikle DSMC çözücüsünün farklı çalışma ortamlarında da sorunsuz kullanılması amaçlanmıştır. Yine DSMC çözücüsünün çözüm süresini kısaltmak için sadece paralel çalışma olanağından yararlanılmakla kalmamış, ayrıca yöntemde yeni veri yapıları ve koordinat sistemleri kullanılarak da çözüm süresinden tasarruf

sağlanabileceği gösterilmiştir. Geliştirilen DSMC yöntemi temelli çözücü sadece daimi akışlara değil aynı zamanda, daimi olmayan akışlara da uygulanabilmektedir. DSMC çözücüsünde yapısal çözüm ağlarından istifade edilmiştir. Yapısal çözüm ağları uygulanabildikleri problemlerin kapsamı açısından yapısal olmayan ağlara nazaran daha özgün çözümler gerektirmekle birlikte, programlamada kolaylık sağladıkları ve çözüm süratini arttırdıkları için tercih edilmektedirler. Bir diğer önemli konu da paralel çalışmada işlemciler arasında yük dengesinin sağlanmasıdır. Bu çalışmada geliştirilen DSMC çözücüsünde programlama kolaylığı ve hesaplama sürati sağladığı için statik yük dengelemesi tercih edilmiştir. Yük dengelemesi için gaz akışının başında alt bölgelerde bulunan molekül sayıları ve hücre sayıları temel alınarak bir paylaşım sağlanmaktadır. DSMC yönteminin dinamik karakteri nedeni ile başta eşit olarak dağıtılan yükler bir müddet sonra eşitsizlik gösterebilmektedirler. Bu nedenle alt bölgeler arasında sadece tek boyutlu değil, çok boyutlu MPI aktarım kanalları da kullanılmış ve yükün işlemciler arasında mümkün olduğunca eşit paylaşımı sağlanmıştır.

KAYNAKLAR

- Aktas, O., Aluru, N.R. and Ravaioli, U., 2001. Application of a parallel DSMC technique to predict flow characteristics in microfluidic filters, *Journal of Microelectromechanical Systems*, **10**(4), 538-549.
- Aktas, O. and Aluru, N.R., 2002. A Combined Continuum/DSMC Technique for Multiscale Analysis of Microfluidic Filters, *Journal of Computational Physics*, **178**, 342-372.
- Alexandre, F.J., Garcia, A.L. and Alder, B.J., 1995. A consistent Boltzmann algorithm, *Phys. Review Letters*, **74**(26), 5212-5215.
- Alexandre, F.J., Garcia, A.L. and Alder, B.J., 1998. Cell size dependence of transport coefficients in stochastic particle algorithms, *Physics of Fluids*, **10**(6), 1540-1542.
- Alexeenko, A.A., Levin, D.A., Gimelshein, S.F., Collins, R.J., and Reed, B.D., 2002. Numerical Modeling of Axisymmetric and Three-Dimensional Flows in Microelectromechanical Systems Nozzles, *AIAA Journal*, **40**, 897-904.
- Alexeenko, A.A., Fedosov, D.A., Gimelshein, S.F., Levin, D.A. and Collins, R.J., 2006. Transient Heat Transfer and Gas Flow in a MEMS-Based Thruster, *Journal of MEMS*, **15**(1), 181-194.
- Baker, L.L. and Hadjiconstantinou, N.G., 2005. Variance reduction for Monte Carlo solutions of the Boltzmann equation, *Physics of Fluids*, **17**, 051703.
- Bayt, R.L., 1999. Analysis fabrication and testing of a MEMS based micropropulsion system, *PhD thesis*, MIT, Cambridge, MA, USA.
- Beskok, A., 2001. Molecular based Microfluidic Simulation Models, *MEMS Handbook*, Chapter 8, Ed. Gad-el-Hak, M., CRC Press, Boca Raton, Florida.
- Bird, G.A., 1976. *Molecular Gas Dynamics*, Clarendon Press, Oxford.
- Bird, G.A., 1994. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, Clarendon Press, Oxford.
- Bird, G.A., 1998. Recent advances and current challenges for DSMC, *Computers Math Applic.*, **35**(1/2), 1-14.
- Bird, G.A., 2000. Forty years of DSMC and now?, *Rarefied Gas Dynamics:22. International Symposium*, Sydney, Australia, July 2000, 372-380.
- Bird, G.A., 2005. The DS2V/3V program suite for DSMC calculations, *Rarefied Gas Dynamics:24. International Symposium*, Bari, Italy, July 2004, 541-546.

- Bhatnagar, P.L., Gross, E.P. and Krook, K.**, 1954. A model for collision processes in gases, *Phys. Rev.*, **94**, 511-524.
- Brito, R., Renne, M.J. and Van Den Broeck, C.**, 2005. Dissipative collapse of the adiabatic piston, *Europhysics Letters*, **70(1)**, 29-35.
- Brito, R., Renne, M.J. and Van Den Broeck, C.**, 2005. Dissipative collapse of the adiabatic piston, *Europhysics Letters*, **70(1)**, 29-35.
- Box, G.E.P. and Muller, M.E.**, 1958. A Note on the Generation of Random Normal Deviates, *The Annals of Mathematical Statistics*, **29(2)**, 610-611.
- Callen, H.B.**, 1985. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, Wiley, New York
- Çelenligil, M.C., Bird, G.A. and Moss, J.N.**, 1989. Direct Simulation of Three-Dimensional Hypersonic Flow About Intersecting Blunt Wedges, *AIAA Journal*, **27(11)**, 1536-1542.
- Çelenligil, M.C., Moss, J.N. and Blanchard, R.C.**, 1991. Three-Dimensional Rarefied Flow Simulations for the Aeroassist Flight Experiment Vehicle, *AIAA Journal*, **29(1)**, 52-57.
- Çelenligil, M.C. and Moss, J.N.**, 1992. Hypersonic Rarefied Flow About a Delta Wing-Direct Simulation and Comparison with Experiment, *AIAA Journal*, **30(8)**, 2017-2023.
- Çelenligil, M.C.**, 2008. Rarefaction effects on the outflow boundary conditions for external subsonic flow simulations, 26. *Rarefied Gas Dynamics Symposium*, Kyoto, Japan, 21-25 July.
- Cercignani, C. and Lampis, M.**, 1971. Kinetic models for gas-surface interactions, *Transport Theory Stat. Phys.*, **1**, 101-114.
- Cercignani, C.**, 1988. *The Boltzmann Equation and its Applications*, Springer-Verlag, Berlin.
- Chapman, S. and Cowling, T.G.**, 1970. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, Cambridge University Press, New York.
- Crosignani, B., Di Porto, P. and Segev, M.**, 1996. Approach to thermal equilibrium in a system with adiabatic constraints, *Am. J. Physics*, **64(5)**, 610-613.
- Crosignani, B., Di Porto, P. and Conti, C.**, 2004. The adiabatic piston: a perpetuum mobile in the mesoscopic realm, *Entropy*, **6**, 50-56.
- Curtis, C.F. and Muckenfus, C.**, 1958. Kinetic theory of nonspherical molecules, *J. Chem. Phys.*, **29**, 1257-1272.
- Dietrich, S. and Boyd, I.D.**, 1996. Scalar and parallel optimized implementation of the direct simulation Monte Carlo method, *J. Comp. Phys.*, **126**, 328-342.
- Elizarova, T.G., Khokhlov, A.A. and Montero, S.**, 2007. Numerical simulation of shock wave structure in nitrogen, *Physics of Fluids*, **19**, 068102.
- Fan, J. and Shen, C.**, 2001. Statistical simulation of low speed rarefied gas flows, *J. Comput. Phys.*, **167**, 393-412.

- Fan, J.**, 2002. A generalized soft sphere model for Monte Carlo simulation, *Phys. Fluids*, **14**, 4399-4405.
- Fang, Y. and Liou, W.**, 2002, Computations of the flow and heat transfer in microdevices using DSMC with implicit boundary conditions, *Transactions of the ASME*, **124**, 338-345.
- Gad-el Hak, M.**, 1995. Questions in fluid mechanics: Stokes' hypothesis for a newtonian, isotropic fluid, *J. Fluids Engrg.*, **117**, 3-5.
- Gad-el-Hak, M.**, 2001. Flow physics in MEMS, *Mec. Ind.*, **2**, 313-341
- Garcia, A.L.**, 1986. Nonequilibrium fluctuations studied by a rarefied gas simulation, *Phys. Rev. A*, **34**, 1454-1457.
- Garcia, A.L., Bell, J.B., Crutchfield, W.Y. and Alder, B.J.**, 1999. Adaptive mesh and algorithm refinement using direct simulation Monte Carlo method, *J. Comp. Phys.*, **154**, 134-155.
- Garcia, A.L. and Wagner, W.**, 2006. Generation of the Maxwellian inflow distribution, *Journal of Computational Physics*, **217**, 693-708.
- Gimelshein, S., Markelov, G. and Rieffel, M.**, 1996. Collision models in the Hawk DSMC implementation, *California Institute of Technology Technical Report, CaltechCSTR:1996.cs-tr-96-16*.
- Gombosi, T.I.**, 1994. *Gas Kinetic Theory*, Cambridge University Press.
- Gruber, C., Pache, S. and Lesne, A.**, 2004. 1999. On the second law of thermodynamics & on the piston problem, *Journal of Statistical Physics*, **117**(3/4), 738-772.
- Hadjiconstantinou, N.**, 2000. Analysis of discretization in the DSMC, *Physics of Fluids*, **12**, 2634-2638.
- Hash, D.B. and Hassan, H.A.**, 1997. Two-dimensional coupling issues of hybrid DSMC/Navier-Stokes solvers, *AIAA Paper*, 97-2507.
- Hassan H.A. and Hash, D.B.**, 1993. A generalized hard-sphere model for Monte Carlo simulations, *Phys. Fluids A*, **5**(3), 738-744.
- Ho, C-M. and Tai, Y-C.**, 1998. Micro-Electro-Mechanical- Systems (MEMS) and fluid flows, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **30**, 579-612.
- Hoffmann, K.A. and Chiang, S.T.**, 2000. *Computational Fluid Dynamics for Engineers*, Engineering Education System, Wichita, Kansas.
- Ikegawa, M. and Kobayashi, J.**, 1990. Development of a rarefied gas flow simulator using the direct-simulation Monte Carlo method, *JSME International Journal*, **33**, 463-467
- Ivanov, M.S., Markov, G.N. and Gimelshein, S.F.**, 1998. Statistical simulation of reactive rarefied flows: Numerical approach and applications, *AIAA Paper*, 98-2669.
- Kaplan, C.R. and Oran, E.S.**, 2002. Nonlinear Filtering for Low-Velocity Gaseous Microflows, *AIAA Journal*, **40**(1), 82-90.
- Karniadakis, G.E. and Beskok, A.**, 2002. *Micro Flows Fundamentals and Simulation*, Springer-Verlag, New York.

- Kim, M.G., Kim, H.S. and Kwon, O.J.** 2004. A parallel cell-based DSMC method on unstructured adaptive meshes. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **44**, 1317-1335.
- Koura, K. and Matsumoto, H.**, 1991. Variable soft sphere model for inverse power law or Lennard-Jones potential, *Phys. Fluids A*, **3**, 2451-2465.
- Larsen, P.S. and Borgnakke, C.**, 1975. Statistical collision model for Monte Carlo simulation of polyatomic gas mixture, *J. Comp. Phys.*, **18**, 405-420.
- LeBeau, G.J.**, 2001. A parallel implementation of the direct simulation Monte Carlo method, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrn.*, **174**, 319-337.
- LeBeau, G.J. and Lumpkin, F.E.**, 2001. Application highlights of DSMC analysis code (DAC) software for simulating rarefied flows, *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, **191**, 595-609.
- Lilley, C.R. and Macrossan, M.N.**, 2003. Methods for implementing the stream boundary condition in DSMC computations, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, **42**, 1363-1371.
- Liou, W.W. and Fang, Y.**, 2006. *Microfluid Mechanics*, Mc Graw-Hill, NY.
- Lord, R.G.**, 1991. Some extensions to the Cercignani-Lampis gas scattering kernel, *Phys. Fluids A*, **3(4)**, 706-710.
- Lord, R.G.**, 1995. Some further extensions of the Cercignani-Lampis gas-surface interaction model, *Phys. Fluids*, **7(5)**, 1159-1161.
- Mansour, M.M., Broeck, C. and Kestemont, E.**, 2005. Hydrodynamic relaxation of the adiabatic piston, *Europhysics Letters*, **69(4)**, 510-516
- Mansour, M.M., Garcia, A.L. and Baras, E.**, 2006. Hydrodynamic Description of the adiabatic piston, *Physical Review E*, **73**, 016121, 1-13
- Markelov, G.N. and Ivanov, M.S.**, 2001. Numerical study of 2D/3D micronozzle flows, *AIP Conference Proceedings*, **585(1)**, p:539-546.
- Matsumoto, H.**, 2002. Variable sphere molecular model for inverse power law and Lennard-Jones potential in Monte Carlo simulations, *Physics of Fluids*, **14(12)**, 4256-4265.
- Matsumoto, M. and Nishimura, T.**, 1998. Mersenne twister: a 623-dimensionally equidistributed uniform pseudorandom number generator, *ACM Trans. Model. Comput. Simul.*, **8**, 3-30.
- Matsumoto, Y. and Tokumasu, T.**, 1997. Parallel computing of diatomic molecular rarefied gas flows, *Parallel Comput.*, **23**, 1249-1260.
- Maxwell, J.C.**, 1879. On stresses in rarefied gases arising from inequalities of temperature, *Phil.Trans.Roy.Soc.Part 1*, **170**, 231-256.
- McNamara, G. and Zannetti, G.**, 1988. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automation, *Physical Review Letters*, **61**, 2332-2335.
- McNenly, M.J., Gallis, M.A. and Boyd, I.D.**, 2003. Slip Model Performance for Micro-Scale Gas Flow, *AIAA Paper*, 2003-4050.
- Meiburg, E.**, 1986. Comparision of molecular dynamics method and the direct simulation Monte carlo technique, *Phys. Fluids*. **29**, 3107-3113.

- Menzies, R.D.D., Richards, B.E., Badcock, K.J., Loseken, J. and Kahl, M.** 2002. Computational Investigation of Three-Dimensional Flow Effects on Micronozzles, *J. Spacecraft*, **39(4)**, 642-644.
- Munakata, T. and Ogawa, H.**, 2001. Dynamical aspects of an adiabatic piston, *Physical Review E*, **64**, 036119.
- Muckenfus, C. and Curtis, C.F.**, 1958. Kinetic Theory of Nonspherical Molecules, *The Journal of Chemical Physics*, **29(6)**, 1257-1272.
- Nance, R.P., Wilmoth, R.G., Moon, B., Hassan, H.A., and Saltz, J.**, 1994. Parallel solution of three-dimensional flow over of a finite flat plate, *AIAA Paper*, **94-0219**.
- Nance, R.B., Hash, D.B. and Hassan, H.A.**, 1998. Role of boundary conditions in Monte Carlo simulation of microelectromechanical systems, *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, **12**, 447-449.
- Neishtadt, A.I. and Sinai, Y.G.**, 2004. Adiabatic Piston as a Dynamical System, *Journal of Statistical Physics*, **116(1/4)**, 815-820.
- Oran, E.S., Oh, C.K. and Cybyk, B.Z.**, 1998. Direct Simulation Monte Carlo: Recent Advances and Applications, *Ann. Rev. Fluid Mech.*, **30**, 403-441.
- Ota, M., Taniguchi, H., and Aritomi, M.**, 1995. A parallel processing for direct simulation Monte Carlo method, *JSME (B)*, **61(582)**, 496-502.
- Papadopoulos, D.H. and Rosner, D.E.**, 1995. Enclosure gas flows driven by non-isothermal walls, *Phys. Fluids*, **7(11)**, 2535-2537.
- Pham-Van-Diep, G., Keeley, P., Muntz, E.P. and Weaver, D.P.**, 1995. A micromechanical Knudsen compressor, *In Proceedings of the Nineteenth International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, Oxford University Press, 715-721
- Piekos, E.S. and Breuer, K.S.**, 1996. Numerical modeling of micromechanical devices using direct simulation Monte Carlo method, *Transactions of the ASME*, **118**, 464-469.
- Rajasanov, S. and Wagner, W.**, 1996. Stochastic weighted particle method for the Boltzmann equation, *J. Comput. Phys.*, **124**, 243-253.
- Reese, J.M., Gallis, M.A. and Lockerby, D.A.**, 2003. New directions in fluid dynamics: non-equilibrium aerodynamics and microsystem flows, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, **361**, 2967-2988.
- Roveda, R., Goldstein, D. and Varghese, P.**, 1998. Hybrid Euler/Particle approach for continuum/rarefied flows, *J. Spacecraft and Rockets*, **35(3)**, 258-265.
- Şengil, N. and Edis, F.O.**, 2006. Parallel DSMC application for the analysis of a Argon gas flow in T-shaped micro manifold, *Proceedings of the 25. Rarefied Gas Dynamics Symposium*, St.Petersbourg, Russia, 1170-1175
- Şengil, N. and Edis, F.O.**, 2007. Computation of 3D cold gas micro nozzle performance with parallel direct simulation Monte carlo solver, HPC Europa Report, **RII3-CT-2003-506079**, Cineca, Italy.

- Şengil, N. and Edis, F.O.**, 2007. Implementation of parallel DSMC method to adiabatic piston problem, *Proceedings of the International Conference on Parallel CFD*, Antalya, Türkiye.
- Şengil, N. and Edis, F.O.**, 2007. Multidimensional MPI Communication Scheme for the Direct Simulation Monte Carlo Method Applied to Micro Nozzles, *Proceedings of the 4. Ankara International Aerospace Conference*, Ankara, Türkiye, AIAC-2007-031.
- Shen, C.**, 2005. *Rarefied Gas Dynamics Fundamentals, Simulations and Micro Flows*, Springer-Verlag, Berlin.
- Sun, Q. and Boyd, I.D.**, 2002. A direct simulation method for subsonic microscale gas flows, *J. Comput. Phys.*, **179**, 400-425.
- Tskhakaya, D. and Schneider, R.**, 2007. Optimization of PIC codes by improved memory management, *J. Comput. Phys.*, **225**, 829-839.
- Tysanner, M.W. and Garcia, A.L.**, 2005. Non-equilibrium behavior of equilibrium reservoirs in molecular simulations, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **48**, 1337-1349.
- Ünal, N.**, 2002. *Termodinamik: Kinetik Kuram ve İstatistik Termodinamik (çev.)*, Literatür Yayınları, İstanbul.
- Vijayakumar, P., Sun, Q. and Boyd, I.D.**, 1999. Vibrational-translational energy exchange models for the direct simulation Monte Carlo method, *Physics of Fluids*, **11(8)**, 2117-2126.
- Vincenti, W.G. and Kreuger, C.H.**, 1965. *Introduction to Physical Gas Dynamics*, Wiley, New York.
- Von Smoluchowski, M.**, 1898. Ueber varmeleitung in verdünnten gasen, *Annalen der Physik und Chemie*, **64**, 101-130.
- Wagner, W.**, 1992. A convergence proof for Bird's direct simulation Monte Carlo method for the Boltzmann equation, *J. Stat. Phys.*, **66**, 1011-1044.
- Wang, M.R. and Li, Z.X.**, 2004. Numerical simulations on performance of MEMS-based nozzles at moderate or low temperatures, *Microfluid Nanofluid*, **1**, 62-70.
- Wang, W-L., Sun, Q. and Boyd, I.D.**, 2002. Towards Development of a Hybrid DSMC-CFD Method for Simulating Hypersonic Interacting Flows, *AIAA Paper*, 3099.
- Wijesinghe, H.S. and Hadjiconstantinou, N.G.**, 2004. Discussion of Hybrid Atomistic-Continuum Methods for the Multiscale Hydrodynamics, *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, **2(2)**, 189-2002.
- Wu, J.-S. and Tseng, K.-C.**, 2001, Analysis of micro-scale gas flows with pressure boundaries using direct simulation Monte Carlo method, *Computers & Fluids*, **30**, 711-735.
- Wu, J.-S. and Lian, Y.-Y.**, 2003. Parallel three-dimensional direct simulation Monte Carlo method and its applications, *Computers & Fluids*, **32**, 1133-1160.

Wu, J.-S., Tseng, K.-C. and Yang, T.-J., 2003. Parallel Implementation of DSMC Using Unstructured Mesh, *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, **17**(5), 405-422.

ÖZGEÇMİŞ



Ad Soyad: Nevsan Şengil

Doğum Yeri ve Tarihi: Üsküdar, 5 Şubat 1959

Adres: İTÜ Uçak ve Uzay Bilimleri Fakültesi, 34469, Maslak, İstanbul

Lisans Üniversitesi: Kontrol Sistemleri, Deniz Harp Okulu, Tuzla, İstanbul, 1980

Y. Lisans: Mühendislik Bilimleri, Naval Postgraduate School, Monterey, CA-USA, 1986

Yayın Listesi:

Sengil, N. and Edis, F.O., 2006. Parallel DSMC application for the analysis of a Argon gas flow in T-shaped micro manifold, *Proceedings of the 25. Rarefied Gas Dynamics Symposium*, St.Petersburg, Russia, 1170-1175.

Sengil, N. and Edis, F.O., 2007. Implementation of parallel DSMC method to adiabatic piston problem, *Proceedings of the International Conference on Parallel CFD 2007*, Antalya, Türkiye.

Sengil, N. and Edis, F.O., 2007. Multidimensional MPI communication scheme for the direct simulation Monte Carlo method applied to micro-nozzles, *Proceedings of the 4. Ankara International Aerospace Conference*, Ankara, Türkiye, AIAC-2007-031.

Sengil, N. and Edis, F.O., 2007. Computation of 3D cold gas micro nozzle performance with parallel direct simulation Monte Carlo solver, Science and Super Computing in Europe, HPC Europe (**RII3-CT-2003-506079**) Report, Cineca, Italy.