T.C.
GEBZE TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYONLARINDA FARKLI SINIR ŞARTLARININ GELİŞTİRİLMESİ

MUSTAFA KOÇ

DOKTORA TEZİ
MAKİNE MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI

GEBZE
2021

T.C.
GEBZE TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYONLARINDA FARKLI SINIR ŞARTLARININ GELİŞTİRİLMESİ

MUSTAFA KOÇ

DOKTORA TEZİ
MAKİNE MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI

DANIŞMANI
PROF. DR. İLYAS KANDEMİR

GEBZE
2021

T.R.

GEBZE TECHNICAL UNIVERSITY

GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES

DEVELOPING OF DIFFERENT BOUNDARY CONDITIONS IN MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS

MUSTAFA KOÇ

A THESIS SUBMITTED FOR THE DEGREE OF

DOCTOR OF PHILOSOPHY

DEPARTMENT OF MECHANICAL ENGINEERING

THESIS SUPERVISOR

PROF. DR. ILYAS KANDEMIR

GEBZE

2021

GEBZE TEKNİK ÜNİVERSİTESİ	**DOKTORA JÜRİ ONAY FORMU**

GTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun 29/01/2021 tarih ve 2021/05 sayılı kararıyla oluşturulan jüri tarafından 03/02/2021 tarihinde tez savunma sınavı yapılan Mustafa KOÇ'un tez çalışması Makine Mühendisliği Anabilim Dalında DOKTORA tezi olarak kabul edilmiştir.

JÜRİ

ÜYE
(TEZ DANIŞMANI) :Prof. Dr. İlyas KANDEMİR

ÜYE : Prof. Dr. Alp Er Şevki KONUKMAN

ÜYE : Dr. Öğr. Üyesi Sedat TOKGÖZ

ÜYE : Dr. Öğr. Üyesi Volkan Ramazan AKKAYA

ÜYE : Dr. Öğr. Üyesi Alaattin Metin KAYA

ONAY

Gebze Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun
……/……./..…. tarih ve …..…/…..... sayılı kararı.

ÖZET

Knudsen sayısı moleküllerin ortalama serbest yolunun karakteristik uzunluğa oranı ile tanımlanır. Bu oran Kn-ilişkili akış rejimlerinin özelliklerini ortaya çıkarır. Bu rejimler sürekli (Kn<0.001), kayma (0.01<Kn<0.1), geçiş (0.1<Kn<10) ve moleküler (Kn>10) rejimlerdir. Yüksek Kn sayılı problemlerde sürekli ortam modelleri geçerliliğini yitirmeye başladığından Moleküler Dinamik (MD), Direkt Simülasyon Monte Carlo (DSMC) ve Hesaplamalı Akışkan Dinamiği(CFD)'nin bir sınıfı olan Lattice Boltzman metodu (LBM) gibi moleküler etkileşime dayanan metodlardan yararlanılır.

Bu çalışmada Olay Güdümlü Moleküler Dinamik simülasyonu yazılımı ile gözenekli ortam içinden ve iki paralel plaka arasındaki yarık içinden akış problemlerinin çözümü için sınır koşulları geliştirilmiştir. Kübik dizilimli kürelerden oluşan gözenekli ortam simüle edilmiştir. Couette akışı için verilen bir vizkozite modeli gözenekli ortam için uyarlanmıştır. Moleküllerin gözenekli ortam içinde kat ettikleri toplam ortalama yol hesaplanarak kıvrımlılık elde edilmiştir. Böylece, akış oranı, vizkozite ve kıvrımlılığın Kn, küre çapı ve gözenekliliğe bağımlılığı elde edilmiştir. Ayrıca Knudsen sayısının molekül-küre ve molekül-molekül çarpışma frekansı oranı ile bir faktör kadar orantılı olduğu bulunmuştur. Dağınık yansıma yapan iki plaka arasına yerleştirilen yarık tipli bir engel simüle edilmiştir. Çeşitli yarık geometrilerinde akışa ait makroskobik özelliklerin akış yönünde dağılımının Knudsen sayısına bağımlılığı elde edilmiştir. Nano dar boğazlarda Mach diski oluşumunun Kn ve yarık geometrisine bağımlılığı tespit edilmiştir. Ayrıca yarık etrafındaki girdap oluşumlarının şekli, boyutu ve konumunun hem Kn hem de yarı geometrisine bağımlılığı gösterilmiştir. Her iki problem için Kn geçiş rejimi aralığında incelenmiş ve farklı kurulum durumlarında yapılan simülasyonların literatürdeki benzerleri ile karşılaştırıldığında uyumlu sonuçlar verdiği görülmüştür.

Anahtar Kelimeler: Olay Güdümlü Moleküler Dinamik Simülasyonu, Geçiş Rejimi, Basınç Farkı Kaynaklı Akış, Gözenekli Ortam, Yarık, Mikro/Nano Akış.

SUMMARY

The Kn number is defined by the ratio of the mean free path of the molecules to the characteristic length. This ratio reveals the characteristics of Kn-related flow regimes. These regimes are continuous (Kn <0.001), slip (0.01 <Kn <0.1), transition (0.1 <Kn <10), and molecular (Kn> 10) regimes. As the continuum models begin to lose their validity in high-Kn number problems, molecular interaction-based methods such as Molecular Dynamics (MD), Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) and the Lattice Boltzman method (LBM), a class of Computational Fluid Dynamics (CFD), are used.

In this study, boundary conditions have been developed for the solution of flow problems through the porous medium and through the slit between two parallel plates using Event Driven Molecular Dynamics simulation software. The porous media consisting of cubically arranged spheres has been simulated. A given viscosity model for Couette flow is adapted for porous media. Tortuosity was obtained by calculating the total average distance the molecules traveled in porous media. Thus, the dependence of flow rate, viscosity and tortuosity on Kn, sphere diameter and porosity was obtained. It has also been found that the Knudsen number is proportional to the ratio of molecule-sphere and molecule-molecule collision frequency by a factor. A slit-type obstacle placed between two parallel diffuse reflective plates is simulated. The dependence of the flow direction distribution of macroscopic features of the flow in various slit geometries on the Knudsen number was obtained. The dependence of Mach disc formation on Kn and slit geometry in nano narrow throats has been determined. The dependence of the shape, size and location of vortices formations around the slit on both Kn and the slit geometry is also shown. For both problems, Kn was examined in the transition regime range and simulations made in different setup cases were found to give compatible results when compared with similar ones in the literature.

Keywords: Event Driven Molecular Dynamics Simulation, Transition Regime, Pressure Driven Flow, Porous Media, Slit Flow, Micro / Nano Flow.

TEŞEKKÜR

Bu tezin oluşmasında öncelikle emeği geçen ve değerli katkılarıyla beni yönlendiren danışman hocam Prof. Dr. İlyas KANDEMİR'e ve programlama konusunda destek veren Dr. Öğr. Üyesi Volkan Ramazan AKKAYA'ya teşekkürlerimi sunarım.

Tez izleme komitesinde bulunan ve değerli görüşlerini bildirerek çalışmalarıma katkı sağlayan Dr. Öğr. Üyesi Sedat TOKGÖZ ve Doç. Dr. Mustafa Fazıl SERİNCAN hocalarıma teşekkür ederim.

Sabır ve fedakârlık göstererek beni destekleyen değerli eşime şükranlarımı sunarım.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	v
SUMMARY	vi
TEŞEKKÜR	vii
İÇİNDEKİLER	viii
SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ	x
ŞEKİLLER DİZİNİ	xii
TABLOLAR DİZİNİ	xv
1. GİRİŞ	1
1.1. Moleküler Etkileşime Dayanan Simülasyon Yöntemleri	2
1.1.1. Olay Güdümlü Moleküler Dinamik Simülasyonu	3
1.2. Çalışmanın Amacı ve Kapsamı	6
2. OLAY GÜDÜMLÜ MD SİMÜLASYONUNUN YAPISI VE İŞLEYİŞİ	9
2.1. Hızlandırma Algoritmaları	9
2.1.1. Hücre Bölümlendirme	9
2.1.2. Tam İkili Ağaç Yapısı ve Öncelik Kuyruğu Uygulaması	10
2.2. Simülasyonun Tanımlanması	11
2.2.1. Moleküllerin Yerleştirilmesi	11
2.2.2. Enerji, Sıcaklık ve Molekül Hızı Arasındaki İlişki	12
2.2.3. Moleküllerin Yörüngeleri ve Konumlarının Yeniden Belirlenmesi	14
2.3. Olay Tanımları	14
2.3.1. Hücreler Arası Geçiş	15
2.3.2. Moleküller Arası Çarpışmalar	15
2.3.2.1. Çarpışma Zamanlarının Hesaplanması	15
2.3.2.2. Esnek Çarpışma	17
2.3.2.3. Esnek Olmayan Çarpışma	19

2.4. Duvar Sınır Koşulları 21
2.4.1. Periyodik Sınır Koşulu 21
2.4.2. Düzgün Yansıma Sınır Koşulu 22
2.4.3. Dağınık Yansıma Sınır Koşulu 23
2.4.4. Basınç Güdümlü Akış Sınır Koşulu 24
2.5. Makroskobik Özelliklerin Hesaplanması 27
3. GÖZENEKLİ ORTAM İÇİNDEN AKIŞIN MODELLENMESİ 31
3.1. Gözenekli Ortamın Modellenmesi 37
3.2. Hesaplama Yöntemleri 38
3.2.1. Geçirgenliğin Hesaplanması 38
3.2.2. Kıvrımlılığın Hesaplanması 39
3.2.3. Viskozite Katsayısının Hesaplanması 39
3.2.4. Kütle Akış Oranının Hesaplanması 40
3.2.5. Gözenekli Ortam içindeki Knudsen Sayısının Hesaplanması 40
3.3. Farklı Durumlar İçin Simülasyon Kurulumları 41
3.4. Gözenekli Ortam İçinden Akış Sonuçların İncelenmesi 45
4. İKİ PARALEL LEVHA ARASINA YERLEŞTİRİLEN BİR YARIK İÇİNDEN AKIŞIN MODELLENMESİ 51
4.1. Yarığın Modellenmesi 52
4.2. Kurulum Konfigürasyonu 53
4.3. Yarık İçinden Akış Sonuçlarının İncelenmesi 55
5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA 78

KAYNAKLAR 81
ÖZGEÇMİŞ 88
EKLER 89

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

Simgeler ve Kısaltmalar		**Açıklamalar**
A	:	Kesit alanı
$\boldsymbol{c}$	:	Hız vektörü
e	:	Birim enerji
d_m	:	Molekül çapı
$D_{katı}$	:	Katı küre çapı
D_p	:	Gözenek çapı
f	:	Frekans
F	:	Molekül akısı
f^*	:	Hız dağılımı fonksiyonu
H	:	Yükseklik
k_b	:	Boltzmann sabiti
K	:	Geçirgenlik
Kn	:	Knudsen sayısı
L	:	Uzunluk
m	:	Molekül kütlesi
M	:	Momentum
N	:	Molekül sayısı
n	:	Sayı yoğunluğu
p	:	Basınç
P	:	Olasılık
P	:	Seyreklik parametresi
s	:	Merkezden merkeze iki molekül arasındaki ortalama uzaklık
S	:	Yüzey alanı
T	:	Sıcaklık
t	:	Süre
u_n	:	Normal hız

u_t	:	Teğetsel hız
u	:	Hızın x bileşeni
x	:	Molekül konum vektörü
X	:	Kat edilen yol
v	:	Hızın y bileşeni
V	:	Hacim
w	:	Hızın z bileşeni
ε	:	Gözeneklilik
Z	:	Çarpışma sayısı
Δt	:	Zaman aralığı
λ	:	Ortalama serbest yol
μ	:	Dinamik viskozite
φ	:	Serbestlik derecesi
Φ	:	Maxwell dağılımı fonksiyonu
τ	:	Kıvrımlılık
<.>	:	Ortalama

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil No:		Sayfa
1.1:	Knudsen sayısına bağlı akış rejimleri şeması.	2
2.1:	Boyut için hücre bölümlendirme.	10
2.2:	İki molekülün çarpışması.	16
2.3:	Periyodiklik Sınır Şartı.	22
2.4:	Düzgün yansıma sınır koşulu.	23
2.5:	Tam dağınık yansıma sınır koşulu.	23
2.6:	Akış sınır koşulu giriş ve çıkış özellikleri	25
3.1:	Gözenekli ortam ile kanal yapısının şematik gösterimi (Yeşiller, gözenekli ortamı oluşturan katı küreleri ve siyahlar tek atomlu Argonu temsil eder).	37
3.2:	(a) ve (b) Normalize edilmiş Kıvrımlılık vs. Simulasyon ve Duvar Saati Zamanı, (c) ve (d) Normalize edilmiş Geçirgenlik vs. Simulasyon ve Duvar Saati Zamanı	43
3.3:	ε vs. (a) Kütle Akış Oranı, (b) μ_e, (c) τ ve (d) K/D_{sol}^2 (Durum 1).	46
3.4:	D_{sol} vs. (a) Kütle akış oranı, (b) μ_e, (c) τ ve (d) K (Durum 2).	47
3.5:	Kn vs. (a) Boyutsuz Kütle Akış Oranı, (b) μ_e/μ_0, (c) τ ve (d) K/K_{int} (Durum 3).	49
4.1:	Yarığın geometrisi ve kanal içindeki yerleşimi.	53
4.2:	Boyutsuz akış oranının Kn'ye bağlı değişimi. p_o/p_i=0.1-0.5 için L/H=0 ve 2'dir.	57
4.3:	Boyutsuz akış oranının Kn'ye bağlı değişimi. p_o/p_i=0.1-0.5 ve L=0 için H yüksekliği 250, 500 ve 1000'dir.	57
4.4:	Boyutsuz u_x,T,p ve n için Lx boyunca Kn 'ye bağlı değişim. Akış şartları p_o/p_i=0.1, H=250 ve L=0 dır.	58
4.5:	xy düzleminde akış çizgileri ve Kn 'ye bağlı boyutsuz u_x kontür grafiği. Akış şartları p_o/p_i=0.1, H=250 ve L=0 dır.	59
4.6:	Boyutsuz u_x, T, p ve n için L_x boyunca Kn 'ye bağlı değişim. Akış şartları	60

p_o/p_i=0.1, H=500 ve L=0 dır.

4.7: xy düzleminde akış çizgileri ve Kn 'ye bağlı boyutsuz u_x kontür grafiği. Akış şartları p_o/p_i=0.1, H=500 ve L=0 dır. 61

4.8: Boyutsuz u_x, T, p ve n için Lx boyunca Kn'ye bağlı değişim. Akış şartları p_o/p_i=0.1, H=1000 ve L=0 dır. 63

4.9: xy düzleminde akış çizgileri ve Kn'ye bağlı boyutsuz u_x kontür grafiği. Akış şartları p_o/p_i=0.1, H=1000 ve L=0 dır. 64

4.10: Boyutsuz ux, T, p ve n için Lx boyunca Kn'ye bağlı değişim. Akış şartları po/pi=0.1, H=500 ve L=1000 dır. 65

4.11: xy düzleminde akış çizgileri ve Kn'ye bağlı boyutsuz u_x kontür grafiği. Akış şartları p_o/p_i=0.1, H=500 ve L=1000 dır. 66

4.12: Boyutsuz u_x, T, p ve n için Lx boyunca Kn'ye bağlı değişim. Akış şartları p_o/p_i=0.5, H=500 ve L=0 dır. 67

4.13: xy düzleminde akış çizgileri ve Kn'ye bağlı boyutsuz u_x kontür grafiği. Akış şartları p_o/p_i=0.5, H=500 ve L=0 dır. 68

4.14: Boyutsuz u_x, T, p ve n için L_x boyunca Kn'ye bağlı değişim. Akış şartları p_o/p_i=0.5, H=1000 ve L=0 dır. 69

4.15: Akış çizgileri ve xy düzleminde Kn'ye bağlı boyutsuz u_x kontür grafiği. Akış şartları p_o/p_i=0.5, H=1000 ve L=0 dır. 70

4.16: Boyutsuz ux, T, p ve n için L_x boyunca Kn'ye bağlı değişim. Akış şartları p_o/p_i=0.5, H=500 ve L=1000 dır. 71

4.17: xy düzleminde akış çizgileri ve Kn'ye bağlı boyutsuz u_x kontür grafiği. Akış şartları p_o/p_i=0.5, H=500 ve L=1000 dır. 72

4.18: Boyutsuz u_x, T, p ve n için L_x boyunca basınç oranına (p_o/p_i) bağlı değişim. Akış şartları Kn=0.04, H=500 ve L=0 dır. 73

4.19: xy düzleminde p_o/p_i = 0.01-0.1-0.5'ye bağlı akış çizgileri ve boyutsuz u_x kontür grafiği. Akış şartları Kn=0.04, H=500 ve L=0 dır. 74

4.20: Boyutsuz u_x, T, p ve n için L_x boyunca basınç oranına (p_o/p_i) bağlı değişim. Akış şartları Kn=0.04, H=1000 ve L=0 dır. 75

4.21: xy düzleminde p_o/p_i = 0.01-0.1-0.5'e bağlı akış çizgileri ve boyutsuz u_x kontür grafiği. Akış şartları Kn=0.04, H=1000 ve L=0 dır. 76

4.22: $p_o/p_i = 0.1$ için H=250, H=500, H=1000 yüksekliklerinde Kn=0.04(solda) ve Kn=10(sağda) değerlerinde kanal boyunca u_x, T ve n dağılımı. 77

4.23: $p_o/p_i = 0.1$ için H=250, H=500, H=1000 yüksekliklerinde Kn=0.04(solda) ve Kn=10(sağda) değerlerinde kanal boyunca u_x, T ve n dağılımı. 77

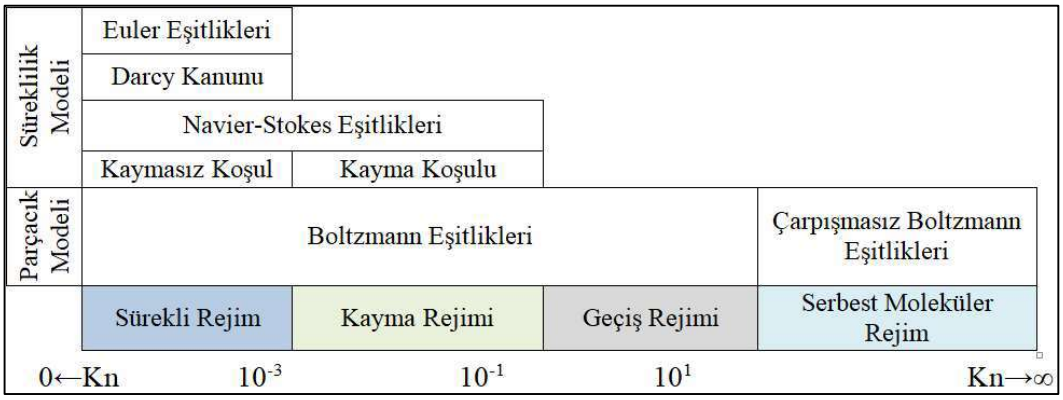
TABLOLAR DİZİNİ

Tablo No:		**Sayfa**
3.1:	Gözenekli ortam içinden akış için simülasyon durumları.	42
4.1:	Yarık akışı için simülasyon durumları.	55

1. GİRİŞ

Makro boyuttaki gaz akışlarının çözümünde en çok kullanılan ve en güvenilir yöntemler özellikle Navier-Stokes ve Euler denklemlerinin çözümlenmesi olmuştur. Akışkanı bireysel parçacıklardan daha çok toplu hareket eden kütle olarak kabul eden bu yöntemler geçmişten günümüze halen geçerliliğini korumaktadır. Hesaplamalı akışkanlar dinamiğinin temel kaygısı, hidrodinamiğin bu kısmi diferansiyel denklemlerini çözmek için sayısal yöntemlerin geliştirilmesi ve uygulanmasıdır. Bu denklemler sadece yüzeydeki kayma gerilmesi ile o yüzeydeki hız gradyeninin her noktada doğru orantılı olduğu Newtonyen akışkanlarını tanımlar. Kn sayısının sürekli rejim aralığında olduğu akış modellemelerinde moleküllerin kütle topluluğu halinde beraber hareket ettiği varsayılır. Kn sayısının sürekli rejimin üstüne çıktığı seyrek gaz ortamlarında moleküllerin bireysel hareketleri akışa hükmetmeye başlar. Bu durumlarda kısmi diferansiyel denklemlerin çözümü problemi açıklamaya yetmez ve kinetik teoriden güç alan çoklu parçacık dinamiği temelli bir yaklaşıma ihtiyaç vardır. Bu tür akışların simülasyonu için çeşitli özel yöntemler geliştirilmiştir.

Bir gazın seyrekleşme derecesi boyutsuz Knudsen sayısı yani bir parçacığın çarpışmadan gittiği ortalama yol ile hesaplama bölgesinin karakteristik geometrik uzunluğu arasındaki oran ile ifade edilebilir. Eğer bu uzunluk gaz moleküllerinin ortalama serbest yolu ile karşılaştırılabilir ölçüde ise akışkan artık termodinamik dengede olarak kabul edilemez ve sürekli olmayan veya seyrekleşme etkilerinin baskın olduğu ortamlar oluşur. Bu ortamlar için moleküler seviyede matematiksel model artık Boltzman eşitlikleridir [1]-[3]. Knudsen sayısı akış rejimlerini Şekil 1.1'deki gibi ayırır:



Şekil 1.1: Knudsen sayısına bağlı akış rejimleri şeması.

Mikro ve Nano-ölçeklerdeki akışkanlar mekaniğinin derinlemesine anlaşılması, mikro / nano-elektro-mekanik-sistemlerin (MEMS / NEMS) gelişmesine ışık tutacak süreçlerin daha iyi anlaşılması için önemlidir. Mikro ve Nano cihazlar genellikle kayma ve geçiş rejimlerinde çalışır. Bu tür gaz akışlarını simüle etmek için farklı yöntemler geliştirilmiştir.

1.1. Moleküler Etkileşime Dayanan Simülasyon Yöntemleri

Seyrek akışkan modellemesi moleküllerin bireysel hareketlerini temel alır. Bir sistem içindeki herbir molekülün anlık hız, pozisyon ve enerji bilgileri ile tüm sistemin makroskobik özellikleri tanımlanabilir. Moleküler simülasyonlar nano/mikro boyutta basit veya kompleks bir kanalda akışın deneysel incelemesinin yapılamadığı durumlarda tüm deneysel hatalardan uzak olarak bilgisayar ortamında incelenmesini sağlar. Matematiksel olarak ifade edilen akış, akış geometrisi, sınırlar ve etkileşimler algoritmalar sayesinde bilgisayar ortamına aktarılarak simüle edilebilir. Simülasyonun hesaplama gücünü sınırlayan etkenlerin başında sistemin büyüklüğü ve yoğunluğu gelir. Fakat etkili algoritmalar ve veri yapıları sayesinde çok sayıda molekül içeren sistemlerin hesabı makul sürelerde ve kişisel bilgisayar sistemlerinde yapılabilir hale gelmiştir. Kinetik teoriyi temel alan moleküler etkileşime dayanan simülasyon yöntemlerinden en önemlileri Moleküler Dinamik Simülasyonu(MDS) ve Doğrudan Simülasyon Monte Carlo(DSMC) yöntemleridir. Ayrıca diferansiyel denklemlerin nümerik çözümlerindeki

gibi kararsızlık ve yakınsamama sorunları bu yöntemlerde yoktur. Boltzman eşitliklerine dayalı kinetik teoriye göre modellendirilmelerinden dolayı tüm akış rejimlerinde geçerlidirler.

1.1.1. Olay Güdümlü Moleküler Dinamik Simülasyonu

Doğrudan Simülasyon Monte Carlo (DSMC) yöntemi[4], çeşitli seyreklik rejimlerinde gaz akışlarını modellemek için yaygın olarak kullanılan en yaygın sayısal tekniklerden biridir. DSMC, kinetik teoriye dayalı Boltzmann denklemini çözmek için olasılıklı parçacık tabanlı bir yöntemdir. DSMC yönteminde molekül hareketleri kesin olmasına rağmen çarpışmaları Moleküler Dinamik yönteminde olduğu gibi tam olarak hesaplamak yerine, seyrek bir gazın kinetik teorisinden belirlenen saçılma oranları ve çarpışma sonrası hız dağılımları ile stokastik olarak çarpışmalar üretir. DSMC simülasyonları atom çapı kadar kısa bir uzunluk ölçeğinde doğru olmasa da, ortalama bir serbest yoldan daha küçük ölçeklerde doğrudurlar[5]. Molekül hareketleri analitik olarak hesaplandığından deterministiktir. DSMC yönteminde milyonlarca molekülü gerçek şekilde modellemek yerine bunları temsilen daha az sayıda molekül kullanır. Bu temsili moleküller simülasyonu ilklendirme aşamasında hücre denilen hesaplama birimlerine yerleştirilir. Ortam sıcaklığı üzerinden Boltzman dağılımından atanan hızlar ile hareket eden ve çarpışmalar yapan her bir hücredeki temsili moleküllerin sahip oldukları termodinamik özellikler üzerinden bütün sistemin makroskobik özellikleri bulunur. Diğer yandan MD simülasyonları daha gerçekçi ve doğrudur çünkü her bir parçacık gerçek bir molekülü temsil eder ve pozisyon ve hız bilgileri tam olarak bilinir. DSMC de MD gibi zaman güdümlü bir simülasyon yöntemidir. Moleküllerin hızına göre belirli bir zaman adımında hareketleri sağlanır. Bu zaman adımını belirlemek oldukça önemlidir. Çünkü çok küçük zaman aralığı simülasyon hızını oldukça yavaşlatır. Büyük zaman adımları ise çok fazla çarpışmanın ve sınır etkileşiminin kaçırılmasına sebep olur. Her zaman adımında moleküllerin pozisyonları ve hızları tekrar güncellenmek zorundadır. İstatiksel olasılık hesabıyla moleküllerin çarpışmaları hesaplanır. Aynı anda sadece iki parçacığın çarpıştığı varsayılır. Momentum ve enerjinin korunumuna göre çarpışma gerçekleştiğinde parçacıklar birbirlerine momentum ve enerji aktarırlar. Sonrasında

hesaplama alanının sıcaklık, yoğunluk ve akış hızı gibi makroskobik özellikleri her hücredeki moleküllerin hızları sayesinde belirlenir. DSMC yöntemi doğasından gelen bazı kısıtlamalara sahiptir. Hücre boyutu yerel ortalama serbest yolla orantılı olmalıdır, çarpışma istatistiklerini korumak için hücre başına parçacık sayısı kabaca sabit olmalıdır. Ayrıca, yöntemin stokastik doğasına karşılık gelen istatistiksel hatalara ilaveten zaman adımı, hücre hacmi ve toplam simüle edilmiş parçacık sayısı gibi sayısal parametrelerin seçimine bağlı olan deterministik hatalara sahiptir[6].

Moleküler Dinamik simülasyon metodunda ise DSMC'den farklı olarak çarpışmalar gerçektir ve hiçbir çarpışma kaçırılmadan modellenir. Parçacıkların hareketi Newton hareket yasalarına göre gerçekleşir. Buna göre parçacık üzerine etkiyen net kuvvet parçacığın momentumunun zamana göre değişimine eşittir. MD simülasyonunda daha gerçekçi kabul edilen sürekli etkileşim potansiyeline göre her molekülün pozisyonuna etkiyen tüm moleküllerin bileşkesi bir kuvvet tesir eder. Bu kuvvetin yönü ve büyüklüğü molekülün pozisyonu ile değişir. Yani çarpışmaların haricinde yörüngesinde ilerleyen bir moleküle moleküller arası kuvvet etki eder. Bu etkileşim potansiyeli sürekli olduğu için yüksek hesaplama gücü ve zamanı harcanmasını gerektirir. Bu sebeple daha basitleştirilmiş Lennard-Jones gibi potansiyeller sıkça kullanılır. MD simülasyonu bir çoklu cisim problemi olduğundan moleküllerin hareket denklemleri birbirine bağlıdır. Analitik olarak çözülemeyeceğinden hız ve ivme gibi dinamik özelliklerin differansiyel formlarını Verlet Algoritması[7] gibi sonlu farklar yöntemine dayanarak Taylor serisi açılımları ile çözen metotlara ihtiyaç vardır. Böylece klasik MD simülasyonlarını çok kısa zaman adımları ile ilerletmek çok büyük zaman harcanmasına ve sistem boyutunun kısıtlanmasına sebep olur[8]. MD simülasyonlarında hesaplama zorlukları molekül sayısı arttıkça artar çünkü etkileşimdeki parçacıklar ve pozisyonları her etkileşim için hesaplanması gerekir. On bin molekül içeren küçük bir hacim için bile integrasyon zaman adımı çok küçük olmak zorundadır ve her adımda çarpışma kontrolü gerekir.

Bu çalışmada kullanılan ve MD'nin bir alt dalı olan Olay Güdümlü Moleküler Dinamik simülasyon yöntemi hem MD hem de DSMC metodlarına göre önemli avantajlara sahiptir. Her bir parçacığı sert bir küre olarak kabul eden Alder ve Wainwright[9]'ın önerdiği sert küre modeli daha kaba bir hesaplama yaklaşımı

sunduğundan daha az maliyetli ve işlevseldir. Buna göre parçacıklar arasında sürekli olmayan sadece birbirleri ile temas ettiklerinde oluşan kesikli etkileşim vardır. Yörüngeleri doğrusal olduğundan bu yaklaşım sayesinde çarpışma zamanları analitik olarak tahmin edilebilir. Bu potansiyelde simülasyon belirli zaman adımları yerine en yakın zamanda olacak çarpışmanın zamanına ilerletilir. Yani simülasyon olay güdümlü olarak bir olaydan başka bir olaya sadece olaya karışan parçacıkların zamanları güncellenerek ilerler ve simülasyon bir seri asenkron olaydan oluşur. OGMD simülasyonlarında en önemli hesaplama, olayların belirlenip en yakın zamanlı olanın seçilmesidir. Sistem hacmi hücre adı verilen alt bölgelere ayrılır ve uzak moleküllerin birbiri ile etkileşemeyecekleri varsayılırsa her bir molekülün olay zamanı hesaplanır. Devamında en yakın zamanlı olayın seçilmesi N tane molekül barındıran bir sistemde O(N) seviyesinde gerçekleşir. Tüm olayların oluş zamanları tek seferde hesaplandığından olay işlendiğinde ilgili parçacıkların olaylarının silinip tekrar hesaplanması yeterlidir. Böylece her olaydan sonraki olayın tüm parçacıklar için hesaplanmasına gerek yoktur. Bu süreç İkili Arama Ağacı(Binary Search Tree)[10], Örtük Altyığın(Implicite Heap-Dynamic)[11] ve Tam İkili Ağaç(Complete Binary Tree)[12] gibi veri yapılarının kullanımı ile hızlandırılmıştır. Ayrıca [12]' de verilen Tam İkili Ağaç yapısı ile Öncelik Kuyruğu(Priority Queue)'nu birlikte kullanmak bu işlemi O(1) seviyesine indirmiştir[13].

OGMD simülasyonu daha büyük sistemleri zaman güdümlü simülasyonlara göre daha uzun periyotlarda simüle edebilir. Bu yaklaşım seyrek gazların transport katsayılarının hesabında oldukça tutarlı sonuçlar verir[13]-[15]. DSMC' nin aksine molekül yörüngeleri, çarpışma çiftlerinin belirlenmesi ve çarpışma sonrası hızlar deterministik olarak hesaplanır. İlave olarak tüm çarpışmalar gerçek ve tahmin edilebilirdir ve en önemlisi hiçbir çarpışma kaçırılmadan gerçekleşir. İlk ortaya çıkışından beri etkili algoritmaların geliştirilmesi sayesinde OGMD simülasyonları daha iyi performans sunmaktadır[10],[14],[16]. Böylece hesaplama gücü DSMC ile rekabet edebilecek düzeye gelmiştir.

Literatürde seyrek gazlar için OGMD simülasyonu ile yapılmış ve tutarlı sonuçlar vermiş çalışmalardan bazılarına transport katsayıları hesabı[15]-[17] , yerçekimi

güdümlü akışlar[19],[20], kavite akışları[21], Couette akışları, basınç güdümlü akışlar ve bimoleküler kimyasal gaz reaksiyonları[13] örnek gösterilebilir.

1.2. Çalışmanın Amacı ve Kapsamı

Gözenekli ortam içinden akış birçok bilim ve mühendislik alanı için önemli bir araştırma konusudur. Özellikle mikro/nano kanal ve nozul, filtrasyon, fraksiyonlama ve kataliz uygulamalarında karşımıza çıkan akış problemlerindendir. Bu tür ortamlarda gaz taşınımının incelenmesi için deneysel olanaklar çok sınırlıdır. Proton değişim membranı (proton-exchange membrane), yakıt hücreleri (fuel cell) gibi cihazlarda, gözenekli ortamın gözenekleri moleküllerin ortalama serbest yolundan bile daha küçüktür [22], [23]. Bu nedenle Kn ilişkili en önemli rejim olan geçiş rejiminin incelenmesi önem kazanmıştır.

Akış alanını azaltan dar boğaz içinden akışların incelenmesi son derece önemlidir. Bu dar boğazlar geometrilerine göre adlandırılırlar. Silindirik geometride dar boğazlar orifis (orifice), dikdörtgensel geometride olanlar ise yarık (slit) olarak bilinir. Bir yarık içinden basınç farkı kaynaklı gaz akışı seyrek gaz dinamiğinde temel problemlerdendir. Paralel levhaların içinden akış uzay araçları, mikro itki sistemleri (micro propulsion), mikro nozül akışları, MEMS veya vakum ölçerlerdeki ani ve hızlı basınç değişimi ölçümü [24]-[26] gibi farklı teknolojik uygulamaların pratik tasarımında başlıca problemlerdendir. Hatta küçük veya büyük basınç farkları çeşitli endüstriyel ekipman tiplerinin tasarım ve optimizasyonunda büyük önem arz eder [27]. Sonlu uzunluktaki paralel iki levha arasından seyrek gaz akışı membran uygulamalarında da pratik öneme sahiptir [28]. Bu tür akışların incelenmesi tüm Knudsen sayısı aralığındaki birçok denge dışı fenomenin araştırılmasına imkan sağlar. Bu dengeden sapma Kn sayısının geçiş rejimi bölgesinde daha yoğun görülür. Bu problemlerin anlaşılması ve çözümlenmesi için geçiş rejimi bölgesinde yarık akışı incelemelerinin yapılması gerekir. Biri yüksek diğeri düşük basınçtaki sonsuz büyüklükte kabul edilen iki rezervuarı ayıran ince bir yarıktan akış literatürde sıklıkla incelenen problemdir. Bu yarık sonsuz ince veya belirli bir kalınlıkta olabilir. Genelde DSMC metodu ile yapılan modellemelerde yarık bölgesi daha küçük hücrelere bölünerek hesaplama yapılır.

Bu çalışmanın temel amaçları öncü çalışmada[13] nesne yönelimli programlama tekniği ile geliştirilen ve çalışma prensibi Bölüm 2'de anlatılan çerçeve yazılım özelliğindeki OGMD simülasyonuna yeni sınır koşulları geliştirilerek eklenmesi ve akış problemlerinin modellenerek incelenmesidir.

Nano boyutta iki paralel plakanın ortasına yerleştirilen çeşitli uzunluk(L) ve yükseklikte(H) geometriye sahip yarık tipli bir engel içinden basınç güdümlü akış Olay Güdümlü Moleküler Dinamik (OGMD) simülasyonu ile incelenmiştir. Geçiş rejimi aralığında kanal boyunca akış hızı, sıcaklık, basınç ve kütle yoğunluğu dağılımları ve akış oranı özellikleri elde edilmiştir. Bu makroskobik özellikler, gazın Knudsen sayısı (Kn), yarığın geometrisi ve kanalın çıkış/giriş basınç oranı parametreleri değiştirilerek oluşturulan çeşitli durumlar için incelenmiştir.

Kartezyen koordinatlarda çalışan mevcut simülasyonda eş boyutlu küresel parçacıkların kübik yerleşimi ile oluşturulan gözenekli (porous) ortam içinden akış modellenmiştir. Katı parçacıkların çapı, gözeneklilik ve Kn sayısının vizkosite, akış oranı, geçirgenlik ve kıvrımlılık özelliklerine etkileri incelenmiştir.

Yapılan literatür çalışmasında ilgili problemlere ait benzeri olmayan geometriler irdelenmiş ve yeni gerçekliklere ışık tutulmuştur. Benzer olanlar ise OGMD simülasyonu ile modellenip doğrulanmıştır. Bu doğrulamalar sayesinde simülasyona eklenen fonksiyonların ve hesaplamaların doğru şekilde işlediği de görülmüştür.

Bu çalışma 5 bölümden oluşmaktadır. Bölüm 1'de akışkanların Kn sayısı ilişkili olarak ayrıldığı rejimler açıklanmış ve bu rejimlerdeki akışkanların modellenmesi için geliştirilen simülasyon yöntemleri avantaj ve dezavantajları ile tanıtılarak OGMD simülasyonu hakkında bilgi verilmiştir.

Bölüm 2'de OGMD simülasyonları detaylı olarak anlatılmış ve işleyişi açıklanmıştır. Öncelikle simülasyonu hızlandırma amaçlı hücre bölümlendirme tekniği ve Tam İkili Ağaç Yapısı ile Öncelik Kuyruğu algoritmasından bahsedilmiştir. Daha sonra simülasyonun ilklendirilmesi aşamasında moleküllerin yerleştirilmesi, enerji, sıcaklık ve molekül hızları arasındaki ilişkilerin tanımlanması, moleküllerin yörüngeleri ve konumlarının yeniden nasıl belirlendiği anlatılmıştır. Esnek ve esnek olmayan çarpışma türleri anlatılmıştır. Devamında hücreler arası geçiş ve çarpışma zamanı ve çarpışma sonrası hız ve enerjilerin hesaplanması ve moleküllerin sistem sınırları ve

kanal içi duvarlar ile olan etkileşimini tanımlayan periyodik, düzgün yansıma, dağınık yansıma sınır koşulları anlatılmıştır. Sonrasında akışı sağlayan basınç güdümlü akış sınır koşulu anlatılmıştır. Makroskobik özelliklerin hesaplanması tanımlanarak bölüm bitirilmiştir.

Bölüm 3'de önce gözenekli ortamın modellenmesi aşaması anlatılmıştır. Sonra gözenekli ortam içinde akışta en önemli parametreler olan geçirgenlik, kıvrımlılık, viskozite katsayısı ve kütle akış oranının hesaplanmasına dair öne sürülen model formülasyonlar belirtilmiştir. Ayrıca gözenekli ortamda Kn sayısının belirlenmesi için yeni bir yöntem tanımlanmıştır. Simülasyonun kurulumunda kabul edilen koşullar belirtilmiş ve modellenen çeşitli simülasyon durumları tanımlanmıştır.

Bölüm 4'de ilk önce parallel plaka arasındaki yarık tipli engelin modellenmesi açıklanmıştır. Kurulum konfigürasyonları ve yarık geometrileri tanımlanmıştır. Kn sayısı ve yarığın H ve L boyutlarının akış oranı üzerine etkileri geçiş rejiminde incelenmiştir. Makroskobik akış özelliklerinin kanalın akış yönü boyunca dağılımı Kn sayısı ve çeşitli yarık geometrileri için elde edilmiştir. Mach diskleri ve yarık bölgesindeki girdap oluşumları gözlemlenmiştir.

Son bölüm olan Bölüm 5'de ise gerçekleştirilen çalışmaların değerlendirilmesi yapılmış, elde edilen bulgular özetlenmiştir.

2. OLAY GÜDÜMLÜ MD SİMÜLASYONUNUN YAPISI VE İŞLEYİŞİ

Bu çalışmada da kullanılan öncül OGMD simülasyonlarının[13],[14] çalışma prensibi bu bölümde anlatılmıştır. Öncelikle simülasyonu hızlandırmayı amaçlayan hücre bölümlendirme tekniği, öncelik kuyruğu ve ağaç yapısı algoritmasından bahsedilmiştir. Sonra simülasyonun ilklendirme ve ilerlemesi aşamalarını oluşturan moleküllerin yerleştirilmesi, enerji, sıcaklık ve molekül hızı arasındaki ilişkinin hesaplanarak moleküllere hareket verilmesi, pozisyonlarının hesaplanması, hücreler arası molekül geçişi, moleküller arası çarpışmaların molekül tiplerine bağlı olarak gerçekleştirilmesi, molekül ile sınırlar arası çarpışma sınır şartları ve akış sınır şartının simülasyonda ifade edilişleri bu bölümde tanımlanmaktadır.

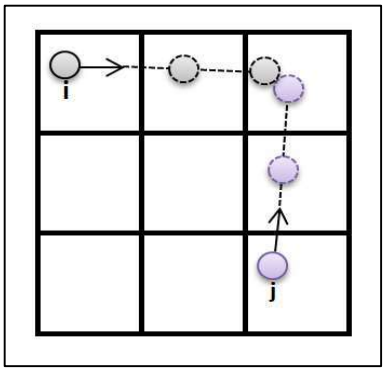
2.1. Hızlandırma Algoritmaları

2.1.1. Hücre Bölümlendirme

Sistem içindeki N tane molekülün birbirleri ile çarpışma zamanlarını bulurken her bir molekül O(N) hesaplama yükü gerektirdiğinden molekül sayısı arttıkça simülasyon hızı yavaşlar. Bir molekülün kendisine çok uzak bir molekül ile çarpışma olasılığı daha yakın bir molekül ile çarpışması olasılığına göre çok büyük olacağından molekülün çarpışma eşinin çok uzakta aranması gereksiz ve hesaplama yükünü artırır. Bu sebeple molekülün de içinde bulunduğu veya moleküle en yakın alt sistem içindeki bir molekül veya sınır ile çarpıştığını düşünmek daha mantıklıdır[14]. Hiçbir çarpışma es geçilmeyecek şekilde çarpışma olasılığı bulunan mesafedeki moleküllerin çarpışma zamanları hesaplanmalıdır. Bu sebeple sistem alt bölgelere ayrılır. Bölgelerin geometrisi bu çalışmada küptür.

Bir molekülün çarpışma olasılığı bulunan molekül veya sınır, 3 boyutlu sistemde kendi içinde bulunduğu hücre ile etrafındaki kenarları ve yüzeyleri temas eden 26 komşu hücre içinde aranır. Her molekül bir hücre içinde bulunur. Molekül hücre sınırı dışına çıktığında komşu hücrenin içine girerek onun üyesi olur. Eğer iki molekül arası mesafe

Şekil 2.1‘deki gibi iki hücrenin boyutundan fazla ise moleküller önce hücreler arası geçiş yapar.



Şekil 2.1: Boyut için hücre bölümlendirme.

2.1.2. Tam İkili Ağaç Yapısı ve Öncelik Kuyruğu Uygulaması

Modellenecek ilk olayın belirlenmesi işleminde iki aşamalı bir yöntem kullanılır[29]. İlkinde her bir molekülün gerçekleştireceği tüm olaylar sıralanır ve içlerinden en yakın zamanlı olanı hafızada tutulur. İkinci aşamada ise tüm bu olaylar içinden en yakın zamanlı olanı seçilir ve simülasyon olay zamanına ilerletilerek olay işlenir. Olay işlendikten sonra tüm olaylar yerine sadece ilgili moleküllerin olayları güncellenir. Bu işlem simülasyon boyunca devam eder.

Paul[30] tarafından geliştirilen öncelik kuyruğu yapısı Akkaya[13] tarafından OGMD simülasyonuna uyarlanarak molekül sayısındaki artışın simülasyon hızını düşürmesi engellenmiştir. Bu simülasyondaki öncelik kuyruğu yapısı:

i) Tüm olaylar gerçekleşme zamanlarına göre takvim yapısı benzeri bir yapıyla gruplandırılır.

ii) En yakın zamanda bulunan gruba ait olaylar için tam ikili ağaç yapısı uygulanır[12].

Kaynak kodun öncül çalışmasında kullanılan yöntemde, sıradaki olayın seçimi hücre yapısı ile ilişkilendirilmiştir[14]. Burada bir hücreye ait olaylar arasından en yakın zamanlı olanı o hücrenin güncel olayı olarak seçilir. Güncel olaylar arasında yapılan doğrusal aramayla sıradaki olay belirlenmiş olur. Bir olay işlendiğinde güncel olayların tüm hücreler için yeniden belirlenmesine ihtiyaç duyulmaz. Sadece olaya müdahil olan

moleküllerin ve varsa çarpışma eşlerinin ait oldukları hücrelerin güncellenmesi yeterlidir. Ancak molekül sayısının artması çarpışma zamanı hesaplama süresinin kullanımını artırmaktadır. Sıradaki olayın seçimi için harcanan süredeki artış simülasyon hızını doğal olarak olumsuz yönde etkiler. Sıradaki olay seçiminde doğrusal arama yöntemine alternatif olarak öncü çalışmada[16] Öncelik Kuyruğu kullanılmıştır. Paul[30] tarafından OGMD simülasyonu için önerilen öncelik kuyruğu uygulamasından farklı olarak [13]'deki tam ikili ağaç yapısında ekleme ve silme işlemi yoktur. Bir olay işlendikten sonra güncel olay listesinden silinmeyerek yeni zamanına göre farklı bir olay listesine eklense bile tam ikili ağaç yapısında olmaya devam eder.

OGMD simülasyonunda Tam ikili ağaç yapısı uygulanışı şöyledir: Önce her bir yaprağı bir olayı temsil edecek şekilde tüm olayları içeren bir tam ikili ağaç yapısı oluşturulur. Yapraklardan başlayarak en yakın zamanlı olay ikişer ikişer turnuva yöntemiyle bir üst düğüme çıkarak köke kadar bu karşılaştırma yapılır. Böylece en yakın zamanlı olay kök düğüme ulaşır. Olay güncellemesi ağacın yaprağından köküne doğru turnuvalar ile devam eder.

2.2. Simülasyonun Tanımlanması

Bir OGMD simülasyonunun işletilebilmesi için gaz özelliklerinin, hesaplama alanının fiziksel boyutlarının ve sınır ve başlangıç koşullarının tanımlanması gerekir. Akışa ait sıcaklık, basınç ve hız bilgilerine ihtiyaç vardır. Sert küre kabulü için çap(d), kütle(m) ve molekül tipi(monoatomik, diatomik vb.) özelliklerinin bilinmesi gerekir. Akışın olduğu fiziksek boyutlar, sınır koşulları, duvar sıcaklığı ve giriş ve çıkış basınçları verilmelidir.

2.2.1. Moleküllerin Yerleştirilmesi

Ayrıt ölçüleri bilinen ve hacmi V olan kartezyen koordinatlardaki kanal içinde bulunan N tane molekülün sayı yoğunluğu $n = N/V$ 'dir. Bu durumda iki molekül arasındaki ortalama mesafe (s) aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$s = \sqrt[3]{V/N}$$
$$s^3 = \frac{1}{n} \tag{2.1}$$

Bir molekülün hiçbir etkileşime girmeden gidebileceği ortalama serbest yol (λ) aşağıdaki gibidir[31].

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}\pi {d_m}^2 n} \tag{2.2}$$

Böylece ortama serbest yol aşağıdaki gibi olur.

$$\frac{\lambda}{d} = \frac{(\frac{s}{d_m})^3}{\sqrt{2}\pi} \tag{2.3}$$

2.2.2. Enerji, Sıcaklık ve Molekül Hızı Arasındaki İlişki

Termal hızlarından dolayı moleküller kendi aralarında çarpışırlar ve birbirlerine enerji ve momentum aktarırlar. Eğer çevresinden izole edilmiş bir sistem içindeyse ve sistem içinde enerji üretimi yoksa bir süre sonra moleküller arasında ısıl denge sağlanır. Moleküller üç boyutlu uzayda ileri hareket etme, dönme ve titreşme hareketlerinden dolayı sahip olduğu üç serbestlik derecesine karşılık gelen öteleme, dönme ve titreşim enerjilerine sahiptirler. Sistem ısıl dengeye ulaştığında bir molekülün toplam enerjisi eş bölüşüm teoremine[32] göre sahip olduğu serbestlik derecesi sayısında eşit paylaşılır. Bu paylaşma serbestlik derecesi (φ) başına $e = \frac{1}{2}k_b T$ olacak şekildedir.

Bir molekül üç boyutlu Kartezyen koordinatlarda ileri geri hareketler yapabilir. Monoatomik veya diatomik fark etmeden ötelenme serbestlik derecesine ($\varphi_{öte}$) göre kinetik enerjisi $e_{öte} = \frac{3}{2}k_b T$ olur.

Monoatomik bir molekülün etrafında dönme yapacakları bir eksenleri bulunmadığı için serbestlik dereceleri ($\varphi_{dön} = 0$) ve dolayısıyla dönme kinetik enerjileri $e_{dön} = 0$

olur. Diatomik moleküller ise ortak bir eksen etrafında dönebildikleri için iki serbestlik derecesine ($\varphi_{dön} = 2$) ve dolayısıyla dönme kinetik enerjileri $e_{dön} = k_b T$ olur.

Titreşim hareketi için monoatomik moleküllerin serbestlik dereceleri olmadığından ($\varphi_{tit} = 0$) titreşim enerjileri de yoktur ($e_{tit} = 0$). Diatomik moleküller ise birbirlerine yakınlaşıp uzaklaşarak titreşim hareketi yapabilirler. Bu tek hareketten dolayı serbestlik dereceleri ($\varphi_{tit} = 1$) ve titreşim enerjileri $e_{tit} = \frac{1}{2} k_b T$ olur.

Isıl dengede iken kinetik sıcaklık ile moleküllerin ortalama kinetik enerjileri arasında $\langle e_{öte} \rangle = \frac{3}{2} k_b T = \frac{1}{2} m \langle c^2 \rangle$ ilişkisi vardır. Burada $\langle c^2 \rangle$ moleküllerin ısıl hız kareleri ortalamasıdır. Isıl hız kareleri ortalamasının karekökü $c_{kok} = \sqrt{\langle c^2 \rangle}$ ile sıcaklık arasındaki ilişki ise $c_{kok} = \sqrt{\frac{3k_b T}{m}}$ şeklinde verilir. Kinetik teorinin temelini oluşturan Boltzmann denklemine göre ısıl dengedeki moleküllerin hız dağılımları aşağıdaki gibidir.

$$f^*(c) = \left(\frac{m}{2\pi m k_b T}\right)^{3/2} 4\pi c^2 e^{-\frac{mc^2}{2k_b T}} \tag{2.4}$$

Simülasyonun ilklendirme aşamasında moleküllere aşağıda anlatılan yöntemle Maxwell dağılımından örneklenmiş ısıl hız bileşeni atanır:

$$\begin{aligned} u_{ısıl} &= c_{eo}\sqrt{-ln(R_1)}\, sin(2\pi R_2) \\ v_{ısıl} &= c_{eo}\sqrt{-ln(R_3)}\, sin(2\pi R_4) \\ w_{ısıl} &= c_{eo}\sqrt{-ln(R_5)}\, sin(2\pi R_6) \end{aligned} \tag{2.5}$$

Burada c_{eo} molekülün en olası hızıdır. Eğer sistemde bir akış varsa akışın hız bileşenleri moleküllerin ısıl hız bileşenlerine aşağıdaki gibi eklenir.

$$\begin{aligned} u &= u_{ısıl} + U \\ v &= v_{ısıl} + V \\ w &= w_{ısıl} + W \end{aligned} \tag{2.6}$$

Molekülün tipi diatomik ise ayrıca dönme enerjisi atanır:

$$e_{dön} = -ln(R_7)k_bT \tag{2.7}$$

Burada $R_{1..7}$ tekbiçimli dağılımdan rastgele seçilerek elde edilir.

2.2.3. Moleküllerin Yörüngeleri ve Konumlarının Yeniden Belirlenmesi

Yörüngeler doğrusaldır ve Newton'un hareket yasalarına göre belirlenir. Sert küre yaklaşımına benimsendiğinden sadece çarpışma esnasında etkileşim olur sürekli etkiyen bir kuvvet alanı yoktur. Hareket eden bir molekülün Δt zaman sonra yeni konumu aşağıdaki gibi hesaplanır:

$$\boldsymbol{x_2} = \boldsymbol{x_1} + \Delta t\boldsymbol{c} \tag{2.8}$$

Ortalama hıza sahip bir molekülün ortalama çarpışma süresinin hesabı aşağıdaki gibidir.

$$\langle t_c \rangle = \frac{2\lambda}{N\langle c \rangle} \tag{2.9}$$

Her olaydan sonra tüm moleküllerin konumlarının yeniden hesaplanması hesaplama yükünü ve sayısal hatayı artırır. Öncül çalışmanın yaklaşımına göre moleküllerin konumları sadece hızı değiştirecek molekül ve sınır çarpışmaları sonucunda güncellenmektedir.

2.3. Olay Tanımları

OGMD simülasyonunda işlenecek olaylar şunlardır: Bir molekülün hücreler arası geçişi, sistem sınırına ulaşması ve diğer moleküller ile çarpışmasıdır. Bu çalışmadaki geliştirmelerin sonucu olarak kanal içine koyulan duvarlar ve katı cisimler ile etkileşimi de ekleyebiliriz.

En önce meydana gelme zamanına göre her olay sırası ile gerçekleştirilerek olaya karışan moleküllerin konumu güncellenir.

2.3.1. Hücreler Arasında Geçiş

Bir molekül en yakın zamanlı olay olarak bir molekül ile çarpışmayacak ise hücre geçişi yapabilir. Hücre sınırına ulaşma zamanı aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$t_j = \frac{\Delta x_j - d_m/2}{c_j} \tag{2.10}$$

Burada t_j molekülün j yönündeki hücre sınırına varış süresi, Δx_j molekül ile j yönündeki hücre sınırı arasındaki dik uzaklık, d_m molekülün çapı ve c_j ise hızıdır. Burada hücre yüzeyi ya sistem sınır ya da komşu hücrenin bitişik yüzeyidir. Hücre yüzeyi eğer sistem sınırı ise sınır koşulu, eğer kanal içindeki bir duvar ise duvar çarpışma koşulu, bunlarda değil ise komşu hücreye geçiş uygulanır. Son durumda molekül eski hücrenin üyelerinden çıkarılır yeni hücrenin sahipliğine eklenir. Molekülün sonraki yeni olayı hesaplanır.

2.3.2. Moleküller Arası Çarpışmalar

2.3.2.1. Çarpışma Zamanlarının Hesaplanması

Seyrek gaz simülasyonlarının doğası gereği simülasyonda herhangi bir olay anında sadece tek bir ikili çarpışma olur. Sert küre kabulüne göre moleküllerin yörüngeleri doğrusaldır yani iki çarpışma arasında molekülün hızını ve yörüngesini değiştirecek herhangi bir kuvvet yoktur.

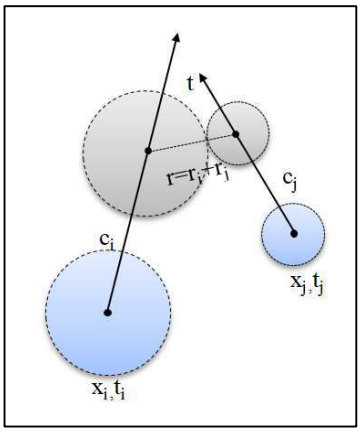
Yörüngesinde ilerleyen iki molekülün çarpışması bu iki molekülün arasındaki mesafenin yarıçapları toplamı kadar olduğunda gerçekleşir.

$$\sum_{n=1}^{3}(x_{j,n}^{*}-x_{i,n}^{*})^{2}=\frac{(d_{m,j}+d_{m,i})^{2}}{4} \tag{2.11}$$

Burada i ve j çarpışacak molekül çifti, x_n^* pozisyon bileşeni ve d_m ise moleküllerin çapıdır. Çarpışma anında moleküllerin konumları aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$\begin{aligned} x_{i,n}^{*} &= x_{i,n}+c_{i,n}(t-t_i) \\ x_{j,n}^{*} &= x_{j,n}+c_{j,n}(t-t_j) \end{aligned} \tag{2.12}$$

Burada t_i ve t_j her moleküle ait zaman değişkenleridir. Çarpışma zamanı ise her molekül için aynı t dir.



Şekil 2.2: İki molekülün çarpışması.

Eşitlik (2.12)'yi (2.11)'de yerine koyarsak aşağıdaki eşitlik elde edilir:

$$\sum_{n=1}^{3}(x_{i,n}+c_{i,n}(t-t_i)-x_{j,n}+c_{j,n}(t-j))^{2}={d_m}^{2} \tag{2.13}$$

Daha sade bir forma getirmek için Δx_n ve Δc_n aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$\Delta x_n = c_{j,n}\Delta t_{i,j} + x_{j,n} - x_{i,n}$$
$$\Delta c_n = c_{j,n} - c_{i,n} \tag{2.14}$$

Böylece Eşitlik(2.13) aşağıdaki hale gelir:

$$\sum_{n=1}^{3} (\Delta c_n)^2 (t - t_i)^2 + 2\Delta x_n \Delta c_n (t - t_i) + (\Delta x_n)^2 = {d_m}^2 \tag{2.15}$$

Daha da basitleştirmek için $A = \sum_{n=1}^{3} (\Delta c_n)^2$, $B = \sum_{n=1}^{3} \Delta x_n \Delta c_n$ ve $C = \sum_{n=1}^{3} (\Delta x_n)^2 - d^2$ tanımlaması yaparsak çarpışma zamanı ikinci derece denklem olarak aşağıdaki gibi yazılır.

$$A(t - t_i)^2 + 2B(t - t_i) + C = 0 \tag{2.16}$$

Eğer bu eşitliğin gerçek kökleri yoksa moleküllerin yörüngesi kesişmez. Pozitif gerçel kökler varsa küçük kök çarpışma zamanını verir.

Molekül tipleri aynı zamanda çarpışmanın karakterini belirler. Çarpışan iki molekülün türüne göre esnek veya esnek olmayan çarpışma simülasyonda işletilir. Çarpışma sonrası hızlar çarpışma türüne göre hesaplanır. Bu türler aşağıda açıklanmıştır.

2.3.2.2. Esnek Çarpışma

Monoatomik molekülleri esnek çarpışma yapar. Bu çarpışmada kütle, ötelenme enerjisi ve momentum korunur. İki moleküle ait fiziksel özellikler m_i, x_i ve u_i sırasıyla, kütle pozisyon vektörü ve hız vektörü olsun. Burada $i = 1,2$ olmak üzere iki molekülü tanımlar. Momentum korunumu yasası gereği çarpışma öncesi ve sonrası momentumlar aşağıdaki ilişkiye sahiptir.

$$m_1 u_1 + m_2 u_2 = m_1 u_1' + m_2 u_2' \tag{2.17}$$

Burada $'$ çarpışma sonrası hızları tanımlar. Böylece:

$$m_1(u_1 - u_1') = -m_2(u_2 - u_2') \tag{2.18}$$

olur. Kinetik enerjinin korunumu gereği aşağıdaki eşitlik türetilir.

$$\frac{1}{2}m_1(u_1 \cdot u_1) + \frac{1}{2}m_1(u_1 \cdot u_2) = \frac{1}{2}m_1(u_1' \cdot u_1') + \frac{1}{2}m_2(u_2' \cdot u_2') \tag{2.19}$$

Bu eşitliği indirgersek aşağıdaki eşitliğe ulaşırız.

$$m_1(u_1 - u_1') \cdot (u_1 + u_1') = -m_2(u_2 - u_2') \cdot (u_2 + u_2') \tag{2.20}$$

Bir çarpışmada, her bir molekül için momentumdaki değişim, temas anında merkezler arasındaki vektörün yönündedir. Bu yöndeki birim vektör k'yı aşağıdaki gibi tanımlarız.

$$k = \frac{x_1 - x_2}{|x_1 - x_2|} \tag{2.21}$$

Böylece momentumdaki değişim aşağıdaki gibi olur:

$$m_1(u_1 - u_1') = -m_2(u_2 - u_2') = ak \tag{2.22}$$

Bu sayede kinetik enerjinin korunumu aşağıdaki şekilde tanımlanabilir:

$$k \cdot (u_1 + u_1') = k \cdot (u_2 - u_2') \tag{2.23}$$

$m_1(u_1 - u_1') = ak$ eşitliğinden yararlanarak $u_1' = u_1 - (\frac{a}{m_1})k$ elde ederiz. Aynı şekilde $u_2' = u_2 - (\frac{a}{m_2})k$ eşitliğine ulaşırız. Bu, kinetik enerjinin korunmasının aşağıdakileri gerektirdiği anlamına gelir:

$$k\left(2u_1 - \left(\frac{a}{m_1}\right)k\right) = k(2u_2 + \left(\frac{a}{m_2}\right)k) \tag{2.24}$$

$k \cdot k = 1$ olduğundan Eşitlik(2.24)'ü aşağıdaki şekilde indirgeyebiliriz:

$$\begin{aligned} 2k(u_1 - u_2) &= a(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}) \\ a &= 2k(u_1 - u_2)/(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}) \end{aligned} \tag{2.25}$$

Eşitlik(2.25)'in sağ tarafindaki her şey bilindiğinden a bulunabilir. Böylece u_1' ve u_2' hesaplanabilir.

2.3.2.3. Esnek Olmayan Çarpışma

Elastik olmayan çarpışma her ikisi de monoatomik olmayan moleküller arasındaki çarpışmayı modellerken esas alınan çarpışma türüdür. Çarpışma öncesinde iki molekülün kütle merkezi hızı (V_{km}) ve göreli hızı (V_g) aşağıdaki gibidir:

$$\begin{aligned} V_{km} &= \frac{m_A v_A + m_B v_B}{m_A + m_B} \\ V_g &= v_A - v_B \end{aligned} \tag{2.26}$$

Bu çarpışmalarda toplam enerji korunacak şekilde ötelenme ve dönme modları arasında enerji transferi olur. Bu enerji transferininin açıklanması için öncül çalışmada Borgnakke-Larsen yaklaşımı[33] kullanılmıştır. Buna göre çarpışmada ötelenme ve dönme enerjileri serbestlik derecelerine göre bir dağılımdan birbirleriyle paylaştırılır.

Çarpışan A ve B molekül ikilisinin dönme serbestlik derecesi her iki molekülün dönme serbestlik derecesi toplamına eşittir.

$$\varphi_{dön} = \varphi_{dön,A} + \varphi_{dön,B} \tag{2.27}$$

Ötelenme serbestlik derecesi ise sert küre yaklaşımı için $\varphi_{öte} = 4$ 'tür. Serbestlik dereceleri toplamı ϕ aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$\phi = \varphi_{öte} + \varphi_{dön} \tag{2.28}$$

Çarpışma sonrası toplam enerjinin parçacıklar arasında paylaşımı için aynı sonuçları veren iki yaklaşım vardır. Birinci yaklaşımda toplam enerji önce kinetik enerji ve iç enerji olarak ayrılıp sonra her enerji modu için moleküllerin sahip oldukları enerjiler belirlenir. İkinci yaklaşımda ise önce her molekülün taşıdığı toplam enerji belirlenir, sonra her molekülün toplam enerjisi enerji halleri tarafından paylaşılır. $e_{öte}$ ve $e_{dön}$ sırasıyla bağıl ötelenme ve dönme enerjileri olmak üzere çarpışma öncesi ve sonrasında toplam enerjinin korunumuna göre aşağıdaki eşitlik elde edilir.

$$e_{öte} + e_{dön,A} + e_{dön,B} = e'_{öte} + e'_{dön,A} + e'_{dön,B} \tag{2.29}$$

Göreli ötelenme enerjisi ise aşağıdaki gibidir:

$$e_{öte} = \frac{1}{2}\mu_{AB}|V_G|^2 \tag{2.30}$$

Toplam çarpışma enerjisi e_T serbestlik derecelerine (φ_A ve φ_B) göre e_A ve e_B şeklinde paylaşıldığına göre e_A'nın herhangi bir değeri alma olasılığının (P) maksimum olasılığa (P_{max}) oranı aşağıdaki gibi olur [4]:

$$\frac{P}{P_{mak}} = \left\{\frac{\varphi_A + \varphi_B - 2}{\varphi_A - 1}\left(\frac{e_A}{e_B}\right)\right\}^{\varphi_A - 1}\left\{\frac{\varphi_A + \varphi_B - 2}{\varphi_B - 1}\left(1 - \frac{e_A}{e_B}\right)\right\}^{\varphi_B - 1} \tag{2.31}$$

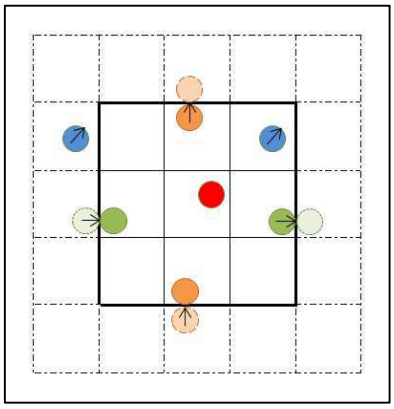
Kabul-red yöntemi[4] ile e_A ve e_B'nin değerleri bulunur.

2.4. Duvar Sınır Koşulları

Öncü çalışmada gazın sınırlar ile ilişkisini veren sınır koşullarından basınç kaynaklı akış koşulu, periyodik sınır koşulu, düzgün ve dağınık yansıma sınır koşulları modellendi. Bu çalışmada farklı durum simülasyonları için mevcut sınır şartlarından yararlanıldı.

2.4.1. Periyodik Sınır Koşulu

Büyük bir sistemi fiziksel olarak simüle etmek çok büyük hesaplamak yükü gerektirir. Bunu yerine bu büyük sistemin kendini temsil eden küçük bir parçasını incelemek daha doğrudur. Bu küçük sistem büyük sistemin bir parçası olması için sınırlar ile kapalı olmamalıdır. Bu durum MD simülasyonlarında periyodik sınır şartı ile sağlanır[34]. Sistem periyodiklik doğrultusunda sonsuz bir örgüde kendini tekrar eder. Periyodik olarak tanımlanan sınıra ulaşan bir molekül sistemin içine aynı doğrultuda ve hızda karşı yüzeyden girer. Bir periyodik sınır ile yüzey temasında olan hücrelerin karşı tarafta sanal görüntüleri varmış gibi düşünülür. Geometrik şartların sağlanması halinde bu hücreler arasında komşuluk ve bitişiklik ilişkileri kurulur. Böylelikle periyodik sınır hücresinde bulunan moleküller birbirlerinin olası çarpışma eşleri olur ve periyodik sınırlardaki molekül kopyalarının tutulma ihtiyacı ortadan kalkar. Bu moleküllerin çarpışma zamanları hesaplanırken aralarındaki mesafeye hücrelerin ilişkisine göre bir sistem boyu (L_i) eklenir ya da çıkarılır. Ayrıca iki periyodik sınır arasında en az üç hücrenin bulunması şarttır. Aksi takdirde bir hücrenin sağ ve sol tarafındaki bitişiği aynı hücre olacaktır. Hücre yapısında periyodik sınır şartının oluşumu aşağıdaki şekilde gösterilmiştir.

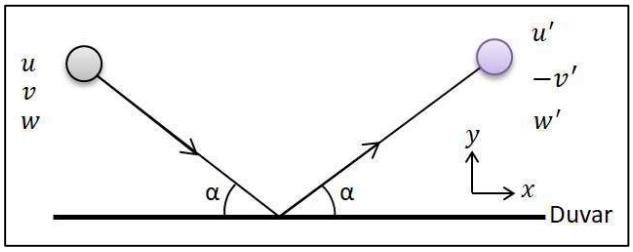


Şekil 2.3: Periyodiklik Sınır Şartı.

2.4.2. Düzgün Yansıma Sınır Koşulu

Düzgün yansıma sınır koşulu, moleküllerin katı duvardan yansımalarını, gelen ve yansıma açılarının eşit olduğunu ima eder. Düzgün yansımanın ardındaki temel varsayım tamamen pürüzsüz bir yüzeydir. Gerçek bir yüzeyle moleküler etkileşimleri simüle ederken bu varsayım tamamen gerçekçi değildir. Çarpışmadan sonraki hızın büyüklüğü, çarpışmadan önceki hız ile aynıdır. Bununla birlikte, hız vektörünün yüzeye normal olan bileşeni işaret değiştirir. Molekülün kinetik ve iç enerjisinde bir değişim meydana gelmez. Bunun sonucunda momentumun teğetsel bileşenleri sabit kalırken normal bileşeni 2mv kadar değişir.

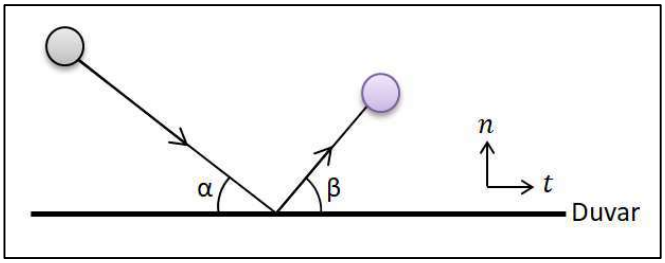
$$\begin{aligned} u &= u' \\ v &= -v' \\ w &= w' \end{aligned} \tag{2.32}$$



Şekil 2.4: Düzgün yansıma sınır koşulu.

2.4.3. Dağınık Yansıma Sınır Koşulu

Bu duvar yansıma sınır koşulunda yansıyan molekülün hızı, geliş hızından bağımsızdır. Yansıyan moleküllerin hızı ve iç enerjisi, duvar sıcaklığı ve hızına karşılık gelen yarım aralıklı Maxwellian dağılımından elde edilir. Tam dağınık yansıma koşulu tipik olarak mikroskobik pürüzlü yüzeyler ve yavaş hızdaki akışlar içindir.



Şekil 2.5: Tam dağınık yansıma sınır koşulu.

Normal hız u_n ve teğetsel hız u_t bileşenleri için dağılımlar aşağıdaki gibidir.

$$f(u_t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-u_t^2}$$
$$f(u_n) = 2u_n e^{-u_n^2} \tag{2.33}$$

Sıcaklığı T_w olan duvardan en olası hız $c_{eo,w} = \sqrt{2k_b T_w / m}$ olmak üzere yansıyan molekülün hız bileşenleri (u', v', w') ve dönme enerjisi $(e'_{dön})$ aşağıdaki bağıntılar

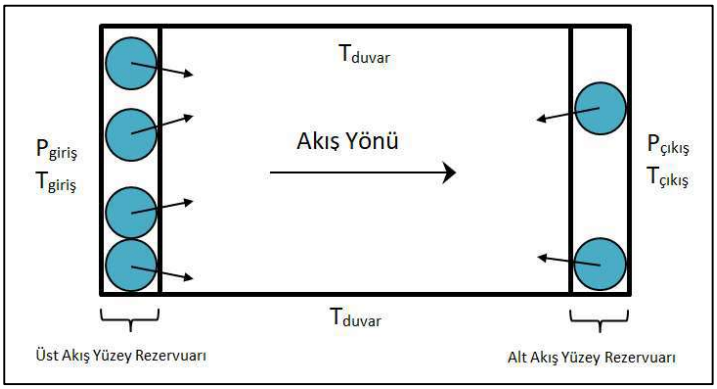
kullanılarak hesaplanır. Ayrıca duvar hareketliyse duvar hızı da (U_w, W_w) molekül hızına eklenir:

$$\begin{aligned} u' &= c_{eo,w}\sqrt{-ln(R_1)}\,sin(2\pi R_2) + U_w \\ v' &= \sqrt{-ln(R_3)}c_{eo,w} \\ w' &= c_{eo,w}\sqrt{-ln(R_4)}\,sin(2\pi R_5) + W_w \\ e'_{dön} &= -ln(R_7)k_b T_w \end{aligned} \tag{2.34}$$

Duvar ve molekül arasındaki çarpışma sonucu molekülün hızının değişmesi ile hem enerji hem de momentum transferine sebep olur.

2.4.4. Basınç Güdümlü Akış Sınır Koşulu

Genellikle DSMC simülasyonları için kullanılan Örtük Sınır Koşulu (Implicit Boundary Treatment, IBT) metodu öncü çalışmada[13] OGMD için uyarlanmıştır. Alt ve üst akış sınırlarına ulaşan bir molekül hesaplama alanını sonsuza kadar terk eder. Hesaplama alanındaki toplam molekül sayısı sabit değildir. Akış sınırları üzerinden hesaplama alanına giren moleküller Olay güdümlü Moleküler Dinamik Simülasyonlarına uygulanması daha kolay olduğu için öncü çalışmada yüzey tipli rezervuar yöntemiyle seçilmiştir. Bu yöntemde akış sınırları birer yüzey rezervuarı olarak tanımlanır ve birim zamanda hesaplama alanına giren molekül sayısı bu yüzeydeki akıdan hesaplanır[35] - [38].



Şekil 2.6: Akış sınır koşulu giriş ve çıkış özellikleri

Üst akış sınırı için giriş basıncı ($p_{giriş}$) ve sıcaklığı ($T_{giriş}$) bilinmektedir. Akış sınırı yüzeyindeki her j bölgesinde ortalama akış hızının yüzeye paralel bileşenlerinin değeri hesaplama alanının o bölgesindeki ortalama değerine eşittir:

$$(v_{giriş})_j = v_j$$
$$(w_{giriş})_j = w_j \tag{2.35}$$

Yüzeye dik hız bileşeni ise hesaplama alanının ortalama akış hızı (u_j), basıncı (P_j), yoğunluğu (ρ_j) ve ses hızının (a_j) bir fonksiyonu olarak ifade edilir:

$$(u_{giriş})_j = u_j + \frac{p_{giriş} - p_j}{\rho_j a_j} \tag{2.36}$$

Molekül sayı yoğunluğu ise ideal gaz denkleminden hesaplanır:

$$n_{giriş} = \frac{p_{giriş}}{k_b T_{giriş}} \tag{2.37}$$

Alt akış sınırında sadece çıkış basıncı ($p_{çıkış}$) bilinmektedir. Diğer akış özellikler ekstrapole edilerek hesaplanır:

$$(\rho_{\text{çıkış}})_j = \rho_j + \frac{p_{\text{çıkış}} - p_j}{(a_j)^2}$$
$$(u_{\text{çıkış}})_j = u_j + \frac{p_j - p_{\text{çıkış}}}{\rho_j a_j} \tag{2.38}$$
$$(T_{\text{çıkış}})_j = \frac{p_{\text{çıkış}}}{(n_{\text{çıkış}})_j k_b}$$

Ortalama akış hızının yatay bileşenleri ise üst akış için benzer şekilde hesaplanır:

$$(v_e)_j = v_j$$
$$(w_e)_j = w_j \tag{2.39}$$

Her iki akış sınırında hesaplama alanına giren molekül akısı (F) Maxwell dağılımı kullanılarak hesaplanır.

$$\Phi_j = \frac{n_j c_{eo}}{2\sqrt{\pi}}\left[e^{-h_j^2 cos^2\vartheta} + \sqrt{\pi} s_j cos\vartheta\{1 + erf(s_j cos\vartheta)\}\right] \tag{2.40}$$

Burada yerel akış hızının en olası hıza oranı $h_j = u_j / c_{eo}$ şeklinde tanımlanır. ϑ'nin değeri üst akış sınır için 0, alt akış sınır için π dir. Birim zamanda (Δt) sınır yüzeyinin kesit alanından (A) hesaplama alanına giren molekül sayısını aşağıdaki bağıntı verir:

$$N_{giriş,j} = \Phi \Delta t A_j \tag{2.41}$$

Hesaplama alanına giren toplam molekül sayısı ve akışın ortalama hızı hesaplandıktan sonra, moleküllerin hızları dağılımdan örneklenir. Sınır yüzeyine paralel hızlar için daha önce dağınık yansıma sınır koşulunda kullanılan yöntem geçerlidir:

$$v = c_{eo}\sqrt{-ln(R_1)}\,sin(2\pi R_2) + (v)_j$$
$$w = c_{eo}\sqrt{-ln(R_3)}\,sin(2\pi R_4) + (w)_j \tag{2.42}$$

Yüzeye dik hız bileşeni için $0.4c_{eo} < u < 1.3c_{eo}$ aralığı için önerilen kabul-ret algoritması kullanılmıştır[39]. Buna gore hesaplama alanına giren moleküllerin sınır yüzeyine dik bileşenleri aşağıdaki gibi seçilir.

$$u = (u)_j - z^*(a)c_{eo} \tag{2.43}$$

Burada $a = (u)_j/c_{eo}$ 'dir. $z^*(a)$ sayısı [39]'te öne sürülen algoritmadaki gibi OGMD için öncü kodlarda kullanılmıştır.

2.5. Makroskobik Özelliklerin Hesaplanması

Moleküler simülasyonlarda başlangıç koşulları ve sınır koşulları hariç hiçbir makroskobik bilgi sisteme empoze edilmez, simülasyon boyunca kendiliğinden oluşur. Sistemin akış hızı, yoğunluk, sıcaklık ve basınç gibi makroskobik termodinamik özellikleri tüm moleküllerin grup ortalaması ile hesaplanmıştır. Buna göre belli bir simülasyon anında moleküllerin anlık özellikleri yakalanır. Hesaplama alanı belli sayıda bölmeye ayrılır ve her molekül geometrik konumuna göre bir bölmede yer alır.

Bir bölgedeki moleküllerin sayı yoğunluğu o bölgede bulunan toplam molekül sayısının bölge hacmine oranıdır:

$$n = \frac{N}{V} \tag{2.44}$$

Yoğunluk ise toplam kütle üzerinden hesaplanır:

$$\rho = \frac{\sum_{i=0}^{N} m_i}{V} \tag{2.45}$$

Akış hızı ise bölgede bulunan moleküllerin hız bileşenlerinin ortalaması üzerinden hesaplanır.

$$U = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} u_i$$

$$V = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} v_i \tag{2.46}$$

$$W = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} w_i$$

Bir molekülün ısıl hızı ise molekül hızı $(\boldsymbol{c})$ ile yerel ortalama akış hızının $(\boldsymbol{C})$ farkıdır:

$$\boldsymbol{c'} = \boldsymbol{c} - \boldsymbol{C} \tag{2.47}$$

Moleküllerin ısıl hızlarının karelerinin ortalaması $(\langle c'^2 \rangle)$ ise moleküllerin hız bileşenlerinin karelerinin ortalamaları $(\langle c^2 \rangle)$ ve akış hızı bileşenlerinin kareleri (C^2) üzerinden ifade edilebilir:

$$\langle c'^2 \rangle = \langle c^2 \rangle - C \tag{2.48}$$

Akış hızının bileşenlerinin kareleri $C^2 = U^2 + V^2 + W^2$ ve moleküllerin hız bileşenlerinin karelerinin ortalamaları $\langle c^2 \rangle = \langle u^2 \rangle + \langle v^2 \rangle + \langle w^2 \rangle$ kullanılarak bölgenin ötelenme sıcaklığı aşağıda gibi gösterilir $(\varphi_{öte} = 3)$:

$$\frac{\varphi_{öte}}{2} k_b T_{öte} = \frac{1}{2} m(\langle c^2 \rangle - C^2)$$

$$T_{öte} = \frac{m}{3k_b}(\langle c^2 \rangle - C^2) \tag{2.49}$$

Burada hız bileşenlerinin karelerinin ortalamaları aşağıdaki gibi hesaplanır:

$$\langle u^2 \rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} u_i^2$$

$$\langle v^2 \rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} v_i^2 \qquad (2.50)$$

$$\langle w^2 \rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} w_i^2$$

Diatomik moleküller ($\varphi_{dön} = 2$) için ise dönme sıcaklığı moleküllerin ortalama dönme enerjisi kullanılarak hesaplanır:

$$\langle e_{dön} \rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} e_{dön,i} = \frac{\varphi_{dön}}{2} k_b T_{dön}$$

$$T_{dön} = \frac{\langle e_{dön} \rangle}{k_b} \qquad (2.51)$$

Toplam kinetik gaz sıcaklığı ise ötelenme ve dönme sıcaklıklarının serbestlik derecelerine göre ağırlıklı ortalamasıdır:

$$T = \frac{3T_{öte} + 2T_{dön}}{5} \qquad (2.52)$$

Sistem S adet bileşenli bir gaz karışımından oluşuyorsa öncelikle her gaz bileşeninin toplam molekül sayısındaki oranı (f_c) hesaplanır. Daha sonra bu değerlerle ortalama ötelenme ve dönme enerjileri elde edilir:

$$\langle e_{öte} \rangle = \frac{3}{2} k T_{öte} = \frac{1}{2}\sum_{c=1}^{S} f_c m_c \langle c_c'^2 \rangle \qquad (2.53)$$

$$\langle e_{dön} \rangle = \frac{\langle \varphi_{dön} \rangle k_b T_{rot}}{2} = \sum_{c=1}^{S} f_c m_c \langle e_{dön} \rangle_c \tag{2.54}$$

Sistemde monoatomik ve diatomik moleküller bir arada bulunabilir. Bu nedenle dönme serbestlik derecesinin ortalama değeri ($\langle \varphi_{dön} \rangle$) hesaplanmalıdır:

$$\langle \varphi_{dön} \rangle = \sum_{c=1}^{S} f_c \varphi_{dön,c} \tag{2.55}$$

Denklem(2.53) ve (2.54)' den ötelenme ve dönme sıcaklıkları çekilirse gaz karışımı için toplam kinetik sıcaklık aşağıdaki gibi hesaplanır:

$$T_{öte} = \frac{1}{3k_b} \sum_{c=1}^{S} f_c m_c \langle c_c'^2 \rangle$$

$$T_{dön} = \frac{2}{k_b \langle \varphi_{dön} \rangle} \sum_{c=1}^{S} f_c m_c \langle e_{dön} \rangle_c \tag{2.56}$$

$$T = \frac{3T_{öte} + \langle \varphi_{dön} \rangle T_{dön}}{3 + \langle \varphi_{dön} \rangle}$$

Son olarak basıncı hesaplamak için ideal gaz bağıntısı kullanılır:

$$p = nk_b T \tag{2.57}$$

3. GÖZENEKLİ ORTAM İÇİNDEN AKIŞIN MODELLENMESİ

Gözenekli ortamlarda Kn ile ilişkili gaz akış rejimini anlamak için ortalama serbest yolun gözenek çapına oranı (λ/D_p) olan Kn tanımlanması gerekir. Kinetik teori açısından, ortalama serbest yol aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}\pi d_m^2 n} \tag{3.1}$$

Burada n sayı yoğunluğu, d_m ise moleküler çaptır. Kn'nin 0.001'den az olduğu sürekli akış rejiminde gözenek boyutu molekülün ortalama serbest yolundan daha büyüktür. Bu rejimde, katı yüzeyine çok yakın bölgedeki moleküllerin hızı sıfır kabul edilir ve moleküller arası çarpışmalar akışı domine eder. Gözenek boyutu molekülün ortalama serbest yolu ile karşılaştırılabilir ölçüde ise kayma akış rejimi gözlenmeye başlar. Kn'nin 0.01 ile 0.1 arasında olduğu bu bölgede, katı yüzeyindeki akış hızı sıfırdan farklıdır. Kn sayısı 0.1 ve 10 arasına büyüdüğünde gözenek boyutu molekülün ortalama serbest yolundan küçük kalmaya başlar. Bu akış rejimi bölgesi geçiş olarak tanımlanır ve kayma ve moleküler akış rejimi arasında bir akış karakteristiği sergiler. Gaz molekülleri, gözenekler arasında yığın sıvı hareketinden ayrı bir karakteristikte bireysel hareket eder ve moleküller ve gözenekli ortam arasındaki çarpışmalar bu akış rejiminde hüküm sürmeye başlar. Kn'nin 10'dan büyük olduğu moleküler akış rejiminde moleküller arası etkileşim önemsizdir. Normal kanal akışlarından farklı olarak Kn sayısı tanımlamalarındaki karakteristik uzunluk gözenekli ortamlarda gözenek boyutu ile tanımlanır. Hatta gözenek boyutu molekül ile katı çarpışma frekansını doğrudan etkilediği için akışı tanımlar.

Geçirgenlik, gözenekli ortamın içinden akışkanın geçmesine izin verme kabiliyeti olarak tanımlanır ve en önemli gözenekli ortam akış parametrelerinden biridir. Gözenekli ortamlarda kütle transferi ve akış karakterizasyonu açısından çoğu pratik uygulama için önemli bir özelliktir. Bu nedenle, gözenekli yapının akış özelliklerini ve kalitesini belirlemek için doğru bir hesaplama çok önemlidir.

Kaymasız ve laminer akışta ölçülen gözenekli bir ortamın geçirgenliği, sadece ortamın yapısına bağlıdır ve iç geçirgenlik olarak bilinir. Bu rejimde, Darcy yasası[40] geçirgenliği tahmin etmek için en sık kullanılan yöntemdir. Darcy yasası uygulanan basınç farkı, sıvı viskozitesi ve akış hızı ile tanımlanır. Viskoz etkilerin hakim olduğu homojen bir gözenekli ortamdan laminer akış genellikle Darcy yasası ile uyumludur ve şu şekilde hesaplanır:

$$\frac{\Delta p}{L_{pm}} = \frac{\mu_0}{K_D} u \tag{3.2}$$

Burada Δp gözenekli ortam uzunluğu L_{pm} boyunca basınç farkıdır, u hacimsel akışkan dejarjına karşılık gelen hız ve μ_0 ise akışkanın dinamik viskozitesidir[40]. Geçirgenliğin SI birimi m^2'dir.

Bununla birlikte, gazlar için gösterilen geçirgenlik durumu biraz farklıdır. Aynı gözenekli yapıda, geçirgenlik değeri Kn nispeten yüksek olduğu için artmaya başlar. Kn'nin gözenekli ortamdaki etkisi ilk önce Klinkenberg tarafından incelenmiştir[41]. Birçok çalışmada ölçülen görünen geçirgenliğin, Kn etkisine bağlı viskoz akışta ölçülen iç geçirgenlikten daha yüksek olduğu ve bu fark artan Kn ile arttığı gösterilmiştir.

Klinkenberg modelinde geçirgenlik basınca bağlı kabul edilir ve görünür geçirgenlik ile iç geçirgenlik (sürekli rejim) arasındaki ilişki aşağıdaki gibi verilmektedir.

$$K_{app} = K_{int}(1 + b/p) \tag{3.3}$$

Florence ve arkadaşları[42] bu ifadeyi kinetik teoriye göre şu şekilde düzeltmişlerdir:

$$K_{app} = K_{int}(1 + 4cKn) \tag{3.4}$$

Burada c oran faktörü veya Maxwell kayma kaysayısı genellikle 1 veya biraz altı seçilir. Beskok and Karniadakis [43], Kn'nin dar gözeneklerde daha önemli olduğunu

savundular, Klinkenberg'in doğrusal düzeltmesine aşağıdaki deneysel modeli önermişlerdir:

$$K_{app} = K_{int}\left[1 + \alpha Kn\left(1 + \frac{4Kn}{1+Kn}\right)\right] \tag{3.5}$$

Burada $\alpha = 128/15\pi^2 + tan^{-1}(4Kn^{0.4})$ dir. Ho ve arkadaşları [44] deneysel sabiti kütle akış oranı $\alpha = 1.358/(1 + 0.178Kn^{-0.4348})$ ile ilişkilendirdi. Yu ve Cheng [45]'in çalışmasında küresel parçacılardan oluşan(mono-dispersed) gözenekli ortam için Kozeny-Carman eşitliği[46], [47] aşağıdaki gibi verilir:

$$K_{K-C} = \frac{\varepsilon^3 D_{katı}^2}{180(1-\varepsilon)^2} \tag{3.6}$$

Burada D_{sol} katı kürenin çapıdır. Chen ve Yao [48] K-C eşitliğini hem kübik hemde üçgensel dizilimli küresel parçaçıklı yapı için yeniden düzenlemişlerdir:

$$K_{K-C} = \frac{8}{35\left(3+2\sqrt{2}\right)k} \cdot \frac{\varepsilon^2}{1-\varepsilon} {D_p}^2 \tag{3.7}$$

Burada gözenek çapı $D_p = \frac{1}{2}\left[D_{katı}\sqrt{\frac{\varepsilon}{1-\varepsilon}} + \frac{D_{katı}}{2}\sqrt{2\left(\frac{1}{(1-\varepsilon)} - 1\right)}\right]$, D_{sol} katı küre çapı ve homojen küresel parçacıklar için $k = 5$ dir. Yu ve Cheng [45] 'in çalışmasında maximum gözenek çapı ikili-dağılmış üçgen dizilimli yapı için $D_p = D_{katı}\sqrt{2\varepsilon/(1-\varepsilon)}/2$ ile verilir. Wu ve Yu [49] ise kare dizilimli yapı için $D_p = D_{katı}\left(\sqrt{\varepsilon/(1-\varepsilon)} + \sqrt{\pi\ /\ 4(1-\varepsilon)} - 1\right)/2$ eşitliğini önermiştir. Ergun [50] ise geçirgenlik için aşağıdaki yarı deneysel eşitliği önermiştir.

$$K_E = \frac{\varepsilon^3 D_{katı}^2}{150(1-\varepsilon)^2} \tag{3.8}$$

Şimdiye kadar verilen tüm geçirgenlik modelleri, sürekli akış rejimi için geçerlidir. Mostafavi ve arkadaşları [51] kare parçacıkların sıralı düzenlemesiyle oluşturulan gözenekli yapının gözeneklilik hesabı için yine Kn'ye bağlı olan aşağıda verilen ilişkiyi önermişlerdir.

$$K_M = A\left[\frac{\varepsilon^3}{(1-\varepsilon)^2}\right]^B {D_{katı}}^2 \tag{3.9}$$

Burada $A = 0.00077795Kn + 0.024$, $B = 0.0006989Kn + 0.4979$ 'dir. Koponen ve arkadaşları [52] ve Tomadakis ve Robertson [53], fiber yapılı gözenekli ortamda viskoz akış için fiber çapındaki değişimin geçirgenlik üzerindeki etkisini elde etmişlerdir. Davies [54], gözeneklilik ve lif çapı dahil olmak üzere ampirik bir korelasyon yardımıyla lifli yapı içindeki akış için bir geçirgenlik hesaplaması önermiştir. Yang ve Weigand [55] 'in Klinkenberg etkisinin incelendiği çalışmasında DSMC yöntemi yardımıyla kayma ve geçiş rejiminde gözenekli bir ortamdan geçen basınca dayalı gaz akış özellikleri incelemişlerdir.

Gözenekli ortamın yapısını ve akış üzerindeki etkilerini anlamak için bir diğer önemli parametre kıvrımlılık (tortuosity)'tır. Bu kavram, gözeneklilik ve gözenek boyutu gibi ölçülebilir kavramlardan farklı olarak, çoğunlukla gözenekli yapıya bağlı olan akış yollarının belirlenmesine olanak tanır. Bu, gözenekli ortamda akışkanın akış çizgisinin ne kadar saptığını anlamamızı sağlar. Gözenekli yapı boyunca bu kıvrımlı gaz molekülleri yolunun ortalama uzunluğunun, akış yönündeki gözenekli ortamın uzunluğuna oranı olarak tanımlanır.

$$\tau = \frac{L_{gerçek}}{L_{pm}} \tag{3.10}$$

Literatürde kıvrımlılığı hesaplamak için birçok model vardır. Bazıları kıvrımlılığı sadece gözenekliliğe bağlılığı açısından değerlendirmiştir. İyi bilinen Bruggeman modeli [56], kompozit heterojen rastgele dağılmış katı parçacıklar için aşağıdaki denklemi önermiştir:

$$\tau_B = \varepsilon^{1-\alpha} \tag{3.11}$$

Burada α Bruggeman'ın tabanıdır ve standart formdaki küre için 1,5 ve silindir için 2 olduğu varsayılır [57], ancak Bruggeman bu değeri dağınık parçacıklar içeren belirli yapıları tanımlamak için kullanmıştır. Comiti ve Renaud [58], küresel ve kübik parçacık ortamlarında akış üzerine deneysel çalışmalarda kıvrımlılık için aşağıdaki modeli önermiştir.

$$\tau_{CR} = 1 + p\ ln\left(\frac{1}{\varepsilon}\right) \tag{3.12}$$

Burada p deneysel bir değerdir ve kübik parçacıklar için 0.63'tür. Pisani [59], kürelerden oluşan gözenekli bir yapıda kıvrımlılığın gözenekliliğe bağımlılığını göstermek için aşağıdaki modeli önermiştir.

$$\tau_P = 1 + \alpha(1 - \varepsilon) \tag{3.12}$$

Burada α şekil faktörüdür ve küreler için 0.75 alınır. Vallabh ve arkadaşları [60], bir fiber ağdan oluşan gözenekli bir ortamda gözeneklilik, fiber çapı ve kıvrımlılık gibi ortam özellikleri arasındaki deneysel ilişkiyi incelemiştir. Ek olarak, Tomadakis ve Sotirchos [61] rastgele dağıtılmış ve üst üste binen kılcal kanalların ortamında kıvrımlılığı incelemiştir. Shariati ve arkadaşları [62] gözeneklilik ve katı parçacık çapının rastgele kürelerin gözenekliliği üzerindeki etkilerini ve Kn ile kıvrımlılık arasındaki ilişkiyi araştırmıştır.

Gazların dinamik viskozitesi, sıvılarınkinden farklıdır ve büyük ölçüde Kn'ye bağlıdır. Beskok ve Karniadakis [43], Kn ile etkin (ölçülen) viskozitenin nekadar değiştiğini bulmak için kayma koşulunu uygulayarak silindir içinden akış ve N-S denklemlerinin sayısal hesaplamaları yardımıyla aşağıdaki denklemi hesaplamıştır.

$$\mu_{e,BK} = \mu_0 \frac{1}{1 + aKn} \tag{3.13}$$

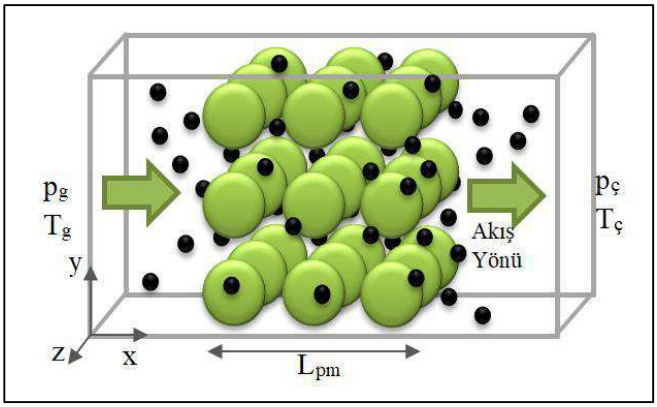
Burada μ_0, kayma etkisi olmaksızın sürekli sınırdaki viskozitedir, a faktörü gözenekli ortamın uzunluğunun genişliğine oranı L_p / H_p ile verilmektedir. Beskok ve Karniadakis [43]'e göre, a sabit değildir, Kn'ye bağlıdır. Denklemde Kn ortalama serbest yolun ortam genişliğine oranı ile bulunmuştur[63]. Guo ve arkadaşları[64], bir mikro kanaldaki geçiş rejiminde akış için etkin viskozitenin Kn'ye bağımlılığını aşağıdaki denklemle hesaplamışlardır.

$$\mu_{e,G} = \frac{2\mu_0}{\pi} arctan\left(\sqrt{2}\, Kn^{-3/4}\right) \tag{3.14}$$

Sutherland [65], viskozitenin hesaplanması için sert küre moleküller arası potansiyel yaklaşımını kullandı. Hadjiconstantinou [66], Cercignani'nin ikinci dereceden kayma modelini düzenleyerek çeşitli seyreklik ve sert küre gazı için Boltzmann denklemini çözdü. Kn'ye bağlı akış hızı elde etti. Cercignani [67] mikrokanalda gaz akış hızını elde etmek için Boltzmann denklemine farklı teknikler uygulamıltır. Guo ve arkadaşları [68], genelleştirilmiş kafes Boltzmann denklem tekniğini ve Poiseuille akış kütle akış hızının Kn'ye bağımlılığını elde etmişlerdir. Dadzie ve Brenner [69], farklı kinetik olmayan yaklaşımlar ve deneysel gözlemlerle geçiş rejimindeki basınca dayalı akışta kütle akış hızını incelemişlerdir. Danielewski ve Wierzba [70], Bi-velocity (Darken) yöntemine dayalı birkaç kısmi diferansiyel denklem yardımıyla difüzyon aracılığıyla kütle transferlerini tanımlamışlardır. Dongari ve arkadaşları [71] ekstra difüzyon terimleri ekleyerek modifiye N-S denklemleri elde etmiş ve Kn'nin basınç gradyanı kaynaklı akışta kütle transferi üzerindeki etkisini incelemişlerdir. Beskok ve Karniadakis [43], basit bir fiziğe dayalı model geliştirerek ve tüm Kn aralığı boyunca kanal akışındaki kütle ve hacim akış oranını tahmin etmişlerdir.

3.1. Gözenekli Ortamın Modellenmesi

Gözenekli ortam içeren örnek kanal Şekil 3.1'de şematik olarak gösterilmiştir. Nano/mikro kanal 3 boyutlu (x, y, z ekseni) ve dikdörtgen bir kesite sahiptir. Akış parametreleri için hesaplama yalnızca gözenekli ortam hacmi içindir. Moleküller ve katı parçacıklar arasındaki etkileşimler, speküler yansıma koşulu ile modellendi. Periyodik sınır koşulu, y ve z eksenlerine uygulandı. Basınç sınır şartı için üst ve alt akış arasına basınç farkı uygulandı. Akış, x ekseni boyuncadır.



Şekil 3.1: Gözenekli ortam ile kanal yapısının şematik gösterimi (Yeşiller, gözenekli ortamı oluşturan katı küreleri ve siyahlar tek atomlu Argonu temsil eder).

Gözenekli bir ortam oluşturmak için ilgili kodları Ek.B.1(a)'da verilen eşit boyutlu katı küresel parçacıklar, moleküllerin kanal içine yerleştirilmesinden önce üretilerek kanalın istenen bölgesine (x-ekseni boyunca) kübik dizilim ile yerleştirilmişlerdir. Simülasyon sırasında bu parçacıkların kütleleri sonsuz ve ilk hızları sıfır olarak atanmıştır.

Bu gözenekli yapı gibi birbirine bağlı gözeneklerden oluşan yapılar etkin gözenekliliğe sahiptir. Gözeneği oluşturan parçacıklar arasında boşluk varsa normal gözeneklilik ve etkin gözeneklilik birbirine eşittir [72]. Bu nedenle, bu çalışma için gözeneklilik, boşluk hacminin, boş ve katı parçacıkların toplam hacmine oranı ile tanımlanmıştır.

$$\varepsilon = \frac{V_{boşluk}}{V_{boşluk} + V_{katı}} \tag{3.15}$$

Moleküller sonsuz kütleli küresel ve pürüzsüz yüzeyli cisimler ile esnek çarpışma yaparlar. Kürelerin sayısı ve yerleştirilmesinde gözeneklilik hesabı dikkate alınmıştır. İstenilen bir gözenekliliğe ve küre çapına bağlı olarak küreler arasındaki merkezden merkeze (x, y, z eksenleri boyunca ve eşit) uzaklıkların bulunması aşağıdaki eşitlik yardımı ile olur:

$$\varepsilon = 1 - \frac{\pi {D_{mol}}^3/6}{s^3} \tag{3.16}$$

Burada s merkezden merkeze uzaklıktır.

3.2. Hesaplama Yöntemleri

3.2.1. Geçirgenliğin Hesaplanması

Geçirgenliği elde etmek için ortamdaki moleküllerin akış yönündeki hız bileşenlerinin ortalaması ve ortama birim zamanda giren ve çıkan molekül sayılarının ortalaması OGMD simülasyonu ile ifade edilerek hesaplanmış ve her Δt zaman aralığında ortalaması alınmıştır.

$$K_{sim} = \frac{L_{pm} \frac{\sum_{n=1}^{n=N_m} u_x}{N_m}}{\frac{N_{out} + N_{in}}{2\Delta t}} \tag{3.17}$$

Burada $(N_{out} + N_{in})/2\Delta t$ belirli bir zaman aralığında hesaplama alanından çıkan ve giren ortalama molekül sayısı, $\sum_{n=1}^{n=N_m} u_x/N_m$ geçen tüm moleküllerin akış yönündeki hız bileşenlerinin ortalaması ve L_{pm} ise gözenekli ortamın uzunluğudur.

3.2.2. Kıvrımlılığın Hesaplanması

Bu çalışmada, kıvrımlılığı hesaplamak için Newton'un hareket yasası kullanılmıştır. Gaz moleküllerinin gözenekli ortama giriş ve ortamdan çıkış zamanlarını tutarak$\langle\sum t_{out} - t_{in}\rangle$, ortamdaki moleküllerin ortalama hızlarının büyüklüğü $\langle\sum u_{mag}\rangle$ ile çarparsak ortamdaki moleküllerin ortalama yol uzunluklarını bulabiliriz. Bu bağlamda, kıvrımlılık tanımını OGMD simülasyonuna uygularsak, şu ifadeyi alırız:

$$\tau_{sim} = \frac{\langle\sum t_{out} - t_{in}\rangle\langle\sum u_{mag}\rangle}{L_{pm}} \tag{3.18}$$

Burada $\langle\sum u_{mag}\rangle = \sum_{n=1}^{n=N_m} \sqrt{u_x^2 + u_y^2 + u_z^2}\,/N_m$ ile hesaplanır.

3.2.3. Viskozite Katsayısının Hesaplanması

Kandemir [14]'in çalışmasında moleküler dinamik perspektifinden viskozite hesaplaması amacıyla Kayma-Güdümlü Couette akışı için geliştirilen model, gözenekli ortamdaki akışa uygulanmıştır:

$$\mu_{sim} = \frac{\frac{X_{T,mol-sol}}{N_{c,mol-sol}}\Sigma\langle M_{in} - M_{ref}\rangle}{\langle\sum u_{mag}\rangle S_{sol}\Delta t} \tag{3.19}$$

Burada $X_{T,mol-sol}$ katı parçacıklarla çarpışan moleküllerin aldıkları toplam yol, $N_{c,mol-sol}$ moleküllerin katı parçacıklar ile toplam çarpışma sayısı, $\Sigma\langle M_{in} - M_{ref}\rangle$ birim zamanda katı ile çarpışan moleküllerin çarpışamadan önceki ve sonraki momentumlarının farkı, S_{sol} katı parçacıkların toplam yüzey alanı, Δt ise verilerin alındığı zaman aralığıdır. Kararlı durum akışında, ortalama viskozite, simülasyonun sonunda her birim zamanda elde edilen viskozite değerlerinin ortalaması alınarak bulunmuştur.

3.2.4. Kütle Akış Oranının Hesaplanması

Simülasyonda, belirli bir 40ure boyunca gözenekli ortama giren ve çıkan toplam molekül kütleleri sayılarak gözenekli ortamdaki kütle akış oranı aşağıdaki denklem ile elde edilmiştir.

$$\dot{m} = \frac{N_{out} + N_{in}}{2\Delta t} m_{mol} \tag{3.20}$$

Burada m bir molekülün kütlesidir.

3.2.5. Gözenekli Ortam İçindeki Knudsen Sayısının Hesaplanması

Gözenekli ortamda Kn, akış rejimi için en önemli parametredir. Normal olarak, moleküllerin ortalama serbest yolunun gözenek çapına oranı $Kn = \lambda/D_p$ ile bulunur. Bununla birlikte, silindirik kılcal gözenek yapıları dışındaki karmaşık gözenekli ortamlar için D_p gözenek çapını bulmak oldukça zordur. Gözenekli ortamdaki katı parçacıklar ve moleküller arasındaki çarpışma sıklığının artması, Kn'daki artışla ilişkilendirilirken, moleküller arasındaki çarpışma sıklığındaki artış, Kn'nin azalması anlamına gelir. Bu iki çarpışma frekansının karşılaştırılması Kn hakkında bilgi verir. Kawagoe ve ark. [22], bu yaklaşımın kılcal gözeneklerde Kn'ye eşit, iki paralel plaka arasındaki gaz akışında 0.5 Kn'a ve küresel partikül bölgesi içindeki akışta 1.5Kn'a eşit olduğu bildirmişlerdir.

Ek olarak, Tomadakis ve Sotirchos [61], mol-sol parçacık çarpışma frekansının mol-mol çarpışma frekansına oranının, rasgele dağıtılmış ve araya giren kılcal kanallardan oluşan yapı için Kn'ye eşit olduğunu bulmuştur. OGMD çalışmasında Kn'a iki farklı yoldan ulaşmaya çalışılmıştır. İlk olarak, mol-sol çarpışma frekansının mol-mol çarpışma frekansına oranını bir düzeltme katsayısı ile çarparak Kn'ye aşağıdaki gibi ulaşabilir.

$$Kn = \alpha_{sim} \frac{f_{mol-sol}}{f_{mol-mol}} \tag{3.21}$$

Simülasyonun belirli bir zaman dilimindeki her iki çarpışma türünün sayısı frekansları verir. İkinci olarak, moleküller arası çarpışmanın ortalama serbest yolu ($\lambda_{mol-mol}$) iki kürenin merkezleri arasındaki mesafeye bölünerek Kn'ye ulaşılmıştır.

$$Kn = \frac{\lambda_{mol-mol}}{s_{sol-sol}} \tag{3.22}$$

Burada f çarpışma frekansı, α_{sim} katsayı ve $s_{sol-sol}$ ise iki küre arasındaki merkezden merkeze mesafedir. Gözenekli ortamdaki ortalama serbest yol mol-mol çarpışması için $\lambda_{mol-mol}$ ve mol-katı küre çarpışması için $\lambda_{mol-sol}$ olarak tanımlanmıştır. Moleküllerin gözenekli ortamdan geçtiği süre için, birbirleriyle çarpışarak kat ettikleri toplam mesafe $X_{T,mol-mol}$ toplam çarpışma sayısına $Z_{C,mol-mol}$ bölünürse ortalama serbest yol aşağıdaki gibi bulunur.

$$\lambda_{mol-mol} = \frac{X_{T,mol-mol}}{Z_{C,mol-mol}} \tag{3.23}$$

Benzer şekilde, bu mantık moleküller ve katı parçacıklar arasındaki etkileşim için yürütülürse, aşağıdaki sonuç elde edilir:

$$\lambda_{mol-sol} = \frac{X_{T,mol-sol}}{Z_{C,mol-sol}} \tag{3.24}$$

3.3. Farklı Durumlar İçin Simülasyon Kurulumları

Bu çalışmada incelenen üç durum için simülasyon kurulumları Tablo 3.1'de verilmiştir. Çalışma akışkanı her durum için Argon'dur ve monoatomik çapı 0.365 nm'dir. Durum 1 ve durum 2 için kanal boyutu 200×40×40 nm'dir. Durum 3 için, z ekseninin uzunluğu 5 ila 200 nm arasında değerler verilmiştir. Kesitsel alandan etkilenen akış özellikleri için, yz düzleminin hesaplama alanı hesaplama hacminin değişmemesi için ayarlanmıştır. Gözenekli ortamın akış yönündeki uzunluğu L_{pm},

karşılaştırmanın doğruluğu için her durumda $160\,nm$'ye sabitlenmiştir. Kanal içi ve sınırlarının kurulum sıcaklığı $300\,K$'dir. Burada simülasyona başlarken kinetik teori ile hesaplanan ortalama serbest yol ilk satırda, kanalın giriş ve çıkış sınırlarının basınçlarının oranı ikinci satırda, üçüncü sırada gözenekli ortamı oluşturan katı kürelerin çapları ve simülasyon başlangıcında hesaplanan gözenekli ortamın gözenekliliği dördüncü sırada verilmiştir. Referans durumları ortalama serbest yol için 2.8, basınç oranı için 1.5, katı küre çapı için 1 ve gözeneklilik için 0.898'dır. Bu referans durumunun üç parametresinin de ayrı ayrı değiştirildiği, ancak ikiliden üçe değişmediği durumlar vardır.

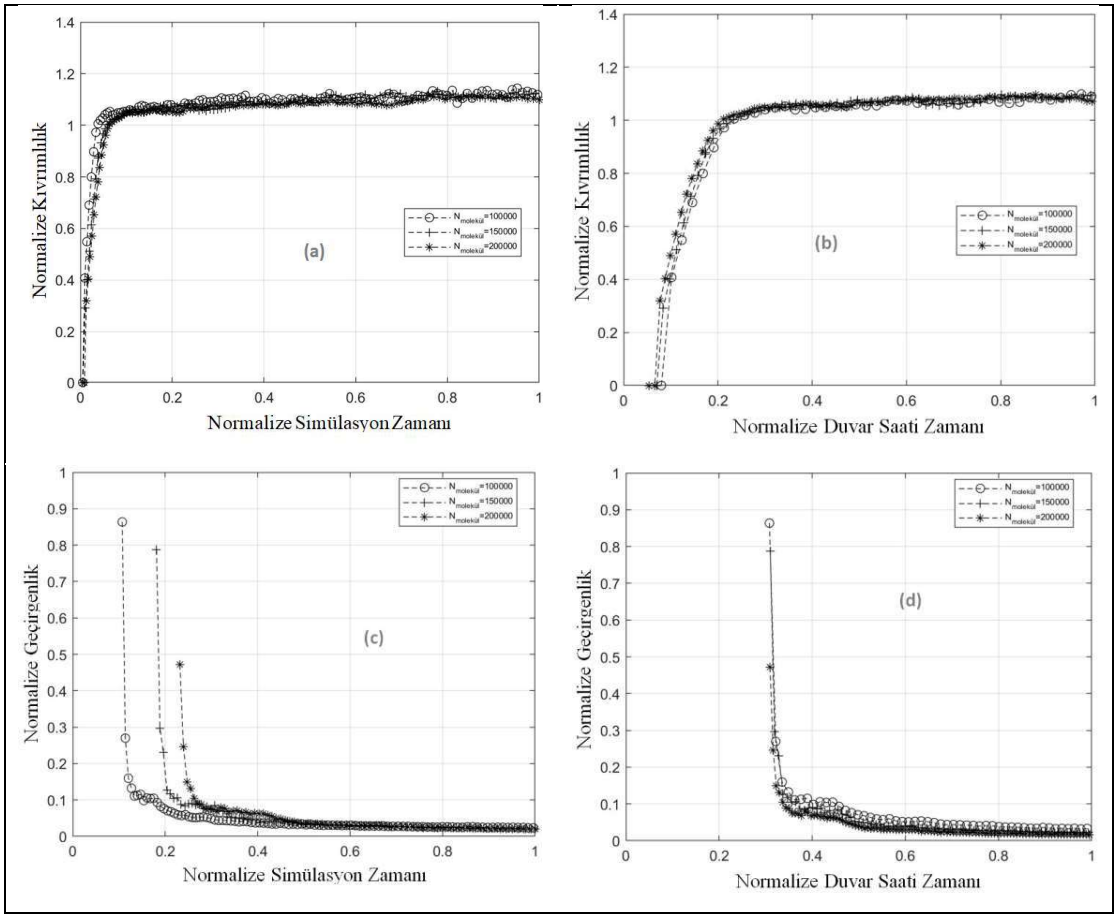
Tablo 3.1: Gözenekli ortam içinden akış için simülasyon durumları.

Simulasyon Parametreleri	**Durum 1**	**Durum 2**	**Durum 3**
Ortalama Serbest Yol, $\lambda_{mol-mol}$ (nm)	2.8	2.8	0.374-0.64-1-1.84-2-2.8-5.6-8-15-18
Basınç Oranı, p_{in}/p_{out}	1.5	1.5	1.5
Katı Küre Çapı, D_{sol} (nm)	1	0.5-1-1.5-2-2.5-3-3.5	1
Gözenklilik, ε	0.581-0.758-0.848-0.898-0.928-0.948-0.961	0.898	0.898

Kn azalan sayı yoğunluğu ile artar. Özellikle Durum 3'teki Kn değişikliğinde OGMD simülasyonunun daha verimli çalışması için molekül sayısının artırılması gerekmektedir. Şekil 3.2'de aynı akış ve simülasyon koşullarında ancak farklı sayıda simüle edilmiş molekül ile seçilen iki özelliğin zamana dayalı karşılaştırmaları yapılmıştır. Buna göre, farklı z ekseni boyutu ve bununla ilişkili molekül sayısının görülmüştür OGMD sonuçlarını değiştirmediği görülmüştür. Aslında, z ekseni üzerindeki boyut değişikliği, kıvrımlılık ve geçirgenliğin sonucunu değiştirmez, ancak

kanalın kesit alanı değiştikçe kütle akış oranını etkiler. Bu durum dikkate alınarak hesaplanan kesit alanı tüm durumlar için sabit tutulmuştur.

Şekil 3.2(a) ve (c) 'de gösterilen simülasyon süresi simülasyonun gerçek zamanıdır ve simülasyon sırasında her bir olayın meydana gelme zaman aralığının toplamıdır. Şekil 3.2(b) ve (d) 'de gösterilen duvar saati zamanı bilgisayarda geçen süredir. Daha yüksek molekül sayısına sahip simülasyonun özelliklerin kararlı durum değerleri üzerinde hiçbir etkisi yoktur. Zaman ekseninin sıfırdan başlamama sebebi kıvrımlılık ve geçirgenlik hesabı için belirli sayıda molekülün gözenekli ortamdan çıkması için belirli bir zaman geçmesi gerektiğindendir.



Şekil 3.2: (a) ve (b) Normalize edilmiş Kıvrımlılık vs. Simulasyon ve Duvar Saati Zamanı, (c) ve (d) Normalize edilmiş Geçirgenlik vs. Simulasyon ve Duvar Saati Zamanı

Hem duvar saati hem de simülasyon zamanı göz önüne alındığında, her iki özellik aynı değere yakınsar. CFD simülasyonlarındaki sonuçların ağ(mesh) bağımlılığından farklı olarak, OGMD sonuçları simüle edilen moleküllerin sayısından bağımsızdır. Molekül sayısı, OGMD'de veri azaltma (data reduction) kolaylığı sağlar. Bu nedenlerle, tüm durumlarda 195000 simüle edilmiş moleküllerle çalışmanın etkili olduğu bulunmuştur.

Akış simülasyonunun başlangıcında, aynı çapta küresel parçacıklar kübik hizalama ile kanalın ortasına yerleştirilmiştir. Parçacıklar arası mesafe istenilen gözeneklilik değerine göre hesaplanmış ve konumları sabitlenmiştir. Simülasyonun ilk anında, kanalın tüm duvarlarına düzgün yansıma sınırı koşulu uygulanmıştır. Boltzmann dağılımından moleküllerin ilk anda sıcaklığa göre başlangıç hızları, kanala dağılan moleküllerin ısıl homojenliği için yeterli çarpışmayı sağlamak üzere atanmıştır. Buraya kadar simülasyonun ilklendirme aşamasıdır. Daha sonra gözenekli ortamda gaz akış simülasyonu, periyodik ve basınç güdümlü akış sınır koşulları uygulanarak gerçekleştirilmiştir.

Gözenekliliği sabit tutarak katı kürelerin çaplarının arttırılması, küreler arasında orantılı olarak merkezden merkeze mesafenin artmasını gerektirir. Bu aynı zamanda gözenek boyutunda bir artış anlamına gelir. Kürelerin çaplarını sabit tutarak, gözenekliliği değiştirmek için ise küreler arasındaki mesafeyi değiştirmek yeterlidir. Bu aynı zamanda gözenekliliği değiştirirken gözenek boyutunun değişmemesini sağlar.

Simülasyondan elde edilen geçirgenlik, belirli bir gözenekli yapı için geçirgenliğin sabit kaldığı ve normalizasyon için kullanıldığı $Kn \ll 1$ koşulu altında iç geçirgenlik olarak kabul edilmiştir. Tüm simülasyonlarda, ilk anda basınç farkının neden olduğu akış için, sadece giriş basıncı p_{in} artırıldı ve çıkış basıncı p_{out}, kanal içi basınç ile aynı değere ayarlanmıştır. Bir basınç gradyanı yaratmak için, giriş basıncı, kanal basıncının bir katına, yani basınç oranı p_{in}/p_{out} ayarlanmıştır. Simülasyon sırasında ortamdaki giriş ve çıkış basınçları ve kanal içi basınç kendiliğinden meydana gelmiştir. Karakteristik uzunluk karışıklığını önlemek için simülasyon kurulumunda akışın seyreklik parametresi olarak Kn yerine $\lambda_{mol-mol}$ (Denklem (3.1)) verilmiştir. Ancak simülasyon sırasında gözeneklerdeki Kn, Denklem (3.22) ile hesaplanmıştır.

3.4. Gözenekli Ortam İçinden Akış Sonuçlarının İncelenmesi

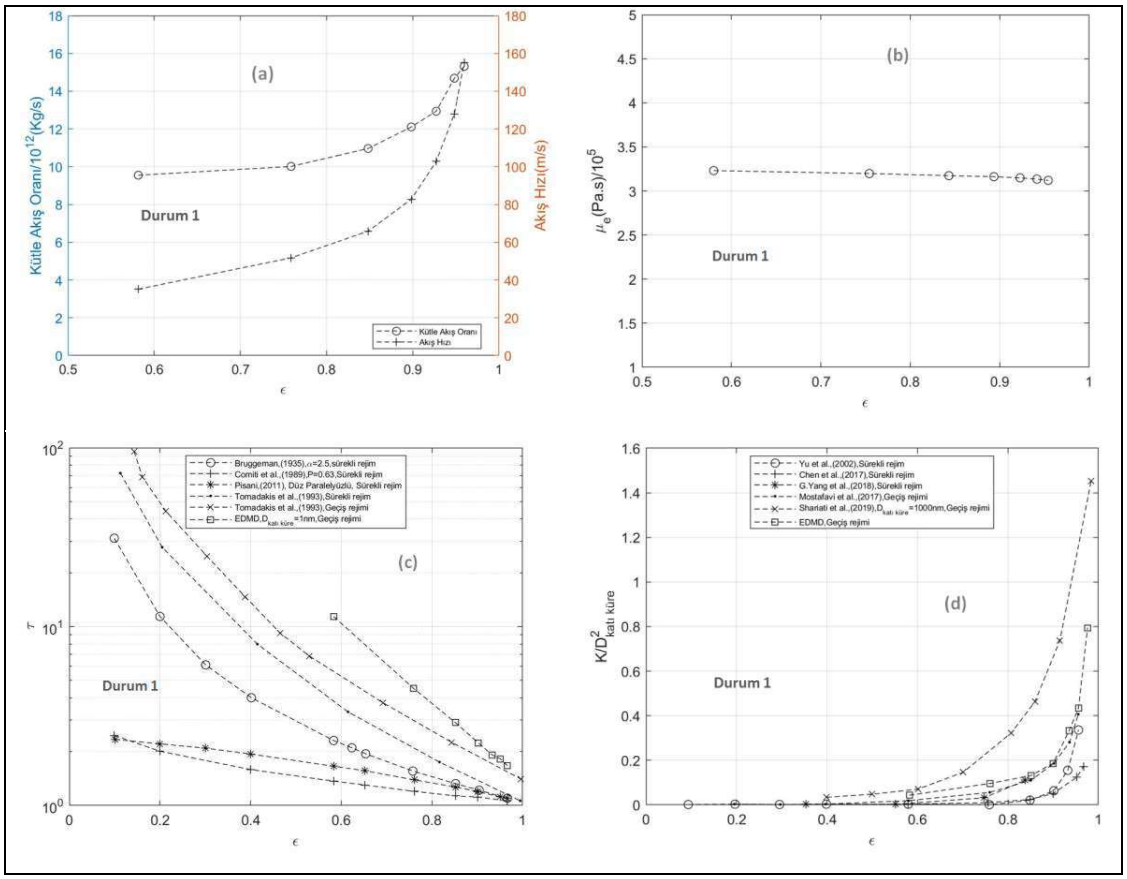
Gözeneklilik, küre çapı ve Kn'nin akış hızı, kütle akış hızı, viskozite, kıvrımlılık ve geçirgenlik gibi temel parametreler üzerindeki etkileri Şekil 3.3 ve Şekil 3.4'te incelenmiştir. Gözenekli ortamda molekül-katı küre ve molekül-molekül çarpışma frekansı oranından elde edilen Kn ve mol-mol çarpışması için iki kürenin merkezleri arasındaki ortalama serbest yolun mesafeye oranı oldukça yaklaşıktır. Hesaplanan α_{sim} katsayısı yaklaşık 1.6'dır.

Eğer ilk kurulumda ortalama serbest yolu, katı küre çapını ve basınç gradyenini sabit tutup sadece gözeneklilik değiştirilirse gözenekli ortamda akış hızı ve kütle akış oranı Şekil 3.3(a)'daki gibi olur. Gözeneklilik arttıkça akış direnci azaldığından, moleküllerin akış yönündeki hızı ve akış oranı artar. Gözeneklilik 1'e yaklaştıkça bu artış oranı en büyük değere ulaşır. Gözeneklilik 0.5'in altındaki değerlerde iken kürelerin birbirine temas etmesi hatta iç içe geçmesi gerektiğinden, akışa karşı direncin aşırı artması ve akışın kararlı duruma gelmesinin hesaplama zamanı açısından çok büyük olması sebebiyle 0.5'in üstünde değerler için hesaplama yapılmıştır.

Durum 1 koşullarında, gözenekli ortamdaki viskozitenin gözeneklilikten neredeyse bağımsız olduğu bulunmuştur (Şekil 3.3(b)). Gözeneklilik arttıkça molekülün katı küre ile çarpışma frekansı azalacak ve bu da gazın viskozitesini bir miktar azaltacaktır. OGMD çalışmasında elde edilen kıvrımlılık ve gözeneklilik arasındaki ilişki, Şekil 3.3(c) 'de aynı akış koşulları için literatürdeki bazı deneysel model ve simülasyon sonuçları ile karşılaştırılmıştır. Gözeneklilik, sürekli akış rejiminde 1 değerine sahipken, kıvrımlılık geçiş rejiminde 1'den büyük bir değere sahiptir. 0.8'den büyük gözeneklilikte, OGMD simülasyonu literatür ile tutarlı görünmektedir, ancak tüm literatür karşılaştırmalarında düşük gözeneklilikte farklı sonuçlar görmek yaygındır. Ancak nano boyutlu parçacıklar, aynı gözeneklilik değişiminde makro boyutlu parçacıklardan daha fazla kıvrımlılığa neden olur.

Sabit bir küre çapı için sadece gözeneklilik değiştirilirse, gözenekli ortamın geçirgenliği değişir. Bu, OGMD simülasyonunda deneyimlenmiş ve Şekil 3.3(d) 'de bazı modellerle karşılaştırılmıştır. Buna göre gözenekliliğin artması geçirgenlikte artışa neden olur. Özellikle 0.4 ve üzerindeki gözeneklilik değerinin geçirgenliği çok etkilediği

açıktır. Burada gözenekli yapının özellikleri farklı çalışmalar için farklı sonuçlar ortaya koymaktadır. Geçiş rejimindeki sonuçlar, 0.4'ten büyük değerler için sürekli rejimdekinden daha büyüktür.



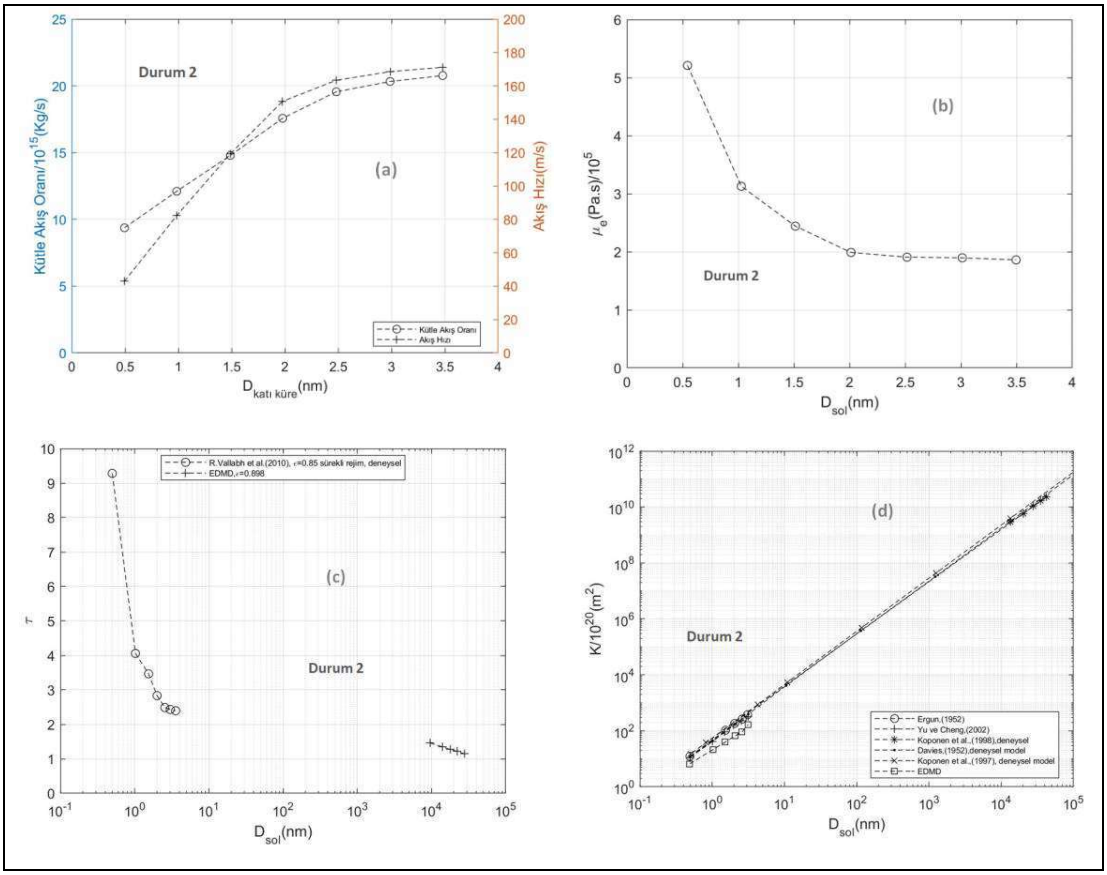
Şekil 3.3: ε vs. (a) Kütle Akış Oranı, (b) μ_e, (c) τ ve (d) K/D_{sol}^2 (Durum 1).

Şekil 3.4(a), küre çapının sabit gözeneklilik için akış hızı ve akış hızı üzerindeki etkisini göstermektedir. Küre çapının 2.5 nm altında, akış hızı ve akış hızındaki artış oranı, yukarıdaki değerlerden daha yüksektir. Bu kritik çaptan sonra iki akış özelliği önemli ölçüde değişmez.

Şekil 3.4(b) 'de küre çapına karşı gözenekli ortamdaki viskozite değişiklikleri verilmiştir. Çap, akışkan gaz partikülünün çapına yakın iken, viskozite oldukça yüksektir, ancak bu çap büyüdükçe katı küre ile momentum transferi azaldıkça viskozite azalmaktadır. Bu düşüş, çap büyüdükçe azalır ve neredeyse değişmez hale gelir. Kn'nin geçiş rejiminde olduğu D_{sol} değerlerinde, kayma akış etkileri baskın hale gelir ve

kıvrımlılık hızla artma eğilimindedir. Bu nedenle, Şekil 3.4(c) 'den görülebileceği gibi, OGMD sonuçlarından daha büyük kıvrımlılık, gözenekli ortamı oluşturan katı küre boyutlarından kaynaklanır. Diğer deneysel modellerde bulunan katı parçacıkların çapları μm veya mm, bu çalışmada nm boyutundadır.

Gözenekli ortamın gözenekliliğini sabit tutarsak ve katı kürelerin çapını arttırırsak, geçirgenlik Şekil 3.4(d) 'de olduğu gibi artar. Bu artışta katı kürelerin çapının akan gaz moleküllerinin çapına oranı etkilidir. OGMD ve diğer modellerde, $D_{katı\,küre} = 0.5\,nm$'ye yaklaştıkça daha uyumlu hale geldiği gürülmüştür. Bununla birlikte, aynı küre çapı için geçiş rejiminin sürekli rejime göre daha düşük geçirgenliğe neden olduğu ortaya çıkmaktadır.



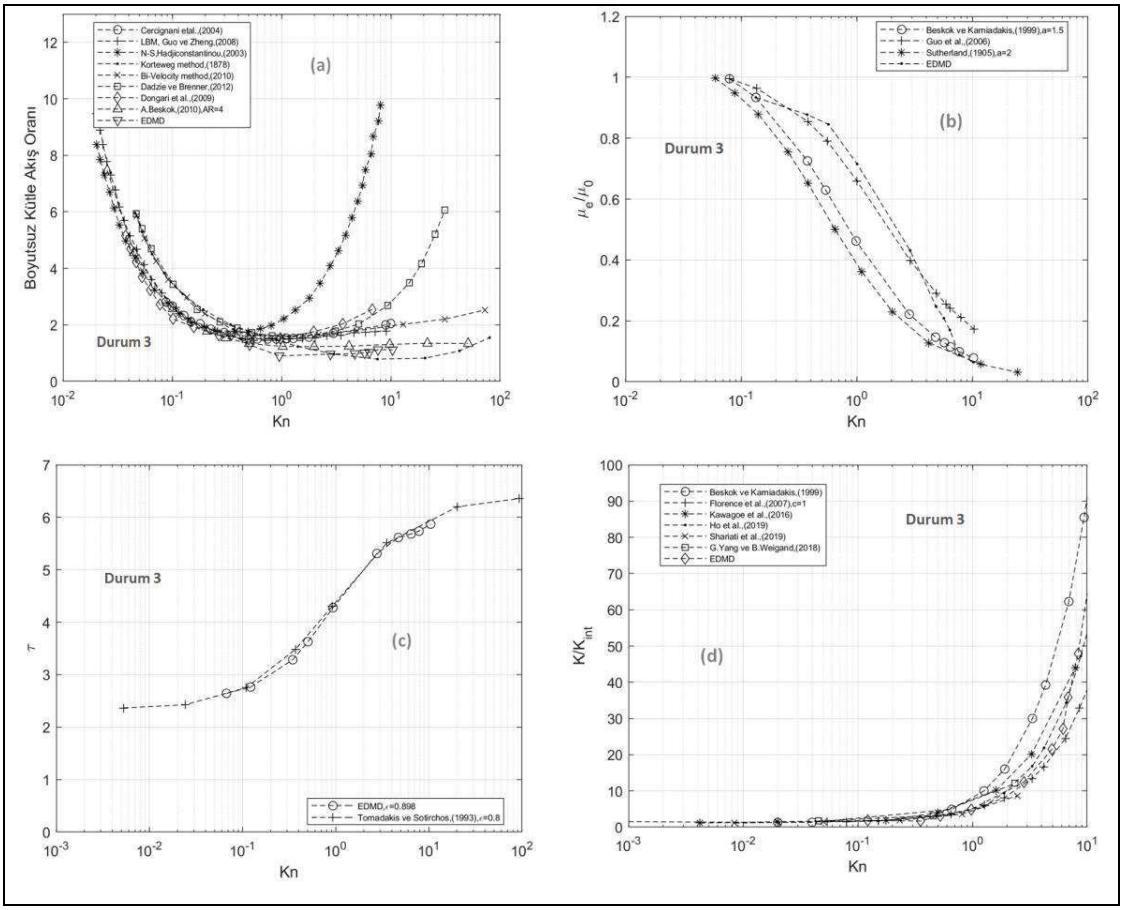
Şekil 3.4: D_{sol} vs. (a) Kütle akış oranı, (b) μ_e, (c) τ ve (d) K (Durum 2).

Şekil 3.5(a) 'da kütle akış hızının Kn'ye bağımlılığı farklı çalışmalarla karşılaştırılmıştır. Kn artışı, moleküllerin katı kürelerle bireysel çarpışmalarının sayısını

artırır. Sonuç olarak, viskozite başlangıçta artar ve bu da kütle akış hızını azaltır. Daha sonra Kn'daki artış hız kaymasını artırır ve bu da kütle akış hızında bir artışa neden olur. Bu çalışmada, Kn minimum[73] olarak bilinen en düşük kütle akış hızı $Kn \approx 0.94$'te elde edilmiştir. Bu değeri 1'in altında yapan şey, gözenekli ortam ve kıvrımlılığın bir etkisidir. Grafikteki OGMD sonucu bu değere normalleştirilmiştir.

Geçiş rejiminde gaz viskozitesi ile Kn arasındaki ilişki Şekil 3.5(b) 'de gösterilmektedir. OGMD simülasyonundan elde ettiğimiz ilişki bazı modellerle karşılaştırılmıştır. Viskozite, geçiş rejiminde büyük ölçüde Kn'ye bağlıdır. Viskozite, artan kayma etkileri ve Kn ile düşme eğilimindedir. Bu çalışmada molekülün katı ile çarpışması düzgün yansıma modeline göre yapılmış olmasına rağmen, Michalis ve arkdaşları[74], geçiş rejiminde viskozitenin Kn'ye bağımlılığının diğer yansıma modelleri için benzer olduğunu ileri sürmüştür. Daha dar gözenek boyutunda akan moleküllerin yolu uzar. Sadece geçiş rejiminde normal duvar kanalından farklı, diğer rejimler için benzer olduğu görülmüştür.

Şekil 3.5(c), kıvrımlılığın Kn'ye nasıl bağlı olduğunu gösterir. Gözenekli yapı farkı, kısmen tutarlı olmasına rağmen gözeneklilik değerinde sapmaya neden olmuştur. Bununla birlikte, geçiş rejiminin kıvrımlılık üzerindeki etkisi, OGMD simülasyonunda açıkça gösterilmiştir. Bu çalışmada gösterilmemiştir fakat Zalc ve arkadaşlarının [75] çalışmasına göre Kn artışının gözeneklilik etkisinin artması ile birlikte daha az kıvrımlılığa sebep olduğunu belirtmişlerdir. Geçiş akışında viskoz akış kuralları geçerliliğini yitirir, bu nedenle OGMD sonuçlarını doğrulamak için temel Darcy modelini kullanmak imkansızdır. Bu sebeple Kn değişimini dikkate alan geçirgenlik modellerinden yararlanmak gereklidir. Bu çalışmada modellenen kürelerden oluşan 0.9 gözeneklilik ve fiber yapılardan oluşan 0.8 gözeneklilik benzerlik göstermiştir.



Şekil 3.5: Kn vs. (a) Boyutsuz Kütle Akış Oranı, (b) μ_e/μ_0, (c) τ ve (d) K/K_{int} (Durum 3).

Kn etkisi açıkça Şekil 3.5(d) 'de gösterilmiştir. Sürekli akış rejiminde, Kn'deki değişiklik geçirgenliği etkilemez. Kn'nin geçirgenlik üzerindeki etkisi, gözenekli ortamın yapısına bağlı değildir. Kayma akış rejiminde, geçirgenlik doğrusal olarak Kn'ye bağlıdır ve biraz artar. Kn'nin $0.1 < Kn < 10$ arasında olduğu geçiş rejimi geçirgenliğin en çok değiştiği bölgedir. Bu bölgedeki Kn artışı, artan kayma etkileri ile katı yüzeydeki yığın sürtünme direncini azaltır ve böylece geçirgenliğin hızla artmasına neden olur. Darcy akışındaki gibi geçirgenlik sabit kalmaz. Bu artış sadece seyreklik etkisinin bir sonucudur ve gözenekli yapı ve gözeneklilikten bağımsızdır. Bu sonuçlar, Klinkenberg'in teorisinde de savunulmuştur. Geçiş rejimindeki hem matematiksel modellerin hem de simülasyonların geçirgenlik için verdiği sonuçlara bakıldığında bu çalışmanın farkı, geçirgenliğin hızlı yükselişinin daha büyük Kn değerlerinde olmasıdır.

Kn'yi moleküler akış rejimine doğru yükselttikçe eğimin daha doğrusal olarak geliştiğini gözlemlenmiştir.

4. İKİ PARALEL LEVHA ARASINA YERLEŞTİRİLEN BİR YARIK İÇİNDEN AKIŞIN MODELLENMESİ

DSMC yöntemi ile orifis ve/veya yarık akışı incelemesi literatürde yaygındır. Çoğu çalışmada sonsuz büyüklükte ve farklı basınçta iki rezervuarın arasındaki küçük bir yarıktan basınç farkı kaynaklı gaz akışı incelenir. Bu ara bağlantı bazen çok kısa bir boru bazen de sonsuz incelikte bir sınırdır. Danilatos [76], Sharipov [77] ve [78], Wang and Li [79], Varoutis ve arkadaşları [28] argon, helyum, azot gazlarından biri veya birkaçı ile geniş bir Kn ilişkili akış rejimi aralığında, özellikle de transition rejimde, bir orifis veya slit kanal içinden akışı incelemişlerdir. Sayı ve kütle yoğunluğu, hız, sıcaklık, basınç ve akış oranlarının akış ekseni boyunca dağılımlarını basınç oranlarına, sadece L'yi değiştirerek L/H oranlarına göre değişimlerini incelemişlerdir. Sharipov ve Strapasson [80] ise aynı incelemeyi ab-initio potansiyeline dayalı DSMC yöntemi ile yapıp asal gazlara kriptonu eklemişlerdir. Makroskobik dağılımlara ve akış oranlarına ilaveten Graur ve arkadaşları [81] orifis kesitinde hız profilini de elde etmişlerdir. Fakat bunu sabit bir H için yapmışlardır. Rahmati ve Ehsani [82] ise LBM yöntemini Langmuir kayma modeli ile beraber kullanarak akış yönündeki hız profillerini elde etmişlerdir. Benzer incelemeyi Misdanitis ve arkadaşları [83] BGK yöntemi ile yaparak sonuçları DSMC ile karşılaştırmıştır. Aynı akış incelemesini yapan Pantazis ve Valougeorgis [27] ise Maxwell speküler-diffuse sınır şartına uyan BGK modeli kullanmıştır. DSMC simülasyonlarını deneysel çalışmaları ile karşılaştıran Gimelshein [84] ve Lilly [85] ise L geometrisi ve yüzey etkileşiminin impulse ve propulsion' a etkisini de incelemiştir. Lindström ve arkadaşları [86] ise çeşitli basınç oranlarında ve farklı orifis geometrilerinde akışa ait kütle akış oranını N-S eşitlikleri tabanlı bir çözücü ile incelemişlerdir. Kararlı durum çalışmalarının yanı sıra akışın zamana bağlı gelişimini inceleyen Sharipov [87], kütle akış oranı, sıcaklık ve hız dağılımlarını geçiş ve sürekli rejimde zamana bağlı hesaplamış ve çeşitli rejimlerde akışın kararlı hale geldiği zamanları değerlendirmiştir. Benzer şekilde zamana bağlı hesaplama yapan Polikarpov & Graur [25] ve Ho & Graur [88] ise kararsız S-modeli kinetik denkleminin DVM (Discrete Velocity Method) yöntemiyle çözümüne dayanarak kararlı hale geliş süresinin

çeşitli parametrelere bağlılığını tüm Kn ilişkili rejim aralığında incelemişler ve sonuçları DSMC ile karşılaştırmışlardır. Varoutis ve arkadaşları [28]' nın çalışmasında akış oranı L/H oranına bağlı incelenmiştir. Fakat alt ve üstte sınırları periyodik yaparak sadece yarık civarını hesaplamışlar ve kanal duvarı koymamışlardır. Literatürde molekül ile duvar etkileşimleri genellikle düzgün veya dağınık olarak modellenmiştir.

Çoğu yarık içinden akış çalışmasında, iki farklı basınçtaki rezervuarı birbirine bağlayan bir yarık içinden akış özellikleri incelenmiştir. Bu rezervuarlar sonsuz büyüklükte varsayıldığından akış süresince basınçları değişmez. Sadece bu rezervuarların yarık ve yarığa yakın bölgesi küçük domainlere ayrılarak hesaplama yapılır.

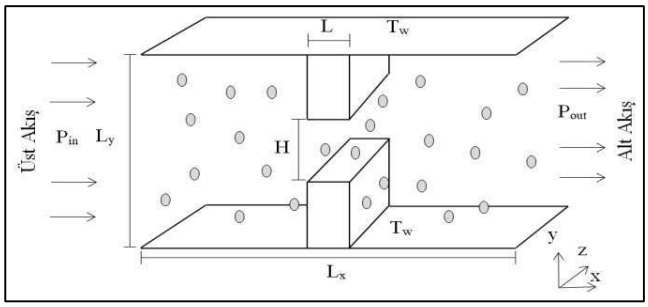
Bu çalışmada ise birbirlerine sonlu mesafede olan ve sonlu uzunluktaki iki paralel levhadan oluşan bir kanalın belirli bir noktasına koyulan engelin oluşturduğu bir yarık içinden akış incelendi. Akış için kanalın giriş ve çıkışına basınç farkı uygulandı. Yarığın H ve L boyutlarının yarık içindeki akış profiline ve kanalın makroskobik akış özelliklerine etkisi aydınlatılması gereken problemler olarak bu çalışmada incelendi. Bu tür akışların modellenmesinde genelde DSMC veya Boltzman eşitliğinin nümerik çözümleri kullanılmasına rağmen tüm avantajları gözetilerek OGMD yöntemi ilk defa bu tür bir akışın modellenmesi için uygulandı.

4.1. Yarığın Modellenmesi

Hücre yapısının bir avantajı da kanal içinde ekstra duvarların oluşturulmasında sağladığı kolaylıktır. Bir mülekül hücre duvarına temas ettiğinde bu duvarın rolüne göre hareket eder. Eğer duvardan yansıma yapacaksa yansıma sınır koşulu devreye girer, eğer normal bir hücre ise sadece hücre geçişi yaparak yörüngesi üzerindeki komşu hücreye geçiş yapar. Simülasyonda her hücre, duvarına ait sınır koşuluna göre ID'ye sahiptir. Böylece kanal içinde belirlenen hücrelerin ID'leri değiştirilerek, molekülün o duvara temas ettiğinde yansıma yapması sağlanır. Kanalın x ekseni üzerinde belirli bir noktasından başlayarak ilgili hücreler bu şekilde duvar hücresi olarak tanımlandı. Eğer sıfır kalınlıklı bir duvar yapmak istenirse o hücrelerin x eksenindeki minimum pozisyonunu maksimum pozisyonuna atamak yeterli olacaktır.

4.2. Kurulum Konfigürasyonlari

Moleküllerin alt ve üst levhalar ile ve engel duvarı ile çarpışması diffuse yansıma sınır koşulu ile yapılmıştır. Genişlik (z ekseni) yönünde sonsuzluk etkisi veren periyodiklik sınır şartı kullanıldı. Bu bağlamda geometri 3 boyutlu kartezyen koordinatlarda modellenmesine rağmen z boyutundaki periyodik sınır şartı sebebiyle özellik dağılımları 1 ve 2 boyutlu incelenmiştir. Bu modellemedeki tüm özellik dağılımları x yönü boyunca akışın merkezinden (center of streamwise) alınmıştır. Makroskobik özelliklerin dağılımları hesaplanırken, kanal x ve y ekseni boyunca bölgelere(bin) ayrılmıştır. Her bölgenin içindeki özelliklerin z ekseni boyunca ortalaması alınmıştır. Böylece 2 boyutlu bir data elde edilmiştir. Her özelliğe ait bu 2 boyutlu datadan istenilen bölgeye ait dağılım değerleri seçilmiştir.



Şekil 4.1. Yarığın geometrisi ve kanal içindeki yerleşimi.

Akışkan olarak monoatomik Ar gazı seçildi. Nümerik hatayı en aza indirmek için bütün büyüklükler boyutsuzlaştırılmıştır. Boltzman sabiti $k_B = 1$, referans sıcaklığı $T = 300K$, kütle $m = 1.5 \times 10^{-27} kg$ ve çap $d = 0.5 \times 10^{-10} m$ ile ölçeklendirilerek boyutsuz hale gelmiştir. Tüm uzunluk ölçüleri d çapı ile boyutsuzlaştırılmıştır. Buna göre simülasyonlarda plakaların uzunlukları $L_x = 10000$ ve plakalar arası mesafe $L_y = 5000$ dir. Simülasyon setupları farklı L ve H uzunluğuna göre farklı basınç oranları ve ortalama serbest yol değerlerinde gerçekleştirilmiştir. Yarığın başlangıç noktası kanal uzunluğu L_x'in 0.16'sından başlatılmıştır. Girişe yakın konulması yarıktan çıkan akışkanın davranışını daha fazla mesafeye kadar takip edebilmek içindir. Simülasyonda modellenen gerçek molekül sayısı 200000 dir. Alt ve üst duvarların sıcaklığı ile kanal içi

sıcaklığı $T_w = 300K$ olarak simülasyonun ilk anında girilmiştir. Duvar sıcaklığı simülasyon boyunca sabit olmasına rağmen kanal içi sıcaklığı simülasyon tarafından kendiliğinden oluşur.

Simülasyonun ilk anında moleküller verilen basınç ve sayı yoğunluğuna göre kanal içine rastgele dağıtılmaktadır. Bu anda tüm sınır duvarları düzgün yansıma sınır koşulu ile modellenir ve yarık yerleştirilmemiştir. İlk anda, verilen sıcaklık değerine bağlı hızlarla hareket ettirilen moleküller yeterli miktarda çarpışma yaparak ısıl denge koşuluna gelir. Buraya kadar simülasyonun ilklendirme aşamasıdır. Sonra kanalın belirlenen noktasına istenilen geometride yarık oluşturulur ve aynı anda diğer sınır duvarlara ilgili yansıma sınır koşulları (y-ekseninde dağınık ve z-ekseninde periyodik) uygulanır. Ardından x-ekseni boyunca üst akış ve alt akışa basınç sınır koşulu uygulanarak akış sağlanır. Kanal girişi ve kanal içi basınçları eşit verilmiştir. Basınç farkı oluşturmak için sadece kanalın alt akış sınırına düşük basınç uygulanmıştır.

Akış oranını hesaplamak için genişliği L olan yarığa birim zamanda giren ve çıkan moleküllerin sayısı simülasyon aracılığı ile belirli bir zaman periyodunda sayılarak aşağıdaki şekilde hesaplanmıştır. Yarığın giriş ve çıkış bölgesinde bulunan hücrelerdeki moleküller dikkate alınmıştır.

$$\dot{m} = \frac{N_{out} + N_{in}}{2\Delta t} m_{mol} \tag{4.1}$$

Burada, m_{mol} tek bir molekülün kütlesidir.

Basınç ve kütle yoğunluğu dağılımlarında her simülasyon grafiği kendi kanal giriş değerine normalize edilmiştir. Bu sayede, farklı Kn değerlerindeki başka deyişle yoğunluktaki sonuçları niteliksel olarak karşılaştırmaya imkân verir. Hız ve sıcaklık dağılımlarında her bin için hesaplanan makroskobik değerler sırasıyla $300m/s$ ve $300K$'ya boyutsuzlaştırılmıştır. Tüm simülasyon sonuçlarında hızın kontür grafiklerinde skala 1.2 ile 0.1 arasına normalize edilmiştir. Bu sayede karşılaştırma renk kontrolü ile yapılabilir.

Bu çalışmada Kn seyreklik parametresi olarak kabul edildi. Literatürdeki karşılığı δ ile ilişkisi aşağıdaki gibidir:

$$Kn = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{\delta} = \frac{\lambda}{H} \tag{4.2}$$

Burada λ molekülün ortalama serbest yolu ve H ise yarık yüksekliğidir. Literatüre uyumlu olması için bu dönüşüm yapılmıştır. Bu çalışmada H yüksekliği parametresi değişken olduğu için Kn hesaplamasında kullanmak doğru olmayacaktır. Kanal yüksekliği L_y her simülasyonda sabit olduğundan karakteristik uzunluk olarak kabul edilmiştir. Bu sayede Kn parametresinden bağımsız olarak H yüksekliğinin akışa etkisi incelenebilir.

Simülasyonlar aşağıdaki tabloda verilen Kn, H, L ve basınç oranı parametrelerinin değişimine bağlı durumlar için gerçekleştirilip akış özelliği karşılaştırmaları yapılmıştır.

Tablo 4.1: Yarık akışı için simülasyon durumları.

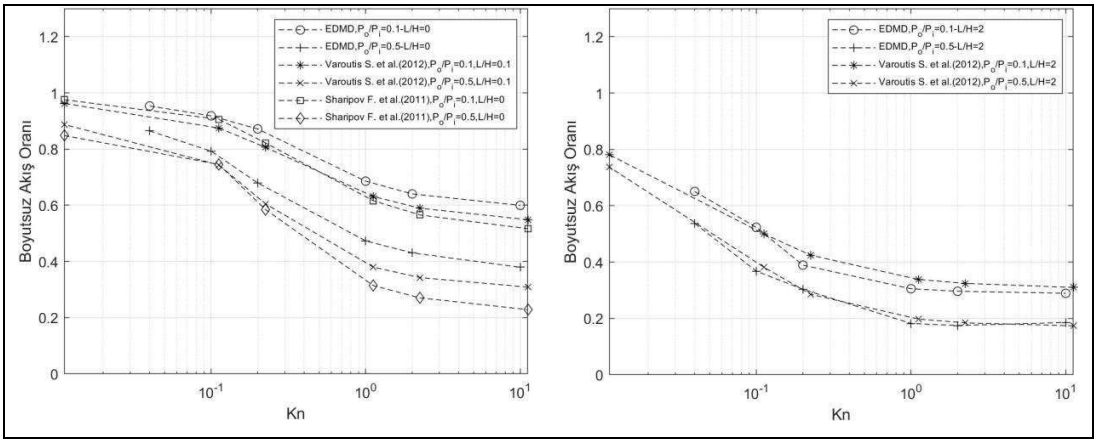
Durum No	**Kn**	**p_o/p_i**	**H**	**L**
1	0.04…10	0.1-0.5	500	0
2	0.04…10	0.1-0.5	250-500-1000	0
3	0.04…10	0.1	250	0
4	0.04…10	0.1	500	0
5	0.02…10	0.1	1000	0
6	0.04…10	0.1	500	1000
7	0.04…10	0.5	500	0
8	0.04…10	0.5	1000	0
9	0.04…10	0.5	500	1000
10	0.04	0.01-0.1-0.5	1000	0
11	0.04	0.01-0.1-0.5	500	0
0.04…10 aralığı için Kn değerleri 0.04, 0.1, 0.2, 1, 2, 10'dir.				

4.3. Yarık İçinden Akış Sonuçlarının İncelenmesi

İki rezervuarı ayıran bir yarık içinden akış çalışmalarında ki ortak sonuçlarda hız, sayı yoğunluğu ve sıcaklık sadece yarık bölgesinde ani değişime uğrar. Alt akış bölgesine geçen moleküllerin bu parametreleri üst akış bölgesindeki durumlarına yaklaşarak belirli uzaklıktan sonra eşitlenir. Yarık öncesinde çalkalanmayı ve simülasyonda yarık girişinde molekül yığılmasını engellemek amacıyla paralel levhalar

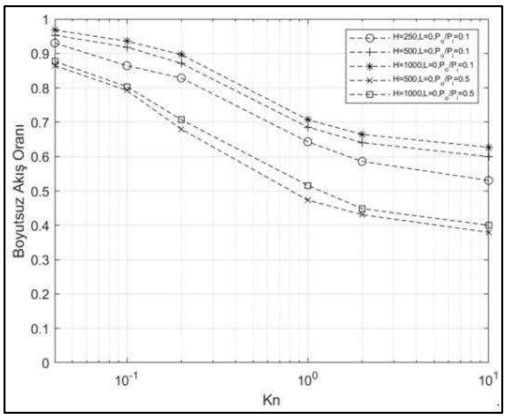
arası akış için gerekli basınç oranını sadece alt akış sınır bölgesine daha düşük basınç değeri verilerek sağlanmıştır. Üst akış sınır bölgesi ve kanal içi basıncı simülasyonun ilk anında aynıdır. Kanal boyunca Kn sayısına bağlı basınç ve yoğunluk dağılımı grafiklerinde basınçlar arasında büyük farklar olmasından dolayı sonuçların niteliksel karşılaştırması maksadıyla simülasyonun veri noktaları kendi kanal giriş değerine normalize edilmiştir. Özelliklerin ölçeklendirilmesi: T=300K ve u_x=300 m/s.

Şekil 4.2'de 0.1 ve 0.5 basınç oranlarında ve farklı H ve L değerlerinde Kn'ye göre elde edilmiş akış debileri gösterilmiştir. L/H=0 için L=0 ve H=500'dür. L/H=2 için L=1000 ve H=500'dür. Kn 0.04'den 10'ye kadar akış oranlarında azalma görülür. Buna göre Kn büyüdükçe akış oranı geçiş rejimine kadar hemen hemen sabittir. Kn değeri geçiş rejimi sınırlarına geldikten sonra akış oranında ani bir azalış başlar. Bu azalış geçiş rejimi boyunca devam eder. Moleküler akış rejimi bölgesinde hemen hemen sabit kalır. Basınç oranı 0.1'den 0.5'e azalırken akış oranı da azalır. Basınç oranına bağlı akış oranındaki bu fark tüm Kn aralığında sabit değildir. Moleküler rejime doğru artarken sürekli rejime doğru azalır. L/H oranı da akış oranını etkiler. L'nin artışı yarık içinde ince bir kanal oluşturur. Bu akış oranının azalmasına sebep olurken aynı zamanda geçiş rejiminin Kn değeri aralığınıda değiştirir. L arttıkça bu aralık daha küçük Kn değerlerine doğru kayar. Sabit H yüksekliğinde ve alt ve üst levhaların olmadığı DSMC çalışmaları [28] ve [89] ile düşük Kn'lerde benzer sonuçlar görülmüştür. Yüksek Kn'lerde farkları oluşturan etki ise bireysel moleküller ile alt üst plaka duvarları arasındaki momentum tranferinin artmasıdır.



Şekil 4.2: Boyutsuz akış oranının Kn'ye bağlı değişimi. p_o/p_i=0.1-0.5 için L/H=0 ve 2'dir.

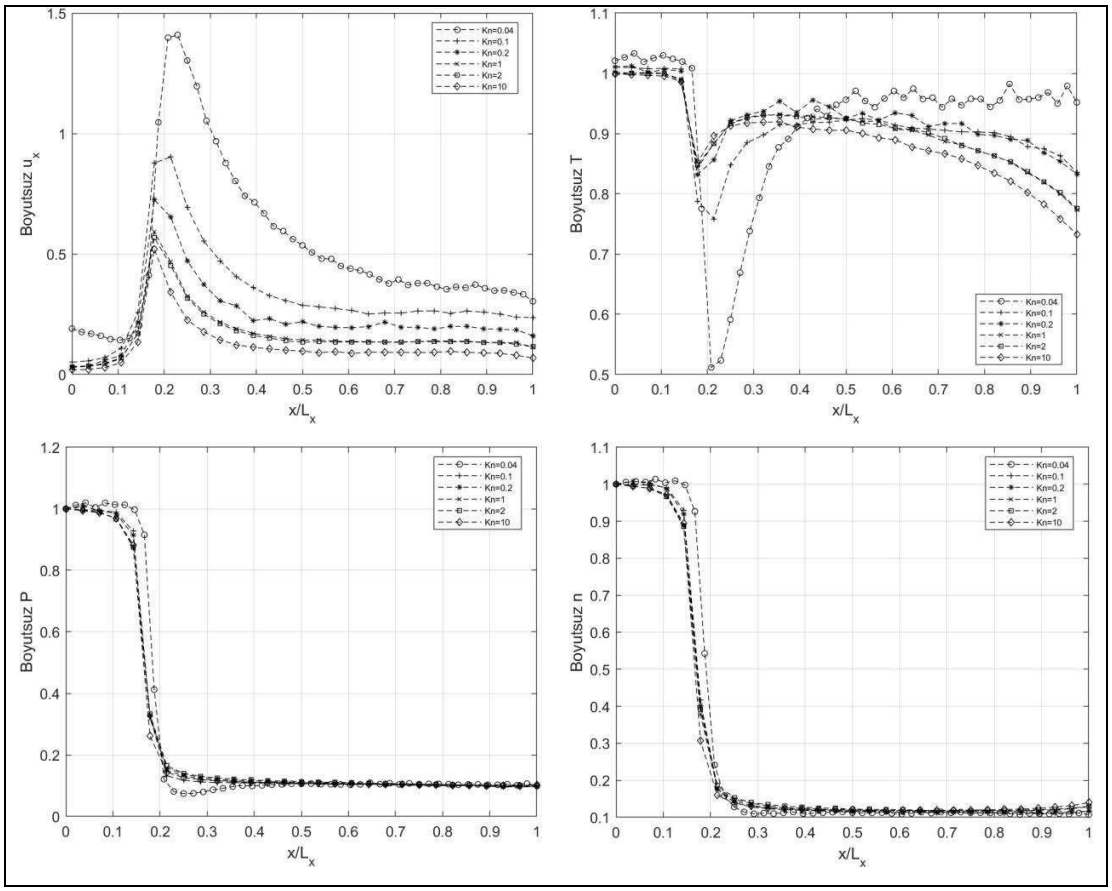
Şekil 4.3'de 0.1 ve 0.5 basınç oranlarında H'ye bağlı akış oranlarındaki değişim gösterildi. H değerleri oransal olarak büyümesine ragmen akış oranına etkisi farklıdır. H=250'de akış oranı diğer ikisi arasındaki farktan tüm Kn değerlerinde daha büyüktür. Literatürde çoğu çalışmada L=0 iken bazılarında sıfırdan faklıdır. Fakat H yüksekliğinin değiştirildiği bir çalışma yoktur.



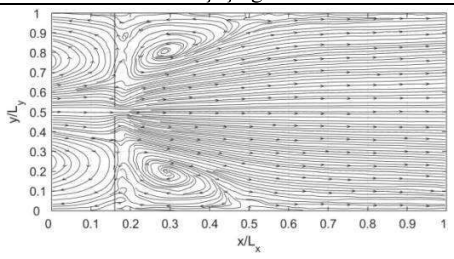
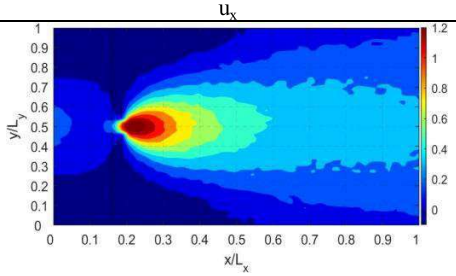
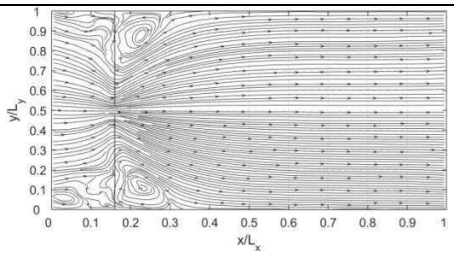
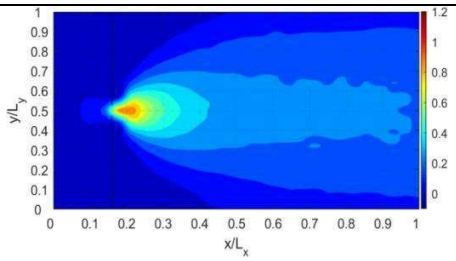
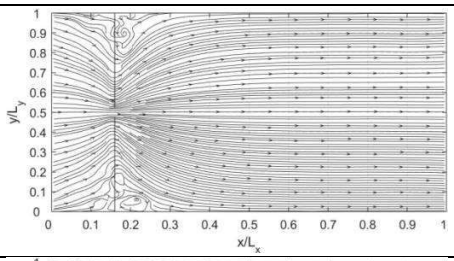
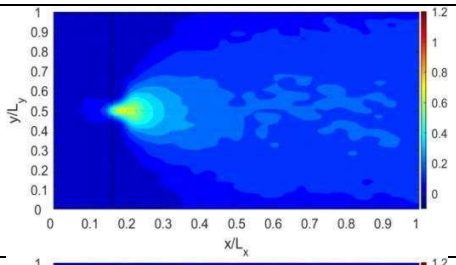
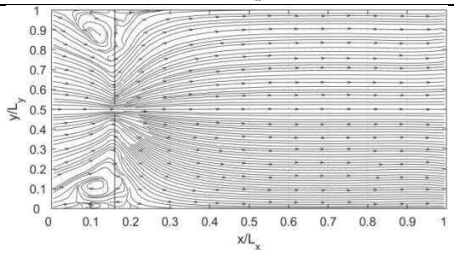
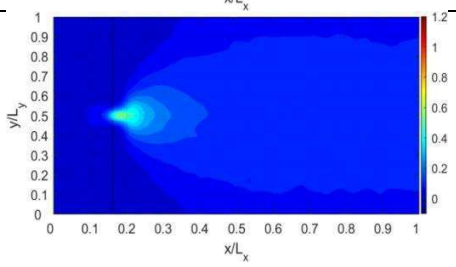
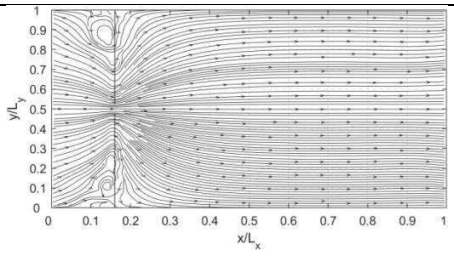
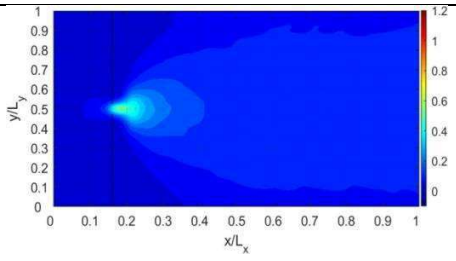
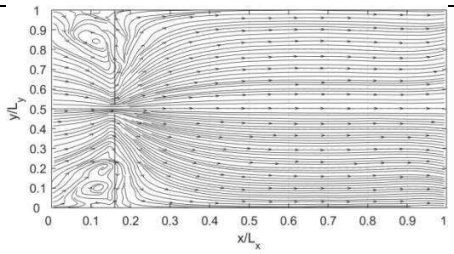
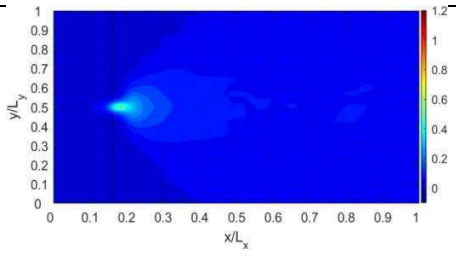
Şekil 4.3: Boyutsuz akış oranının Kn'ye bağlı değişimi. p_o/p_i=0.1-0.5 ve L=0 için H yüksekliği 250, 500 ve 1000'dir.

Şekil 4.4'te kanalın x/L_x boyunca sırasıyla akış yönündeki hız bileşeni, sıcaklık, basınç ve sayı yoğunluğu (u_x, T, p, n) değişimleri farklı Kn değerlerinde ve p_o/p_i=0.1, H=250 ve L=0 akış şartında elde edilmiştir. Bu simülasyonda H yüksekliği en düşük

değerdedir. Basınç dağılımında yarık çıkışındaki ani basınç düşüşü yarık ve orifis gibi geometrilerde görülen ani hacim artışından dolayı beklenen bir akış özelliğidir.

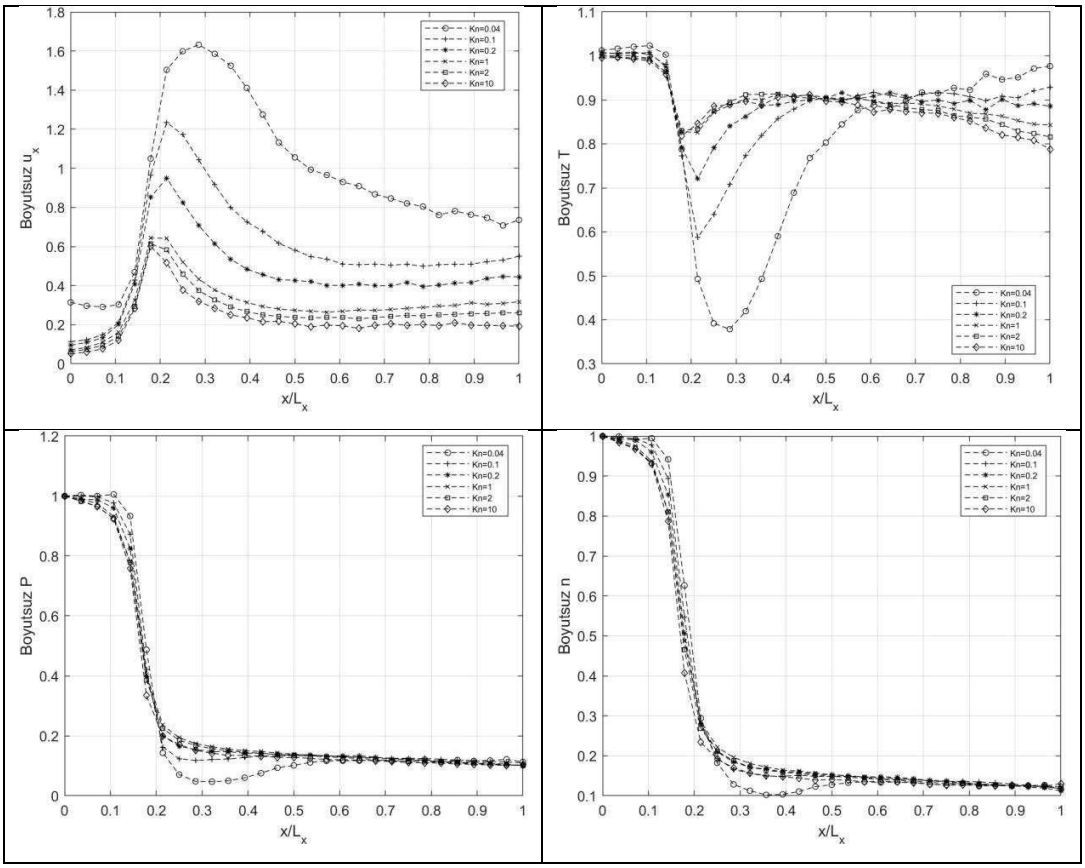


Şekil 4.4: Boyutsuz u_x,T,p ve n için L_x boyunca Kn 'ye bağlı değişim. Akış şartları p_o/p_i=0.1, H=250 ve L=0 dır.

Kn	Akış Çizgisi	u_x
0.04		
0.1		
0.2		
1		
2		
10		

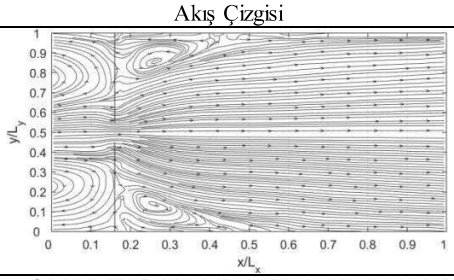
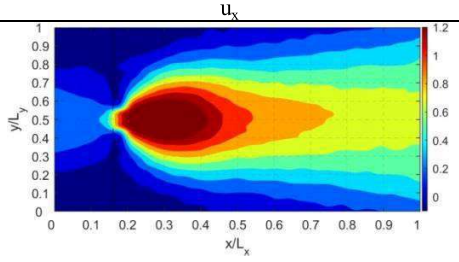
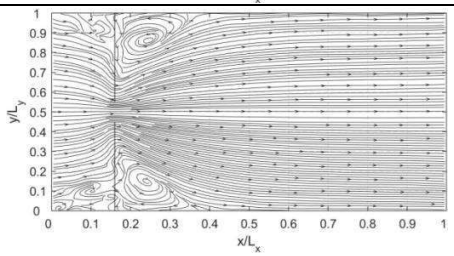
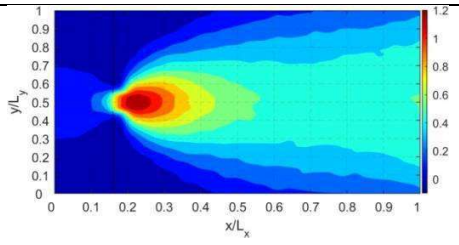
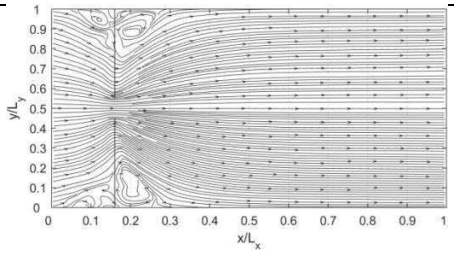
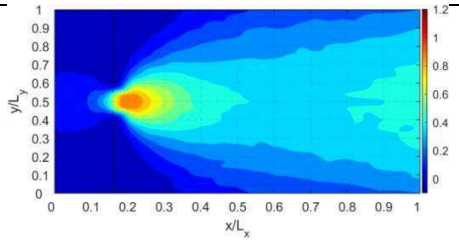
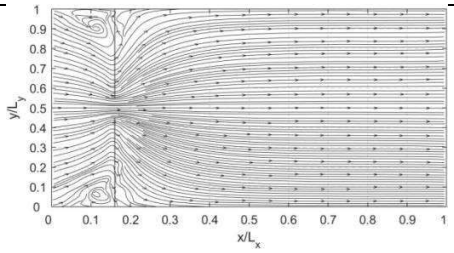
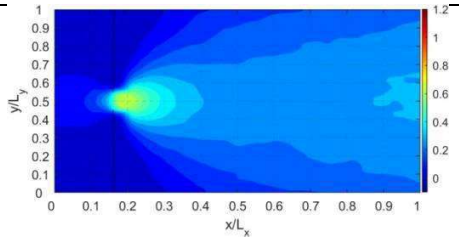
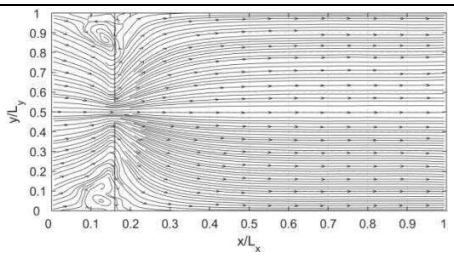
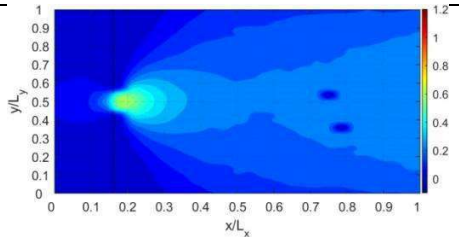
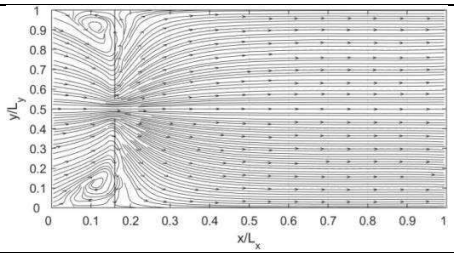
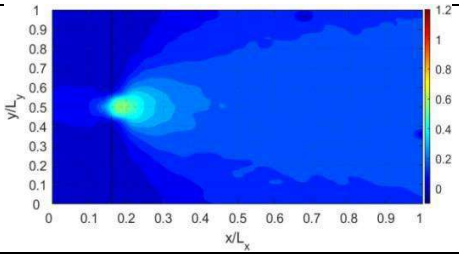
Şekil 4.5: xy düzleminde akış çizgileri ve Kn 'ye bağlı boyutsuz u_x kontür grafiği. Akış şartları p_o/p_i=0.1, H=250 ve L=0 dır.

Şekil 4.6'te kanalın x/L_x boyunca sırasıyla akış yönündeki hız bileşeni, sıcaklık basınç ve sayı yoğunluğu (u_x, T, p, n) değişimleri farklı Kn değerlerinde ve p_o/p_i=0.1, H=500 ve L=0 akış şartında elde edilmiştir. Kn sürekli rejime yaklaştıkça yarık çıkışındaki hız artış gösterir. Sıcaklık düşük Kn'de kanal çıkışına doğru giriş değerine yaklaşırken büyük Kn'de giriş değerinden daha aşağı değerlere doğru gider. Sürekli rejimdeki akışlarda basıncın yarık çıkışında ani düşüş göstermesi beklenir. Fakat Kn sayısı arttıkça basınçtaki bu ani azalış kaybolmaktadır.



Şekil 4.6: Boyutsuz u_x, T, p ve n için L_x boyunca Kn 'ye bağlı değişim. Akış şartları p_o/p_i=0.1, H=500 ve L=0 dır.

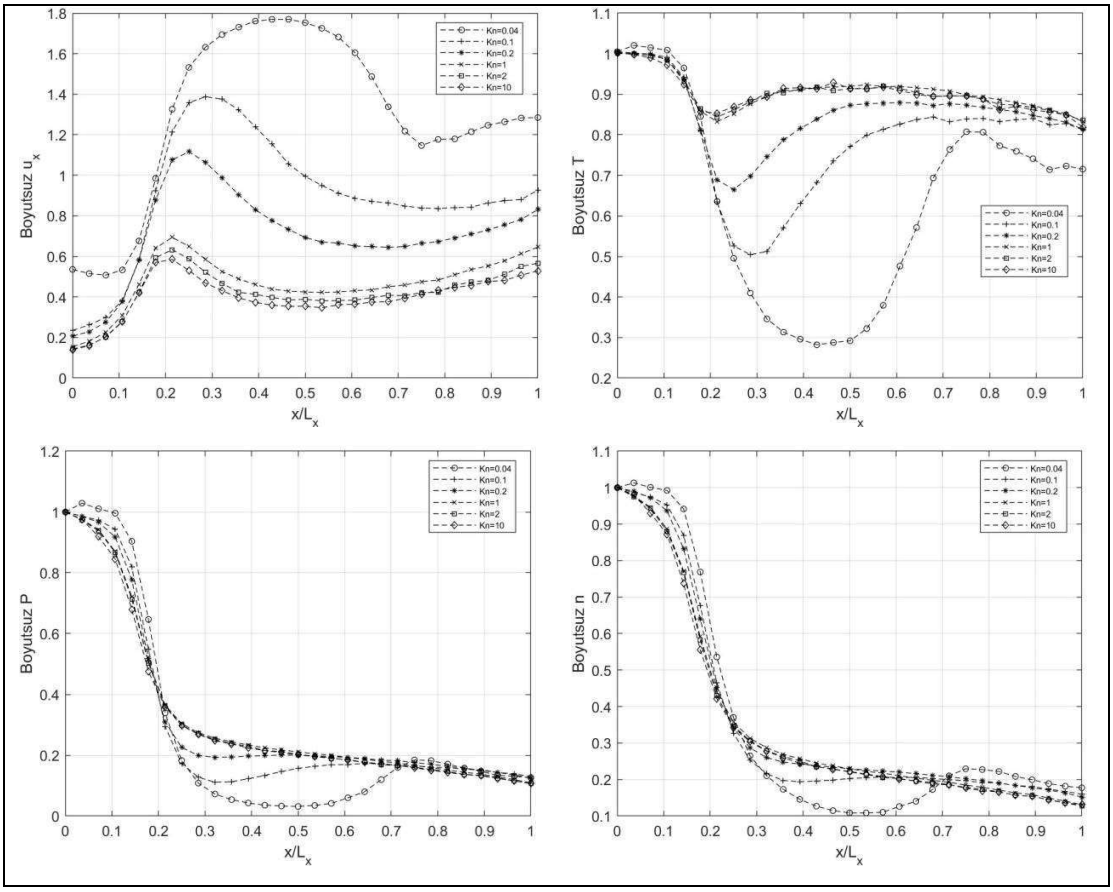
Şekil 4.7 ise Şekil 4.6 'te verilen simülasyonlara ait akış çizgisi ve özelliklere ait iki boyutlu kontür planlarıdır. Akış çizigilerinde düşük Kn'de daha belirgin girdap oluşumları yarık çıkışında göze çarpar. Hatta yarık girişinde yarık duvarı engelinden dolayı geri akışlı girdaplar olur. Bu girdap oluşumları Kn sayısı büyüdükçe azalır. Yarık çıkışında azalan bu girdaplar yarık öncesine taşınmaktadır.

Kn	Akış Çizgisi	u_x
0.04		
0.1		
0.2		
1		
2		
10		

Şekil 4.7: xy düzleminde akış çizgileri ve Kn 'ye bağlı boyutsuz u_x kontür grafiği. Akış şartları p_o/p_i=0.1, H=500 ve L=0 dır.

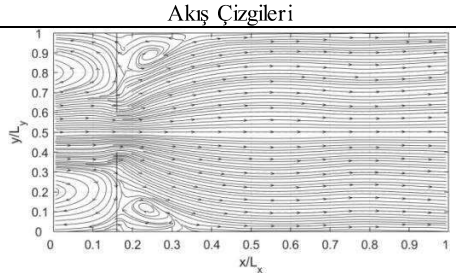
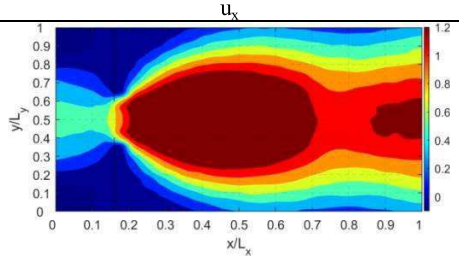
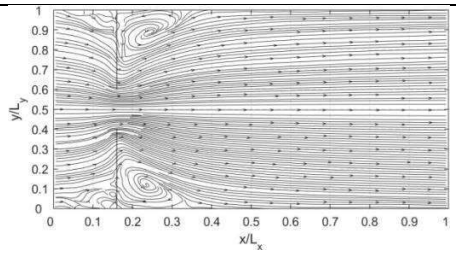
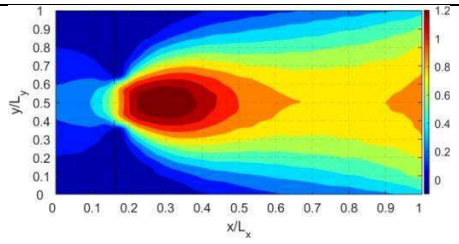
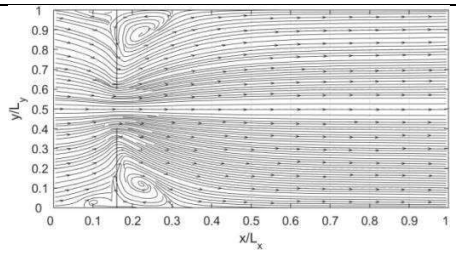
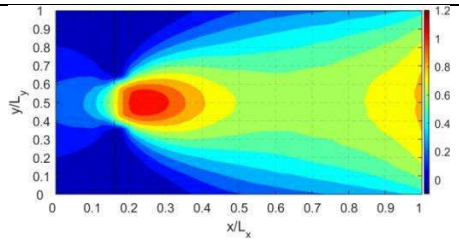
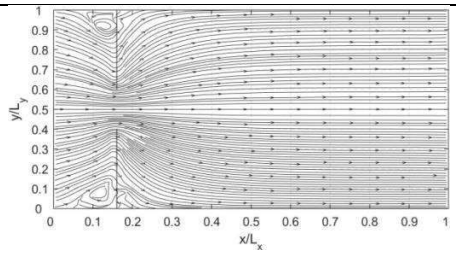
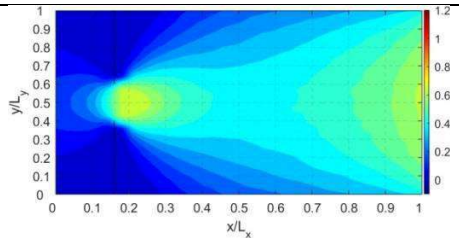
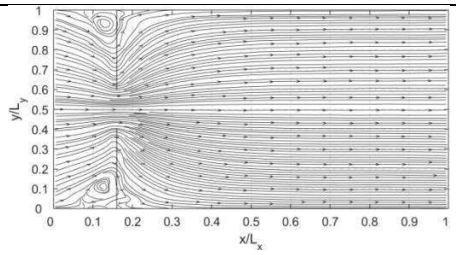
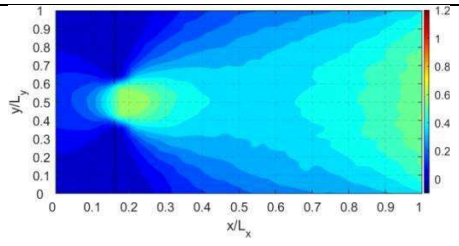
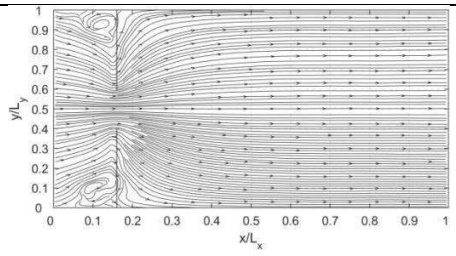
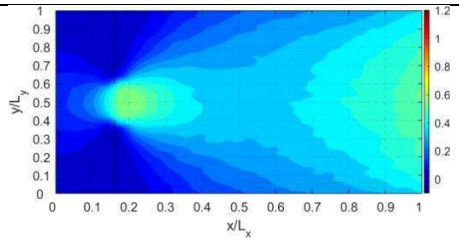
Kn=0.2'de girdaplar yarık civarında yerini daha kaotik akış hareketlerine bırakmıştır. Yarık çıkışındaki basınç düşüşü H=250'dekinden daha fazla ve daha uzak mesafeye kadar olmuştur.

Şekil 4.8'da kanalın x/L_x boyunca sırasıyla akış yönündeki hız bileşeni, sıcaklık, basınç ve yoğunluk (u_x, T, p, n) değişimleri farklı Kn değerlerinde ve p_o/p_i=0.1, H=1000 ve L=0 akış şartında elde edilmiştir. Şekil 4.9 ise aynı akışlara ait akış çizgisi ve kontür planlarıdır. Şekil 4.7'te göremediğimiz Mach diskleri burada Kn=0.04'te x=0.75-0.8 civarında görülmeye başlanmıştır. Mach diskleri hız, yoğunluk, basınç ve sıcalıkta ani dalgalı değişimler ile kendini gösterir. Yarığı geçtiğimiz anda yoğunluk ve sıcaklıktaki ani düşme ile hızdaki ani artışın olduğu sessizlik bölgesi ile başlar. Ardından hızda azalma görüldüğü normal şok dalgası meydana gelir. Bu dalga yoğunluk ve sıcaklıkta ani artışa sebep olur. Sessizlik bölgesi ve normal şok dalgası varil(barrel) şoku tarafından sınırlandırılmıştır. Neredeyse yeniden termal hale gelir ve nispeten yüksek yoğunluktadır. Hafif süpersonik akış hızına sahiptir. Varil şokundan hemen sonra akış yavaşlar[81],[89]. Sadece H boyutunun büyütülmesi buna sebep olmuştur. Bu etki Şekil 4.8'daki x eksenindeki değişimlerde de görülebilir. Literatürde bu disklerin oluşmasındaki ana etkenler basınç oranı ve Kn olarak verilmiştir. Simülasyonun hesap gücüne etkisinden dolayı kanalın yarık sonrası uzunluğun fazla uzatılamaması ve Kn'nin daha fazla küçültülememesinden dolayı sadece bir adet Mach diski görülebildi. Kn=0.2' de yarık önündeki girdaplar 1'de yarık arkasına geçmiştir. Şekil 4.4 ve Şekil 4.5'de yarık açıklığı H'nin 250 olduğu durumda yarık arkasındaki girdapların daha geniş olduğu görüldü. Girdapların önden arkaya tam geçişi diğer H değerlerine göre daha büyük Kn'de olmuştur. Ayrıca kanal boyunca basınç değişim dağılımına göre yarık çıkışındaki ani basınç düşüşü H=250 ve 500'dekinden daha küçük ve daha uzak mesafeye kadar gerçekleşmiştir. Varil şoklarının oluşumu için belirli bir mesafe gerektiği böylece ortaya çıkmıştır.

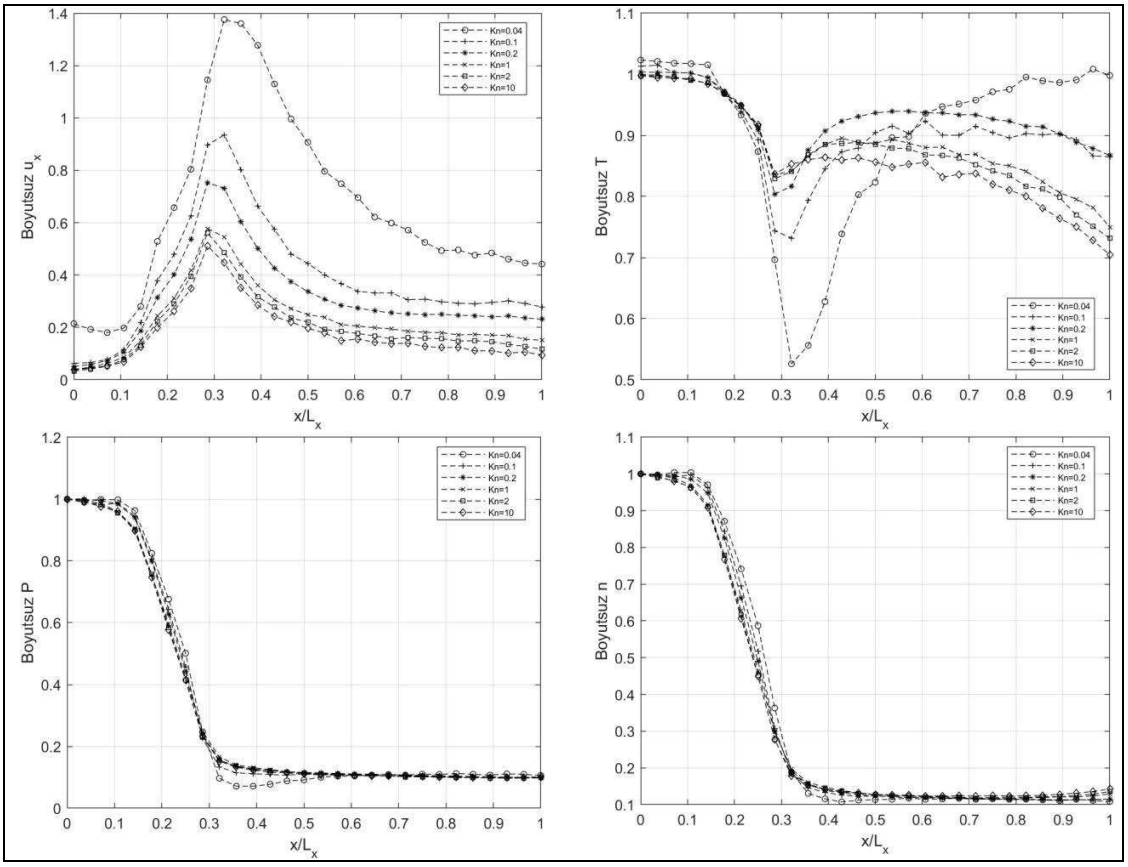


Şekil 4.8: Boyutsuz u_x, T, p ve n için L_x boyunca Kn 'ye bağlı değişim. Akış şartları p_o/p_i=0.1, H=1000 ve L=0 dır.

Şekil 4.10'da kanalın x/L_x boyunca sırasıyla akış yönündeki hız bileşeni, sıcaklık, basınç ve yoğunluk (u_x, T, p, n) değişimleri farklı Kn değerleri için ve p_o/p_i=0.1, H=500 ve L=1000 akış şartında elde edilmiştir. Şekil 4.11 ise aynı akışlara ait akış çizgisi ve kontür planlarıdır. Şekil 4.6 ve Şekil 4.7'te verilen hız kontürlerinde jetlerin daha uzun olduğu görülmektedir. L'nin artışı yarık akışında hızı azaltır. Fakat yarık sonrası oluşan girdapların x ekseni boyunca daha uzun yayılmasına sebep olur. Yarık çıkışındaki basınç düşüşü aynı H değeri için L=0'dakinden daha küçük olmuştur. L'nin büyümesi yarık çıkışındaki basınç düşüşünü azaltmıştır.

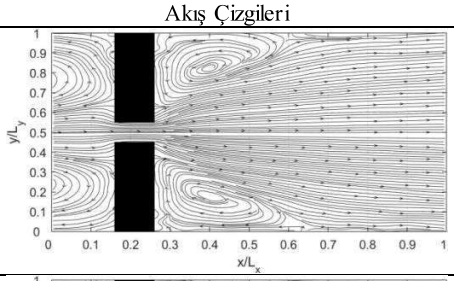
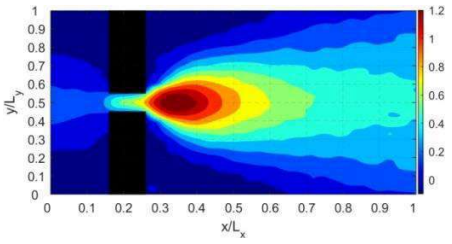
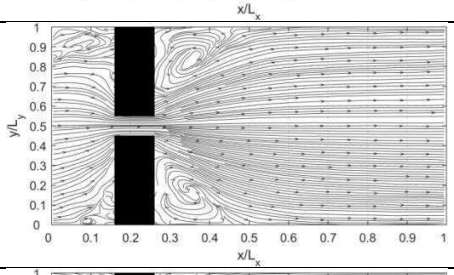
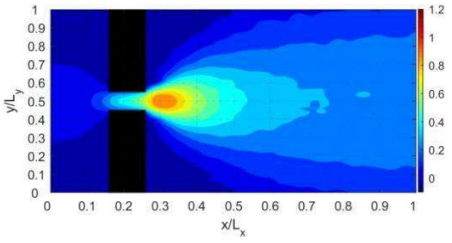
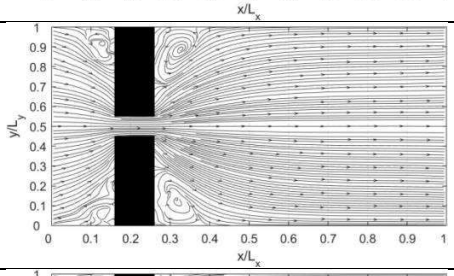
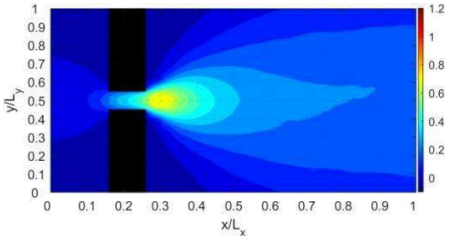
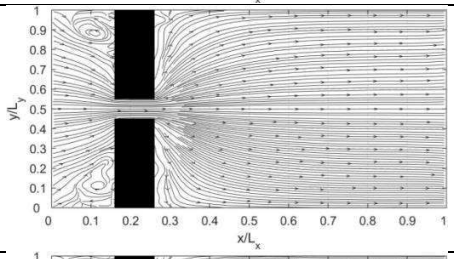
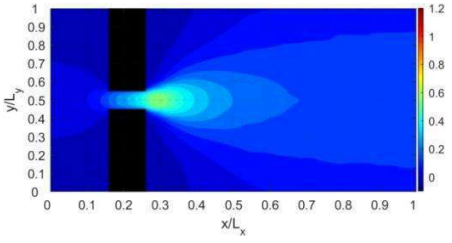
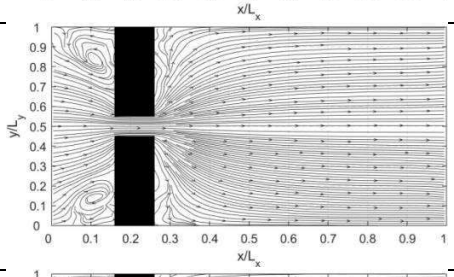
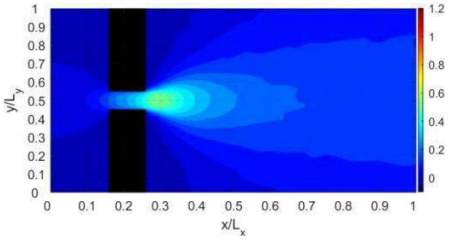
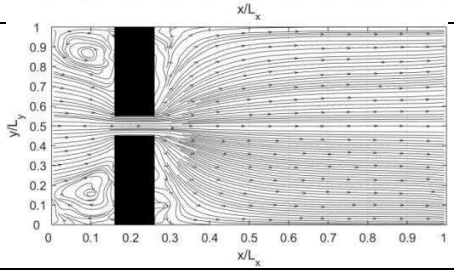
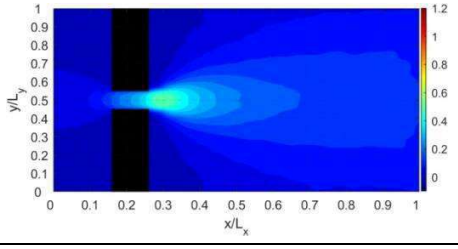
Kn	Akış Çizgileri	u_x
0.04		
0.1		
0.2		
1		
2		
10		

Şekil 4.9: xy düzleminde akış çizgileri ve Kn 'ye bağlı boyutsuz u_x kontür grafiği. Akış şartları p_o/p_i=0.1, H=1000 ve L=0 dır.

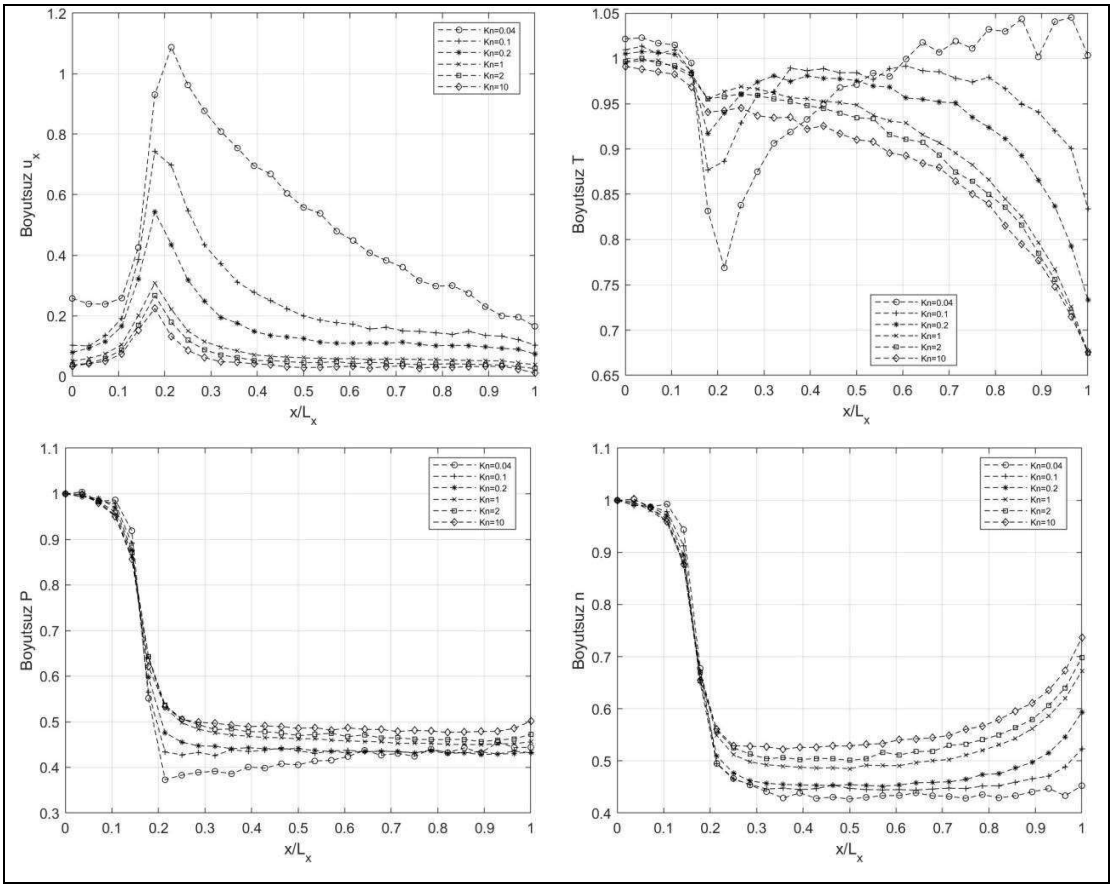


Şekil 4.10: Boyutsuz u_x, T, p ve n için L_x boyunca Kn 'ye bağlı değişim. Akış şartları p_o/p_i=0.1, H=500 ve L=1000 dır.

Şekil 4.12'da kanalın x/L_x boyunca sırasıyla akış yönündeki hız bileşeni, sıcaklık ve basınç (u_x, T, p, n) değişimleri farklı Kn değerlerinde ve p_o/p_i=0.1, H=500 ve L=1000 akış şartında elde edilmiştir. Şekil 4.13 ise aynı akışlara ait akış çizgisi ve kontür planlarıdır. Şekil 4.6 ve Şekil 4.7'ten farklı olarak basınç oranının düşürüldüğü bu akışlarda yarık sonrası hız jetlerinin daha dar olduğu görülmüştür. Bununla beraber Kn=0.04'te yarık sonrası girdapların x ekseni boyunca daha uzun alana yayıldığı görülmüştür. Bu etki L'nin boyutunun etkisinden daha büyük olmuştur. Kn=1'den büyük değerlerde kanal çıkışında girdap hareketlerinin başladığı görülmektedir.

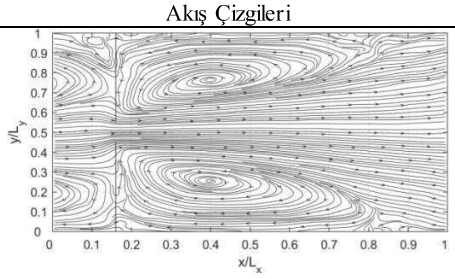
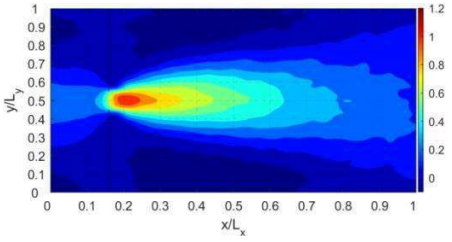
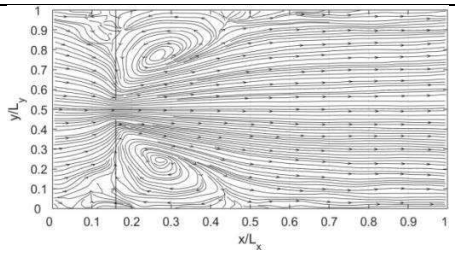
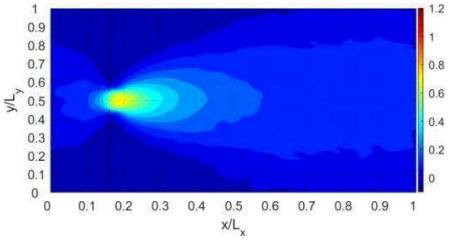
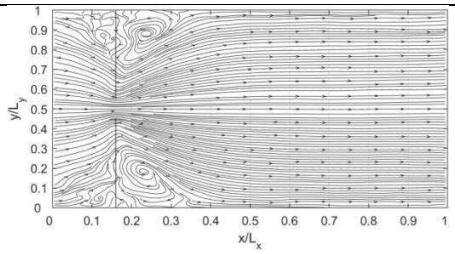
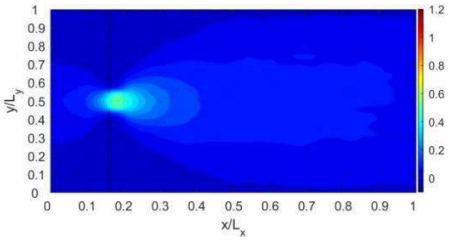
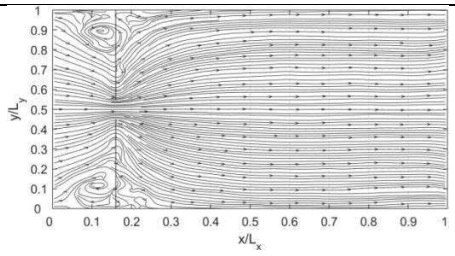
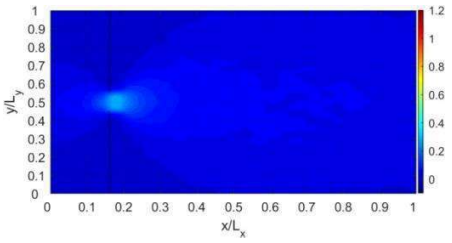
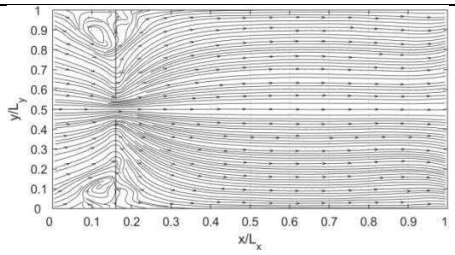
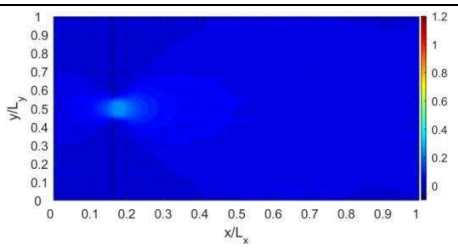
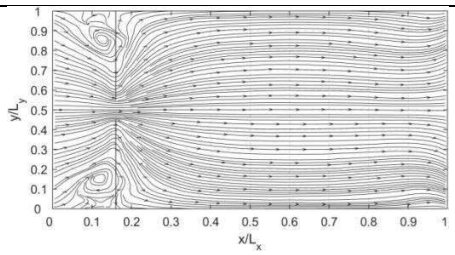
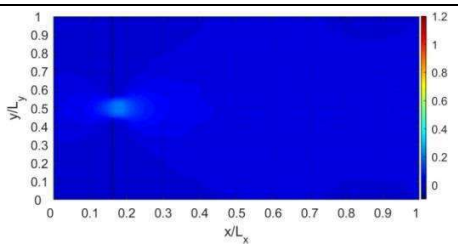
Kn	Akış Çizgileri	u_x
0.04		
0.1		
0.2		
1		
2		
10		

Şekil 4.11: xy düzleminde akış çizgileri ve Kn 'ye bağlı boyutsuz u_x kontür grafiği. Akış şartları p_o/p_i=0.1, H=500 ve L=1000 dır.

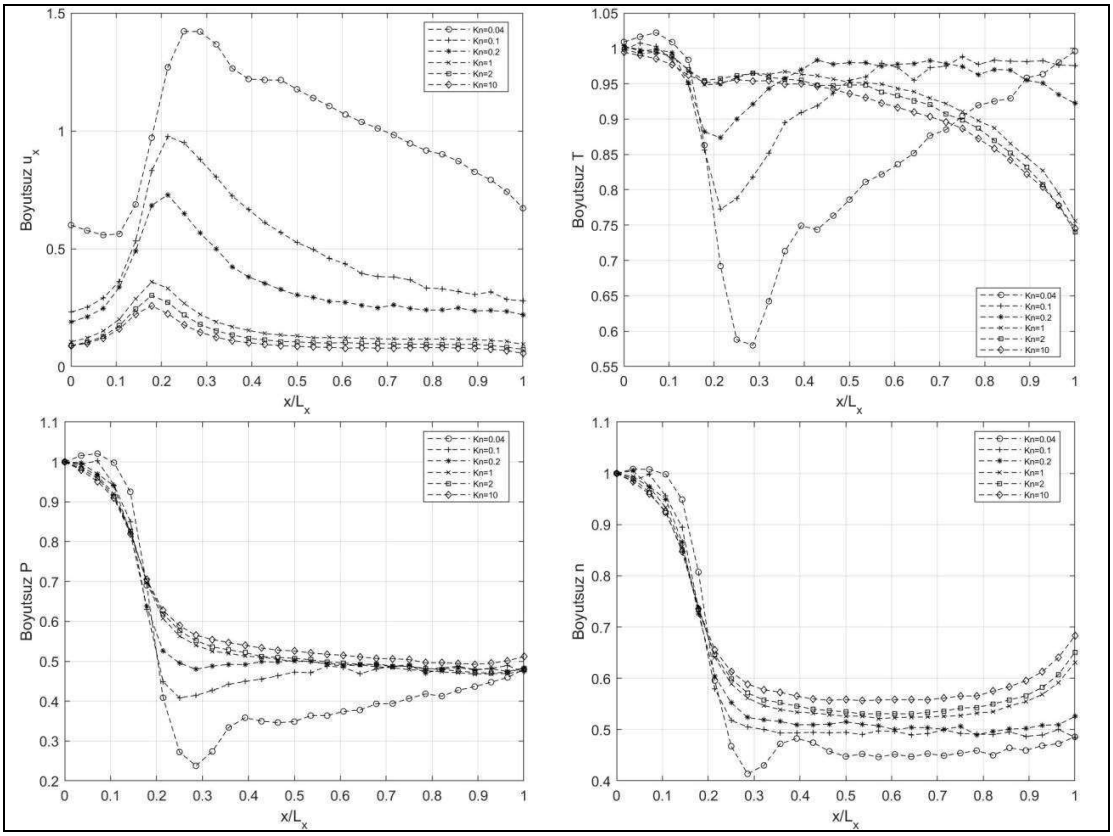


Şekil 4.12: Boyutsuz u_x, T, p ve n için L_x boyunca Kn 'ye bağlı değişim. Akış şartları p_o/p_i=0.5, H=500 ve L=0 dır.

Şekil 4.14'da kanalın x/L_x boyunca sırasıyla akış yönündeki hız bileşeni, sıcaklık ve basınç (u_x, T, p) değişimleri farklı Kn değerlerinde ve p_o/p_i=0.5, H=1000 ve L=0 akış şartında elde edilmiştir. Şekil 4.15 ise aynı akışlara ait akış çizgisi ve kontür planlarıdır. H'nin büyümesi ile yarık sonrası girdablar x ekseninde yayılmasını daha da artırmış hatta kanalın sonuna kadar devam etmiştir. Kn=0.1'de girdapların yarık öncesine gerilemesi için ara geçiş olmuştur. Tam geçişi Kn=0.2'den 2'ye kadar sürmüştür. Basınç oranının düşmesi ile yarık çıkındaki jet hızının düşmesi yoğunluğun azalmasına sebep olur. Yarık çıkışındaki ani basınç düşüşünü H=500'den 1000'e gittikçe büyük miktarda artırmıştır.

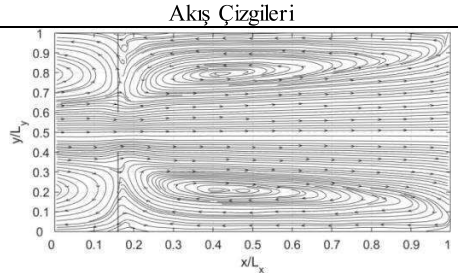
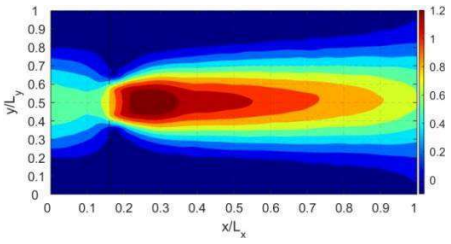
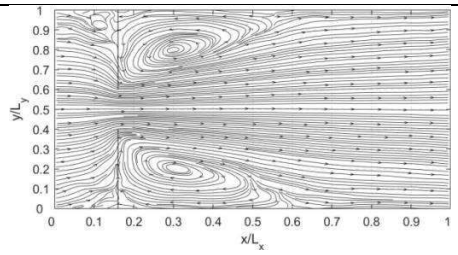
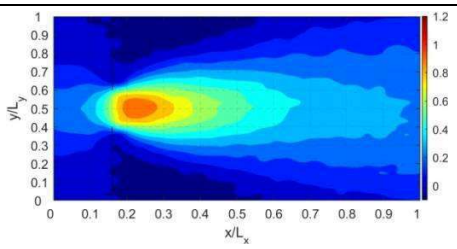
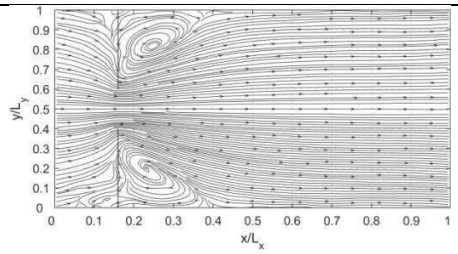
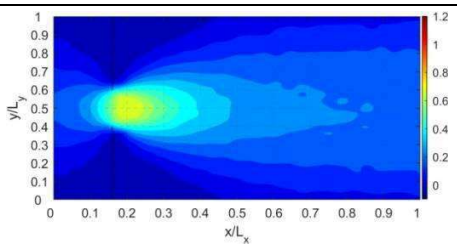
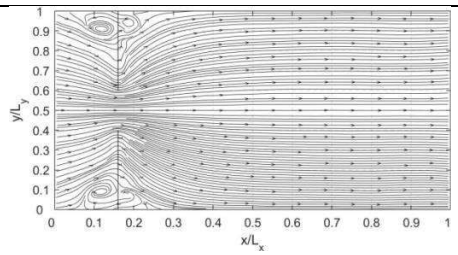
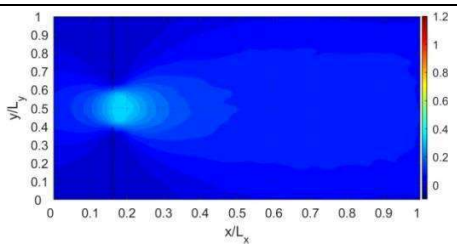
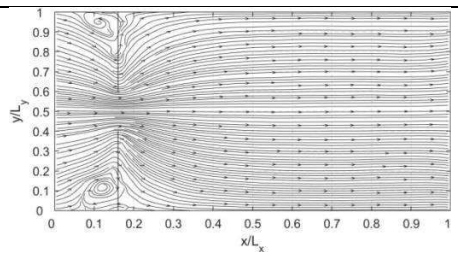
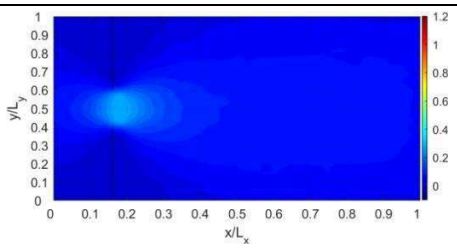
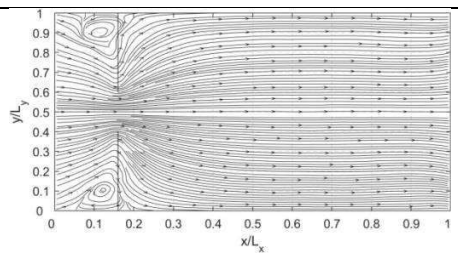
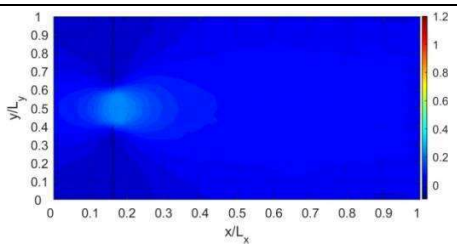
Kn	Akış Çizgileri	u_x
0.04		
0.1		
0.2		
1		
2		
10		

Şekil 4 13: xy düzleminde akış çizgileri ve Kn 'ye bağlı boyutsuz u_x kontür grafiği. Akış şartları p_o/p_i=0.5, H=500 ve L=0 dır.



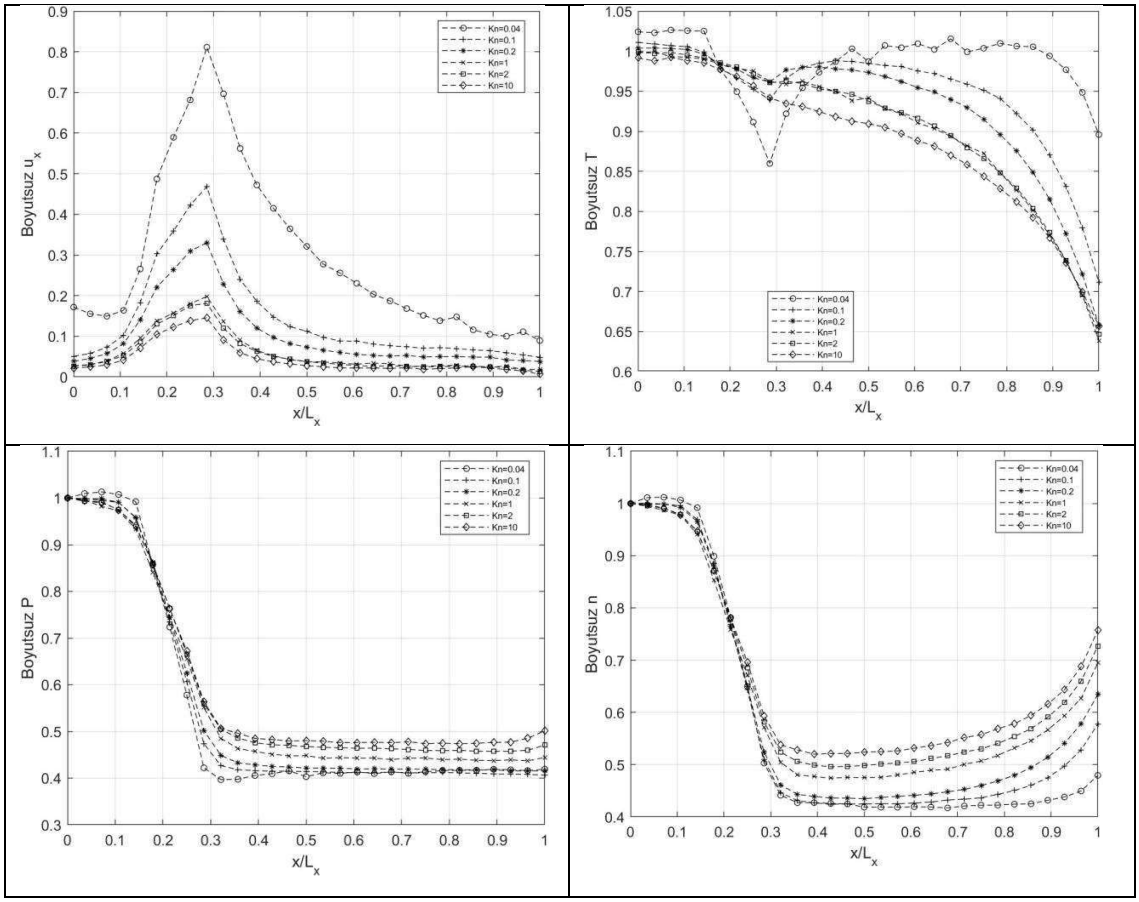
Şekil 4.14: Boyutsuz u_x, T, p ve n için L_x boyunca Kn 'ye bağlı değişim. Akış şartları p_o/p_i=0.5, H=1000 ve L=0 dır.

Şekil 4.16'da kanalın x/L_x boyunca sırasıyla akış yönündeki hız bileşeni, sıcaklık, basınç ve sayı yoğunluğu(u_x, T, P, n) değişimleri farklı Kn değerlerinde ve p_o/p_i=0.5, H=1000 ve L=0 akış şartında elde edilmiştir. Şekil 4.17 ise aynı akışlara ait akış çizgisi ve kontür planlarıdır. L'nin artışı yarıktan sonrası girdapların x-ekseninde yayılmasını Şekil 4.11 ve Şekil 4.12'daki yayılmaya nazaran azaltmıştır. Yarık dar boğazının belli bir uzunlukta olması yarık sonrası yoğunluğun aniden düşmesini engeller böylece yarık sonrası girdapları küçülür. Kn=2'den başlayarak daha büyük Kn'lerde kanal çıkışındaki girdaplar daha belirgin hale gelir. Bu oluşum Şekil 4.11 ve Şekil 4.12'da da gözlemlenmiştir.

Kn	Akış Çizgileri	u_x
0.04		
0.1		
0.2		
1		
2		
10		

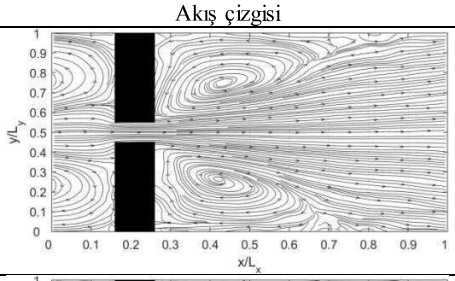
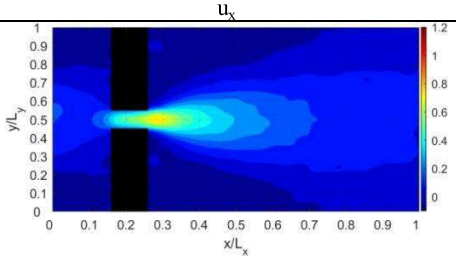
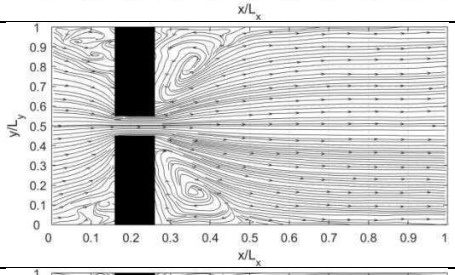
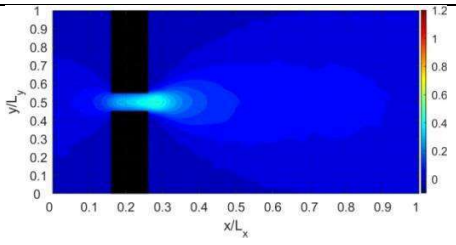
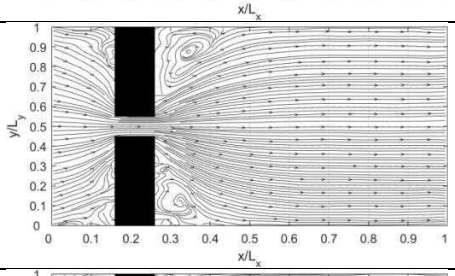
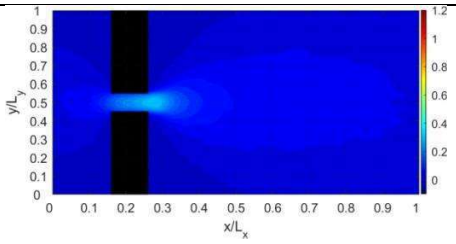
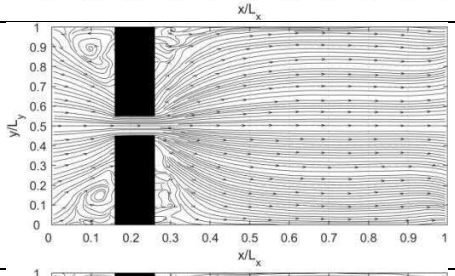
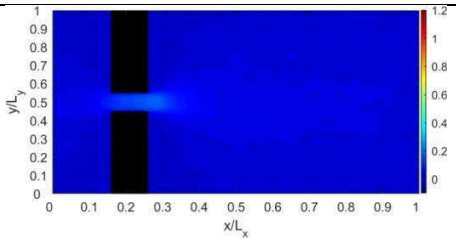
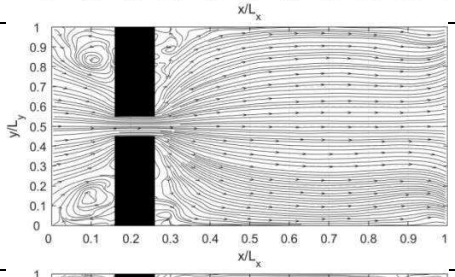
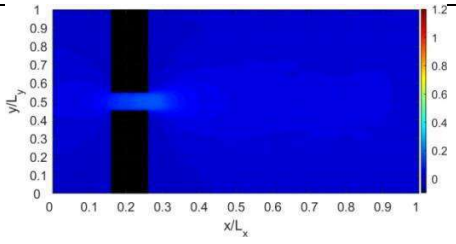
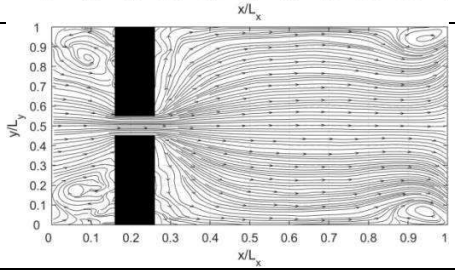
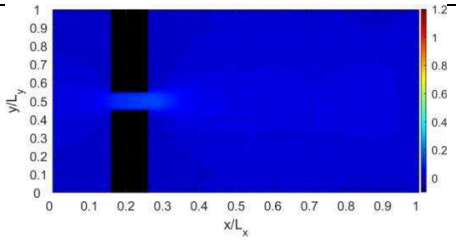
Şekil 4.15: Akış çizgileri ve xy düzleminde Kn 'ye bağlı boyutsuz u_x kontür grafiği. Akış şartları p_o/p_i=0.5, H=1000 ve L=0 dır.

Bunun sebebi daha düşük basınç oranlarında ve dar yarıklardır. L'nin artışı girdap oluşumunun daha erken Kn'lerde oluşmasını sağlamıştır. L'nin 1000'e çıkarılması basınç oranındaki azalmanın sebep olduğu yarık çıkışındaki ani basınç düşüşünü neredeyse ortadan kaldırmıştır.



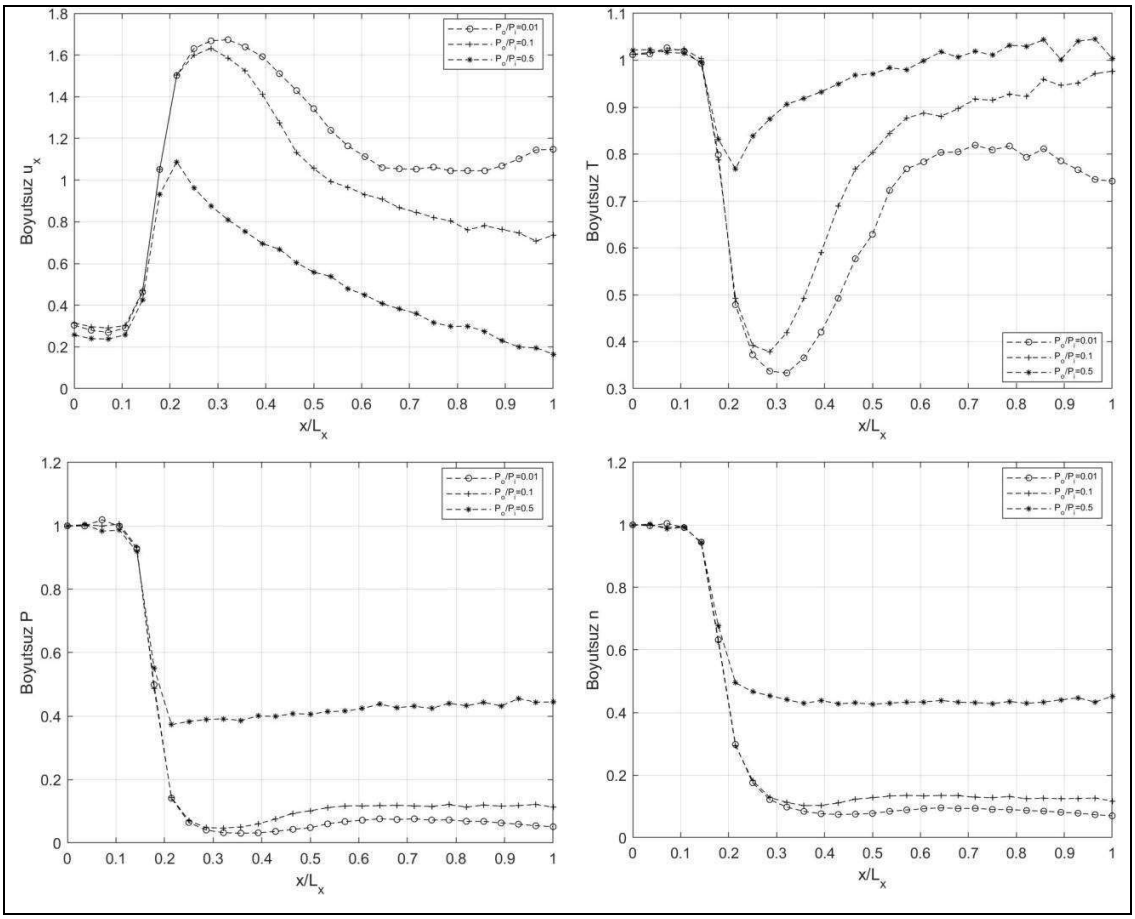
Şekil 4.16: Boyutsuz u_x, T, p ve n için L_x boyunca Kn 'ye bağlı değişim. Akış şartları p_o/p_i=0.5, H=500 ve L=1000 dır.

Kn=0.04, H=500, L=0 ve p_o/p_i=0.1-0.5-0.01 akış şartlarında akış çizgisi oluşumları ve hız kontür grafikleri Şekil 4.19'da verilmiştir. Daha önce Şekil 4.6 ve Şekil 4.7'te görülemeyen H=500'deki Mach diskleri basıncın 100 kat artırılması ile dahi tam anlamıyla elde edilememiştir. Şekil 4.18'teki u_x grafiğinde basıncın 0.1'den 0.01'e yani 10 kat artması hızdaki değişimi yarık çıkışında kendini gösterir.

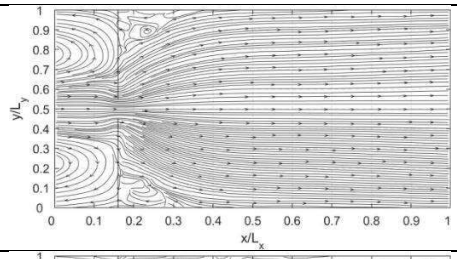
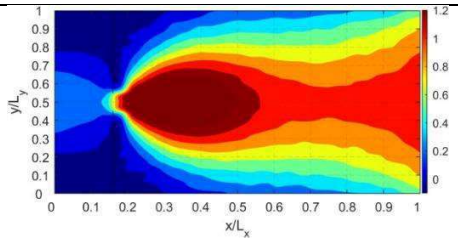
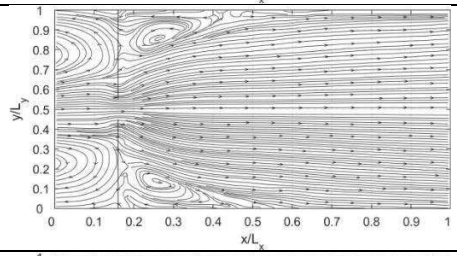
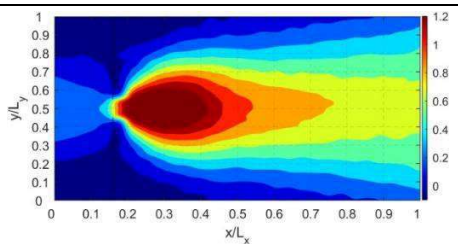
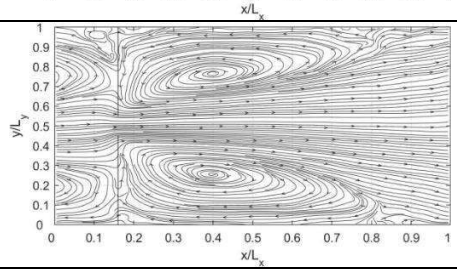
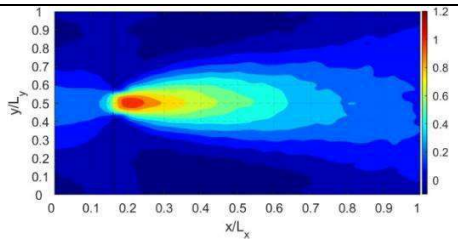
Kn	Akış çizgisi	u_x
0.04		
0.1		
0.2		
1		
2		
10		

Şekil 4.17: xy düzleminde akış çizgileri ve Kn 'ye bağlı boyutsuz u_x kontür grafiği. Akış şartları p_o/p_i=0.5, H=500 ve L=1000 dır.

Akış çizgilerine baktığımızda ise 0.01'in 0.5'e göre girdapları yarık çıkışında oldukça azalttığı ve belirsizleştirdiği görülür. Fakat yarık girişindeki girdapları daha da genişletmiştir. Ayrıca H=1000'de p_o/p_i=0.1'de gördüğümüz Mach diskini aynı Kn'de H=0.01'de dahi belirgin olarak görememizin sebebi yarık geometrisi olabilir. Daha dar yarıklarda daha büyük basınç oranları işe yaramadığı aşikar olduğundan daha küçük Kn'lerde oluşabilir.

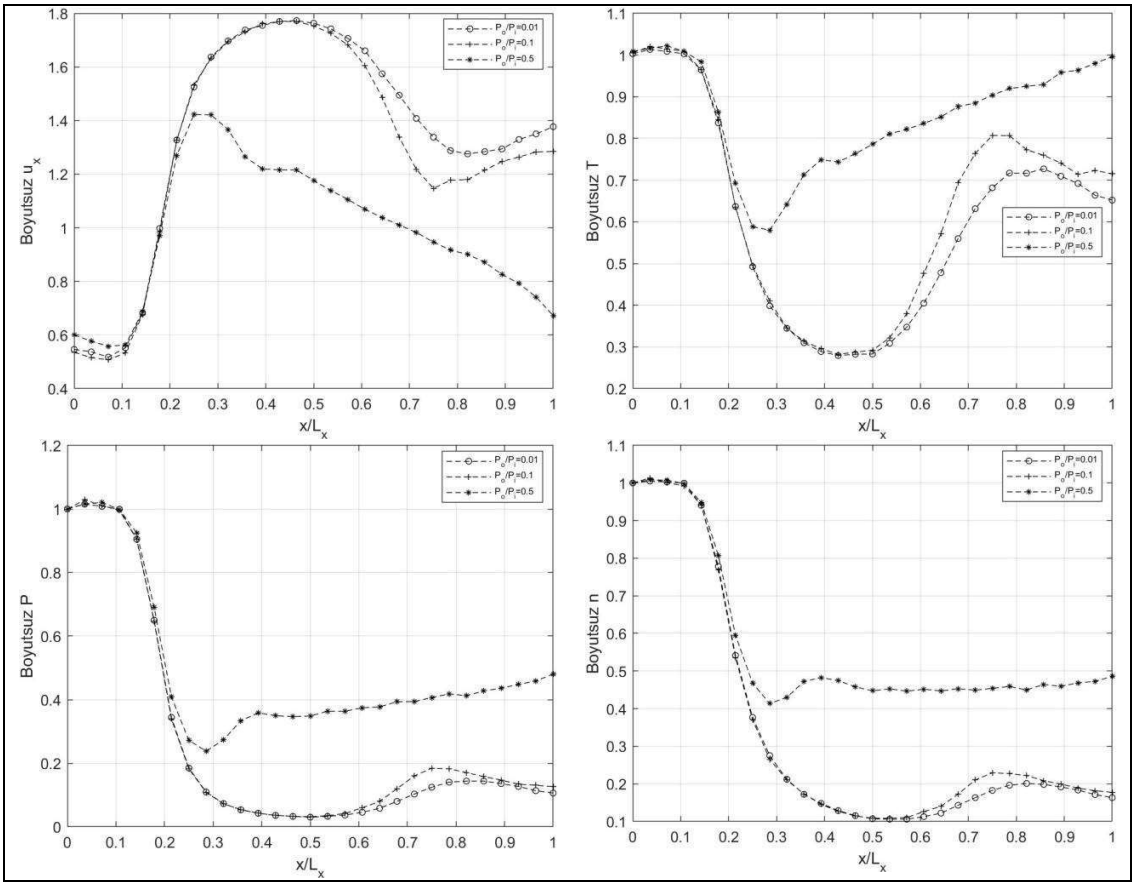


Şekil 4.18: Boyutsuz u_x, T, p ve n için L_x boyunca basınç oranına (p_o/p_i) bağlı değişim. Akış şartları Kn=0.04, H=500 ve L=0 dır.

p_o/p_i	Akış Çizgisi	u_x
0.01		
0.1		
0.5		

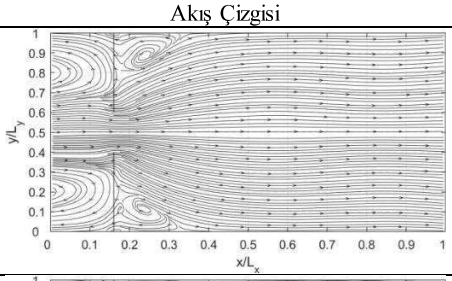
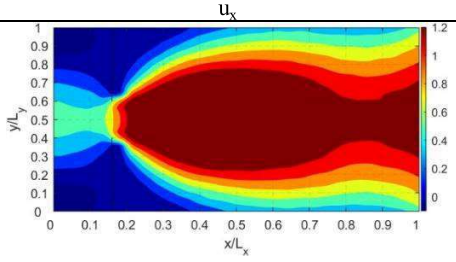
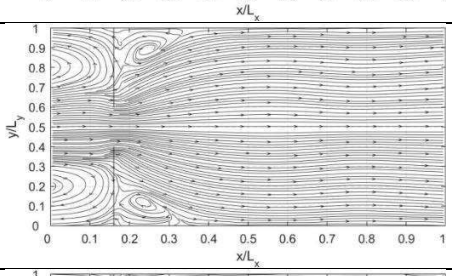
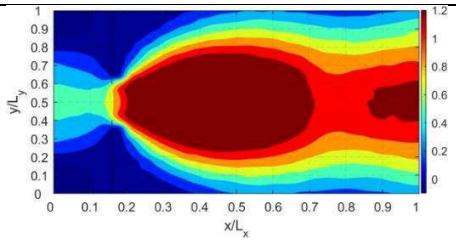
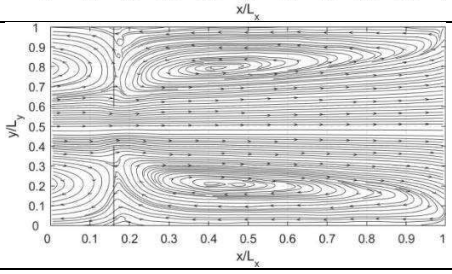
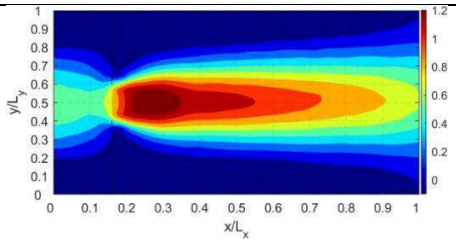
Şekil 4.19: xy düzleminde p_o/p_i = 0.01-0.1-0.5'ye bağlı akış çizgileri ve boyutsuz u_x kontür grafiği. Akış şartları Kn=0.04, H=500 ve L=0 dır.

Kn=0.04, H=1000, L=0 ve p_o/p_i=0.1 akış şartlarında Şekil 4.8 ve Şekil 4.9'da Mach disk oluşumu görülmüştü. Şekil 4.20 ve Şekil 4.22'de Kn=0.04, H=1000, L=0 akış şartlarında basınç oranlarına (p_o/p_i=0.1-0.5-0.01) göre karşılaştırma yapılmıştır. Buna göre basınç oranını 100 katına çıkarmak Mack disklerinde daha yumuşak ani özellik değişimlerine sebep olmuştur. Bununla birlikte yarık sonrası girdaplarında basınç oranı 0.1 ile karşılaştırıldığında neredeyse hiç farklılık göstermemiştir. Bu akış şartlarında basınç oranının girdap yapısına etkisi sadece 0.1 ve altı değerlerde mevcuttur.



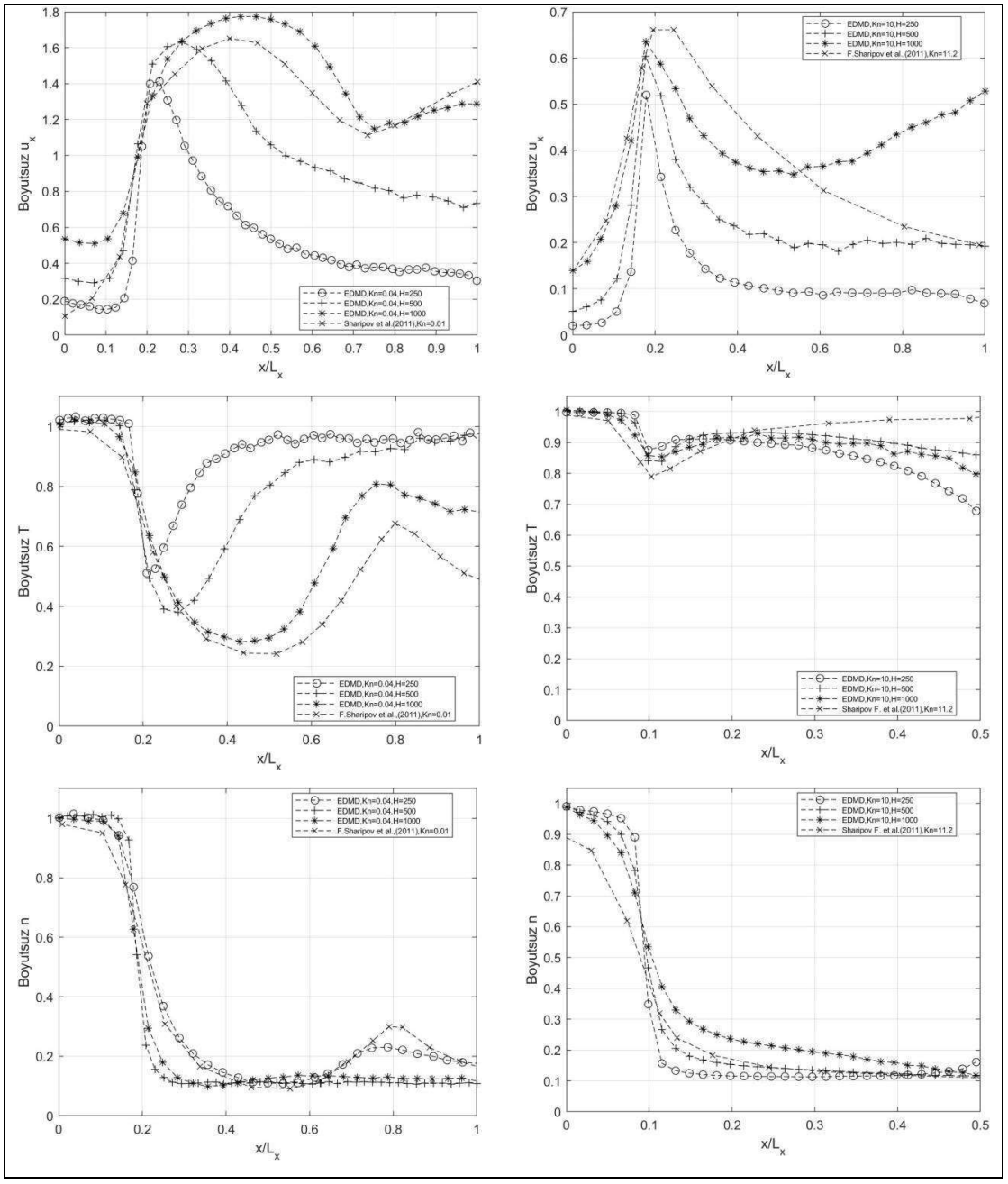
Şekil 4.20: Boyutsuz u_x, T, p ve n için L_x boyunca basınç oranına (p_o/p_i) bağlı değişim. Akış şartları Kn=0.04, H=1000 ve L=0 dır.

H=250-500-1000 yükseklikleri için Kn=0.04-10'de kanal boyunca u_x, n ve T dağılımları gösterilmiştir(Şekil 4.21). Özellik dağılımlarında yarık sonrası dalgalanma H=250'de daha azdır. Böylece akış özelliklerinin dengeye gelmesi aynı Kn değerleri için büyük H'lere göre daha kısa mesafede olmuştur. Mach diskinin kanalın x ekseni üzerindeki konumları Kn=0.01'deki çalışma[89] ile benzerlik göstermiştir. Fakat plakaların varlığı ve Kn sayısı farkı ani özellik değimlerinin OGMD'de daha yumuşak olmasına sebep olmuştur.

p_o/p_i	Akış Çizgisi	u_x
0.01		
0.1		
0.5		

Şekil 4.22: xy düzleminde p_o/p_i = 0.01-0.1-0.5'e bağlı akış çizgileri ve boyutsuz u_x kontür grafiği. Akış şartları Kn=0.04, H=1000 ve L=0 dır.

Bazı dağılım sonuçlarında özelliklerin yarıktan çıkışa kadar sürekli düşmesi sadece kanal çıkışına düşük basınç oranının verilmesindendir.



Şekil 4.23: $p_o/p_i = 0.1$ için H=250, H=500, H=1000 yüksekliklerinde Kn=0.04(solda) ve Kn=10(sağda) değerlerinde kanal boyunca u_x, T ve n dağılımı.

5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada mevcut Olay Güdümlü Moleküler Dinamik simülasyonuna yeni sınır şartları geliştirilerek eklenmiştir. Geliştirilen yeni sınır şartları ile gözenekli ortamda gaz akışı ve yarık içinden gaz akışı problemlerine çözüm aranmıştır.

OGMD simülasyonu yardımı ile katı kürelerden oluşan gözenekli ortam içinden monoatomic Ar gazı akışı simüle edilmiştir. Gözenekli ortam içinde geçirgenlik, viskozite, kıvrımlılık ve kütle akış oranı özellikleri OGMD perspektifi ile elde edilip değerlendirilmiştir. Literatürde eksik olan yeni bulgular sunulmuştur. Literatürde ilk defa gözenekli ortam içinde viskozitenin Knudsen sayısı, katı küre çapı (D_{sol}) ve gözenekliliğe bağlılığı incelenmiştir. Kn ilişkili akış rejimleri içinde geçiş rejiminin akış karakteristiğine etkisi diğer rejimlerden daha fazla olduğu doğrulanmıştır. Gözeneklilik ve gözenekli ortamı oluşturan parçacık boyutunun kütle akış oranı, viskozite ve kıvrımlılık(tortuosity) üzerine etkisi nano boyutlu kanallar için incelenmiştir. Gözenekliliğin Kn ilişkili rejimden bağımsız olarak aynı eğilimde geçirgenliği etkilediği gösterilmiştir, ancak geçiş rejimindeki sonuçlar, 0.4'ten büyük değerler için sürekli rejimden daha büyüktür. Gözenekli ortamın geçirgenliği, kıvrımlılık, katı yüzey ile çarpışan gazın dinamik viskozitesi ve kütle akış oranı özellikleri Knudsen sayısı, gözeneklilik ve katı küre çapına bağlılığı açısından hesaplandı. Gözenkliliğin kütle akış oranı ve akış hızına etkisi açık şekilde gösterilmiştir. Gözenekliliğin kütle akış hızıyla doğru orantılı olduğu ve gazın viskozitesi üzerinde çok az etkiye sahip olduğu bulunmuştur. Katı küre çapı, kütle akış oranı ile doğru orantılı iken, viskozite ile ters orantılıdır. Ancak çap kritik değerin üzerine çıktıkça bu bağımlılık ortadan kalkar ve bağımsız hale gelir. Sürekli akış rejiminde viskozite sabittir ve yalnızca gazın kendisine ve sıcaklığa bağlıdır. Bununla birlikte, bu çalışmada gösterildiği gibi, artan Kn ile viskozite, özellikle geçiş rejimi akışında önemli ölçüde azalmaktadır. Kütle akış oranı kritik Kn değerine kadar azalır ve yaklaşık 1 değerinden sonra katı yüzey üzerindeki kayma etkisine bağlı olarak artma eğilimindedir. Normal kanallarda görülen Knudsen minimum fenomeninin gözenekli ortam için de geçerli olduğu bu çalışma ile gösterilmiştir. Bununla birlikte, kıvrımlılığın etkisine bağlı olarak, Knudsen minimum değeri 1'in altında bir değerde gözlenmiştir. Ayrıca, Kn=1 ve daha yüksek olduğunda,

gözenekli ortamın kütle akış hızı normal kanaldan daha düşüktür. Makro boyutlu parçacıklardan oluşan gözenekli ortamın kıvrımlılığı birçok deneysel ve sayısal çalışmada 1 ile 2 arasında elde edilmiştir. Bununla birlikte, çapın boyutu sıvı molekülünün boyutuna yaklaştıkça, kıvrımlılığın neredeyse dikey olarak arttığı bulgusu bu çalışmadan elde edilmiştir. Kıvrımlılık, katı küre çapı ve gözeneklilik ile ters orantılı iken, geçiş rejiminde Kn ile doğru orantılıdır. Bu çalışma, sabit gözeneklilik için parçacık çapı arttıkça, kıvrımlılığın azaldığını ve kütle akış oranının arttığını göstermektedir. Gözeneklilik çok düşük olmamasına rağmen, kıvrımlılıktaki azalma, 2.5 $D_{katı\,küre}$'den daha büyük değerler için azalır. Sürekli akış rejiminin aksine, geçiş rejiminde, gözeneklilik 1 olduğunda, kıvrımlılık 1'den büyüktür. Geçirgenlik, Kn, gözeneklilik ve katı küre çapı ile doğru orantılıdır. Sürekli rejimde sabit değerde iken Kn arttıkça özellikle geçiş rejiminde ciddi bir artış gösterir. Sabit gözeneklilikte katı küre çapının geçirgenlikle doğru orantılı olduğu bulunmuştur. Diğer birçok yöntemle karşılaştırma bu doğru orantının 1 nm ila 100 mikron çap için geçerli olduğu gerçeğini destekledi. Ek olarak, gözenekli ortamda akan moleküllerin sayısına bağlı olarak kıvrımlılık ve geçirgenliğin değişmediği doğrulanmıştır.

İki parallel plaka arasına konulan yarık tipli bir engel içinden akışta Knudsen sayısı ve basınç oranı etkilerinin yanısıra H ve L mesafelerinin de akış oranı ve kanal boyunca akış özellik dağılımlarına etkileri incelenmiştir. Çeşitli L ve H mesafeleri göz önünde bulundurularak farklı durumlar için simülasyonlar gerçekleştirilmiştir. L/H oranına göre akış oranı geçiş rejimi aralığında incelendi ve literatür ile niteliksel olarak karşılaştırılmıştır. Kn sayısı geçiş rejimi aralığına gelene kadar akış oranında ciddi değişim olmaz fakat geçiş rejimi aralığında moleküler rejime kadar hızlı bir düşüş yapar. Aynı Kn'lerde basınç oranı arttıkça akış oranı tipik olarak artar. Basınç oranları arasındaki fark sürekli rejime yaklaştıkça azalır. H yüksekliğini artırmak akış oranını yüksek Kn'lerde artırırken bu fark sürekli rejime doğru azaldığı görülmüştür. L/H oranı artışı basınç oranına ve Kn'ye bakılmaksızın akış oranını azaltırken aynı zamanda geçiş rejimi aralığını daha küçük Kn'lere doğru kaydırdığı görülmüştür. Engelin boşluk yüksekliği H'nin önemi Mach disklerinin oluşumunda önemli rol oynar. Bu fenomen Kn'ye ve basınç oranına doğrudan bağlıdır. Disklerin oluştuğu Kn küçültülerek ve basınç oranı artırılarak aynı netlikte disklerin oluşmadığı görülmüştür. Ayrıca sadece

belirli bir H değerinin disklerin daha net oluşumunu sağladığı belirlenmiştir. Yarık arkasında ve önünde oluşan girdapların karakteristiği farklı Kn, basınç oranı, H ve L için belirlenmiştir. Buna göre Kn artışının girdapların büyüklüğünü azaltıp hatta neredeyse kaybedip konumunu yarık arkasından (alt akış yönü) ön tarafa (üst akış yönü) değiştirdiği görülmüştür. Literatürde verilen H değerleri niceliksel olarak belirtilmese de L_y/H oranından yola çıkarak farklı H'ler için alınan x yönündeki dağılım verilerine göre H=1000'de benzer sonuçlar elde edilmiştir.

KAYNAKLAR

[1] Ebrahimi A., Roohi E., (2017), "DSMC investigation of rarefied gas flow through diverging micro- and nanochannels", Microfluid and Nanofluidics, 21 (2).

[2] Scherer G., (1999), "On the numerical modelling of the transitional flow in rarefied gases", Journal of Computational and Applied Mathematics, 103, 165-173

[3] Mastiani M., Pourmahmoud N., Sohrabai A., Yousefian N., (2011), "Numerical study of a gas flow inside a rotating cylinder using the consistent Boltzmann Algorithm", World Appl. Sci. J., 15 (12), 1713–1721.

[4] Bird G. A., (1994), "Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows", 2nd edition, Oxford Sciences Publications.

[5] Alexander F. J., Garcia A. L., (1997), "The Direct Simulation Monte Carlo Method", Comput. Phys., 11 (6), 588.

[6] Prasanth P. S., Kakkassery J. K., (2006), "Direct simulation Monte Carlo (DSMC): A numerical method for transition-regime flows-A review", J. Indian Inst. Sci., 86 (3), 169–192.

[7] Verlet L., (1967), "Computer 'experiments' on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules", Phys. Rev., 159 (1), 98–103.

[8] Mareschal M., Holian B. L., (1992), "From Fluid Particles to Physical Particles: Computing Hydrodynamics".

[9] Alder B. J., Wainwright T. E., (1959), "Studies in molecular dynamics. I. General method", J. Chem. Phys.

[10] Rapaport D. C., (1980), "The event scheduling problem in molecular dynamic simulation", J. Comput. Phys., 34 (2), 184–201.

[11] Lubachevsky B. D., (1991), "How to simulate billiards and similar systems", J. Comput. Phys., 94 (2), 255–283.

[12] Marín M., Cordero P., (1995), "An empirical assessment of priority queues in event-driven molecular dynamics simulation", Comput. Phys. Commun., 92 (2-3), 214–224.

[13] Akkaya V. R., Kandemir I., (2015), "Event-driven molecular dynamics simulation of hard-sphere gas flows in microchannels", Math. Probl. Eng., 2015.

[14] Kandemir I., (1999), "A multicell molecular dynamics method", Doktora Tezi, Case Western Reserve University, Cleveland, Ohio, USA.

[15] Greber I., Sleeter C., Kandemir I., (2001), "Molecular dynamics simulation of unsteady diffusion", AIP Conference Proceedings, 585, 396-400, Aug. 2001.

[16] Donev A., Garcia A. L., Alder B. J., (2008), "Stochastic Event-Driven Molecular Dynamics", *J. Comput. Phys.*, 227 (4), 2644–2665.

[17] Arkilic E. B., Schmidt M. A., Breuer K. S., (1997), "Gaseous slip flow in long microchannels", J. Microelectromechanical Syst., 6 (2), 167–178.

[18] Kandemir I., Sevilgen F. E., (2008), "Molecular dynamics simulation of helium-argon gas mixture under various wall conditions", Mol. Simul., 34 (8), 795–808.

[19] Liss E. D., Conway S. L., Glasser B. J., (2002), "Density waves in gravity-driven granular through a channel", Phys. Fluids, 14 (9), 3309–3326.

[20] Vijayakumar K. C., Alam M., (2007), "Velocity distribution and the effect of wall roughness in granular Poiseuille flow", Phys. Rev. E - Stat. Nonlinear, Soft Matter Phys., 75 (5).

[21] Kandemir I., Kaya A. M., (2012), "Molecular dynamics simulation of compressible hot/cold moving lid-driven microcavity flow", Microfluid. Nanofluidics, 12 (1-4), 509–520.

[22] Kawagoe Y., Oshima T., Tomarikawa K., Tokumasu T., Koido T., Yonemura S., (2016), "A study on pressure-driven gas transport in porous media: from nanoscale to microscale", Microfluid and Nanofluidics, 20 (12), 162.

[23] Eshghinejadfard A., Daróczy L., Janiga G., Thévenin D., (2016), "Calculation of the permeability in porous media using the lattice Boltzmann method", Int. J. Heat Fluid Flow, vol. 62, 93–103.

[24] Abbott P. J., Jabour Z. J., (2011), "Vacuum technology considerations for mass metrology", J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol., 116 (4), 689–702.

[25] Polikarpov A. P., Graur I., (2014), "Unsteady rarefied gas flow through a slit", Vacuum, 101, 79–85.

[26] Jousten K., Pantazis S., Buthig J., Model R., Wüest M., Iwicki J., (2014), "A standard to test the dynamics of vacuum gauges in the millisecond range", Vacuum, 100, 14–17.

[27] Pantazis S., Valougeorgis D., (2013), “Rarefied gas flow through a cylindrical tube due to a small pressure difference”, Eur. J. Mech. B/Fluids, 38, 114–127.

[28] Varoutis S., Day C., Sharipov F., (2012), “Rarefied gas flow through channels of finite length at various pressure ratios”, Vacuum, 86 (12), 1952–1959.

[29] Krantz A. T., (1996), “Analysis of an efficient algorithm for the hard-sphere problem”, ACM Trans. Model. Comput. Simul., 6 (3), 185–209.

[30] Paul G., (2007), “A Complexity O(1) priority queue for event driven molecular dynamics simulations”, J. Comput. Phys., 221 (2), 615–625.

[31] Einwohner T., Alder B. J., (1968), “Molecular dynamics. VI. Free-path distributions and collision rates for hard-sphere and square-well molecules”, J. Chem. Phys., 49 (4), 1458–1473.

[32] Intelligence, and miscellaneous articles, (1799), Philos. Mag., 5 (18), 197–208.

[33] Borgnakke C., Larsen P. S., (1975), “Statistical collision model for Monte Carlo simulation of polyatomic gas mixture”, J. Comput. Phys., 18 (4), 405–420.

[34] Scott R., Allen M. P., Tildesley D. J., (1991), “Computer Simulation of Liquids”, Math. Comput., 57 (195).

[35] Lilley C. R., Macrossan M. N., (2003), “Methods for implementing the stream boundary condition in DSMC computations”, Int. J. Numer. Methods Fluids, 42 (12), 1363–1371.

[36] Tysanner M. W., Garcia A. L., (2005), “Non-equilibrium behaviour of equilibrium reservoirs in molecular simulations”, Int. J. Numer. Methods Fluids, 48, 1337–1349.

[37] Pérez A., Moríñigo J. A., (2012), “Computational efficiency of the inflow boundary conditions in DSMC simulation”, AIP Conference Proceedings, 1505 (1), 601-608.

[38] Sengil N., Edis F. O., (2009), “Highly efficient volume generation reservoirs in molecular simulations of gas flows”, J. Comput. Phys., 228 (12), 4303–4308.

[39] Garcia A. L., Wagner W., (2006), “Generation of the Maxwellian inflow distribution”, J. Comput. Phys., 217 (2), 693–708.

[40] Fiemeyer A., Leca-Chetochine F., Thibert M., Louville Y., Mathey J., Cara M., (1975), “Congenital cardiopathies appearing during the neonatal period. The view points of the cardiologist, the hemodynamics specialist, the surgeon, and the anesthetist”, Ann. Anesthesiol. Fr., 16, 161–9.

[41] Klinkenberg L. J., (1941), “The permeability of porous media to liquids and gases”, Drilling and Production Practice, 1941, 200–213.

[42] Florence F. A., Rushing J. A., Newsham K. E., Blasingame T. A., (2007), “Improved permeability prediction relations for low-permeability sands”, Society of Petroleum Engineers - Rocky Mountain Oil and Gas Technology Symposium, 290-307.

[43] Beskok A., Karniadakis G. E., (1999), “Report: A model for flows in channels, pipes, and ducts at micro and nano scales”, Microscale Thermophys. Eng., 3 (1), 43–77.

[44] Ho M. T. et al., (2019), “Pore-scale simulations of rarefied gas flows in ultra-tight porous media”, Fuel, 249, 341–351.

[45] Yu B., Cheng P., (2002), “A fractal permeability model for bi-dispersed porous media”, Int. J. Heat Mass Transf., 45 (14), 2983–2993.

[46] Kozeny J., (1927), “Uber Kapillare Leitung des Wassers im Boden Stizungsberichte”, Acad. Sci. Vienna, Proc. Cl. I, 136, 271–306.

[47] Carman P. C., (1997), “Fluid flow through granular beds”, Chem. Eng. Res. Des., 75, 32–48.

[48] Chen X., Yao G., (2017), “An improved model for permeability estimation in low permeable porous media based on fractal geometry and modified Hagen-Poiseuille flow”, *Fuel*, 210, 748–757.

[49] Wu J., Yu B., (2007), “A fractal resistance model for flow through porous media”, Int. J. Heat Mass Transf., 50 (19–20), 3925–3932.

[50] Ergun S., (1952), “Fluid flow through packed columns”, Chem. Eng. Prog., 48, 89–94.

[51] Mostafavi M., Meghdadi Isfahani A. H., (2017), “A new formulation for prediction of permeability of nano porous structures using lattice botzmann method”, J. Appl. Fluid Mech., 10 (2), 639–649.

[52] Koponen A. et al., (1998), “Permeability of Three-Dimensional Random Fiber Webs”, Phys. Rev. Lett., 80 (4), 716–719.

[53] Tomadakis M. M., Robertson T. J., (2005), “Viscous permeability of random fiber structures: Comparison of electrical and diffusional estimates with experimental and analytical results”, J. Compos. Mater., 39 (2), 163–188.

[54] Davies C. N., (1952), “The Separation of Airborne Dust and Particles”, Preedings of Institute of Mechanical Engineers.

[55] Yang G., Weigand B., (2018), “Investigation of the Klinkenberg effect in a micro/nanoporous medium by direct simulation Monte Carlo method”, Phys. Rev. Fluids, 3 (4).

[56] Bruggeman D. A. G., (1935), “Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen. I. Dielektrizitätskonstanten und Leitfähigkeiten der Mischkörper aus isotropen Substanzen”, Ann. Phys., 416 (7), 636–664.

[57] Tjaden B., Brett D. J. L., Shearing P. R., (2018), “Tortuosity in electrochemical devices: a review of calculation approaches”, Int. Mater. Rev., 63 (2), 47–67.

[58] Comiti J., Renaud M., (1989), “A new model for determining mean structure parameters of fixed beds from pressure drop measurements: application to beds packed with parallelepipedal particles”, Chem. Eng. Sci., 44 (7), 1539-1545.

[59] Pisani L., (2011), “Simple Expression for the Tortuosity of Porous Media”, Transp. Porous Media, 88 (2), 193–203.

[60] Vallabh R., Banks-Lee P., Seyam A. F., (2010), “New approach for determining tortuosity in fibrous Porous Media”, 5 (3).

[61] Tomadakis M. M., Sotirchos S. V., (1993), “Ordinary, transition, and knudsen regime diffusion in random capillary structures,” 48 (19), 3323-3333.

[62] Shariati V., Ahmadian M. H., Roohi E., (2019), “Direct Simulation Monte Carlo investigation of fluid characteristics and gas transport in porous microchannels”, Sci. Rep., 9 (1), 17183.

[63] Kalarakis A. N., Michalis V. K., Skouras E. D., Burganos V. N., (2012), “Mesoscopic Simulation of Rarefied Flow in Narrow Channels and Porous Media”, Transp. Porous Media, 94 (1), 385–398.

[64] Guo Z., Zhao T. S., Shi Y., (2006), “Physical symmetry, spatial accuracy, and relaxation time of the lattice Boltzmann equation for microgas flows”, J. Appl. Phys., 99 (7).

[65] Sutherland W., (1905), “ LXXV. A dynamical theory of diffusion for non-electrolytes and the molecular mass of albumin”, London, Edinburgh, Dublin Philos. Mag. J. Sci., 9 (54), 781–785.

[66] Hadjiconstantinou N. G., (2003), “Comment on Cercignani’s second-order slip coefficient”, Phys. Fluids, 15 (8), 2352–2354.

[67] Cercignani C., Lampis M., Lorenzani S., (2004), “Variational approach to gas flows in microchannels”, Phys. Fluids, 16 (9), 3426–3437.

[68] Guo Z., Zheng C., Shi B., (2008), "Lattice Boltzmann equation with multiple effective relaxation times for gaseous microscale flow", Phys. Rev. E - Stat. Nonlinear, Soft Matter Phys., 77 (3), 036707.

[69] Dadzie S. K., Brenner H., (2012), "Predicting enhanced mass flow rates in gas microchannels using nonkinetic models", Phys. Rev. E - Stat. Nonlinear, Soft Matter Phys., 86 (3), 036318.

[70] Danielewski M., Wierzba B., (2010), "Thermodynamically consistent bi-velocity mass transport phenomenology", Acta Mater., 58 (20), 6717–6727.

[71] Dongari N., Sharma A., Durst F., (2009), "Pressure-driven diffusive gas flows in micro-channels: From the Knudsen to the continuum regimes", Microfluid. Nanofluidics, 6 (5), 679–692.

[72] Kaviany M., (1966), "Principle of Heat Transfer in Porous Media", Br. J. Psychiatry, 112 (483), 211–212.

[73] Knudsen M., (1909), "Die Gesetze der Molekularströmung und der inneren Reibungsströmung der Gase durch Röhren", Ann. Phys., 333 (1), 75–130.

[74] Michalis V. K., Kalarakis A. N., Skouras E. D., Burganos V. N., (2010), "Rarefaction effects on gas viscosity in the Knudsen transition regime", Microfluid. Nanofluidics, 9 (4-5), 847–853.

[75] Zalc J. M., Reyes S. C., Iglesia E., (2004), "The effects of diffusion mechanism and void structure on transport rates and tortuosity factors in complex porous structures", Chem. Eng. Sci., 59 (14), 2947–2960.

[76] Danilatos G. D., (2001), "Direct simulation Monte Carlo study of orifice flow", AIP Conference Proceedings, (585), 924–932.

[77] Sharipov F., (2003), "Rarefied Gas Flow Through an Orifice at Finite Pressure Ratio", AIP Conference Proceedings, 1049 (2003), 663.

[78] Sharipov F., (2004), "Numerical simulation of rarefied gas flow through a thin orifice", J. Fluid Mech., 518, 35–60.

[79] Wang M., Li Z., (2004), "Simulations for gas flows in microgeometries using the direct simulation Monte Carlo method", Int. J. Heat Fluid Flow, 25 (6), 975–985.

[80] Sharipov F., Strapasson J. L., (2014), "Ab initio simulation of rarefied gas flow through a thin orifice", Vacuum, 109, 246-252.

[81] Graur I. A., Polikarpov A. P., Sharipov F., (2012), “Numerical modelling of rarefied gas flow through a slit at arbitrary pressure ratio based on the kinetic equation”, Zeitschrift fur Angew. Math. und Phys., 63 (3), 503–520.

[82] Rahmati A. R., Ehsani R., (2017), “Simulation of Micro-Channel and Micro-Orifice Flow Using Lattice Boltzmann Method with Langmuir Slip Model”, Nano Micro Scales, 5 (1), 1–8.

[83] Misdanitis S., Pantazis S., Valougeorgis D., (2012), “Pressure driven rarefied gas flow through a slit and an orifice”, Vacuum, 86 (11), 1701–1708.

[84] Gimelshein S. F., Markelov G. N., Lilly T. C., Selden N. P., Ketsdever A. D., (2005), “Experimental and numerical modeling of rarefied gas flows through orifices and short tubes”, AIP Conference Proceedings, 762, 437–443.

[85] Lilly C. T., Gimelshein F. S., Ketsdever D. A., Markelov N. G., (2006), “Measurements and computations of mass flow and momentum flux through short tubes in rarefied gases”, Phys. Fluids, 18 (9).

[86] Lindström J., Bejhed J., Nordström J., (2009), “Measurements and numerical modelling of orifice flow in microchannels”, 41st AIAA Thermophysics Conference, 2009-4098, 22-25 June.

[87] Sharipov F., (2012), “Transient flow of rarefied gas through an orifice”, J. Vac. Sci. Technol. A Vacuum, Surfaces, Film., 30 (2), 021602.

[88] Ho M. T., Graur I., (2014), “Numerical study of unsteady rarefied gas flow through an orifice”, Vacuum, 109, 253–265.

[89] Sharipov F., Kozak D. V., (2011), “Rarefied gas flow through a thin slit at an arbitrary pressure ratio”, Eur. J. Mech. B/Fluids, 30 (5), 543–549.

ÖZGEÇMİŞ

Bu tezin yazarı 10 Ağustos 1983 tarihinde İstanbul'da doğdu. Ege Üniversitesi Fen Fakültesi Astronomi ve Uzay Bilimleri lisans alanından mezun olduktan sonra Melikşah ve Erciyes Üniversitesi ortak Malzeme Bilimi ve Makine Mühendisliği Yüksek lisansını tamamladı. 2015 yılından beri İstanbul Arel Üniversitesi Makine Programında öğretim görevlisi olarak çalışmaktadır. Evli ve 1 çocuk babasıdır.

EKLER

Ek A: Tez Çalışması Kapsamında Yapılan Yayınlar

Koc M., Kandemir I., Akkaya V.R., (2021), "An Investigation of Transition Flow in Porous Media by Event Driven Molecular Dynamics Simulation", Journal of Applied Fluid Mechanics", 14 (1), 23-36.

Ek B: Geliştirilen C# fonksiyon kodları

Tablo B1.1: Katı kürelerin üretilip kübik düzen ile kanal içine yerleştirilmesi.

```
private void CreatePorousMedia()
{
    if (Setup.CubicArray)
    {
            var fn = $"solmol_positions.txt";
            var SW = new StreamWriter(fn, true);
            SolidMolDia = Setup.SolMolDia;
            var _type = new MoleculeType("SM", 21, MoleculeType.AtomicTypeEnum.Monoatomic,
SolidMolDia, 1E100, 0, 0, 1);
            if (Setup.Diffusion_withDiffuseRef)
               _type.AtomicType = MoleculeType.AtomicTypeEnum.Diatomic;
            var id = Setup.NMolecules + Setup.NReserveMolecules;
            Vector<double> vel = new DenseVector(3) { [0] = 0.0, [1] = 0.0, [2] = 0.0 };
            Setup.MoleculeTypes.Add(_type);
            int number = 0;
            Pormolecules = new List<Molecule>();
            var a = Setup.Amp;
            var k = new int();
            var l = new int();
            var m = new int();
 for (k = (int)(Setup.NCellDir[0] * Setup.PoreStart); k < (int)(Setup.NCellDir[0] * Setup.PoreEnd) + 1; k +=
a)
            {
               for (l = 1; l < Setup.NCellDir[1]; l += a)
               {
                  for (m = 1; m < Setup.NCellDir[2]; m += a)
                  {
number++;
                     var sol_molecule = new Molecule
                     {
                        ID = id,
                        Type = _type,
```

Tablo B1.1: Devam.

```
Velocity = vel,
                    Time = 0.0,
                    EventTime = 0.0,
                    CollisionCount = 0
                };
                for (int i = 0; i < 3; i++)
                {
                    sol_molecule.Position[i] = 0.5 * (_cell3D[k, l, m].MaxPos[i] + _cell3D[k, l,
m].MinPos[i]);
                }
                _cell3D[k, l, m].Members.AddLast(sol_molecule);
                sol_molecule.Owner = _cell3D[k, l, m];
                SW.WriteLine(Convert.ToString(sol_molecule.Position[0] + " " +
sol_molecule.Position[1] + " " + sol_molecule.Position[2]).Replace(",", "."));
                Pormolecules.Add(sol_molecule);
                id++;
            }
        }
    }
    SW.Write("Sol_Mol_Number: " + number + " Porosity_1: " + (1.0 - ((Math.PI *
Math.Pow(SolidMolDia, 3.0) / 6.0) / (Math.Pow((_cells[0].MaxPos[0] - _cells[0].MinPos[0]) * a, 3.0)))));
    SW.Close();
    return;
}

var IDler = new List<int>();
foreach (var cell in _cells.Where(cell => cell.UnitPos[0] >= (int)(Setup.NCellDir[0] *
Setup.PoreStart) && cell.UnitPos[0] <= (int)(Setup.NCellDir[0] * Setup.PoreEnd)))
{
    IDler.Add(cell.Id);
}
SolidMolDia = Setup.SolMolDia;
Porosity = Setup.Porosity;
TotPorousVol = IDler.Count * Math.Pow((_cells[0].MaxPos[0] - _cells[0].MinPos[0]), 3.0);
var OneMolVol = Math.PI * Math.Pow(SolidMolDia, 3.0) / 6.0;
NMol = (int)((1.0 - Porosity) * TotPorousVol / OneMolVol);
Pormolecules = new List<Molecule>();
var MolID = Setup.NMolecules + Setup.NReserveMolecules;
var molecules_left = DeepClone(NMol);
var sol_mol_type = new MoleculeType("SM", 21, MoleculeType.AtomicTypeEnum.Monoatomic,
SolidMolDia, 1E100, 0, 0, 1);
if (Setup.Diffusion_withDiffuseRef)
    sol_mol_type.AtomicType = MoleculeType.AtomicTypeEnum.Diatomic;
Vector<double> sol_mol_vel = new DenseVector(3) { [0] = 0.0, [1] = 0.0, [2] = 0.0 };
Setup.MoleculeTypes.Add(sol_mol_type);
var fileName = $"solmol_positions.txt";
var sw = new StreamWriter(fileName, true);
while (molecules_left > 0)
{
    var sol_molecule = new Molecule
    {
```

Tablo B1.1: Devam.

```
                ID = MolID,
                Type = sol_mol_type,
                Velocity = sol_mol_vel,
                Time = 0.0,
                EventTime = 0.0,
                CollisionCount = 0
            };
            var num = _rnd.Next(IDler.Count);
            var _owner_id = IDler[num];
            foreach (var _owner in _cells.Where(cell => cell.Id == _owner_id))
            {
                for (int i = 0; i < 3; i++)
                {
                    sol_molecule.Position[i] = 0.5 * (_owner.MaxPos[i] + _owner.MinPos[i]);
                }
                _owner.Members.AddLast(sol_molecule);
                sol_molecule.Owner = _owner;
                sw.WriteLine(Convert.ToString(sol_molecule.Position[0] + " " + sol_molecule.Position[1] + " "
+ sol_molecule.Position[2]).Replace(",", "."));
            }

            IDler.Remove(_owner_id);
            molecules_left--;
            Pormolecules.Add(sol_molecule);
            MolID++;
        }
        sw.Write(" Kati_mol_sayisi: " + NMol);
        sw.Close();
}
```

Tablo B1.2: Her snapshot için hesaplamaların yapıldığı fonksiyon.

```
private void PorousMediaSnapshot()
    {
        var colliding_molecule_count = new int[Setup.BinSize, 2];//carpısma sayma kısmı
        foreach (var col_mol in col_mol_list)
        {
            int bin;
            GetBin1D(0, col_mol, out bin);              //yön,molekül sınıfı,bin sayısı
            int type_index = 0;

            //for (int index = 0; index < count; index++)
            //{
            //    if (col_mol.Type == Setup.MoleculeTypes[index])
            //    {
            //        type_index = index;
            //        break;
            //    }
            //}
```

Tablo B1.2: Devam

```
   if (col_mol.Type.Name == "PM")
                type_index = 1;
            else if (col_mol.Type.Name == "SM")
                type_index = 1;
            else
                type_index = 0;

            colliding_molecule_count[bin, type_index]++;
        }
        int sayac = 0;  // kitlenmiş çarpışma kontrolü
        int sayac_2 = 0;
        int bin_ilk = 0; int bin_son = 0; int[] binler = new int[Setup.BinSize];
        for (int bin = 0; bin < Setup.BinSize; bin++)
        {
            sayac += colliding_molecule_count[bin, 1];
        }
        if (sayac == 2000000 || sayac == 0)
        {
            col_mol_list.Clear();
            Result.EventCount++;
            return;
        }
        for (int bin = 0; bin < Setup.BinSize; bin++)
        {
            if (colliding_molecule_count[bin, 1] != 0)
                binler[bin] = bin;
        }
        bin_ilk = binler.Where(f => f > 0).Min();
        bin_son = binler.Max();
        for (int bin = bin_ilk; bin < bin_son + 1; bin++)
        {
            sayac_2 += colliding_molecule_count[bin, 0];
        }
var fileName = $"{Setup.Name}-diffusion.txt";
        var sw = new StreamWriter(fileName, true);
        var NGas = new int[Setup.BinSize, 1]; //2D dizi[bin sayısı,kaç tip molekül var?]
        var NPor = new int[Setup.BinSize, 1];

        foreach (var molecule in _molecules.Where(molecule => molecule.Owner != _reservoir &&
molecule.Type.Name != "SM"))
        {
            int i;
            int t = 0;
            GetBin1D(0, molecule, out i); //yön,molekül sınıfı,bin sayısı
            //var t = (Equals(molecule.Type, Setup.MoleculeTypes[0])) ? 0 : 1;
            for (int index = 0; index < Setup.MoleculeTypes.Count; index++)
            {
                if (Equals(molecule.Type, Setup.MoleculeTypes[index]))
                {
                    t = index;
                    break;
                }
            }
            NGas[i, t]++;
        }
```

Tablo B1.2: Devam

```
////////----------sadece her snapshotta gözenekli ortamdan geçen moleküllerin hızlarının ortalaması----------
        var VelTot1 = 0.0;
        var VelTot2 = 0.0;
        var TotSpeed = 0.0;
        var rms = 0.0;
        int NGasCell = 0;
        int NGasMol = 0;

        foreach (var cell in _cells.Where(cell => cell.UnitPos[0] > (int)(Setup.NCellDir[0] * Setup.PoreStart) && cell.UnitPos[0] < (int)(Setup.NCellDir[0] * Setup.PoreEnd)))
        {
            NGasCell++;
            foreach (var molecule in cell.Members.Where(mol => mol.Type.Name != "SM"))
            {
                NGasMol++;
                VelTot1 += molecule.Velocity[0];
                VelTot2 += Math.Abs(molecule.Velocity[0]);
                TotSpeed += molecule.Speed;
                rms += Math.Sqrt((Math.Pow(molecule.Velocity[0], 2.0) + Math.Pow(molecule.Velocity[1], 2.0) + Math.Pow(molecule.Velocity[2], 2.0)) / 3.0);
            }
        }

        //kanal boyunca gözenek moleküllerinin sayısı
        foreach (var molecule in _molecules.Where(mol => mol.Type.Name == "SM" && mol.Owner != _reservoir))
        {
            int i;
            GetBin1D(0, molecule, out i);
            int pt = 0;
            NPor[i, pt]++;
        }
        ///////////////----------giriş ve çıkış basıncı----------

        var ncellin = 0;
        var nmolin = 0;
        var PressureIn = 0.0;
        var nmolout = 0;
        var ncellout = 0;
        var PressureOut = 0.0;
        var _temp = new List<Cell>();
        double _temp_in = 0.0;
        double _temp_out = 0.0;

        foreach (var cell in _cells.Where(cell => cell.UnitPos[0] < (int)(Setup.NCellDir[0] * Setup.PoreStart)))
        {
            _temp.Add(cell);
            ncellin++;
            foreach (var mol in cell.Members.Where(mol => mol.Type.Name != "SM"))
            {
                nmolin++;
            }
        }
```

Tablo B1.2: Devam

```
        _temp_in = CellTemperature(_temp)[0];
        PressureIn = (nmolin * _temp_in / (ncellin * Math.Pow((_cells[0].MaxPos[0] - _cells[0].MinPos[0]),
3.0))) * (1.381e-23 * 300.0 / Math.Pow(0.5e-10, 3.0));
        _temp.Clear();

        foreach (var cell in _cells.Where(cell => cell.UnitPos[0] > (int)(Setup.NCellDir[0] *
Setup.PoreEnd)))
        {
            _temp.Add(cell);
            ncellout++;
            foreach (var mol in cell.Members.Where(mol => mol.Type.Name != "SM"))
            {
                nmolout++;
            }
        }
        _temp_out = CellTemperature(_temp)[0];
        PressureOut = (nmolout * _temp_out / (ncellout * Math.Pow((_cells[0].MaxPos[0] -
_cells[0].MinPos[0]), 3.0))) * (1.381e-23 * 300.0 / Math.Pow(0.5e-10, 3.0));
        _temp.Clear();

        for (var t = 0; t < 1; t++)
        {
            sw.Write("Binlere_göre_gaz_mol_sayısı: ");
            for (var i = 0; i < Setup.BinSize; i++)
                sw.Write(NGas[i, t] + " ");
        }
        var Nsolmol = 0;
        for (var pt = 0; pt < 1; pt++)
        {
            sw.Write("Binlere_göre_katı_küre_sayısı: ");
            for (var i = 0; i < Setup.BinSize; i++)
            {
                sw.Write(NPor[i, pt] + " ");
                Nsolmol += NPor[i, pt];
            }
        }
        for (int type = 0; type < 2; type++)
        {
            sw.Write(" Tip_" + type + ": ");
            for (int bin = 0; bin < Setup.BinSize; bin++)
            {
                sw.Write("{0} ", colliding_molecule_count[bin, type]);
            }
        }
        var Hacim_debisi = 0.0; var dt_cik = 0.0; var tort = 0.0; var dt_gir = 0.0; double dt = 0.0;
        var AveSpeed = TotSpeed * Math.Sqrt(1.381e-23 * 300.0 / (0.001 / 6.02e23)) / NGasMol;
        UxAve = VelTot1 * Math.Sqrt(1.381e-23 * 300.0 / (0.001 / 6.02e23)) / NGasMol;
        if (sag_cik.Keys.Count > 1)
        {
            foreach (var _sag_cik in sag_cik)
                dt += _sag_cik.Value - sol_gir[_sag_cik.Key];
            var dx = AveSpeed * dt / sag_cik.Keys.Count;
            tort = dx / (Setup.BoxSize[0] * (Setup.PoreEnd - Setup.PoreStart) * 0.5e-10);
```

Tablo B1.2: Devam

```
            dt_cik = sag_cik.Values.Max() - sag_cik.Values.Min();
            Hacim_debisi = sag_cik.Keys.Count * (Math.PI * Math.Pow((0.5E-10 *
Setup.MoleculeTypes[0].Diameter), 3.0) / 6.0) / dt_cik;
        }
        dt_gir = sol_gir.Values.Max() - (DifCount_time / 3.1585e13);
        var sol_gir_farki = (sol_gir.Keys.Count + ref_sag_cik_sayisi) - ref_sol_gir_sayisi;
        var lenght = Setup.DiffusionFlag ? SolidMolDia : _cells[0].MaxPos[0] - _cells[0].MinPos[0];
        var MFP_2 = -GetTransporCoefficients()[3];
        var RMS = rms * Math.Sqrt(1.381e-23 * 300.0 / (0.001 / 6.02e23)) / NGasMol;
        var GasSR = Math.Pow(((NGasCell * Math.Pow((Setup.BoxSize[0] / Setup.NCellDir[0]), 3.0)) /
NGasMol), 1.0 / 3.0) / Setup.MoleculeTypes[0].Diameter;
        var Tort = TotSpeed / VelTot2;
        var cells_to_temp = _cells.FindAll(cell => cell.UnitPos[0] >= (int)(Setup.NCellDir[0] *
Setup.PoreStart) && cell.UnitPos[0] <= (int)(Setup.NCellDir[0] * Setup.PoreEnd));
        var _poreTemp = CellTemperature(cells_to_temp)[0];
        int SolParticlesNumber = Setup.DiffusionCubeFlag ? Ncube : Nsolmol;
        double SolParticleSurfaceArea = Setup.DiffusionCubeFlag ? Math.Pow(lenght * 0.5e-10, 2.0) * 6.0 :
Math.PI * Math.Pow(SolidMolDia * 0.5E-10, 2);
        var viscosity = (Result.MolTravelMol_Wall * 0.5E-10 / sayac) * top_mom / (AveSpeed *
SolParticlesNumber * SolParticleSurfaceArea * ((Result.GlobalTime - DifCount_time) / 3.1585e13));

        sw.WriteLine(" Mol_Mol_Carpisma_Sayisi: " + sayac_2 + " Mol_Wall_Carpisma_Sayisi: " + sayac
+ " Travel_mol_mol: " + Result.MolTravelMol_Mol * 0.5E-10 + " Travel_wall_mol: " +
Result.MolTravelMol_Wall * 0.5E-10 + " Tort(nabovati): " + Tort + " Tort(sim): " + tort + "
ic_gec_top_zam: " + dt + " Hacim_debisi(sim): " + Hacim_debisi + " MFP(simVolkan): " + MFP_2 + "
Rms_Hız: " + RMS + " Ort_Surat: " + AveSpeed + " Viskozite(sim): " + viscosity + " Toplam_momentum:
" + top_mom + " Gozenekli_ort_mol_sayisi: " + NGasMol + " Giris_Basınci: " + PressureIn + "
Cikis_Basinci: " + PressureOut + " Ort_X_hizi: " + UxAve + " Giren_mol_sayisi_ve_zaman_farki: " +
sol_gir_farki + " " + dt_gir + " Cikan_mol_sayisi_ve_zaman_farki: " + sag_cik.Keys.Count + " " + dt_cik +
" Giristeki_mol_sayisi: " + nmolin + " Cikistaki_mol_sayisi: " + nmolout + " Gaz_SR_inPore: " + GasSR +
" Gozenekli_ortamda_sicaklik: " + _poreTemp * 300.0 + " giristeki_sicaklik: " + _temp_in * 300.0 + "
cikisteki_sicaklik: " + _temp_out * 300.0 + " Zaman: " + Result.GlobalTime / 3.1585e13 + " Global_Time: "
+ Result.GlobalTime + " Elapsed_Time: " + _Stopwatch.ElapsedMilliseconds / 1000.0);

        sw.Close();
        col_mol_list.Clear();
        //Result.CollisionCount++;
        if (sag_cik.Keys.Count > 1) sag_cik.Clear();
        ref_sol_gir_sayisi = sol_gir.Keys.Count + ref_sag_cik_sayisi;
        DifCount_time = Result.GlobalTime;
        top_mom = 0.0;
        Result.MolTravelMol_Mol = 0.0;
        Result.MolTravelMol_Wall = 0.0;
    }
```

Tablo B1.3: Katı küreler ile moleküllerin çarpışma sonrası hız ve doğrultularını hesaplayan fonksiyon.

```
private Vector<double> Fake_Reflection(Event _Sevent)
{
if (Setup.Diffusion_withDiffuseRef)//Diffuse ref
{
```

Tablo B1.3: Devam.

```
var _mol = _Sevent.Actor.Type.Name == "SM" ? _Sevent.Target : _Sevent.Actor;
var _smol = _Sevent.Actor.Type.Name != "SM" ? _Sevent.Target : _Sevent.Actor;
_mol.Move();
var _temp = Setup.Temperature * 1.0;
            var cmp = Math.Sqrt(2.0 * _temp / _mol.Type.Mass);
            Vector<double> tmp_vel = new DenseVector(3)
            {
               [0] = -cmp * _rndRayleigh.Sample(),
               [1] = cmp * _rndNormal.Sample(),
               [2] = cmp * _rndNormal.Sample()
            };

            Vector<double> normal = new DenseVector(3)
            {
               [0] = -1.0,
               [1] = 0.0,
               [2] = 0.0
            };
            var new_normal = (_mol.Position - _smol.Position).Normalize(2);
            Vector<double> cross_product = new DenseVector(3)
            {
               [0] = (new_normal[1] * normal[2] - new_normal[2] * normal[1]),
               [1] = (new_normal[2] * normal[0] - new_normal[0] * normal[2]),
               [2] = (new_normal[0] * normal[1] - new_normal[1] * normal[0])
            };
            var angle = Math.Atan2(cross_product.Norm(2), new_normal.DotProduct(normal));
            cross_product = cross_product.Normalize(2);
            Matrix<double> rot_mat = DenseMatrix.OfArray(new double[3, 3]
            {{//1.satır
               (1.0 - Math.Cos(angle)) * Math.Pow(cross_product[0], 2.0) + Math.Cos(angle),
               (1.0 - Math.Cos(angle)) * cross_product[0] * cross_product[1] - Math.Sin(angle) *
cross_product[2],
               (1.0 - Math.Cos(angle)) * cross_product[0] * cross_product[2] + Math.Sin(angle) *
cross_product[1]
            },
            {//2.satır
               (1.0 - Math.Cos(angle)) * cross_product[0] * cross_product[1] + Math.Sin(angle) *
cross_product[2],
               (1.0 - Math.Cos(angle)) * Math.Pow(cross_product[1], 2.0) + Math.Cos(angle),
               (1.0 - Math.Cos(angle)) * cross_product[1] * cross_product[2] - Math.Sin(angle) *
cross_product[0]
            },
            {//3.satır
               (1.0 - Math.Cos(angle)) * cross_product[0] * cross_product[2] - Math.Sin(angle) *
cross_product[1],
               (1.0 - Math.Cos(angle)) * cross_product[1] * cross_product[2] + Math.Sin(angle) *
cross_product[0],
               (1.0 - Math.Cos(angle)) * Math.Pow(cross_product[2], 2.0) + Math.Cos(angle)}
            });
            _mol.Velocity = rot_mat * tmp_vel;
            if (_mol.Type.AtomicType != MoleculeType.AtomicTypeEnum.Monoatomic)
               AssignRotationalEnergy(_mol, _temp);
            return _mol.Velocity;
         }
         else//specular ref
         {
```

Tablo B1.3: Devam.

```
            var _mol = _Sevent.Actor.Type.Name == "SM" ? _Sevent.Target : _Sevent.Actor;
            var _smol = _Sevent.Actor.Type.Name != "SM" ? _Sevent.Target : _Sevent.Actor;
            _mol.Move();
            var _temp = Setup.Temperature * 1.0;
            var new_normal = (_mol.Position - _smol.Position).Normalize(2);
         var angle = Math.PI;
            Matrix<double> rot_mat = DenseMatrix.OfArray(new double[3, 3]
            {
            {//1.satır
               (1.0 - Math.Cos(angle)) * Math.Pow(new_normal[0], 2.0) + Math.Cos(angle),
               (1.0 - Math.Cos(angle)) * new_normal[0] * new_normal[1] - Math.Sin(angle) * new_normal[2],
               (1.0 - Math.Cos(angle)) * new_normal[0] * new_normal[2] + Math.Sin(angle) * new_normal[1]
            },
            {//2.satır
               (1.0 - Math.Cos(angle)) * new_normal[0] * new_normal[1] + Math.Sin(angle) *
new_normal[2],
               (1.0 - Math.Cos(angle)) * Math.Pow(new_normal[1], 2.0) + Math.Cos(angle),
               (1.0 - Math.Cos(angle)) * new_normal[1] * new_normal[2] - Math.Sin(angle) * new_normal[0]
            },
            {//3.satır
               (1.0 - Math.Cos(angle)) * new_normal[0] * new_normal[2] - Math.Sin(angle) * new_normal[1],
               (1.0 - Math.Cos(angle)) * new_normal[1] * new_normal[2] + Math.Sin(angle) *
new_normal[0],
               (1.0 - Math.Cos(angle)) * Math.Pow(new_normal[2], 2.0) + Math.Cos(angle)
            }
            });
            _mol.Velocity = rot_mat * _mol.Velocity;
            _mol.Velocity *= -1.0;
            if (_mol.Type.AtomicType != MoleculeType.AtomicTypeEnum.Monoatomic)
               AssignRotationalEnergy(_mol, _temp);
            return _mol.Velocity;
         }
}
```

Tablo B1.4: Yarık engelini oluşturan duvarların kanal içine yerleştirilmesi ve yansıma şartının verilmesi.

```
private void CreateSlit() //M.K
      {
         var cellsize = _cells[0].MaxPos[0] - _cells[0].MinPos[0];
         var startcell = (int)(Setup.NCellDir[0] * Setup.Loc_x);
         var mincellpos = (startcell - 1) * cellsize;
         var minmolpos = mincellpos - 2 * cellsize;
         var finishcell = (int)(Setup.NCellDir[0] * (Setup.Loc_x + Setup.OrificeL));
         var maxcellpos = finishcell * cellsize;
         var maxmolpos = maxcellpos + 2 * cellsize;
         var tmp = new List<Molecule>(); //önce kanaldaki bütün molekülleri temizle
         foreach (var mol in _molecules.Where(m => m.Position[0] > minmolpos && m.Position[0] <
maxmolpos && m.Owner != _reservoir))
         {
```

Tablo B1.4: Devam.

```
            mol.Owner.Members.Remove(mol);
            mol.Owner = _reservoir;
            _reservoir.Members.AddLast(mol);
        }

        if (Setup.OrificeL != 0.0)    // orifisin L boyu varsa
        {
            foreach (var cell in _cells.Where(c => c.UnitPos[0] >= (int)(Setup.NCellDir[0] * Setup.Loc_x)
&& c.UnitPos[0] <= (int)(Setup.NCellDir[0] * (Setup.Loc_x + Setup.OrificeL))))
            {
                if (Setup.Loc_y == 0.0)    //dipte boşluk varsa
                {
                    if (cell.UnitPos[1] >= (int)(Setup.NCellDir[1] * Setup.OrificeH))
                    {
                        if (Setup.Diffusion_withDiffuseRef)
                            cell.Id = -2;
                        if (Setup.Diffusion_withSpecularRef)
                            cell.Id = -1;
                    }
                }
                else if (Setup.Loc_y == 1.0)       //üstte boşluk varsa
                {
                    if (cell.UnitPos[1] <= (int)(Setup.NCellDir[1] * (1.0 - Setup.OrificeH)))
                    {
                        if (Setup.Diffusion_withDiffuseRef)
                            cell.Id = -2;
                        if (Setup.Diffusion_withSpecularRef)
                            cell.Id = -1;
                    }
                }
                else if (cell.UnitPos[1] <= (int)(Setup.NCellDir[1] * (Setup.Loc_y - (Setup.OrificeH * 0.5))) ||
cell.UnitPos[1] >= (int)(Setup.NCellDir[1] * (Setup.Loc_y + (Setup.OrificeH * 0.5))))//arada boşluk varsa
                {
                    if (Setup.Diffusion_withDiffuseRef)
                        cell.Id = -2;
                    if (Setup.Diffusion_withSpecularRef)
                        cell.Id = -1;
                }
            }
        }


        if (Setup.OrificeL == 0.0)//orifisin L boyu yoksa yani sıfır kalınlıklı ise
        {

            foreach (var cell in _cells.Where(c => c.UnitPos[0] == (int)(Setup.NCellDir[0] * Setup.Loc_x)))
            {
cell.MaxPos[0] = cell.MinPos[0];
                foreach (var c in _cells.Where(_c => _c.UnitPos[0] == cell.UnitPos[0] + 1))
                    c.MinPos[0] = cell.MaxPos[0];
```

Tablo B1.4: Devam.

```
            if (Setup.Loc_y == 0.0)//dipte boşluk varsa
            {
               if (cell.UnitPos[1] >= (int)(Setup.NCellDir[1] * Setup.OrificeH))
               {
                  if (Setup.Diffusion_withDiffuseRef)
                     cell.Id = -2;
                  if (Setup.Diffusion_withSpecularRef)
                     cell.Id = -1;
               }
            }
            else if (Setup.Loc_y == 1.0)//üstte boşluk varsa
            {
               if (cell.UnitPos[1] <= (int)(Setup.NCellDir[1] * (1.0 - Setup.OrificeH)))
               {
                  if (Setup.Diffusion_withDiffuseRef)
                     cell.Id = -2;
                  if (Setup.Diffusion_withSpecularRef)
                     cell.Id = -1;
               }
            }
            else if (cell.UnitPos[1] <= (int)(Setup.NCellDir[1] * (Setup.Loc_y - (Setup.OrificeH * 0.5))) ||
cell.UnitPos[1] >= (int)(Setup.NCellDir[1] * (Setup.Loc_y + (Setup.OrificeH * 0.5))))//arada boşluk varsa
            {
               if (Setup.Diffusion_withDiffuseRef)
                  cell.Id = -2;
               if (Setup.Diffusion_withSpecularRef)
                  cell.Id = -1;
            }
         }
      }
   }
```

Tablo B1.5: Hem poroz ortam hemde yarık içinden birim zamanda geçen moleküllerin sayılması.

```
private void CellCrossing(Event tEvent)
   {
      var mol = tEvent.Actor;
      var oldCell = tEvent.Actor.Owner;
      var newCell = oldCell.Adjacents[tEvent.Direction, tEvent.Side];

      if (Setup.DiffusionCount)
         SoldanveSagdan_girencikan(newCell, mol);  //M.K

      oldCell.Members.Remove(mol);
      newCell.Members.AddLast(mol);
      mol.Owner = newCell;
      UpdateTime(tEvent.Actor);
   }
   private void SoldanveSagdan_girencikan(Cell _newcell, Molecule _mol)   //M.K
   {
      if (Setup.OrificeFlag)
      {
```

Tablo B1.5: Devam.

```
            if (_newcell.UnitPos[0] == (int)(Setup.NCellDir[0] * (1.0 - Setup.OrificeL) * 0.5)
&&!Soldan_giren.Contains(_mol.ID))
            {
               var fileName = $"{Setup.Name}-Soldan_giren.txt";
               var sw = new StreamWriter(fileName, true);

               Soldan_giren.AddLast(_mol.ID);
               sw.WriteLine("Mol_ID: " + _mol.ID + " Zaman: " + Result.GlobalTime / 3.1585e13 + "
Soldan_girenler: " + Soldan_giren.Count());
               sw.Close();
            }
            if (_newcell.UnitPos[0] == (int)(Setup.NCellDir[0] * (((1.0 - Setup.OrificeL) * 0.5) +
Setup.OrificeL)) && Soldan_giren.Contains(_mol.ID))
            {
               var fileName = $"{Setup.Name}-Sagdan_cikan.txt";
               var sw = new StreamWriter(fileName, true);
               Sagdan_cikan.AddLast(_mol.ID);
               Soldan_giren.Remove(_mol.ID);
               sw.WriteLine("Mol_ID: " + _mol.ID + " Zaman: " + Result.GlobalTime / 3.1585e13 + "
Sagdan_cikanlar: " + Sagdan_cikan.Count());
               sw.Close();
            }
            return;
         }
         if (_newcell.UnitPos[0] == (int)(Setup.NCellDir[0] * Setup.PoreStart) + 1)//soldan girenler
         {
            if (sol_gir.Keys.Contains(_mol.ID))
               sol_gir[_mol.ID] = Result.GlobalTime / 3.1585e13;
            else
               sol_gir.Add(_mol.ID, Result.GlobalTime / 3.1585e13);

            if (soldan_tekrar_giren.Contains(_mol.ID) && sol_gir.Keys.Contains(_mol.ID))
            {
               soldan_tekrar_giren.Remove(_mol.ID);
               ref_sag_cik_sayisi++;
            }
         }
         if (_newcell.UnitPos[0] == (int)(Setup.NCellDir[0] * Setup.PoreEnd) + 1 &&
sol_gir.Keys.Contains(_mol.ID))//sağdan çıkanlar
         {
            if (sag_cik.Keys.Contains(_mol.ID))
               sag_cik[_mol.ID] = Result.GlobalTime / 3.1585e13;
            else
               sag_cik.Add(_mol.ID, Result.GlobalTime / 3.1585e13);

            soldan_tekrar_giren.Add(_mol.ID);
         }
      }
```