



Hız Yön Değişirmesinin Langmuir Kayma Sınır Koşulu ile İncelenmesi

Investigation of the Velocity Inversion Using Langmuir Slip Boundary Condition

Ali Dinler¹, Kamil Oruçoğlu², Robert W. Barber³

¹İstanbul Medeniyet Üniversitesi, Matematik Bölümü, 34700 Üsküdar, İstanbul, Türkiye

²İstanbul Teknik Üniversitesi, Matematik Bölümü, 34469 Maslak, İstanbul, Türkiye

³Centre for Microfluidics and Microsystems Modelling, STFC Daresbury Laboratory, Warrington WA4 4AD, UK

Özet

Bir mikro-akış davranışı olan hız yön değişirmesi, iki silindir arasındaki Couette akışında, iç silindir dönerken dış silindirin durduğu durumda ortaya çıkar. Bu mikro-akış davranışı, gazın yüzeydeki teğetsel hızının dönen iç silindirden sabit duran dış silindire doğru beklenmedik şekilde artması ile oluşur. Knudsen sayısı büyük ve dış silindir yüzey konaklama (accommodation) katsayısı nispeten küçük olduğunda bu akış davranışı oluşur. Bu çalışmada, hız yön değişirmesi Langmuir kayma sınır koşulu ile incelenmiştir.

Anahtar Sözcükler: Mikro gaz akışları, Langmuir kayma sınır koşulu, Boltzmann denklemi, Doğrudan Monte Carlo benzetim metodu.

Abstract

The interesting phenomenon of velocity inversion occurs in the case of Couette flow between two concentric microcylinders when the inner cylinder is rotating and the outer cylinder is stationary. This non-intuitive phenomenon reveals itself as an increase in the tangential velocity of the gas from the rotating inner cylinder towards the stationary outer cylinder. The velocity inversion occurs when the Knudsen number is relatively high and the outer cylinder (tangential momentum) accommodation coefficient is relatively small. The present study investigates the phenomenon of the velocity inversion using the Langmuir slip boundary condition.

Keywords: Micro gas flows, Langmuir slip boundary condition, Boltzmann equation, Direct simulation Monte Carlo (DSMC) method.

1. Giriş

Bir mikro-akış davranışı olan hız yön değişirmesi, iki silindir arasındaki Couette akışında, iç silindir dönerken ve dış silindirin durduğu durumda ortaya çıkar. Bu beklenmedik mikro gaz akış davranışı, kendisini gaz hızının dönen iç silindirden duran dış silindire doğruartmasıyla gösterir. Bu davranış, iki plaka arasındaki denk bir akışta ortaya çıkmadığından, bu davranışa mikro-akışlarda yüzey eğriliğinin neden olduğu düşünülmüştür (Tibbs vd. 1997). Hız yön değişirmesinin nasıl oluştuğunu ve bu davranışın mekanizmasını inceleyen son çalışmalar, bu davranışın oluşması için, dış silindir yüzey konaklama katsayısının küçük olması gerektiğini göstermiştir (Aoki vd. 2003, Yuhong vd. 2005, Guo vd. 2011, Dinler vd. 2012a, Dinler vd. 2013a). Ayrıca mikro/nano sıvı

akışlarında da bu davranışın görülebileceğini ortaya konmuştur (Jung 2007, Kim 2009). Üstelik iç silindir yüzeyinin dışbükey geometrisinin hız yön değişirmesinin oluşumunda rol oynayabileceği, kayma sınır koşulları üzerine yapılan çalışmalarda gösterilmiştir (Dinler vd. 2012b, Dinler vd. 2013b).

Bu çalışmada, Boltzmann denklemi yardımıyla elde edilen akış denklemleri Langmuir kayma sınır koşulu ile çözülmüş ve hız yön değişirmesi incelenmiştir. Langmuir modeli moleküllerin yüzeye tutunmasını (adsorption) göz önüne alan bir modeldir. Langmuir modeli ile elde edilen sonuçlar, Maxwell (Maxwell 1879) kayma sınır koşulu ve moleküler stokastik bir yöntem olan doğrudan Monte Carlo benzetim (direct simulation Monte Carlo (DSMC)) sonuçları ile karşılaştırılmıştır.

2. Problemin Tanımı

İki silindir arasındaki bu mikro Couette gaz akışında, iç

*Sorumlu yazarın e-posta adresi: ali.dinler@medeniyet.edu.tr

silindirin yarı çapı r_1 , dış silindirin yarı çapı r_2 , iç silindirin açılma hızı ise ω_1 olsun. İki mikro-silindir arasındaki bu gaz akışı için silindirik koordinatlarda (r, θ, z) , zmandan-bağımsız ve boyutsuz Boltzmann denklemi, dış kuvvetin yokluğunda

$$\xi_r \frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{r}} + \frac{\xi_\theta}{\hat{r}} \frac{\partial \hat{f}}{\partial \xi_\theta} - \frac{\xi_r \xi_\theta}{\hat{r}} \frac{\partial \hat{f}}{\partial \xi_\theta} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{(1-\chi)}{\chi} \hat{J}(\hat{f}, \hat{f}) \quad (1)$$

şeklinde yazılır (Sone 2002, Sone 2007). Burada, $\hat{\xi} = (\hat{\xi}_r, \hat{\xi}_\theta, \hat{\xi}_z)$ boyutsuz moleküler hız vektörü $\hat{f}(\hat{r}, \hat{\xi})$, boyutsuz moleküler hız dağılım fonksiyonu, $\chi = r_1/r_2$, $Kn = \lambda/(r_2 - r_1)$ Knudsen sayısı ve $\hat{J}(\hat{f}, \hat{f})$ boyutsuz çarpışma terimidir. Boyutsuz değişkenler

$$\hat{r} = \frac{r}{\lambda}, \xi = \frac{\zeta}{(2RT_0)^{1/2}}, \hat{f} = \frac{(2RT_0)^{3/2}}{\rho_{av}} f, \hat{\rho} = \frac{\rho}{\rho_{av}},$$

$$\hat{V}_1 = \frac{\omega_1 r_1}{(2RT_0)^{1/2}} \text{ ve } \hat{T} = T/T_0$$

şeklinde tanımlanmıştır. Burada d ve m sırasıyla gaz molekülünün yarıçapı ve kütlesi; R gaz sabiti, V_1 iç silindirin teğet hızı, T gaz sıcaklığı, T_0 referans sıcaklık, ρ_{av} iki silindir arasındaki ortalama yoğunluk ve $\lambda = (\sqrt{2} \pi d^2 \rho_{av} / m)^{-1}$ sert-küre (hard-sphere) molekül modeli için ortalama serbest yoldur. Boyutsuz yoğunluk $\hat{\rho}$ için

$$\frac{2\chi^2}{1-\chi^2} \int_{r_1}^{r_2} \hat{r} \hat{\rho} d\hat{r} = 1 \quad (2)$$

ifadesinin sağlandığı kabul edilir (Aoki vd. 2003).

Boyutsuz nonlineer çarpışma terimi $\hat{J}(\hat{f}, \hat{f})$

$$\hat{J}(\hat{f}_1, \hat{f}_2) = \frac{1}{2} \int_{R^3} \int_{S^2} (\hat{f}'_1 \hat{f}'_2 - \hat{f}_1 \hat{f}_2) \hat{B} d\Omega(e) d\zeta_2, \quad (3)$$

ve

$$f_1 = f(r, \zeta_1, t), f_2 = f(r, \zeta_2, t), \quad (4)$$

$$f'_1 = f(r, \zeta'_1, t), f'_2 = f(r, \zeta'_2, t), \quad (5)$$

$$\hat{B} = \hat{B}(|V \cdot e|/|V|), V = \zeta_2 - \zeta_1, \quad (6)$$

$$\zeta'_1 = \zeta_1 + (V \cdot e)e, \zeta'_2 = \zeta_2 - (V \cdot e)e, \quad (7)$$

şeklinde tanımlıdır. Burada $\zeta_1, \zeta_2 \in R^3$ çarpışma öncesi ve $\zeta'_1, \zeta'_2 \in R^3$ çarpışma sonrası moleküler hızlar; e çarpışma birim vektörü, $\Omega(e)e$ yönünde çarpışma açısı; $\hat{B}, |V \cdot e|$ ve $|V|$ 'ye bağlı çarpışma çekirdeği (sert-küre modeli için) $\hat{B} = |V \cdot e|/4\sqrt{2\pi}$, S^2 birim küredir ve $d\zeta_2 = d\zeta_{2,r} d\zeta_{2,\theta} d\zeta_{2,z}$.

Boltzmann denklemi (1), Knudsen sayısının küçük değerleri için, asimptotik analiz ile akış denklemlerine indirgenebilir. Moleküler hız dağılım fonksiyonu

$$\hat{f} = \hat{f}_H + \hat{f}_K, \quad (8)$$

olarak yazılır, burada \hat{f}_H Hilbert çözümü (hidrodinamik çözüm de denir), ve \hat{f}_K Knudsen sınır-tabaka çözümüdür. Knudsen sınır tabaka çözümü yüzeye yakın sınır tabakada geçerli ve bu tabakanın kalınlığı Knudsen sayısı mertebesinde. İki çözüm de aşağıdaki gibi kuvvet serisine açılabilir

$$\hat{f}_H = \hat{f}_{H_0} + \hat{f}_{H_1} \varepsilon + \hat{f}_{H_2} \varepsilon^2 + K, \quad (9)$$

$$\hat{f}_K = \hat{f}_{K_0} + \hat{f}_{K_1} \varepsilon + \hat{f}_{K_2} \varepsilon^2 + K, \quad (10)$$

burada K kalan terim ve

$$\varepsilon = \frac{\sqrt{\pi}}{2} Kn \ll 1 \text{ dır} \quad (11)$$

Makroskopik değerler, örneğin yoğunluk $\hat{\rho}$, gaz hızı u_θ , sıcaklık \hat{T} ve basınç \hat{p} ; hız dağılım fonksiyonu \hat{f} bilindiği durumda momentler yardımıyla bulunabilir. Dolayısıyla bu makroskopik değerler Hilbe tçözümü için,

$$\hat{\rho}_H = \hat{\rho}_{H_0} + \hat{\rho}_{H_1} \varepsilon + \hat{\rho}_{H_2} \varepsilon^2 + K, \quad (12)$$

$$u_{\theta,H} = u_{\theta,H_0} + u_{\theta,H_1} \varepsilon + u_{\theta,H_2} \varepsilon^2 + K, \quad (13)$$

$$\hat{T}_H = \hat{T}_{H_0} + \hat{T}_{H_1} \varepsilon + \hat{T}_{H_2} \varepsilon^2 + K, \quad (14)$$

$$\hat{p}_H = \hat{p}_{H_0} + \hat{p}_{H_1} \varepsilon + \hat{p}_{H_2} \varepsilon^2 + K \quad (15)$$

şeklinde kuvvet serisine açılarak ve hız dağılım fonksiyonunun Hilbert açılımı ile aynı mertebedeki terimlerinin eşleştirilmesi ile elde edilir. Knudsen sınır tabaka çözümü için benzer açılım kullanılırsa aynı şekilde Knudsen tabakası içindeki makroskopik değerler elde edilir.

Akış denklemleri ε mertebesinde aşağıdaki gibi, Hilbert çözümü yardımıyla bulunur¹:

$$\frac{d\hat{p}_{H_0}}{d\hat{r}} - \frac{2\hat{\rho}_{H_0} u_{\theta,H_0}^2}{\hat{r}} = 0, \quad (16)$$

$$\frac{d}{d\hat{r}} \left[\gamma_1 \hat{r}^2 \hat{T}_{H_0}^{1/2} \left(\frac{du_{\theta,H_0}}{d\hat{r}} - \frac{u_{\theta,H_0}}{\hat{r}} \right) \right] = 0, \quad (17)$$

$$\frac{5}{4} \frac{d}{d\hat{r}} \left(\gamma_2 \hat{r}^2 \hat{T}_{H_0}^{1/2} \frac{d\hat{T}_{H_0}}{d\hat{r}} \right) + \gamma_1 \hat{r} \hat{T}_{H_0}^{1/2} \left(\frac{du_{\theta,H_0}}{d\hat{r}} - \frac{u_{\theta,H_0}}{\hat{r}} \right)^2 = 0 \quad (18).$$

Burada $\gamma_1 = 1.270042$ ve $\gamma_2 = 1.922284$ olarak alınabilir (Sone 2007).² Bu sabit sıcaklık probleminde $\gamma_1 \hat{T}_{H_0}^{1/2}$ ve

¹Akış denklemlerinin çıkarılışı oldukça uzun olduğundan burada yer verilmemiştir. Hilbert açılımı (9) Boltzmann denkleminde yerine yazılır ve ε 'a göre düzenlenirse, akış denklemlerini bulmak için çözülebilirlik koşullarından gelen integral denklemler elde edilir. İntegral denklemler en düşük mertebeden başlanarak, üst mertebeye doğru sistematik olarak çözülebilir ve akış denklemleri bulunur.

$\gamma_2 \hat{T}_{H_0}^{1/2}$, sırasıyla boyutsuz viskozite ve ısı iletim katsayısıdır. u_{θ, H_0} yerine kısaca u_{θ} yazılırsa, momentum denklemi

$$\frac{d}{d\hat{r}} \left[\hat{r}^2 \left(\frac{du_{\theta}}{d\hat{r}} - \frac{u_{\theta}}{\hat{r}} \right) \right] = 0 \quad (19)$$

olur. Burada u_{θ} silindir yüzeyine teğet makroskopik gaz hız profilidir.

2.1. Doğrudan Monte Carlo Benzetim (DSMC) Metodu

Boltzmann denklemi (1) gaz kinetik teorisinin temel denklemi olup gaz molekül dağılım fonksiyonunun değişimini modeller. Bütün Knudsen sayılarında ve tüm gaz akış rejimlerinde geçerlidir. Dahası, Boltzmann denkleminin çözümü olan moleküler dağılım fonksiyonu bulunduğu; yoğunluk, hız ve sıcaklık gibi tüm makroskopik büyüklükler Boltzmann denkleminin çözümü olan dağılım fonksiyonunun momentleri ile hesaplanabilir. Ancak Boltzmann denkleminde gaz moleküllerinin çarpışmasını modelleyen çarpışma terimi (3), bu denklemi bir doğrusal-olmayan integro-diferansiyel denklem yapar. Bu doğrusal-olmayan integro-diferansiyel denklemin genel çözümü mevcut değildir.

Doğrudan Monte Carlo benzetim metodu, Boltzmann denklemini çözmek için moleküler stokastik çözüm yöntemidir (Unal ve Dinler 2008). DSMC metodu Boltzmann denklemini çözmede en etkili yöntemlerden biridir (Bird 1994, Oran vd. 1998).

Gaz bölgesi D , M tane hücreye $dC^{(l)} l=1,2,\dots, M$ şeklinde bölünsün ve $x^{(l)} \in dC^{(l)}$ hücre içerisinde hücreyi temsil eden bir nokta olsun. Hız dağılım fonksiyonu bu hücre için

$$f(x^{(l)}, v, t) dC^{(l)} = \Delta \sum_{j=1}^{N^{(l)}} \delta(v - v_{(j)}^{(l)}), \quad x^{(l)} \in dC^{(l)} \quad (20)$$

dir ve genel olarak

$$f(x, v, t) = \Delta \sum_{l=1}^M \sum_{j=1}^{N^{(l)}} \delta(x - x_{(j)}^{(l)}) \delta(v - v_{(j)}^{(l)}), \quad x \in D \quad (21)$$

şeklinde yazılabilir (Sone 2007). Burada δ üç boyutta Dirac delta fonksiyonu, Δ sabit bir katsayı ve $N^{(l)}$ $dC^{(l)}$ içerisinde ki molekül sayısıdır. Moleküllerin başlangıç pozisyonu $x_{(j)}^{(l)} \in \epsilon^3$ ve hızları, $v_{(j)}^{(l)} \in \epsilon^3$ başlangıçtaki sıcaklık ve (makroskopik) gaz hızına göre Maxwellian dağılımı ile belirlenir. $dC^{(l)}$ hücresindeki molekül sayısı $N^{(l)}$, çarpışmalar ile zamanla değişecektir.

Bir t anında moleküllerin konumu $x_{(j)}^{(l)}$ ve $v_{(j)}^{(l)}$ hızları bilindiğinde, Boltzmann denkleminde (1) eşitliğinin sol tarafına göre (advection part), yeni konumlar $x_{(j)}^{(l)} + v_{(j)}^{(l)} dt$

olarak bulunur. Eğer dış bir kuvvet F var ise hızlar $v_{(j)}^{(l)} + F(x_{(j)}^{(l)}, v_{(j)}^{(l)}, t) dt$ şeklinde ötelenerek bulunur. Böylece dağılım fonksiyonu

$$f(x, v, t) = \Delta \sum_{l=1}^M \sum_{j=1}^{N^{(l)}} \delta(x - x_{(j)}^{(l)} - v_{(j)}^{(l)} dt) \delta(v - v_{(j)}^{(l)} - F(x_{(j)}^{(l)}, v_{(j)}^{(l)}, t) dt), \quad x \in D \quad (22)$$

olur.

Boltzmann denkleminde (1) eşitliğin sol tarafına göre ötelenen moleküller, bir hücreden diğer hücreye geçebilir. Bu durumda, DSMC algoritmasında, moleküller buldukları yeni hücrelere göre tekrar indekslenmelidir. Eğer öteleme ile bir molekül akış bölgesinin sınırlarına (yüze) temas ederse, uygun sınır koşulu uygulanır.

Boltzmann denkleminin sağ tarafında bulunan çarpışma terimi için, $(v_{(j)}^{(l)}, v_{(k)}^{(l)})$ hızlarına sahip iki molekülün, açıl element $d\Omega^{(s)}$ de bulunma olasılığı

$$P^{(s)}(v_{(j)}^{(l)}, v_{(k)}^{(l)}) d\Omega^{(s)} = \frac{\Delta dt}{m dC^{(l)}} \hat{B} d\Omega^{(s)} \quad (23)$$

olarak yazılır (Sone 2002). Burada $\hat{B}(v_1 - v_2, e)$ önceki bölümde tarif edildiği gibi çarpışma çekirdeği ve m molekül kütlesidir. Hız çifti $(v_{(j)}^{(l)}, v_{(k)}^{(l)})$, moleküllerin buldukları $dC^{(l)}$ hücresindeki konumlarına bakılmadan rastgele seçilir. Yukarıdaki olasılık fonksiyonuna (23) göre $(v_{(j)}^{(l)}, v_{(k)}^{(l)})$ hız çifti $(v'_{(j)}^{(l)}, v'_{(k)}^{(l)})$ hız çiftine dönüştürülür ya da dönüştürülmez. Eğer çarpışma gerçekleşiyorsa, bu dönüşüm

$$v'_{(j)}^{(l)} = v_{(j)}^{(l)} + ((v_{(k)}^{(l)} - v_{(j)}^{(l)}), e^{(s)}) e^{(s)} \quad (24)$$

ve

$$v'_{(k)}^{(l)} = v_{(k)}^{(l)} - ((v_{(k)}^{(l)} - v_{(j)}^{(l)}), e^{(s)}) e^{(s)} \quad (25)$$

formülleri ile dönüştürülür. Böylece bütün bölge içinde, herhangi bir hız çifti, $(v_{(j)}^{(l)}, v_{(k)}^{(l)})$

$$P(v_{(j)}^{(l)}, v_{(k)}^{(l)}) = \sum_s P^{(s)}(v_{(j)}^{(l)}, v_{(k)}^{(l)}) d\Omega^{(s)} = \frac{\pi \check{r}^2 \Delta}{m} \frac{dt}{dC^{(l)}} |v_{(k)}^{(l)}, v_{(j)}^{(l)}| \quad (26)$$

olasılığına göre çarpışır. Burada \check{r} iki molekülün merkezleri arasındaki uzaklıktır. Bu iki molekülün çarpışmama olasılığı ise $1 - P(v_{(j)}^{(l)}, v_{(k)}^{(l)})$ olarak bulunur.

Doğrudan Monte Carlo benzetim algoritması aşağıdaki şekilde özetlenebilir. İlk önce (fiziki) başlangıç koşulları belirlenir. Molekül hızları ve konumları başlangıç Maxwellian dağılımı ile atanır. Fiziksel bölge akış geometrisine göre hücrelere bölünür. Sonra Boltzmann denk-

² γ_1 ve γ_2 sabitleri genel durumda T_H 'in bir fonksiyonu olup, çarpışma terimine ve moleküler etkileşim modeline (örneğin sert-küre modeli) bağlı olarak, birinci dâpnota bahsedildiği şekilde ilgili integral denklemin çözümü ile elde edilir.

leminin sol tarafına göre moleküller ortalama çarpışma zamanı süresince hareket ettirilir. Böylece konum ve hız değerleri ötelenir. Bütün moleküller takip edilir ve indekslenir. Eğer bir molekül bir hücreden diğer hücreye geçerse işaretlenir, eğer (fiziksel) sınırlara temas ederse uygun sınır koşulu uygulanır. Daha sonra, Boltzmann denkleminin sağ tarafındaki çarpışma terimine göre yukarıda belirtildiği gibi çarpışacak moleküller olasılıksal olarak belirlenir. Hücre içersinden moleküller rastgele seçilir, eğer çarpışma gerçekleşirse, çarpışma öncesi hızlar çarpışma sonrası hızlara dönüştürülür. Bu süreçte sadece ikili çarpışmalar göz önünde bulundurulur.

Yukarıdaki iki alt adımdan (advection and collision substeps) sonra makroskopik değerler (örneğin sıcaklık, yoğunluk ya da basınç) hücrelerde kimoleküllerin hız verisinden elde edilir. Bu iki alt adım makroskopik değerlerin değişiminin, belli bir tolerans değerden düşük olacağı duruma kadar devam eder, son olarak aranan makroskopik sonuç değerler, her hücre için bulunmuş moleküler değerlerin yardımıyla hesaplanır ve benzetim metodu sonlandırılır.

2.2.Langmuir Kayma Sınır Modeli

Langmuir modeli moleküllerin yüzeye tutunmasını göz önüne alan bir modeldir. Langmuir kayma koşulu iç ve dış silindirde

$$u_{\theta}(r_1) = \alpha_1 r_1 \omega_1 + (1 - \alpha_1) u_{\theta}(\bar{r}) \frac{r_1}{\bar{r}}, \quad (27)$$

$$u_{\theta}(r_2) = (1 - \alpha_2) u_{\theta}(\bar{r}) \frac{r_2}{\bar{r}} \quad (28)$$

yazılabilir (Myong et al. 2005). Burada α_1 , α_2 sabit sıcaklıkta sırasıyla iç ve dış silindir yüzeyine tutunan moleküllerin tutunmayan moleküllere oranı, $\bar{r} = ((r_1^3 + r_2^3)/(r_1 + r_2))^{1/2}$ ise referans pozisyonudur.

İç silindirin $V_1 = r_1 \omega_1$ hızıyla döndüğü ve dış silindirin sabit durduğu durumda, denklem (19)'un genel çözümü Langmuir sınır koşulları (27, 28)'den

$$\hat{u}_{\theta} = u_{\theta}(\hat{r}) = A\hat{r} + B\hat{r}^{-1} \quad (29)$$

şeklinde elde edilir. Burada A ve B sabit katsayıları

$$A = \frac{\alpha_1 \chi (\alpha_2 - (1 - \chi) \chi)}{\hat{r}_2 (\alpha_2 - \alpha_2 \chi + \alpha_1 \chi^3 - \alpha_1 \chi^4)}, \quad (30)$$

$$B = \frac{\alpha_1 \alpha_2 \hat{r}_2 \chi (1 - (1 - \chi) \chi)}{(1 - \chi) (\alpha_2 + \alpha_1 \chi^3)}, \quad (31)$$

$$\chi = \frac{r_1}{r_2} \quad (32)$$

dir. Yüzey tutunma sabitleri iki yüzeyde eşit alındığında ($\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$), genel çözüm

$$\hat{u}_{\theta}(\hat{r}) = -\frac{\chi (\alpha - (1 - \chi) \chi)}{\hat{r}_2 (1 - \chi + \chi^3 - \chi^4)} \hat{r} + \frac{\alpha \hat{r}_2 \chi}{(1 - \chi^2) \hat{r}} \quad (33)$$

şeklinde olur. Şekil 1'de, iç silindir $\omega_1 = 5.17 \times 10^8$ rad/s açısal hızı ile dönmekte ve dış silindir sabit durmaktadır. Serbest ortalama hız $\lambda = 6.25 \times 10^{-8}$ m, iç silindir yarıçapı $r_1 = 3\lambda$ ve dış silindir yarıçapı 5λ dir. Bu durumda, DSMC sonuçları akış bölgesinde %2 kadar sıcaklık ve yoğunluk değişimi göstermektedir. Böylece denklem (19) için sıkıştırılabilirlik koşulu geçerlidir. Knudsen sayısı $Kn = \lambda / (r_2 - r_1) = 0.5$. DSMC benzetim metodunda, akış bölgesi 200 hücreye bölünmüş ve her hücreye başlangıçta ortalama 100 molekül yerleştirilmiştir. Maxwell ve Langmuir modelleri karşılaştırılırken, Langmuir yüzey moleküler tutunma katsayısı ile Maxwell konaklama katsayısı arasındaki ilişki

$$\alpha = \frac{\sigma}{4(2 - \sigma)Kn} \quad (34)$$

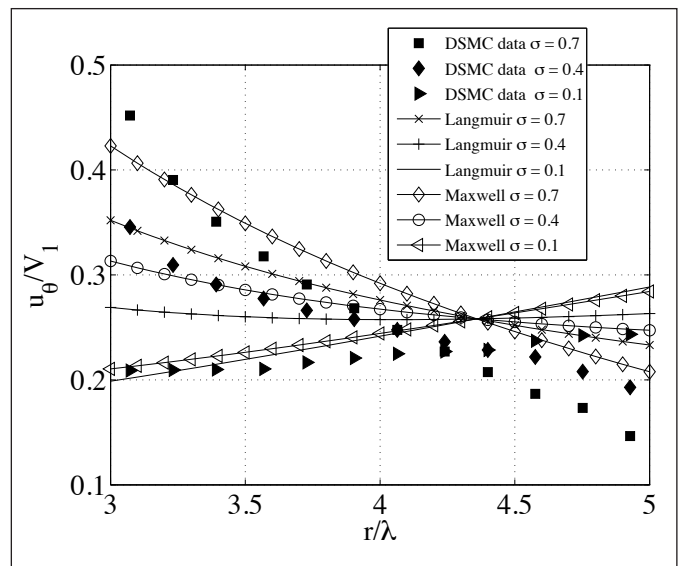
ifadesi ile bulunur.

Kayma gerilmesi ,

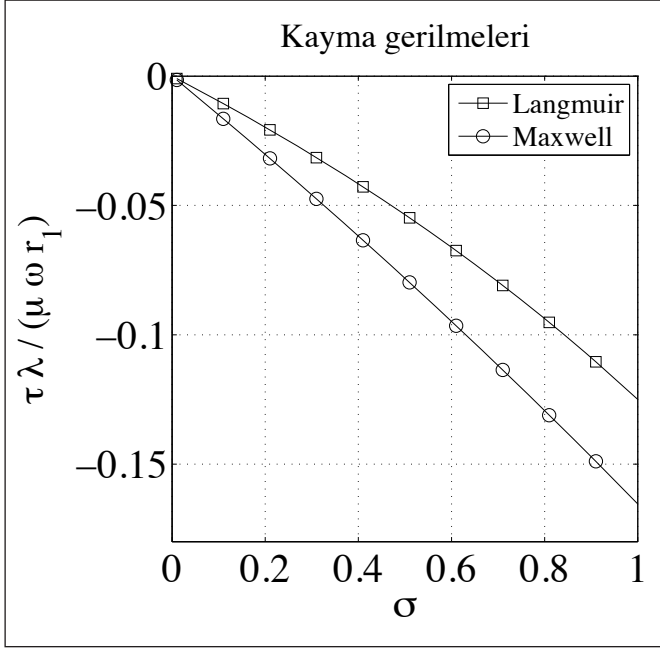
$$\tau = \mu \left(\frac{du_{\theta}}{dr} - \frac{u}{r} \right) \quad (35)$$

olup burada μ dinamik viskozitedir. Boyutsuz kayma gerilmesi $\hat{\tau} = \tau \lambda / (\mu \omega r_1)$ şeklinde yazılır.

Langmuir kayma sınır koşulu ile hız yön değiştirmesi incelenebilir. Hızın yön değiştirmesinin oluşması hemen hemen tamamıyla dış silindir konaklama katsayısına bağlıdır. Hız yön değiştirmesi, dış silindir konaklama katsayısının küçük olduğu durumlarda olur. Dolayısıyla hız yön değiştirmesi için gerek koşul, dış silindir konaklama katsayısının kritik konaklama katsayısından küçük olmasıdır.



Şekil 1. Langmuir ve Maxwell kayma koşulları ile elde edilen hız profillerinin DSMC benzetim sonucu ile karşılaştırılması. Yukarıdaki şekilde görüldüğü gibi Maxwell modeli, Langmuir modeline göre DSMC verisine daha yakın sonuç vermektedir.



Şekil 2. Dış silindir yüzeyinde, Langmuir ve Maxwell boyutsuz kayma gerilmelerinin konaklama katsayısı ile değişimi. Burada Knudsen sayısı 0.5 olarak alınmıştır.

Kritik konaklama katsayısının değeri hız yön değiştirmesinin tam ve kısmi olmasına göre bulunur.

Tanım: Tam hız yön değiştirmesi, her $r \in [r_1, r_2]$ için, $du_\theta/dr > 0$ ise vardır.

Öyleyse tam hız yön değiştirmesi

$$\frac{du_\theta}{dr} = \frac{\alpha_1 \chi (r^2(1-\chi)\chi - \alpha_2(r^2 + R_2^2(1-(1-\chi)\chi)))}{r^2 R_2(1-\chi)(\alpha_2 + \alpha_1 \chi^3)} > 0 \quad (36)$$

koşulu gerçekleşir ise mevcuttur. Denklem (36)'nın paydası her zaman pozitif olduğundan, tam hız yön değiştirmesi

$$(r^2(1-\chi)\chi - \alpha_2(r^2 + R_2^2(1-(1-\chi)\chi))) > 0 \quad (37)$$

gerçeklenir ise vardır.

Buradan tam hız yön değiştirmesi için dış silindir konaklama katsayısı için

$$\alpha_2 < \frac{r^2(1-\chi)\chi}{r^2 + R_2^2(1-(1-\chi)\chi)} \quad (38)$$

koşulu elde edilir. Dikkat edilirse, yukarıdaki tanıma göre tam hız yön değiştirmesinin varlığı iç silindir konaklama katsayısına bağlı değildir. (38) denkleminde eşitsizliğin sağ tarafı, $r \in [r_1, r_2]$ 'ye göre monoton artan bir fonksiyondur. Öyle ise

$$\alpha_2 < \frac{R_1^2(1-\chi)\chi}{R_1^2 + R_2^2(1-(1-\chi)\chi)} = \frac{(1-\chi)\chi^3}{1-(1-2\chi)\chi} \quad (39)$$

eşitsizliği gerçekleşir ise (38) ifadesi doğru olur. Yani (39) ifadesi gerçekleşirse tam hız yön değiştirmesi her zaman oluşur.

Eğer $du_\theta/dr < 0$ ise her $r \in [r_1, r_2]$ için hız yön değiştirmesi oluşmaz. Bu ise

$$r^2(1-\chi)\chi - \alpha_2(r^2 + R_2^2(1-(1-\chi)\chi)) < 0 \quad (40)$$

koşulunun olmasını gerektirir. Buradan

$$\alpha_2 > \frac{r^2(1-\chi)\chi}{r^2 + R_2^2(1-(1-\chi)\chi)} \quad (41)$$

bulunur.

Denklem (41)'de eşitsizliğin sağ tarafı $r \in [r_1, r_2]$ 'ye göre monoton artan bir fonksiyon olduğundan; sonuç olarak

$$\alpha_2 > \frac{R_2^2(1-\chi)\chi}{R_2^2 + R_2^2(1-(1-\chi)\chi)} = \frac{(1-\chi)\chi}{2-(1-\chi)\chi} \quad (42)$$

eşitsizliği geçerli ise denklem (41) doğrudur. Son olarak, $du_\theta/dr = 0$ durumuna bakarak, hız minimumunun noktası

$$r^* = \sqrt{\frac{\alpha_2 R_2^2(-1+(1-\chi)\chi)}{\alpha_2 - (1-\chi)\chi}} \quad (43)$$

olarak bulunur. Burada ikinci türev

$$\frac{d^2 u_\theta}{dr^2} = -\frac{2\alpha_1 \alpha_2 R_2 \chi (1-(1-\chi)\chi)}{r^3 (1-\chi)(\alpha_2 + \alpha_1 \chi^3)} \quad (44)$$

şeklinde elde edilir.

Denklem (44) her zaman pozitif olduğundan, $r=r^*$ noktası minimumdur. (43) denklemindeki karekök ifadesinde pay her zaman negatiftir. Öyleyse minimum nokta ancak $\alpha_2 < (1-\chi)\chi$ olduğunda vardır. Fakat bu şart r^* 'ın r_1 ve r_2 arasında olmasını gerektirmez. Sonuç olarak, $r^* \in [r_1, r_2]$ için, α_2 'nin limit değerleri

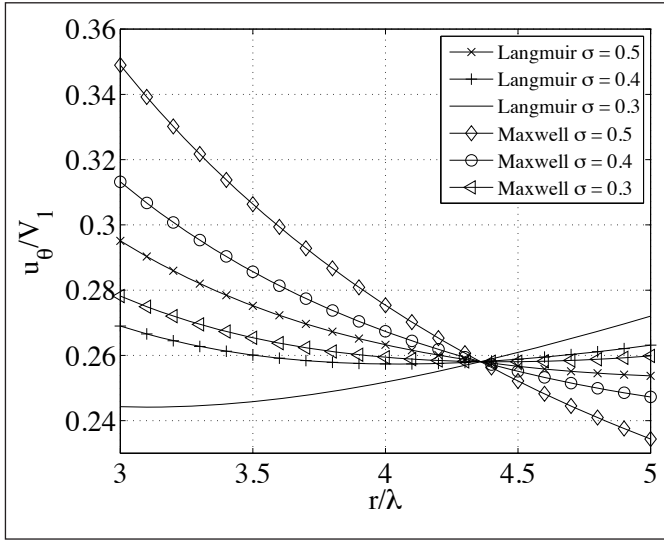
$$\frac{(1-\chi)\chi^3}{1-(1-2\chi)\chi} < \alpha_2 < \frac{(1-\chi)\chi}{2-(1-\chi)\chi} \quad (45)$$

şeklinde dir. Denklem (39) ve (42) göz önünde bulundurulursa, eğer α_2 denklem (45)'deki açık aralıkta ise, kısmi hız yön değiştirmesi oluşur. Böylece kısmi hız yön değiştirmesi oluşması için, dış silindir konaklama katsayısının alması gereken değer aralığı bulunmuş olur.

3. Sonuçlar

Elde edilen sonuçlar aşağıdadır:

- Şekil 1' de görüldüğü gibi hız profilleri, hem Maxwell hem Langmuir modeli için, değişen konaklama



Şekil 3. Langmuir ve Maxwell kayma sınır koşulları ile konaklama katsayısının $\sigma = 0.3, 0.4$ ve 0.5 değerleri için hız profilleri.

katsayısından bağımsız olarak ortak bir noktada kesilmektedir. Bu kesişme noktası Langmuir modelinde referans nokta \bar{r}' 'ye bağlıdır.

- Şekil 2'de kayma gerilmesi analizi, Langmuir kayma modelinin Maxwell kayma modeline göre daha düşük kayma gerilmesi verdiğini göstermiştir. Ayrıca sonuçlar, DSMC sonucu ve Maxwell modeli ile karşılaştırıldığında, Langmuir kayma modeli daha yüksek yüzey konaklama katsayısı değerlerinde hız yön değiştirmesi olabileceğini öngörmektedir.
- Langmuir modeli kritik konaklama katsayısı, Maxwell modeline göre daha yüksek olduğu hesaplanmıştır. Böylece Langmuir modelinde hız yön değiştirmesi olacağı ön görüldüğü halde, aynı durumda Maxwell modeli hız yön değiştirmesi davranışını göstermemektedir.
- Şekil 3'de, Maxwell ve Langmuir kayma sınır koşulu ile bulunan hız profilleri karşılaştırıldığında ve DSMC verisi göz önünde bulundurulduğunda, Maxwell modeli Langmuir modelinden biraz daha isabetli sonuç vermektedir.

4. Kaynaklar

- Aoki, K., Yoshida, H., Nakanishi, T. 2003. Inverted velocity profile in the cylindrical Couette flow of a rarefied gas. *Phys. Rev. E*, 68: 016302.
- Bird, G.A. 1994. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, Oxford Press.

- Dinler, A., Barber RW., Emerson, DR., Stefanov, SK. 2012a. Velocity Inversion and Predicting velocity slip on Curved surfaces. *AIP Conference Proceedings*, 1501:771.
- Dinler, A., Barber, RW., Emerson, DR., Stefanov, SK., Orucoglu, K. 2013a. On the degree of boundary slip over nonplanar surfaces. *Microfluid. Nanofluid.*, 1-10.
- Dinler, A., Barber, RW., Emerson, DR., Stefanov, SK., Orucoglu, K. 2012b. Role of surface shape on boundary slip and velocity defect. *Phys. Rev. E*, 86: 016314.
- Dinler, A., Barber, RW., Emerson, DR., Stefanov, SK., Orucoglu, K. 2013b. The effects of S-layer on nonplanar microfluidic gas flows: A critical view on the accuracy of the slip models. *J. Comput. Theor. Nanosci.*, 10: 1990-1998.
- Guo, Z., Shi, B., Zheng, C. 2011. Velocity inversion of microcylindrical Couette flow: a lattice Boltzmann study. *Comput., Math., Appl.*, 61: 3519-3527.
- Jung, Y. 2007. Velocity inversion in nanochannel flow. *Phys. Rev. E*, 75: 051203.
- Kim, S. 2009. Slip velocity and velocity inversion in a cylindrical Couette flow. *Phys. Rev. E*, 79: 036312.
- Maxwell, J.C. 1879. On stresses in rarefied gases arising from inequalities of temperature. *Phil. Trans. R. Soc. London*, 170: 231-256.
- Myong, R.S. 2004. Gaseous slip models based on the Langmuir adsorption isotherm. *Phys. Fluids*, 16: 104.
- Myong, R.S., Reese, J.M., Barber, RW., Emerson, DR. 2005. Velocity slip in microscale cylindrical Couette flow: The Langmuir model. *Phys. Fluids*, 17: 087105.
- Oran, E.S., Oh, C.K., Cybyk, B.Z. 1998. Direct simulation Monte Carlo: Recent advances and applications. *Annual Rev. Fluid Mec.*, 30:403-441.
- Sone, Y. 2002. *Kinetic Theory and Fluid Dynamics*, Birkhauser, Boston.
- Sone, Y. 2007. *Molecular Gas Dynamics: Theory, Techniques, and Applications*, Birkhauser, Boston.
- Tibbs, K.W., Baras, F., Garcia, A.L. 1997. A nonlocal flow profile due to the curvature effect on slip-length. *Phys. Rev. E*, 56: 2282-2283.
- Unal, G., Dinler, A. 2008. Exact linearization of one dimensional Itô equations driven by fBm: Analytical and numerical solutions. *Nonlinear Dyn.*, 53:251-259.
- Yuhong, S., Barber, RW., Emerson, DR. 2005. Inverted velocity profiles in rarefied cylindrical Couette gasflow and the impact of the accommodation coefficient. *Phys. Fluids*, 17: 047102.