

T.C.
GEBZE TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ

ÖZEL AKIŞ PROBLEMLERİNİN MOLEKÜLER DİNAMİK
SİMÜLASYONU İLE İNCELENMESİ

ESMA PALA ÖNGÜL

DOKTORA TEZİ
MAKİNE MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI

DANIŞMAN: PROF. DR. İLYAS KANDEMİR

OCAK 2025

T.C.
GEBZE TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ

**ÖZEL AKIŞ PROBLEMLERİNİN MOLEKÜLER
DİNAMİK SİMÜLASYONU İLE İNCELENMESİ**

ESMA PALA ÖNGÜL

DOKTORA TEZİ
MAKİNE MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI

DANIŞMAN: PROF. DR. İLYAS KANDEMİR

OCAK 2025

T.R.
GEBZE TECHNICAL UNIVERSITY
GRADUATE SCHOOL

**INVESTIGATION OF SPECIAL FLOW PROBLEMS
USING MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION**

ESMA PALA ÖNGÜL

A THESIS OF DOCTORATE
DEPARTMENT OF MECHANICAL ENGINEERING

ADVISOR: PROF. DR. İLYAS KANDEMİR

JANUARY 2025

DOKTORA JÜRİ ONAY FORMU

GTÜ Lisansüstü Eğitim Enstitüsü Yönetim Kurulunun 22/07/2024 tarih ve 2024/39 sayılı kararıyla oluşturulan jüri tarafından 02/01/2025 tarihinde tez savunma sınavı yapılan Esma PALA ÖNGÜL'ün tez çalışması Makine Mühendisliği Anabilim Dalında DOKTORA tezi olarak kabul edilmiştir.

JÜRİ

ÜYE

(TEZ DANIŞMANI) : Prof. Dr. İlyas KANDEMİR

ÜYE

: Prof. Dr. Süleyman KARSLI

ÜYE

: Dr. Öğr. Üyesi Volkan Ramazan AKKAYA

ÜYE

: Doç. Dr. Alaattin Metin KAYA

ÜYE

: Dr. Öğr. Üyesi Onur SON

ONAY

Gebze Teknik Üniversitesi Lisansüstü Eğitim Enstitüsü Yönetim Kurulunun

...../...../..... tarih ve/..... sayılı kararı.

İMZA/MÜHÜR

ÖZET

Gelişen hesaplama kapasiteleriyle birlikte Moleküler Dinamik (MD) simülasyonları, mikro ve nano ölçekteki akış problemlerinin çözümünde giderek daha önemli bir araç haline gelmiştir. Geleneksel akışkanlar dinamiği yöntemleri, Navier-Stokes denklemleri gibi süreklilik varsayımlarına dayansa da bu yöntemler mikro ve nano ölçekteki sınır tabaka etkilerini ve moleküler düzeydeki karmaşık süreçleri tam olarak yansıtamayabilir. Sürekli ortam kabulü, kayma/kaymazlık sınır şartları, sabit akışkan özellikleri gibi varsayımlar, küçük ölçeklerde fiziksel gerçeklikten uzaklaşabilir. Bu bağlamda MD simülasyonları, moleküller arası çarpışmalar, enerji-momentum transferleri gibi atomik düzeydeki etkileşimleri modelleme yetenekleriyle öne çıkmaktadır.

Bu tezde, MD simülasyonlarının mikro ve nano ölçekteki akış problemlerine uygulanabilirliği ayrıntılı olarak incelenmiştir. Çalışma, özellikle Couette ve Poiseuille akışları, şok tüpleri ve fırça keçesi sistemlerine odaklanmıştır. Couette ve Poiseuille akışları simülasyonları, farklı Knudsen ve Mach sayılarında gerçekleştirilmiş ve nano ölçekteki gaz dinamiği problemleri hakkında önemli veriler sunulmuştur. Bu süreçte, duvar hızları, sıcaklıklar ve basınç gradyanları gibi parametrelerin gazın moleküler düzeydeki davranışlarına etkileri analiz edilmiştir. Ayrıca, gaz moleküllerinin sıkıştırılabilirlik özellikleri dikkate alınarak, ses altı, transonik ve süpersonik rejimlerde kapsamlı bir analiz gerçekleştirilmiştir. Şok tüplerine yönelik çalışmalarda ise, şok dalgalarının gazların dinamik ve termodinamik özelliklerine etkileri moleküler düzeyde incelenmiştir. Farklı gaz türleri, örneğin helyum ve argon, ile bunların karışımları için enerji ve yoğunluk profillerindeki değişimler değerlendirilmiştir. Bu analizlerde, gazların ses hızlarının ölçülmesi ve enerji aktarım mekanizmalarının teorik hesaplamalarla karşılaştırılması, MD simülasyonlarının bu sistemlerdeki gücünü ortaya koymuştur. Fırça keçesi sistemlerine yönelik incelemelerde, döner ve sabit bileşenler arasındaki sızıntıyı en aza indirmeyi hedefleyen bu elemanlar, moleküler seviyede analiz edilmiştir. Rotor hızlarının ve basınç farklarının moleküler yoğunluk, basınç ve enerji birikimi üzerindeki etkileri detaylı bir şekilde değerlendirilmiş ve bu sistemlerin mühendislik uygulamalarında performansını artırmaya yönelik değerli bilgiler elde edilmiştir. Bu süreçte, MD simülasyonlarının paralelleştirilmesi için modern paralel hesaplama teknikleri kullanılmış ve bu sayede moleküler düzeydeki hesaplamaların hızını ve verimliliğini artırmada önemli ilerlemeler kaydedilmiştir. 1.600 hücre ve 27 iş parçacığıyla yapılan çalışmalarda 4,85 hızlanma faktörü elde edilmiş, ancak hücre ve iş parçacığı sayılarındaki artışın veri transferini artırarak performansı sınırladığı gözlemlenmiştir. Bu nedenle, optimum performansın sağlanması için parametrelerin dikkatlice dengelenmesi gerektiği sonucuna ulaşılmıştır.

Bu çalışma, MD simülasyonlarının mikro ve nano ölçekteki akış problemlerini anlamadaki kritik rolünü ve hesaplama avantajlarını ortaya koymuştur. Simülasyonların, sınır tabaka etkileri ve moleküler düzeydeki karmaşık süreçler gibi geleneksel yöntemlerin ötesindeki problemlere çözüm sunduğu görülmüştür. Paralel hesaplama teknikleriyle verimlilik artışı sağlanmış ve bu yöntemlerin büyük ölçekli bilimsel simülasyonlarda etkili bir şekilde uygulanabileceği gösterilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Moleküler dinamik; Couette akışı; basınç gradyanı; şok tüpü; fırça keçe; paralel programlama

ABSTRACT

As computational capabilities increase, Molecular Dynamics (MD) simulations have become a crucial tool in solving flow problems at micro and nano scales. While traditional fluid dynamics methods rely on continuum-based approaches such as the Navier-Stokes equations, these approaches often fail to accurately represent boundary layer effects and molecular-level processes at these scales. Assumptions such as the continuum hypothesis, slip/no-slip boundary conditions, isothermal models, and constant fluid properties may deviate from physical reality in small-scale systems.

This thesis provides a comprehensive examination of the applicability of MD simulations to micro- and nanoscale flow problems, focusing on Couette and Poiseuille flows, shock tubes, and brush seal systems. In the simulations of Couette and Poiseuille flows, simulations were conducted across various Knudsen and Mach numbers, providing significant insights into nanoscale gas dynamics problems.

Parameters such as wall velocities, temperatures, and pressure gradients were analyzed for their effects on the molecular behavior of gases. Additionally, compressibility effects of gas molecules were studied in subsonic, transonic, and supersonic regimes, offering a detailed assessment.

In the studies on shock tubes, the effects of shock waves on the dynamic and thermodynamic properties of gases were investigated at the molecular level. Various gas types, such as helium and argon, and their mixtures were analyzed to evaluate changes in energy and density profiles. These studies demonstrated the power of MD simulations by comparing measured speeds of sound and energy transfer mechanisms with theoretical predictions.

The examination of brush seal systems, which aim to minimize leakage between rotating and stationary components, involved molecular-level analyses. The effects of rotor speeds and pressure differences on molecular density, pressure, and energy accumulation were explored, yielding valuable insights for improving performance in engineering applications.

Modern parallel computing techniques were employed to parallelize MD simulations, significantly enhancing the speed and efficiency of molecular-level computations. With 1,600 cells and 27 threads, a speedup factor of 4.85 was achieved. However, it was observed that increasing the number of cells and threads resulted in higher data transfer overhead, limiting performance. Consequently, the study concludes that careful balancing of parameters is essential for achieving optimal performance.

This work highlights the critical role and computational advantages of MD simulations in understanding micro- and nanoscale flow dynamics. By providing solutions to problems beyond the reach of traditional methods, such as boundary layer effects and molecular-scale processes, MD simulations have proven to be a powerful tool. Furthermore, the use of parallel computing has demonstrated significant efficiency gains, showcasing the effectiveness of these methods in large-scale scientific simulations.

Keywords: Molecular dynamics; Couette flow; pressure gradient; shock tube; brush seal; parallel programming

TEŞEKKÜR

Öncelikle, tez konumu belirleme, yönlendirme ve bilimsel katkılarıyla çalışmamın her aşamasında rehberlik eden değerli danışman hocam Prof. Dr. İlyas Kandemir'e en derin minnet ve teşekkürlerimi sunarım.

Tez izleme komitesinde yer alan ve çalışmamı değerlendiren Prof. Dr. Süleyman Karşlı, Dr. Öğr. Üyesi Volkan Ramazan Akkaya ve Dr. Öğr. Üyesi Sedat Tokgöz'e katkıları için teşekkür ederim. Ayrıca, doktora jürimde yer alan Doç. Dr. Alaattin Metin Kaya ve Dr. Öğr. Üyesi Onur Son'a değerli görüş ve değerlendirmeleri için teşekkür ederim.

Çalışmam süresince yanımda olan ve manevi destekleriyle beni motive eden değerli arkadaşlarım Selin Engin, İlke Algül, Başak Gök, Eda Özyılmaz, Fethiye Coşkun, Seda Kol ve Murat Murutoğlu'na en içten teşekkürlerimi sunarım. Aynı zamanda bilgi birikimi ve tecrübeleriyle bana yol gösteren Doç. Dr. Emel Kuram'a desteklerinden dolayı minnettarlığımı ifade etmek isterim.

Tezimin en zor anlarında yanımda olan, hem akademik bilgi birikimiyle çalışmama katkı sağlayan hem de manevi desteğiyle beni her daim motive eden sevgili eşim Fahreddin Fatih Öngül'e teşekkürlerimi dile getirmek isterim.

Beni bugünlere getiren, sevgileri, sabırları ve destekleriyle her zaman yanımda olan değerli aileme en içten teşekkürlerimi sunarım.

Ayrıca, bu çalışmanın hayata geçirilmesinde dolaylı veya doğrudan emeği geçen tüm kişilere ve kurumlara teşekkür ederim. Gebze Teknik Üniversitesi Yüksek Performanslı Hesaplama Laboratuvarı'nı tesis ederek sağladıkları hesaplama kaynaklarına erişim ve tezde kullanılan simülasyonları gerçekleştirme olanağı sundukları için TUSAŞ Motor Sanayii A.Ş. (TEI)'ye teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	v
ABSTRACT	vi
TEŞEKKÜR	vii
İÇİNDEKİLER	viii
SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ	xi
ŞEKİLLER DİZİNİ	xiii
TABLolar DİZİNİ	xv
1. GİRİŞ	1
2. MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYON MODELİ	11
2.1 Simülasyon Parametreleri ve Kabulleri	11
2.2 Simülasyon Alanının Tanımı	12
2.2.1 Hesaplama Alanının Özellikleri	12
2.2.2 Molekül Yerleşimi	13
2.3 Matematiksel Modeller	14
2.3.1 Hız ve Sıcaklık Arasındaki İlişki	14
2.3.2 Ortalama Serbest Yol	16
2.4 Çok Hücreli Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu	17
2.4.1 Olay Güdümlü Yaklaşım ve Temel Olaylar	18
2.4.1.1 Moleküller Arası Çarpışmalar	19
2.4.1.2 Hücre Değişimi (Sanal Olay)	19
2.4.1.3 Sınır Etkileşimleri	19
2.4.2 Molekül-Hücre Sınırı Geçiş Zamanı	20
2.4.3 Moleküller Arası Çarpışma Dinamikleri	21
2.4.4 Çarpışma Sonrası Hızların Hesaplanması	23
2.5 Moleküler Dinamik Simülasyonlarının İşleyiş Süreci ve Akış Diyagramı	24
2.6 Sınır Koşulları ve Yansıma Modelleri	27
2.6.1 Düzgün Yansıma Sınır Koşulları	27
2.6.2 Dağınık Yansıma Sınır Koşulları	28
2.6.3 Periyodik Sınır Koşulu	33
2.7 Simülasyonların Fiziksel Sistemlere Uygulanabilirliği	34
2.8 Knudsen Sayısının Hesaplanması ve Rolü	35
3. PARALEL PROGRAMLAMA	37
3.1 Seri ve Paralel Programlama Kavramları	37
3.2 Paralel Programlama Modelleri	39
3.2.1 Paylaşılan Bellek Modelleri	39
3.2.2 Dağıtılmış Bellek Modelleri	40
3.2.3 Hibrit Modeller	41
3.2.4 Heterojen Yapılar	41
4. BASINÇ GRADYANLI COUETTE AKIŞININ MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYONU İLE İNCELENMESİ	43
4.1 Yöntem ve Simülasyon Tasarımı	44
4.1.1 Simülasyon Alanı ve Hesaplama Yöntemleri	44
4.1.2 Basınç Gradyanı	46

4.1.3 Simülasyon Parametreleri	47
4.1.4 Sıcaklık ve Basınç için Moleküler Dinamik Temelli Hesaplamalar	50
4.2 Simülasyon Sonuçları	51
4.2.1 Molekül Sayı Yoğunluğu Dağılımları	52
4.2.2 Akış Çizgileri	54
4.2.3 Bölgesel Basınç Dağılımları	57
4.2.4 Hız Profilleri	60
4.2.5 Sıcaklık Profilleri	61
4.2.6 Parametrelerin Birleşik Etkisi	62
5. ŞOK TÜPÜ ANALİZLERİNİN MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYONU İLE İNCELENMESİ	67
5.1 Simülasyon Yöntemleri	68
5.2 Simülasyon Sonuçları ve Analizi	71
5.2.1 Saf Gazların Analizi	71
5.2.1.1 Helyum (He) Simülasyonu	71
5.2.1.2 Argon (Ar) Simülasyonu	73
5.2.2 Gaz Karışımlarının Analizi	74
5.2.3 Sonuçlar ve Tartışma	75
6. FIRÇA KEÇELERİN MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYONU İLE İNCELENMESİ	84
6.1 Simülasyon Alanı	86
6.2 Simülasyon Parametreleri	88
6.3 Simülasyon Sonuçları	90
7. Çok Hücreli Moleküler Dinamik Simülasyonu Yönteminin Paralleleştirilmesi	99
7.1 OpenMP'nin Çok Hücreli Simülasyonlardaki Rolü	100
7.2 Kod Optimizasyonu ve Performans Artışı	100
7.3 Performans Değerlendirmesi için Kullanılan Yöntem ve Formüller	101
7.3.1 Hızlanma Faktörü (Speedup) Hesaplama Yöntemi	101
7.3.2 Verimlilik (Efficiency) Hesaplama Yöntemi	101
7.4 Test Planı	102
7.4.1 Test 1: İş Parçacığı Sayısına Göre Performans Analizi	102
7.4.2 Test 2: Hücre Sayısına Göre Performans Analizleri	103
7.4.3 Test 3: Molekül Sayısına Göre Performans Analizleri	104
7.5 Paralel ve Seri Hesaplamaların Karşılaştırmalı Performans Değerlendirmesi	105
7.5.1 Test 1: İş Parçacığı Sayısına Göre Performans Analizleri	105
7.5.2 Test 2: Hücre Sayısına Göre Performans Analizleri	108
7.5.3 Test 3: Molekül Sayısına Göre Performans Analizleri	109
7.6 Özel Akış Problemlerinin Çözümlerinde Paralel Programlamanın Etkisi	110
8. SONUÇ	112
8.1 Simülasyon Sonuçları	113
8.1.1 Basınç Gradyanlı Couette Akışının Moleküler Dinamik Simülasyonu ile İncelenmesi	113
8.1.2 Şok Tüpü Analizlerinin Moleküler Dinamik Simülasyonu ile İncelenmesi	113
8.1.3 Fırça Keçelerin Moleküler Dinamik Simülasyonu ile İncelenmesi	114
8.2 Paralel Programlama ve Performans Analizleri	114
8.3 Genel Değerlendirme ve Gelecekteki Çalışmalar	116

KAYNAKLAR	117
ÖZGEÇMİŞ	129
TEZ ÇALIŞMASI KAPSAMINDA YAPILAN YAYINLAR	130



SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ

2B	: İki boyutlu
3B	: Üç boyutlu
a	: Ses hızı
A	: Kesit alanı
AR	: En-boy oranı (Aspect Ratio)
c	: Hız vektörü
c_{mean}	: Ortalama hız
c_{mp}	: En olası hız
c_{rms}	: rms hızı
cpp	: Her bir parçacık başına çarpışma sayısı (collision per particle)
CPU	: Merkezi İşlem Birimi (Central Processing Unit)
d	: Molekül çapı
dPdx	: Basınç gradyanı değer aralığı
DSMC	: Direkt Simülasyon Monte Carlo
E	: Kinetik enerji
GPU	: Grafik İşlem Birimi (Graphics Processing Unit)
k	: Boltzman sabiti
Kn	: Knudsen sayısı
L	: Karakteristik uzunluk
LTA	: Uzun Süreli Ortalama Alma (Long Time Averaging)
m	: Molekül kütlesi
M	: Momentum
MD	: Moleküler Dinamik
MEMS	Mikro elektromekanik sistemler
N	: Molekül sayısı
n	: Molekül sayı yoğunluğu
NEMS	Nano elektromekanik sistemler
P	: Basınç
P_r	: Basınç oranı
PW	: Basınç gradyanı
R	: Gaz sabiti
r	: Molekül yarıçapı
s	: İki molekül arasındaki uzaklık
T	: Sıcaklık
T_a	: Alt duvar sıcaklığı
$T_{\bar{u}}$	: Üst duvar sıcaklığı

t	: Zaman
u	: Hız
u_n	: Normal hız
u_t	: Teğetsel hız
V	: Hacim
V_x	: Üst ve alt duvar hızları
x	: Molekül pozisyonu
ξ	: Normalize edilmiş hız
γ	: Özgöl ısı oranı
λ	: Ortalama serbest yol
$\langle \rangle$	: Ortalama operatörü
μ_{ij}	: İndirgenmiş kütle



ŞEKİLLER DİZİNİ

	<u>Sayfa</u>
Şekil 1.1: Knudsen sayısına göre akış rejimleri.	4
Şekil 2.1: Simülasyonlarda kullanılan hesaplama alanı temsili gösterimi.	12
Şekil 2.2: Simülasyon alanında moleküller arası mesafe (s).	13
Şekil 2.3: Gaz molekülleri için normalleştirilmiş hız dağılımı ve ilgili parametreler.	16
Şekil 2.4: a. Hesaplama alanının genel temsili gösterimi, b. Hesaplama alanının hücrel olarak bölünmüş hali.	17
Şekil 2.5: Sert küre modeli ile iki molekül arasındaki çarpışma geometrisi.	21
Şekil 2.6: Moleküler dinamik simülasyonlarının işleyiş süreci akış diyagramı.	25
Şekil 2.7: Düzgün yansıma sınır koşulunu gösteren şematik bir temsil.	28
Şekil 2.8: Dağınık yansıma sınır koşulunun temsili.	29
Şekil 2.9: Dağınık yansıma altında teğetsel hız dağılım fonksiyonu.	30
Şekil 2.10: Dağınık yansıma altında normal hız dağılım fonksiyonu.	30
Şekil 2.11: Couette akışında $uw = 1$ durumuna ait teğetsel hız dağılım fonksiyonu.	31
Şekil 2.12: Periyodik sınır koşulları altında moleküllerin geçiş ve komşuluk ilişkilerinin temsili.	34
Şekil 3.1: Seri ve paralel hesaplama yapısının temel farkları.	38
Şekil 4.1: Hesaplama alanı temsili gösterimi.	45
Şekil 4.2: Basınç gradyanlı hesaplama alanının temsili gösterimi.	46
Şekil 4.3: $V_x = 0$, $AR=1,0$, $N=204.800$ durumunda molekül sayı yoğunluğu grafikleri.	52
Şekil 4.4: $V_x = 5,0$, $AR=1,0$, $N=204.800$ durumunda molekül sayı yoğunluğu grafikleri.	54
Şekil 4.5: $V_x = 0$, $AR=1,0$, $N=204.800$ durumunda akış çizgisi grafikleri.	55
Şekil 4.6: $V_x = 5,0$, $AR=1,0$, $N=204.800$ durumunda akış çizgisi grafikleri.	56
Şekil 4.7: $V_x = 0$, $AR=1,0$, $N=204.800$ durumunda bölgesel basınç değerleri.	58
Şekil 4.8: $V_x = 5,0$, $AR=1,0$, $N=204.800$ durumunda bölgesel basınç değerleri.	59
Şekil 4.9: $AR = 1,0$, $N = 204.800$ durumunda hız profilleri.	60
Şekil 4.10: $AR = 1,0$, $N = 204.800$ durumunda sıcaklık profilleri.	62
Şekil 4.11: $Kn = 0,034$ için T_u , V_x ve dP/dx kombinasyonlarına bağlı olarak hesaplama alanındaki ortalama basınç değerleri.	64
Şekil 4.12: $Kn = 0,069$ için T_u , V_x ve dP/dx kombinasyonlarına bağlı olarak hesaplama alanındaki ortalama basınç değerleri.	64
Şekil 4.13: $Kn = 0,137$ için T_u , V_x ve dP/dx kombinasyonlarına bağlı olarak hesaplama alanındaki ortalama basınç değerleri.	65
Şekil 4.14: Çeşitli Kn sayıları için hesaplama alanındaki ortalama basınç.	66
Şekil 5.1: Şok tüpü başlangıç durumlarının temsili gösterimi, (a) Monatomik He gazı, (b) Monatomik Ar gazı, (c) Monatomik karışım durumu.	69
Şekil 5.2: Şok tüpünde He gazının molekül sayı yoğunluğunun zamanla değişimi.	72
Şekil 5.3: Şok tüpünde Ar gazının molekül sayı yoğunluğunun zamanla değişimi	73
Şekil 5.4: Şok tüpünde %50 He ve %50 Ar gazlarının molekül sayı yoğunluklarının zamanla değişimi.	75

Şekil 5.5: Şok tüpünde saf He, saf Ar ve karışımlarının sayı yoğunluklarının zamanla değişimi.	76
Şekil 5.6: Saf He, saf Ar ve karışıma ait enerji karşılaştırması.	77
Şekil 5.7: Saf He, saf Ar ve karışıma ait molekül sayı yoğunluğu karşılaştırması.	79
Şekil 5.8: Saf He, saf Ar ve karışım gazlarına ait akış çizgilerinin (streamline) zamanla karşılaştırılması.	81
Şekil 6.1: Fırça keçesinin yapısal elemanları ve akış yollarının şematik gösterimi [121].	86
Şekil 6.2: Hesaplama alanının izometrik görünümü.	87
Şekil 6.3: Fırça keçesi ve rotoru içeren hesaplama alanı.	87
Şekil 6.4: Basınç gradyanlarına karşılık gelen basınç oranlarının gösterimi.	89
Şekil 6.5: Farklı rotor hızları ve basınç gradyanı koşullarında molekül sayı yoğunluğunun x eksenı boyunca dağılımı.	91
Şekil 6.6: Çeşitli rotor hızı (V_z) ve basınç gradyanı (PW) koşullarında fırça keçesi analizlerinin molekül sayı yoğunluğu (n) dağılımı.	95
Şekil 6.7: Çeşitli rotor hızı (V_z) ve basınç gradyanı (PW) koşullarında fırça keçesi analizlerinin basınç (P) dağılımı.	96
Şekil 6.8: Çeşitli rotor hızı (V_z) ve basınç gradyanı (PW) koşullarında fırça keçesi analizlerinin enerji (E) dağılımı.	97
Şekil 7.1: Çok hücreli MD simülasyonunda temsili hücreler ve komşulukları.	99
Şekil 7.2: İş parçacığı sayısına göre hızlanma oranı ve verimlilik analizi.	107

TABLÖLAR DİZİNİ

	<u>Sayfa</u>
Tablo 2.1: Monatomik ve diatomik gazların fiziksel özellikleri.	34
Tablo 4.1: Simülasyonlarda kullanılan parametreler.	48
Tablo 4.2: Simülasyonlarda kullanılan veri setleri.	49
Tablo 4.3: Basınç gradyanı aralıklarının isimlendirilmesi.	63
Tablo 6.1: Simülasyonlarda kullanılan parametreler.	88
Tablo 6.2: Basınç gradyanlarına karşılık gelen basınç oranları.	89
Tablo 7.1: İş parçacığı sayısının paralel hesaplama performansı üzerindeki etkisi.	106
Tablo 7.2: Hücre sayısının paralel hesaplama performansı üzerindeki etkisi.	108
Tablo 7.3: Molekül sayısının paralel hesaplama performansı üzerindeki etkisi.	110
Tablo 7.4: Bu çalışmada gerçekleştirilen simülasyonların seri ve paralel sürelerinin karşılaştırması.	111

1. GİRİŞ

Moleküler dinamik (MD) simülasyonları, moleküllerin ve malzemelerin atomik ve moleküler düzeydeki davranışlarını ve etkileşimlerini inceleyebilme kapasitesi nedeniyle çeşitli bilim ve mühendislik araştırmalarında geniş bir uygulama alanı bulmaktadır. Bu yöntem, özellikle mikro ve nano elektromekanik sistemler (MEMS ve NEMS) gibi yenilikçi teknolojilerdeki hızlı gelişmeler doğrultusunda kritik bir araç haline gelmiştir. MEMS ve NEMS'in son yıllarda gösterdiği hızlı ilerlemeler, biyomedikal cihazlardan enerji sistemlerine kadar geniş bir yelpazede yeni uygulamaların doğmasına olanak sağlamıştır [1]–[4]. Mikro cihazların, örneğin mikro valfler, pompalar ve türbinlerin, geliştirilmesi ve işletilmesinde gaz akışlarının anlaşılması büyük önem taşımaktadır [5]–[7]. Ancak, nano-kanal akışlarını temsil eden sayısal yöntemlerin yetersizliği ve deneysel çalışmaların yüksek maliyet ve teknik zorluklar içermesi, MD simülasyonlarını bu alanlarda vazgeçilmez bir yöntem haline getirmiştir [8]. MD simülasyonları, gaz moleküllerinin karmaşık davranışlarını atomik düzeyde inceleme imkânı sunarak mikro ve nano ölçekteki gaz dinamiği problemlerine çözüm getirmektedir [4]. Ayrıca, bu yöntem sayesinde, akışkanların difüzyon, ısı transferi ve viskozite gibi özellikleri detaylı olarak analiz edilmekte, bu analizler mikroakışkan cihazların tasarımı ve optimizasyonu için önemli bilgiler sağlamaktadır [9], [10].

MD simülasyonları, özellikle mikro ve nano ölçekteki karmaşık fiziksel süreçlerin anlaşılması ve modellenmesi için etkin bir yöntem sunmaktadır. Bu simülasyonlar, makroskobik davranışları atomik düzeydeki olaylarla ilişkilendirme yeteneği sayesinde, fiziksel ve kimyasal süreçlerin daha ayrıntılı analizine olanak tanımaktadır. Örneğin, gaz moleküllerinin duvarlarla veya diğer moleküllerle etkileşimleri sırasında enerji ve momentum transferleri, MD simülasyonları kullanılarak incelenebilmekte ve bu sayede, sınır tabaka fenomenleri, yüzey etkileşimleri ve ısı transfer süreçleri hakkında derinlemesine bilgi sağlanmaktadır [11], [12].

MD simülasyonlarının bir diğer önemli avantajı, deneysel yöntemlerin teknik sınırlamalarını ve maliyetlerini aşabilmesidir. Bu simülasyonlar, özellikle nano-kanal akışları gibi yüksek çözünürlük gerektiren durumlarda, deneylerle elde edilmesi güç verilerin analizi için güçlü bir araçtır. Atomik düzeydeki ayrıntıları yakalayabilmesi,

bu yöntemi, sıvı ve gaz moleküllerinin davranışlarını anlamada ve bu bilgileri teknolojik uygulamalara aktarmada vazgeçilmez kılmaktadır. Örneğin, moleküller arası etkileşimlerin difüzyon katsayısı üzerindeki etkisi ya da nanoölçekteki akışkanların termofiziksel özelliklerindeki değişimler, MD simülasyonlarıyla güvenilir şekilde incelenebilir [13], [14].

Endüstriyel uygulamalar açısından bakıldığında, MD simülasyonları, malzeme bilimi, biyomedikal mühendislik ve enerji sistemleri gibi birçok alanda tasarım süreçlerini desteklemektedir [15]. Özellikle kimyasal reaksiyonlar ve akışkan karışımları gibi hassas süreçlerin modellenmesinde, bu yöntem hem verimlilik artışı sağlar hem de sistemlerin performansını optimize etmek için gereken bilimsel bilgiyi sunmaktadır [16]. Ayrıca, nano düzeydeki malzeme davranışlarının incelenmesi, yeni nesil yüksek performanslı mikro cihazların geliştirilmesi için önemli bir rol oynamaktadır [17], [18].

Seyreltilmiş gaz rejimlerinde (örneğin, düşük basınç, yüksek irtifa, atmosfere yeniden giriş, vakum sistemleri ve hipersonik uçuşlar), geleneksel süreklilik temelli akışkanlar dinamiği modellerinin yetersiz kaldığı durumlarda MD simülasyonları önemli bir çözüm sunmaktadır [19], [20]. Bu yöntem, gaz moleküllerinin katı yüzeylerle etkileşimlerinden kaynaklanan sınır koşullarını ayrıntılı bir şekilde inceleyerek, nano ölçekli cihazlar, malzeme bilimi, kataliz ve yüzey reaksiyonları gibi alanlarda kritik bilgiler sağlar [21], [22]. Sınır etkilerinin akış davranışı üzerindeki belirgin etkisi dikkate alındığında, MD simülasyonları bu tür süreçlerin incelenmesinde hem teorik anlayışa hem de pratik uygulamalara değerli katkılar sunmaktadır [23].

Gazların moleküler ölçekteki hareketlerini anlamak için, kinetik gaz teorisi, fizik biliminin temel ilkelerinden biridir. Bu teori, gazların sıcaklık, basınç ve hacim gibi makroskobik özelliklerini, moleküler bileşim ve hareketlere dayalı olarak açıklamaktadır. Kinetik teori, gazları birbirleriyle sürekli etkileşimde olan parçacık toplulukları olarak ele almaktadır [24], [25]. Bu yaklaşımın temel matematiksel çerçevesi, gazların davranışını tanımlayan Maxwell-Boltzmann denklemi ile oluşturulmuştur [26], [27]. Taşıma olaylarının daha kapsamlı bir çözümünü sağlamak için Chapman-Enskog yaklaşımı geliştirilmiş ve bu yaklaşımın uygulamaları geniş bir alanda kendine yer bulmuştur [28], [29].

MD simülasyonu [30] ve Direkt Simülasyon Monte Carlo (DSMC) [20], gazların kinetik teorisine dayanan iki temel yöntemdir. MD, moleküller arası etkileşimleri ve çarpışmaları ayrıntılı bir şekilde modelleyerek daha gerçekçi ve doğru sonuçlar sağlarken, DSMC, moleküler çarpışmalara dayalı olasılıksal bir yaklaşıma sahiptir [31], [32]. MD yöntemi, tüm çarpışmaları ele aldığı için daha fazla hesaplama kaynağı gerektirirken, DSMC, daha düşük hesaplama maliyeti ile büyük ölçekli sistemlerde hızlı çözümler sunar [33]. Bu iki yöntem, farklı ölçeklerde ve karmaşıklık seviyelerinde gaz akışlarının analizinde tamamlayıcı roller üstlenmektedir.

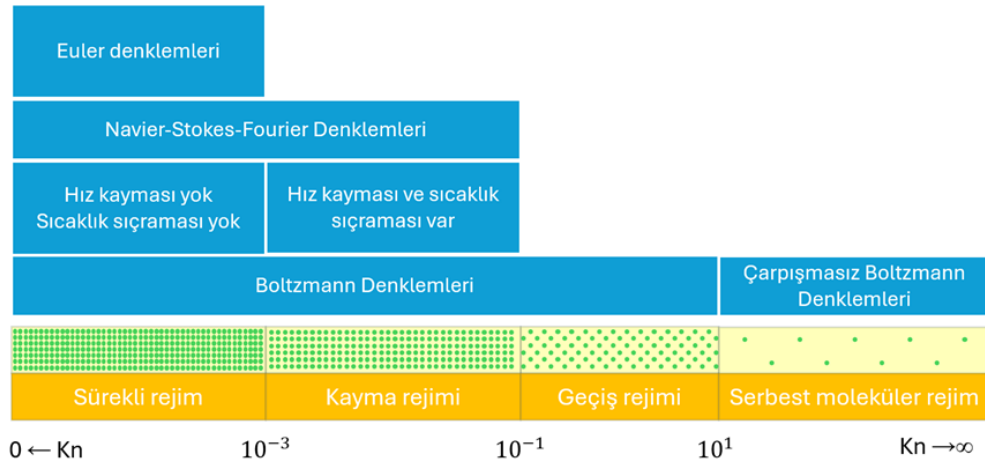
Akış problemlerinin çözümünde sıklıkla kullanılan sayısal ve analitik yaklaşımlar, bazı varsayımlara dayanmaktadır. Sürekli ortam varsayımı, sabit akışkan özellikleri, iki boyutlu (2B) yaklaşımlar, ampirik viskozite modelleri, daimilik, Newtonyenlik veya viskoz olmayan akışkan modelleri ve izotermal ortam gibi varsayımlar, makroskobik düzeyde genellikle makul sonuçlar vermektedir [34], [35]. Ancak bu varsayımlar, mikro ve nano düzeyde yeterli olmayabilir ve önemli hatalara yol açabilir. Örneğin, nano ölçekte gazların moleküler etkileşimleri, geleneksel varsayımların ötesinde daha karmaşık davranışlar sergilemektedir. MD simülasyonları, bu tür makro ölçekli varsayımlara gerek duymadan mikro ve nano ölçekteki karmaşık fiziksel süreçleri doğrudan modelleyebilir. Hatta bazı durumlarda bu varsayımları yapmak teknik olarak imkânsızdır, çünkü MD, moleküler düzeydeki dinamikleri ve etkileşimleri tam anlamıyla hesaplayabilen bir yöntemdir [36]. Bu özellikleri sayesinde MD, nano-kanal akışlarından yüzey-gaz etkileşimlerine kadar birçok alanda ayrıntılı bir çözüm sağlamaktadır [37], [38].

Günümüzde, bilgisayarların artan hesaplama kapasiteleri sayesinde, gaz akışı problemlerinin çözümünde MD simülasyonları, bilim insanlarının dikkatini giderek daha fazla çekmektedir [39]–[42]. MD simülasyonları, moleküler düzeydeki detayları doğru bir şekilde modelleyebilme kabiliyetiyle akışkanlar dinamiği araştırmalarında önemli bir araç haline gelmiştir. Bu tür simülasyonlarda molekül sayısının artırılması, moleküler etkileşimlerin daha geniş bir ölçekte doğru şekilde modellenmesi için gereklidir. Ancak, simülasyonlarda molekül sayısının artırılması ve bu yolla Knudsen sayısının (Kn) azaltılması, yüksek hesaplama maliyetleri nedeniyle halen önemli bir zorluk teşkil etmektedir. Knudsen sayısının yüksek olduğu rejimlerde ise, moleküler etkileşimler baskındır ve bu nedenle akışın doğru modellenmesi için MD simülasyonları kullanılabilir. Bu hesaplama sınırlamalarını aşmak ve daha

büyük sistemlerde moleküler düzeyde analiz yapabilmek için sert küre modeli sıklıkla tercih edilmektedir [26], [27]. Sert küre modeli, gaz moleküllerini katı küreler olarak kabul ederek, moleküller arasındaki çarpışma ve hareketleri matematiksel bir çerçevede içinde modelleme imkânı sunmaktadır. Bu model, özellikle düşük yoğunluklu gaz ortamlarında moleküller arasındaki etkileşimleri temsil edebilmesi sayesinde MD simülasyonlarında yaygın bir şekilde kullanılmaktadır [28]. Ayrıca, sert küre modeli, moleküler hareketleri ve çarpışmaları hesaplama açısından basitleştirilmiş bir yöntem sunarak hesaplama maliyetlerini düşürmekte ve daha geniş ölçekli sistemlerin modellenmesine olanak tanımaktadır.

Knudsen sayısı, MD simülasyonlarında gaz hareketlerini tanımlamak için kritik bir parametredir. MD simülasyonları, hem düşük Knudsen sayıları (süreklilik yaklaşımı için $Kn < 0.01$) hem de yüksek Knudsen sayıları (nano kanallar ve seyreltilmiş gazlar gibi rejimler) için güvenilir çözümler sunmaktadır. Düşük Knudsen sayılarında, gaz moleküllerinin ortalama serbest yolu akış alanının karakteristik boyutuna kıyasla oldukça küçüktür. Bu koşullar altında gaz davranışı, süreklilik akışına benzer hale gelir ve Navier-Stokes denklemleri gibi süreklilik temelli modeller gaz hareketini iyi bir şekilde tanımlamak için yeterli olmaktadır.

Knudsen sayısı arttıkça, gazın davranışı, ortalama serbest yolun karakteristik uzunluk ölçeğine benzer veya daha büyük hale geldiği seyrek akışa doğru kayar. Farklı Knudsen sayısı rejimlerinin kapsamı ve bu rejimlerde kullanılan modelleme yaklaşımları **Şekil 1.1**'de özetlenmiştir.



Şekil 1.1: Knudsen sayısına göre akış rejimleri.

Bu geiş srecinde, srekli­lik varsayımları yetersiz kalır ve gazın molekler dzeydeki zelliklerini doėru Őekilde modellemek iin MD simlasyonları daha etkili bir yntem sunar. zellikle sıkıŐtırılabilir akıŐlar iin MD simlasyonları, gazın molekler seviyede sıkıŐtırılabilirlik zelliklerini aıka modelleyerek, Navier-Stokes denklemlerinden daha kapsamlı ve doėru sonular saėlamaktadır [43]. Bu araŐtırmada kullanılan molekler dzeyde analiz, sıkıŐtırılabilir akıŐların dinamiklerini daha doėru bir Őekilde yakalamayı ve sıkıŐtırılabilirliėin akıŐ davranıŐına olan etkilerini daha derinlemesine anlamayı hedeflemektedir.

Bu alıŐmada, gaz akıŐkanlarında karŐılaŐılan eŐitli akıŐ problemlerinin MD simlasyonları ile zlmesi amalanmaktadır. Simlasyonlarda kullanılan gazın tr ve saėlıėı, araŐtırmanın ihtiyalarına gre deėiŐtirilebilmekte ve zamana baėlı,  boyutlu, sıkıŐtırılabilir akıŐkanlar dinamiėi analizleri gerekleŐtirilmiŐtir. alıŐmada, ok hcreli MD simlasyonu yntemi benimsenmiŐtir. Bu yntem, hesaplama alanını daha kk hcrelere blerek hesaplama maliyetlerini azaltmakta ve daha verimli simlasyonlar yapılmasını saėlamaktadır. Bu kapsamda ele alınan ilk analiz, Couette ve Poiseuille akıŐlarının incelenmesi olmuŐtur. Tek atomlu bir gaz iin tasarlanan simlasyonlarda, Couette ve Poiseuille akıŐlarının MD simlasyonları, ok hcreli sert kre yntemi kullanılarak gerekleŐtirilmiŐtir. Bu simlasyonlarda, gazın akıŐ zelliklerine etki eden eŐitli parametrelerin dinamik etkilerini incelemek amacıyla, duvar hızları, basın gradyanları ve duvar sıcaklıkları birlikte deėerlendirilmiŐtir. Bu yaklaŐım, gaz molekllerinin molekler dzeyde davranıŐlarını daha iyi anlamak ve zellikle nano lekli kanallarda gaz dinamiėi problemlerine dair ayrıntılı bilgiler sunmak iin tasarlanmıŐtır. Nano kanallarda gerekleŐtirilen bu simlasyonlar, ses altı, transonik ve spersonik hız rejimlerine ulaŐarak geniŐ bir hız aralıėında analiz yapma imknı sunmuŐtur. Gazların molekler seviyedeki davranıŐlarını anlamak amacıyla, Couette akıŐı ve Poiseuille akıŐı gibi temel akıŐ yapılarına dayalı MD simlasyonları sıklıkla kullanılmaktadır [44]–[49]. Couette akıŐı, gaz molekllerinin kayma gerilmelerine verdiėi tepkiyi incelemek iin uygun bir ortam sunar ve iki paralel plaka arasında oluŐan kayma hareketiyle karakterize edilir. Bu yapı, gazların kayma gerilmesi altında nasıl davrandıėını molekler dzeyde incelemek iin olduka elveriŐlidir. Poiseuille akıŐı ise bir tpn uzunluėu boyunca var olan ve bu basın gradyanı nedeniyle akıŐı ynlendiren bir basın farkı (ΔP) ile ifade edilir.

Bir problemde sıkıştırılamazlık söz konusu olduğunda, problemin analitik çözümleri genellikle daha basit ve doğrudan elde edilebilir [23]. Literatürde tanımlanan MD simülasyonlarının çoğu, öncelikle basınçtan kaynaklanan akışlardan ziyade ivmelenen bir cisim kuvvetinin neden olduğu akışları araştırmaktadır. [50]–[53]. Bu eğilim, simülasyon alanı içinde basınç gradyanı oluşturamayan periyodik sınır koşullarının yaygın olarak kullanılmasından kaynaklanmaktadır. Periyodik sınır koşulları, basınç farklılıklarının etkisini modellemede sınırlı kalmakta ve dolayısıyla bu tür akışların detaylı bir şekilde incelenmesini zorlaştırmaktadır.

Bu sınırlamaların üstesinden gelmek için literatürde basınç farklılıklarının neden olduğu akışları oluşturmak amacıyla çeşitli yenilikçi yöntemler geliştirilmiştir. Örneğin, bir çalışmada, hesaplama alanının giriş ve çıkış bölgelerine iki sabit duvar yerleştirilmiş ve bu duvarlara dış kuvvetler uygulanarak basınç farkı oluşturulmuştur [54]. Bir başka çalışmada, moleküllerin tek yönlü hareketine izin verilmiş ve sisteme diğer yönden gelen moleküller belirli bir olasılıkla elastik olarak yansıtılarak simülasyon dengesi sağlanmıştır [55]. Bunun yanı sıra, başka bir yaklaşımda, simülasyon alanına giren ve çıkan moleküller arasındaki kare hız farkının sabit tutulduğu bir yöntem uygulanmıştır [56].

Bu çalışmada Poiseuille akışında, moleküler kütledeki değişimin uygulanan basınç gradyanlarına bağımlılığını ortadan kaldıran bir yoğunluk farklılaştırma algoritması kullanılmıştır. Bu yaklaşım aynı zamanda literatürdeki birçok Poiseuille akış çalışmasında olduğu gibi özel bir termostatik işlemin uygulanmasından kaçınmamızı sağlamıştır [57]–[59]. Basınç farkı oluşturmak için, periyodik sınır koşuluna sahip özel bir membran kullanılmış ve bu membrandan moleküllerin tek yönlü hareketine izin verilirken, karşı yönden yaklaşan moleküller, belirli bir olasılıkla elastik olarak geri yansıtılmıştır. Bu sayede, sistem içinde dinamik bir denge kurulmuş ve gaz akışının doğal özellikleri daha gerçekçi bir şekilde simüle edilmiştir. Simülasyonlarda düşük aralık oranları kullanılmış olsa da elde edilen bulgular, uygun ölçeklendirme kullanılarak benzer Knudsen sayılarına sahip seyrek gaz akışlarına genişletilebilir [60].

Bu çalışmada gerçekleştirilen simülasyonlar, Couette ve Poiseuille akışlarında kullanılan belirli Knudsen ve Mach sayıları aralıklarına odaklanmaktadır: $0.03 < Kn < 0.14$ ve $M < 1.7$. Bu parametreler, nano ölçekli akışlarda moleküler düzeydeki

davranışların detaylı bir şekilde incelenmesine olanak sağlamaktadır. Couette akışında gaz moleküllerinin kayma gerilmelerine verdiği tepkiler, Poiseuille akışında ise bir basınç gradyanıyla yönlendirilen gaz akışının özellikleri ele alınmıştır. Simülasyonlarda duvar hızları, basınç gradyanları ve duvar sıcaklıkları gibi parametreler birleştirilerek, akışın moleküler düzeydeki özellikleri detaylı incelenmiştir. Ayrıca, bu simülasyonlar içsel akış davranışlarını gerçekçi bir şekilde tasvir eden hız ve sıcaklık profilleri sağlamaktadır [61].

Couette ve Poiseuille akışlarının MD simülasyonları ve bu analizlerin detayları **Bölüm 4**'te kapsamlı bir şekilde sunulmuştur.

Bu çalışmada, bir diğer özel akış problemi olarak şok tüpleri incelenmiştir. Gaz dinamiği çalışmalarında önemli bir role sahip olan şok tüpü sistemleri, şok dalgalarının doğasını anlamak ve bu dalgaların gazlar ve malzemeler üzerindeki etkilerini incelemek için kritik bir araştırma aracıdır. Şok dalgaları, bir ortam boyunca yayılan, basınç, sıcaklık ve yoğunluk gibi termodinamik özelliklerde ani değişikliklere yol açan güçlü bozulmalar olarak tanımlanır. Şok tüpleri, özellikle yüksek sıcaklık, basınç ve hız rejimlerinde gazların dinamik davranışlarını analiz etmek için kullanılır. Bu sistemler, havacılık, uzay mühendisliği, yanma araştırmaları ve malzeme bilimi gibi çeşitli disiplinlerde, gaz akışkanlarının ve malzemelerin aşırı koşullar altındaki davranışlarını anlamak için değerli veriler sunar.

Bu çalışmada, MD simülasyonları şok tüplerindeki gaz davranışlarını moleküler düzeyde incelemek için kullanılmıştır. Çalışma kapsamında, şok tüplerinde farklı gazların ses hızları ölçülmüş ve bu değerler teorik hesaplamalarla karşılaştırılmıştır. Ayrıca, şok dalgası kaynaklı enerji ve yoğunluk değişimleri, gaz karışımlarının moleküler seviyedeki davranışları ile ilişkilendirilerek analiz edilmiştir. **Bölüm 5**'te monatomik saf ve karışım gazlarının şok tüpü içindeki davranışları incelenmiştir.

Bir diğer özel problem olarak ele alınan fırça sızdırmazlık elemanları, dönen ve sabit bileşenler arasındaki sızıntıyı en aza indirmek için kullanılan, özellikle türbinler ve pompalar gibi mühendislik uygulamalarında yaygın bir sızdırmazlık yöntemidir. Bu elemanlar, yoğun bir şekilde düzenlenmiş esnek kıllardan oluşarak sızdırmazlık yüzeyi ile uyum sağlar ve yüksek sıcaklık, basınç ve hız rejimlerinde etkili bir performans sergiler. Geleneksel labirent tipi contalara kıyasla daha iyi sızdırmazlık sağlama,

aşınmayı azaltma ve makine verimliliğini artırma gibi avantajlar sunan fırça contalar, havacılık, otomotiv ve turbo makineler gibi birçok sektörde kritik bir öneme sahiptir.

Bu çalışmada, fırça sızdırmazlık elemanlarının davranışını mikroskobik düzeyde incelemek için MD simülasyonları kullanılmıştır. Bu yöntemle, fırça kıllarının hareketli yüzeylerle ve akışkanlarla olan etkileşimleri ayrıntılı bir şekilde analiz edilebilmektedir. Fırça sızdırmazlık elemanlarının davranışlarının ve performanslarının detaylı incelemeleri, **Bölüm 6**'da kapsamlı bir şekilde ele alınmıştır. Bu bölümde, farklı rotor hızları, sıcaklıklar ve basınç gradyanları altında simülasyonlar gerçekleştirilmiş ve fırça kıllarının akışkanlarla etkileşimleri analiz edilmiştir.

MD simülasyonlarının karmaşık fiziksel sistemleri anlamada sağladığı detaylı içgörüler, bu yöntemlerin giderek daha büyük sistemlere ve daha uzun zaman ölçeklerine uygulanmasını gerektirmektedir. Ancak, bu tür simülasyonlar yoğun hesaplama gücü ve büyük veri işleme yetenekleri gerektirdiğinden, geleneksel sıralı programlama yaklaşımları bu ihtiyaçları karşılamakta yetersiz kalmaktadır. Bu noktada, paralel programlama devreye girerek, MD simülasyonlarının ölçeklenebilirliğini ve verimliliğini artıran kritik bir çözüm sunmaktadır.

Bilimsel hesaplama bağlamında ve özellikle moleküler dinamikler gibi alanlarda paralel programlama, artan hesaplama kapasiteleriyle birlikte daha uygulanabilir hale gelmiştir. Paralel programlama, araştırmacıların daha büyük sistemleri simüle etmesine, daha uzun simülasyon süreleri elde etmesine ve sıralı programlama yaklaşımlarıyla mümkün olmayan daha karmaşık etkileşim modellerini dahil etmesine olanak tanımaktadır. Bu bağlamda, paralel programlamanın temel prensibi, büyük ve karmaşık problemleri eş zamanlı olarak yürütülebilecek daha küçük, yönetilebilir görevlere ayırmaktır. Bu yaklaşım, özellikle bilimsel hesaplama, veri analizi ve simülasyonlar gibi büyük miktarda verilerin işlenmesi veya karmaşık hesaplamaların yapılması gereken alanlarda büyük fayda sağlamaktadır. Bu yaklaşım hem hesaplamaların hızlandırılmasını hem de mevcut işlem gücünün daha verimli kullanılmasını sağlamaktadır.

Paralel programlama, yalnızca merkezi işlem birimi (CPU) ile sınırlı kalmayıp, grafik işlem birimlerinin paralel yapısından da faydalanarak hesaplama kapasitesini önemli ölçüde artırabilir. Bu özellik, özellikle büyük veri kümelerinin işlenmesi, karmaşık

simülasyonların gerçekleştirilmesi ve gerçek zamanlı analizlerin yapılması gereken projelerde önemli avantajlar sunmaktadır. Bununla birlikte, paralelleştirmenin başarısı, görevlerin bağımsız çalışabilirliğine ve iş yükünün işlem birimleri arasında ne kadar dengeli bir şekilde dağıtıldığına bağlıdır. Paralel programlama, geliştiriciler, araştırmacılar ve bilim insanları için geniş bir kullanım alanı sunarak, farklı disiplinlerde yenilikçi çözümlerin temelini oluşturmaktadır [62]–[64].

Paralel programlama, görevlerin farklı düğümler veya çekirdekler arasında dağıtılarak eş zamanlı yürütülmesini sağlayan bir yöntemdir. Yüksek Performanslı Hesaplama (HPC) sistemleri bağlamında bir düğüm, bir işletim sisteminin yürütülmesinden sorumlu olan bellek ve işlemcileri içeren bağımsız bir bilgisayar sistemini ifade eder [65], [66]. Bu sistemlerde kullanılan işlemciler, genellikle birden çok çekirdeğe sahip entegre devrelerdir. Çekirdekler, komutların yürütülmesinden sorumlu temel işlevsel bileşenlerdir ve modern işlemcilerde birden fazla çekirdek, eş zamanlı işlem yürütme yeteneği sağlar. Bir işlemci birkaç çekirdekten oluşabileceği gibi, bir düğüm birden fazla işlemci içerebilir. Paralel programlama, bu yapının etkin bir şekilde kullanılabilmesi için görevlerin uygun şekilde bölünmesini ve kodun birden fazla çekirdek, işlemci veya düğüm üzerinde yürütülmesini kolaylaştırır. Bunun sağlanabilmesi için geliştiriciler, görev dağıtımı, veri paylaşımı ve senkronizasyon gibi işlevleri yerine getiren özel yazılım araçları ve programlama modelleri kullanır. Paralel programlama, yalnızca hesaplama süresini kısaltmakla kalmaz, aynı zamanda büyük miktarda veri işleme ve karmaşık simülasyonlar yürütme gibi kaynak açısından yoğun görevlerin gerçekleştirilmesini de mümkün kılar. HPC bağlamında paralel programlama, CPU'lar ve GPU'lar gibi işlem birimlerinin çok çekirdekli yapısından faydalanarak performansı üst düzeye çıkarmayı amaçlamaktadır. Paralel programlama ile ilgili ayrıntılar **Bölüm 3**'te verilmiştir.

Bu çalışmada, çok hücreli MD simülasyonlarının performansını artırmak amacıyla OpenMP kullanılarak paralelleştirme yöntemleri uygulanmıştır. Çok hücreli MD yöntemi, yoğun işlem gücü gerektiren bir hesaplama sürecine sahiptir. Paralel hesaplama teknikleri, bu yöntemin işlem sürelerini kısaltmak ve mevcut çok çekirdekli işlemcilerin kapasitesini daha etkin kullanmak için önem taşımaktadır. Hızlanma faktörü, verimlilik ve bellek kullanımı gibi temel metrikler üzerinden yapılan değerlendirmeler, paralel programlama yöntemlerinin hem işlem sürelerini önemli ölçüde iyileştirdiğini hem de daha büyük ve karmaşık sistemlerin analizinde etkili bir

özüm sunduğunu göstermiştir. Bu sayede, çok hücreli MD yönteminin geniş ölçekli simülasyonlarda daha verimli bir şekilde uygulanması mümkün olmuştur. Elde edilen sonuçlar **Bölüm 7**'de verilmiştir.

Bu tezde, özel akış problemleri, MD simülasyonları ile detaylı bir şekilde ele alınmış ve bu bağlamda Couette ve Poiseuille akışları, şok tüpleri ve fırça sızdırmazlık elemanları incelenmiştir. Her bir problem, mikroskobik düzeydeki fiziksel mekanizmaların ve gaz dinamiği davranışlarının daha iyi anlaşılmasına yönelik kapsamlı analizlerle ele alınmıştır. MD simülasyonlarının sağladığı avantajlarla, moleküler düzeydeki etkileşimler, akış davranışları ve sistem dinamikleri detaylandırılmıştır. Bu süreçte, MD simülasyonlarının paralelleştirilmesi için modern paralel hesaplama teknikleri kullanılmış ve bu sayede moleküler düzeydeki hesaplamaların hızını ve verimliliğini artırmada önemli ilerlemeler kaydedilmiştir. Tez kapsamında elde edilen bulguların detaylı değerlendirilmesi ve sonuçların tartışması, **Bölüm 8**'de verilmiştir. Ayrıca, gelecek çalışmalar için fikirler de bu bölümde sunulmuştur.

2. MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYON MODELİ

Moleküler Dinamik (MD) simülasyonları, atomik ve moleküler ölçeklerde fiziksel süreçleri modellemek için kullanılan önemli bir hesaplama yöntemidir. Bu yöntem, özellikle gaz akışları, moleküller arası çarpışmalar ve sınır etkilerinin incelenmesinde etkili sonuçlar sağlamaktadır. Simülasyonlarda kullanılan sert küre modeli, gaz moleküllerinin davranışlarını basitleştirerek, sistematik analizlere olanak tanır.

Bu çalışmada, MD simülasyonlarının özel akış problemlerine uygulanabilirliği değerlendirilmiş, gaz karışımlarının fiziksel ve dinamik özellikleri detaylı olarak incelenmiştir. Çalışma kapsamında, moleküler çap, yoğunluk, en olası hız ve sıcaklık gibi parametrelerin akış özelliklerine etkisi araştırılmıştır.

Bu bölümde, MD simülasyonlarının teorik altyapısı ve matematiksel modelleri açıklanmakta, simülasyon alanının yapısal özellikleri ve kullanılan hesaplama teknikleri ele alınmaktadır. Ayrıca, olay güdümlü yaklaşım ve sınır koşulları gibi kritik unsurlar detaylandırılmaktadır.

2.1 Simülasyon Parametreleri ve Kabulleri

Hesaplamalar sırasında karmaşıklığı önlemek için bazı basitleştirmeler yapılmıştır. Çalışmada kullanılan moleküller sert küreler ile ifade edilmiş ve tüm moleküller arası çarpışmalar ikili çarpışmalar olarak ele alınmıştır. Bir molekülün konumu, o molekülün küresel merkezinin konumuyla tanımlanmıştır. Toplam molekül sayısı N , hesaplama sırasında sabittir.

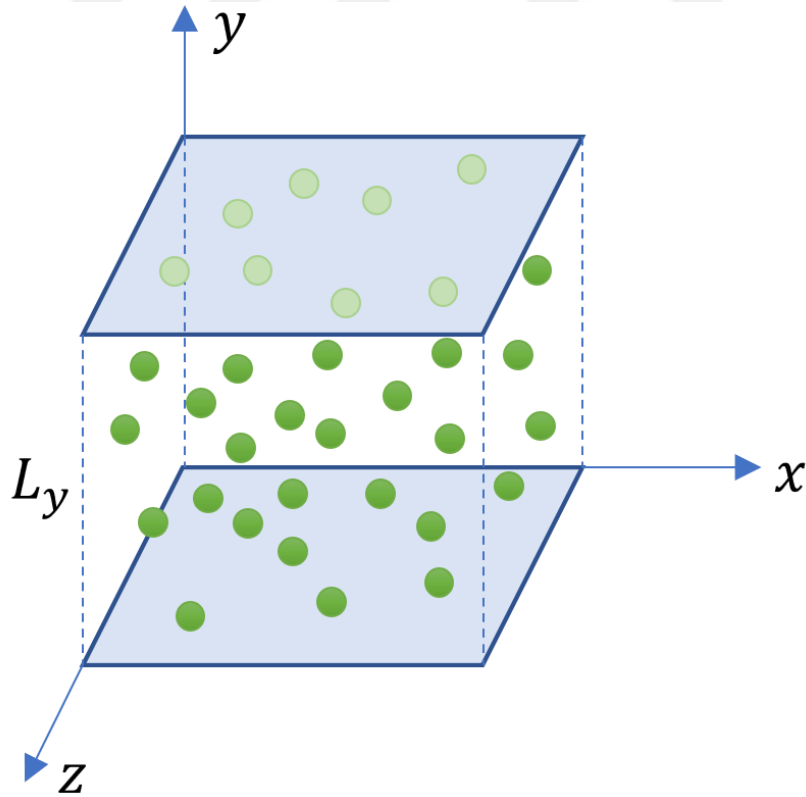
Belirli koşullar altında bir gazı tanımlayan parametreler moleküler çap, d , en olası hız, c_{mp} , moleküler kütle, m , moleküler aralık, s ve gazın monatomik/diatomik özelliğidir. Çalışmada, farklı değerlere (d , c_{mp} , m) sahip birçok gaz karışımlarının simülasyonları yapılmıştır. Hesaplama alanının büyüklüğü, alt-üst duvar sıcaklıkları ve hızları belirlenebilmektedir. Her olay, meydana gelme sırasına göre ele alınır. Simülasyonun geri kalanını etkileyen moleküller arası bir etkileşim, molekül-sınır etkileşimi veya herhangi bir diğer belirlenmiş davranışsal durum bir olay oluşturur.

2.2 Simülasyon Alanının Tanımı

Simülasyonların başlangıcında moleküllerin yerleşimi, sistem yoğunluğunu ve fiziksel parametrelerini belirlemek için kritik bir adımdır. Moleküller arası mesafe (s), moleküler çap (d) ve bunlara bağlı olarak elde edilen s/d oranı, simülasyon alanının başlangıç koşullarını tanımlamaktadır. Bu parametreler, gazın fiziksel özelliklerini ve simülasyonun doğruluğunu doğrudan etkilemektedir.

2.2.1 Hesaplama Alanının Özellikleri

Bu çalışmada hesaplama alanı olarak kullanılan 3 boyutlu (3B) bölge **Şekil 2.1**'de verilmiştir. Alan, sıkıştırılabilir gaz molekülleriyle doldurulmuş ve tek atomlu moleküller, moleküller arası elastik çarpışmalara maruz kalan sert küreler olarak modellenmiştir. Hesaplama alanının y -yönündeki karakteristik uzunluğu (L_y) boyunca, $\pm y$ duvarlarına ulaştığında, molekül-duvar etkileşimleri dağınık yansıma modeli kullanılarak tanımlanır. Bu durumda, duvar özelliklerine bağlı olarak molekül, rastgele bir hızla hesaplama alanına geri yansıtılır [20].



Şekil 2.1: Simülasyonlarda kullanılan hesaplama alanı temsili gösterimi.

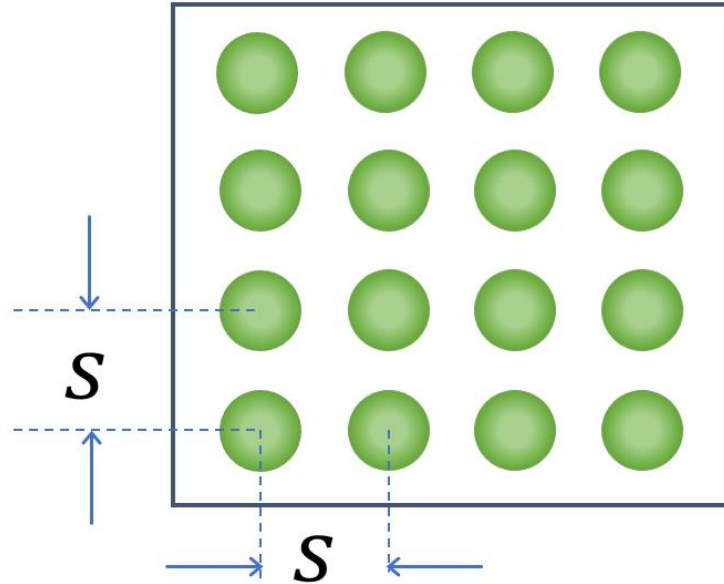
Hesaplama alanının z ve x yönlerinde uygulanan periyodik sınır koşulları, sistemin sonsuz bir şekilde tekrarlandığı varsayımına dayanmaktadır. Bu yaklaşım, simülasyon alanını küçülterek hesaplama yükünü azaltmaktadır. Bu sınır koşulları sayesinde, gaz akışının sürekliliği ve sistemin gerçekçiliği korunur.

Moleküller, z -yönündeki bir sınıra ulaştığında, hızlarını koruyarak diğer sınıra aktarılır. Bu sayede, z -ekseni boyunca sınırsız bir akış davranışı elde edilir.

x -yönünde de periyodiklik sınır koşulu uygulanır. Bu yön, sistemde gaz akışının sürekliliğini sağlamak için kritik bir rol oynamaktadır. Bu sınır koşulları ile ilgili detaylı açıklamalar, Bölüm 2.6'da verilmiştir.

2.2.2 Molekül Yerleşimi

Simülasyonların başlangıcında, gaz molekülleri düzenli bir şekilde yerleştirilmiştir. **Şekil 2.2**, moleküler dinamik simülasyonunda kullanılan gaz moleküllerinin yerleşimini ve moleküller arası mesafeyi (s) göstermektedir. Her bir molekül, küresel bir model ile temsil edilmiştir ve aralarındaki mesafeler eşit olacak şekilde düzenlenmiştir. Bu düzenleme, sistemin başlangıç yoğunluğunu ve simülasyon parametrelerini belirlemek için kullanılmaktadır.



Şekil 2.2: Simülasyon alanında moleküller arası mesafe (s).

Simülasyon alanında karakteristik uzunluğun (L) bilindiği bir kübik hacimde, gaz molekülleri arasındaki mesafe (s) ve toplam molekül sayısı (N) şu şekilde ifade edilmektedir:

$$N = \left(\frac{L}{s}\right)^3 \quad (2.1)$$

Bu denklemden molekül sayı yoğunluğu n , hacim $V = L^3$ olmak üzere, Denklem 2.2’de görüldüğü şekilde elde edilir.

$$n = \frac{N}{V} = \frac{1}{s^3} \quad (2.2)$$

2.3 Matematiksel Modeller

Bu bölümde, MD simülasyonlarının teorik altyapısı ve kullanılan matematiksel modeller açıklanmaktadır. Simülasyonlar sırasında kullanılan denklemler, gaz moleküllerinin dinamiklerini ve etkileşimlerini tanımlamak için kritik bir rol oynamaktadır. Ayrıca, moleküller arası çarpışma sıklığını, hız dağılımlarını ve sistemin genel termodinamik davranışlarını açıklamak için gerekli olan fiziksel parametreler detaylandırılmıştır.

2.3.1 Hız ve Sıcaklık Arasındaki İlişki

Gazın karakteristiğini belirleyen parametrelerden biri c_{mp} ’dir. Ortalama hız $\langle c \rangle$, rms hızı olan c_{rms} ve hız bileşenleri u_{th} arasında ilişki Denklem 2.3’te verilmiştir.

$$\sqrt{\langle c^2 \rangle} = c_{rms} = \sqrt{\left\langle \sum_{t=1}^3 u_t^2 \right\rangle} \quad (2.3)$$

Sıcaklığın kinetik teoriye dayalı tanımından dolayı c_{rms} ile T arasındaki ilişki şu şekildedir:

$$\frac{1}{2} m \langle c^2 \rangle \equiv \frac{3}{2} kT \quad (2.4)$$

Burada k Boltzman sabiti olup, $k = 1.38 \times 10^{-23}$ 'tür. Bu denklem, c_{rms} ile sıcaklık arasındaki doğrudan ilişkiyi gösterir ve şu şekilde yeniden yazılabilir:

$$c_{rms} = \sqrt{\frac{3kT}{m}} \quad (2.5)$$

Maxwell-Boltzmann kinetik teorisine göre, moleküller daimi durumda belirli bir hız dağılımına sahip olur [24], [27]. Bu hız dağılımı Denklem 2.6'da verilmiştir:

$$f(c) = 4\pi \sqrt{\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^3} c^2 e^{-\frac{mc^2}{2kT}} \quad (2.6)$$

Bu hız dağılımı, normalize edilerek en olası hız c_{mp} 'ye göre normalize edilirse, $\xi = \frac{c}{c_{mp}}$, Denklem 2.7 elde edilir.

$$f(\xi) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \xi^2 e^{-\xi^2} \quad (2.7)$$

Normalize edilmiş bu hız dağılımı Şekil 2.8'de verilmiştir. Burada $f(\xi = 1) = f_{max}$ noktası c_{mp} değerini ifade etmektedir.

$$c_{mp} = \sqrt{\frac{2kT}{m}} = \sqrt{\frac{2}{3}} c_{rms} \quad (2.8)$$

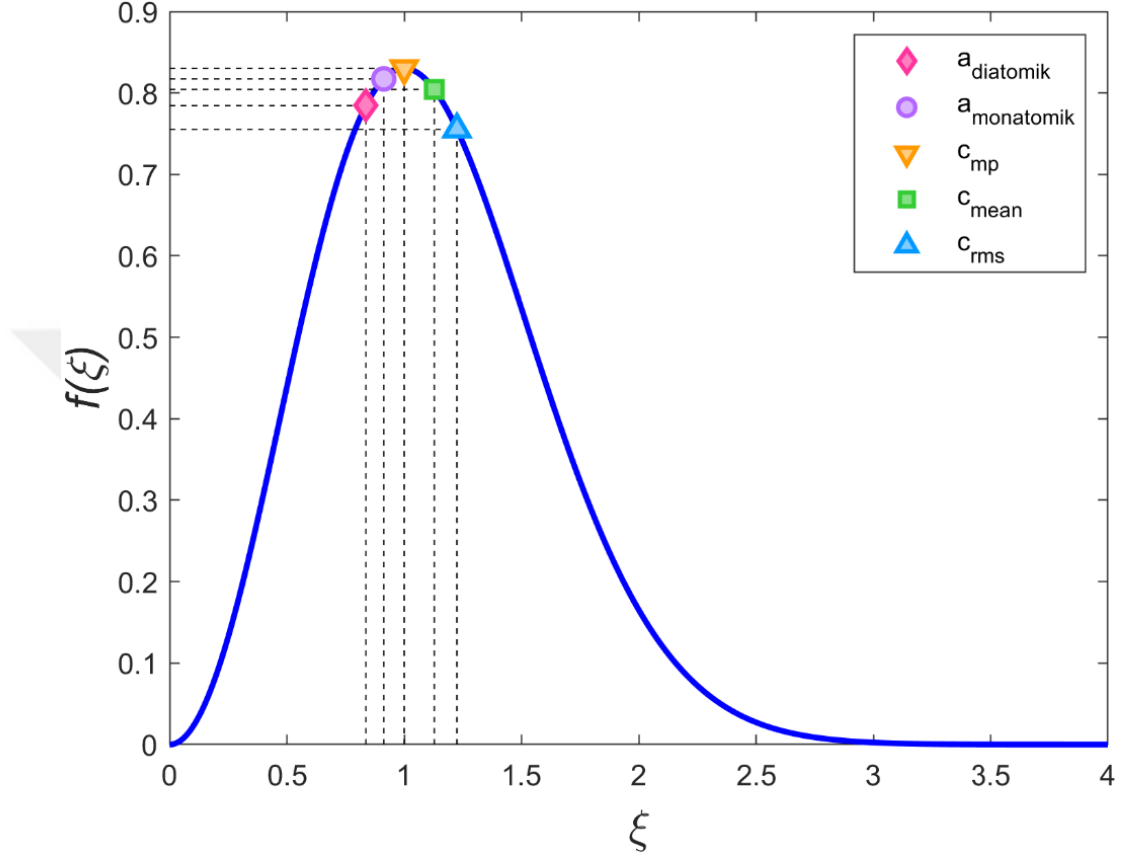
Ortalama hızı hesaplamak için Denklem 2.9 kullanılır:

$$\langle c \rangle = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} c_{mp} \quad (2.9)$$

Gazın özgül ısı oranı γ , monatomik gazlar için 5/3, diatomik gazlar için ise 7/5 olarak tanımlanmaktadır. Ses hızı Denklem 2.10'da verildiği şekilde hesaplanmaktadır.

$$a = \sqrt{\gamma RT} = \sqrt{\frac{\gamma}{2}} \sqrt{\frac{2kT}{m}} \quad (2.10)$$

Normalize edilmiş hız dağılımına ait grafik **Şekil 2.3**'te verilmiştir. Bu grafikte hız dağılım fonksiyonunun yanında diatomik moleküller için ses hızı olan $a_{diatomik}$, monatomik moleküller için ses hızı $a_{monatomik}$, c_{mp} , c_{mean} ve c_{rms} noktaları gösterilmiştir.



Şekil 2.3: Gaz molekülleri için normalleştirilmiş hız dağılımı ve ilgili parametreler.

2.3.2 Ortalama Serbest Yol

Ortalama serbest yol (λ) bir molekülün başka bir molekülle çarpışmadan katettiği mesafeyi tanımlar ve Denklem 2.11'de verilmiştir [67].

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}\pi d^2 n} \quad (2.11)$$

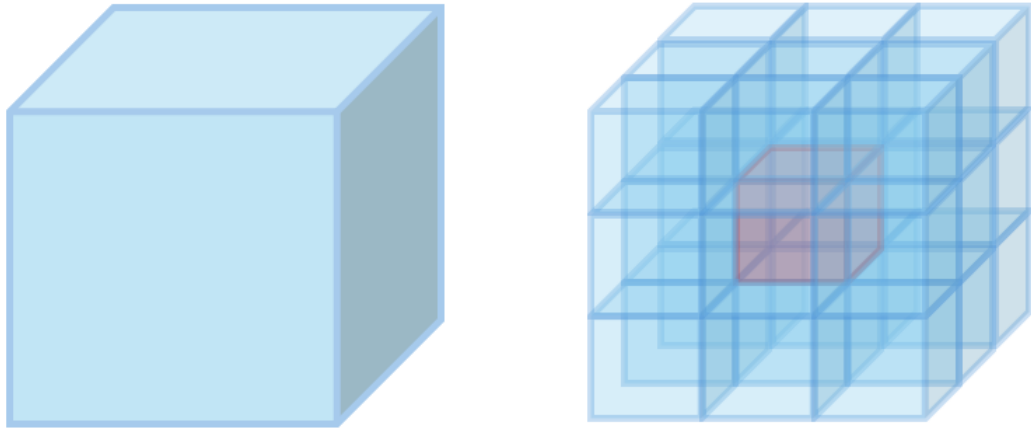
Denklem 2.2 ve Denklem 2.11 birlikte ele alındığında, Denklem 2.12 elde edilir:

$$\frac{\lambda}{d} = \frac{(s/d)^3}{\sqrt{2\pi}} \quad (2.12)$$

Hesaplama alanı, simülasyon başlangıcında moleküllerin yerleştirildiği düzenli bir kübik hacim olarak modellenmiştir. Moleküllerin yoğunlukları ve aralarındaki mesafeler, bu hacimdeki fiziksel parametreleri belirlemede kritik bir rol oynamaktadır.

2.4 Çok Hücreli Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu

MD simülasyonlarında, en fazla hesaplama gücü, moleküller arasındaki çarpışmaların zamanlarının ve etkileşimlerinin belirlenmesi sırasında kullanılır. Bu çalışmada, hesaplama hızını artırmak ve simülasyonların daha verimli bir şekilde gerçekleştirilmesini sağlamak amacıyla, çok hücreli MD simülasyon yöntemi uygulanmıştır [68]. Bu yöntemde, hesaplama alanı küçük hücresel bölgelere ayrılarak moleküller, bulundukları hücelere atanır. **Şekil 2.4.a**, hesaplama alanının genel bir temsili olarak verilmiştir. **Şekil 2.4.b** ise hesaplama bölgesinin hücresel olarak bölünmesini göstermektedir. Bu yaklaşım, her molekülün yalnızca kendi hücresi ve komşu hücrelerindeki moleküllerle olası çarpışmalarını hesaplamayı mümkün kılmaktadır.



(a)

(b)

Şekil 2.4: (a) Hesaplama alanının genel temsili gösterimi, (b) hesaplama alanının hücresel olarak bölünmüş hali.

Hesaplama alanının hücresel yapıya bölünmesi, simülasyonun verimliliğini artıran kritik bir yöntemdir. **Şekil 2.4.b'**de kırmızı olarak işaretlenmiş bir hücrede yer alan bir molekülün çarpışma hesaplamaları yapılırken, yalnızca bu hücredeki ve bitişik komşu hücrelerdeki moleküller dikkate alınmaktadır. Uzak mesafelerde bulunan moleküllerle çarpışma olasılığı bu yöntemde göz ardı edilmektedir. Bu durum, işlem yükünü önemli ölçüde azaltır ve simülasyonun hesaplama süresini kayda değer ölçüde hızlandırır.

Hücresel yapı, moleküllerin yalnızca belirli bir mesafede bulunan diğer moleküllerle çarpışma olasılığını değerlendirdiğinden, gereksiz hesaplamaların önüne geçer.

Bu yöntem, olay güdümlü MD yaklaşımı için güçlü bir temel oluşturmaktadır. Hücresel yapı sayesinde, her bir molekül için potansiyel çarpışma zamanı, hücre sınırı geçiş zamanı veya sistem sınırıyla etkileşim zamanı gibi olaylar belirlenmektedir. Olay güdümlü yaklaşım, bu olayları zaman sırasına göre organize ederek simülasyonun doğruluğunu ve hızını artırmaktadır. Bu sayede, sistemde gerçekleşen tüm etkileşimler sistematik bir şekilde ele alınmaktadır.

2.4.1 Olay Güdümlü Yaklaşım ve Temel Olaylar

Çok hücreli olay güdümlü MD simülasyonu, sistemdeki moleküller arasındaki etkileşimlerin gerçekleşme zamanlarını hesaplayan, sıralayan ve simülasyonun verimliliğini artırmak için bu süreçleri düzenleyen bir yaklaşımdır. Bu yöntemde, üç temel olay türü ele alınır: moleküller arası çarpışma, hücre değişimi (sanal olay) ve dış sınır olayı.

Olay güdümlü MD simülasyonlarında bir sonraki gerçek olay belirlenmeden önce her olası olay incelenir. Bir molekülün olası ilk olayını bulabilmek için, molekülün gerçekleştireceği ilk çarpışmanın zamanı, ilk hücre değişiminin zamanı ve ilk dış sınır olayının hesaplanması gerekmektedir. Sert küre modelinde bir molekülün olay süresi, molekülün yüzeyinin başka bir molekülün yüzeyiyle veya bir sınırla temas ettiği süre olarak tanımlanır. Hesaplanan bu üç zaman içerisinden en küçük olanı, ilgili molekülün olası ilk olayı olarak işlenir. En küçük olay süresine sahip olası olay, tüm sistemin bir sonraki evrensel olayı olarak atanır. Bu evrensel olayın hangi moleküllerde ne kadar süre içinde gerçekleştiğinin belirlenmesi, MD hesaplamaların en çok vakit alan kısımlarından biridir.

2.4.1.1 Moleküller Arası Çarpışmalar

Moleküller arası çarpışmalar, mükemmel elastik etkileşim varsayımı temelinde modellenir. Bu yaklaşımda, momentum ve enerji korunumuna göre, çarpışan moleküllerin hız bileşenleri yeniden hesaplanır. Çarpışma sırasında hız bileşenlerindeki değişiklik, moleküllerin gelen hızlarına, kütlelerine, boyutlarına ve göreceli konumlarına bağlıdır.

Çarpışmanın gerçekleşmesi için moleküllerin yüzeylerinin temas etmesi gerekir. Sert küre modeli kullanıldığında, çarpışma koşulu, moleküllerin arasındaki mesafenin, molekül çaplarının toplamına eşit olduğu durumda sağlanır.

2.4.1.2 Hücre Değişimi (Sanal Olay)

Hücre değişimi, molekülün bir hücrenin sınırına ulaştığında gerçekleşen sanal bir olaydır. Bu olay, molekülün hızını veya konumunu değiştirmez; yalnızca molekülün atandığı hücreyi değiştirir ve böylece hücresel komşuluktaki yeni bir molekül grubunun gelecekteki olası etkileşimlerine aday olmasını sağlar.

Moleküller, üç boyutlu uzayda birden fazla hücreyi geçebilir ve bu geçiş sırasında uzak moleküllerle de etkileşime girebilir. Ancak bu yöntemde, gerçek bir çarpışma kaybolmaz; tüm moleküler etkileşimler doğru bir şekilde kaydedilir ve modellenir. Hücre değişimi sırasında her molekülün bir zaman değişkeni bulunur ve bu değişken yalnızca gerçek olaylar meydana geldiğinde güncellenir. Hücre değişimi sanal bir olay olduğundan, bu zaman değişkenini değiştirmez.

Bu yaklaşımın önemli bir avantajı, moleküler yer değiştirmeler sırasında oluşabilecek artımlı hataları azaltmasıdır. Hücre değişimi, hesaplama sürecini optimize eder ve çarpışma hesaplamalarını yalnızca molekülün yakın çevresiyle sınırlandırarak gereksiz işlem yükünü ortadan kaldırır. Böylece simülasyonun genel verimliliği artırılır [69], [70].

2.4.1.3 Sınır Etkileşimleri

Moleküller, hesaplama alanının sınırlarına ulaştığında dış sınır olaylarına maruz kalır. Bu olaylar, simülasyonun fiziksel sınır koşullarını modelleme sürecinde önemli bir rol oynar. Sınırla etkileşim sırasında molekül ya sınırdan geri yansıtılır, periyodik sınır

koşulları altında diğer taraftan sisteme geri dahil edilir ya da belirli durumlarda simülasyon alanından çıkarılır. Yansıma olaylarında, hızın normal bileşeni ters çevrilirken teğetsel bileşen korunur; bu süreç, momentum ve enerji korunumuna uygun olarak gerçekleştirilir. Periyodik sınır koşulları, sistemin sonsuz bir şekilde modellenmesine olanak tanıyarak simülasyonun gerçekçiliğini artırır.

2.4.2 Molekül-Hücre Sınırı Geçiş Zamanı

Olay güdümlü MD simülasyonlarında bir sonraki olayı belirlemek için her olası olayın zamanlaması hesaplanır. Çok hücreli MD simülasyon yönteminde, sistem belirlenen sayıda kübik hücrelere bölünerek modellenir. Her hücre içinde kalan moleküller o hücreye atanır ve hücre bazlı bir organizasyon yapılır. Bu yöntem, moleküller arası etkileşimleri yerel olarak değerlendirme avantajı sağlayarak hesaplama yükünü önemli ölçüde azaltmaktadır.

Bir molekülün bulunduğu hücre içinde hareket ederken, olası altı duvarla etkileşimi dikkate alınmaktadır. Bu etkileşimler, molekülün bir hücre sınırına ulaşması veya diğer bir hücreye geçmesi durumunda ortaya çıkmaktadır. Molekül bir duvara yaklaşıırken, aynı eksenindeki karşıt duvardan uzaklaşır. Dolayısıyla bir molekül, bulunduğu hücreyi terk ederek bitişik üç hücre sınırından birine geçebilir.

Bir i molekülünün j yönündeki sınıra varış süresi olan t_{ij} , Denklem 2.13 ile hesaplanır. Burada x_j molekül ile j yönündeki dik uzaklığı, c_i hızı ifade eder.

$$t_{ij} = \frac{x_j - x_i - d/2}{c_i} \quad (2.13)$$

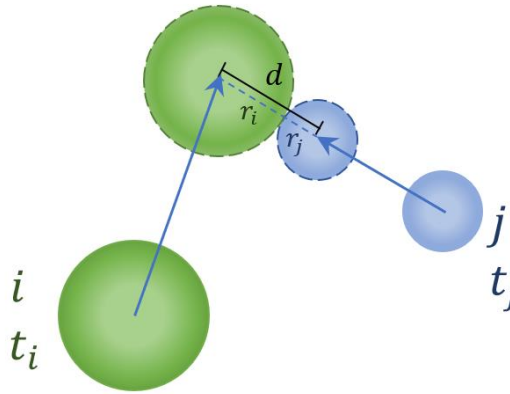
Molekül bir hücre sınırına ulaştığında, iki temel durum ortaya çıkar: hücre değişimi ve sistem sınırlarıyla etkileşim. Molekül, bulunduğu hücrenin sınırına ulaştığında komşu bir hücreye geçebilir. Bu geçiş sırasında molekül, eski hücrenin molekül listesinden çıkarılarak yeni geçtiği hücrenin molekül listesine eklenir. Bu işlem, her hücrenin yalnızca kendi moleküllerine odaklanmasını sağlayarak simülasyonun organizasyonunu kolaylaştırır ve hesaplama verimliliğini artırır.

Alternatif olarak, molekül sistem sınırlarına ulaşabilir. Bu durumda, ulaşılan sınırın özelliklerine göre molekül işlenir. Örneğin, periyodik sınır koşullarında molekül, bir sınırdan çıkarak diğer taraftan aynı hızla sisteme geri dahil edilir. Eğer farklı bir sınır

koşulu uygulanıyorsa, molekülün hızı veya konumu bu koşullara uygun şekilde yeniden düzenlenir.

2.4.3 Moleküller Arası Çarpışma Dinamikleri

Moleküller arası çarpışmalar, molekül-duvar çarpışmalarına göre daha karmaşık bir yapıya sahiptir. **Şekil 2.5**'te, sert küre modeli ile temsil edilen iki molekülün çarpışması resmedilmiştir. **Şekil 2.5**, moleküller arası çarpışmayı geometrik olarak temsil etmektedir. Molekül i ve molekül j , çarpışma zamanı t boyunca hareket eder ve yüzeylerinin birbirine değmesiyle çarpışma gerçekleşir. Şekilde, her iki molekülün yarıçapları (r_i ve r_j) ve bu yarıçapların toplamına eşit olan çarpışma mesafesi (d) belirtilmiştir. Bu modelleme, moleküllerin doğrusal olarak hareket ettiğini ve kendi yörüngelerinde ilerlediğini varsayar. Simülasyonun amacı, bu moleküllerin çarpışma zamanını t hesaplamaktır. İki molekül, yüzeyleri birbirine değdiğinde çarpışma gerçekleşmiş kabul edilir. Bu durum, iki molekül arasındaki mesafenin yarıçaplarının toplamına eşit olmasıyla tanımlanmaktadır.



Şekil 2.5: Sert küre modeli ile iki molekül arasındaki çarpışma geometrisi.

Ortalama çap d , iki molekülün yarıçapları olan r_i ve r_j değerlerinin toplamına eşittir.

$$d = r_i + r_j \quad (2.14)$$

Çarpışmanın gerçekleşmesi için, Denklem 2.14'te tanımlanan bu mesafe kriteri, her iki molekülün koordinatlarının ve hızlarının analiz edilmesiyle doğrulanır. Denklem 2.15, çarpışma kriterinin matematiksel ifadesini içerir. Bu denklemde x pozisyonu, k boyutu, i ve j çarpışma süresi hesaplanan molekülleri ifade eder.

$$\sum_{k=1}^3 (x_{jk}^* - x_{ik}^*)^2 = d^2 \quad (2.15)$$

Olay güdümlü MD simülasyonlarında her molekül için diğer moleküllerle çarpışma süresi hesaplanır ve ayrı bir zaman değişkeni tutulur (t_i, t_j) . Çarpışma anındaki moleküllerin konumlarını bulmak için Denklem 2.16 ve Denklem 2.17 kullanılır, burada c moleküler hızı ifade etmektedir.

$$x_{ik}^* = x_{ik} + c_{ik}(t - t_i) \quad (2.16)$$

$$x_{jk}^* = x_{jk} + c_{jk}(t - t_j) \quad (2.17)$$

Denklem 2.16, Denklem 2.15'e yerleştirildiğinde Denklem 2.18 elde edilir.

$$\sum_{k=1}^3 (x_{jk} - x_{ik} + c_{jk}(t - t_j) - c_{ik}(t - t_i))^2 = d^2 \quad (2.18)$$

Denklemini sadeleştirmek için Δx_k ve Δc_k tanımlanır.

$$\Delta x_k = c_{jk}\Delta t_{ij} + x_{jk} - x_{ik} \quad (2.19)$$

$$\Delta c_k = c_{jk} - c_{ik} \quad (2.20)$$

Bu durumda denklem 2.21, aşağıda görüldüğü şekilde ifade edilir.

$$\sum_{k=1}^3 (\Delta c_k)^2 (t - t_i)^2 + 2\Delta x_k \Delta c_k (t - t_i) + (\Delta x_k)^2 = d^2 \quad (2.21)$$

Gösterimi daha basit hale getirmek için:

$$A = \sum_{k=1}^3 (\Delta c_k)^2 \quad (2.22)$$

$$B = \sum_{k=1}^3 \Delta x_k \Delta c_k \quad (2.23)$$

$$C = \sum_{k=1}^3 (\Delta x_k)^2 - d^2 \quad (2.24)$$

Bu denklemler yardımıyla Denklem 2.25'i basitleştirilmiş şekilde yazabiliriz.

$$A(t - t_i)^2 + 2B(t - t_i) + C = 0 \quad (2.25)$$

Elde edilen ikinci mertebeden denklemin gerçek kökünün olmaması moleküllerin çarpışmadığı anlamına gelmektedir. Pozitif gerçek kökleri varsa, küçük olan kök, çarpışma zamanı olarak alınır.

2.4.4 Çarpışma Sonrası Hızların Hesaplanması

Simülasyon sırasında bir çarpışma meydana geldiğinde, çarpışan moleküllerin hızlarının yeniden hesaplanması gerekmektedir. Bu süreç, momentum ve enerji korunumu ilkelerine dayanmaktadır ve çarpışmanın türüne göre değişiklik gösterebilir. Örneğin, düzgün yansıma koşulu altındaki duvar çarpışmalarında molekülün hızı yalnızca duvara dik bileşeninde değişiklik gösterirken, moleküller arası çarpışmalar daha karmaşık dinamikler içerir.

Çarpışma sonrası hesaplamalara başlamadan önce, çarpışmanın gerçekleştiği pozisyonun ve çarpışan moleküllerin görel konumlarının belirlenmesi gereklidir. Bu nedenle çarpışan moleküller, çarpışma pozisyonuna taşınır. Bu işlem, moleküllerin çarpışma sonrasında aynı zaman değişkenine sahip olmasını sağlar. Çarpışma pozisyonu Denklem 2.26 ile ifade edilir:

$$x_i = c_i(t - t_i) + x_{i_{eski}} \quad (2.26)$$

Görel (relative) konum, çarpışma anında iki molekül arasındaki mesafeyi tanımlar ve Denklem 2.27 ile hesaplanır:

$$x_r = x_j - x_i \quad (2.27)$$

Burada, x_i ve x_j , çarpışma anındaki moleküllerin konumlarını ifade eder.

Şekil 2.5'te çarpışma anında moleküllerin merkezlerinin birbirinden uzaklığı gösterilmiş olup, $\sum_{k=1}^3 x_r^2 = d^2$ sağlanmaktadır.

Çarpışma sırasında momentum ve enerji korunumu ilkeleri temel alınarak, moleküllerin çarpışma sonrası hızları hesaplanır. Monatomik sert küre ile modellenmiş çarpışmalarda kütle, momentum ve ötelenme enerjisi korunur. Bu korunumu tanımlayan denklemler şu şekildedir:

$$m_i + m_j = m'_i + m'_j \quad (2.28)$$

$$m_i c_i + m_j c_j = m'_i \acute{c}_i + m'_j \acute{c}_j \quad (2.29)$$

$$m_i |c_i|^2 + m_j |c_j|^2 = m'_i |\acute{c}_i|^2 + m'_j |\acute{c}_j|^2 \quad (2.30)$$

Çarpışma sonrası hızlar, çarpışma geometrisi ve momentum değişimi dikkate alınarak hesaplanır. Bu işlem, göreceli hız bileşenleri ($c_i - c_j$) ve moleküller arasındaki çarpışma eksenine (r) bağlıdır. Çarpışma sonrası hız denklemleri şu şekilde ifade edilir:

$$\acute{c}_i = c_i - \frac{2\mu_{ij}}{m_i} r \langle r, c_i - c_j \rangle \quad (2.31)$$

$$\acute{c}_j = c_j + \frac{2\mu_{ij}}{m_i} r \langle r, c_i - c_j \rangle \quad (2.32)$$

Burada $\langle \dots \rangle$ iç çarpım işlemini, μ_{ij} indirgenmiş kütleği ifade etmektedir.

$$\mu_{ij} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j} \quad (2.33)$$

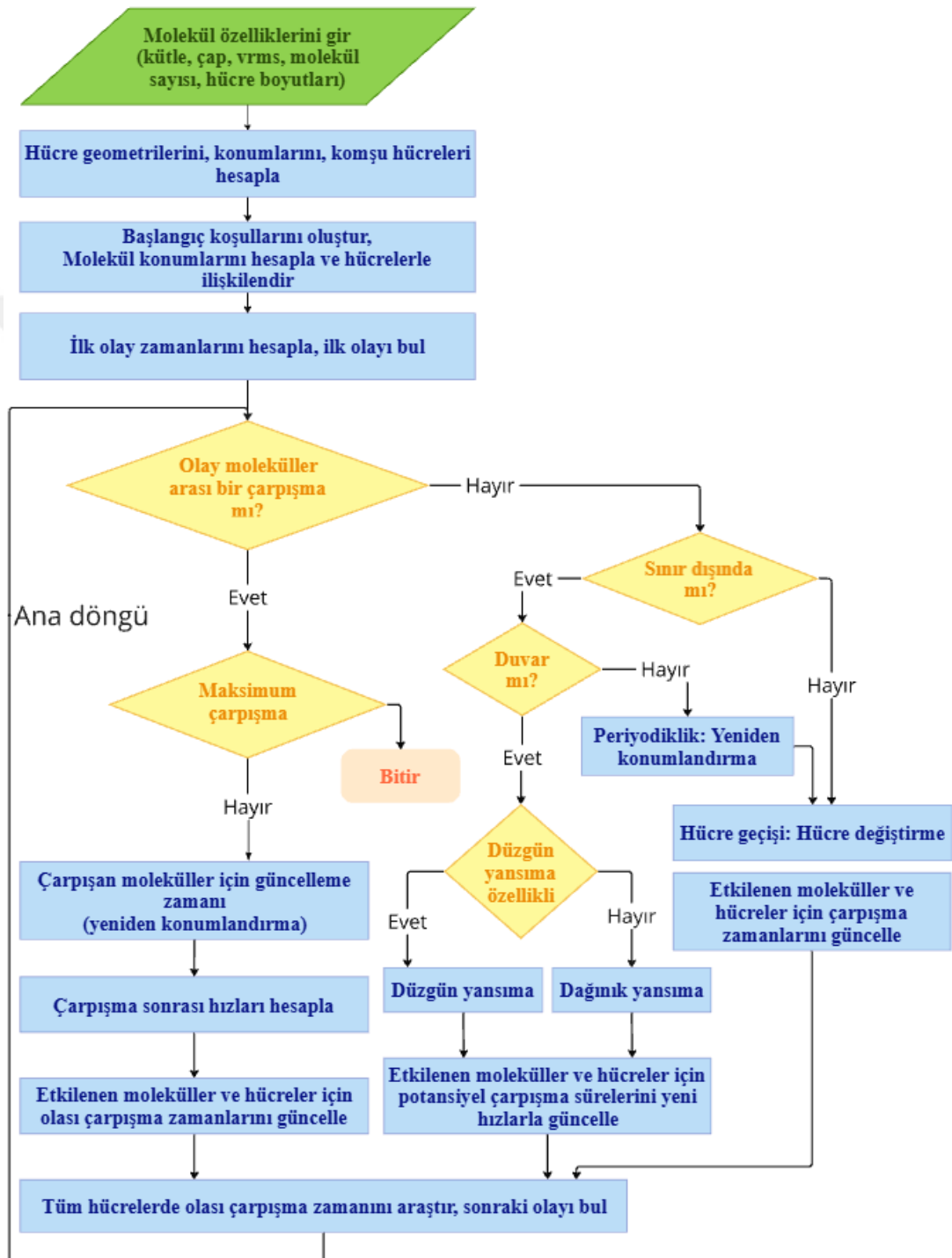
Çarpışma eksenini r , çarpışma anında moleküllerin merkezlerinden geçen birim vektördür ve Denklem 2.34 ile ifade edilir:

$$r = \frac{x_i - x_j}{d} \quad (2.34)$$

2.5 Moleküler Dinamik Simülasyonlarının İşleyiş Süreci ve Akış Diyagramı

Bu çalışmada kullanılan MD simülasyonunun akış diyagramı **Şekil 2.6**'da verilmiştir. Simülasyonun başlangıcında, sisteme moleküllerin temel özellikleri olan kütle, çap, hız (V_{rms}), hesaplama alanındaki toplam molekül sayısı ve hücre boyutları gibi bilgiler

girilir. Bu başlangıç parametreleri kullanılarak, hücre geometrileri, konumları ve her hücrenin komşu hücreleri hesaplanır. Bu adım, simülasyonun geometrik ve fiziksel temelini oluşturmaktadır. Sistemin başlangıç koşulları, kullanıcı tarafından belirlenebilir ve istenen bir fiziksel duruma göre ayarlanabilir.



Şekil 2.6: Moleküler dinamik simülasyonlarının işleyiş süreci akış diyagramı.

Simülasyon, ilk olayın gerçekleşmesiyle birlikte bir ana döngüye girer. Bu ana döngü, sistemde gerçekleşen olayın türüne göre farklı hesaplamaların yapıldığı bir süreçtir. Olayların moleküller arası bir çarpışma mı yoksa sınır dışında gerçekleşen bir olay mı olduğuna karar verilir. Her bir olay, sistemde önceden belirlenen maksimum çarpışma sayısına ulaşana kadar hesaplanmaya devam eder. Eğer olay, moleküller arası bir çarpışma ise çarpışan moleküller yeniden konumlandırılır ve çarpışma sonrası hızları hesaplanır. Ardından, ilgili moleküller ve hücreler için olası çarpışma zamanları güncellenir.

Olayın sınır dışında gerçekleşmesi durumunda, molekül bir duvara çarparsa, yansıma türüne göre hesaplamalar yapılır. Bu yansıma türleri, düzgün yansıma, dağınık yansıma veya periyodik sınır koşullarına göre modellenir. Eğer olay bir hücre geçişiye, ilgili moleküller ve hücreler yeniden değerlendirilir ve geçiş hesaplamaları yapılır. Bu süreçlerin ardından, tüm hücrelerdeki potansiyel çarpışma zamanları taranır ve sistemde bir sonraki olay belirlenir. Bu diyagramda gösterilen adımların gerçekleştirilmesinde kullanılan başlangıç parametreleri, ilgili dosyada detaylandırılmıştır. Bu dosya, simülasyonun yapılandırılmasını sağlayan temel bilgileri içermektedir. Dosya, molekül özelliklerini (kütle, çap ve hız gibi) ve simülasyon parametrelerini detaylı bir şekilde tanımlamaktadır. Molekül özellikleri, her molekül tipi için ayrı ayrı girilir ve boyutsuzlaştırma en olası hız değerine (most probable speed) göre yapılmaktadır. Bu, simülasyon sonuçlarının genellenebilirliğini arttırmaktadır.

Simülasyon parametreleri arasında, veri toplama modu, simülasyonun sonlanacağı maksimum çarpışma sayısı, verilerin hangi sıklıkla kaydedileceği ve hesaplama alanının hücrelere bölünmesi yer almaktadır. Örneğin, hesaplama alanı x, y, z yönünde $32 \times 18 \times 4$ hücreye bölünürse toplamda 2304 hücre oluşturulur. Ayrıca, üst ve alt duvarların sıcaklık karekök değerleri (örneğin TT1: üst duvar, TT2: alt duvar) gibi parametreler de belirlenir. Bunun yanı sıra, sol alt iç köşenin koordinatları, her hücrenin boyutu ve duvar sınır şartları gibi bilgiler de dosyada yer almaktadır. Bu sınır şartları, moleküllerin duvarlarda yansıması veya diğer tarafa geçmesi gibi durumları tanımlamaktadır.

Son olarak, akış koşulları Couette akışı veya basınç gradyanı gibi özel durumları içermektedir. Örneğin, x -yönünde duvar hızları belirlenebilir ya da sistem sabit duvar

koşullarında çalıştırılabilir. Bu parametreler, simülasyonun başlangıç koşullarını oluşturmak ve fiziksel gerçekliği doğru bir şekilde modellemek için gereklidir. Sonuç olarak, giriş parametrelerinin bulunduğu dosya, simülasyonun her aşamasını etkileyen temel bir yapı taşıdır ve simülasyonun doğru şekilde yapılandırılmasını sağlamaktadır.

Bu çalışmada, MD simülasyonlarının zamansal kararlı durum davranışlarını analiz etmek için Uzun Süreli Ortalama Alma (Long Time Averaging, LTA) yöntemi uygulanmıştır. LTA, simülasyon süresince elde edilen zamana bağlı değişkenlerin (örneğin yoğunluk, basınç, enerji) uzun dönemli ortalamalarını hesaplayarak kısa süreli dalgalanmaların etkisini azaltır ve sistemin genel eğilimlerini ortaya koyar. Bu yöntem, özellikle MD simülasyonlarında kararlı durum analizlerinde yaygın bir şekilde kullanılmaktadır ve sistemin geçici etkilerden arındırılmış güvenilir sonuçlar sunmasına olanak sağlamaktadır [71]. Örneğin, yoğunluk profilleri veya enerji dağılımları gibi parametrelerin uzun süreli ortalamaları alınarak, simülasyon sonuçlarının fiziksel gerçekliği daha iyi yansıttığı gösterilmiştir. Aynı şekilde, momentum ve hız gibi zamana bağlı değişkenlerin LTA ile analiz edilmesi, bu parametreler arasındaki ilişkilerin incelenmesine katkı sağlamaktadır. Bu yaklaşım, sistemin uzun vadeli davranışlarını anlamak ve kararlı durum analizlerini desteklemek açısından kritik bir rol oynamaktadır [72].

2.6 Sınır Koşulları ve Yansıma Modelleri

Çeşitli akış problemlerinin incelenmesi sırasında akışkan ve sistemin sınırları arasındaki bağlantıyı doğru şekilde tanımlamak, olaya dayalı MD simülasyonu kullanılarak akış ve ısı transfer sorunlarını çözmek için çok önemlidir. Bu çalışmada, kayma gerilimi ve basınç farkı ile oluşan akışların incelenmesi, üst-alt duvarlarda ısı transferini modellemek için düzgün yansıma, dağınık yansıma, periyodik sınır koşulları gibi sınır şartları uygulanmıştır.

2.6.1 Düzgün Yansıma Sınır Koşulları

Düzgün yansıma sınır koşulları, MD simülasyonlarında kullanılan en genel sınır koşuludur. Bu koşul, hesaplama açısından en az işlem süresini gerektirir ve molekülün duvara çarptığı açı ile geri yansımını sağlar. Bu sınır koşullarında, molekülün normal hız bileşeni değişirken, teğetsel bileşenlerinde herhangi bir değişiklik meydana

gelmemektedir. Denklem 2.35’te gösterildiği üzere x duvarına gelen i molekülünün normal hız bileşeni değişir. Normal hız bileşeni (c_{ix}):

$$c_{ix_{yeni}} = -c_{ix} \quad (2.35)$$

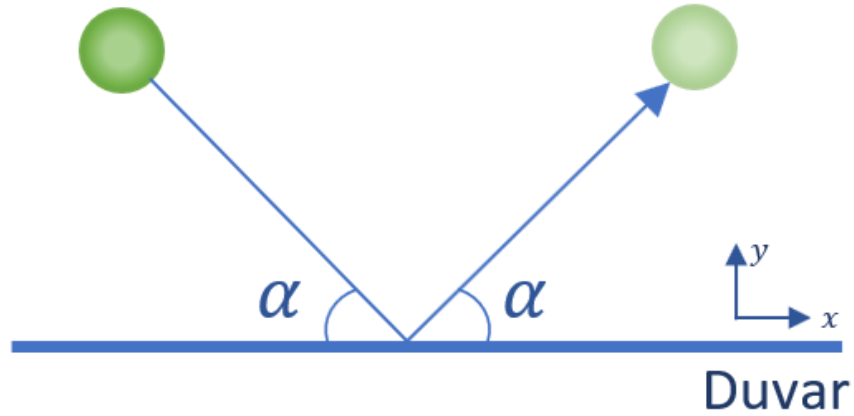
Teğetsel hız bileşenleri (c_{iy} , c_{iz}) aynı kalır:

$$c_{iy_{yeni}} = c_{iy} \quad (2.36)$$

$$c_{iz_{yeni}} = c_{iz} \quad (2.37)$$

Şekil 2.7’de gösterildiği üzere duvara gelen molekül geldiği açı ile hesaplama alanına geri yansır. Bu şema, molekülün duvara çarptığı açının, geri yansıma açısıyla eşit olduğunu ve simetrik bir etki oluştuğunu görselleştirmektedir.

Düzgün yansıma sırasında molekülün kinetik enerjisi değişmez. Ancak normal hız bileşeninin yön değiştirmesiyle birlikte, momentumda belirgin bir değişiklik meydana gelmektedir. Toplam momentum ($2m_i c_{ix}$) duvarla etkileşim sonucu yeniden hesaplanır.

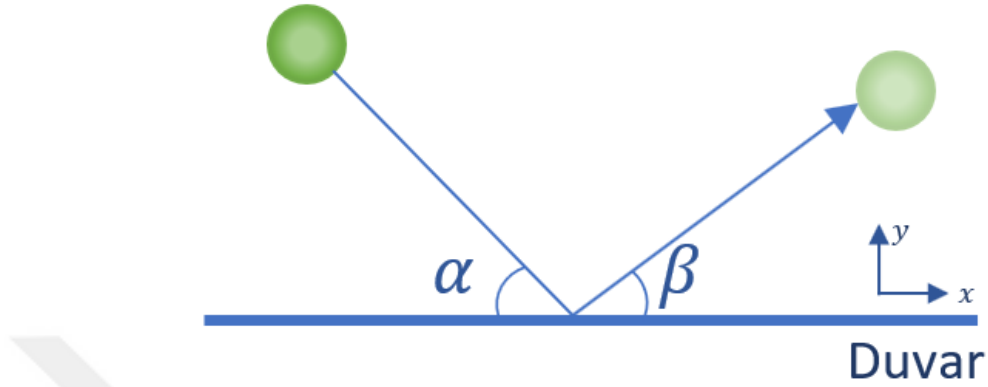


Şekil 2.7: Düzgün yansıma sınır koşulunu gösteren şematik bir temsil.

2.6.2 Dağınık Yansıma Sınır Koşulları

Dağınık yansıma sınır koşulları, duvarın hız ve sıcaklık özelliklerini moleküllere aktarmak için kullanılmaktadır. Duvara gelen molekülün tüm hız bileşenlerinde değişiklik meydana gelebilir. Molekül, duvarın hız ve sıcaklığına göre sisteme geri yansıtılır. Bu yansıtma için kabul-ret algoritması kullanılmaktadır.

Dağılık yansımada gelen molekülün temsili yansıması **Şekil 2.8**'de verilmiştir. Şemada, duvara gelen bir molekülün farklı hız bileşenleriyle yansıtılma süreci gösterilmektedir. Bu süreç, molekülün duvarın sıcaklık ve hız dağılımına göre hareket etmesini sağlamaktadır.



Şekil 2.8: Dağılık yansımaya sınır koşulunun temsili.

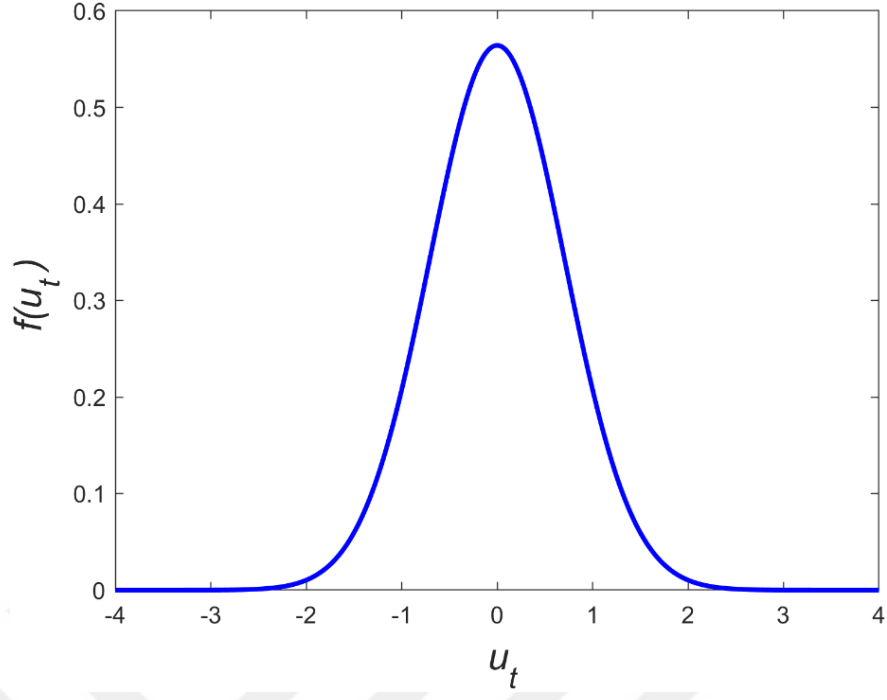
Molekülün yansıma hızı, Denklem 2.38 ve Denklem 2.39'da verilen fonksiyonlardan rastgele bir değer seçilerek belirlenir. Yansıyan molekülün teğet hız bileşeni u_t , normal hız bileşeni ise u_n 'dir.

$$f(u_t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-u_t^2} \quad (2.38)$$

$$g(u_n) = 2u_n e^{-u_n^2} \quad (2.39)$$

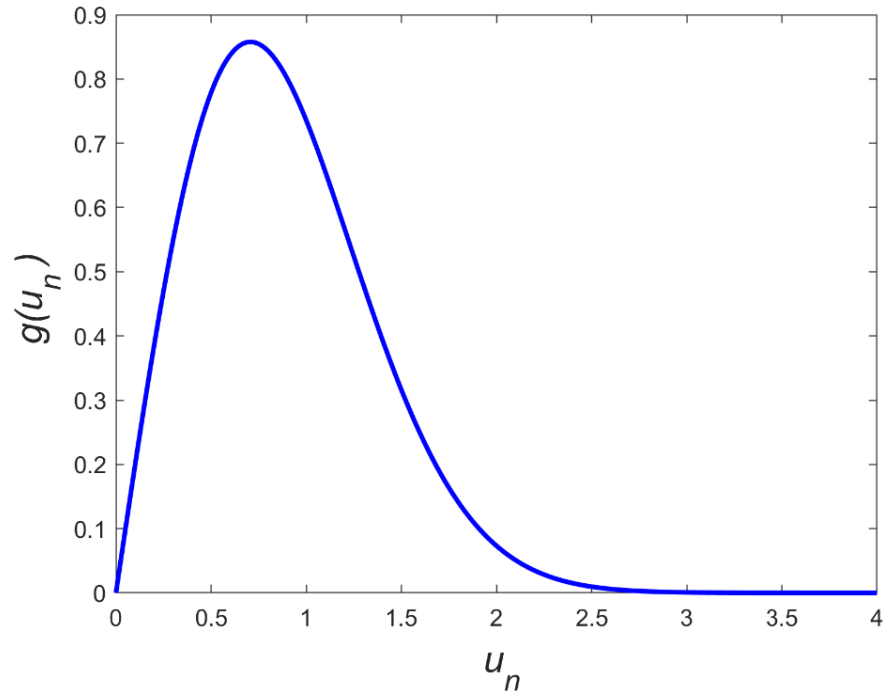
Dağılık yansımaya koşullarında, molekülün normal hız bileşeni u_n , uygun bir hız dağılım fonksiyonu $g(u_n)$ ile ağırlıklandırılarak belirlenir. Burada $g(u_n)$ uygun bir normal hız bileşeniyle ağırlıklandırılır. Bu ağırlıklandırma, molekülün duvar özelliklerine uygun bir hızla geri yansımasını sağlar. Sonuç olarak, ortalama normal hız bileşeni (u_n), ortalama mutlak teğetsel hız bileşeninden (u_t) daha büyük olur ve yansımanın fiziksel olarak uygun bir şekilde gerçekleştiğini temsil eder. Normal ve teğetsel hız bileşenleri belirlendikten sonra, bu değerler Denklem 2.8 kullanılarak gazın duvar sıcaklığındaki en olası hız ile yeniden ölçeklendirilir.

Teğetsel hız bileşeni için elde edilen dağılım fonksiyonu $f(u_t)$, **Şekil 2.9**'da gösterilmiştir.



Şekil 2.9: Dağınık yansıma altında teğetsel hız dağılım fonksiyonu.

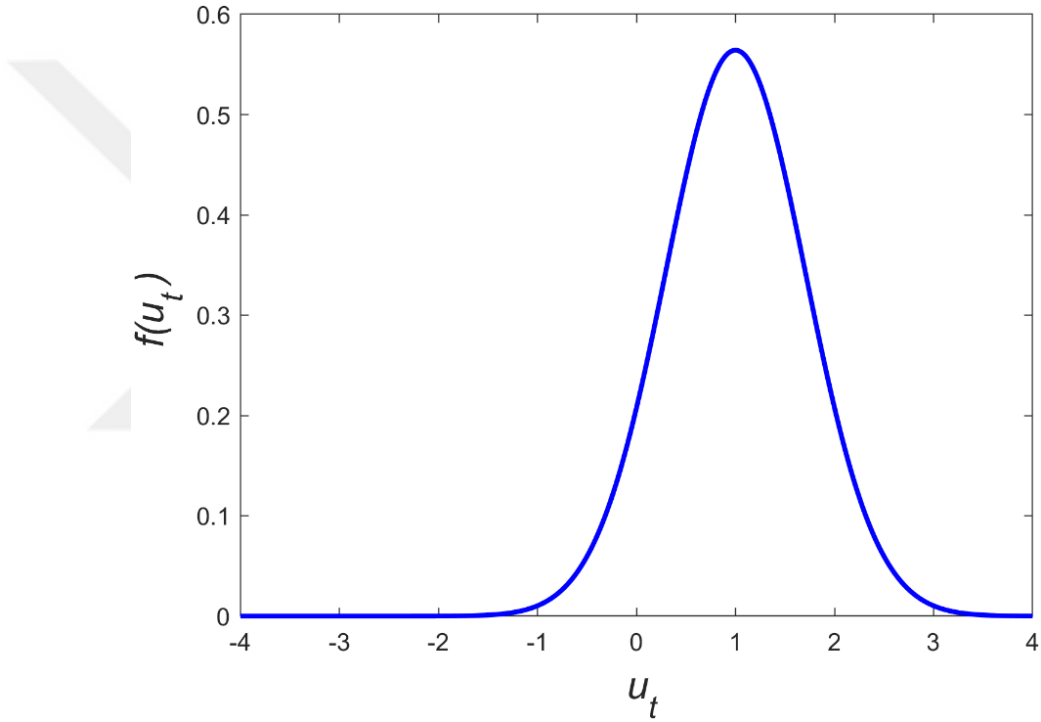
Normal hız bileşeni dağınık yansıma sınır koşulları altında hız dağılım fonksiyonu $g(u_n)$, yansıyan molekülün normal hız bileşeninin, duvarın sıcaklık ve hız özellikleriyle uyumlu bir şekilde nasıl seçildiğini açıklar. **Şekil 2.10**, bu hız bileşeninin dağılımını görselleştirmektedir.



Şekil 2.10: Dağınık yansıma altında normal hız dağılım fonksiyonu.

Şekil 2.11'de, bir Couette akışı simülasyonunda, hareketli duvarın gaz molekülleri üzerindeki etkisi görselleştirilmiştir.

Couette akışı, bir duvarın hareket yönünde moleküllerin teğetsel hız bileşenlerinin, duvarın hareketine bağlı olarak güncellenmesini içermektedir. Bu yaklaşımda, teğetsel hız bileşeni (u_t), duvar hızı (u_w) kadar artırılarak güncellenmektedir. Örneğin, duvar hızı $u_w = 1$ olduğu durumda, teğetsel hız bileşenleri yeniden ölçeklenmiş ve bu etkiler teğetsel hız dağılım fonksiyonunda ($f(u_t)$) gözlemlenmiştir. **Şekil 2.11**, bu durumu görselleştirerek hareketli duvarın gaz molekülleri üzerindeki etkisini ortaya koymaktadır.



Şekil 2.11: Couette akışında $u_w = 1$ durumuna ait teğetsel hız dağılım fonksiyonu.

Duvardan yansıyan bir i molekülünün yeni hız bileşenleri, dağılık yansıma sınır koşullarına göre aşağıdaki gibi belirlenir.

$$x: V_{i1} = \sqrt{\frac{T_w}{T_0}} u_{t1} \pm V_w \quad (2.40)$$

$$y: V_{i2} = \sqrt{\frac{T_w}{T_0}} u_n \quad (2.41)$$

$$z: V_{i3} = \sqrt{\frac{T_w}{T_0}} u_{t2} \quad (2.42)$$

Burada T_w , duvar sıcaklığını, T_0 , ortamdaki gazın başlangıç sıcaklığını, $\pm V_w$ duvar hızını ifade etmektedir. Duvar hızı c_{mp} ile boyutsuzlaştırılmıştır. Denklem 2.38 Denklem 2.39, Denklem 2.40, Denklem 2.41 ve Denklem 2.42 kullanılarak aşağıdaki denklemler elde edilmiştir:

$$\langle V_{t1} \rangle = \pm V_w \quad (2.43)$$

$$\langle V_{t2} \rangle = \sqrt{\frac{T_w}{T_0}} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (2.44)$$

$$\langle V_{t3} \rangle = 0 \quad (2.45)$$

$$\langle V_{i1}^2 \rangle = \frac{1}{2} \frac{T_w}{T_0} + V_w^2 \quad (2.46)$$

$$\langle V_{i2}^2 \rangle = \frac{T_w}{T_0} \quad (2.47)$$

$$\langle V_{i3}^2 \rangle = \frac{1}{2} \frac{T_w}{T_0} \quad (2.48)$$

$$\langle c_i^2 \rangle = 2 \frac{T_w}{T_0} + V_w^2 \quad (2.49)$$

Duvar hızının olmadığı ($V_w = 0$) ısı iletimi problemi ele alındığında, dağınık yansıma sınır koşulu altında i molekülü için, hız karelerinin ortalaması şu şekilde elde edilir:

$$\langle c^2 \rangle = \frac{3}{2} \quad (2.50)$$

Molekül hız bileşenlerinin karelerinin toplamı $\langle c_i^2 \rangle$:

$$\langle c_i^2 \rangle = 2 \quad (2.51)$$

Bu sonuç, hızlı moleküllerin duvara çarpma olasılığının daha yüksek olması nedeniyle teğetsel hız bileşenlerinin daha büyük olduğunu göstermektedir. Dağınık yansıma

mekanizması, moleküllerin çarpma sonrası hız bileşenlerinin, duvarın termodinamik özelliklerine bağlı olarak yeniden belirlendiği bir süreci ifade etmektedir. Bu mekanizma, gazın duvarlarla uyumlu bir hız ve sıcaklık dağılımına sahip olmasını sağlamaktadır.

Isı iletimi hesaplamasında T_0 , ortalama duvar sıcaklığı olarak atanır. T_0 'nun bölgedeki başlangıç hız dağılımıyla uyumlu olduğu bir durumda, ΔT , duvar sıcaklığı ile ortalama sıcaklık arasındaki sıcaklık farkı olarak ele alınırsa, üst duvar $T_{\bar{u}}$ ve alt duvar T_a sıcaklıkları aşağıdaki denklemlerle elde edilir:

$$T_{\bar{u}} = T_0 + \Delta T \quad (2.52)$$

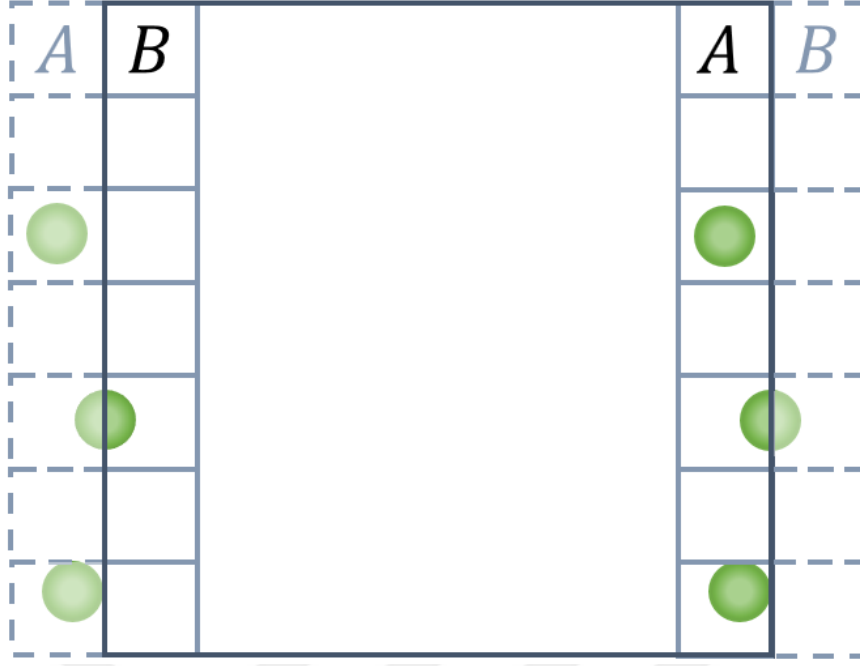
$$T_a = T_0 - \Delta T \quad (2.53)$$

2.6.3 Periyodik Sınır Koşulu

Periyodik sınır koşulları, çeşitli bilimsel ve mühendislik simülasyonlarında büyük sistemleri verimli bir şekilde modellemek için kullanılan önemli bir yöntemdir. Bu sınır koşulları altında, simülasyon alanının yalnızca küçük bir temsili bölgesi dikkate alınarak, sistemin sonsuz bir şekilde tekrarlandığı varsayılır. Periyodik sınır koşulları, özellikle gaz dinamiği, akışkanlar mekaniği ve katı hal fiziği gibi alanlarda sıkça kullanılmaktadır.

Bu sınır koşulunun uygulanmasıyla, sistem periyodik sınır koşulu tanımlanmış yönde kendini sonsuz tekrar eder. **Şekil 2.12'**de gösterildiği gibi, periyodik sınır koşulu altında sağ ve soldaki duvarlara çarpan moleküller aynı hız bileşenleriyle diğer tarafa ıslanılır. Ayrıca, sınıra komşu olan hücreler sanal olarak diğer duvara komşu olarak hesaba katılır. Bu durum, hücre geçişi ve moleküllerin çarpışma hesaplamaları sırasında bu sanal komşu hücrelerin de dikkate alınmasını sağlamaktadır.

Simülasyon, sınırlı bir alan yerine sonsuz bir sistemin küçük bir parçası olarak modellenir. Bu yöntem, özellikle seyrek gaz dinamiği ve yüksek Knudsen sayısı rejimleri için idealdir. Ayrıca, büyük sistemlerin modellenmesi için çok daha küçük bir bölgeyi dikkate alarak hesaplama maliyetini azaltmaktadır.



Şekil 2.12: Periyodik sınır koşulları altında moleküllerin geçiş ve komşuluk ilişkilerinin temsili.

2.7 Simülasyonların Fiziksel Sistemlere Uygulanabilirliği

Moleküler dinamik simülasyonları sırasında, simüle edilen sistemlerin gerçek dünyayla uyumlu hale getirilmesi için belirli fiziksel değişkenlerin doğru bir şekilde tanımlanması gerekir. Özellikle gazın fiziksel ve dinamik özelliklerini anlamak adına şu dört temel değişken önemlidir: T , m , d ve s/d .

Bazı gazların belirli sıcaklıklardaki özellikleri, fiziksel değişkenlerin büyüklükleri hakkında fikir vermek amacıyla, diatomik olan hava ve monatomik He ve Ar'un bazı özellikleri **Tablo 2.1**'de verilmiştir:

Tablo 2.1: Monatomik ve diatomik gazların fiziksel özellikleri.

Gaz Türü	m (kg)	d (m)	s/d
Hava (diatomik)	$4,8 \times 10^{-26}$	$3,7 \times 10^{-10}$	9,0 (T=300 K)
He	$6,64 \times 10^{-27}$	$2,18 \times 10^{-10}$	15,8 (T=300 K)
Ar	$6,63 \times 10^{-26}$	$3,65 \times 10^{-10}$	9,1 (T=300 K)

Helyum en düşük moleküler kütleyle sahip gazdır ve bu, onun yüksek bir difüzyon katsayısına sahip olmasına yol açar. Argon, havaya benzer şekilde daha yüksek bir moleküler kütleyle sahiptir.

Moleküler çap, çarpışma sıklığını ve ortalama serbest yolu etkilemektedir. Helyum, diğer gazlara göre daha küçük bir moleküler çapa sahiptir ve bu da gazın daha seyrek çarpışmasına neden olmaktadır.

2.8 Knudsen Sayısının Hesaplanması ve Rolü

Knudsen sayısı (Kn), gaz hareketlerini ve dinamiklerini tanımlamak için kullanılan kritik bir parametredir ve özellikle MD simülasyonlarında önemli bir rol oynamaktadır [20], [23]. Kn , gazın ortalama serbest yolunun (λ), akış alanının karakteristik uzunluğuna (L) oranı olarak ifade edilir:

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \quad (2.36)$$

Bu ifade, gazın akış rejimini sınıflandırmada temel bir ölçüt sağlamaktadır. Knudsen sayısının düşük olduğu durumlarda ($Kn < 0.01$), gazın davranışı sürekli akış rejimine benzer. Bu rejimde, gaz moleküllerinin ortalama serbest yolu, akış alanının karakteristik boyutuna göre oldukça küçüktür. Bu nedenle, gaz dinamikleri Navier-Stokes denklemleri gibi süreklilik modelleri ile açıklanabilir. Öte yandan, yüksek Knudsen sayıları ($Kn > 0.01$) durumunda ise, gaz sürekli ortam modelinden uzaklaşır. Moleküller arası çarpışmalar azalır ve sınır etkileri baskın hale gelir. Bu rejim, özellikle nano ölçekli sistemler ve mikro akışlar gibi uygulamalarda gazın detaylı moleküler özelliklerinin modellenmesini gerektirir [73], [74].

Knudsen sayısı, gazın moleküler özellikleri ile sistemin geometrik parametreleri arasındaki bir ilişkiyi temsil eder. Örneğin, gazın yoğunluğu ve moleküller arası mesafenin çapına oranı (s/d), Knudsen sayısının önemli belirleyicilerindendir. Knudsen sayısı, Denklem 2.11 yardımıyla aşağıdaki gibi bir formülle yeniden ifade edilebilir:

$$Kn = \frac{(s/d)^2}{\sqrt{2}\pi^3\sqrt{N}} \quad (2.37)$$

Bu formül, Knudsen sayısının hem s/d oranından hem de sistemdeki molekül sayısından (N) doğrudan etkilendiğini göstermektedir. Daha düşük bir s/d oranı, gazın yoğunluğunu artırarak sürekli akış rejimine geçişi kolaylaştırır. Molekül sayısını artırmak da Knudsen sayısını düşürebilir, ancak bu aynı zamanda hesaplama yükünü önemli ölçüde artırır. Daha fazla molekül kullanımı, daha yoğun gaz modelleri sunarken yüksek hesaplama kapasitesi gerektirir.

Sonuç olarak, Knudsen sayısı, akış rejiminin belirlenmesi ve gaz dinamiklerinin anlaşılması açısından kritik bir role sahiptir. Bu çalışmada hem düşük hem de yüksek Knudsen sayısı rejimlerinde simülasyonlar gerçekleştirilmiştir. Knudsen sayısının hesaplanması ve analizi, gazın moleküler seviyedeki davranışlarının fiziksel gerçeklikle uyumlu bir şekilde değerlendirilmesini mümkün kılmıştır.

3. PARALEL PROGRAMLAMA

Yüksek performanslı hesaplama (HPC) sistemlerindeki gelişmeler ve bu sistemlerin yaygınlaşması, paralel programlamayı karmaşık hesaplama problemlerinin çözümünde önemli bir araç haline getirmiştir [75], [76]. Paralel programlama, karmaşık hesaplama problemlerini seri (sıralı) programlama yaklaşımlarına göre daha verimli bir şekilde çözmek için geliştirilmiş bir yöntemdir. Bu yöntem, aynı anda birden fazla işlem veya iş parçacığının yürütülmesini sağlayarak işlem sürelerini önemli ölçüde kısaltmakta ve günümüzde giderek daha güçlü hale gelen çok çekirdekli işlemcilerin (CPU) ve grafik işlem birimlerinin (GPU) potansiyelinden faydalanmaktadır [77], [78]. Paralel programlama, özellikle bilimsel hesaplamalar, mühendislik simülasyonları ve büyük veri analitiği gibi yüksek işlem gücü gerektiren alanlarda, verimliliği artırmak ve hesaplama süreçlerini hızlandırmak için yaygın bir çözüm olarak öne çıkmaktadır [62]–[64].

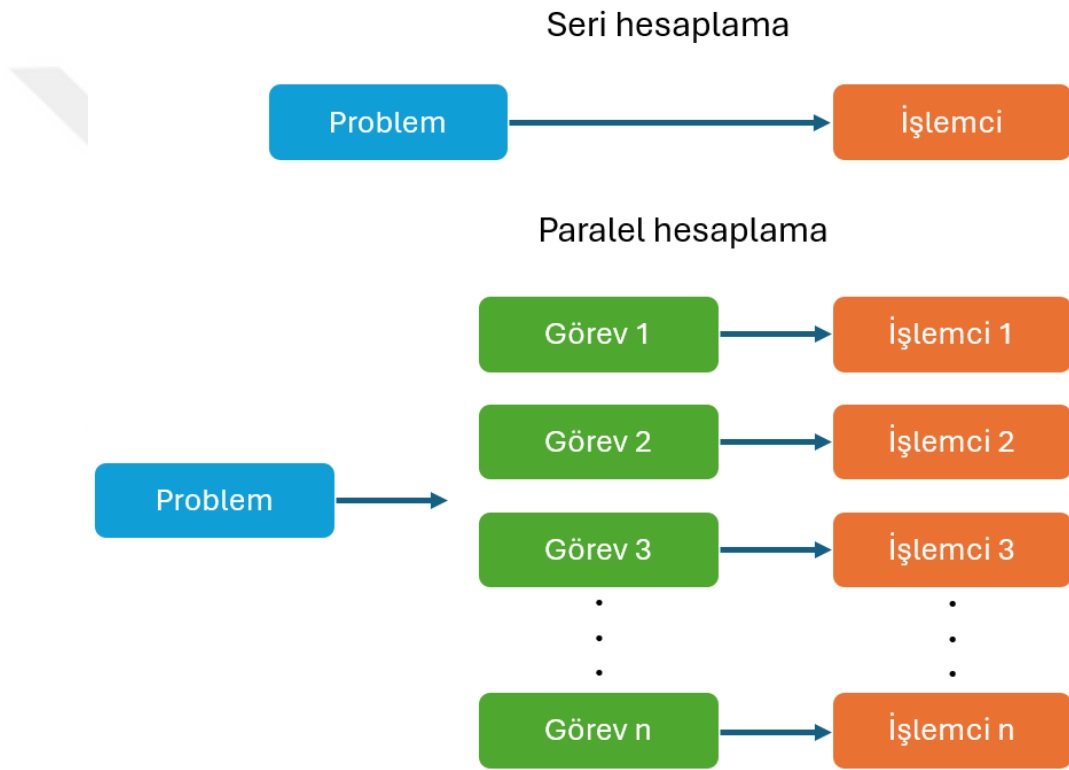
Paralel programlamanın temel prensibi, karmaşık ve büyük ölçekli problemleri daha küçük, yönetilebilir görevlere ayırmaktır. Bu görevlerin eş zamanlı yürütülmesi, işlem sürelerini önemli ölçüde kısaltır ve mevcut işlem gücünden maksimum verim alınmasını sağlar. Paralel programlama, birden fazla işlemci çekirdeği veya grafik işlem birimini kullanarak görevlerin eş zamanlı olarak çalıştırılmasını mümkün kılarak, özellikle büyük ölçekli projelerde hız ve doğruluk gereksinimlerini karşılamada etkili bir çözüm sunmaktadır.

Bu çalışmada, MD simülasyonlarında hesaplama sürelerini kısaltmak ve verimliliği artırmak amacıyla paralel programlama teknikleri kullanılmıştır. Özellikle, çok hücreli MD simülasyonu yönteminin çözümünde kullanılan döngüler OpenMP kullanılarak paralelleştirilmiş, böylece çok çekirdekli işlemcilerin işlem gücünden daha etkin bir şekilde yararlanılmıştır. Bu çalışmada hem hesaplama performansını artırmak hem de daha karmaşık ve büyük ölçekli sistemlerin modellenmesini sağlamak amaçlanmıştır. Elde edilen sonuçlar Bölüm 6’da verilmiştir.

3.1 Seri ve Paralel Programlama Kavramları

Bilgisayar programlama süreçlerinde seri ve paralel programlama kavramları, görevlerin nasıl yerine getirileceği konusunda belirleyici bir rol oynamaktadır [75].

Seri programlama, işlemlerin sıralı bir şekilde gerçekleştirilmesini ifade eder ve basit görevler veya sıralı bir işlem akışı gerektiren durumlar için uygundur. Uygulanması nispeten basit olan bu yöntem, az miktarda işlem gücü gerektiren uygulamalarda etkili bir çözüm sunar. Ancak, karmaşık veya büyük ölçekli hesaplamaların gerektiği durumlarda seri programlama, işlem gücünü sınırlı bir şekilde kullandığı için darboğaz oluşturabilir ve hesaplamaların tamamlanması uzun zaman alabilir [79]. **Şekil 3.1**, seri ve paralel hesaplama arasındaki temel farkları göstermektedir. Seri hesaplamada tüm işlemler tek bir işlem birimi tarafından sıralı bir şekilde gerçekleştirilirken, paralel hesaplamada görevler birden fazla işlem birimine eş zamanlı olarak dağıtılmaktadır.



Şekil 3.1: Seri ve paralel hesaplama yapısının temel farkları.

Buna karşılık, paralel programlama, birden fazla işlem birimini eş zamanlı olarak kullanarak karmaşık ve kaynak açısından yoğun görevlerin performansını önemli ölçüde artırabilir. Paralel programlama, bir problemin alt parçalara bölünmesi ve bu parçaların farklı işlem birimleri tarafından eş zamanlı olarak yürütülmesini içerir. Bu yaklaşım, işlem sürelerini kısaltarak özellikle bilimsel hesaplama, mühendislik simülasyonları, veri analitiği ve görüntü işleme gibi alanlarda büyük avantajlar sağlar. Ancak, paralel programlama geliştirme sürecine ek bir karmaşıklık katar. Görevler

arasında veri paylaşımı, senkronizasyon ve veri yarışmalarını önleme gibi konuların dikkatle ele alınması, paralel bir sistemin doğru ve etkili bir şekilde çalışması için gereklidir [80]. Bu nedenle, paralel programlama yöntemleri uygulanırken özellikle veri tutarlılığı ve görevler arası iletişim gibi unsurların optimize edilmesi önem taşımaktadır.

3.2 Paralel Programlama Modelleri

Seri ve paralel programlama arasındaki tercih, genellikle problemin doğasına, mevcut kaynaklara ve performans gereksinimlerine bağlıdır. Seri hesaplama, düşük karmaşıklığa sahip ve hızlı sonuç alınması gereken durumlarda etkili bir yöntemdir. Öte yandan, paralel hesaplama, büyük miktarda veriyle çalışılması veya yoğun işlem gücü gerektiren durumlarda önemli bir çözüm haline gelmektedir.

Paralel işleme teknikleri, gömülü sistemlerden mobil cihazlara, dizüstü bilgisayarlardan iş istasyonlarına ve süper bilgisayarlara kadar çok çeşitli cihazlarda kullanılabilmektedir [81]. Bu geniş uygulama alanı, paralel programlamanın modern bilgi işlemde ne kadar kritik bir rol oynadığını göstermektedir. Çeşitli bilgisayar dilleri, paralel işleme ihtiyaçlarını karşılamak için farklı araçlar ve yöntemler sunmaktadır. Paralel programlama, sistem mimarisine ve problemlerin gereksinimlerine bağlı olarak çeşitli modellerde uygulanmaktadır. Bu modeller genel olarak paylaşılan bellek modelleri, dağıtılmış bellek modelleri ve hibrit modeller olarak sınıflandırılabilir. Her bir model, farklı uygulama ihtiyaçlarına yönelik avantajlar ve dezavantajlar sunmaktadır. Son yıllarda bu modellerin, CPU'lar ve GPU'lar gibi farklı işlemci türlerini bir arada kullanan heterojen yapılarla uygulanması yaygınlaşmıştır. Heterojen sistemler, paralel programlama süreçlerinin esnekliğini ve performansını artırarak modern bilgi işlem ihtiyaçlarına verebilmektedir.

3.2.1 Paylaşılan Bellek Modelleri

Paylaşılan bellek modelleri, birden fazla işlem biriminin aynı bellek alanını paylaşarak çalıştığı paralel programlama yöntemleridir. Bu modeller, özellikle çok çekirdekli işlemcilerde paralel işlemlerin kolayca gerçekleştirilmesini sağlamaktadır. Paylaşılan bellek yapısı, işlem birimlerinin ortak bir adres alanını kullanmasına olanak tanıyarak veri iletişimini hızlı ve verimli hale getirmektedir. Bu yaklaşımın en önemli

avantajlarından biri, veri paylaşımı ve iletişim kolaylığıdır. İşlem birimleri aynı bellek alanına eriştiği için, veri iletimi sırasında gecikme süreleri düşük olur ve bellek tüketimi optimize edilir. Ayrıca, OpenMP gibi araçlar sayesinde paralel döngülerin tanımlanması ve kontrol edilmesi daha kolay hale gelir. Bu da geliştirme süresini kısaltmaktadır. Bununla birlikte, paylaşılan bellek modelleri bazı dezavantajlar da taşımaktadır. İşlem birimlerinin aynı bellek alanına eş zamanlı erişimi, veri yarışmaları ve senkronizasyon sorunlarına yol açabilir [82], [83]. Bu tür durumlarda veri tutarlılığını sağlamak ve işlem birimleri arasında doğru sırayı belirlemek için ek çaba gereklidir. Ayrıca, paylaşılan bellek yapısı büyük ölçekli sistemlerde ölçeklenebilirlik sınırlamaları oluşturabilir. İşlem birimlerinin artmasıyla bellek paylaşımı zorlaşabilir ve performans düşüşleri yaşanabilir. Bu nedenlerle, paylaşılan bellek modelleri, küçük ve orta ölçekli paralel hesaplama projelerinde etkili bir çözüm sunarken, daha büyük ve karmaşık sistemlerde hibrit yaklaşımlar gerekebilir.

3.2.2 Dağıtılmış Bellek Modelleri

Dağıtılmış bellek modellerinde, her işlem biriminin kendi özel bellek alanı bulunmaktadır ve işlem birimleri arasındaki veri paylaşımı, mesaj geçirme yoluyla sağlanmaktadır. Mesaj Geçirme Arayüzü (Message Passing Interface, MPI), bu tür modellerin en yaygın örneğidir. MPI, özellikle büyük ölçekli paralel sistemlerde işlem birimleri arasında veri paylaşımını ve iletişimi etkin bir şekilde koordine ederek karmaşık hesaplama problemlerinde güçlü bir çözüm sunmaktadır [84].

Dağıtılmış bellek modelleri, büyük ölçekli sistemlerde ve birden fazla düğüm arasında çalışması gereken durumlarda tercih edilmektedir. Bu modelin en önemli avantajlarından biri, ölçeklenebilirlik sunmasıdır; işlem birimlerinin artan sayısına paralel olarak sistem kapasitesi genişletilebilir. Ayrıca, her işlem biriminin kendi belleğini kullanması, bağımsız işlem yapılarını destekler ve veri tutarlılığı sorunlarını minimuma indirir. Ancak, dağıtılmış bellek modellerinin bazı dezavantajları da bulunmaktadır. Mesaj geçirme işlemleri, özellikle büyük veri kümeleri üzerinde çalışırken iletişim gecikmelerine ve performans kayıplarına neden olabilir. Ayrıca, veri aktarımının karmaşıklığı, programlama sürecinde ek bir yük oluşturabilir ve hata yönetimini zorlaştırabilir [80]. Bu nedenle, dağıtılmış bellek modelleri uygulanırken veri transferi ve senkronizasyon sorunları dikkatlice ele alınmalıdır.

3.2.3 Hibrit Modeller

Hibrit modeller, paylaşılan ve dağıtılmış bellek modellerinin avantajlarını birleştiren paralel programlama yaklaşımlarıdır. Bu modellerde, her bir düğüm içindeki işlem birimleri arasında iletişim için paylaşılan bellek modeli (örneğin, OpenMP) kullanılırken, farklı düğümler arasındaki veri paylaşımı ve koordinasyon için dağıtılmış bellek modeli (örneğin, MPI) tercih edilmektedir [85]. Hibrit modeller, paralel hesaplamanın hem yerel hem de geniş ölçekli sistemlerde verimli bir şekilde gerçekleştirilmesine olanak sağlamaktadır. Bu yaklaşım, özellikle karmaşık ve büyük ölçekli sistemlerde, işlem gücünden maksimum düzeyde yararlanmak için kritik bir çözüm sunmaktadır. Hibrit modelin en önemli avantajı, aynı anda ölçeklenebilirlik ve verimlilik sağlamasıdır. Paylaşılan bellek modelleri, her bir düğümdeki işlem birimlerinin aynı veriler üzerinde eşzamanlı çalışmasına olanak tanırken, dağıtılmış bellek modelleri farklı düğümler arasında veri iletişimini etkin bir şekilde koordine eder. Bu sayede, büyük ölçekli hesaplama sistemlerinde hem işlem birimleri arasındaki iletişim gecikmeleri azalır hem de geniş ölçekli sistemlere kolay uyarlanabilir [86].

Ancak, hibrit modellerin uygulanması bazı zorlukları da beraberinde getirir. Bu zorlukların başında, geliştiricilerin her iki modelin avantajlarını optimize ederken aralarındaki karmaşıklığı yönetmesi gelmektedir. Paylaşılan bellek ve dağıtılmış bellek yaklaşımlarının aynı sistemde eş zamanlı kullanılması, senkronizasyon ve hata yönetimi açısından ek bir yük oluşturabilir. Ayrıca, iletişim protokollerinin doğru bir şekilde tasarlanması ve veri tutarlılığının sağlanması, performansın korunması için kritik önemdedir. Bu nedenle, hibrit modeller genellikle daha uzun bir geliştirme süresi gerektirmektedir [83], [85].

3.2.4 Heterojen Yapılar

Son yıllarda, CPU'lar, GPU'lar ve diğer hızlandırıcı işlemciler gibi farklı işlemci türlerini bir arada kullanan heterojen yapılar, paralel programlama uygulamalarında ön plana çıkmıştır. Heterojen sistemler, işlemci türlerinin farklı yeteneklerinden faydalanarak paralel hesaplamada performansı önemli ölçüde artırmaktadır. Özellikle bilimsel hesaplamalar, yapay zekâ uygulamaları ve büyük veri analitiği gibi yoğun

işlem gerektiren alanlarda bu sistemler, modern bilgi işlem ihtiyaçlarını karşılamaktadır.

Heterojen sistemlerin temel avantajı, farklı işlemci türlerinin iş yüküne göre optimize edilebilmesidir. Örneğin, CPU'lar seri ve yönetimsel görevler için daha uygunken, GPU'lar yoğun paralel işlemler için üstün performans sunar. Bu iş bölümü sayesinde, uygulamalar hem işlem süresi hem de enerji verimliliği açısından optimize edilebilir. Ayrıca, heterojen yapılar, tek bir işlemci türüne bağımlılığı azaltarak esneklik sağlar ve işlemci kaynaklarının daha verimli kullanımını mümkün kılar. Bununla birlikte, heterojen yapılar bazı teknik zorluklar da barındırmaktadır. Bu zorlukların başında, algoritmaların farklı işlemci türlerine uygun şekilde tasarlanması ve iş yükünün dengeli bir şekilde dağıtılması gelmektedir. Ayrıca, CPU ve GPU arasındaki veri aktarımının yüksek maliyeti, paralel programlama süreçlerinde performansı olumsuz etkileyebilir. Heterojen sistemlerin verimli bir şekilde uygulanabilmesi için, geliştiricilerin senkronizasyon, veri bağımsızlığı ve bellek yönetimi gibi konulara dikkat etmesi gerekmektedir [87] .

Heterojen yapılar, doğru bir şekilde uygulandığında, paralel programlama süreçlerinde hem performansı artırır hem de enerji verimliliği sağlar. Özellikle modern paralel hesaplama gereksinimlerini karşılamak için, heterojen sistemler her geçen gün daha fazla tercih edilmektedir.

4. BASINÇ GRADYANLI COUETTE AKIŞININ MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYONU İLE İNCELENMESİ

Couette ve Poiseuille akışları, akışkanların moleküler düzeydeki davranışlarını anlamak için sıkça kullanılan temel akışkanlar dinamiği kavramlarıdır. Bu iki model, özellikle mikro ve nano ölçekli sistemlerde akışkan davranışlarını detaylı bir şekilde incelememize olanak tanımaktadır. Couette akışı, iki paralel plaka arasındaki bir akışkanın, plakaların birinin ya da her ikisinin belirli bir hızda hareket etmesiyle oluşan kayma gerilimini analiz eder. Bu analiz, akışkanın katmanları arasında hız gradyanı oluşturarak moleküler etkileşimlerin anlaşılmasını sağlar [20]. Poiseuille akışı ise, basınç farkı etkisiyle dar kanallarda veya borularda hareket eden bir akışkanın davranışını incelemektedir. Bu akış türü, uygulanan basınç gradyanı sayesinde akışkanın hız profilini analiz etmek için kullanılmakta ve gaz dinamiği konularında temel bir model olarak öne çıkmaktadır [88].

MD simülasyonlarında, Couette ve Poiseuille akışları, moleküler düzeyde akış davranışlarının incelenmesi için önemli referans modellerdir. Mikro ve nano ölçekli sistemlerde, özellikle elektronik ve biyomedikal uygulamalarda sıkça başvurulanan bu modeller, akışın sınır tabakası, kayma etkileri ve duvar etkileri gibi araştırma konularını da kapsamaktadır [23].

Bu çalışmada, Couette akışı, farklı duvar hızları, duvar sıcaklıkları ve basınç gradyanları altında MD simülasyonları kullanılarak ayrıntılı bir şekilde incelenmiştir. Ana amaç, nano-ölçekli kanallarda süpersonik, transonik ve ses altı hızlardaki akış karakteristiklerini detaylı olarak yakalamaktır. Sisteme bir basınç gradyanı uygulanmış ve hesaplama alanı, farklı duvar hızları, duvar sıcaklıkları ve basınç gradyanı kombinasyonları altında ayrıntılı olarak incelenmiştir; böylece bu parametrelerin akış dinamikleri üzerindeki birleşik etkileri ortaya konmuştur.

Basınç gradyanı ve duvar hızlarının birleşik etkisi ile nano kanallardaki ses altı ($Mach < 0.8$), transonik ($0.8 < Mach < 1.2$) ve süpersonik ($1.2 < Mach < 5.0$) hızlarda, farklı parametrelerin kombinasyonu incelenmiştir. Sisteme uygulanan basınç gradyanı ve duvar hızlarının birleşik etkisi, nano kanallardaki farklı akış rejimlerinin kapsamlı bir şekilde araştırılmasına olanak sunmuştur. 1260 farklı simülasyon boyunca, çeşitli

parametre kombinasyonları test edilerek her bir Mach seviyesinde belirgin akış karakteristiklerini tanımlayan moleküler düzeydeki etkileşimler ve hız profilleri hakkında bulgular elde edilmiştir.

4.1 Yöntem ve Simülasyon Tasarımı

Bu bölümde, nano ölçekli kanallarda akış dinamiklerini derinlemesine analiz etmek amacıyla kullanılan yöntem ve simülasyon tasarımı detaylı olarak ele alınmaktadır. Çalışmada, MD simülasyonları kullanılarak basınç gradyanı, duvar hızları ve sıcaklık farkları gibi temel parametrelerin akış özellikleri üzerindeki etkileri sistematik bir şekilde incelenmiştir. Bu parametreler, nano ölçekli sistemlerin karmaşık termal ve mekanik davranışlarını anlamak için kritik öneme sahiptir.

Hesaplama alanının detaylı tasarımı, basınç gradyanı oluşturma teknikleri ve boyutsuz parametrelerin tanımlanması, simülasyonların güvenilir ve genelleştirilebilir sonuçlar üretmesini sağlamak için dikkatle yapılandırılmıştır. Hesaplama alanı tasarımında, akışkanın sınır koşulları ile olan etkileşimleri ve bu etkileşimlerin moleküler düzeydeki dinamiklere etkisi göz önünde bulundurulmuştur. Bu çerçevede, sonraki alt bölümlerde açıklanan yöntemlerin ve simülasyon sonuçlarının temelini oluşturmaktadır.

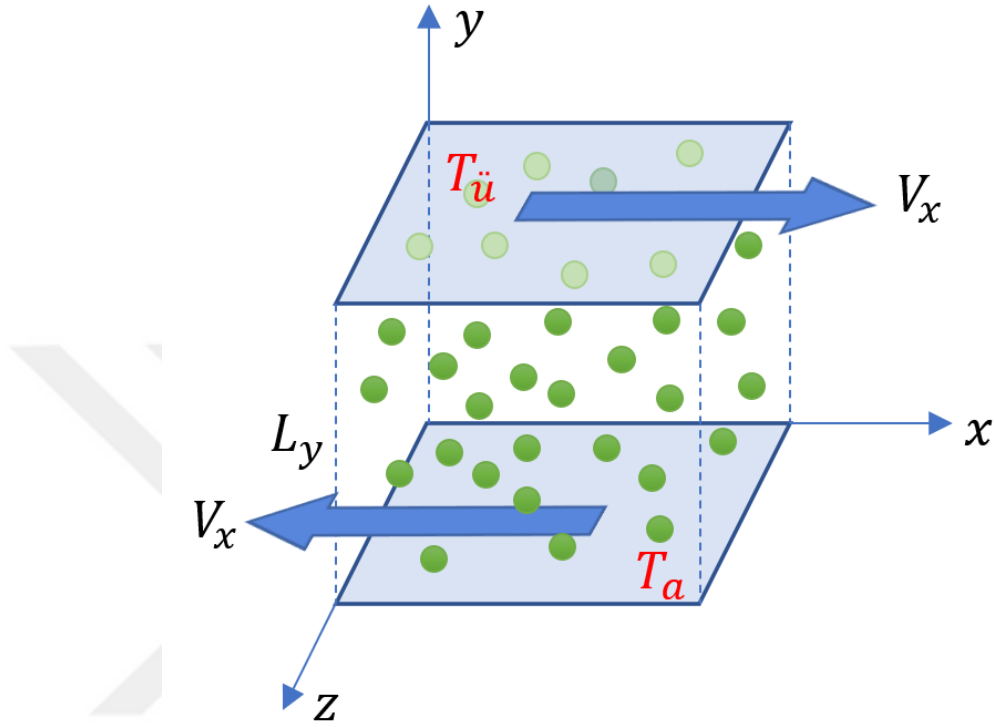
4.1.1 Simülasyon Alanı ve Hesaplama Yöntemleri

Simülasyon alanı, **Şekil 4.1**'de görüldüğü gibi, alt ve üst duvarlar arasında yer alan bir hesaplama bölgesinden oluşmaktadır. Hesaplama alanı, L_y yüksekliğinde bir nano-kanal olarak modellenmiştir. Alt ve üst duvarlar, sistemin sınırlarını belirlemekle kalmayıp aynı zamanda akışın fiziksel özelliklerini şekillendiren önemli birer bileşen olarak işlev görmektedir. Üst duvar sıcaklığı (T_u) değişken bir şekilde tanımlanmışken, alt duvar sıcaklığı (T_a) sabit tutulmuştur. Bu düzenleme, sistemde bir sıcaklık gradyanı oluşturarak enerji transferi ve termal etkilerin incelenmesine olanak tanımaktadır.

Duvarlar, farklı hızlarda (V_x), Couette akışının karakteristiklerini ortaya koymak amacıyla belirli hız değerleriyle hareket ettirilmiştir. Bu düzenleme, duvarlar arasında bir kayma gerilimi ve hız profili oluşturulmasını sağlamıştır.

Simülasyon alanında x ve z -yönlerinde periyodik sınır koşulları uygulanmıştır. Bu sınır koşulları, sınırlı bir hesaplama alanında sonsuz bir sistemin davranışını temsil etmekte

ve hesaplama maliyetlerini optimize ederek gerçekçi sonuçlar elde edilmesini mümkün kılmaktadır. Simülasyonlarda moleküller arasındaki etkileşimlerde sert küre modeli kullanılmıştır. Bu model, çarpışmaları basit ve hızlı bir şekilde simüle etme avantajına sahiptir.



Şekil 4.1: Hesaplama alanı temsili gösterimi.

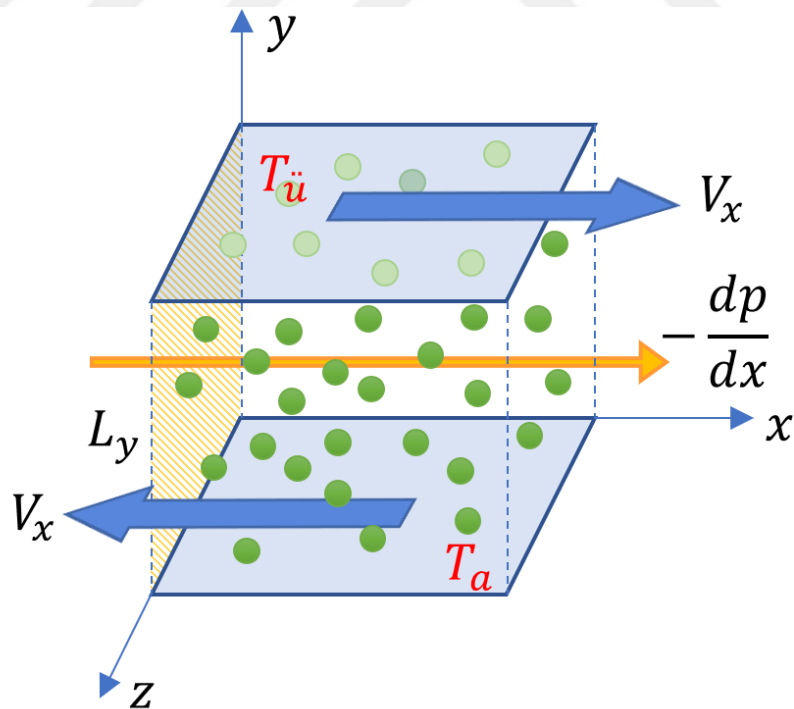
Hesaplama sürecinde moleküllerin zaman içindeki hareketleri ve çarpışmaları adım adım izlenebilmektedir. Alt ve üst duvarlar arasında oluşturulan basınç ve hız profilleri, akışın farklı hız, sıcaklık ve basınç gradyanı koşulları altındaki davranışlarını analiz etmek için kullanılmıştır. Bu tasarım, nano-kanallarda moleküler düzeyde akış özelliklerini detaylı bir şekilde incelemek için ideal bir ortam sunmaktadır. Simülasyon hücrelerine periyodik sınır koşulları eklenerek, sınırlı bir hesaplama alanında sonsuz uzunlukta bir kanalın etkisi taklit edilir. Bu yöntem, sınır koşullarının ve basınç gradyanının uyum içinde çalışmasını sağlayarak, sistemin hesaplama maliyetini artırmadan gerçekçi sonuçlar elde edilmesini mümkün kılmaktadır.

4.1.2 Basınç Gradyanı

Poiseuille akışı, bir kanal veya boru boyunca, uygulanan basınç farkı sayesinde akışkanın yönlendirildiği karakteristik bir akış tipidir. Bu tür bir akış, özellikle sıvıların ve gazların dar kanallarda veya borularda nasıl hareket ettiğini incelemek için yaygın olarak kullanılmaktadır. MD simülasyonlarında, Poiseuille akışını oluşturmak amacıyla simülasyon hücresi boyunca bir basınç gradyanı uygulanır; böylece, akışkanın kanal boyunca hareket etmesi sağlanır.

MD simülasyonlarında, periyodik sınır koşulları, genellikle hesaplama yükünü hafifletmek ve sınırlı bir alanı kullanarak çok daha büyük veya sonsuz bir sistemin davranışını simüle etmek amacıyla kullanılmaktadır. Bu yaklaşım, yalnızca sistemin küçük bir bölümünü modellemeye olanak tanırken, sanki bu bölüm etrafındaki ortamla sürekli bir etkileşim içindeymiş gibi davranmasını sağlar. Böylece, araştırmacılar büyük boyutlu bir sistemin tam simülasyonunu yapmadan, daha küçük bir hesaplama alanı içinde benzer sonuçlar elde edebilmektedirler [89], [90].

Şekil 4.2'de, basınç gradyanlı hesaplama alanının temsili gösterimi yer almaktadır.



Şekil 4.2: Basınç gradyanlı hesaplama alanının temsili gösterimi.

Bu tez çalışmasında, **Şekil 4.2**'de gösterilen hesaplama alanına moleküller yerleştirilmiştir. Sistemde, moleküllerin bir yönden geçişine izin verilirken diğer

yönden gelen moleküllerin belirli bir olasılıkla elastik olarak yansıtıldığı özel bir periyodik sınır koşulu uygulanmıştır. Bu sınır koşulu, bir tür hayali zar mekanizmasıyla moleküllerin hareket yönlerini ve geçiş olasılıklarını yönetmiştir. Bu modelde, $+x$ sınırına ulaşan moleküllerin $-x$ sınırına geçiş olasılığı, $-x$ sınırına ulaşan moleküllerin $+x$ sınırına geçiş olasılığından daha yüksek bir seviyede tutulmuştur. Bu asimetrik geçiş oranı, sistemde doğal bir akış yönü ve basınç farkı oluşturmak için seçici bir periyodik koşul kullanılarak sağlanmıştır. Bu seçici periyodik sınır koşulu, zıt yönlerdeki sınırların geçirgenliklerine farklı olasılıklar atayarak elde edilmektedir. **Şekil 4.2'**de $-x$ duvarında bir membran olarak gösterilen gölgeli alan, sınır koşulunun uygulandığı bölgeyi temsil etmektedir. $+x$ sınırına yaklaşan moleküller, diğer tarafa serbestçe aktarılırken, $-x$ sınırına yaklaşan moleküllere ise bu kabul-red algoritması uygulanmaktadır. Bu algoritma sayesinde $-x$ sınırından geçmek isteyen moleküller belirli bir olasılıkla geri çevrilmekte, böylece x yönünde bir yoğunluk farkı oluşturulmaktadır. Bu yoğunluk farkı, x yönünde bir basınç gradyanı oluşturur ve sistemde doğal bir akış profili elde edilmesine olanak tanımaktadır. Bu süreçte, basınç gradyanının kontrolü, PW (Pressure Weight) adı verilen boyutsuz bir parametre ile sağlanmaktadır.

PW değeri, moleküllerin bir sınırdan diğerine geçiş olasılıklarını kontrol ederek, sistemde doğal bir basınç farkı oluşturulmasını sağlamaktadır. $+x$ ve $-x$ sınırları arasındaki geçirgenlik oranını belirleyen PW değeri, düşük olduğunda yoğunluk farkını artırır ve daha güçlü bir basınç gradyanı oluşturur. Örneğin, $PW=1,0$, sınırlar arasında herhangi bir basınç gradyanı olmadığı durumu ifade ederken, $PW=0,5$, yüksek bir basınç gradyanını temsil etmektedir. Bu yaklaşım, moleküllerin doğal hareketlerini engellemeden belirli bir yönlenme kazandırarak akışın kontrollü bir şekilde oluşmasını sağlamaktadır.

4.1.3 Simülasyon Parametreleri

Bu çalışmada, farklı parametrelerin akış dinamikleri üzerindeki etkileri incelenmiştir. Duvar hızları, sıcaklıkları ve basınç gradyanları çeşitli kombinasyonlarla test edilmiş; Couette akışı ve basınç gradyanlı kanal akışı için simülasyonlar gerçekleştirilmiştir. **Tablo 4.1'**de belirtilen V_x , T_u ve PW kullanılarak simülasyonlar gerçekleştirilmiştir. Bu parametreler, simülasyon sonuçlarını genelleştirilebilir ve farklı ölçeklerdeki sistemlerle karşılaştırılabilir hale getirmek için seçilmiştir. Çalışmada, farklı duvar

sıcaklıkları, duvar hızları ve basınç gradyanları, akış davranışını ayrıntılı bir şekilde incelemek için sistematik olarak değiştirilmiştir. Ayrıca, bu bölümden elde edilen sonuçların bir kısmı bilimsel makale olarak yayınlanmıştır [91].

Tablo 4.1: Simülasyonlarda kullanılan parametreler.

Parametreler	Değerler						
V_x	0,0	1,0	2,0	3,0	4,0	5,0	
PW	1,0	0,9	0,8	0,7	0,6	0,5	
T_u	4,0	7,0	10,0	13,0	16,0	19,0	22,0

Duvar hızını temsil eden V_x , simülasyonlarda 0'dan başlayarak 5,0'a kadar değişen bir aralıkta tanımlanmıştır. Bu, duvarların sabit kaldığı durumlardan (hareketsiz duvarlar, $V_x = 0$), yüksek hızlı hareket eden duvarlara ($V_x = 5,0$) kadar çeşitli hız rejimlerini kapsamaktadır. Simülasyonlarda ses hızı yaklaşık olarak 2,89 olarak hesaplanmıştır. Bu durumda $V_x = 5,0$ değeri yaklaşık olarak 1,7 Mach değerine karşılık gelmektedir. Bu, süpersonik akış rejimlerinin davranışlarını anlamak için önemli bir parametre sunmaktadır. Basınç gradyanı ise $PW = 1,0$ ile $PW = 0,5$ arasında değiştirilmiştir. $PW = 1,0$, sistemde bir basınç gradyanı bulunmadığı durumu ifade ederken, $PW = 0,5$, basınç gradyanının yüksek bir noktaya ulaştığı durumu temsil etmektedir. $PW = 0,5$ durumunda, duvara yaklaşan moleküllerin yarısının diğer tarafa geçmesine izin verilirken, diğer yarısı elastik çarpışma yoluyla yansıtılmaktadır. Bu, moleküllerin akış yönündeki yoğunluk farkının artırılmasını ve böylece belirgin bir basınç gradyanı oluşmasını sağlamaktadır. Bu seçici sınır koşulu sayesinde, moleküllerin hareket dinamikleri üzerinde ayrıntılı bir kontrol sağlanarak, farklı basınç ve hız rejimlerinde akışın karakteristikleri analiz edilmiştir. PW değerinin değiştirilmesiyle oluşturulan basınç gradyanı, hem düşük hem de yüksek yoğunluk farklarının incelenmesine olanak tanımış, böylece nano-ölçekli kanallardaki akış profillerine yönelik kapsamlı bir değerlendirme yapılabilmektedir.

Simülasyonlarda T_u , üst duvar sıcaklığını temsil eder ve 4,0 ile 22,0 arasında değişmektedir. Alt duvar sıcaklığı ise $T_a = 10$ seçilmiş ve sabit tutulmuştur. Üst duvar

sıcaklığının değişkenliği ile birlikte bu sabit değer, sistemde belirgin bir sıcaklık farkı oluşturarak, moleküllerin hızlarını, yüzeye olan etkileşimlerini ve enerji transferini etkileyerek sistemin termodinamik davranışını şekillendirmektedir. Bu yaklaşım, akışkanın sıcaklık değişimlerine verdiği tepkileri analiz etmek ve farklı sıcaklık gradyanlarının hem nano-ölçekli akış profilleri üzerinde hem de mikroakışkan sistemler üzerindeki etkilerini ortaya koymak için önemlidir.

Açıklanan bu parametreler, **Tablo 4.2**'de sunulan veri setlerine uygulanarak toplamda 1260 simülasyon gerçekleştirilmiştir. Her bir veri seti, sistemin geometrik ve fiziksel özelliklerini temsil eden çeşitli değişkenler içerir: AR (aspect ratio, en-boy oranı), N (molekül sayısı), Kn (Knudsen sayısı) ve L_y/d (kanal uzunluğunun molekül çapına oranı). Bu veri setleri, akışkanın davranışını, yüzeye olan etkileşimini ve sistemin boyutsal etkilerini gözlemlemek için farklı kombinasyonlarda kullanılmıştır.

Tablo 4.2: Simülasyonlarda kullanılan veri setleri.

Parametreler	Veri Setleri				
	Set 1	Set 2	Set 3	Set 4	Set 5
AR	1,0	2,0	2,0	4,0	4,0
N	204.800	25.600	51.200	204.800	51.200
Kn	0,0345	0,0689	0,1378	0,0345	0,0689
L_y/d	280	140	70	280	140

Karakteristik uzunluk olan L_y , simülasyon sisteminin boyutunu belirlemekte ve çalışmada L_y/d boyutsuz uzunluk değerleri 70, 140 ve 280 olarak seçilmiştir. Bu boyutsuz değerler, helyum (He) gazı temel alınarak boyutlandırıldığında, $L_y/d = 280$ değeri yaklaşık 61 nm'ye karşılık gelmektedir. Buna karşılık, $L_y/d = 140$ değeri 30,5 nm'yi ve $L_y/d = 70$ değeri 15,3 nm'yi temsil etmektedir. Bu sayede, farklı boyutsal uzunluklarda simülasyonların gerçekleştirilmesi ve akış karakteristiklerinin değişimi detaylı bir şekilde incelenmiştir.

Toplam simülasyon sayısı, her bir parametre kombinasyonunun farklı veri setlerine uygulanmasıyla elde edilmiştir. Farklı duvar hızları (V_x), basınç gradyanı değerleri (PW) ve üst duvar sıcaklıkları (T_u) bu veri setlerinde yer alan farklı AR, N, Kn ve L_y/d ile birleştirilerek geniş bir yelpazede test edilmiştir.

Simülasyonlarda kullanılan boyutsuz değerler hem akışın dinamiklerini hem de termodinamik özelliklerini analiz etmek için geniş bir aralıkta test edilmiştir. Simülasyonda, parçacıkların basınç gradyanına verdiği tepki gözlemlenir; parçacıklar, yüksek basınç bölgesinden düşük basınç bölgesine doğru hareket ederken, basıncın yönlendirdiği doğrultuda hızlanırlar. Boyutsuz basınç gradyanı değerleri hem düşük hem de yüksek basınç farklarını temsil edecek şekilde ayarlanmıştır. Boyutsuz parametreler, simülasyonların sadece nano-ölçekteki kanallarla sınırlı kalmamasını, aynı zamanda farklı ölçeklerdeki sistemlere de uygulanabilir sonuçlar vermesini sağlamıştır.

4.1.4 Sıcaklık ve Basınç için Moleküler Dinamik Temelli Hesaplamalar

Kararlı durum profillerine ulaşmak için, simülasyonun son aşamalarında 198 ile 200 cpp (collision per particle) arasında uzun süreli bir ortalama alma prosedürü uygulanmıştır. Bu prosedür, sistemin istatistiksel dengeye ulaştığından emin olmak için geliştirilmiş bir yöntemdir. Elde edilen veriler, önceki cpp değerlerinden türetilen profillerle karşılaştırılmış ve sistemin kararlı durum koşullarının başarıyla oluşturulduğu doğrulanmıştır. Yerel sıcaklık hesaplamaları, moleküllerin yerel hızlarına dayanmaktadır ve Denklem 4.1 ile ifade edilmektedir. Bu denklemde, $\langle \rangle$ ortalama alma operatörü, k , Boltzmann sabiti, T , mutlak sıcaklık, m , moleküler kütle, $\vec{c}$ moleküler hız ve $\vec{u}$ ilgili yerel bölgedeki moleküller üzerinden ortalaması alınan yerel hız vektörüdür.

$$3kT \equiv \langle m|\vec{c} - \vec{u}|^2 \rangle = m\langle |\vec{c} - \vec{u}|^2 \rangle \quad (4.1)$$

Problemimizde sadece x yönünde etkili bir basınç gradyanı ve hız sınır şartları mevcut olduğundan, simülasyonlarda yalnızca x yönünde sıfır olmayan bir hız bileşeninin oluşması beklenmektedir. Bu durum, aşağıdaki Denklem 4.2 ile ifade edilmiştir:

$$\langle c_x \rangle = |\vec{u}| = V_x \quad (4.2)$$

Burada c_x , x yönündeki moleküler hız bileşenini temsil etmektedir.

Denklem 4.1 ve Denklem 4.2'nin birlikte kullanımıyla Denklem 4.3 türetilmiştir. Bu denklem, sıcaklık ve hız arasındaki ilişkiyi ifade eder:

$$3kT = m\langle |\vec{c} - \vec{u}|^2 \rangle = m(\langle c^2 \rangle - V_x^2) \quad (4.3)$$

Kinetik enerji Denklem 4.4'te verilmiştir.

$$E \equiv \frac{1}{2}mc^2 \quad (4.4)$$

Denklem 4.3 ve Denklem 4.4 kullanıldığında sıcaklık için ilişki Denklem 4.5 olarak elde edilir.

$$3kT = 2\langle E \rangle - \langle m \rangle V_x^2 \quad (4.5)$$

Simülasyondaki basınç ise, moleküllerin sayı yoğunluğu (n) kullanılarak hal denkleminde ifade edilmiştir. Basınç ve sıcaklık arasındaki ilişki şu şekilde tanımlanır:

$$p = nkT \quad (4.6)$$

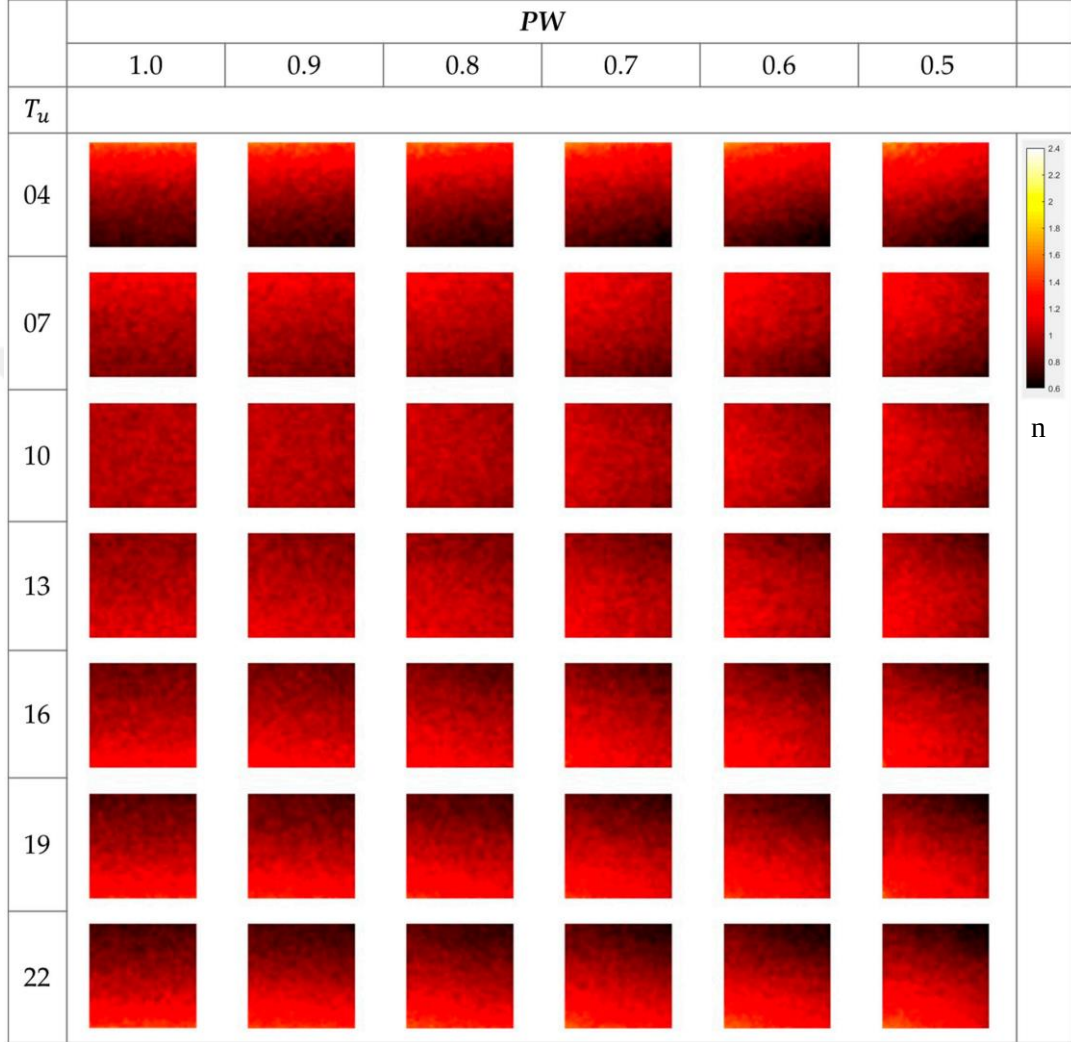
Denklem 4.6, basıncın moleküllerin yoğunluğu ve sıcaklığı ile doğru orantılı olduğunu ifade eder. Bu hal denklemi, simülasyondaki termodinamik özelliklerin analiz edilmesi ve sistemin fiziksel parametrelerinin doğrulanmasında temel bir araçtır.

4.2 Simülasyon Sonuçları

Bu bölümde, yapılan simülasyonlardan elde edilen sonuçlar detaylı olarak sunulmaktadır. Akış dinamikleri, duvar hızları, sıcaklık gradyanları ve basınç gradyanlarının etkileri incelenerek Couette akışı ve basınç gradyanlı kanal akışı için akış profilleri değerlendirilmiştir. Burada sunulan grafikler, Veriseti 1'den elde edilen sonuçları kapsamaktadır. Son kısımda ise tüm verisetleri için karşılaştırmalı sonuçlar verilmiştir.

4.2.1 Molekül Sayı Yoğunluğu Dağılımları

Simülasyon sonuçlarından biri olan $V_x = 0,0$, $AR = 1,0$, $N = 204.800$ durumuna ilişkin molekül sayı yoğunluğu grafikleri Şekil 4.3'te sunulmaktadır. Bu grafik MATLAB'de çizilmiştir.



Şekil 4.3: $V_x = 0$, $AR=1,0$, $N=204.800$ durumunda molekül sayı yoğunluğu grafikleri.

Bu şekil, farklı T_u ve PW kombinasyonlarına karşılık gelen molekül sayı yoğunluğu dağılımlarını göstermektedir. İlk sütun, sıfır basınç gradyanlı durumu temsil etmektedir ($PW = 1,0$). Bu durumda, duvara yaklaşan tüm moleküller karşı tarafa serbestçe geçmekte ve sistemde bir basınç farkı oluşmamaktadır. Bu nedenle, duvarlar arasında belirgin bir yoğunluk gradyanı gözlemlenmemektedir. Basınç gradyanı olmaması durumunda ($+x$ ve $-x$ duvarlarına çarpan moleküllerin karşı tarafa elastik olarak yansıtılması nedeniyle), moleküller homojen bir dağılım sergilemektedir. Simülasyonlarda, alt duvar başlangıç ortam sıcaklığında ($T_a = 10$) tutulurken üst

duvar sıcaklığı (T_u), 4 ile 22 arasında değiştirilmiştir. $T_u = 10$ durumunda, alt ve üst duvarlar aynı sıcaklığa sahip olup, yalnızca basınç gradyanının etkili olduğu bir akış durumu gözlemlenmiştir. Bu özel durum, **Şekil 4.3**'te üçüncü sıra ve birinci sütunda gösterilmiştir.

Üst duvar sıcaklığının artışı (T_u), moleküler hareketliliği artırarak yoğunluk gradyanında belirgin değişimlere yol açmaktadır. Bu artış, moleküllerin kinetik enerjilerini artırarak üst duvar yakınındaki yoğunluğun azalmasına neden olmaktadır. Bu enerji aktarımı, moleküllerin sistem içinde daha serbest hareket etmesini sağlarken, alt duvar yakınındaki molekül yoğunluğu artışını tetiklemektedir. Özellikle yüksek T_u değerlerinde ($T_u = 19$ ve $T_u = 22$), bu etkiler daha belirgin hale gelmektedir.

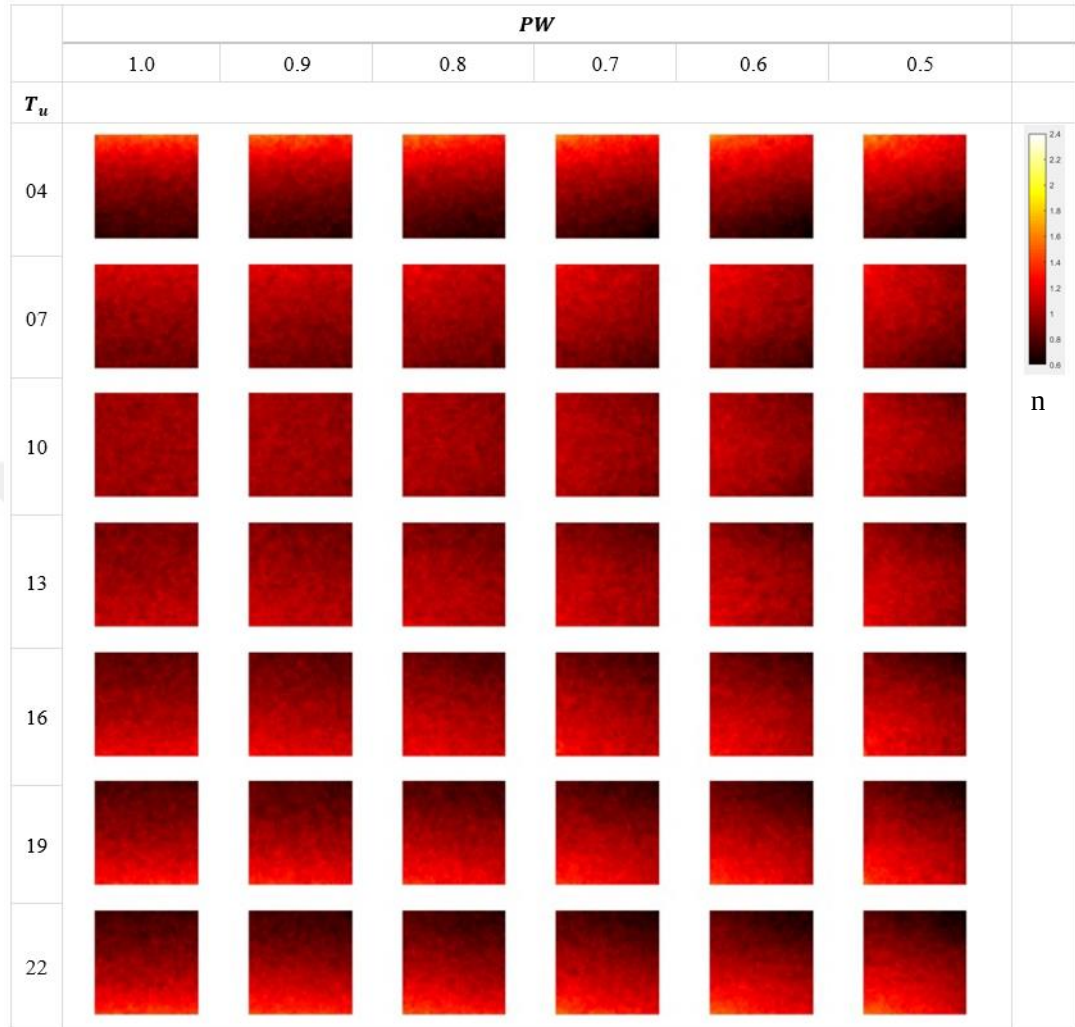
Şekil 4.4'te $V_x = 5,0$, $AR = 1,0$, $N = 204.800$ durumunda moleküler sayı yoğunluk grafikleri verilmiştir. Bu durumda, x yönünde bir hız bileşeni sisteme eklenmiş ve moleküler hareketlilik artmıştır. Bu hareketlilik, moleküler sayı yoğunluğu dağılımını daha belirgin şekilde asimetrik hale getirmiştir. PW'nin azalması ve T_u 'nun artışıyla birlikte yoğunluk gradyanı daha da belirginleşmiş ve alt ile üst duvarlardaki molekül birikimi kuvvetlenmiştir. Özellikle $V_x = 5,0$ durumu, sisteme güçlü bir hız bileşeni kazandırarak moleküllerin x yönünde düzenli hareketini sağlamış ve yoğunluk farklılıklarını keskinleştirmiştir. Bu grafikler MATLAB ile çizilmiştir.

Hem **Şekil 4.3** hem de **Şekil 4.4**'te, ilk sütunlar ($PW = 1.0$) basınç gradyanı olmayan durumu temsil etmektedir. Bu sütunlarda yalnızca üst duvar sıcaklıklarının ve duvar hızlarının etkileri gözlemlenmektedir. Üst duvar sıcaklığı azaldıkça moleküllerin soğuk duvarlara yakın bölgelerde yoğunlaştığı açıkça görülmektedir. Özellikle $T_u = 4$ durumunda, üst duvar alt duvara göre oldukça soğuk olduğu için bu bölgede molekül sayı yoğunluğu artmıştır. Ancak **Şekil 4.4**'te, üst duvarın hızının yüksek olduğu durumlarda, bu yüksek hızın etkisiyle üst duvar yakınındaki molekül yoğunluğu artış göstermektedir.

$T_u = 10$ durumunda, alt ve üst duvarların sıcaklıklarının eşit olması nedeniyle simetrik bir yoğunluk dağılımı gözlemlenmiştir. Basınç gradyanı olmadığında, yoğunluk dağılımı simetrik kalmakta, ancak PW'nin azalmasıyla asimetri ortaya çıkmaktadır.

Bu şekilde alt ve üst duvarın zıt yönde hareketine basınç gradyanının eklenmesi ile moleküller alt duvarın hareketinden dolayı $-x$ yönünde hareket etmeye çalışırken, basınç gradyanı da molekülleri $+x$ yönünde harekete zorlamaktadır. Bu sebeple, basınç

gradyanının artışı ile alt duvarın akış yukarı bölgesinde moleküler sayı yoğunluğu artmaktadır.

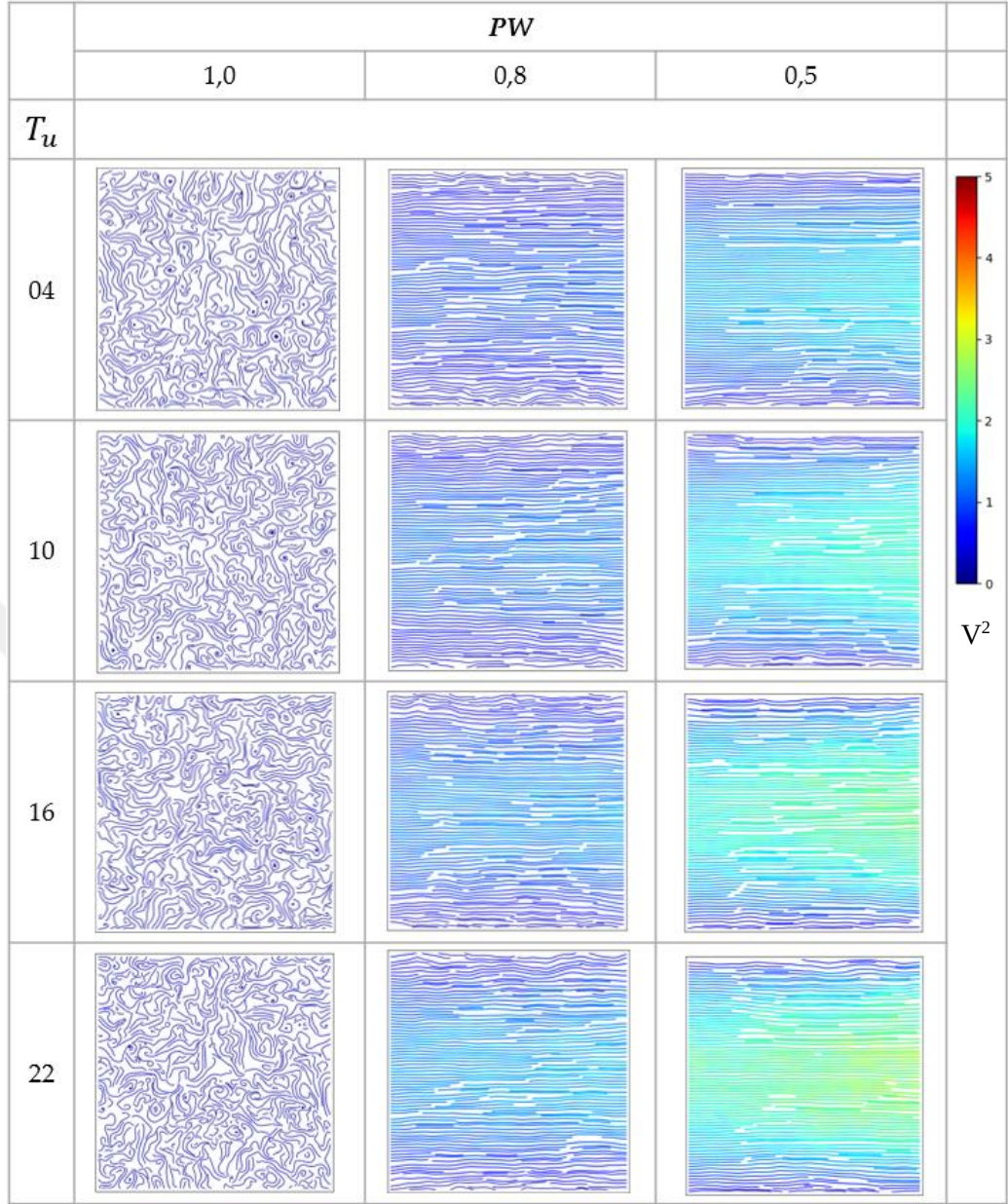


Şekil 4.4: $V_x = 5,0$, $AR=1,0$, $N=204.800$ durumunda molekül sayı yoğunluğu grafikleri.

4.2.2 Akış Çizgileri

Şekil 4.5, $V_x = 0$ ve $AR = 1,0$ durumda, farklı PW ve T_u değerleri altında nano-kanaldaki moleküler akışın davranışını görselleştiren akış çizgisi grafiklerini göstermektedir.

Renk değişimleri, moleküllerin hız karelerinin büyüklüklerini yansıtırken, çizgi kalınlıkları akışın büyüklüğüne ve yoğunluğuna işaret etmektedir. Daha kalın çizgiler, daha güçlü akış yönelimi ve yüksek hız bölgelerini ifade ederken, ince çizgiler düşük hızda veya enerji yoğunluğunda olan bölgeleri temsil etmektedir. Bu, akışın genel yönelimi ve hız dağılımının daha ayrıntılı bir görselleştirilmesini sağlamaktadır.



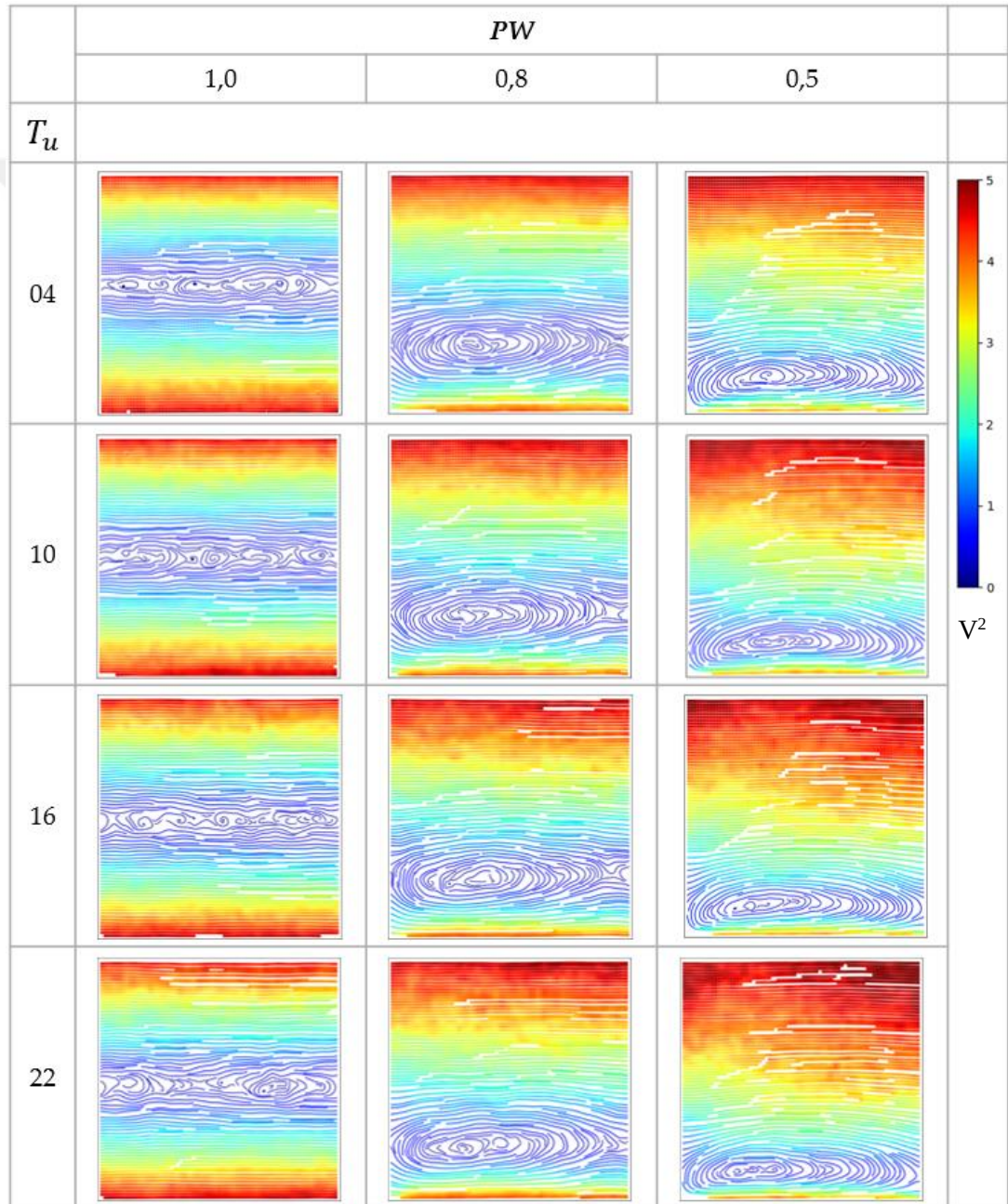
Şekil 4.5: $V_x = 0$, $AR=1,0$, $N=204.800$ durumunda akış çizgisi grafikleri.

Şekil 4.5 ve Şekil 4.6'da aynı renk skalası kullanılmıştır. Bu renk skalası, tüm simülasyonlardaki en büyük hız kare değeri referans alınarak belirlenmiş ve tüm hız değerleri bu maksimum değere göre normalize edilmiştir. Bu yaklaşım, farklı PW ve T_u kombinasyonlarının etkilerinin tutarlı bir şekilde karşılaştırılmasını sağlamaktadır.

PW 'nin azalmasıyla, akış çizgileri daha düzenli hale gelmekte ve moleküller basınç gradyanının etkisiyle belirgin bir yönetime sahip olmaktadır. $PW = 1,0$ durumunda basınç gradyanı olmadığı için moleküler hareketler oldukça düzensiz ve izotropik bir yapıya sahiptir. Ancak $PW = 0,8$ ve özellikle $PW = 0,5$ değerlerinde, basınç farkının artmasıyla moleküller x -yönüne yönelir ve akış daha düzenli bir hale gelir. Sıcaklık

arttıkça moleküler hareketlerin enerjisi artmakta ve bu durum akış profillerini önemli ölçüde etkilemektedir. PW ve T_u değerlerinin ortak etkisi hem akış çizgilerinde hem de bölgesel basınç dağılımlarında net bir şekilde görülmektedir. PW 'nin azalması, moleküllerin basınç gradyanı etkisiyle x -yönüne hizalanmasını sağlarken, T_u 'nun artışı moleküllerin kinetik enerjisini arttırır. Akış çizgisi grafikleri Python ile çizilmiştir.

Şekil 4.6, farklı PW ve T_u değerleri altında, $V_x = 5,0$ hızında duvar hareketinin olduğu bir durumda nano-kanal içerisindeki akış profillerini ve dinamiklerini göstermektedir.



Şekil 4.6: $V_x = 5,0$, $AR=1,0$, $N=204,800$ durumunda akış çizgisi grafikleri.

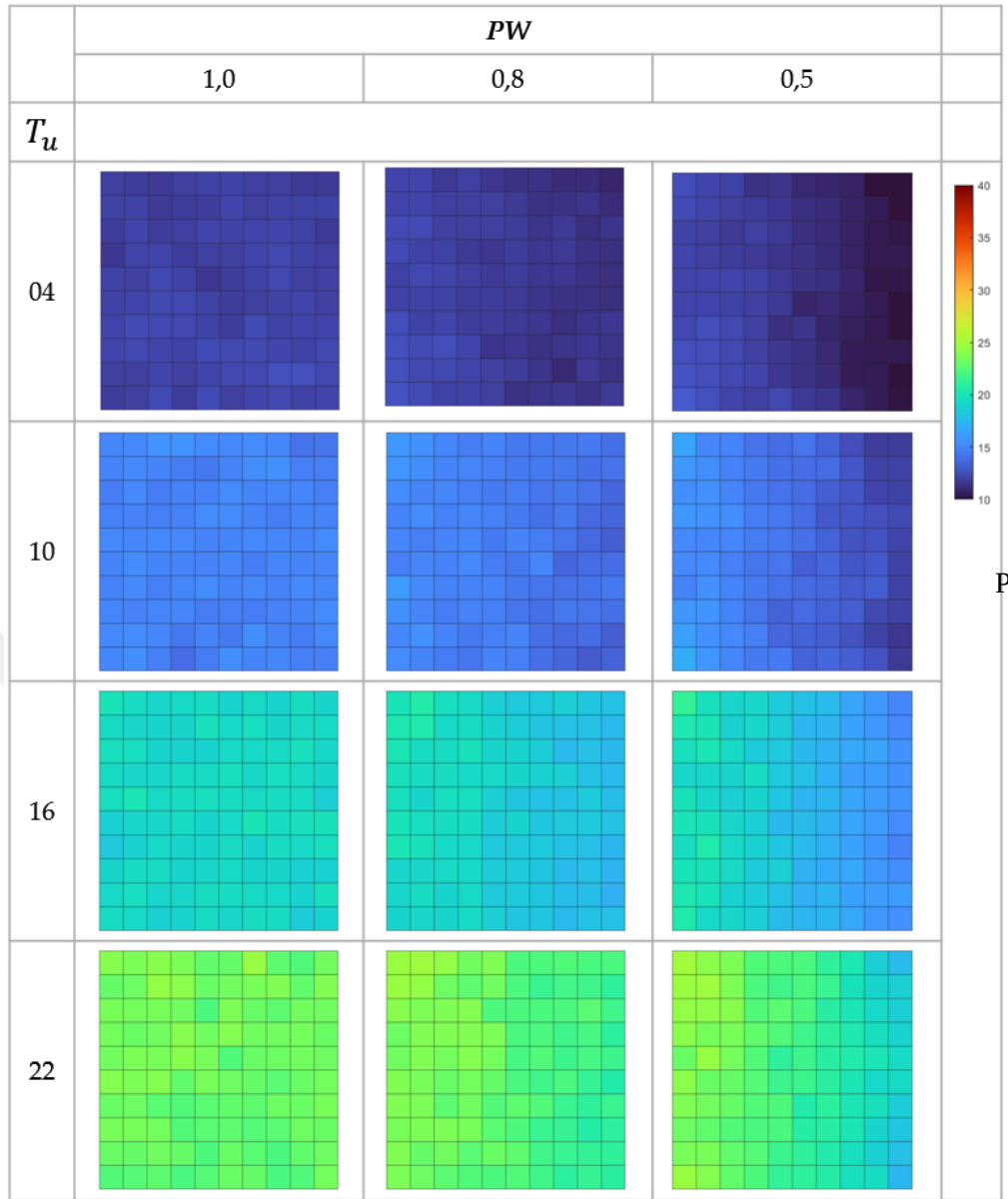
Basınç gradyanı arttıkça, renk haritasında mavi tonlardan kırmızı tonlara doğru bir geçiş gözlenmekte, bu da hızdaki artışı ve akışın x -yönünde belirginleştiğini göstermektedir. $PW = 0,5$ durumunda, akış tamamen x -yönünde hizalanmış ve çizgiler en kalın haline ulaşarak basınç gradyanının etkisini yansıtmaktadır.

Sıcaklık arttıkça (örneğin, $T_u = 22$), moleküllerin kinetik enerjisi artmakta ve bu durum hem renk haritasındaki kırmızı tonların yoğunlaşmasına hem de çizgilerin kalınlıklarının artmasına yol açmaktadır. Bu grafikler hem renk değişimleri hem de çizgi kalınlıkları ile akışın yönelimi, hızı ve enerji dağılımı hakkında detaylı bilgiler sunmaktadır.

Basınç gradyanı yükseldikçe, hızın sıfır olduğu bölgeler alt duvara doğru kayar. Bu kayma, üst duvardan alt duvara doğru artan enerji aktarımı ve x yönündeki moleküler hareketin baskın hale gelmesiyle ilişkilidir. Bu bölgelerde görülen dairesel örüntülerin aslında dairesel olmaması gerekmektedir. Hem MATLAB'de hem de Python'da kullanılan akış çizgileri (streamline veya contour plot) kütüphaneleri, özellikle düşük hız bölgelerinde veya çok küçük hız farklarının olduğu yerlerde, görsel hatalara neden olabilir. Bu hataları önlemek için düşük hızların filtrelenmesi gerekmektedir. Bu da kayıplara neden olacağı için tercih edilmemiştir.

4.2.3 Bölgesel Basınç Dağılımları

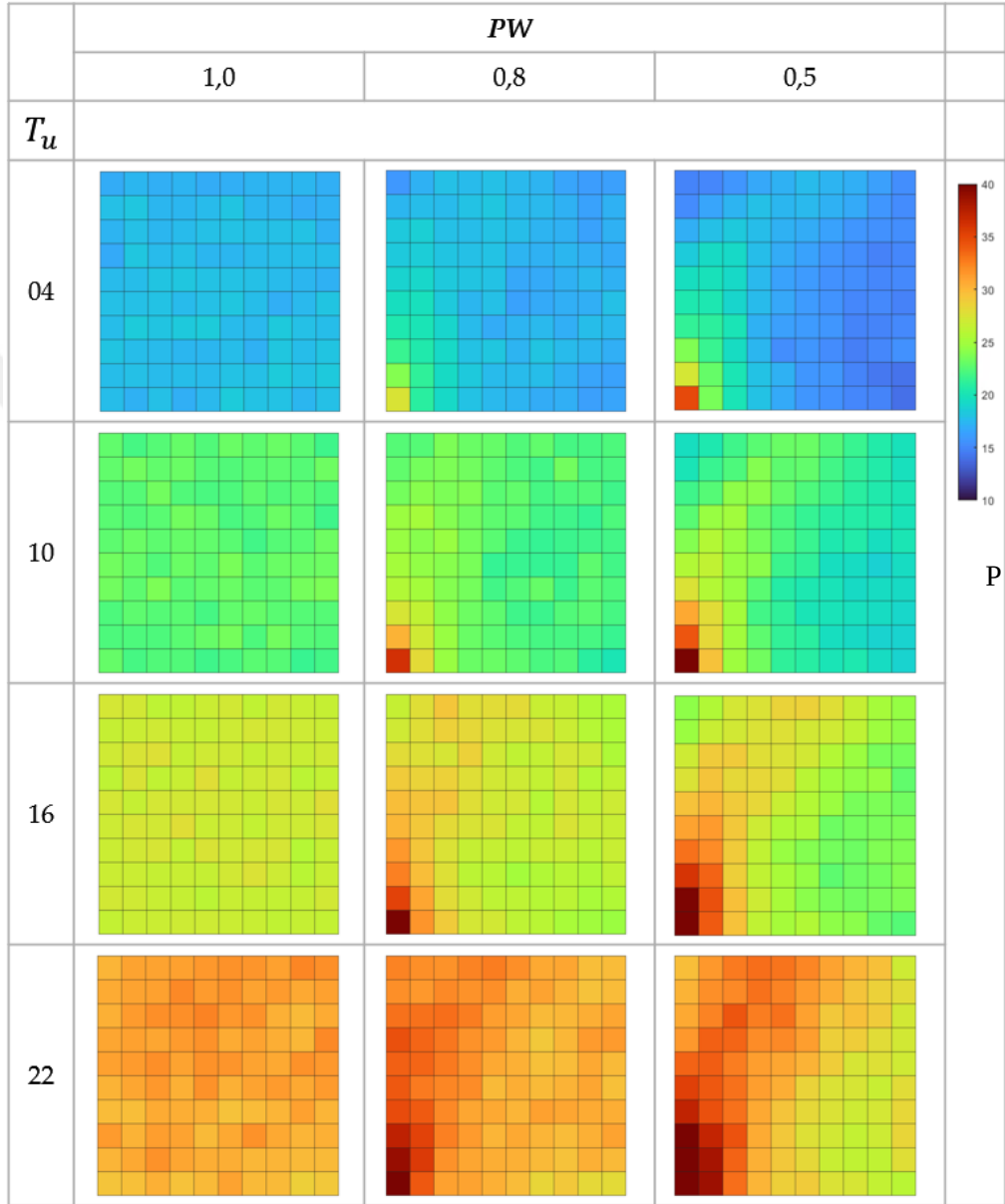
Bölgesel basınç dağılımları **Şekil 4.7**'de verilmiştir. Hesaplama alanı başlangıçta x ve y eksenleri boyunca 40×40 hücreye bölünmüştür ve her hücrede basınç değerleri, yoğunluk ve sıcaklık verilerinin çarpılmasıyla elde edilmiştir. Daha sonra, bu bölgesel basınç değerlerini daha sade ve karşılaştırılabilir bir şekilde görselleştirmek için hesaplama alanı 10×10 hücrelik bir grid yapısına indirgenmiştir. Bu indirgeme sırasında, her 4×4 hücrelik grup birleştirilerek yeni bir hücre oluşturulmuş ve bu hücrelerdeki basınç değerleri ortalamaları alınarak yeni basınç değerleri hesaplanmıştır. Bu işlem, basınç dağılımlarının daha anlaşılır bir şekilde sunulmasını ve genel akış yapısının etkilerinin net bir şekilde değerlendirilmesini sağlamıştır. **Şekil 4.7** ve **Şekil 4.8**'de kullanılan aynı renk skalası, farklı PW ve T_u kombinasyonlarının basınç üzerindeki etkilerinin görsel olarak karşılaştırılabilir olmasını kolaylaştırmıştır.



Şekil 4.7: $V_x = 0$, $AR=1,0$, $N=204.800$ durumunda bölgesel basınç değerleri.

Isı haritası ile ifade edilen grafikler bölgelerdeki basınç yoğunluğunu ifade etmektedir. Düşük basınç alanları mavi tonlarla, yüksek basınç alanları ise sarıdan kırmızıya doğru yoğunlaşan tonlarla gösterilmiştir. Basınç dağılımlarındaki farklar, akışın düzenliliği ve enerji yoğunluğuyla doğrudan ilişkilidir. $PW = 1,0$ durumunda basınç dağılımı oldukça homojen bir yapıya sahiptir ve fark edilebilir bir basınç gradyanı oluşmaz. $PW = 0,8$ durumunda basınç gradyanının devreye girmesiyle bölgeler arasında basınç farkı oluşur. Sistemin giriş ve çıkış bölgelerindeki basınç farkları belirginleşir. $PW = 0,5$, basınç gradyanı durumunda, bölgesel basınç değişimleri netleşir.

Düşük sıcaklık değerlerinde basınç farkları sınırlı düzeydedir. Duvar sıcaklığının artması sistemdeki ortalama basıncın artmasına neden olmuştur. Basınç gradyanının artması, akış yukarı ve akış aşağı basınç farklarının artmasına neden olmuştur (P_r). Renkler basıncı ifade etmektedir ve grafikler MATLAB’de çizilmiştir.

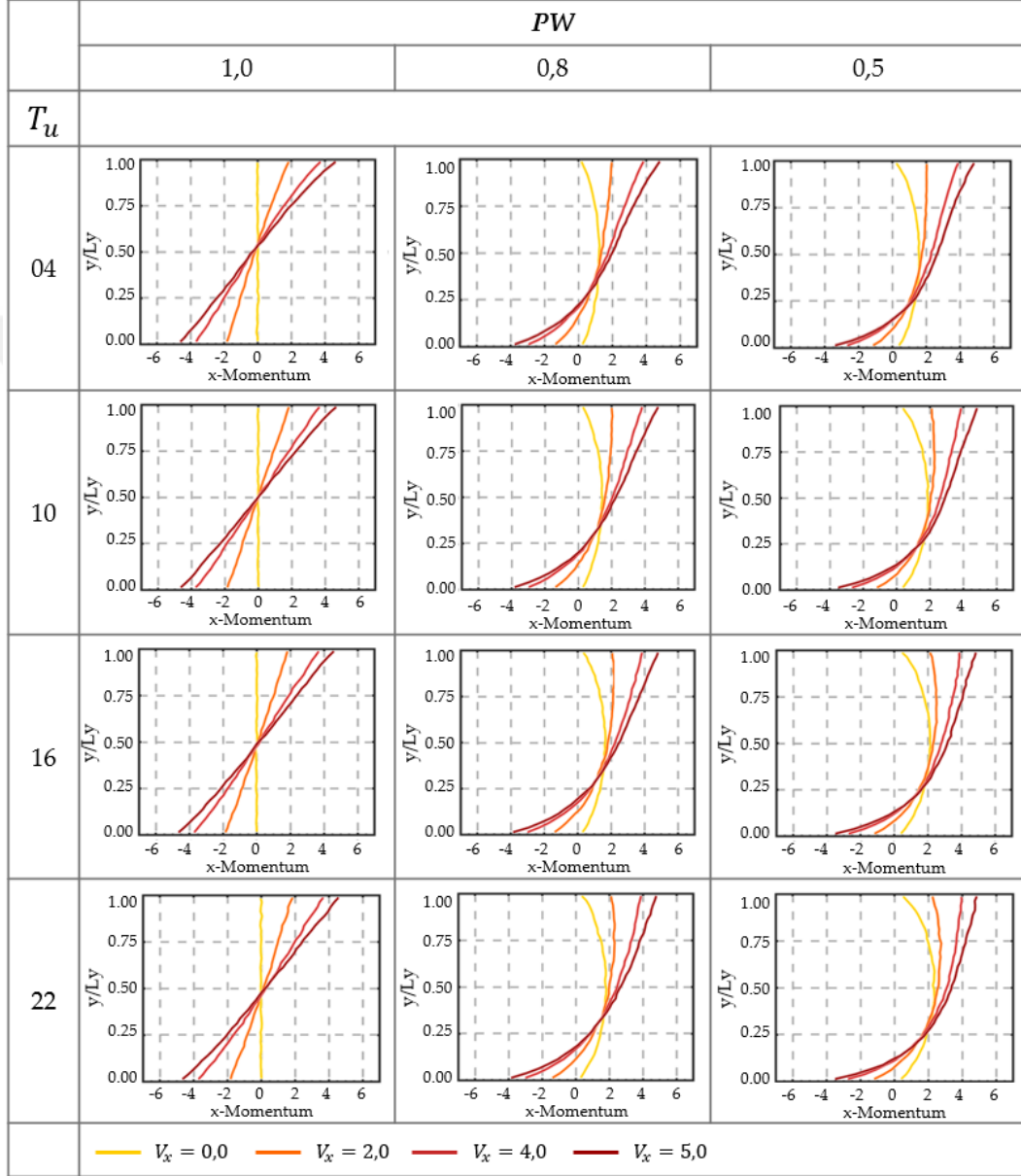


Şekil 4.8: $V_x = 5,0$, $AR=1,0$, $N=204.800$ durumunda bölgesel basınç değerleri.

PW azaldıkça, akış x -yönünde artarken, bölgesel basınç farkları da buna bağlı olarak artar. Üst ve alt duvarlar zıt yönlerde hareket ederken, x -yönünde mevcut olan basınç gradyanının da etkisi ile moleküller sol altta birikir. Bu sebeple bu bölgede basınç artışı gözlemlenmektedir.

4.2.4 Hız Profilleri

Bu bölümde, Veriseti 1 ($AR = 1,0$, $N = 204.800$) için PW ve T_u parametrelerinin hız profilleri üzerindeki etkileri incelenmiştir. Şekil 4.9'da $V_x = 0, 2,0, 4,0, 5,0$ hız değerleri altında elde edilen hız profilleri görselleştirilmiştir.



Şekil 4.9: $AR = 1,0$, $N = 204.800$ durumunda hız profilleri.

İlk sütun sıfır basınç gradyanı durumlarından oluşmaktadır. Bu ilk sütunda, Knudsen sayısının düşük olması ($Kn = 0,034$) ve $PW = 1,0$ ile periyodik sınır koşulu olması nedeniyle hız profilleri neredeyse doğrusaldır. Basınç gradyanı arttıkça, hız profillerindeki lineerlik bozulmaktadır. $T_u = 10$ durumunda üst ve alt duvarların aynı

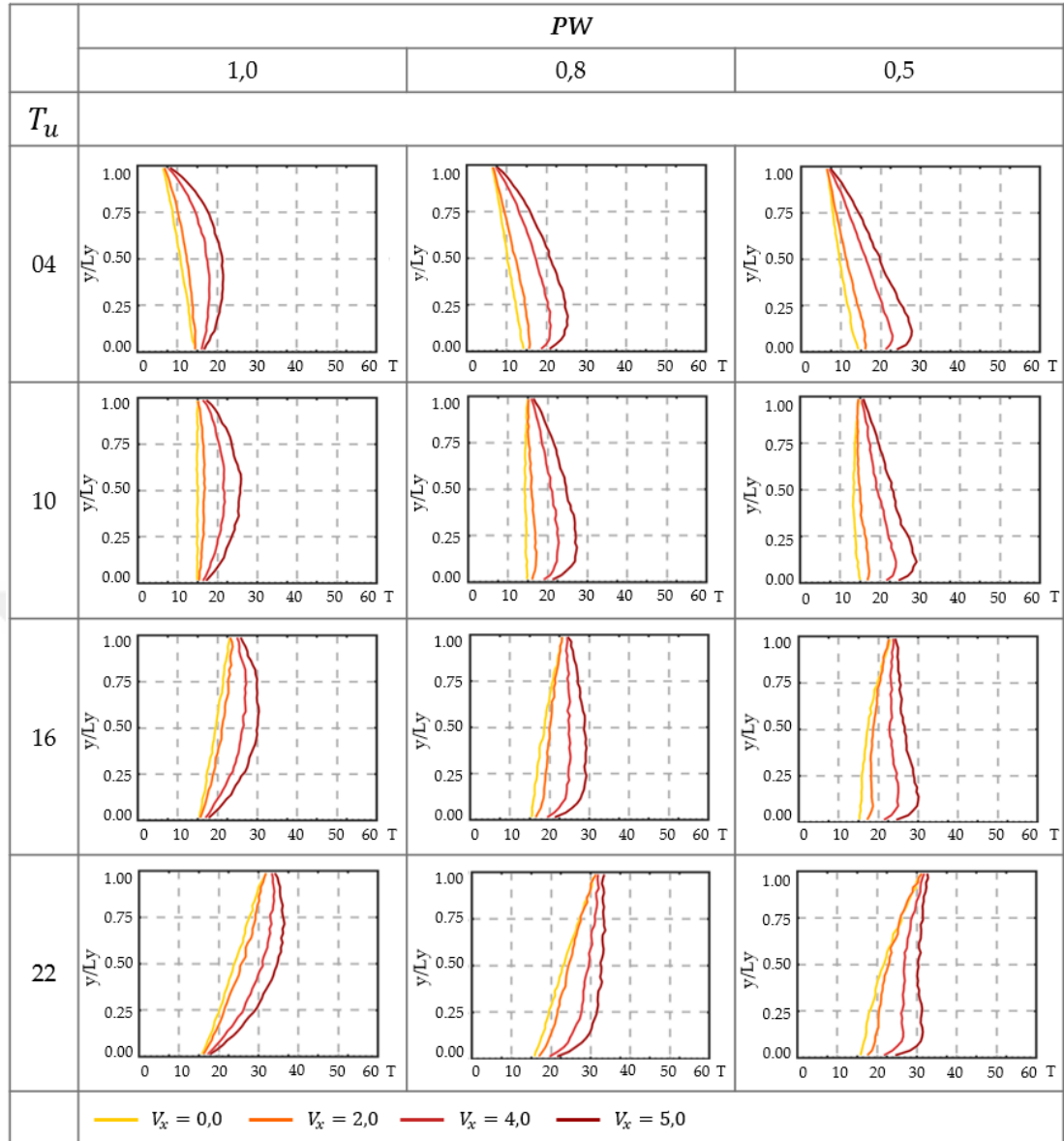
sıcaklığa sahip olmasından dolayı, ikinci satır-ilk sütun grafiği sadece duvar hızlarının geçerli olduğu bir durumu temsil etmektedir. Basınç gradyanının hız profilleri üzerindeki etkisi duvar sıcaklığından daha büyüktür. Bir basınç gradyanı mevcut olduğunda duvarlardaki hız kaymalarının simetrik olmadığını gözlemlenmiştir. Örneğin, $PW = 0,5$ olduğu durumda, hız kayması alt duvarda daha büyüktür. Duvar sıcaklıklarının hız kaymaları üzerindeki etkisi ise önemsiz görünmektedir.

4.2.5 Sıcaklık Profilleri

Bu bölümde, üst ve alt duvarların belirli hızlarla zıt yönlerde hareket etmesi durumunda sıcaklık profilleri incelenmektedir. Denklem 4.5 ve Denklem 4.6'dan hareketle, orta bölgede daha yüksek sıcaklıklar ve buna bağlı olarak daha düşük yoğunluk değerleri beklenmektedir. **Şekil 4.10'** da verilen sıcaklık profilleri, üst ve alt duvarların hareketinin sıcaklık dağılımına etkisini detaylı bir şekilde göstermektedir.

Şekil 4.10'da üst ve alt duvarlar belirtilen hızlarda zıt yönlerde hareket etmektedir. Bu nedenle, Denklem 3.5'e göre, orta bölgede daha yüksek sıcaklıklar beklenir. Sıcaklık profilinde, orta bölgedeki akış daha yavaş olduğu için parabolik bir davranış gözlenmektedir. Bu davranış, düşük Knudsen sayısı ($Kn = 0,034$) ile uyumlu olan analitik çözümle örtüşmektedir [41].

Basınç gradyanı arttıkça sıcaklık profilindeki tepe noktası y -ekseni boyunca düşer. Duvar hızlarının, duvarların yakınındaki hız profilinin davranışını güçlü bir şekilde belirlemektedir. Basınç gradyanının varlığı, Poiseuille akış teorisi tarafından öngörüldüğü üzere, merkez hattı çevresinde daha yüksek sıcaklık ve hız gradyanlarına neden olur. Duvar hızlarının sıcaklık profili üzerindeki etkisi, özellikle duvarlara yakın bölgelerde yoğunlaşırken, basınç gradyanının sistem genelindeki etkisi daha baskındır.



Şekil 4.10: AR = 1,0, N = 204.800 durumunda sıcaklık profilleri.

4.2.6 Parametrelerin Birleşik Etkisi

Bu bölümde, akış dinamikleri seçici geçirgen periyodik sınır koşulları altında incelenmiş ve sistemin basınç farklarına verdiği tepkiler detaylandırılmıştır. Simülasyon sonuçlarında, basınç gradyanlarının sistemin genel davranışı üzerindeki etkileri incelenmiş ve bu etkilerin çeşitli parametreler ile ilişkili olduğu gösterilmiştir. **Tablo 4.1'**de verilen parametre değerleri, **Tablo 4.2'**de sunulan veri setleri ile analiz edilerek tüm simülasyonlarda bu kombinasyonların etkileri incelenmiştir.

Simülasyonlarda, seçici geçirgen periyodik sınır koşulları altında sistemin farklı basınç farklarına verdiği tepkiler incelenmiştir. Sonuçlar, basınç gradyanlarının

yaklaşık değerler üzerinden beş farklı aralığa bölünebildiğini göstermiştir. **Tablo 4.3**, bu basınç gradyanı aralıklarını ve ilgili değerleri özetlemektedir. **Tablo 4.3**, sistemin çıkış ve giriş basıncı arasındaki fark temel alınarak belirlenen basınç gradyanı aralıklarını ve bu aralıkların isimlendirilmesini sunmaktadır.

Basınç gradyanları, $-dP/dx$ olarak ifade edilmiş ve her bir gradyan aralığı bir isimle tanımlanmıştır. Örneğin, $dPdx1$ aralığı, düşük basınç gradyanını temsil ederken, $dPdx5$ aralığı, daha yüksek basınç gradyanı etkisinin olduğunu ifade etmektedir.

Tablo 4.3: Basınç gradyanı aralıklarının isimlendirilmesi.

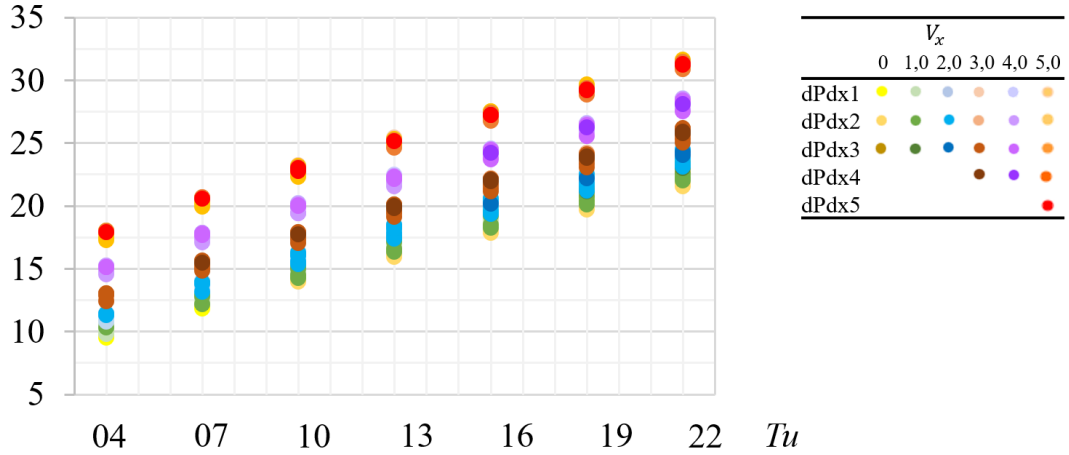
Basınç Gradyanı İsmi	Değer Aralığı
$dPdx1$	$-\frac{dP}{dx} < 0,0008$
$dPdx2$	$0,0020 > -\frac{dP}{dx} > 0,0008$
$dPdx3$	$0,0032 > -\frac{dP}{dx} > 0,0020$
$dPdx4$	$0,0043 > -\frac{dP}{dx} > 0,0032$
$dPdx5$	$-\frac{dP}{dx} > 0,0043$

Şekil 4.11'de $Kn = 0,034$ değerinde, hesaplama alanındaki ortalama basıncın T_u ile değişimi çeşitli duvar hızları (V_x) için gösterilmektedir. Bu grafiklerin oluşturulma süreci, tüm veri setleri için basınç gradyanı ve hesaplama alanındaki ortalama basınç değerlerinin hesaplanması ile gerçekleştirilmiştir. Her veri seti için, belirli dP/dx değerlerine bağlı olarak sistemin basınç gradyanı aralıkları ($dPdx1$, $dPdx2$, ..., $dPdx5$) belirlenmiş ve aynı zamanda hesaplama alanındaki tüm hücrelerin ortalama basınçları hesaplanmıştır. Bu ortalama basınç değerleri, hücrelerdeki moleküler yoğunluk ve sıcaklık bilgileri kullanılarak elde edilmiştir.

Her bir T_u ve V_x kombinasyonu için, hesaplama alanındaki ortalama basınç değerleri basınç gradyanı aralıklarına göre gruplanmış ve grafikler bu gruplandırma esas alınarak oluşturulmuştur. Grafiklerde, yatay eksen T_u değerlerini, dikey eksen ise hesaplanan ortalama basınçları temsil etmektedir. Farklı basınç gradyanı aralıkları

($dPdx1$, $dPdx2$, ..., $dPdx5$) renklerle, V_x duvar hızları ise farklı tonlarla ifade edilmiştir. Örneğin, düşük V_x değerleri açık tonlarla, yüksek V_x değerleri ise daha koyu renklerle görselleştirilmiştir. Bu süreçte, **Tablo 4.2**'de verilen tüm veri setleri kullanılmış ve her veri seti için bu analiz tekrarlanmıştır. Grafikler, sıcaklık arttıkça ortalama basıncın arttığını, ancak bu artışın dP/dx ve V_x parametrelerine bağlı olarak değişiklik gösterdiğini ortaya koymaktadır.

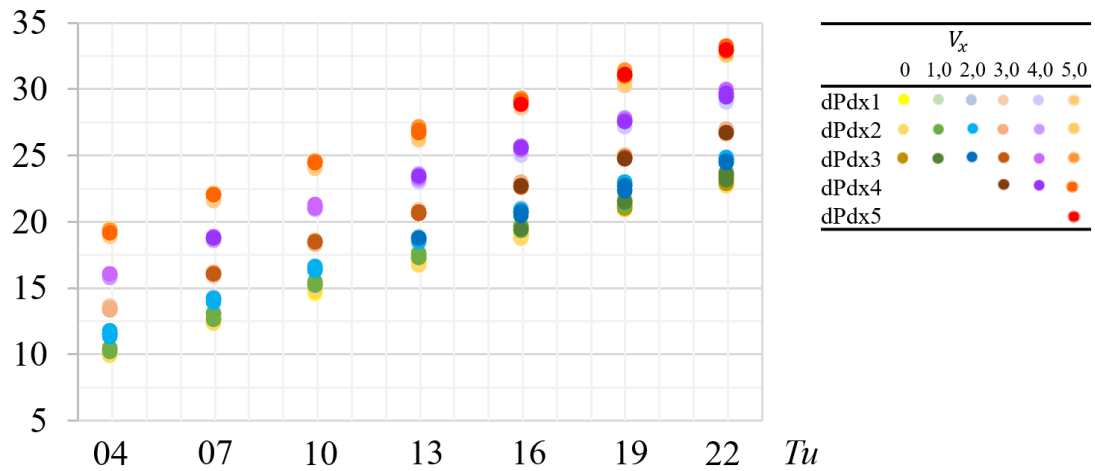
Ortalama Basınc



Şekil 4.11: $Kn = 0,034$ için T_u , V_x ve dP/dx kombinasyonlarına bağlı olarak hesaplama alanındaki ortalama basınç değerleri.

Şekil 4.12'de $Kn = 0,069$ değerinde, hesaplama alanındaki ortalama basıncın T_u ile değişimi çeşitli duvar hızları için gösterilmektedir.

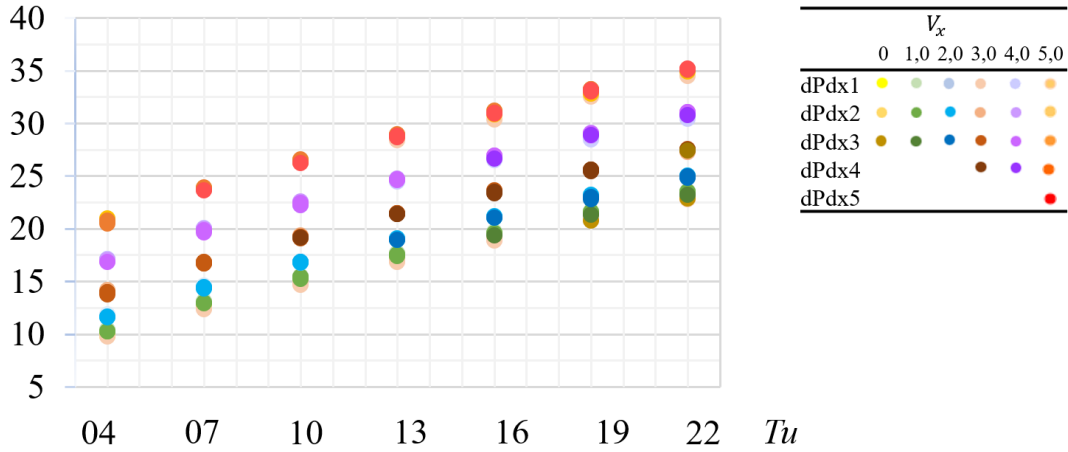
Ortalama Basınc



Şekil 4.12: $Kn = 0,069$ için T_u , V_x ve dP/dx kombinasyonlarına bağlı olarak hesaplama alanındaki ortalama basınç değerleri.

Şekil 4.13'te $Kn = 0,137$ değerinde, hesaplama alanındaki ortalama basıncın T_u ile değişimi çeşitli duvar hızları için gösterilmektedir. Grafik, bu parametrelerin ortalama basınç üzerindeki etkilerini görselleştirmektedir.

Ortalama Basınç



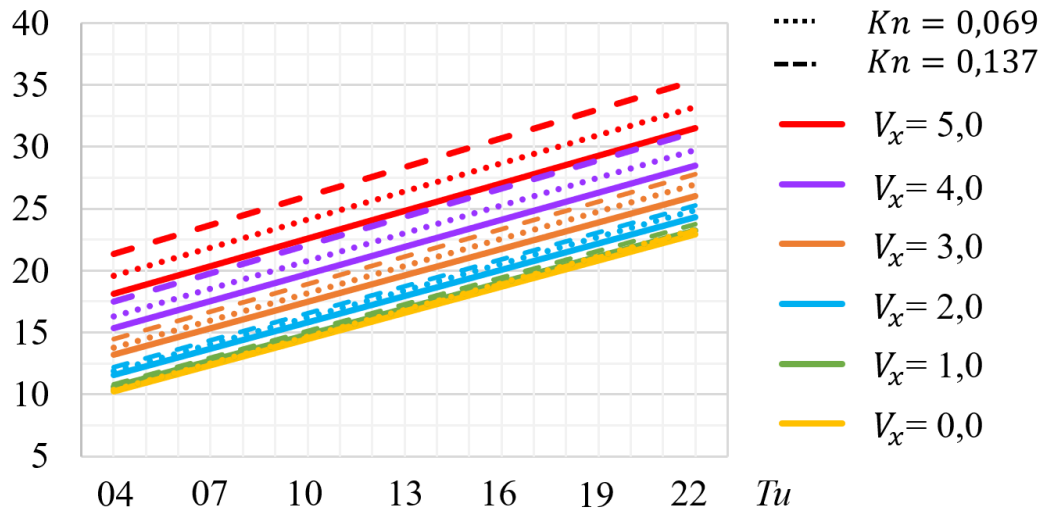
Şekil 4.13: $Kn = 0,137$ için T_u , V_x ve dP/dx kombinasyonlarına bağlı olarak hesaplama alanındaki ortalama basınç değerleri.

Bu sonuçların Denklem 4.6 ile uyumlu olduğu görülmektedir. Hesaplama alanındaki ortalama basınç, T_u ile doğrusal olarak artış göstermektedir. Üst duvar sıcaklığı, tüm bölgedeki ortalama sıcaklığı etkileyerek moleküllerin kinetik enerjisini artırmakta ve bu durum basınç artışına neden olmaktadır. Bunun yanı sıra, Couette akışındaki duvar hızları, sisteme ek enerji sağlayarak basınç üzerinde doğrudan bir etkiye sahiptir. Daha hızlı hareket eden duvarlar, sisteme daha fazla enerji aktararak basınç artışını hızlandırmaktadır.

Şekil 4.14'te, basınç ve üst duvar sıcaklığı arasındaki ilişki, farklı Knudsen sayıları ve duvar hızları dikkate alınarak gösterilmektedir. Önceki grafiklerdeki veriler doğrusal eğri uydurması yoluyla analiz edilmiş ve basınç gradyanının bu ilişkiyi nasıl etkilediği incelenmiştir. Şekilde görüldüğü gibi, Knudsen sayısı ve duvar hızları arttıkça, ortalama basınç değerleri de artış göstermektedir.

Bu doğrusal ilişki, T_u arttıkça ortalama basıncın düzenli bir şekilde yükselmesiyle kendini göstermektedir. Daha düşük V_x değerlerinde ($V_x = 0, 1, 2$), T_u 'nun artışı daha yavaş ve düzenli bir basınç artışına yol açarken, daha yüksek V_x değerlerinde ($V_x = 4, 5$) bu artış daha keskin hale gelmektedir. Bu durum, duvar hızlarının sisteme sağladığı kinetik enerjinin basınç üzerindeki etkisini ortaya koymaktadır.

Ortalama Basınç



Şekil 4.14: Çeşitli Kn sayıları için hesaplama alanındaki ortalama basınç.

Knudsen sayısının artışı, basınç eğrilerinin eğimini değiştirmekte ve daha yüksek Kn değerlerinde yüzey sıcaklıklarına bağlı basınç artışını daha belirgin hale getirmektedir.

Bu grafik, farklı Kn , V_x , ve T_u kombinasyonlarının birleşik etkilerini detaylı bir şekilde göstererek, sistemin akış dinamiklerini anlamak için kapsamlı bir çerçeve sunmaktadır.

5. ŞOK TÜPÜ ANALİZLERİNİN MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYONU İLE İNCELENMESİ

Gaz dinamiğinde şok tüpü, şok dalgalarını analiz etmek ve bu dalgaların etkilerini anlamak amacıyla kullanılan önemli bir araçtır. Şok dalgaları, bir ortam boyunca yayılarak basınç, sıcaklık ve yoğunluk gibi termodinamik özelliklerde ani değişimlere neden olan şiddetli bozulmalar olarak tanımlanmaktadır [92]–[94]. Bu dalgalar, aerodinamik, havacılık ve yanma araştırmaları gibi çeşitli bilimsel ve mühendislik disiplinlerinde önemli bir yere sahiptir. Şok dalgalarının doğasını anlamak, bu alanlardaki teknolojik ilerlemeler için kritik bir gereklilik olarak karşımıza çıkmaktadır [95].

Şok tüpünün temel tasarımı, uzun ve içi boş bir tüpün, ince bir zar veya diyafram ile iki bölmeye ayrılması prensibine dayanmaktadır. Bu bölmelerden biri, genellikle sürücü bölmesi olarak adlandırılan taraf, yüksek basınçlı gaz ile doldurulurken diğer taraf, düşük basınçlı gaz veya vakum içermektedir. Deney başladığında, diyaframın kaldırılmasıyla yüksek basınçlı gaz düşük basınçlı bölgeye hızla yayılır ve bir şok dalgası oluşur. Bu süreç hem teorik hem de deneysel çalışmalarla kapsamlı bir şekilde incelenmiş ve modellenmiştir [96], [97].

Şok tüpleri, yalnızca şok dalgalarının oluşumu ve yayılmasını değil, aynı zamanda bu dalgaların engellerle etkileşimi ve malzemeler üzerindeki etkilerini de incelemek için kullanılmaktadır. Özellikle yüksek sıcaklık, basınç ve hızların simüle edilebildiği bu sistemler, gazların aşırı koşullar altındaki davranışlarını anlamak için büyük bir olanak sağlamaktadır. Bu bağlamda şok tüpleri, havacılık ve uzay mühendisliği, yanma araştırmaları ve malzeme bilimi gibi çeşitli alanlardaki bilimsel ve teknolojik ilerlemelere katkıda bulunmaktadır [98]–[102].

MD simülasyonları, şok tüpü dinamiklerinin moleküler düzeyde incelenmesinde önemli bir araç olup, şok dalgalarının davranışlarını detaylı bir şekilde incelemek ve bu süreçlerin altında yatan karmaşık fiziksel mekanizmaları anlamak için kullanılmaktadır [94]. Geleneksel deneysel yöntemlerin tamamlayıcısı olan bu simülasyonlar, yüksek doğrulukla elde edilen sonuçlarla şok dalgası dinamiklerine dair kritik bilgiler sunmaktadır [103]. Özellikle, moleküler etkileşimlerin ayrıntılı olarak incelenmesine olanak tanıyan bu yöntemler hem teorik modellemeyi

geliştirmek hem de deneysel verileri desteklemek açısından önem taşımaktadır. MD simülasyonlarının kullanımı, yalnızca şok dalgasının fiziksel özelliklerini anlamakla kalmaz, aynı zamanda bu dalgaların malzemelerle nasıl etkileştiğini de anlamamızı sağlar. Bu bağlamda, şok dalgalarının enerji transferi, kimyasal reaksiyonları başlatma potansiyeli ve malzeme yüzeylerine olan etkileri gibi konulara dair detaylı bilgiler elde edilmektedir [104]. Örneğin, bir şok dalgasının yüksek sıcaklık ve basınç altında gaz ve katı malzemelerdeki etkileri, özellikle havacılık ve yanma uygulamaları için hayati öneme sahiptir [101], [102], [105]. Malzemeler üzerindeki bu etkilerin derinlemesine incelenmesi hem deneysel şok tüpü çalışmaları hem de MD simülasyonları ile gerçekleştirilir. Şok tüpleri, malzemelerin aşırı koşullar altında gerçekçi test edilmesini sağlarken, MD simülasyonları bu süreçlerin moleküler düzeydeki mekanizmalarını anlamamıza olanak tanır. Bu tür çalışmalar, hem mevcut malzeme sistemlerinin performansını artırmak hem de yeni nesil malzeme tasarımı için değerli bilgiler sunmaktadır.

Bu bölümde gerçekleştirilen çalışmalar, şok tüplerinde şok dalgalarının dinamiklerini anlamaya yönelik teorik ve MD simülasyonlarını kapsamaktadır. Çalışmada, şok dalgalarının gazlar üzerindeki etkileri analiz edilmiştir. Özellikle saf helyum (He), saf argon (Ar) ve bu gazların karışımları için şok dalgalarının yoğunluk, hız ve enerji dağılımları detaylı bir şekilde incelenmiştir. MD simülasyonlarından elde edilen veriler, teorik sonuçlarla karşılaştırılmış ve sonuçların uyumu değerlendirilmiştir. Çalışma, şok dalgalarının gazların moleküler düzeydeki dinamiklerini anlamak için simülasyon tabanlı bir yaklaşımla ele alınmıştır.

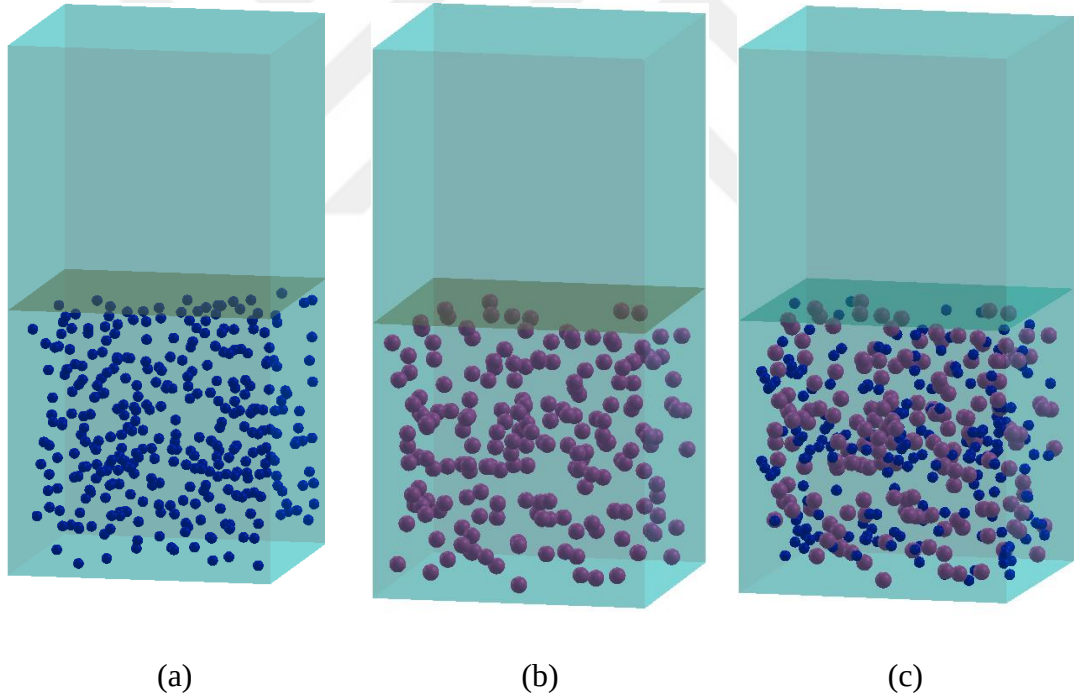
5.1 Simülasyon Yöntemleri

Çok hücreli MD simülasyonu yöntemi, şok tüplerinde gazların dinamik davranışlarını analiz etmek için güçlü bir araçtır. Bu yöntemle yapılan bir çalışmada, monatomik gazlar için ses hızları başarılı bir şekilde ölçülmüş ve ölçülen değerlerin teorik sonuçlarla tutarlı olduğu görülmüştür [68].

Bu bölümde, şok tüplerinde gazların dinamik davranışlarını analiz etmek için daha önce detaylandırılan MD yöntemleri kullanılarak gerçekleştirilen iki aşamalı simülasyon süreci açıklanmıştır. Simülasyonlar, helyum ve argon gibi farklı fiziksel özelliklere sahip gazların şok dalgası dinamiklerini anlamaya yönelik olarak

tasarlanmıştır. Özellikle saf monatomik moleküller ve bunların karışımları üzerinde yapılan şok tüpü simülasyonları, problemin fiziğini anlamak ve ses hızını doğru bir şekilde tahmin etmek için önemli veriler sunmaktadır.

Bu çalışmada yapılan simülasyonların başlangıç durumları, **Şekil 5.1**'de verilmektedir. **Şekil 5.1.a**'da simülasyonlarda 1. gaz olarak kullanılan He gazı, **Şekil 5.1.b**'de 2. gaz olarak kullanılan Ar gazı ve **Şekil 5.1.c**'de ise sisteme aynı oranlarda eklenmiş He ve Ar karışımı temsil edilmiştir. Bu başlangıç durumları, helyumun düşük moleküler kütlesi ve argonun yüksek moleküler kütlesi gibi fiziksel özelliklerin, şok dalgası dinamiklerine etkisini karşılaştırmak amacıyla seçilmiştir. Burada hesaplama alanının bir yarısı gaz ile doldurulurken, diğer yarısı boş bırakılmıştır ve arada hayali bir duvar bulunmaktadır. Bu duvar birden kaldırılır ve şok yapısı gelişir. Bu süreç, şok dalgasının gaz molekülleri arasında enerjiyi nasıl dağıttığını gözlemlemek için kritik öneme sahiptir.



Şekil 5.1: Şok tüpü başlangıç durumlarının temsili gösterimi, (a) Monatomik He gazı, (b) Monatomik Ar gazı, (c) Monatomik karışım durumu.

Uç duvarlara yakın bölgelerde molekül sayı yoğunluğunda osilasyonlar (salınımlar) gözlenmiştir. Bu osilasyonlar, sistemin başlangıçtaki dengesizliğinin bir sonucu olarak ortaya çıkar ve zamanla azalır. Bu, sistemin enerjisinin dengelendiğini göstermektedir.

Tüm simülasyonlarda boyutsuz çalışılmıştır. Simülasyonlarda He'un çapı $d = 1$, Ar'un çapı ise $d = 1,67$ olarak boyutsuzlaştırılmış ve hesaplamalarda $s = 3,5$ olarak alınmıştır. Boyutsuzlaştırma sayesinde farklı moleküler özelliklere sahip gazların dinamik davranışları, fiziksel ölçüm birimlerinden bağımsız olarak ortak bir çerçevede incelenmiştir. Simülasyonlar iki aşamada yürütülmüştür.

- **1. Aşama:** Simülasyon Ortamına Moleküllerin İlk Yerleşimi

İlk adımda, toplam 204.800 molekül, $280d \times 280d \times 112d$ (x, y, z) boyutlarında bir hesaplama bölgesine yerleştirilmiştir. Bu aşamada, moleküller başlangıçta homojen bir şekilde yerleştirilmiş ve çarpışma süreci başlatılmıştır. Simülasyon, molekül başına çarpışma (cpp) 10'a ulaşana kadar çalıştırılmıştır. Karışım modelinde ise karışımın homojen olması için 100 cpp kullanılmıştır. Bu aşamada, tüm çarpışmalar düzgün yansıma modeli ile gerçekleştirilmiştir; yani moleküller herhangi bir enerji kaybı olmadan elastik bir şekilde yansımıştır. İlk simülasyondan elde edilen sonuçlar, sonraki aşama için başlangıç verisi olarak kullanılmıştır.

- **2. Aşama:** Hesaplama Alanının Genişletilmesi ve Şok Yapısının İncelenmesi

İkinci adımda, hesaplama alanı, ortadaki hayali duvarın kaldırılmasıyla genişletilmiş ve bölge boyutları iki katına çıkarılmıştır. Bu işlem, gazların serbestçe yayılmasına izin vererek şok yapısının doğal bir şekilde oluşmasına olanak sağlamıştır. Şok dalgasının yayılım süreci bu genişletilmiş alanda daha net bir şekilde gözlemlenmiştir.

Bu aşamada da düzgün yansıma modeli kullanılmaya devam edilmiş ve simülasyon cpp 2000'e ulaşana kadar yürütülmüştür.

Simülasyon verilerinden ses hızının çıkarımı, problemin fiziksel prensipleri ile uyumlu olduğu sürece mümkündür. Bu çalışmada, simülasyondan elde edilen ses hızı, teorik olarak Denklem 5.1 ile ifade edilen değere karşılık gelmektedir:

$$a = \sqrt{\gamma RT} = \sqrt{\frac{\gamma}{2}} \sqrt{\frac{2kT}{m}} \quad (5.1)$$

Bu denklemde, a ses hızını ifade ederken, γ gazın adyabatik katsayısını temsil eder ve monatomik gazlar için genellikle $\gamma=5/3$ olarak alınır. R gaz sabiti olup, termodinamik

özelliklerle ilişkilidir. T gazın mutlak sıcaklığını, k Boltzmann sabitini ve m ise gazın moleküler kütesini ifade etmektedir.

5.2 Simülasyon Sonuçları ve Analizi

Simülasyonlar sırasında elde edilen veriler, şok dalgalarının gazların dinamik davranışları üzerindeki etkilerini anlamak için analiz edilmiştir. Bu analizler, He, Ar ve bu gazların karışımları üzerinde yoğunlaşarak yoğunluk, hız ve enerji dağılımlarının zamana bağlı değişimlerini incelemektedir.

Bu bölümde, şok dalgalarının gazların moleküler sayı yoğunluğu üzerindeki etkileri grafiksel olarak sunulmuş ve maksimum noktalar arasındaki zaman farklarından ses hızı hesaplamaları yapılmıştır. Bu hesaplamalar, simülasyon sonuçlarının teorik değerlerle uyumlu olduğunu ortaya koyarak, şok dalgası dinamiklerinin fiziksel modellerle tutarlılığını göstermektedir.

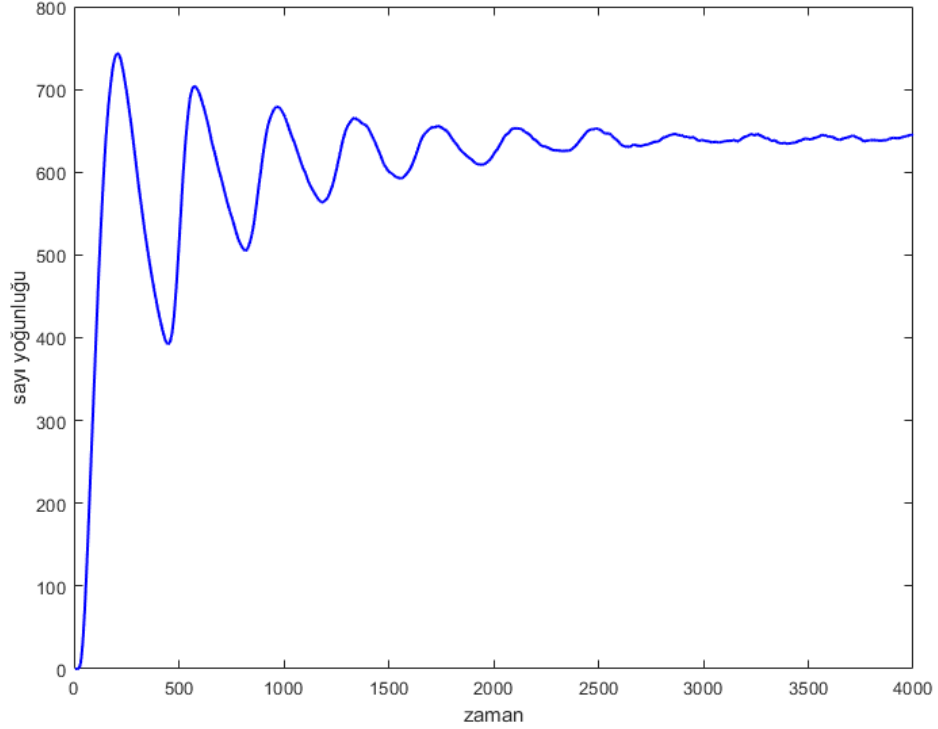
5.2.1 Saf Gazların Analizi

Bu bölümde, saf He ve saf Ar gazları için gerçekleştirilen şok tüpü simülasyonları ele alınmaktadır. Her bir gaz için yoğunluk dalgalanmaları, enerji dağılımları ve ses hızı gibi parametreler incelenmiş ve bu verilerin teorik modellerle uyumu değerlendirilmiştir.

5.2.1.1 Helyum (He) Simülasyonu

Şekil 5.2, He gazı için gerçekleştirilen şok tüpü simülasyonunda, hesaplama alanının üst kısmından seçilen bir bölgedeki moleküler sayı yoğunluğunun zamana bağlı değişimini göstermektedir. Bu grafik, şok dalgasının etkilerini yerel olarak analiz etmek ve şok dalgası oluşumu ile gazın yoğunluk dalgalanmalarının (osilasyonlarının) zaman içinde nasıl dengelendiğini incelemek açısından önemli bilgiler sunmaktadır. Grafikte, başlangıçta ani bir yoğunluk artışı gözlemlenmekte, bunu takiben yoğunluk değerlerinde dalgalanmalar görülmektedir. Bu osilasyonların genliği zamanla azalmakta ve sistem, kararlı bir yoğunluk değerine yaklaşmaktadır. Bu durum, şok dalgasının enerjisinin gaz molekülleri arasında dengeli bir şekilde dağıldığını ve sistemin kararlı bir rejime geçtiğini göstermektedir.

Simülasyon sırasında, hesaplama alanının seçilen bölgesindeki yoğunluk değerleri belirli zaman adımlarında kaydedilmiş ve elde edilen veriler grafik üzerinde görselleştirilmiştir.



Şekil 5.2: Şok tüpünde He gazının molekül sayı yoğunluğunun zamanla değişimi.

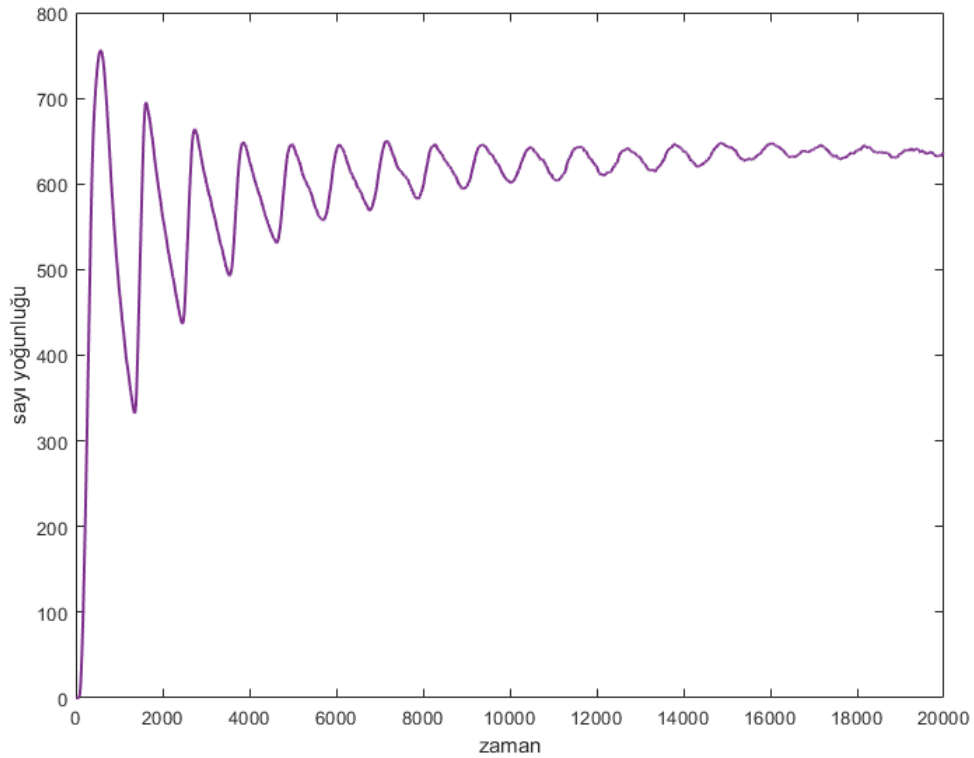
Simülasyonlardan elde edilen yoğunluk grafikleri incelendiğinde, eğriler üzerindeki maksimum noktalar dalganın yayılımı hakkında önemli bilgiler sağlar. İlk iki maksimum nokta, dalgaların tam olarak ses hızıyla yayılmadığı bir geçiş dönemine ait olduğu için analizde kullanılmaz. Bunun yerine, yoğunluk grafiğinin daha sonraki maksimum noktaları arasında geçen zaman aralıkları ses hızı hesaplaması için kullanılır. Bu yaklaşım, dalganın şok sonrası kararlı bir rejimdeki hareketini doğru bir şekilde temsil eder. Yoğunluk grafiğindeki herhangi iki maksimum nokta arasındaki zaman farkı ($t_2 - t_1$), dalganın bu süre zarfında kat ettiği mesafeyle ilişkilidir. Örneğin, grafikteki son iki maksimum nokta dikkate alınarak ses hızı şu şekilde hesaplanmıştır:

$$a_{simülasyon} = \frac{1118d}{(t_2 - t_1)} = \frac{1118}{(2165 - 1779)} \cong 2,896 \quad (5.2)$$

Bu simülasyon sonucu, teorik ses hızı değeriyle ($a_{teorik} = 2,887$) karşılaştırıldığında oldukça uyumlu bir sonuç vermektedir. Simülasyon ile teorik değer arasındaki hata oranı yalnızca %0,3'tür ve bu durum, simülasyon yönteminin fiziksel modellerle yüksek doğrulukta uyumlu olduğunu göstermektedir.

5.2.1.2 Argon (Ar) Simülasyonu

Şekil 5.3'te verilen yoğunluk grafiği, Ar gazının zamanla değişen molekül sayısı yoğunluğunu göstermektedir.



Şekil 5.3: Şok tüpünde Ar gazının molekül sayısı yoğunluğunun zamanla değişimi

Bu grafikteki son iki maksimum nokta, simülasyon sonucunda hesaplanan ses hızı ($a_{simülasyon}$) ile teorik ses hızı (a_{teorik}) arasındaki ilişkiyi analiz etmek için kullanılmıştır. Ar gazının yoğunluk grafiğinin son iki maksimum noktası arasındaki zaman farkı kullanılarak ses hızı şu şekilde hesaplanmıştır:

$$a_{simülasyon} = \frac{1116,7d}{(t_2 - t_1)} = \frac{1116,7}{(16638 - 15518)} \cong 0,928 \quad (5.3)$$

Teorik değeri ise $a_{teorik} = 0,914$ olarak hesaplanmıştır. Hata oranı, %1,5 gibi düşük bir seviyededir. Bu, simülasyon sonuçlarının teorik modelle tutarlı olduğunu ve Ar gazının şok dalgası dinamiklerinin doğru bir şekilde simüle edildiğini göstermektedir. Simülasyondan elde edilen bu sonuçlar, şok dalgalarının gazların fiziksel özelliklerine etkilerini anlamak için kullanılan yöntemlerin güvenilirliğini ortaya koymaktadır.

Gazların ideal gaz davranışından sapmaları, viskozite ve ısı transferi gibi etkilerden kaynaklanan nonlinear davranışlarla ilişkilidir [106]–[109]. Argon gazında moleküller arası mesafenin çok düşük olması, dalga biçiminin sinüsoidal yapısını bozarak sıkışma ve genleşme eğrilerinde asimetrik bir davranışın ortaya çıkmasına yol açar. Moleküler dinamik simülasyonları ise bu nonlinear etkilerin detaylı bir şekilde incelenmesini sağlayarak, bu tür davranışların daha iyi anlaşılmasında önemli bir avantaj sunar.

5.2.2 Gaz Karışımlarının Analizi

Çeşitli akış koşulları altında şok dalgalarının yapısı çeşitli araştırmalara konu olmuştur. Özellikle gaz karışımları, şok dalgalarının dinamiğini anlamada kritik bir yere sahiptir. Karışım modelleri, farklı türde gazların moleküler özelliklerini birleştirerek şok dalgalarının yayılmasını ve ses hızını tahmin etmeye yönelik yaklaşımlar sunmaktadır [110]. Bu bağlamda, bir gaz karışımı içerisindeki türlerin ortalama moleküler kütlesi (m_{mix}) üzerinden ses hızı, Denklem 5.4’te ifade edilmiştir:

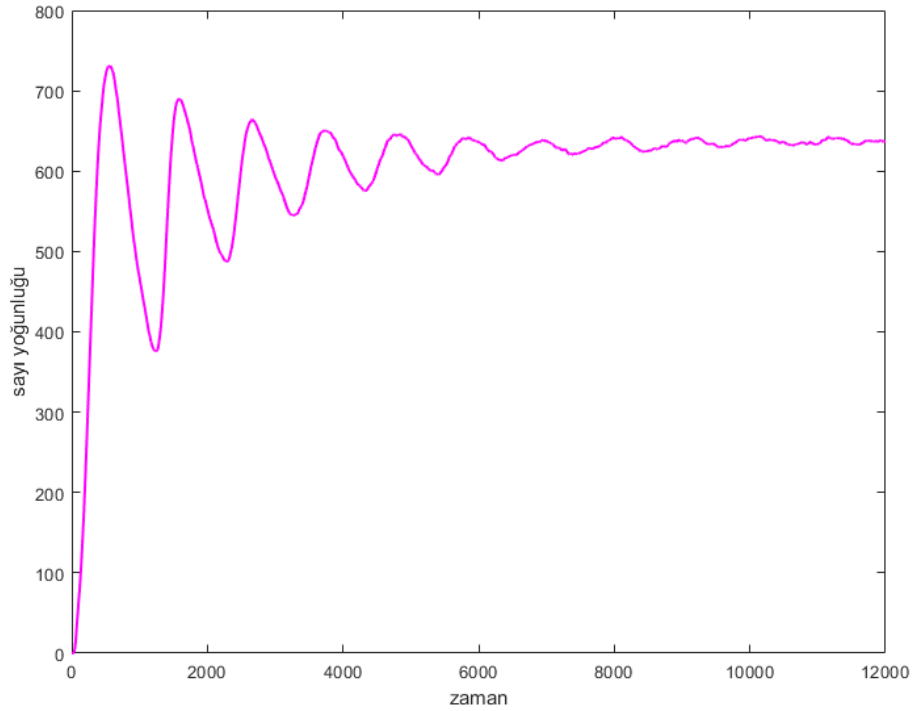
$$a_{mix} = \sqrt{\frac{5kT}{3m_{mix}}} \quad (5.4)$$

Burada, karışımın ortalama moleküler kütlesi (m_{mix}), karışımdaki her gaz türünün moleküler kütlesi ve bileşim oranları (x_i) dikkate alınarak hesaplanır:

$$m_{mix} = \sum_i x_i m_i \quad (5.5)$$

Bu çalışmada, monatomik saf He ve Ar gazlarının şok tüpündeki davranışı incelenmiştir. He ve Ar gaz karışımları için ses hızı hem simülasyon hem de teorik olarak hesaplanmış ve bu değerler kıyaslanmıştır. Özellikle, %50 He ve %50 Ar gaz karışımı ele alınarak, şok tüpündeki zaman-molekül sayı yoğunluğu verileri analiz

edilmiştir. Karışıma ait molekül sayı yoğunluğunun zamana bağlı değişimini gösteren grafik, **Şekil 5.4**'te sunulmuştur.



Şekil 5.4: Şok tüpünde %50 He ve %50 Ar gazlarının molekül sayı yoğunluklarının zamanla değişimi.

%50 oranında He ve %50 oranında Ar gazı karışımının molekül sayı yoğunluğu grafiği kullanılarak, ses hızı şu şekilde hesaplanmıştır:

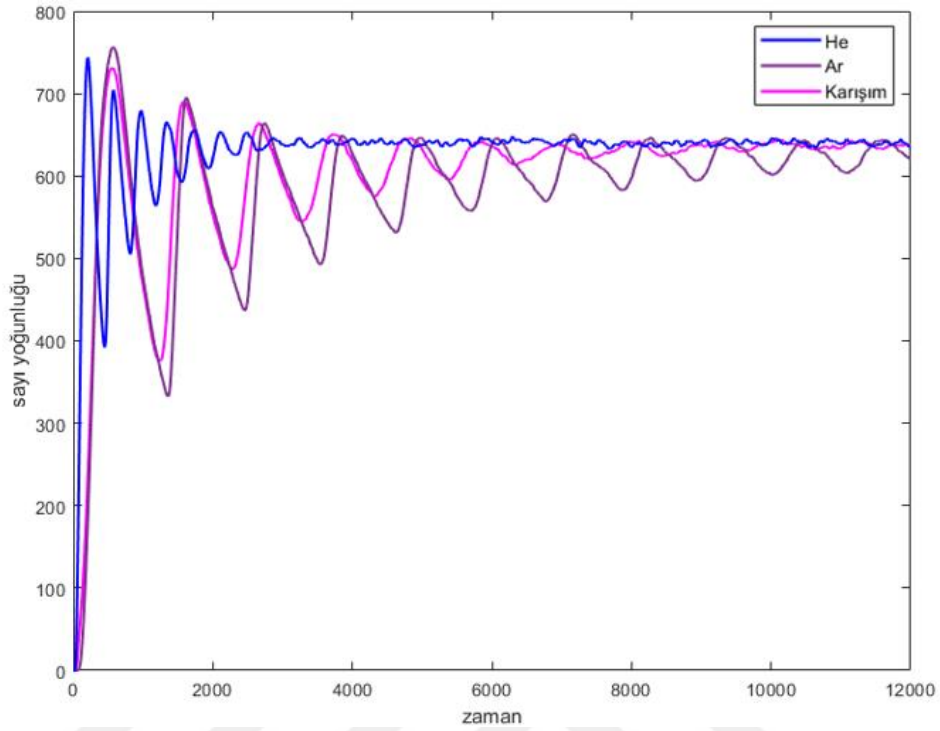
$$a_{simülasyon} = \frac{1116.7d}{(t_2 - t_1)} = \frac{1116.7}{(6280 - 5360)} \cong 1,214 \quad (5.6)$$

Teorik olarak hesaplanan ses hızı değeri ise: $a_{teorik} = 1,232$ olarak hesaplanmıştır. Bu sonuçlar, simülasyon ve teorik değerler arasındaki hata oranının %1,5 olduğunu göstermektedir. Hata oranının düşük olması, simülasyonun fiziksel modelle tutarlılığını ve gaz karışımlarının şok dalgası dinamiklerini doğru bir şekilde temsil ettiğini göstermektedir.

5.2.3 Sonuçlar ve Tartışma

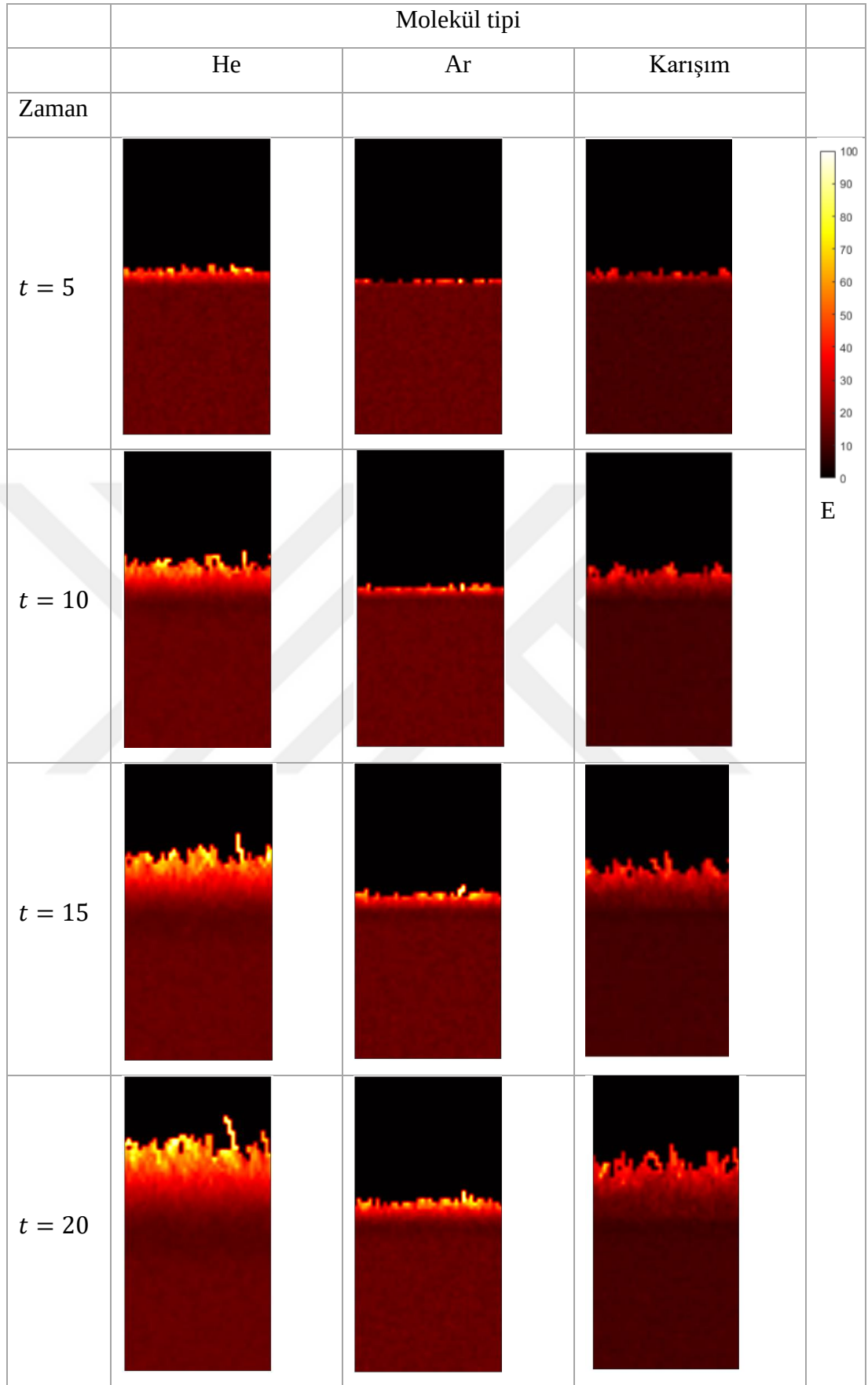
Bu bölümde saf He, saf Ar ve eşit oranlarda (%50-%50) He-Ar karışımı hesaplama alanına yerleştirilmiş ve simülasyonlar çalıştırılmıştır. Her bir gaz türü için şok dalgasının yayılımı ve yoğunluk değişimleri incelenmiştir. **Şekil 5.5**'te, bu üç farklı

durumda elde edilen zaman-molekül sayı yoğunluğu grafikleri aynı eksen üzerinde sunulmuştur.



Şekil 5.5: Şok tüpünde saf He, saf Ar ve karışımlarının sayı yoğunluklarının zamanla değişimi.

Şekil 5.6'da, saf He, saf Ar ve eşit oranlarda He-Ar karışımının şok tüpündeki enerji dağılımları gösterilmektedir. Bu grafikler, $t = 5$, $t = 10$, $t = 15$ ve $t = 20$ anlarındaki durumu görselleştirmekte ve enerji seviyelerinin (E) molekül türlerine bağlı olarak nasıl değiştiğini göstermektedir. Grafikler aynı zaman değerine karşılık gelen cpp değerine göre oluşturulmuş olup, farklı molekül türlerinin kinetik enerjilerindeki farklılıkları açıkça ortaya koymaktadır. He, düşük moleküler kütlesi ($m_{He} = 4 \text{ g/mol}$) nedeniyle, aynı sıcaklık altında daha yüksek bir kinetik enerjiye sahiptir. Bu durum, kinetik enerji formülüne göre, daha hafif gazların daha hızlı hareket etmesine neden olmaktadır. Grafiklerde de görüldüğü üzere, He molekülleri daha yüksek enerji yoğunluğuna sahip bir profile sahiptir. Şok tüpünde aradaki hayali membran kaldırıldığında, helyum molekülleri, daha hızlı hareket ederek şok dalgasının etkisini daha güçlü bir şekilde taşımaktadır. Ar, He'a göre daha ağır bir molekül kütlesine sahiptir ($m_{Ar} = 39,948 \text{ g/mol}$). Bu nedenle, aynı sıcaklık altında kinetik enerjisi daha düşük olur. Argon molekülleri, şok tüpü boyunca helyuma kıyasla daha yavaş hareket etmektedir.



Şekil 5.6: Saf He, saf Ar ve karışıma ait enerji karşılaştırması.

Eşit oranlarda He-Ar karışımı, helyumun hafifliği ve yüksek kinetik enerjisi ile argonun daha ağır moleküler kütlesi ve düşük kinetik enerjisini bir araya getirerek dengelenmiş bir enerji profili sunmaktadır. Bu kombinasyon, karışımın enerji seviyesinin saf Ar'a göre daha yüksek, ancak saf He'a göre daha düşük olmasına neden olur. **Şekil 5.6'**da görüldüğü üzere, karışımın enerji dağılımı, saf helyum ve saf argon arasında bir değer olarak iki gazın dinamik özelliklerini harmanlamaktadır. Bu durum, şok dalgası dinamiklerinin gazların moleküler kütlesi ve kinetik özelliklerine bağlı olduğunu göstermektedir.

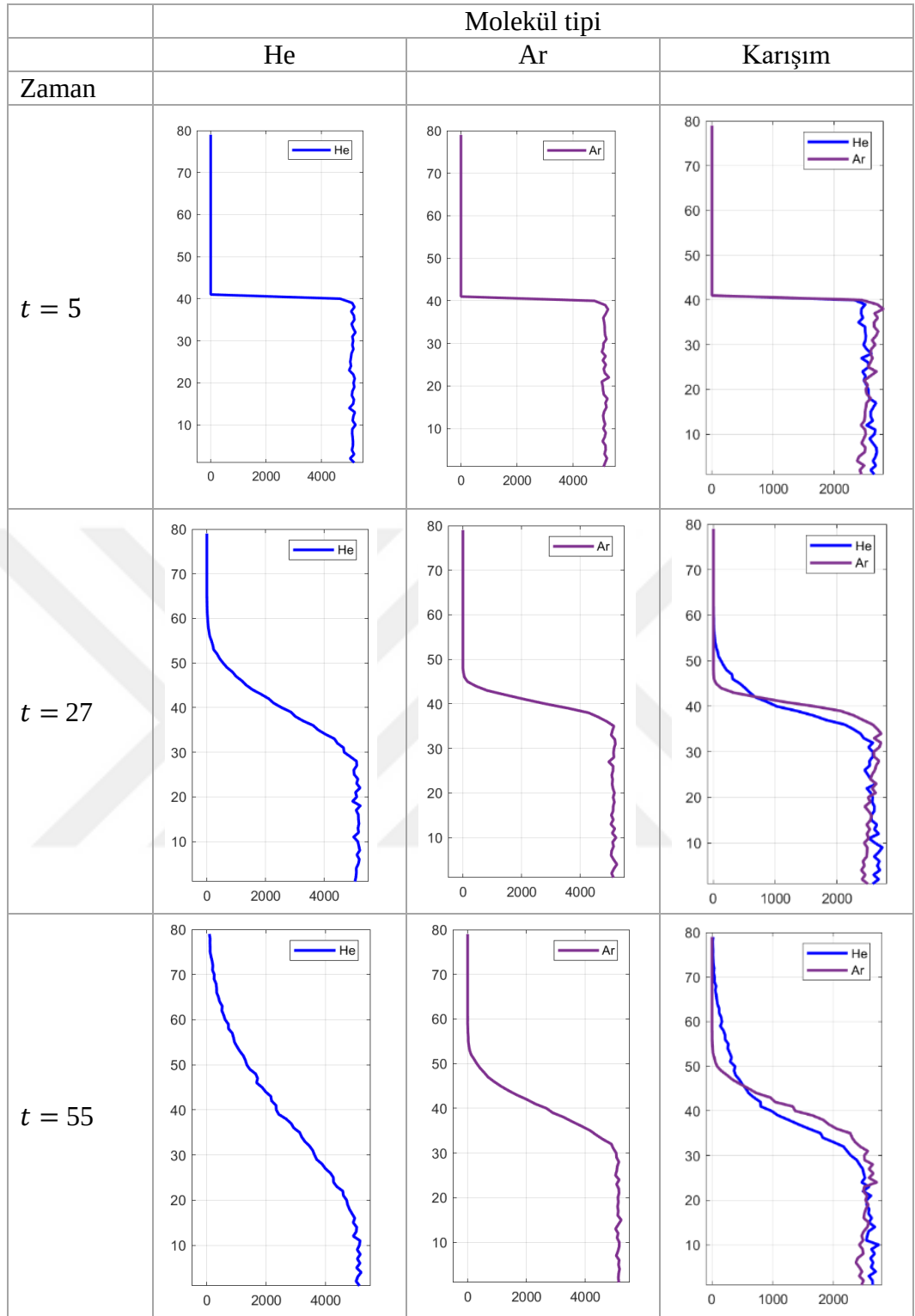
Helyumun daha yüksek kinetik enerjisi, şok dalgalarının daha hızlı yayılmasına neden olur. Bu durum, helyumun simülasyon tabanlı ses hızının ($a_{simülasyon} \cong 2,896$) daha yüksek çıkmasıyla doğrulanmıştır.

Argon, daha düşük enerji seviyesi nedeniyle daha yavaş bir şok dalgası yayılımına sahiptir ($a_{simülasyon} \cong 0,928$).

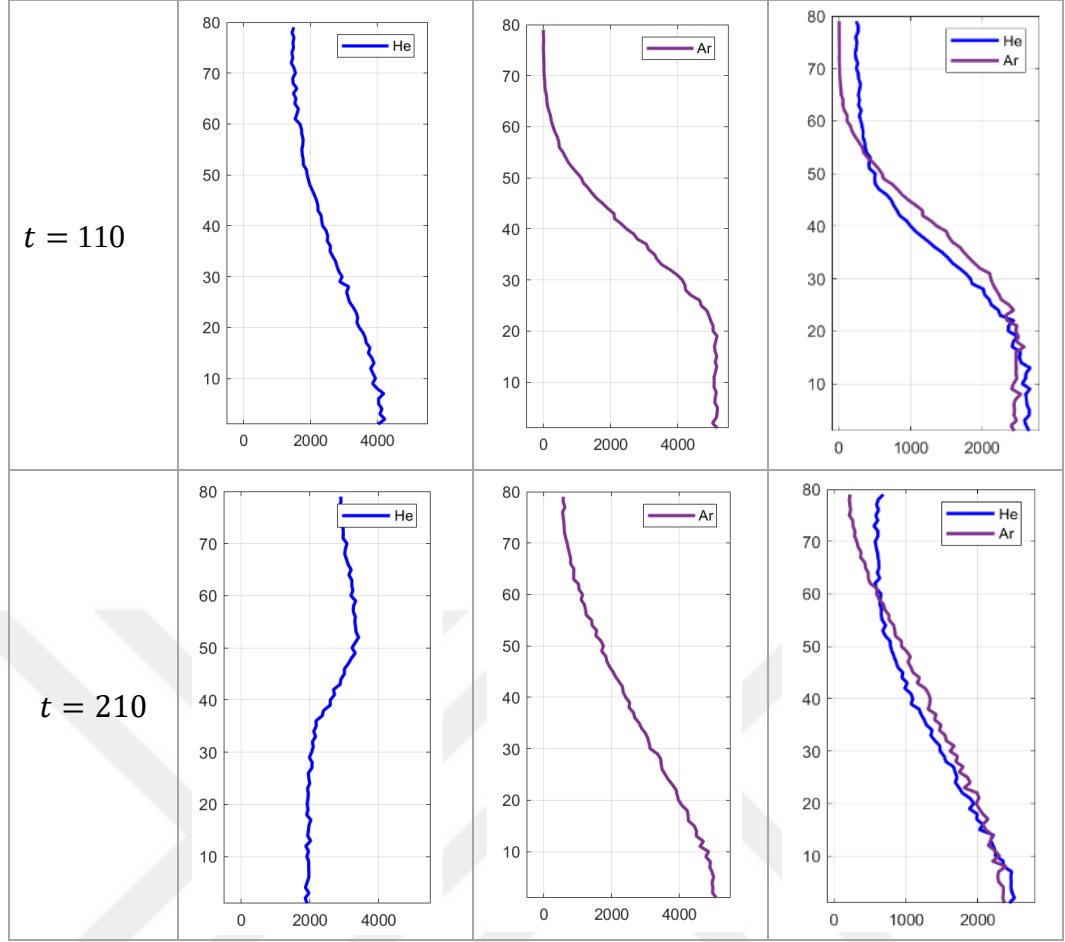
Karışım, helyumun yüksek enerjisi ve argonun düşük enerjisi arasında bir davranış sergiler. Bu, karışımın ses hızının ($a_{simülasyon} \cong 1,214$) iki gazın arasında bir değere sahip olmasını açıklamaktadır.

Şekil 5.7'de He, Ar ve bu gazların karışımları için molekül sayı yoğunluğu grafikleri verilmiştir. Bu grafikler, şok tüpü içerisindeki gazların zamanla yoğunluk değişimlerini ve üst duvara ulaşma hızlarını görselleştirmektedir. Başlangıçta grafikler yaklaşık olarak aynı değerleri verirlerken, zamanla grafikler arasında farklılıklar görülmektedir. Zaman ilerledikçe, He, Ar ve karışım gazları arasındaki farklılıklar belirginleşmektedir. Bu farklılık, gazların moleküler özelliklerine dayanmaktadır. Helyum molekülleri, düşük moleküler kütlesi nedeniyle daha yüksek kinetik enerjiye sahip olduğundan, argona kıyasla daha hızlı hareket etmektedir. Bu da helyumun üst duvara daha çabuk ulaşmasına neden olmaktadır.

Helyum ve argon karışımında (He-Ar), grafik, helyumun hızlı hareketinin etkilerini ve argonun daha yavaş hareketinin dengelenmesini yansıtmaktadır. Karışım gazı, helyumdan daha yavaş, ancak argondan daha hızlı bir şekilde üst duvara ulaşmaktadır. Bu durum, karışımın ortalama moleküler kütlesi (m_{mix}) ve buna bağlı ses hızı (a_{mix}) ile ilişkilidir.



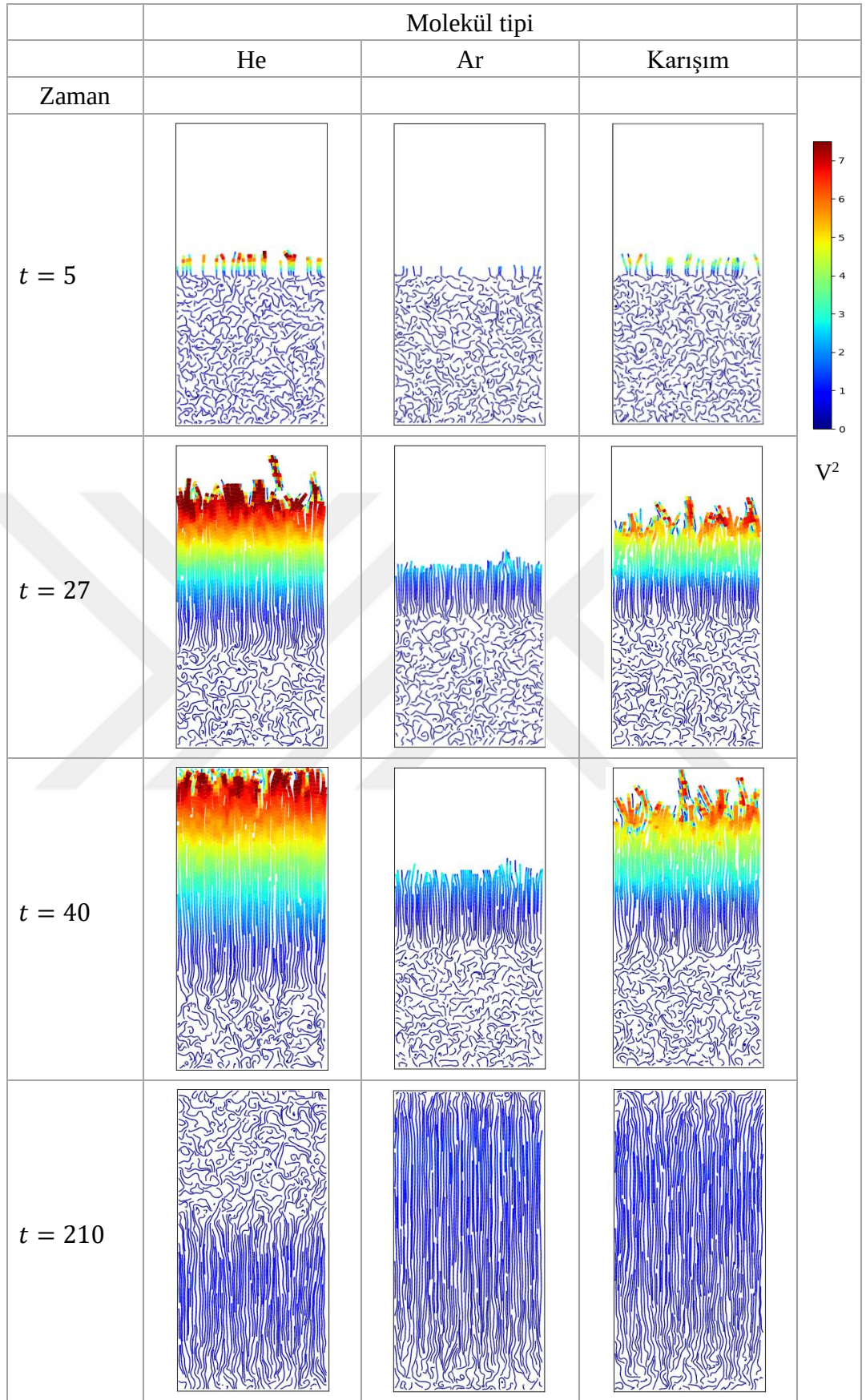
Şekil 5.7: Saf He, saf Ar ve karışıma ait molekül sayı yoğunluğu karşılaştırması.



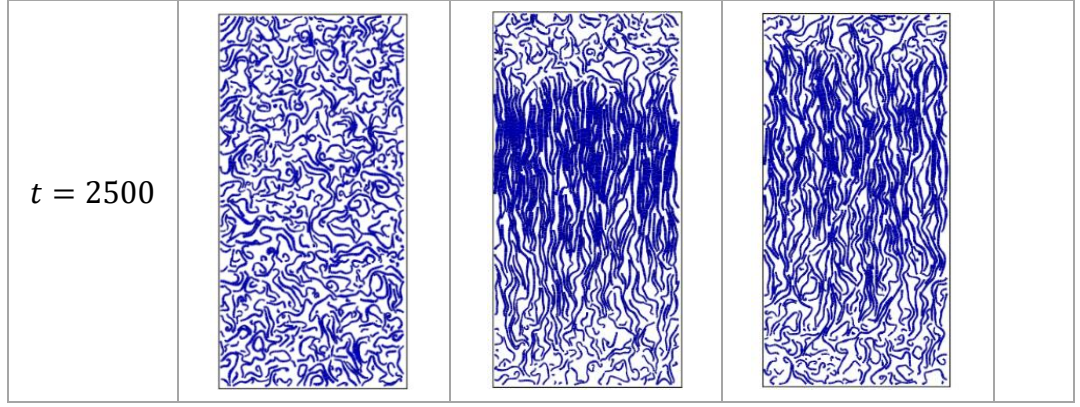
Şekil 5.7 (devamı): Saf He, saf Ar ve karışıma ait moleköl sayı yoğunluğu karşılaştırması

Şekil 5.8, şok tüpündeki gazların hız alanlarının görselleştirilmesi için akış çizgileri (streamline) kullanılarak oluşturulmuştur. Bu görselleştirme, gazların hız karelerinin hesaplanmasıyla elde edilen veriler temel alınarak yapılmıştır. Akış çizgileri, gazların hareket yönünü ve hız büyüklüğünü temsil etmek için kullanılmış, hız büyüklüğünün karesi renklerle ifade edilmiştir. Ayrıca, hızın büyüklüğü arttıkça akış çizgilerinin kalınlığı değiştirilerek, şok dalgasının gaz üzerindeki etkisi daha belirgin bir şekilde ortaya konulmuştur. Her bir grafik, He, Ar ve karışım için zamanın farklı anlarındaki ($t = 5, 27, 40, 210, 2500$) hız dağılımını temsil etmektedir.

$t = 5$ anında, He gazında akış çizgileri, şok dalgasının başlangıcında yüksek bir hızla genişlemeye başlamış ve alt duvardan üst duvara doğru net bir hareket göstermiştir. He, düşük moleküler kütlesi sayesinde şok dalgası etkisiyle en hızlı yayılan gazdır. Ar gazında akış çizgileri oldukça sınırlı bir bölgeyi kaplamakta ve hareket daha yavaş bir şekilde başlamaktadır.



Şekil 5.8: Saf He, saf Ar ve karışım gazlarına ait akış çizgilerinin (streamline) zamanla karşılaştırılması.



Şekil 5.8 (devamı): Saf He, saf Ar ve karışım gazlarına ait akış çizgilerinin (streamline) zamanla karşılaştırılması.

Daha ağır moleküler kütlesi nedeniyle Ar gazı, He'a göre daha fazla eylemsizlik göstermektedir. Bu, Ar'un başlangıçta daha yavaş bir yayılım sergilemesine yol açmaktadır. Karışımında akış çizgileri, He'dan daha dar bir alana yayılmış, ancak Ar'a göre daha geniş bir hız dağılımı sergilemiştir. Bu, karışımın hareket hızının He ve Ar arasında bir değer gösterdiğini ifade etmektedir.

$t = 27$ anında, He akış çizgileri, üst duvara iyice yaklaşmış ve hızla genişleyen bir yapı sergilemiştir. Bu aşamada He'un şok dalgası etkisiyle alt duvardan üst duvara olan hareketini büyük ölçüde tamamladığı görülmektedir. Bu esnada, Ar gazının akış çizgileri hala alt bölgede yoğunlaşmıştır ve hareket alanı oldukça sınırlıdır. Şok dalgası Ar gazında etkisini hissettirse de kütlesinin yüksek olması nedeniyle Ar'un hareketi oldukça yavaş bir hızla ilerlemektedir. Karışımında ise akış çizgileri He'a göre daha dar bir alana yayılmış, ancak Ar'a kıyasla üst duvara doğru daha hızlı bir hareket görülmektedir.

$t = 40$ anında He gazı, üst duvara ulaşmış ve hızın en yüksek olduğu alanlar renk skalasında belirgin şekilde gösterilmiştir. He'un düşük moleküler kütlesi sayesinde hızlı hareket ettiği ve şok dalgasını etkili bir şekilde taşıdığı gözlemlenmiştir. Ar ise daha ağır yapısı nedeniyle hala alt bölgeye yakın kalmış ve hareket sınırlı bir alanda yoğunlaşmıştır. Karışım gazı, He'un hızlı etkisiyle üst duvara yaklaşmış ancak Ar'un yavaşlatıcı etkisiyle tam olarak ulaşmamıştır.

$t = 210$ anında, şok dalgası He gazında alt duvara çarpıp doğru geri dönerken, Ar gazında şok dalgası üst duvar bölgesine ulaşmıştır. Ar'un hareket hızı He ve karışıma

kıyasla hâlâ düşüktür. Karışım gazında akış çizgileri belirgin bir şekilde genişlemiş, ancak helyumun etkisiyle hızlanmış bir yapı sergilemektedir.

$t = > 2500$ anında, He gazında akış çizgileri tamamen kaybolmuştur. Bu durum, helyumun düşük moleküler kütlesi nedeniyle enerjisini hızla eşit şekilde dağıtarak kararlı bir duruma ulaştığını göstermektedir. Buna karşılık, Ar gazında akış çizgileri hâlâ üst duvar ve alt duvar arasında yoğun bir hareket göstermektedir. Bu, argonun kinetik enerjisini helyuma kıyasla daha uzun süre koruduğunu ve kararlı duruma daha geç ulaştığını ifade etmektedir. Karışım gazında ise akış çizgileri helyuma göre daha belirgin bir şekilde varlığını sürdürmekte, ancak argona kıyasla daha dengeli bir yapı sergilemektedir. Bu durum, helyumun hızlı dinamik etkilerinin argonun daha yavaş kinetik davranışıyla dengelendiğini göstermektedir.

6. FIRÇA KEÇELERİN MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYONU İLE İNCELENMESİ

Turbomakinelerde ve diğer mühendislik uygulamalarında, kaçak akışları kontrol etmek amacıyla çeşitli sızdırmazlık elemanları kullanılmaktadır. Bu elemanlar arasında, labirent keçeler ve fırça keçeler öne çıkmaktadır. Bu keçeler, dönen ve sabit bileşenler arasındaki kaçak akışları kontrol etmek için geliştirilmiştir.

Labirent keçeler, geleneksel sızdırmazlık elemanları arasında yer almakta ve genellikle dönen bileşenlerin etrafında çoklu dar geçitler oluşturarak kaçak akışları engellemeyi amaçlamaktadır. Bu keçelerin en önemli avantajlarından biri, fiziksel temas olmadan çalışan bir tasarıma sahip olmaları nedeniyle düşük sürtünme ve aşınma sorunlarının önlenmesidir. Bu özellik, uzun ömür ve minimum bakım gereksinimi sağlamaktadır. Ancak, düşük sızdırmazlık performansına sahip olmaları nedeniyle enerji kayıplarına yol açabilir ve özellikle yüksek basınç farklarının olduğu durumlarda kaçak akış miktarı artabilir. Bu durum, enerji verimliliği yüksek uygulamalarda sınırlayıcı bir faktör olarak öne çıkmaktadır [111], [112].

Fırça keçeler ise modern turbomakinelerde ve çeşitli mühendislik sistemlerinde dinamik sızdırmazlık çözümleri olarak tercih edilmektedir. Bu elemanlar, dönen ve sabit bileşenler arasındaki kaçak akışları kontrol etmek için tasarlanmış ve özellikle gaz ve buhar türbinleri gibi uygulamalarda kullanılmaktadır. Labirent keçelerin sınırlamalarını gidermek üzere geliştirilmiş olan fırça keçeler, yüksek sıcaklık ve basınç farklarında daha az kaçak akış sağlarken, lif benzeri yapıları sayesinde dönen bileşenlerin yüzeyine daha etkili bir şekilde uyum sağlamaktadır [113]. Ayrıca, ince lif yapısı sayesinde enerji verimliliğini artırarak bazı uygulamalarda %20'ye varan enerji tasarrufu sağlamaktadır [114]. Bunun yanı sıra, lifler arasında meydana gelen küçük deformasyonları tolere edebilme kapasitesi, fırça keçelerin stabil performansını arttırmaktadır [115].

Fırça keçeler, makinelerdeki sızıntıyı en aza indirmek için, genellikle metalik veya polimer malzemelerden üretilmiş, sıkıca paketlenmiş ve aynı zamanda esnek yapıya sahip teller (bristle) veya lifler kullanan bir yöntemdir [116]. Bu teller, hareketli bir yüzeyle sürekli temas halinde kalarak sızdırmazlık yüzeyiyle uyum sağlayabilmektedir. Bu özellikleri sayesinde fırça contalar, türbinler, kompresörler ve

jet motorları gibi yüksek hız ve performans gerektiren turbo makinelerde yaygın olarak tercih edilmektedir. Geleneksel sızdırmazlık yöntemlerine kıyasla, fırça contalar bir dizi önemli avantaj sunmaktadır. Bunlar arasında, değişken çalışma koşulları altında yüksek performans, sızdırmazlık yüzeyinde minimize edilmiş aşınma ve makinenin genel verimliliğinde belirgin iyileşmeler yer almaktadır [117], [118].

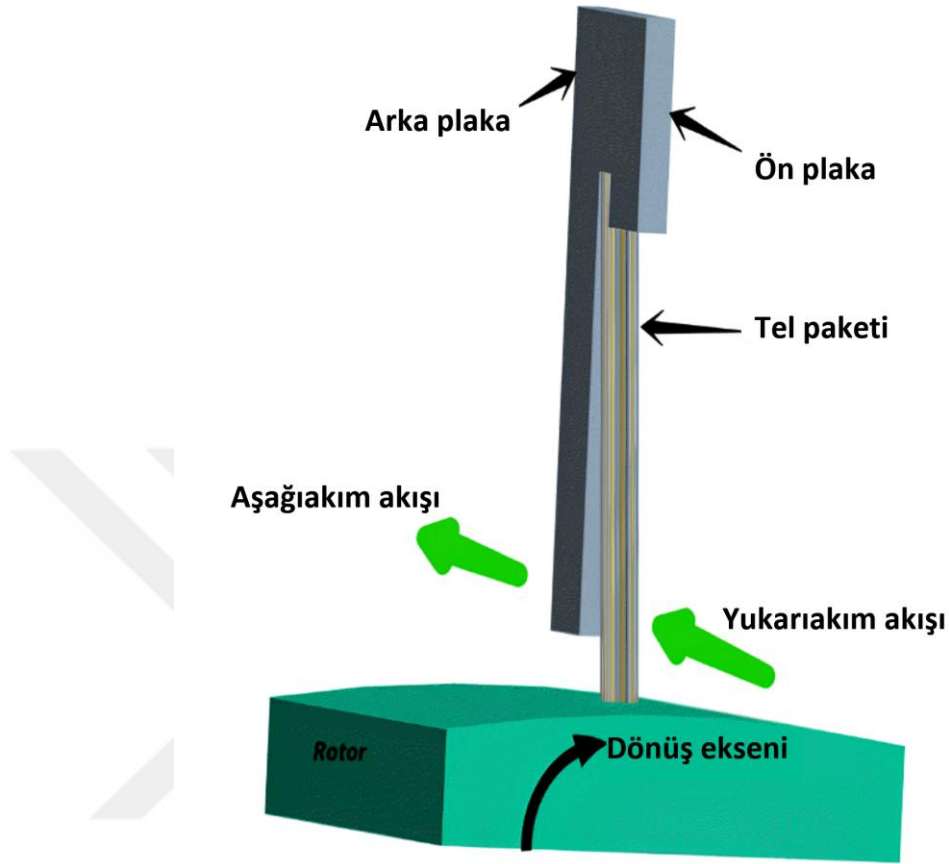
Birçok çalışma, fırça keçesi ve labirent contaların ısı transferi davranışları ile kaçak akış özelliklerini detaylı şekilde incelemeye odaklanmıştır [117]–[120]. Bu tür çalışmalar, mühendislik uygulamalarında daha verimli sızdırmazlık çözümleri geliştirebilmek adına kritik veriler sunmaktadır. Özellikle, akışkan dinamiği davranışlarını anlamaya yönelik araştırmalar, contaların içindeki ve çevresindeki basınç alanlarının dağılımını detaylandırmıştır [121]. Bu basınç alanı analizleri, sızdırmazlık performansını etkileyen parametrelerin doğru bir şekilde tanımlanmasını sağlamaktadır. Örneğin, büyük ölçekli fırça keçesi sistemlerinde yapılan araştırmalar, tel arası basınç alanlarını inceleyerek kaçak akış dinamikleri üzerindeki etkileri ortaya koymuştur [113], [121]. Bu tür bulgular, fırça keçesi geometrisinin ve malzeme özelliklerinin performans üzerindeki rolünü daha iyi anlamamıza olanak tanımaktadır [113].

Fırça keçeler, akış sistemlerinde mikroskobik düzeyde karmaşık yapıları ile dikkat çekmektedir. Ancak bu çalışmada, fırça keçelerin bütünsel davranışı ele alınarak, keçenin sızdırmazlık performansı üzerindeki etkileri incelenmiştir. Lifler arasındaki geçiş akışına odaklanmak yerine, keçenin bir bütün olarak akışkanla etkileşimi MD simülasyonları kullanılarak analiz edilmiştir.

MD simülasyonları, özellikle rotor hızı (V_z) ve basınç gradyanının (PW) akışkanın basıncı, sıcaklığı ve moleküler sayı yoğunluğu üzerindeki etkilerini ortaya koymak için güçlü bir yöntem sunmaktadır. Bu yaklaşım, keçenin mikroskobik seviyede sızdırmazlık yüzeyi ile akışkan arasındaki dinamik etkileşimlerini anlamaya yönelik veriler sağlamıştır.

Şekil 6.1, fırça keçelerinin yapısını ve çalışma prensiplerini ortaya koymaktadır [122]. Fırça keçesi, ön plaka, arka plaka ve tel paketi olmak üzere üç temel bileşenden oluşmaktadır. Ön plaka, keçenin giriş tarafında yer alır ve tel paketine yapısal destek sağlayarak, akışın tel paketi üzerinde düzgün bir şekilde yönlendirilmesini sağlar. Arka plaka, tel paketinin arka kısmında bulunur ve keçenin çalışma sırasında

deformasyona uğramasını engeller. Bu iki plaka, tel paketini sabitleyerek fırça keçesinin sağlamlığını ve dayanıklılığını arttırmaktadır.



Şekil 6.1: Fırça keçesinin yapısal elemanları ve akış yollarının şematik gösterimi [122].

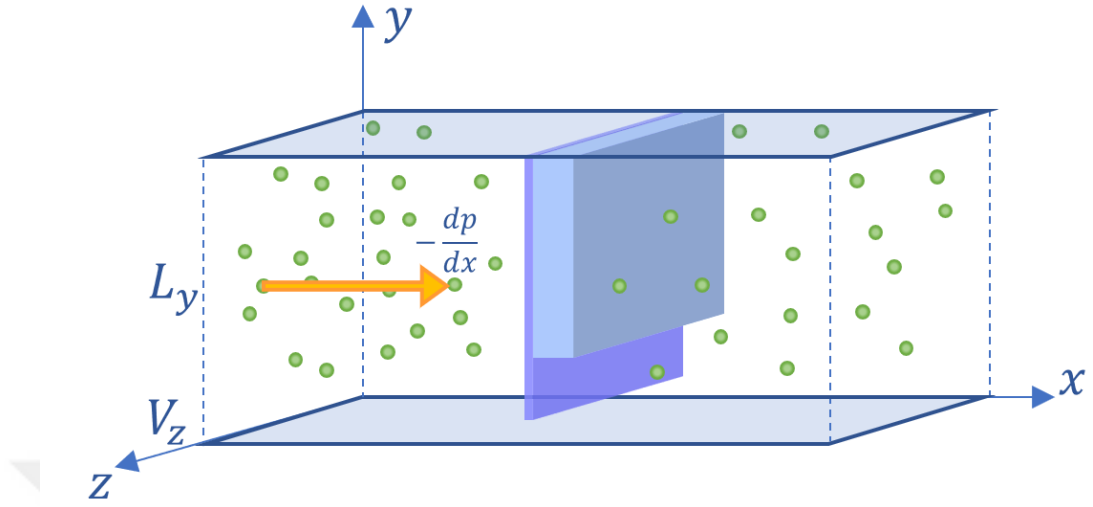
Fırça keçesinin en kritik bileşeni olan tel paketi, ince ve yoğun şekilde düzenlenmiş tellerden oluşmaktadır. Bu teller, rotor yüzeyi ile temas halinde ya da çok küçük bir boşluk bırakarak sızdırmazlık sağlamaktadır. Tel paketi, yüksek basınçlı taraftan gelen akışın (yukarıakım) düşük basınçlı tarafa (aşağıakım) geçişini büyük ölçüde kısıtlar ve yalnızca kontrollü bir miktarda akışa izin verir. Bu, özellikle yüksek basınç ve sıcaklık koşullarında çalışan döner makineler için büyük bir avantaj sağlamaktadır.

6.1 Simülasyon Alanı

Bu bölümde, fırça keçelerinin MD simülasyonlarında kullanılan hesaplama alanı detaylı bir şekilde açıklanmıştır. Hesaplama alanının genel özellikleri ve bu alanı oluşturan fiziksel sınır koşulları aşağıdaki şekillerde gösterilmektedir.

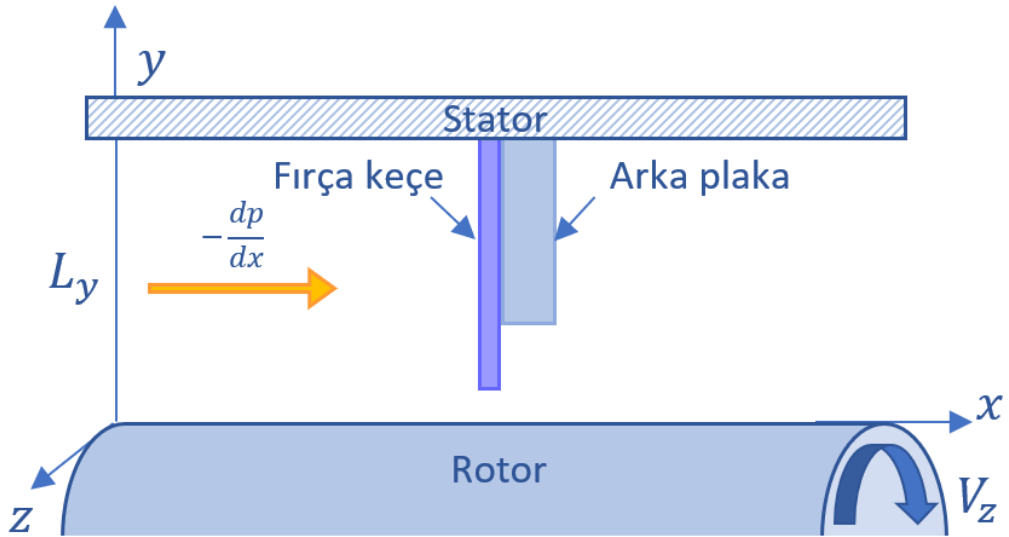
Şekil 6.2'de hesaplama alanının izometrik bir görünümü verilmektedir. Alan, bir akışkan bölgesini temsil etmekte olup, x, y ve z eksenlerine göre üç boyutlu bir yapıda

izilmiřtir. Akıř, x-ekseni boyunca hareket etmekte olup, bu hareket zerinde bir basıncı gradyanı etkili olmaktadır.



řekil 6.2: Hesaplama alanının izometrik görünümü.

řekil 6.3'te, fırça keçelerinin ve rotorun simlasyon ortamındaki yerleşimi gösterilmiştir. řekil, keçenin st kısımda yer alan stator ile ařağıda dönen rotor sisteminde nasıl çalıştığını açıklamaktadır. Fırça keçesi, akıř bölgesini sınırlamakta ve arka plakaya sabitlenmiş bir yapıda gösterilmiştir. Rotor, z-ekseni etrafında dönmekte olup, dönüş yönü V_z ile belirtilmiştir.



řekil 6.3: Fırça keçesi ve rotoru içeren hesaplama alanı.

6.2 Simülasyon Parametreleri

Yüksek performanslı makinelerde kullanılan fırça keçelerinin sızdırmazlık davranışını anlamak amacıyla, yoğun bir şekilde paketlenmiş fırça kılları ile hareketli yüzeyler arasındaki karmaşık etkileşimler MD simülasyonları ile analiz edilmiştir. Bu analizler, fırça keçelerinin farklı rotor hızlarında ve basınç gradyanlarında nasıl davrandığını incelemeyi amaçlamaktadır. Simülasyonlarda kullanılan temel parametreler ve değerler, **Tablo 6.1**'de sunulmuştur.

Tablo 6.1: Simülasyonlarda kullanılan parametreler.

Parametreler	Değerler				
V_z	0,0	2,0	4,0	5,0	
PW	1,0	0,8	0,6	0,4	0,2
T_u	10,0				

Simülasyonlarda duvar sıcaklıkları sabit tutulmuş, üst ve alt duvarlar için belirlenen değerler sırasıyla $T_u = 10$ ve $T_a = 10$ olarak seçilmiştir. Sabit sıcaklık koşulları, basınç ve hız gibi diğer parametrelerin etkilerinin izole bir şekilde incelenmesine olanak tanımıştır.

Simülasyonlarda, rotor hızı V_z , $V_z = 0, 2, 0, 4, 0, 5, 0$ gibi farklı hız rejimlerinde test edilmiştir. Bu hız aralığı, düşük hızlarda akış karakteristiklerinden süpersonik rejimlere kadar geniş bir analiz imkânı sağlamıştır. Basınç gradyanı parametresi PW ise 1,0 ile 0,2 arasında seçilmiştir. **Tablo 6.1**'de sunulan bu parametreler, akışın farklı hız ve basınç gradyanı koşulları altında nasıl davrandığını anlamak için temel teşkil etmiştir. Özellikle, PW parametresinin farklı değerlerde alınması, giriş ve çıkış basınçları arasındaki farkın (basınç oranı, P_r) sistem üzerindeki etkisini analiz etmeye olanak sağlamıştır.

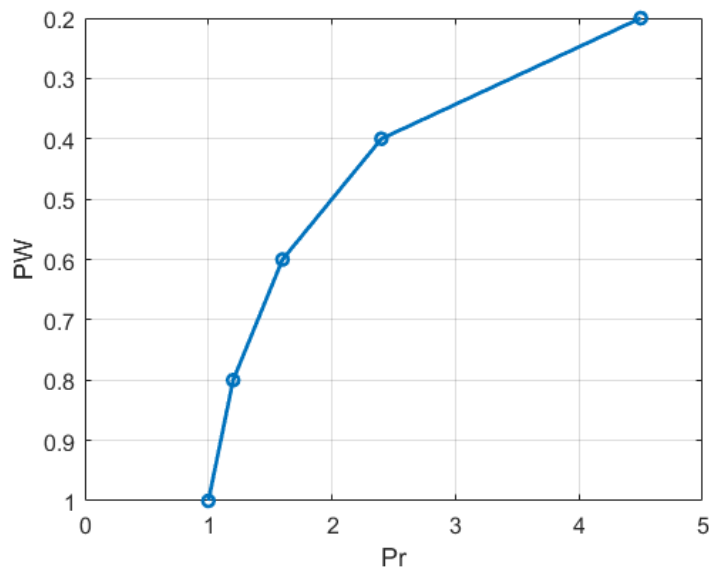
Basınç oranlarının hesaplanması sırasında ilk olarak, sıcaklık ve moleküler sayı yoğunluğu gibi fiziksel parametrelerin verileri ilgili dosyalardan okunmuş ve basınç matrisleri elde edilmiştir. Bu işlem, moleküler sayı yoğunluğu ve sıcaklık matrislerinin eleman bazında çarpılmasıyla yapılmıştır. Ardından, basınç matrisi üzerinde giriş ve

ıkış blgeleri tanımlanmıřtır. Giriř blgesi ve ıkış blgesi iin kenarlardan uzak olacak řekilde bir aralık belirlenmiřtir. Giriř ve ıkış basınlarının ortalaması kullanarak basın oranı hesaplanmıřtır. Her bir basın gradyanı iin yapılan bu hesaplamalarda, zellikle son 5 deėere odaklanılmıřtır. Hesaplama sonuları **Tablo 6.2**'de sunulmuřtur. Bu tablo, farklı basın gradyanları iin elde edilen basın oranlarını gstermektedir. Tabloya gre, PW deėeri azaldıka basın oranının arttıėı aıka grlmektedir. rneėin, $PW = 1,0$ iin giriř ve ıkış basınları eřit olup, basın oranı 1,0 olarak hesaplanmıřtır. Ancak, PW deėeri 0,2'ye dřtėnde basın oranı 4,5 gibi olduka yksek bir deėere ulařmıřtır.

Tablo 6.2: Basın gradyanlarına karřılık gelen basın oranları.

PW	P_r
1	1
0,8	1,2
0,6	1,6
0,4	2,4
0,2	4,5

Bu tabloda verilen basın gradyanlarının karřılıkları **řekil 6.4**'te verilmiřtir.



řekil 6.4: Basın gradyanlarına karřılık gelen basın oranlarının gsterimi.

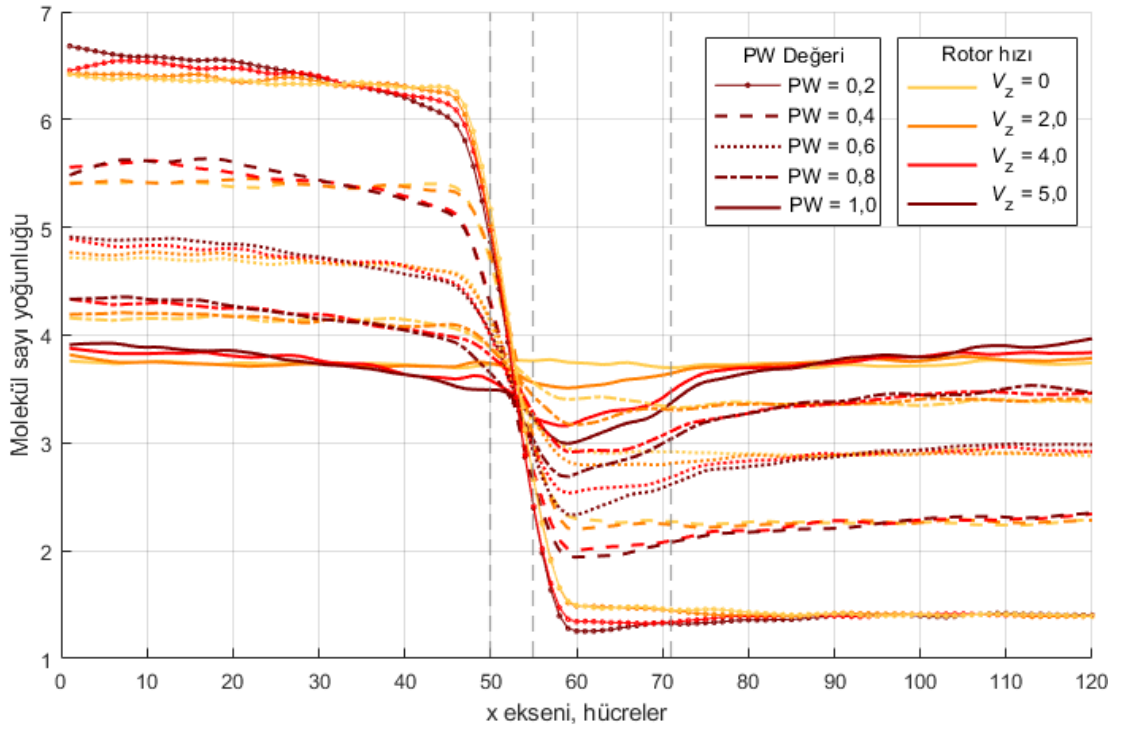
Literatürde benzer sistemlerin analizi, genellikle Fluent gibi ticari hesaplamalı akışkanlar dinamiği (CFD) yazılımları kullanılarak gerçekleştirilmiş ve bu süreçte sisteme doğrudan giriş ve çıkış basınçları tanımlanmıştır. Bu yöntem, basınç farklarını sabit bir parametre olarak sisteme dahil ederek akış üzerindeki etkilerini analiz etmeye odaklanmaktadır [123]–[125]. Ancak bu çalışmada farklı bir yaklaşım benimsenmiş; sabit bir basınç oranı yerine, PW parametresi kullanılarak sistemin dinamik davranışları incelenmiştir.

PW parametresi, yoğunluk ve sıcaklık gibi fiziksel değişkenler üzerinden basınç farkının etkilerini dolaylı olarak analiz etme imkânı sunmuş ve böylece sistemin daha geniş bir perspektifle değerlendirilmesini sağlamıştır. Literatürdeki çalışmaların büyük bir kısmında, akışkanın sıkıştırılmaz olduğu varsayılmıştır. Bu bağlamda, bazı çalışmalarda basınç oranı hesaplanmamış ve analizler yalnızca basınç farkı üzerinden yürütülmüştür [126], [127].

Bu yaklaşımla, giriş ve çıkış basınçlarının sistemdeki akış dinamiklerine göre kendiliğinden oluşması sağlanmış ve sabit bir basınç oranı yerine daha esnek bir analiz yöntemi geliştirilmiştir. Ayrıca, PW değerlerinin farklı seviyelerde kullanımı, literatürdeki yöntemlere kıyasla sistemin doğrusal olmayan davranışlarının ve fiziksel parametrelerin basınç gradyanına tepkilerinin detaylı bir şekilde incelenmesine olanak tanımıştır.

6.3 Simülasyon Sonuçları

Fırça keçesi sistemi, bir rotor ve bir stator arasına yerleştirilmiş bir fırça keçesi elemanından oluşmaktadır. Fırça keçesi, arka plaka ile desteklenmiş olup, dönen rotorun yüzeyiyle minimum temas sağlayarak sızdırmazlık görevini üstlenmektedir. Bu sistemde simülasyon, MD yaklaşımıyla çözülmüş ve basınç gradyanı (PW) ile rotor hızı (V_z) gibi parametrelerin etkisi incelenmiştir. **Şekil 6.5**'te, farklı V_z ve PW koşulları altında, x -ekseni boyunca molekül sayı yoğunluğunun değişimi gösterilmiştir. Bu grafik MATLAB'de çizilmiştir.



Şekil 6.5: Farklı rotor hızları ve basınç gradyanı koşullarında molekül sayı yoğunluğunun x eksenı boyunca dağılımı.

Grafikte, fırça keçesinin bulunduğu bölge ile arka plakanın konumunu vurgulamak için x eksenı boyunca dikey gri kesikli çizgiler kullanılmıştır. Bu çizgiler, fırça keçesi ve arka plakanın simülasyon alanındaki fiziksel yerleşimini göstermektedir. Kesik çizgiler, molekül sayı yoğunluğu profilindeki değişimlerin özellikle keçenin bulunduğu bölgede nasıl gerçekleştiğini görselleştirmek ve analiz etmek için kullanılmıştır.

Grafik oluşturulurken, öncelikle simülasyon verilerinin son 5 sütununun ortalaması alınarak veri seti stabilize edilmiştir. Bu işlem, yoğunluk dalgalanmalarını azaltmak ve verilerin dengeli bir profil oluşturmasını sağlamak amacıyla gerçekleştirilmiştir. Simülasyon alanı, x-eksenı boyunca dört bölgeye ayrılmış ve her bölge için uygun ölçeklendirme faktörleri uygulanmıştır. Sistemde fırça keçesi ve arka plaka gibi yapısal elemanlar bulunduğundan, bu bölgelerdeki y-eksenı yüksekliği diğer bölgelere göre farklılık göstermektedir. İlk bölge ve son bölge, sistemde en büyük y eksenı yüksekliğine sahiptir ve bu nedenle yoğunluk verileri, normalizasyon amacıyla 400 ile bölünmüştür. Fırça keçesi bölgesi olarak adlandırılan 50–55 aralığında, y-eksenı yüksekliği daha düşük olduğundan, bu bölgedeki veriler 16 ile ölçeklendirilmiştir. Arka plaka bölgesi (56–71 aralığı), geçiş bölgesine göre daha büyük bir y-eksenı

yüksekliğine sahiptir, bu nedenle veriler 160 ile normalize edilmiştir. Son bölge (72–120 aralığı), ilk bölge ile aynı y eksenini yüksekliğine sahiptir, bu nedenle yoğunluk verileri tekrar 400 ile ölçeklendirilmiştir. Bu işlemler, sistemin fiziksel geometrisindeki farklılıkları hesaba katarak, grafikteki yoğunluk profillerinin gerçekçi ve anlamlı bir şekilde görselleştirilmesini sağlamıştır.

Grafiğin sol bölgesi, simülasyonun yüksek basınç farkının etkili olduğu kısmını temsil etmektedir. Yoğunluk profili, burada belirgin şekilde yüksek bir değerden başlar ve geçiş bölgesine yaklaştıkça yavaşça azalmaya başlar.

Fırça keçesi, gaz moleküllerinin yüksek basınç bölgesinden (yukarıdaki) düşük basınç bölgesine (aşağıdaki) geçişini kısıtlayan bir bariyer işlevi görmektedir. Bu yapı, moleküllerin diğer tarafa geçişini sınırlandırdığı için yoğunlukta keskin bir düşüş görülmektedir. Basınç gradyanı nedeniyle bu bölgede moleküler hareketin büyük ölçüde engellendiği gözlemlenmiştir.

Arka plaka bölgesinde, geçişten sonra moleküllerin yoğunluklarının dengelenmeye başladığı kısmı ifade eder. Fırça keçesi bölgesinde yaşanan yoğun düşüşten sonra, yoğunluk profili bu bölgede daha kararlı bir seyir izlemektedir.

Grafiğin sağ tarafı, düşük basınç farkının etkili olduğu bölgedir. Bu alanda moleküllerin yoğunluğu, sol bölgeye kıyasla daha düşük bir dengeye ulaşmıştır.

Sol bölgedeki yüksek basınç, moleküllerin yoğunluk profilinde belirgin bir artışa neden olurken, geçiş bölgesindeki fiziksel engeller yoğunlukta keskin bir düşüşe yol açmaktadır. Bu geçişten sonra yoğunluk, orta ve sağ bölgelerde daha dengeli bir hale gelmektedir. Fırça keçesi ve arka plaka gibi yapısal elemanların etkisi, geçiş bölgesinde yoğun bir şekilde hissedilmekte, bu da grafikteki keskin yoğunluk düşüşüyle somut bir şekilde ifade edilmektedir.

Şekil 6.6, çeşitli V_z ve PW koşulları altında simülasyon alanındaki molekül sayı yoğunluğunun iki boyutlu dağılımını göstermektedir. Grafikteki siyah bölge, fırça keçesi ve arka plaka alanını temsil etmektedir ve bu alan, akışın fiziksel olarak sınırlandırıldığı bir bölgedir. PW = 1,0 durumunda, moleküler sayı yoğunlukları oldukça homojendir ve renkler genel olarak mavi-yeşil tonlarında görülmektedir. Düşük basınç farkı, moleküllerin serbestçe hareket edebilmesini sağlamakta ve yoğunlukta büyük bir değişikliğin gözlenmemesine neden olmaktadır. Fakat, rotor hızlandıkça (özellikle

$V_z = 5,0$ 'de), rotorun yüzeyine yakın bölgelerde akışkan molekülleri kinetik enerji kazanır ve bu enerji molekülleri daha hızlı hareket ettirir. Rotorun yüzeyindeki bu hareketlilik, moleküllerin daha hızlı taşınmasına ve üst duvara doğru yönelmesine neden olur. Bu gibi durumlarda, $PW = 0,4$ gibi yüksek basınç farkı koşullarında, moleküllerin bir kısmı yüksek basınçlı bölgede birikmekte ve diğer tarafa geçişleri sınırlandırılmaktadır. Bu belirgin durumlarda, renk skalasında kırmızı tonların hâkim olduğu görülmektedir, bu da moleküler yoğunluğun yüksek olduğunu ifade etmektedir.

$V_z = 0$ durumunda, moleküler sayı yoğunluk dağılımı yalnızca basınç gradyanına bağlıdır ve daha düzenli bir yapı sergiler. Rotorun etkisinin olmaması, akışın yalnızca basınç gradyanı yönünde gerçekleşmesine yol açmaktadır. Ancak, hız seviyelerinin yükselmesiyle ($V_z > 0$ durumunda), yoğunluk dağılımı giderek daha heterojen hale gelmektedir. Özellikle $PW = 0,4$ durumunda, yüksek rotor hızları moleküler hareketi artırarak yoğunluk profillerinde dalgalanmalara neden olmaktadır. Vurgulanması gereken bir diğer önemli nokta, yüksek rotor hızında ($V_z = 5,0$), moleküllerin dağılımında daha belirgin asimetri gözlemlenmektedir.

Literatürdeki çeşitli çalışmalarda, fırça contalarının arkasında arka plaka nedeniyle oluşan girdapların, akış türbülansı sonucu meydana geldiği ve bu durumun contanın performansı üzerinde önemli etkiler yarattığı ortaya konmuştur [128]–[130]. Bu girdaplar, Şekil 6.6'da $PW = 0,8$ ve $V_z = 4,0$ durumunda görsel olarak da gözlemlenebilmektedir. Bu çalışmada, arka plaka temsil edilmemiş olsa bu girdapların etkisinin gözlemlenmesi mümkün olmayacaktı. Arka plaka, fırça paketiyle birlikte çalışarak girdap kaynaklı basınç dalgalanmalarını düzenleyerek fırça uçlarında oluşabilecek düzensiz basınç dağılımına engel olmaktadır. Bu bulgular, arka plakanın mühendislik optimizasyonunun, fırça keçenin hem mekanik dayanıklılığı hem de sızdırmazlık performansı açısından kritik olduğunu ortaya koymaktadır [131]–[133].

Şekil 6.7, çeşitli V_z ve PW koşullarında simülasyon alanındaki basınç dağılımını göstermektedir. Renk skalası, basınç seviyelerini ifade etmekte olup, mavi düşük basıncı, kırmızı ise yüksek basıncı temsil etmektedir. Rotor hızı sırasıyla 0, 2,0, 4,0 ve 5,0 olarak artmaktadır. Rotor hızı arttıkça, rotorun kinetik etkisi basınç profillerini etkilemeye başlamakta, özellikle fırça keçesinin yakınında basınç artışı gözlemlenmektedir. Bu, rotorun molekülleri sıkıştırarak bölgesel basıncı

artırmasından kaynaklanmaktadır. Rotor hızının maksimum seviyeye ulaşmasıyla, basınç profili daha dinamik hale gelmekte ve akışın karakteristiğini ciddi şekilde değiştirmektedir.

$V_z = 5,0$ durumunda, fırça keçesinin giriş tarafında yüksek basınç birikimi oluşurken (kırmızı renk), çıkış tarafında ise basınç daha düşüktür (mavi tonlar). Bu nedenle, yüksek rotor hızı, basınç farkını daha da belirgin hale getirerek, akış dinamiklerinde dengesizlik oluşturmaktadır.

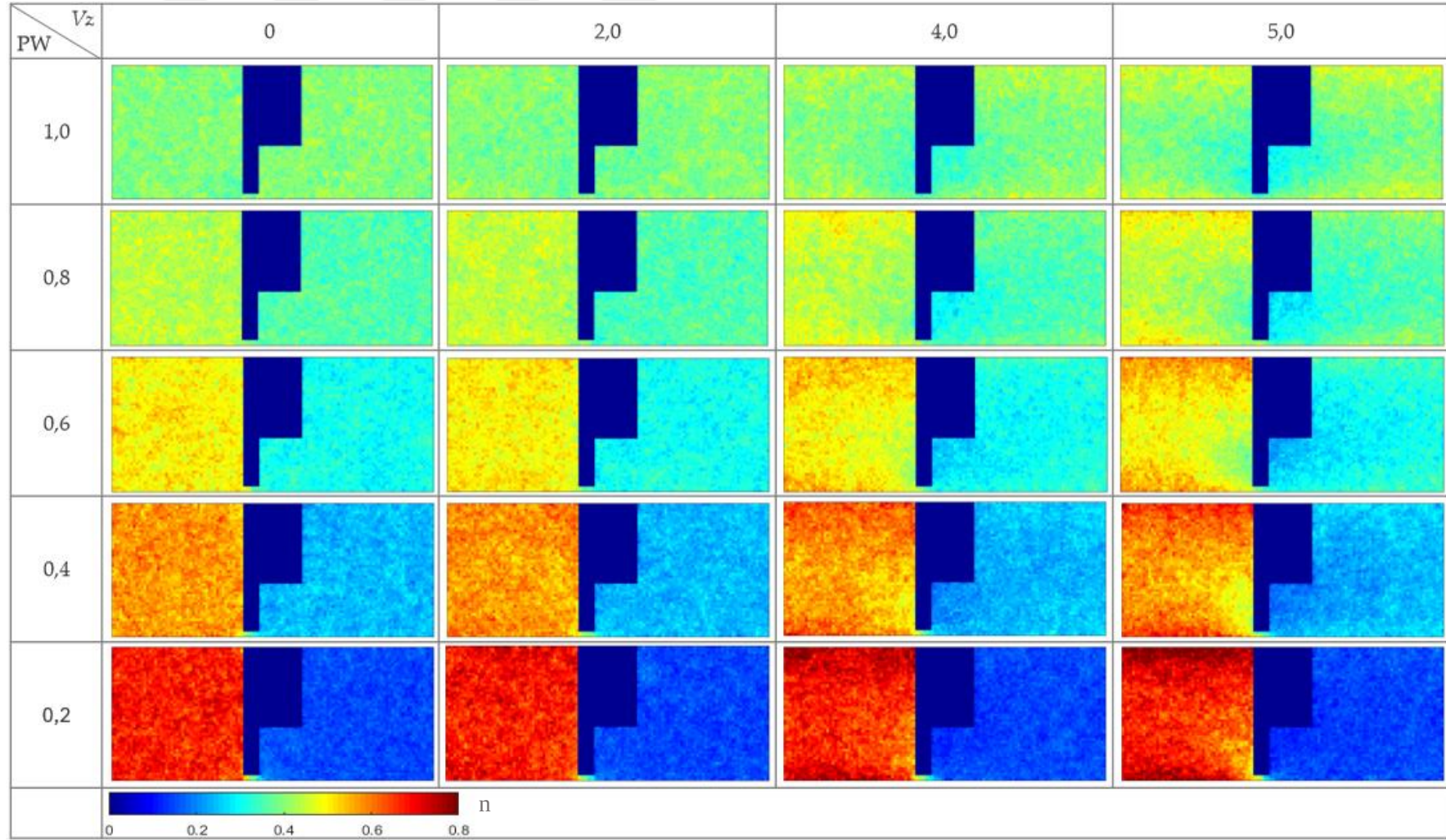
PW azaldıkça, sistemdeki basınç farkı artar ve bu durum grafikte daha büyük değişiklikler meydana gelir. PW = 1,0 ve $V_z = 0$ durumunda, basınç farkı olmadığı için sistem dengelidir ve homojen bir renk profili gözlemlenmektedir. Ancak, PW = 0,4 ve $V_z = 5,0$ durumunda, yüksek basınç farkı ve yüksek rotor hızı, basınç profillerini oldukça karmaşık hale getirmektedir. Fırça keçesinin giriş tarafında yüksek basınç birikimi, çıkış tarafında ise düşük basınç alanı belirginleşmektedir.

Şekil 6.8, çeşitli V_z ve PW koşullarında simülasyon alanındaki enerji dağılımını görselleştirmektedir. Grafik, renk skalası aracılığıyla enerji yoğunluğunun dağılımını ifade etmektedir. Koyu kırmızı düşük enerji yoğunluğunu, sarı ve beyaz ise yüksek enerji yoğunluğunu temsil etmektedir.

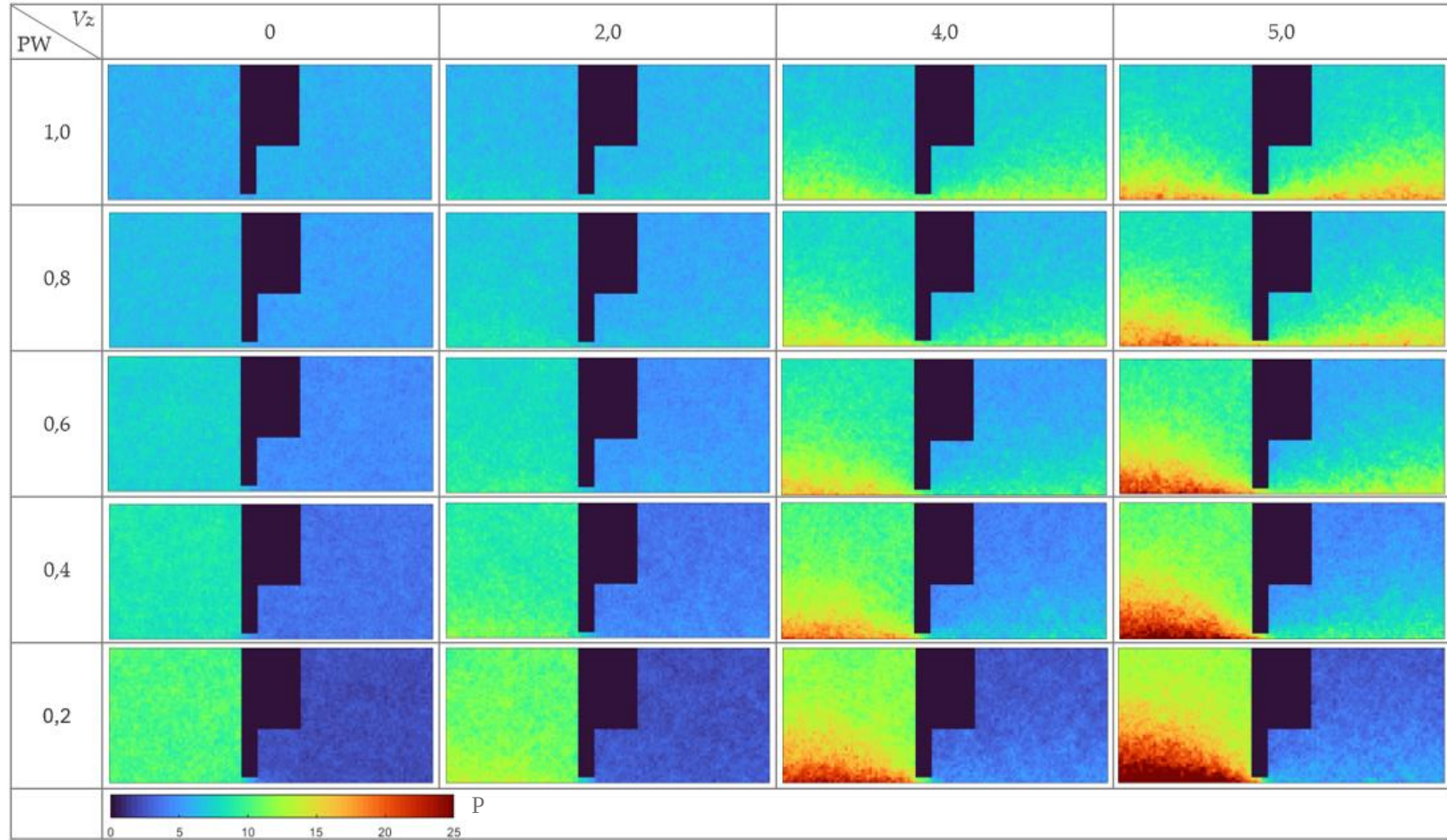
PW = 1,0 durumunda, enerji dağılımı homojendir. Koyu kırmızı tonlar, enerji yoğunluğunun düşük olduğunu göstermektedir. Bu durumda, rotor hızı düşük olduğunda enerji dağılımında büyük bir değişiklik gözlemlenmez. Ancak, basınç farkı arttıkça, enerji yoğunluğu fırça keçesi giriş bölgesinde (yüksek basınç tarafında) birikir.

$V_z = 0$ durumunda, enerji yoğunluğu yalnızca basınç gradyanına bağlıdır ve homojen bir dağılım sergiler. Bu durumda, enerji yoğunluğu düşük seviyede kalır ve sistemde büyük bir asimetri gözlenmez. Ancak, rotor hızlandıkça ($V_z = 2,0$ ve $4,0$), enerji yoğunluğu artmaya başlar ve özellikle fırça keçesi giriş bölgesinde enerji birikimi meydana gelir. Orta hızlarda enerji profili daha dengesiz bir hal alır ve asimetric enerji dağılımları gözlemlenir.

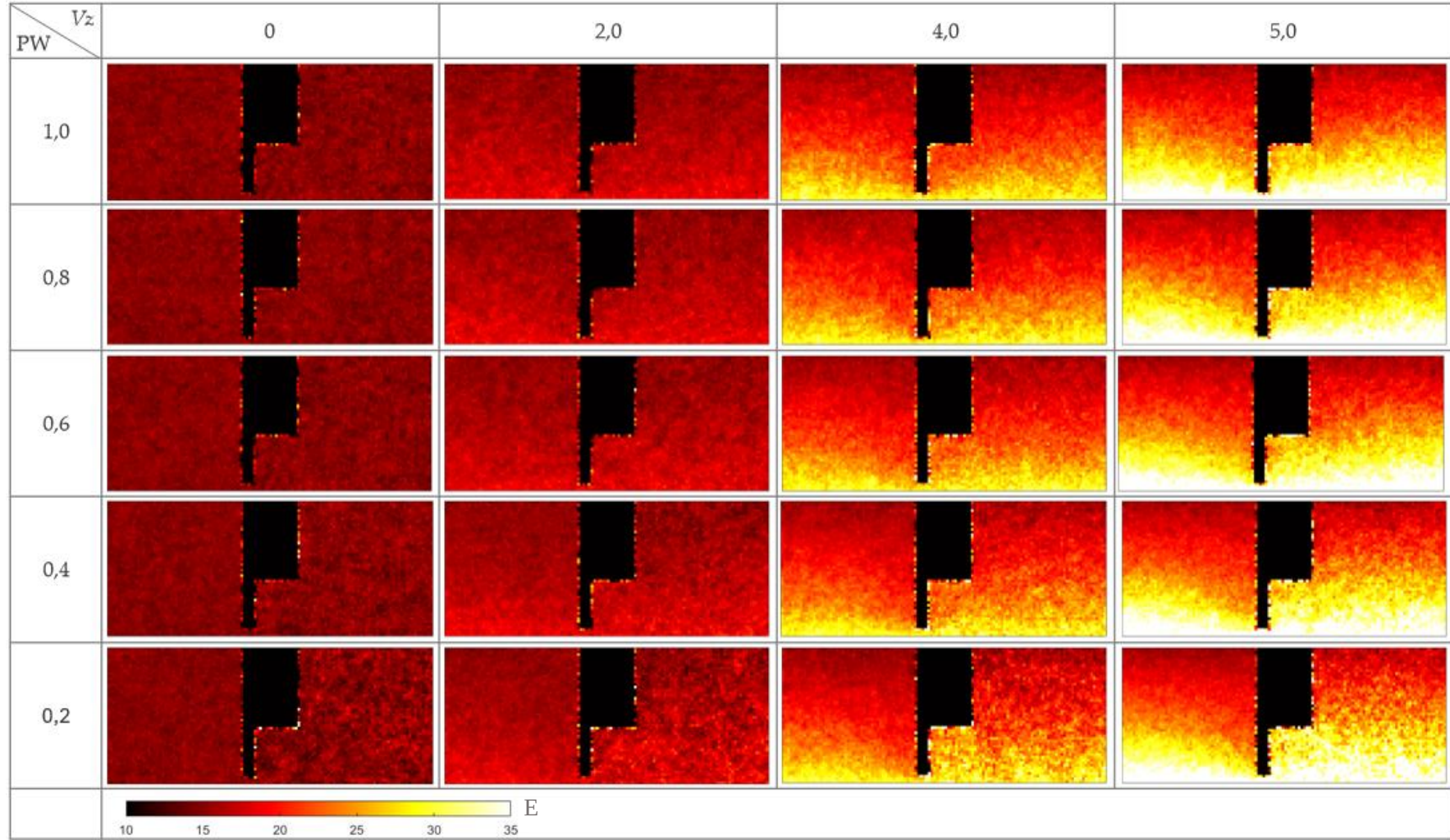
Şekil 6.8'de gözlemlenen sol duvardaki enerji birikimi, basınç gradyanının (PW) artışıyla moleküllerin bu bölgede sıkışması ve yoğunlaşmasından kaynaklanmaktadır.



Şekil 6.6: Çeşitli rotor hızı (V_z) ve basınç gradyanı (PW) koşullarında fırça keçesi analizlerinin molekül sayı yoğunluğu (n) dağılımı.



Şekil 6.7: Çeşitli rotor hızı (V_z) ve basınç gradyanı (PW) koşullarında fırça keçesi analizlerinin basınç (P) dağılımı.



Şekil 6.8: Çeşitli rotor hızı (V_z) ve basınç gradyanı (PW) koşullarında fırça keçesi analizlerinin enerji (E) dağılımı.

Özellikle $PW = 0.4$ gibi yüksek basınç gradyanı koşullarında, sol duvarda molekül birikimi artar ve moleküller arasındaki çarpışmalar kinetik enerji artar. Ayrıca, yüksek rotor hızları ($V_z = 5,0$) bu enerji yoğunluğunu daha da artırarak maksimum seviyelere ulaşmasına neden olmaktadır.

MATLAB yardımıyla çizilen **Şekil 6.6**, **Şekil 6.7** ve **Şekil 6.8**, basınç gradyanı (PW) ve rotor hızının (V_z) moleküler yoğunluk, basınç ve enerji dağılımı üzerindeki kritik etkilerini ortaya koymaktadır. Basınç gradyanı arttıkça, moleküllerin akışı sınırlandırılmakta ve özellikle fırça keçesi girişinde yoğunluk, basınç ve enerji birikimi oluşmaktadır. Bu etkiler, yüksek PW durumlarında daha homojen profiller oluştururken, düşük PW ve V_z koşullarında belirgin asimetrilere ve dalgalanmalara yol açmaktadır. Rotor hızının artışı, moleküllerin kinetik enerjisini artırarak yoğunluk dağılımlarını heterojenleştirmekte, basıncı yükseltmekte ve enerji birikimini maksimum seviyelere ulaştırmaktadır. Özellikle sol duvarda gözlemlenen enerji birikimi, basınç farkının ve rotor etkisinin birleşimiyle türbülanslı bir akış yapısına dönüşerek sistemin dinamiklerini güçlü bir şekilde değiştirmektedir.

Sistemin PW ve buna karşılık gelen basınç oranlarına olan tepkisinin incelenmesi **Şekil 6.6**, **Şekil 6.7** ve **Şekil 6.8** ile mümkün olmuştur. Burada basınç gradyanının artışı ile akış yukarı bölgede basınç artmakta ve fırça yüksek basınca maruz kalmaktadır. PW 'nin artması ile sistem, basıncın arttığı durumda ortaya çıkan tepkileri vermekte ve sonuçlar PW 'nin çalıştığını göstermektedir.

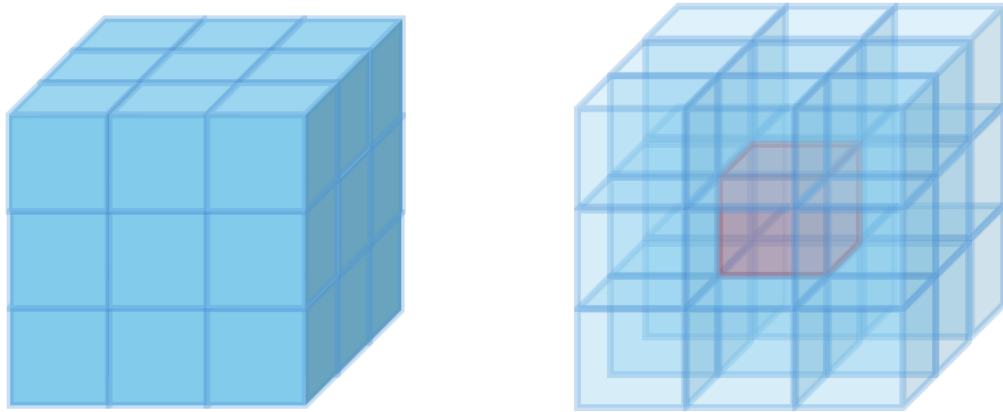
Bu bölümde özel akış problemlerinden biri olan fırça keçesinin MD simülasyonları gerçekleştirilmiştir. Basınç gradyanı ve rotor hızının fırça keçesi sistemlerindeki akış dinamiklerine etkilerini anlamaya yönelik bir inceleme yapılmıştır. Elde edilen sonuçlar, bu parametrelerin moleküler yoğunluk, basınç ve enerji dağılımında belirgin değişimlere neden olabileceğini göstermektedir. Özellikle basınç gradyanı arttığında molekül birikimi ve enerji yoğunluğunun fırça keçesi girişinde artış gösterdiği, rotor hızının ise bu etkileri daha da belirgin hale getirdiği gözlemlenmiştir. Gelecekte yapılacak araştırmalarda farklı geometriler, malzeme özellikleri ve akış koşulları dikkate alınarak elde edilen sonuçların kapsamı genişletilebilir. Bu bağlamda, çalışma mevcut tasarım ve analiz yaklaşımlarını anlamak için bir temel sunmakta ve MD simülasyonlarının fırça keçesi sistemlerindeki potansiyel uygulamalarını ortaya koymaktadır.

7. Çok Hücreli Moleküler Dinamik Simülasyonu Yönteminin Parallellleştirilmesi

MD, atomların ve moleküllerin zaman içerisindeki fiziksel hareketlerini modellemeyi amaçlayan, yoğun işlem gücü gerektiren bir hesaplama yöntemidir. Bu yöntem, fiziksel ve kimyasal sistemlerin dinamik davranışlarını anlamak için geniş bir kullanım alanına sahiptir. Ancak, MD simülasyonlarının yüksek işlem gücü gereksinimi, büyük ölçekli sistemlerde klasik hesaplama yöntemlerini yetersiz bırakabilmektedir. Paralel hesaplama tekniklerinin bu alandaki kritik rolü, hesaplama sürelerini önemli ölçüde kısaltarak bu zorluğun üstesinden gelinmesini sağlamaktadır.

Bu çalışmada, MD simülasyonlarının performansını artırmak için OpenMP kullanılmıştır. OpenMP, çok çekirdekli işlemci mimarilerinde paralel programlama yapmayı sağlayan güçlü bir API'dir ve iş yükünü işlemcinin tüm çekirdeklerine dağıtarak yüksek verimlilik sunmaktadır. Kapsamlı kütüphane desteği ve standartlara uyumu sayesinde, paralel hesaplama süreçlerinin uygulanabilirliğini kolaylaştırır ve optimize edilmiş performans sağlamaktadır.

Bu çalışmada, MD simülasyonlarında hesaplama hızını artırmak için Çok Hücreli Yöntem uygulanmıştır [68]. Bu yöntem, tüm hesaplama alanını küçük hücelere bölerek uzak moleküller arasındaki çarpışma olasılıklarını azaltmakta ve böylece hesaplama süresini optimize etmektedir. Bununla birlikte, moleküllerin birden fazla hücreyi geçebilmesi ve uzaktaki moleküllerle etkileşimde bulunabilmesi, simülasyonun doğruluğunu korumak için dikkatle ele alınmaktadır. **Şekil 7.1'**de temsili bir hesaplama alanı bulunmaktadır.



Şekil 7.1: Çok hücreli MD simülasyonunda temsili hücreler ve komşulukları.

Kırmızı renkle gösterilen bölgede iki molekül arasında bir çarpışma gerçekleştiğinde, bir sonraki olası çarpışma zamanı ve yeri hesaplanırken bu moleküllerle çevredeki 26 hücredeki moleküller de dikkate alınır. Bu yaklaşım, toplamda 27 hücrelik (bir merkez hücre ve 26 komşu hücresi) bir bölge için hesaplama yapılmasını gerektirmektedir.

7.1 OpenMP'nin Çok Hücreli Simülasyonlardaki Rolü

Bu çalışmada, çok hücreli MD simülasyonlarının paralelleştirilmesinde Fortran programlama dili ve OpenMP etkin bir şekilde kullanılmıştır. Fortran, dizilerle etkili çalışma kapasitesi ve bilimsel hesaplamalar için optimize edilmiş yapısıyla, yüksek işlem gücü gerektiren görevler için ideal bir dil olarak tercih edilmiştir. OpenMP ise, iş yükünü işlemcinin çekirdekleri arasında eşit şekilde dağıtarak paralel hesaplama süreçlerini hızlandırmıştır. OpenMP'nin paralelleştirme yetenekleri, birden fazla iş parçacığının aynı veri kümesi üzerinde eş zamanlı olarak çalışmasını mümkün kılarak, yoğun işlem gerektiren görevlerde verimliliği artırmıştır [134].

Hücre bazlı çarpışma hesaplamalarında, her bir hücrenin bağımsız çalışması sağlanmış ve bu hesaplamalar OpenMP'nin paralel döngü yönetimi ile optimize edilmiştir.

7.2 Kod Optimizasyonu ve Performans Artışı

OpenMP'nin bir diğer önemli avantajı, karmaşık kod tabanlarının kolayca optimize edilmesini sağlarken, bu süreçte donanım bilgisine olan ihtiyacı azaltmasıdır. Bu özellik, bilimsel hesaplamalarda yenilikçi çözümlerin geliştirilmesini hızlandırmakta ve daha büyük, karmaşık problemleri çözmek için avantaj sağlamaktadır. Özellikle MD simülasyonları gibi yoğun hesaplama gerektiren alanlarda, OpenMP kullanımı kritik bir rol oynamaktadır.

OpenMP'nin paralelleştirme süreçlerindeki en önemli yeteneklerinden biri, iş parçacığı (thread) yönetimi üzerinde sağladığı esnekliktir. Bu çalışmada, simülasyon sırasında kullanılan iş parçacığı sayısı, OpenMP'nin `omp_set_num_threads()` fonksiyonu ile ayarlanmıştır. Bu yöntem, donanımın fiziksel çekirdek kapasitesine uygun iş parçacığı ayarlarının yapılmasına olanak tanımış ve işlem gücünün tamamının verimli bir şekilde kullanılmasını sağlamıştır.

7.3 Performans Değerlendirmesi için Kullanılan Yöntem ve Formüller

Bu bölümde, paralel programlama performansını değerlendirmek için kullanılan temel metrikler ve hesaplama yöntemleri açıklanmıştır. Metrikler arasında hızlanma faktörü (speedup), verimlilik (efficiency) ve doğruluk (accuracy) değerlendirilmiştir [135], [136].

7.3.1 Hızlanma Faktörü (Speedup) Hesaplama Yöntemi

Hızlanma faktörü, paralel programın performansını ölçmek için temel bir metriktir. Seri bir programın çalışma süresi (t_{seri}) ile paralel bir programın çalışma süresi ($t_{paralel}$) arasındaki oran olarak hesaplanmaktadır.

$$\text{Hızlanma faktörü} = \frac{t_{seri}}{t_{paralel}} \quad (7.1)$$

Hızlanma faktörünü hesaplamak için öncelikle programın seri versiyonu çalıştırılarak t_{seri} değeri kaydedilir. Daha sonra, programın paralel versiyonu çalıştırılarak $t_{paralel}$ elde edilir. Son olarak, t_{seri} değeri $t_{paralel}$ değerine bölünerek hızlanma faktörü hesaplanır. Bu yaklaşım, seri ve paralel çalışma süreleri arasındaki farkı doğrudan ölçerek paralel programın etkisini değerlendirme olanağı sağlamaktadır. Örneğin, bir seri program 40 saniyede tamamlanırken, paralel program 10 saniyede tamamlanıyorsa, hızlanma faktörü 4 olarak bulunur. Bu, paralel programın seri programa göre 4 kat daha hızlı olduğunu ifade etmektedir.

7.3.2 Verimlilik (Efficiency) Hesaplama Yöntemi

Verimlilik (Efficiency), paralel bir programın işlemci çekirdeklerini ne kadar etkin bir şekilde kullandığını ölçmek için kullanılan bir metriktir. Bu metrik, hızlanma faktörünün (Speedup), kullanılan iş parçacığı sayısına (Thread Sayısı) oranlanmasıyla hesaplanmaktadır. Verimlilik, bir programın paralelleştirme sırasında işlem kaynaklarını ne kadar iyi kullandığını değerlendirmek için önemli bir göstergedir. Yüksek verimlilik, paralel programın işlemcileri etkili bir şekilde kullandığını ve performans kayıplarının az olduğunu ifade etmektedir.

$$\text{Verimlilik} = \frac{\text{Hızlanma faktörü}}{\text{Thread sayısı}} \quad (7.2)$$

Hesaplama işlemi, öncelikle hızlanma faktörünün bulunmasıyla başlar. Bu değer, seri ve paralel çalışma sürelerinden elde edilir. Ardından, paralel programda kullanılan toplam iş parçacığı sayısı belirlenir. Son olarak, hızlanma faktörü iş parçacığı sayısına bölünerek verimlilik değeri elde edilir. Örneğin, bir programın hızlanma faktörü 4 ve kullanılan iş parçacığı sayısı 16 ise, verimlilik Denklem 7.3'te görüldüğü gibi %25 olarak hesaplanır.

$$\text{Verimlilik} = \frac{\text{Hızlanma faktörü}}{\text{Thread sayısı}} = \frac{4}{16} = 0,25 \text{ (\%25)} \quad (7.3)$$

Bu sonuç, paralel programın işlemcilerin çeyreğini etkili bir şekilde kullandığını göstermektedir.

Verimlilik, paralel programların optimizasyonunda kritik bir ölçüt olarak değerlendirilmektedir ve sistemin performansını artırmak için kullanılabilecek alanları belirlemek adına önemli bir rol oynamaktadır.

7.4 Test Planı

Bu bölümde, paralel programlama performansını değerlendirmek için yapılacak testlerin kapsamı, amaçları ve uygulanacak parametreler detaylandırılmıştır. Testler, farklı hücre sayıları, molekül sayıları ve iş parçacığı sayılarının program performansı üzerindeki etkilerini incelemek amacıyla tasarlanmıştır.

7.4.1 Test 1: İş Parçacığı Sayısına Göre Performans Analizi

Bu test, simülasyonda kullanılan iş parçacığı sayısındaki artışın paralel programlama performansı üzerindeki etkisini değerlendirmek için tasarlanmıştır. Amaç, farklı iş parçacığı sayılarıyla paralel programın hızlanma faktörü ve verimlilik üzerindeki etkilerini analiz etmektir. İş parçacığı sayısının artırılması, teorik olarak paralel işlemlerin daha kısa sürede tamamlanmasını sağlar. Ancak, iş parçacığı sayısındaki artışın performansa olan etkisinin her zaman doğrusal bir şekilde ilerlemeyeceği göz önüne alınmalıdır.

Bu testte, sabit bir hücre sayısı (1600 hücre) kullanılacaktır ve 400.000 molekül üzerinde analiz yapılacaktır. İş parçacığı sayıları sırasıyla 1, 4, 8, 16, 27 ve 32 olarak artırılacaktır. Her iş parçacığı sayısında paralel program çalıştırılarak aşağıdaki kriterlere göre ölçümler yapılacaktır:

- **Hızlanma Faktörü (Speedup):** İş parçacığı sayısındaki artışla birlikte paralel programın hızlanma düzeyi analiz edilecektir. Teorik olarak, iş parçacığı sayısının artması hızlanma faktöründe bir artış sağlamalıdır. Ancak, iş yükü dağılımındaki dengesizlikler veya veri transfer maliyetleri bu artışı sınırlayabilir.
- **Verimlilik (Efficiency):** Paralel işlemlerde çekirdeklerin ne kadar etkili kullanıldığı hesaplanacaktır. İş parçacığı sayısı arttıkça, verimliliğin düşmesi beklenebilir çünkü her ek iş parçacığı, daha fazla kaynak paylaşımına ve potansiyel işlem kayıplarına neden olabilir.

Bu test, paralel programların ölçeklenebilirliğini ve iş parçacıklarının paralel işlemler üzerindeki etkisini anlamak için önemli bir yere sahiptir. Sonuçlar, iş parçacığı sayısının performans üzerindeki etkisini analiz ederek, paralel programların hangi iş parçacığı sayılarına kadar etkili bir şekilde ölçeklenebileceğini belirlemeye yardımcı olacaktır. Örneğin, belirli bir noktadan sonra, iş parçacığı sayısındaki artışın hızlanma üzerinde sınırlı bir etkisi olduğu görülebilir. Bu, paralel programın optimizasyon sürecinde dikkate alınması gereken önemli bir faktördür.

7.4.2 Test 2: Hücre Sayısına Göre Performans Analizleri

Bu test, MD simülasyonlarında kullanılan hücre sayısının paralel programlama performansı üzerindeki etkisini değerlendirmek için tasarlanmıştır. Amaç, hücre sayısının artırılmasıyla paralel işlem sürelerinin, hızlanma faktörünün, verimliliğin ve hafıza kullanımı üzerindeki değişimini analiz etmektir. Hücre sayısının artışı, veri paralelleştirme sürecini etkileyen önemli bir faktördür, çünkü daha fazla hücre, işlem birimlerinin daha küçük ve bağımsız iş yükleri üzerinde çalışmasını sağlamaktadır. Ancak, bu durum aynı zamanda bellek tüketiminde artışa ve iletişim gecikmelerine neden olabilir.

Bu testi gerçekleştirmek için, simülasyonda sabit bir molekül sayısı (400.000) kullanılacaktır. Test boyunca, hücre sayıları sırasıyla 800, 1600, 3200, 6400, 12800 ve

25600 olacak şekilde artırılacaktır. Her hücre sayısında program hem seri hem de paralel olarak çalıştırılacak ve aşağıdaki kriterlere göre ölçümler yapılacaktır:

- **Hızlanma Faktörü (Speedup):** Hücre sayısının artışıyla paralel programın seri programa göre ne kadar hızlandığı hesaplanacaktır. Hücrelerin daha küçük ve bağımsız iş yükleri sağlamasıyla hızlanma faktöründe artış beklenmektedir.
- **Verimlilik (Efficiency):** İş parçacığı sayısı sabitken hücre sayısının artışının paralel işlemlerin etkinliğine etkisi analiz edilecektir. Bu ölçüm, işlemcilerin mevcut kaynakları ne kadar verimli kullandığını anlamaya yardımcı olacaktır.
- **Hafıza Kullanımı (Memory Usage):** Hücre sayısı arttıkça, toplam bellek gereksinimi artabilir. Bu nedenle, hücrelerin bellek üzerindeki yükü analiz edilerek paralel hesaplamaların bellek kullanımına etkisi değerlendirilecektir.

Test sonuçları, hücre sayısındaki artışın paralel programlama üzerindeki avantajlarını ve sınırlamalarını daha iyi anlamamıza olanak sağlayacaktır. Örneğin, düşük hücre sayılarında iş yükü dengesi iyi sağlanamayabilir ve bu durum hızlanma faktörünü olumsuz etkileyebilir. Bu testin sonuçları, paralel programlama optimizasyonu için hücre sayısının ideal bir şekilde nasıl seçilebileceğini belirlemek açısından bir öneme sahiptir.

7.4.3 Test 3: Molekül Sayısına Göre Performans Analizleri

Bu test, simülasyonda kullanılan molekül sayısındaki artışın paralel programlama performansına etkisini değerlendirmek için tasarlanmıştır. Testin temel amacı, veri yoğunluğundaki artışın paralel programlama üzerindeki etkilerini analiz etmek ve artan veri yükü altında programın doğruluğunu ve performansını değerlendirmektir. Molekül sayısının artması, paralel programın işleme sürelerini artırabilir ve bu durum hızlanma faktörü üzerinde önemli etkiler oluşturabilir.

Test sırasında, hücre sayısı sabit tutulacak (1600 hücre), ancak simülasyonda kullanılan molekül sayıları kademeli olarak artırılacaktır. Molekül sayısı için belirlenen değerler sırasıyla 200.000, 400.000, 800.000 ve 1.600.000'dir. Her bir molekül sayısında hem seri hem de paralel program çalıştırılarak aşağıdaki kriterlere göre analiz yapılacaktır:

- **Hızlanma Faktörü (Speedup):** Molekül sayısının artışıyla paralel programın seri programa kıyasla ne kadar hızlandığı hesaplanacaktır. Molekül sayısındaki artış, paralel işlemlerin ölçeklenebilirliğini test etmek açısından önemlidir.
- **Verimlilik (Efficiency):** Molekül sayısının artışın verimlilik üzerindeki etkisi incelenecektir.

Bu test, paralel programın yüksek veri yoğunluğu altında ne kadar etkili çalıştığını değerlendirmek için önemlidir. Sonuçlar, paralel programların büyük veri kümeleriyle çalışırken nasıl optimize edilebileceği konusunda bilgi sağlayacaktır.

7.5 Paralel ve Seri Hesaplamaların Karşılaştırmalı Performans Değerlendirmesi

Bu bölümde, paralel programlama performansını değerlendirmek amacıyla gerçekleştirilen testlerden elde edilen veriler sunulmaktadır. Seri ve paralel programların farklı koşullar altındaki davranışlarını analiz etmek için belirlenen üç temel parametre olan hücre sayısı, molekül sayısı ve iş parçacığı sayısı üzerinde ölçümler gerçekleştirilmiştir. Her bir testte, seri ve paralel çalışma süreleri, hızlanma faktörü, verimlilik ölçülmüştür. Elde edilen veriler sistematik bir şekilde düzenlenerek tablolar ile sunulmuştur. Bu analizler, paralelleştirme süreçlerinin performans üzerindeki etkilerini ortaya koymaktadır.

7.5.1 Test 1: İş Parçacığı Sayısına Göre Performans Analizleri

Bu bölümde, paralel programın performansı, kullanılan iş parçacığı sayısına bağlı olarak değerlendirilmiştir. Simülasyonlar, 400.000 molekül ve 1.600 hücre kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Ayrıca, her bir molekül için yaklaşık 10 cpp gerçekleştirilmiştir. Analiz, iş parçacığı sayısındaki artışın, hesaplama sürelerini ne derece kısalttığını ve verimlilik üzerinde nasıl bir etkisi olduğunu ortaya koymaktadır.

Tablo 7.1’de, kullanılan iş parçacığı sayısının hızlanma faktörü ve verimlilik üzerindeki etkileri sunulmaktadır. Seri programın hesaplama süresi temel alınarak, paralel çalıştırmalar sırasında elde edilen hızlanma faktörü ve verimlilik oranları hesaplanmıştır.

Tablo 7.1: İş parçacığı sayısının paralel hesaplama performansı üzerindeki etkisi.

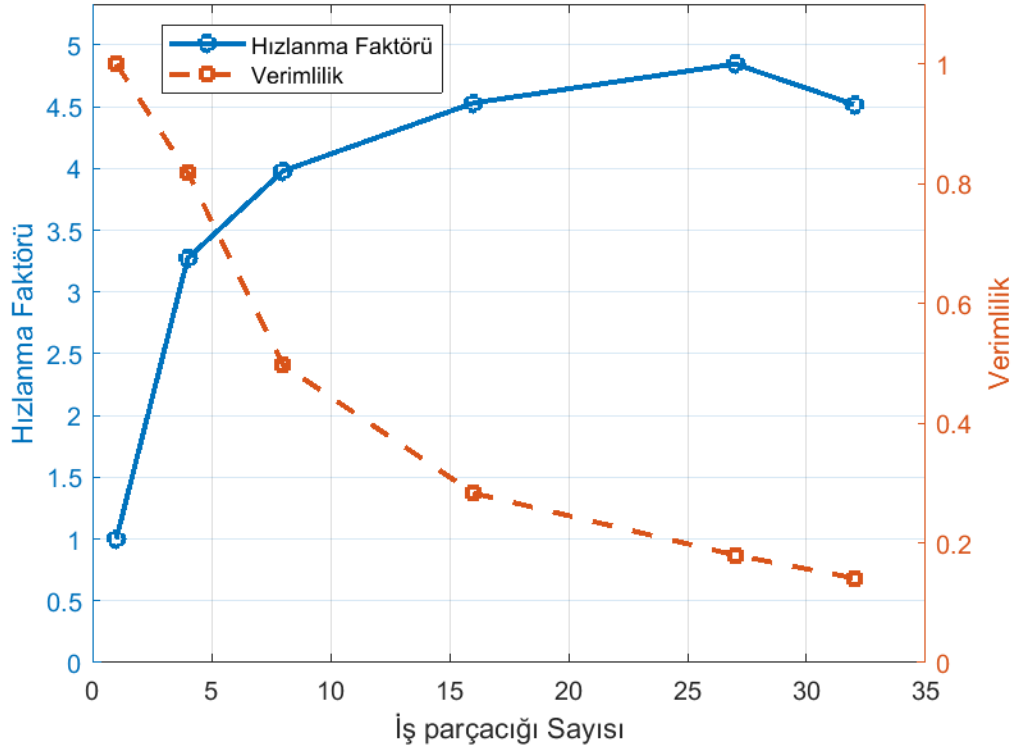
İş parçacığı Sayısı	Seri Süre (s)	Paralel Süre (s)	Hızlanma Faktörü	Verimlilik (%)
1	1735	1735	1	100
4	1735	530	3,28	81,89
8	1735	436	3,98	49,73
16	1735	383	4,53	28,29
27	1735	358	4,85	17,93
32	1735	384	4,52	14,13

Burada elde edilen sonuçlar, paralel hesaplamalarda iş parçacığı sayısındaki artışın başlangıçta belirgin bir hızlanma sağladığını, ancak 27 iş parçacığından sonra bu artışın sınırlı kaldığını ve hatta düşüş gösterdiğini açıkça ortaya koymaktadır. 27 iş parçacığında hızlanma faktörü 4,85 ile en yüksek seviyeye ulaşmıştır. Ancak, 32 iş parçacığına geçildiğinde hızlanma faktörü 4,52'ye gerilemiştir. Literatürde, MD simülasyonlarının paralelleştirilmesi sonucunda, 8 iş parçacığı ile yaklaşık 5,7 kat, 16 iş parçacığı ile ise yaklaşık 11 kat hızlanma sağlandığı belirtilmiştir [137]. Ancak bu çalışmada, programda çok sayıda veri toplama işlemi bulunmaktadır ve bu işlemler paralelleştirilemediği için elde edilen hızlanmayı kısıtlamaktadır.

27 iş parçacığı, hücre sayısı ile iş parçacığı sayısının ideal bir şekilde eşleştiği noktadır. Bu noktada hızlanma faktörü maksimum seviyeye ulaşmıştır çünkü her iş parçacığı bir hücreye atanarak paralel hesaplama en verimli şekilde gerçekleştirilmiştir. Ancak, 27'nin üzerine çıkıldığında, ek iş parçacıkları hücrelerle doğrudan ilişkilendirilememiş ve bu durum, çekirdeklerin boşta kalması veya veri transferi ve senkronizasyon maliyetlerinin artmasına neden olmuştur. Bu durum, hızlanma faktöründeki azalmayı ve verimlilikteki düşüşü açıklamaktadır.

4 iş parçacığında %81,98 verimlilik ile en yüksek verim elde edilmiştir. Bu durum, iş parçacığı sayısının başlangıçta hızlanma üzerinde etkili olduğunu, ancak iş parçacığı sayısı arttıkça verimlilikte düşüş yaşandığını açıkça göstermektedir.

Şekil 7.2'de farklı iş parçacığı sayılarıyla hızlanma faktörü ve verimlilik arasındaki ilişkiyi göstermektedir. X eksenini iş parçacığı sayısını ifade ederken, sol Y eksenini hızlanma oranını ve sağ Y eksenini ise verimliliği göstermektedir.



Şekil 7.2: İş parçacığı sayısına göre hızlanma oranı ve verimlilik analizi.

Hızlanma faktörü (mavi çizgi), thread sayısı arttıkça başlangıçta hızlı bir artış göstermektedir. Ancak belirli bir noktadan sonra (örneğin, 8-16 thread arasında) artış hızında bir yavaşlama gözlemlenmektedir. Bu durum, paralel programlamada yaygın olarak görülen Amdahl Yasası ile açıklanabilir; sistemin seri kalan kısmı hızlanmayı sınırlamaktadır [138], [139].

Verimlilik (turuncu kesikli çizgi), hızlanma faktörünün iş parçacığı sayısına bölünmesiyle hesaplanır ve iş parçacığı sayısı arttıkça düşüş eğilimi göstermektedir. Bu, paralel çalışmanın getirdiği ek yükler (overhead) ve kaynakların tam verimli kullanılamaması ile ilişkilidir. Başlangıçta yüksek olan verimlilik, iş parçacığı sayısı arttıkça önemli ölçüde azalmaktadır.

Grafik genel olarak, paralel programlamada iş parçacığı sayısının performansa etkisini vurgulamaktadır. Daha fazla iş parçacığı eklemek başlangıçta performansı arttırsa da, belirli bir noktadan sonra hızlanma oranında sınırlı bir artış, hatta duraklama,

verimlilikte ise ciddi bir düşüş gözlemlenmektedir. Bu durum, paralel işlemlerin sınırlamalarını ve sistem kaynaklarının tam kapasite kullanımı ile ilgili sorunları açık bir şekilde ortaya koymaktadır.

7.5.2 Test 2: Hücre Sayısına Göre Performans Analizleri

Bu testte, 400.000 molekül ve 8 iş parçacığı kullanılarak, farklı hücre sayılarına göre paralel hesaplama performansı değerlendirilmiştir. Hücre sayıları sırasıyla 800, 1.600, 6.400, 12.800, 25.600 ve 51.200 olarak seçilmiş ve her bir molekül için 10 cpp gerçekleştirilmiştir. Analizlerde, hücre sayısı arttıkça paralel hesaplamaların hızlanma faktörü, verimlilik ve bellek kullanımı üzerindeki etkileri değerlendirilmiştir.

Elde edilen sonuçlar, **Tablo 7.2**'de verilmiştir.

Tablo 7.2: Hücre sayısının paralel hesaplama performansı üzerindeki etkisi.

Hücre Sayısı	Seri Süre (s)	Paralel Süre (s)	Hızlanma Faktörü	Verimlilik (%)	Bellek Kullanımı (MB)
800	2847	760	3,75	46,85	57
1.600	1735	436	3,98	49,73	102
6.400	337	124	2,71	33,88	982
12.800	192	75	2,55	31,96	3.796
25.600	107	44	2,43	30,37	15.050
51.200	68	32	2,13	26,62	60.030

Hücre sayısı arttıkça, seri süreler belirgin şekilde azalmaktadır. Örneğin, 800 hücrede 2847 saniye olan seri süre, 12.800 hücrede 192 saniyeye kadar düşmüştür. Bu, hücre sayısının artırılmasıyla hesaplama alanının daha küçük birimlere bölünmesi ve iş yükünün azaldığını göstermektedir.

Paralel sürelerde de benzer bir azalma gözlemlenmiştir. Ancak, hücre sayısı 6.400'den 12.800'e çıktığında paralel sürelerdeki düşüş sınırlı kalmıştır (124 saniyeden 75 saniyeye). Bu, artan hücre sayısı ile birlikte veri transfer maliyetlerinin etkisini göstermektedir.

Hızlanma faktörü, hücre sayısındaki artışla başlangıçta önemli bir iyileşme gösterse de hücre sayısı belirli bir seviyeyi aştığında düşüşler yaşanmıştır. 800 hücre kullanıldığında hızlanma faktörü 3,75 olarak hesaplanmış ve paralel hesaplamaların etkili bir şekilde çalıştığını göstermiştir. Hücre sayısının 1.600'e çıkarılması, hızlanma faktörünü 3,98'e yükselterek optimum seviyeye ulaşılmasını sağlamıştır. Ancak, 6.400 hücre kullanıldığında hızlanma faktörünün 2,71'e düşüğü görülmüştür. 12.800 hücre seviyesinde ise hızlanma faktörünün 2,55'e gerilemesi, ölçeklenebilirlik sınırlarının aşıldığını ve artan koordinasyon ihtiyaçlarının hızlanmayı daha da sınırladığını işaret etmektedir.

Hücre sayısındaki artışın, verimlilik üzerinde belirgin etkileri olmuştur. 800 hücre ile elde edilen %46,85'lik verimlilik, sistemin etkili bir şekilde çalıştığını göstermiştir. 1.600 hücre kullanıldığında verimlilik %49,73'e yükselerek maksimum değere ulaşmıştır. Bu durum, paralel hesaplama için hücre sayısının uygun bir şekilde bölünmesini sağlamıştır. Ancak, hücre sayısının 6.400'e çıkarılmasıyla verimlilik %33,88'e, 12.800 hücre ile %31,96'ya, 25.600 hücre ile %30,37'ye düşmüştür.

Hücre sayısındaki artış, bellek kullanımını da önemli ölçüde artırmıştır. 800 hücre kullanıldığında yalnızca 57 MB bellek tüketilmişken, bu değer 1.600 hücre ile 102 MB'a çıkmıştır. 6.400 hücre kullanıldığında bellek kullanımı 982 MB'a yükselmiş ve kaynak tüketiminde önemli bir artış yaşanmıştır. 12.800 hücre seviyesinde bellek kullanımı 3.796 MB'a, 25.600 hücre seviyesinde ise bellek kullanımı 15.050 MB'a ulaşmıştır. 51.200 hücreye çıkıldığında ise bellek kullanımı yaklaşık 60GB'a ulaşarak önemli bir artış göstermiştir. Mevcut örüntü göz önünde bulunduğunda hücre sayısı iki katına çıktığında bellek kullanımının dört katına çıkacağı ön görülmektedir. Bu da elimizdeki bilgisayar kapasitesinin önüne geçeceğinden dolayı bu değerlendirme gerçekleştirilememiştir. Bu durum, artan hücre sayısının hafıza gereksinimlerini artırarak işlemlerin kaynak tüketimi üzerindeki etkisini ortaya koymaktadır.

7.5.3 Test 3: Molekül Sayısına Göre Performans Analizleri

Bu testte, paralel hesaplama performansı, farklı molekül sayıları kullanılarak detaylı bir şekilde analiz edilmiştir. Simülasyonlar, 200.000, 400.000, 800.000 ve 1.600.000 molekül ile gerçekleştirilmiş ve her bir test, 8 iş parçacığı ve 1.600 hücre yapılandırmasıyla uygulanmıştır.

Tablo 7.3'te gösterildiği gibi, 1.600 hücre, tüm molekül yoğunluklarında dengeli bir performans sunmuştur. Seri çalıştırmalara kıyasla paralel hesaplama, hızlanma faktörü açısından önemli iyileştirmeler sağlamıştır. Örneğin, 1.600.000 molekül için hızlanma faktörü 4,01 olarak ölçülmüş, bu da paralel hesaplamanın etkili bir çözüm sunduğunu göstermektedir. 8 iş parçacığı kullanımı, mevcut yapılandırma için uygun bir hızlanma ve verimlilik sağlamıştır. Daha fazla iş parçacığı kullanılması, özellikle yüksek molekül sayılarında performans iyileştirme potansiyeli taşımaktadır.

Tablo 7.3: Molekül sayısının paralel hesaplama performansı üzerindeki etkisi.

Molekül Sayısı	Seri Süre (s)	Paralel Süre (s)	Hızlanma Faktörü	Verimlilik (%)
200.000	870	220	3,95	49,38
400.000	1735	436	3,98	49,73
800.000	3460	990	3,49	43,63
1.600.000	26912	6716	4,01	50,09

7.6 Özel Akış Problemlerinin Çözümlerinde Paralel Programlamanın Etkisi

Bu tez kapsamında, çeşitli özel akış problemlerine yönelik çok sayıda MD simülasyonu gerçekleştirilmiştir. Simülasyonların paralel programlama yöntemleri kullanılarak optimize edilmesi sayesinde hesaplama sürelerinde önemli ölçüde iyileştirmeler sağlanmıştır. Paralel programlama, yoğun işlem gerektiren bu tür simülasyonların çözüm sürelerini kısaltarak, daha büyük ve karmaşık problemlerin verimli bir şekilde analiz edilmesine olanak tanımıştır. Bu gelişmeler, özellikle uzun süreli ve geniş ölçekli simülasyonlarda hesaplama performansını artırarak, daha detaylı ve doğru sonuçlar elde edilmesini mümkün kılmıştır. Bu bağlamda, çalışmada kullanılan paralel hesaplama teknikleri, MD simülasyonlarının bilimsel ve mühendislik uygulamalarındaki rolünü güçlendirmiştir. **Tablo 7.4**'te bu çalışmada gerçekleştirilen simülasyonların seri ve paralel sürelerinin karşılaştırması verilmiştir. Bu analizler, her bir simülasyonun 10 cpp'ye kadar olan sürelerini kapsamaktadır ve

seri ile paralel alıřtırmalar arasındaki performans farklarını detaylı řekilde ortaya koymaktadır.

Tablo 7.4: Bu alıřmada gerekleřtirilen simlasyonların seri ve paralel srelerinin karřılařtırması.

Simlasyon	Seri Sre (s)	Paralel Sre (s)	Hızlanma Faktr	Verimlilik (%)	Bellek Kullanımı (MB)
Couette	87	38	2,29	28,63	961
řok Tp	97	34	2,85	35,63	3.775
Fıra kee	75	37	2,03	25,38	13.232

Paralel hesaplamalar, her  simlasyon trnde de seri alıřtırmalara gre anlamlı bir hızlanma saėlamıřtır. En yksek hızlanma faktr, řok Tp simlasyonunda (2,85) elde edilmiřtir. Verimlilik deėerleri ise %25 ile %36 arasında deėiřmekte olup, en yksek verimlilik řok Tp simlasyonunda gzlemlenmiřtir.

Bellek tketimi, simlasyon trne baėlı olarak nemli lde farklılık gstermiřtir. En yksek bellek kullanımı Fıra Kee simlasyonunda (13.232 MB) kaydedilmiřtir.

8. SONUÇ

Bu çalışmada, mikro ve nano ölçeklerdeki gaz dinamiği problemlerinin çözümünde MD simülasyonlarının sağladığı katkılar ve etkiler detaylı bir şekilde incelenmiştir. Geleneksel Navier-Stokes denklemlerinin yetersiz kaldığı bu boyutlarda, MD simülasyonları, gazların karmaşık davranışlarını anlamada güçlü bir araç olarak öne çıkmış ve bilimsel ile mühendislik alanlarında daha derin bir anlayış geliştirilmesine olanak tanımıştır. MD simülasyonlarının, mikro/nano ölçekli sistemlerin karmaşık fiziksel süreçlerini detaylı bir şekilde modelleme kapasitesi, bu yöntemleri geleneksel yaklaşımların ötesine taşıyan önemli bir avantajdır.

Çalışma kapsamında, gazların farklı fiziksel koşullar altında nasıl davrandığı analiz edilmiş ve sıcaklık, basınç ile hız parametrelerinin birleşik etkilerinin mikro ve nano ölçekli akışkan mekanikleri üzerindeki temel dinamikleri detaylandırılmıştır. Özellikle, Knudsen sayısının yüksek olduğu bölgelerde MD simülasyonları, enerji ve momentum transferlerini başarılı bir şekilde modellemiştir. Bu modellemeler, yalnızca fiziksel parametrelerin etkilerini ortaya koymakla kalmamış, aynı zamanda bu etkilerin mikroakışkan cihazların performans iyileştirilmesine nasıl katkıda bulunabileceğini de göstermiştir.

Bu çalışmada, çeşitli akış problemlerinin farklı gazlarla, istenilen saflıkta, zamana bağlı, 3-boyutlu, sıkıştırılabilir akışkanlar dinamiği analizlerinin MD ile çözümü yapılmıştır. Akış yönündeki periyodik sınır koşulları, kabul-red şeması geliştirilerek yeniden düzenlenmiş ve bu sayede yoğunluk farklarına bağlı olarak basınç gradyanının yönlendirdiği akışlar modellenmiştir. PW parametresi 0,8 iken basınç oranlarına bakıldığında Couette akışında bu oran 1,1 iken, fırça keçesinde 1,2 elde edilmiştir. Aynı şekilde PW parametresi 0,6 iken Couette akışında bu oran 1,2 iken, fırça keçesinde 1,6 elde edilmiştir. Bu durum, uygulanacak basıncın bilindiği durumlarda moleküler dinamik ve basınç gradyanının zayıf yönünü göstermektedir. İstenilen basınç değerine ulaşmak için PW optimize edilmelidir. Couette akışı ve fırça keçesi akışının basınç gradyanı altındaki tepkileri incelendiğinde basınç gradyanı yaklaşımının çalıştığı ortaya konmuştur.

8.1 Simülasyon Sonuçları

Bu çalışmada, MD simülasyonları kullanılarak üç farklı akış problemi detaylı bir şekilde incelenmiştir. Mikro ve nano ölçeklerde gaz dinamiklerinin karmaşık doğasını anlamaya yönelik bu araştırmada, Couette ve Poiseuille akışları, şok tüplerindeki gaz davranışları ve fırça keçesi sistemlerindeki akış karakteristikleri ele alınmıştır. Her bir problem, gazların fiziksel parametreleri, sınır koşulları ve dinamik etkileşimleri açısından analiz edilmiş ve bu süreçlerin mühendislik uygulamalarına yönelik çıkarımları değerlendirilmiştir. Bu analizler, yalnızca teorik anlayışa katkı sağlamakla kalmamış, aynı zamanda pratik mühendislik uygulamaları için de önemli referanslar oluşturmuştur.

8.1.1 Basınç Gradyanlı Couette Akışının Moleküler Dinamik Simülasyonu ile İncelenmesi

Bu çalışmada, monatomik bir gazın MD simülasyonları, Couette ve Poiseuille akışlarının çok hücreli sert küre yöntemi kullanılarak detaylı bir şekilde incelenmiştir. Simülasyonlar, duvar hızları, basınç gradyanları ve duvar sıcaklıklarının birleşik etkilerini kapsamlı bir şekilde analiz etmiş; nano kanallarda ses altı, transonik ve ses üstü hızlara ulaşılabileceğini göstermiştir. Ayrıca, akış yönündeki periyodik sınır koşulları, kabul-red şeması geliştirilerek yeniden düzenlenmiş ve bu sayede yoğunluk farklarına bağlı olarak basınç gradyanının yönlendirdiği akışlar daha gerçekçi bir şekilde modellenmiştir. Bu bulgular, sıcaklık ve hız kaymalarının yalnızca ilgili parametrelere değil, aynı zamanda basınç gradyanının büyüklüklerine de bağlı olduğunu ortaya koymuş, yüksek ve düşük Knudsen sayılarına sahip nano kanallarda gazların farklı fiziksel davranışlarını anlamaya yönelik bilgiler sağlamıştır.

8.1.2 Şok Tüpü Analizlerinin Moleküler Dinamik Simülasyonu ile İncelenmesi

Bu çalışmada, bir diğer özel akış problemi olan şok tüpünde monatomik moleküllerin davranışı MD yöntemleri kullanılarak detaylı bir şekilde incelenmiştir. Şok tüpleri, gazların yüksek sıcaklık ve basınç altında nasıl davrandığını anlamak için önemli bir araç sunmaktadır. Bu bağlamda, helyum (He) ve argon (Ar) gazlarının yanı sıra bu iki gazın karışımları üzerinde yapılan simülasyonlar, molekül sayı yoğunluğu, enerji seviyeleri ve akış profilleri gibi temel parametrelerin detaylı bir şekilde analiz

edilmesine olanak tanımıştır. Araştırma, monatomik moleküllerin şok dalgalarıyla olan etkileşimlerini ve bu etkileşimlerin moleküllerin hız, enerji ve yoğunluk dağılımları üzerindeki etkilerini incelemiştir. Elde edilen bulgular, monatomik moleküllerin şok dalgaları altında sergilediği davranışları ortaya koyarken, aynı zamanda gelecekteki araştırmalara bir referans sunmayı amaçlamaktadır.

8.1.3 Fırça Keçelerin Moleküler Dinamik Simülasyonu ile İncelenmesi

Bu çalışmada bir diğer akış problemi olarak fırça keçesi sistemlerinin mikro ve nano ölçeklerdeki gaz dinamikleri, MD simülasyonları ile incelenmiştir. Simülasyonlar, farklı rotor hızları ve basınç gradyanı koşullarının molekül sayı yoğunluğu, basınç dağılımı ve enerji transferi üzerindeki etkilerini analiz etmiştir. Çalışma boyunca, fırça keçesi sistemlerinin akış dinamiklerini anlamada önemli bir parametre olan rotor hızının gaz molekülleri üzerindeki etkisi şekilde değerlendirilmiştir. Aynı zamanda, basınç gradyanı değişimlerinin gazın akış karakteristiklerini nasıl şekillendirdiği belirlenmiştir. Sonuçlar, rotor hızındaki artışın moleküler dağılımı ve enerji transferini artırarak fırça keçesi mekanizmalarının verimliliğini etkilediğini göstermiştir. Benzer şekilde, basınç gradyanı değişimlerinin moleküler etkileşimleri ve yoğunluk profillerini önemli ölçüde etkilediği görülmüştür. Bu bulgular, fırça keçelerinin mikro/nano akışkan sistemlerde enerji transferi ve viskozite yönetiminde kritik bir rol oynadığını doğrulamaktadır. Çalışma, fırça keçesi sistemlerinin mühendislik tasarımlarında enerji optimizasyonu ve akış kontrolü için uygulanabilir çözümler sunma potansiyeline işaret etmektedir.

8.2 Paralel Programlama ve Performans Analizleri

Bu çalışmada, çok hücreli MD simülasyonlarının performansını artırmak amacıyla OpenMP kullanılarak paralelleştirme yöntemleri uygulanmıştır. MD simülasyonları, doğası gereği yoğun işlem gücü gerektiren ve seri yöntemlerle büyük ölçekli sistemlerde yetersiz kalan hesaplama süreçlerini içermektedir. Bu nedenle, paralel hesaplama teknikleri, işlem sürelerini kısaltmak ve mevcut çok çekirdekli işlemcilerin kapasitesinden daha yüksek verim almak için kritik bir rol oynamıştır.

Hızlanma faktörü, verimlilik ve bellek kullanımı gibi temel metrikler dikkate alınarak paralel programlama tekniklerinin etkisi kapsamlı bir şekilde değerlendirilmiştir.

Hızlanma faktörü, paralel programların seri programlara kıyasla ne kadar hızlı çalıştığını gösterirken, verimlilik, kullanılan işlemci çekirdeklerinin ne derece etkin kullanıldığını ortaya koymuştur. Çalışmada elde edilen sonuçlar, paralelleştirmenin işlem sürelerini belirgin şekilde azalttığını ve verimliliği artırdığını göstermiştir.

OpenMP'nin paralelleştirme yetenekleri sayesinde hesaplama yükü yoğun döngüler, çok çekirdekli işlemciler üzerinde eş zamanlı olarak çalıştırılmıştır. Bu kapsamda çok hücreli MD simülasyon modeli paralelleştirilmiştir. Seri sistemlerde uzun zaman alacak simülasyonlar, paralel programlama teknikleri sayesinde daha kısa sürede tamamlanmıştır.

Bu çalışmada, MD simülasyonlarının paralelleştirilmesiyle ilgili olarak gerçekleştirilen analizler, paralel hesaplama tekniklerinin performansı önemli ölçüde artırdığını göstermiştir. OpenMP kullanılarak yapılan çalışmalarda, 1.600 hücre ve 27 iş parçacığının kullanıldığı durumda en yüksek hızlanma faktörü (4,85) elde edilmiş, bu sayede hesaplama süreleri önemli ölçüde kısaltılmıştır. Ancak, iş parçacığı ve hücre sayısındaki artışın, belirli bir sınırdan sonra veri transferi maliyetlerini artırdığı ve hızlanma ile verimlilikte düşüşe neden olduğu gözlemlenmiştir. Örneğin, 800 hücrede hızlanma faktörü 3,75 iken, 12.800 hücrede bu değer 2,55'e gerilemiştir. Benzer şekilde, molekül sayısı arttıkça (ör. 400.000 molekülden 800.000 moleküle), hızlanma faktöründe sınırlı bir artış gözlenmiştir.

Paralel hesaplama yöntemleri, gerçekleştirilen MD simülasyonlarının performansını önemli ölçüde artırmıştır. Özellikle Şok Tüpü simülasyonunda 2,85'lik hızlanma faktörü ve %36 verimlilik ile en yüksek değerler elde edilmiştir. Couette simülasyonu ise en düşük bellek kullanımı (961 MB) ile öne çıkmıştır. Bununla birlikte, Fırça Keçe simülasyonu 13.232 MB'lik bellek tüketimiyle en yüksek kaynak ihtiyacına sahip olmuştur. Paralel hesaplama, her üç simülasyon türünde de seri çalıştırmalara göre anlamlı bir hızlanma sağlarken, verimlilik %25 ile %36 arasında değişmiştir.

Bu çalışma, paralel hesaplama yöntemlerinin büyük ölçekli bilimsel simülasyonlarda nasıl optimize edilmesi gerektiğine dair değerli veriler sunmuş ve performans artışını sağlamak için iş yükü dağılımı ile kaynak yönetiminin kritik önemini vurgulamıştır.

8.3 Genel Değerlendirme ve Gelecekteki Çalışmalar

Bu çalışma, MD simülasyonlarının mikro ve nano ölçeklerdeki karmaşık akış problemlerini çözmedeki güçlü potansiyelini ortaya koymuştur. Üç farklı akış problemi (Couette ve Poiseuille akışları, şok tüpü analizleri ve fırça keçesi sistemleri) üzerine yapılan bu kapsamlı araştırma, gazların fiziksel davranışlarını derinlemesine anlamayı sağlamış ve mühendislik ile bilimsel uygulamalara değerli bir katkı sunmuştur.

Elde edilen sonuçlar, enerji transferi, basınç ve yoğunluk profilleri gibi temel parametrelerin analizinde yenilikçi yaklaşımlar sağlayarak, mikro/nano akışkan sistemlerin tasarım ve performans iyileştirme süreçlerine ışık tutmaktadır.

Gelecekte yapılacak çalışmalar, bu çalışmada elde edilen bulguların daha karmaşık sistemlere ve farklı fiziksel koşullara uygulanmasını hedefleyerek, bu alandaki bilgi birikimini derinleştirebilir. Özellikle, mikro ve nano ölçeklerde daha karmaşık geometrilere sahip sistemlerin simülasyonu, bu kapsamda önemli bir araştırma alanı sunmaktadır. Eğrisel kanallar, çok katmanlı malzemeler veya nanometre ölçeğinde yüzey desenlerine sahip sistemler gibi spesifik konuların yanı sıra, malzeme özelliklerinin (örneğin esneklik, ısı iletkenliği ve yüzey pürüzlülüğü) akış dinamikleri üzerindeki etkisi daha detaylı bir şekilde incelenebilir.

Bunun yanı sıra, GPU hızlandırmalı hesaplamaların MD simülasyonlarına entegrasyonu, işlem sürelerini daha da kısaltarak büyük ölçekli simülasyonların daha verimli hale getirilmesini sağlayabilir. OpenMP ve MPI gibi hibrit paralel programlama tekniklerinin kullanımı, hesaplama süreçlerinin performansını artırmak için potansiyel bir çözüm sunmaktadır. Ayrıca, gaz ve sıvı fazların bir arada bulunduğu çok fazlı akışlar veya iyonlaşmış gazların dinamik davranışları gibi karmaşık fiziksel sistemlerin analizi, MD simülasyonlarının gelecekteki kullanım alanlarını genişletmek için önemli bir fırsat sağlamaktadır.

Bu tür araştırmalar, yalnızca mevcut yöntemlerin sınırlarını test etmekle kalmayacak, aynı zamanda enerji verimliliği ve akış kontrolü gibi endüstriyel uygulamalarda yenilikçi çözümler geliştirme potansiyeline de sahiptir. Moleküler dinamik simülasyonlarının, daha geniş bir uygulama yelpazesinde kullanılmasını mümkün kılacak bu yenilikçi teknikler hem akademik hem de endüstriyel bilgi birikimine önemli katkılar sağlayacaktır.

KAYNAKLAR

- [1] M. Gad-el-Hak, *The MEMS Handbook*, vol. 23, no. 13. 2001.
- [2] J. Zhu *et al.*, “Development Trends and Perspectives of Future Sensors and MEMS/NEMS,” *Micromachines* 2020, Vol. 11, Page 7, vol. 11, no. 1. Multidisciplinary Digital Publishing Institute, p. 7, Dec. 2019. doi: 10.3390/MI11010007.
- [3] D. J. and Z. C. A. Feng Philip X.-L. and Young, “MEMS/NEMS Devices and Applications,” in *Springer Handbook of Nanotechnology*, B. Bhushan, Ed., Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2017, pp. 395–429. doi: 10.1007/978-3-662-54357-3_13.
- [4] C. Chircov and A. M. Grumezescu, “Microelectromechanical Systems (MEMS) for Biomedical Applications,” *Micromachines* 2022, Vol. 13, Page 164, vol. 13, no. 2. Multidisciplinary Digital Publishing Institute, p. 164, Jan. 2022. doi: 10.3390/MI13020164.
- [5] F. Sharipov, “Gas Flow in Nanochannels,” *Encyclopedia of Microfluidics and Nanofluidics*. Springer, New York, NY, pp. 1269–1276, 2015. doi: 10.1007/978-1-4614-5491-5_615.
- [6] A. H. Epstein, “Millimeter-Scale, Micro-Electro-Mechanical Systems Gas Turbine Engines,” *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, vol. 126, no. 2. American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, pp. 205–226, Apr. 2004. doi: 10.1115/1.1739245.
- [7] M. Nabavi, “Steady and unsteady flow analysis in microdiffusers and micropumps: a critical review,” *Microfluidics and Nanofluidics*, vol. 7, no. 5. pp. 599–619, 2009. doi: 10.1007/s10404-009-0474-x.
- [8] X. B. Mi and A. T. Chwang, “Molecular Dynamics Simulations of Nanochannel Flows at Low Reynolds Numbers,” *Molecules* 2003, Vol. 8, Pages 193-206, vol. 8, no. 1. Molecular Diversity Preservation International, pp. 193–206, Jan. 2003. doi: 10.3390/80100193.
- [9] F. Sofos, T. E. Karakasidis, and A. Liakopoulos, “Fluid flow at the nanoscale: How fluid properties deviate from the bulk,” *Nanoscience and Nanotechnology Letters*, vol. 5, no. 4. pp. 457–460, Apr. 2013. doi: 10.1166/NNL.2013.1555.
- [10] M. Zhou, X. Xiong, D. Drummer, and B. Jiang, “Molecular Dynamics Simulation on the Effect of Bonding Pressure on Thermal Bonding of Polymer Microfluidic Chip,” *Polymers* 2019, Vol. 11, Page 557, vol. 11, no. 3. Multidisciplinary Digital Publishing Institute, p. 557, Mar. 2019. doi: 10.3390/POLYM11030557.
- [11] F. Müller-Plathe and F. Müller-Plathe, “A simple nonequilibrium molecular dynamics method for calculating the thermal conductivity,” *The Journal of Chemical*

Physics, vol. 106, no. 14. AIP Publishing, pp. 6082–6085, Apr. 1997. doi: 10.1063/1.473271.

[12] T. Ohara and D. Torii, “Molecular dynamics study of thermal phenomena in an ultrathin liquid film sheared between solid surfaces: The influence of the crystal plane on energy and momentum transfer at solid-liquid interfaces,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 122, no. 21. p. 214717, Jun. 2005. doi: 10.1063/1.1902950.

[13] W. Q. Lu and Q. M. Fan, “Study for the particle’s scale effect on some thermophysical properties of nanofluids by a simplified molecular dynamics method,” *Engineering Analysis with Boundary Elements*, vol. 32, no. 4. Elsevier, pp. 282–289, Apr. 2008. doi: 10.1016/J.ENGANABOUND.2007.10.006.

[14] S. Chatterjee, Paras, H. Hu, and M. Chakraborty, “A Review of Nano and Microscale Heat Transfer: An Experimental and Molecular Dynamics Perspective,” *Processes 2023, Vol. 11, Page 2769*, vol. 11, no. 9. Multidisciplinary Digital Publishing Institute, p. 2769, Sep. 2023. doi: 10.3390/PR11092769.

[15] D. Frenkel, B. Smit, D. Frenkel, and B. Smit, *Chapter 1 – Introduction*. 2002. Accessed: Nov. 23, 2024.

[16] S. Zendehboudi, “Molecular dynamics simulation in energy and chemical systems,” *Modelling of Chemical Process Systems*. Elsevier, pp. 91–148, Jan. 2023. doi: 10.1016/B978-0-12-823869-1.00002-8.

[17] L. F. Li and X. F. Zhang, “Molecular Dynamics Simulation of Thermodynamic Properties for Al-Si Alloys in Material Manufacturing Engineering,” *Advanced Materials Research*, vol. 583. Trans Tech Publications Ltd, pp. 326–329, 2012. doi: 10.4028/

[18] H. A. L. Filipe and L. M. S. Loura, “Molecular Dynamics Simulations: Advances and Applications,” *Molecules*, vol. 27, no. 7. p. 2105, 2022. doi: 10.3390/molecules27072105.

[19] A. Fedoseyev and V. Griaznov, “Simulation of rarefied hypersonic gas flow and comparison with experimental data,” vol. 2522. p. 100006, 2022. doi: 10.1063/5.0101533.

[20] G. A. Bird, *Molecular Gas Dynamics And The Direct Simulation Of Gas Flows*. 1994.

[21] M. Barisik and A. Beskok, “Surface-gas interaction effects on nanoscale gas flows,” *Microfluidics and Nanofluidics*, vol. 13, no. 5. Springer, pp. 789–798, Nov. 2012. doi: 10.1007/S10404-012-1000-0/FIGURES/8.

[22] J. F. Xie and B. Y. Cao, “Nanochannel flow past permeable walls via molecular dynamics,” *AIP Advances*, vol. 6, no. 7. American Institute of Physics Inc., p. 75307, Jul. 2016. doi: 10.1063/1.4959022/564887.

- [23] G. E. Karniadakis, A. Beskok, and N. R. Aluru, "Microflows and Nanoflows Fundamentals and Simulation," in *Interdisciplinary Applied Mathematics*, vol. 29, Springer, 2005, pp. 1–61. doi: <https://doi.org/10.1007/0-387-28676-4>.
- [24] J. C. Maxwell, "On the Dynamical Theory of Gases," *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, vol. 157. The Royal Society, pp. 49–88, 1867. doi: <https://doi.org/10.1098/rstl.1867.0004>.
- [25] M. Knudsen and J. R. Partington, "The Kinetic Theory of Gases: Some Modern Aspects," *The Journal of Physical Chemistry*, vol. 39, no. 2. American Chemical Society, p. 307, Jan. 1934. doi: 10.1021/j150362a021.
- [26] J. C. Maxwell and W. D. Niven Sir, *The scientific papers*; , vol. 1. Cambridge,: University Press, 1890.
- [27] L. Boltzmann, "Further Studies on the Thermal Equilibrium of Gas Molecules," in *Sitzungsberichte der Akademie der Wissenschaften*, 1872, pp. 275–370. doi: 10.1142/9781848161337_0015.
- [28] S. Chapman, "The Kinetic Theory of Simple and Composite Monatomic Gases: Viscosity, Thermal Conduction, and Diffusion," *Proceedings of the Royal Society of London Series A*, vol. 93, no. 646. pp. 1–20, Dec. 1916. doi: 10.1098/rspa.1916.0046.
- [29] D. Enskog, "Kinetische Theorie der Vorgänge in mässig verdünnten Gasen.," 1917.
- [30] B. J. Alder and T. E. J. Wainwright, "Phase Transition for a Hard Sphere System," *jcp*, vol. 27. pp. 1208–, 1957. doi: 10.1063/1.1743957.
- [31] Y. L. Han, E. P. Muntz, A. Alexeenko, and M. Young, "Experimental and computational studies of temperature gradient-driven molecular transport in gas flows through nano/microscale channels," *Nanoscale and Microscale Thermophysical Engineering*, vol. 11, no. 1–2. pp. 151–175, 2007. doi: 10.1080/15567260701337209.
- [32] M. Tohidi and D. Toghraie, "The effect of geometrical parameters, roughness and the number of nanoparticles on the self-diffusion coefficient in Couette flow in a nanochannel by using of molecular dynamics simulation," *Physica B: Condensed Matter*, vol. 518, no. May. pp. 20–32, 2017. doi: 10.1016/j.physb.2017.05.014.
- [33] W. B. Paul, "Molecular dynamics simulation, elementary methods. By J. M. Haile, Wiley, Chichester 1992, 489 pp.," *Advanced Materials*, vol. 5, no. 3. John Wiley & Sons, Ltd, pp. 223–224, Mar. 1993. doi: 10.1002/adma.19930050319.
- [34] P. W. Duck, G. Erlebacher, and M. Y. Hussaini, "On the linear stability of compressible plane Couette flow," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 258. Cambridge University Press, pp. 131–165, 1994. doi: DOI: 10.1017/S0022112094003277.
- [35] G. A. Bird, "Molecular gas dynamics," *NASA STI/Recon Technical Report A*, vol. 76. p. 40225, Jan. 1976.

- [36] M. Gad-el-Hak, "Liquids: The holy grail of microfluidic modeling," *Physics of Fluids*, vol. 17, no. 10. 2005. doi: 10.1063/1.1897009.
- [37] M. Barisik and A. Beskok, "Surface-gas interaction effects on nanoscale gas flows," *Microfluidics and Nanofluidics*, vol. 13, no. 5. Springer, pp. 789–798, Nov. 2012. doi: 10.1007/S10404-012-1000-0/METRICS.
- [38] K. K. Kammara, G. Malaikannan, and R. Kumar, "Molecular Dynamics Study of Gas–Surface Interactions in a Force-Driven Flow of Argon through a Rectangular Nanochannel," *Nanoscale and Microscale Thermophysical Engineering*, vol. 20, no. 2. Taylor & Francis, pp. 121–136, Apr. 2016. doi: 10.1080/15567265.2016.1215364.
- [39] A. A. Abramov and A. V. Butkovskii, "Couette flow regimes with heat transfer in rarefied gas," *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, vol. 116, no. 6. pp. 1036–1042, 2013. doi: 10.1134/s1063776113050154.
- [40] J. Xie, "A mean free path approach to the micro/nanochannel gas flows," *Advances in Aerodynamics*, vol. 2, no. 1. Springer, pp. 1–15, Dec. 2020. doi: 10.1186/s42774-020-00035-w.
- [41] I. Kandemir and F. E. Sevilgen, "Molecular dynamics simulation of helium-argon gas mixture under various wall conditions," *Molecular Simulation*, vol. 34, no. 8. pp. 795–808, 2008. doi: 10.1080/08927020802275785.
- [42] I. Kandemir and A. M. Kaya, "Molecular dynamics simulation of compressible hot / cold moving lid-driven microcavity flow." 2011. doi: 10.1007/s10404-011-0892-4.
- [43] H. Xiao, Q. J. He, X. Xiao, and Y. D. Lian, "Molecular-level study of compressible gaseous continua," *Journal of Physics Communications*, vol. 2, no. 9. Institute of Physics Publishing, Sep. 2018. doi: 10.1088/2399-6528/aac0eb.
- [44] W. A. Zahid, Y. Yin, and K. Q. Zhu, "Couette-Poiseuille flow of a gas in long microchannels," *Microfluidics and Nanofluidics*, vol. 3, no. 1. pp. 55–64, 2007. doi: 10.1007/s10404-006-0108-5.
- [45] A. O. Ali and O. D. Makinde, "Modelling the effect of variable viscosity on unsteady couette flow of nanofluids with convective cooling," *Journal of Applied Fluid Mechanics*, vol. 8, no. 4. Isfahan University of Technology, pp. 793–802, 2015. doi: 10.18869/acadpub.jafm.67.223.22967.
- [46] S. Assadi, M. Kalteh, and M. Bagheri Motlagh, "Investigating convective heat transfer coefficient of nanofluid Couette flow in a nanochannel by molecular dynamics simulation," *Molecular Simulation*, vol. 48, no. 8. pp. 702–711, 2022. doi: 10.1080/08927022.2022.2046271.
- [47] A. S. Ziarani and A. A. Mohamad, "A molecular dynamics study of perturbed Poiseuille flow in a nanochannel," *Microfluidics and Nanofluidics*, vol. 2, no. 1. pp. 12–20, 2006. doi: 10.1007/s10404-005-0036-9.

- [48] A. Ebrahimi, V. Shahabi, and E. Roohi, "Pressure-driven nitrogen flow in divergent microchannels with isothermal walls," *Applied Sciences*, vol. 11, no. 8. Multidisciplinary Digital Publishing Institute, p. 3602, Apr. 2021. doi: 10.3390/app11083602.
- [49] A. S. Kannan *et al.*, "The knudsen paradox in micro-channel poiseuille flows with a symmetric particle," *Applied Sciences*, vol. 11, no. 1. Multidisciplinary Digital Publishing Institute, pp. 1–13, Dec. 2021. doi: 10.3390/app11010351.
- [50] B. D. Todd and D. J. Evans, "Temperature profile for Poiseuille flow," *Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics*, vol. 55, no. 3. pp. 2800–2807, 1997. doi: 10.1103/PhysRevE.55.2800.
- [51] D. K. Bhattacharya and G. C. Lie, "Molecular-dynamics simulations of nonequilibrium heat and momentum transport in very dilute gases," *Physical Review Letters*, vol. 62, no. 8. pp. 897–900, 1989. doi: 10.1103/PHYSREVLETT.62.897.
- [52] Q. D. To, C. Bercegeay, G. Lauriat, C. Léonard, and G. Bonnet, "A slip model for micro/nano gas flows induced by body forces," *Microfluidics and Nanofluidics*, vol. 8, no. 3. pp. 417–422, Mar. 2010. doi: 10.1007/S10404-009-0532-4.
- [53] J. L. Barrat and L. Bocquet, "Large Slip Effect at a Nonwetting Fluid-Solid Interface," *Physical Review Letters*, vol. 82, no. 23. American Physical Society, p. 4671, Jun. 1999. doi: 10.1103/PhysRevLett.82.4671.
- [54] M. Lupkowski and F. Van Swol, "Computer simulation of fluids interacting with fluctuating walls," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 93, no. 1. pp. 737–745, 1990. doi: 10.1063/1.459524.
- [55] J. Li, D. Liao, and S. Yip, "Coupling continuum to molecular-dynamics simulation: Reflecting particle method and the field estimator," *Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics*, vol. 57, no. 6. pp. 7259–7267, 1998. doi: 10.1103/PhysRevE.57.7259.
- [56] Q. D. To, T. T. Pham, G. Lauriat, and C. Léonard, "Molecular dynamics simulations of pressure-driven flows and comparison with acceleration-driven flows," *Advances in Mechanical Engineering*, vol. 2012. 2012. doi: 10.1155/2012/580763.
- [57] B. Y. Cao, M. Chen, and Z. Y. Guo, "Effect of surface roughness on gas flow in microchannels by molecular dynamics simulation," *International Journal of Engineering Science*, vol. 44, no. 13–14. pp. 927–937, 2006. doi: 10.1016/j.ijengsci.2006.06.005.
- [58] Y. Guo, D. Surblys, Y. Kawagoe, H. Matsubara, X. Liu, and T. Ohara, "A molecular dynamics study on the effect of surfactant adsorption on heat transfer at a solid-liquid interface," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 135. The Authors, pp. 115–123, 2019. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.01.131.
- [59] K. Aoki, Y. Sone, and T. Ohwada, "Heat Transfer and Temperature Distribution in a Rarefied Gas Between Two Parallel Plates with Different Temperatures: Numerical Analysis of the Boltzmann Equation for a Hard Sphere Molecule," *Rarefied*

Gas Dynamics: Theoretical and Computational Techniques. American Institute of Aeronautics and Astronautics, pp. 70–81, Jan. 1989. doi: 10.2514/5.9781600865923.0070.0081.

[60] I. Greber and H. Wachman, “Scaling rules and time averaging in molecular dynamics computations of transport properties,” *Progress in Astronautics and Aeronautics*, vol. 117. pp. 194–207, Jan. 1989. doi: <https://doi.org/10.2514/5.9781600865923.0194.0207>.

[61] D. Risso and P. Cordero, *Dilute gas Couette flow: Theory and molecular dynamics simulation*, vol. 56. 1997. doi: 10.1103/PhysRevE.56.489.

[62] Z. Dong, “Research on the Implementation Method of Parallel Testing Based on Computer Technology,” *Lecture Notes in Electrical Engineering*, vol. 1037 LNEE. Lecture notes in electrical engineering, pp. 461–469, Jan. 2023. doi: 10.1007/978-981-99-1983-3_42.

[63] H. Tian, A. W. C. Liew, and H. Shen, “Advances in parallel and distributed computing and its applications (Editorial),” *Concurrency and Computation: Practice and Experience*, vol. 34, no. 2. Wiley, Oct. 2021. doi: 10.1002/CPE.6667.

[64] Y. Huang, “Parallel computing and its applications,” *2022 IEEE International Conference on Artificial Intelligence and Computer Applications, ICAICA 2022*. 2022 IEEE International Conference on Artificial Intelligence and Computer Applications (ICAICA), pp. 715–718, Jun. 2022. doi: 10.1109/ICAICA54878.2022.9844487.

[65] S. Han, T. Y. Jeong, and E. Y. Chung, “Multi-node Power/Performance Modeling for HPC System,” *34th International Technical Conference on Circuits/Systems, Computers and Communications, ITC-CSCC 2019*. Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc., p. 8793388, Jun. 2019. doi: 10.1109/ITC-CSCC.2019.8793388.

[66] Y. Wang, Q. Zhang, Y. Liu, and D. Qian, “HPC-SFI: System-Level Fault Injection for High Performance Computing Systems,” *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, vol. 11276 LNCS. Springer International Publishing, pp. 103–113, Nov. 2018. doi: 10.1007/978-3-030-05677-3_9.

[67] T. Einwohner and B. J. Alder, “Molecular Dynamics. VI. Free-Path Distributions and Collision Rates for Hard-Sphere and Square-Well Molecules,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 49, no. 4. AIP Publishing, pp. 1458–1473, Aug. 1968. doi: 10.1063/1.1670266.

[68] I. Kandemir, “A multicell molecular dynamics method,” *Case Western Reserve University*. 1999.

[69] M. Koc, I. Kandemir, and V. R. Akkaya, “An Investigation of Transition Flow in Porous Media by Event Driven Molecular Dynamics Simulation,” *Journal of Applied Fluid Mechanics*, vol. 14, no. 1. Isfahan University of Technology, pp. 23–36, Jan. 2021. doi: 10.47176/jafm.14.01.31475.

- [70] V. R. Akkaya and I. Kandemir, “Event-driven molecular dynamics simulation of hard-sphere gas flows in microchannels,” *Mathematical Problems in Engineering*, vol. 2015, pp. 1–12, 2015. doi: 10.1155/2015/842837.
- [71] D. Frenkel and B. Smit, *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications, Third Edition*. in Computational science. Academic Press, 2023. doi: 10.1016/C2009-0-63921-0.
- [72] R. Scott, M. P. Allen, and D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids.*, vol. 57, no. 195. in Computer Simulation of Liquids, vol. 57. Clarendon Press, 1991. doi: 10.2307/2938686.
- [73] Y. A. Çengel and J. M. Cimbala, *Fluid Mechanics: Fundamentals and Applications*. 2006. doi: 10.1017/CBO9781107415324.004.
- [74] P. G. Drazin and N. Riley, “The Navier-Stokes equations: a classification of flows and exact solutions,” *Cambridge University Press*. pp. 24–29, 2006. Accessed: Nov. 19, 2024.
- [75] H. Jin, D. Jespersen, P. Mehrotra, R. Biswas, L. Huang, and B. Chapman, “High performance computing using MPI and OpenMP on multi-core parallel systems,” *Parallel Computing*, vol. 37, no. 9, pp. 562–575, 2011. doi: <https://doi.org/10.1016/j.parco.2011.02.002>.
- [76] P. Czarnul, M. Matuszek, and A. Krzywaniak, “Teaching High-performance Computing Systems – A Case Study with Parallel Programming APIs: MPI, OpenMP and CUDA,” in *Computational Science – ICCS 2024*, L. Franco, C. de Mulatier, M. Paszynski, V. V Krzhizhanovskaya, J. J. Dongarra, and P. M. A. Sloot, Eds., Cham: Springer Nature Switzerland, 2024, pp. 398–412.
- [77] L. M. Sanchez, J. Fernandez, R. Sotomayor, and J. D. Garcia, “A Comparative Evaluation of Parallel Programming Models for Shared-Memory Architectures,” in *2012 IEEE 10th International Symposium on Parallel and Distributed Processing with Applications*, 2012, pp. 363–370. doi: 10.1109/ISPA.2012.54.
- [78] C.-T. Yang, T.-C. Chang, H.-Y. Wang, W. C. C. Chu, and C.-H. Chang, “Performance Comparison with OpenMP Parallelization for Multi-core Systems,” in *2011 IEEE Ninth International Symposium on Parallel and Distributed Processing with Applications*, 2011, pp. 232–237. doi: 10.1109/ISPA.2011.60.
- [79] C.-T. Yang, T.-C. Chang, H.-Y. Wang, W. C. C. Chu, and C.-H. Chang, “Performance Comparison with OpenMP Parallelization for Multi-core Systems,” in *2011 IEEE Ninth International Symposium on Parallel and Distributed Processing with Applications*, 2011, pp. 232–237. doi: 10.1109/ISPA.2011.60.
- [80] C. Wang, “Analyzing the limitations of parallelism in hardware and software through threaded programming,” *Highlights in Science, Engineering and Technology*, vol. 41. Darcy & Roy Press Co. Ltd., pp. 23–28, Mar. 2023. doi: 10.54097/HSET.V41I.6738.

- [81] J. L. Hennessy, D. A. Patterson, and K. Asanović, *Computer Architecture: A Quantitative Approach*. in *Computer Architecture: A Quantitative Approach*. Kaufmann, 2012.
- [82] B. Chapman, G. Jost, and R. Van Der Pas, *Using OpenMP: portable shared memory parallel programming*, vol. 46, no. 02. in *Scientific and Engineering Computation*, vol. 46. MIT Press, 2008. doi: 10.5860/choice.46-0930.
- [83] W. Gropp, E. Lusk, and A. Skjellum, *Using MPI: Portable parallel programming with the message-passing interface*, vol. 40, no. 2–3. in *Scientific and Engineering Computation*, vol. 40. MIT Press, 2000. doi: 10.1016/s0898-1221(00)90207-4.
- [84] P. Balaji, D. Buntinas, D. Goodell, W. Gropp, and R. Thakur, “Fine-Grained Multithreading Support for Hybrid Threaded MPI Programming,” *The International Journal of High Performance Computing Applications*, vol. 24, no. 1. SAGE Publications Ltd STM, pp. 49–57, Feb. 2010. doi: 10.1177/1094342009360206.
- [85] R. Rabenseifner, G. Hager, and G. Jost, “Hybrid MPI/OpenMP Parallel Programming on Clusters of Multi-Core SMP Nodes,” in *2009 17th Euromicro International Conference on Parallel, Distributed and Network-based Processing*, 2009, pp. 427–436. doi: 10.1109/PDP.2009.43.
- [86] P. Czarnul, J. Proficz, and K. Drypczewski, “Survey of Methodologies, Approaches, and Challenges in Parallel Programming Using High-Performance Computing Systems,” *Scientific Programming*, vol. 2020, no. 1. John Wiley & Sons, Ltd, p. 4176794, Jan. 2020. doi: <https://doi.org/10.1155/2020/4176794>.
- [87] S. Mittal and J. S. Vetter, “A Survey of CPU-GPU Heterogeneous Computing Techniques,” *ACM Comput. Surv.*, vol. 47, no. 4. Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, Jul. 2015. doi: 10.1145/2788396.
- [88] S. Chapman, T. G. Cowling, and C. Cercignani, *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases: An Account of the Kinetic Theory of Viscosity, Thermal Conduction and Diffusion in Gases*. in *Cambridge Mathematical Library*. Cambridge University Press, 1970.
- [89] D. J. Allen, Michael P and Tildesley, *Computer simulation of liquids*. Oxford university press, 2017.
- [90] Rapaport D.C., *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, 2nd ed. Cambridge University Press, 2004.
- [91] E. Pala Öngül and İ. Kandemir, “Examination of Couette Flow with a Pressure Gradient and Heat Conduction Using Molecular Dynamics Simulation,” *Applied Sciences*, vol. 14, no. 6, 2024, doi: 10.3390/app14062313.
- [92] E. Rathakrishnan, “Normal Shock Waves,” *Applied Gas Dynamics*. Wiley, pp. 113–153, Mar. 2013. doi: 10.1002/9781119500377.CH3.

- [93] K. Niu, "Shock waves in gas and plasma," *Laser and Particle Beams*, vol. 14, no. 2. Cambridge University Press, pp. 125–132, 1996. doi: 10.1017/S0263034600009885.
- [94] G. Ben-Dor, "Shock wave reflection phenomena," *Shock Wave Reflection Phenomena*. Springer Berlin Heidelberg, 1992. doi: 10.1007/978-3-540-71382-1.
- [95] C. Crowe, "Multiphase Flow Handbook," *Multiphase Flow Handbook*. CRC Press, Sep. 2005. doi: 10.1201/9781420040470.
- [96] Y. Takashima, J. Kasahara, J. E. Shepherd, and I. Funaki, "Impulse generated by a shock tube in a vacuum," *46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. 2008. doi: 10.2514/6.2008-987.
- [97] P. Thaloor Ramesh, V. Kengaiyah, E. M. Gutema, P. Velusamy, and D. Balamoorthy, "Development of cost-effective shock tube based on experimental and numerical analysis," *Aircraft Engineering and Aerospace Technology*, vol. 94, no. 4. Emerald Group Holdings Ltd., pp. 559–563, Mar. 2022. doi: 10.1108/AEAT-04-2021-0122/FULL/XML.
- [98] Y. J. Zhang, Z. H. Huang, J. H. Wang, and S. L. Xu, "Shock tube study on auto-ignition characteristics of kerosene/air mixtures," *Chinese Science Bulletin*, vol. 56, no. 13. Springer, pp. 1399–1406, May 2011. doi: 10.1007/S11434-010-4293-Y/METRICS.
- [99] J. Vishakantaiah and G. Balasubramaniam, "Experimental investigation of oxidation resistance of SiC powder for the protection of re-entry space vehicle using material shock tube," *Advanced Materials Letters*, vol. 9, no. 7. International Association of Advanced Materials, pp. 510–515, Jul. 2018. doi: 10.5185/AMLETT.2018.2061.
- [100] G. Sakthi Balan and S. Aravind Raj, "A review on Shock tubes with multitudinous applications," *International Journal of Impact Engineering*, vol. 172. p. 104406, 2023. doi: 10.1016/j.ijimpeng.2022.104406.
- [101] G. E. Duvall and R. A. Graham, "Phase transitions under shock-wave loading," *Reviews of Modern Physics*, vol. 49, no. 3. American Physical Society, p. 523, Jul. 1977. doi: 10.1103/RevModPhys.49.523.
- [102] J. Warnatz, U. Maas, and R. W. Dibble, "Combustion: Physical and chemical fundamentals, modeling and simulation, experiments, pollutant formation," *Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation*. Springer Berlin Heidelberg, pp. 1–378, 2006. doi: 10.1007/978-3-540-45363-5/COVER.
- [103] B. L. Holian, "Molecular dynamics comes of age for shockwave research," in *Shock Waves*, Springer New York, 2004, pp. 489–495. doi: 10.1007/s00193-004-0226-5.

- [104] M. P. Allen and D. J. Tildesley, "Computer simulation of liquids: Second edition," *Computer Simulation of Liquids: Second Edition*. Oxford University Press, pp. 1–626, Nov. 2017. doi: 10.1093/oso/9780198803195.001.0001.
- [105] J. Vishakantaiah and G. Balasubramaniam, "Experimental investigation of oxidation resistance of SiC powder for the protection of re-entry space vehicle using material shock tube," *Advanced Materials Letters*, vol. 9, no. 7. International Association of Advanced Materials, pp. 510–515, Jul. 2018. doi: 10.5185/AMLETT.2018.2061.
- [106] I. I. Glass and G. N. Patterson, "A Theoretical and Experimental Study of Shock-Tube Flows," *Journal of the Aeronautical Sciences*, vol. 22, no. 2. American Institute of Aeronautics and Astronautics, pp. 73–100, Feb. 1955. doi: 10.2514/8.3282.
- [107] E. S. Oran, T. R. Young, J. P. Boris, and A. Cohen, "Weak and strong ignition. I. Numerical simulations of shock tube experiments," *Combustion and Flame*, vol. 48. pp. 135–148, 1982. doi: [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(82\)90123-7](https://doi.org/10.1016/0010-2180(82)90123-7).
- [108] E. L. Petersen and R. K. Hanson, "Nonideal effects behind reflected shock waves in a high-pressure shock tube," *Shock Waves*, vol. 10, no. 6. pp. 405–420, 2001. doi: 10.1007/PL00004051.
- [109] R. K. Hanson and D. Davidson, "Recent advances in laser absorption and shock tube methods for studies of combustion chemistry," *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 44. Oct. 2014. doi: 10.1016/j.pecs.2014.05.001.
- [110] Q. Li, J. Zeng, and L. Wu, "Kinetic modelling of rarefied gas mixtures with disparate mass." Mar. 2024.
- [111] D. L. Tipton, T. E. Scott, and R. E. Vogel, "Labyrinth seal analysis. Volume 3. Analytical and experimental development of a design model for labyrinth seals." 1986.
- [112] T. S. Kim and K. S. Cha, "Comparative analysis of the influence of labyrinth seal configuration on leakage behavior," *Journal of Mechanical Science and Technology*, vol. 23, no. 10. Springer, pp. 2830–2838, Oct. 2009. doi: 10.1007/S12206-009-0733-5/METRICS.
- [113] Y. Dogu, M. F. Aksit, M. Demiroglu, and O. S. Dinc, "Evaluation of flow behavior for clearance brush seals," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, vol. 130, no. 1. American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, Jan. 2008. doi: 10.1115/1.2770479/470352.
- [114] F. E. Aslan-zada, V. A. Mammadov, and F. Dohnal, "Brush seals and labyrinth seals in gas turbine applications," <http://dx.doi.org/10.1177/0957650912464922>, vol. 227, no. 2. SAGE PublicationsSage UK: London, England, pp. 216–230, Nov. 2012. doi: 10.1177/0957650912464922.
- [115] R. E. Chupp, F. Ghasripoor, N. A. Turnquist, M. Demiroglu, and M. F. Aksit, "Advanced Seals for Industrial Turbine Applications: Dynamic Seal Development," <https://doi.org/10.2514/2.6061>, vol. 18, no. 6. American Inst. Aeronautics and Astronautics Inc., pp. 1260–1266, May 2012. doi: 10.2514/2.6061.

- [116] R. E. Chupp, R. C. Hendricks, S. B. Lattime, and B. M. Steinetz, "Sealing in turbomachinery," *Journal of Propulsion and Power*, vol. 22, no. 2. American Institute of Aeronautics and Astronautics Inc., pp. 313–349, 2006. doi: 10.2514/1.17778.
- [117] J. Li, B. Qiu, and Z. Feng, "Experimental and numerical investigations on the leakage flow characteristics of the labyrinth brush seal," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, vol. 134, no. 10. 2012. doi: 10.1115/1.4007062.
- [118] Y. Zhang *et al.*, "Effect of the Fence Height on the Leakage Flow Characteristics of Brush Seals." GPPS, Sep. 2019. doi: 10.33737/GPPS19-BJ-021.
- [119] B. Qiu and J. Li, "Numerical investigations on the heat transfer behavior of brush seals using combined computational fluid dynamics and finite element method," *Journal of Heat Transfer*, vol. 135, no. 12. 2013. doi: 10.1115/1.4024556.
- [120] A. O. Pugachev and P. Helm, "Calibration of porous medium models for brush seals," <http://dx.doi.org/10.1243/09576509JPE641>, vol. 223, no. 1. SAGE PublicationsSage UK: London, England, pp. 83–91, Nov. 2008. doi: 10.1243/09576509JPE641.
- [121] J. P. Bowen, M. R. Jenkins, A. A. Bowsher, P. F. Crudgington, C. M. Sangan, and J. A. Scobie, "The Inter-Bristle Pressure Field in a Large-Scale Brush Seal," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, vol. 144, no. 11. American Society of Mechanical Engineers (ASME), Nov. 2022. doi: 10.1115/1.4055458/1145920.
- [122] A. A. M. Ahmed, M. Liu, Y. Kang, J. Wang, A. I. B. Idriss, and N. T. T. Tin, "Brush Seal Performance with Ideal Gas Working Fluid under Static Rotor Condition," *Machines* 2024, Vol. 12, Page 476, vol. 12, no. 7. Multidisciplinary Digital Publishing Institute, p. 476, Jul. 2024. doi: 10.3390/MACHINES12070476.
- [123] M. T. Turner, J. W. Chew, and C. A. Long, "Experimental Investigation and Mathematical Modeling of Clearance Brush Seals," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, vol. 120, no. 3. pp. 573–579, Jul. 1998. doi: 10.1115/1.2818185.
- [124] L. H. Chen, P. E. Wood, T. V Jones, and J. W. Chew, "An Iterative CFD and Mechanical Brush Seal Model and Comparison With Experimental Results," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, vol. 121, no. 4. pp. 656–662, Oct. 1999. doi: 10.1115/1.2818522.
- [125] R. E. Chupp and C. A. Dowler, "Performance Characteristics of Brush Seals for Limited-Life Engines," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, vol. 115, no. 2. pp. 390–396, Apr. 1993. doi: 10.1115/1.2906721.
- [126] D. Lelli, J. W. Chew, and P. Cooper, "Combined three-dimensional fluid dynamics and mechanical modeling of brush seals," *Journal of Turbomachinery*, vol. 128, no. 1. pp. 188–195, Jan. 2006. doi: 10.1115/1.2103093.
- [127] C. Guardino and J. W. Chew, "Numerical simulation of three-dimensional bristle bending in brush seals," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, vol. 127, no. 3. pp. 583–591, May 2005. doi: 10.1115/1.1850943.

- [128] A. M. Abbas, M. J. Pekris, and J. W. Chew, “Investigation of Grooved Front Plate for Inlet Swirl Reduction in Brush Seals.” American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, Aug. 2024. doi: 10.1115/GT2024-127753.
- [129] M. F. Aksit and J. A. Tichy, “Wear of Brush Seals: Background and New Modeling Approach,” *TRIBOLOGY TRANSACTIONS*, vol. 41, no. 3. Taylor & Francis Group, pp. 368–374, Jan. 1998. doi: 10.1080/10402009808983760.
- [130] P. Song, D. Ma, Z. Li, and J. Li, “Numerical and Experimental Investigations on the Leakage Flow Characteristics and Temperature Distributions of Brush Seals,” *Proceedings of the ASME Turbo Expo*, vol. 7-B. American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, Sep. 2023. doi: 10.1115/GT2023-102763.
- [131] Y. Dogu and M. F. Aksit, “Effects of Geometry on Brush Seal Pressure and Flow Fields—Part II: Backing Plate Configurations,” *Journal of Turbomachinery*, vol. 128, no. 2. pp. 379–389, Jul. 2005. doi: 10.1115/1.2101858.
- [132] M. F. Aksit and J. A. Tichy, “Wear of Brush Seals: Background and New Modeling Approach,” *Tribology Transactions*, vol. 41, no. 3. Taylor & Francis, pp. 368–374, Jan. 1998. doi: 10.1080/10402009808983760.
- [133] J. W. Kwon and J. Ahn, “Prediction of Leakage Flow Rate and Blow-Down in Brush Seals via 2D CFD Simulation with Porosity Correction,” *Applied Sciences*, vol. 14, no. 19. 2024. doi: 10.3390/app14198821.
- [134] R. Harel, I. Mosseri, H. Levin, L. Alon, M. Rusanovsky, and G. Oren, “Source-to-Source Parallelization Compilers for Scientific Shared-Memory Multi-core and Accelerated Multiprocessing: Analysis, Pitfalls, Enhancement and Potential,” *International Journal of Parallel Programming*, vol. 48, no. 1. pp. 1–31, 2020. doi: 10.1007/s10766-019-00640-3.
- [135] E. J. Kontoghiorghes, *Handbook of parallel computing and statistics*. CRC Press, 2005. doi: 10.1198/tech.2008.s912.
- [136] X.-H. Sun and J. L. Gustafson, “Toward a better parallel performance metric,” *Parallel Computing*, vol. 17, no. 10. pp. 1093–1109, 1991. doi: [https://doi.org/10.1016/S0167-8191\(05\)80028-6](https://doi.org/10.1016/S0167-8191(05)80028-6).
- [137] V. N. Kamat, “Applying Parallel Design Patterns on Molecular Dynamics Simulation,” *International Journal of Computer Applications*, vol. 181, no. 50. pp. 975–8887, 2019. doi: 10.2147/AABC.S70333.
- [138] G. M. Amdahl, “Validity of the single processor approach to achieving large scale computing capabilities,” in *Proceedings of the April 18-20, 1967, Spring Joint Computer Conference*, in AFIPS ’67 (Spring). New York, NY, USA: Association for Computing Machinery, 1967, pp. 483–485. doi: 10.1145/1465482.1465560.
- [139] A. Grama, *Introduction to Parallel Computing*. in Pearson Education. Addison-Wesley, 2003.

ÖZGEÇMİŞ

Esmâ PALA ÖNGÜL, 2014 yılında Akdeniz Üniversitesi Elektrik-Elektronik Mühendisliği Bölümü'nden mezun olmuştur. 2018 yılında Gebze Teknik Üniversitesi Makine Mühendisliği Bölümü'nde yüksek lisans eğitimini 4.00 not ortalaması ile tamamlamıştır. Bu dönemde gerçekleştirdiği “Dikey Kalkış ve İniş Yapabilen Sabit Kanatlı Hava Aracı Tasarımı, Kontrolü ve İmalatı” başlıklı tez çalışmasıyla, insansız hava araçlarının tasarımı ve kontrolü üzerine bilgi ve deneyim kazanmıştır.

Yüksek lisans ve doktora süresi boyunca, Gebze Teknik Üniversitesi'nde Uçuş Sistemleri Laboratuvarı'nda görev almış, bu süre zarfında insansız hava araçları ve uçuş sistemleri üzerine çalışmalar yürütmüştür. Doktora programını 4.00 not ortalaması ile başarıyla sürdürmüş ve bu süreçte Berlin Teknik Üniversitesi'nde ve Dresden Teknik Üniversitesi'nde misafir araştırmacı olarak bulunarak uluslararası akademik iş birlikleri geliştirmiştir.

Teknofest ve TÜBİTAK gibi önemli etkinliklerde akademik danışmanlık ve ekip üyeliği görevleri üstlenmiş, insansız hava araçları ve diğer mühendislik projelerinde uygulamalı deneyim kazanmıştır.

TEZ ÇALIŞMASI KAPSAMINDA YAPILAN YAYINLAR

- [1] E. Pala Öngül and İ. Kandemir, “Examination of Couette Flow with a Pressure Gradient and Heat Conduction Using Molecular Dynamics Simulation,” *Applied Sciences*, vol. 14, no. 6, 2024, doi: 10.3390/app14062313.

