

УДК 532:593, 534.222.24

## Исследование встречных газодинамических потоков гелия в наноканалах и влияния учета столкновений атомов\*

Д.С. ОЖГИБЕСОВ<sup>1</sup>, И.Ф. ГОЛОВНЕВ<sup>2</sup>, В.М. ФОМИН<sup>3</sup>

<sup>1</sup> 630073, РФ, г. Новосибирск, пр. Карла Маркса, 20, Новосибирский государственный технический университет, аспирант. E-mail: dozhgibesov@mail.ru

<sup>2</sup> 630090, РФ, г. Новосибирск, ул. Институтская, 4/1, ИТПМ СО РАН, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории № 4. E-mail: golovnev@itam.nsc.ru

<sup>3</sup> 630090, РФ, г. Новосибирск, ул. Институтская, 4/1, ИТПМ СО РАН, доктор физико-математических наук, академик СО РАН, профессор, директор ИТПМ СО РАН. E-mail: fomin@itam.nsc.ru

В представленной работе проведены исследования газодинамических потоков гелия в наноканалах цилиндрической формы. Актуальность данной работы обусловлена бурным развитием энергетической сферы, а именно в области термоядерного синтеза, где сырьем выступает газ гелий. В связи с этим встает вопрос исследования новых способов добычи и сепарации гелия с помощью применения нанотехнологий. Рассмотрен случай истечения газа из двух резервуаров навстречу друг другу. Температура газа во всех расчетах предполагалась равной 300 К. Взаимодействие атомов гелия между собой описывалось потенциалом Леннарда-Джонса, а для описания взаимодействия атомов со стенками канала использовалась модель зеркального отражения. Исследования проводились в интервалах параметров: давление – от 0,1 до 5 атмосфер, длина каналов – от 100 Å до 10 м. Особое внимание уделено каналам с радиусом 110 Å, так как это размеры каналов в мембранах, выпускаемых промышленностью в настоящее время. Результаты позволяют увидеть зависимости потоков газа в различных условиях от времени, а также частично понять процессы, протекающие внутри каналов в широком диапазоне параметров. Также результаты предоставляют возможность судить о расходе газа через круглые сечения, что, в свою очередь, можно использовать для сравнения с потоком Пуазейля при определенных условиях. Для подтверждения достоверности результатов было проведено сравнение с молекулярно-кинетической теорией, в результате которой выявлено влияние учета столкновений атомов на численное значение потоков в наноканалах.

**Ключевые слова:** гелий, газ, поток, наноканал, ценосфера, метод молекулярной динамики, расчет, моделирование, добыча, энергетика, условия нанотехнологии

DOI: 10.17212/1814-1196-2014-4-147-154

### ВВЕДЕНИЕ

На сегодняшний день сфера энергетики подвергается бурному развитию. Открываются новые горизонты атома, что не может не сказаться на промышленности и повседневной жизни в целом. Одно из перспективнейших направлений будущей энергетики – термоядерный синтез, сырьем для которого является гелий, но добыча гелия представляет собой сложный процесс. Это связано с тем, что в процентном соотношении гелия в атмосфере и природном газе очень мало (до 2 %). Основным способом его добычи на сегодняшний день является криогенный способ, основанный еще в 20-х годах прошлого столетия. Основа этого метода заключается в охлаждении огромного объема природного газа. Но в результате бурного развития нанотехнологий недавно предложен другой способ добычи гелия – с помощью ценосфер. Ценосферы являются по-

\* Статья получена 11 августа 2014 г.

лыми сферами с наноканалами и обладают селективным свойством. В связи с этим возникла необходимость провести исследование газодинамического течения гелия в наноканалах.

Изучению поведения молекул в каналах сверхмалых размеров посвящено огромное количество работ [4, 10–15]. Для оценки потоков газа в наноканале или концентраций молекул в тренче в настоящее время используются, главным образом, аналитические выражения молекулярно-кинетической теории, хотя появились и первые работы, в которых исследование газодинамических явлений в наноканалах основано на численном решении уравнения Больцмана.

Одним из способов представления заполнения наноканала атомами и молекулами газа является моделирование потока молекул путем последовательного приближения группы молекул параллельно продольной оси наноканала [5]. Применительно к задачам исследования поведения атомов газа в каналах с точки зрения физического подобия наиболее удачным является моделирование с помощью метода Монте-Карло с использованием известного распределения молекул по скоростям в пучке, так как в этом случае вектор скорости молекулы имеет направление, не всегда параллельное оси трубки.

При моделировании поведения молекул в каналах следует также уделять большое внимание граничным условиям на стенках канала. Подробное описание теоретических и экспериментальных работ в данной области приведено в последнем параграфе главы 10 в работе [6]. Также описание граничных условий для случая адсорбции молекул на стенку затронуто в [7], где сказано, что адсорбция молекул происходит не на саму поверхность, а молекула останавливается на некотором малом расстоянии от нее.

В последнее время наряду с теоретическими работами стали появляться и экспериментальные работы, посвященные исследованию компрессора Кнудсена. Принцип работы данного компрессора заключается в том, что перемещение газа между двумя емкостями осуществляется сквозь нано- или микроканалы от холодной емкости к горячей. Данный эффект обусловлен наличием потока молекул газа в пристеночной области канала, движущихся в сторону горячей емкости. Подробные теоретические описания данных эффектов приведены в [8, 9].

В предыдущих работах [1, 2] на основе прямого сравнения результатов, полученных в рамках метода молекулярной динамики и уравнения Больцмана, было показано, что в интервале размеров каналов, представляющих интерес для поставленной проблемы, необходимо применять метод молекулярной динамики.

## 1. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

В работе [3] рассматривалась физическая система, состоящая из истечения газа в вакуум сквозь цилиндрический наноканал заданного радиуса и длины. Давление и температура газа в резервуаре задавались в качестве внешних фиксированных параметров.

В представленной работе исследовалось встречное истечение потоков с постоянной разностью давлений. На рис. 1 показана схема потоков для задачи. Температура газа во всех расчетах была равной 300 К, а радиус канала – 110 Å. При этом всегда предполагалось, что давление в первом (входном) сечении канала было больше, чем во втором (выходном),  $P_1 \geq P_2$ . Условие выхода на стационар, при выполнении которого расчет прерывался, имеет вид

$$J_{i1} + J_{i2} = J_- + J_+ \quad (1)$$

Здесь  $J_-$  – обратный поток, вытекающий из входного сечения канала;  $J_+$  – прямой поток, вытекающий из выходного сечения канала;  $J_{i1}$ ,  $J_{i2}$  – теоретические потоки, поступающие во входное и выходное сечения канала соответственно.

Согласно [3] каждый теоретический поток состоит из суммы двух составляющих потоков. Исходя из такого разделения можно с уверенностью сказать, что прямой поток  $J_+$  состоит из прямой составляющей потока  $J_{i1}$  (в дальнейшем она будет называться  $J_{out}$ ) и обратной  $J_{i2}$ . В свою очередь,  $J_-$  состоит из прямой составляющей потока  $J_{i2}$  и обратной составляющей  $J_{i1}$ .

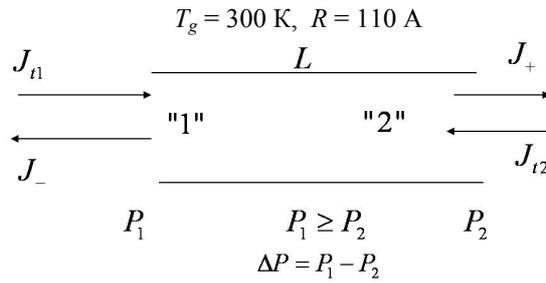


Рис. 1. Схема канала для исследования встречных потоков

В поставленной задаче нас интересует прежде всего количество гелия, попавшее из области высокого давления (резервуар с природным газом) в область низкого (ценосферу), поэтому исследование проводится преимущественно для потока  $J_{out}$ , который определяется по следующей формуле:

$$J_{out} = J_{t1} - J_{-},$$

где расшифровка величин соответствует рис. 1.

## 2. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА

Для иллюстрации технологии проведения численных расчетов на рис. 2 представлена зависимость потоков от времени через первое и второе сечения для случая затекания гелия через одно сечение. Отчетливо видна область релаксации и выход потоков на постоянные асимптотические значения. Они определяются очевидным соотношением равенства входящего и суммы выходящих потоков  $J_{-} + J_{+} = J_{th}$ . После этого численный расчет процесса затекания атомов гелия в канал прерывался.

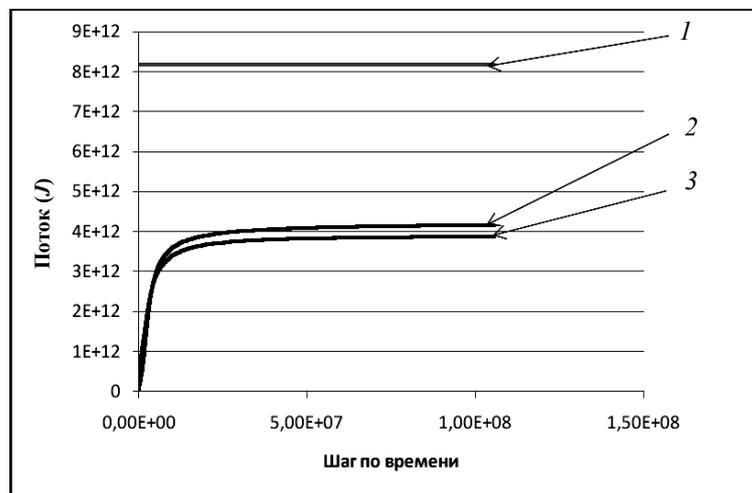


Рис. 2. Зависимость прямого и обратного потоков от числа шагов по времени: 1 –  $J_{t1} + J_{t2}$ ; 2 –  $J_{+}$ ; 3 –  $J_{-}$ . Радиус канала  $R = 110 \text{ \AA}$ , длина  $L = 2 \text{ \mu}$ . Параметры газа в резервуаре  $T_g = 300 \text{ K}$ ,  $P_1 = 2 \text{ атм}$ ,  $P_2 = 0,8 \text{ атм}$

На первом этапе было проведено исследование газодинамического потока в наноканале при затекании через два сечения, а затем производилось сравнение с молекулярно-кинетической теорией (МКТ). На рис. 3 отображается зависимость прямого потока ( $J_{out}$ )

от длины канала. Видно, что при увеличении длины прямой поток ( $J_{out}$ ) уменьшается нелинейно.

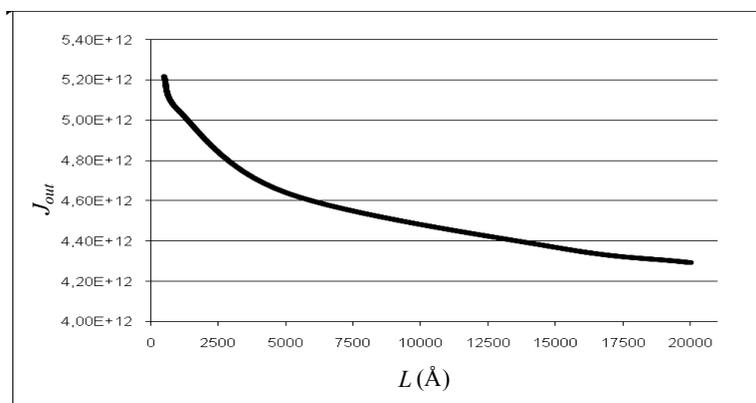


Рис. 3. Зависимость прямого потока ( $J_+$ ) от длины канала. Параметры газа в резервуарах  $T_g = 300$  К,  $P_1 = 2$  атм,  $P_2 = 0,8$  атм, радиус каналов  $R = 110$  Å

Такая зависимость подтверждает результаты, полученные в работе [3], и показывает аналогию в континуальном подходе для течения Пуазейля.

На следующем этапе была проведена работа по исследованию влияния давления в резервуарах на вытекающий поток. На рис. 4, а и б представлены зависимости вытекающего потока ( $J_{out}$ ) для различных перепадов давлений.

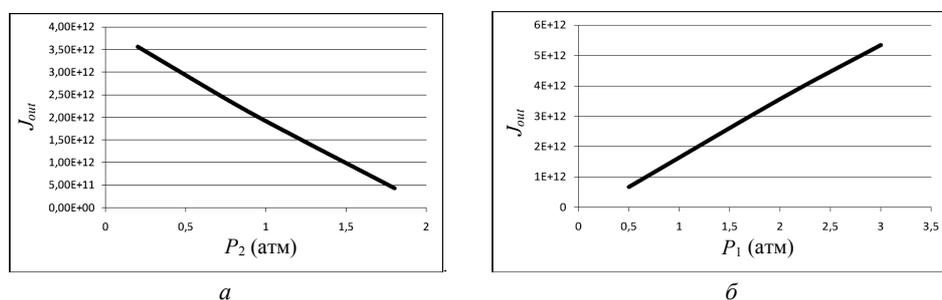


Рис. 4. Зависимость вытекающего потока от давления во втором резервуаре при постоянном давлении в первом резервуаре:

а –  $P_1 = 2$  атм, длина наноканала  $L = 5000$  Å; б –  $P_2 = 0,2$  атм, длина наноканала  $L = 1000$  Å

Из рис. 4, а и б можно сделать вывод о том, что при увеличении давления в области высокого давления при неизменном давлении в области низкого давления поток  $J_{out}$  увеличивается, однако если мы зафиксируем давление в первом резервуаре и станем менять давление в области низкого давления, то интересующий нас поток  $J_{out}$  уменьшается с ростом давления. Это объясняется тем, что растет прямая составляющая потока  $J_{I2}$  и, следовательно, увеличивается сопротивление течению целевого потока в результате столкновений молекул между собой.

### 3. СРАВНЕНИЕ С РЕЗУЛЬТАТАМИ МОЛЕКУЛЯРНО-КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ

Для проверки применимости аналитических выражений было проведено сравнение результатов, полученных в результате молекулярно-кинетической теории (МКТ) и метода молекулярной динамики (ММД).

Рассмотрен случай, когда газы находятся в степени ультраразреженности. Согласно молекулярно-кинетической теории, при таком состоянии молекулы не взаимодействуют друг с другом. Тогда для расчета потока, попадающего в область низкого давления, справедливо следующее равенство:

$$J_{t1} - J_{t2} = J_{out},$$

где расшифровка символов аналогична рис. 1.

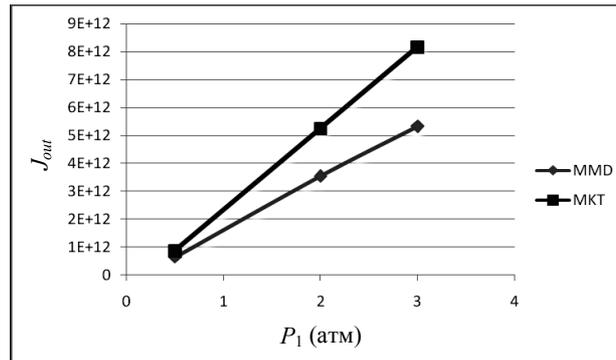


Рис. 5. Зависимость прямого потока  $J_{out}$  от давления в резервуаре  $P_1$ . Давление в резервуаре № 2 оставалось неизменным  $P_2 = 0,2$  атм. Длина наноканала  $L = 5000$  Å.  $Kn = 83,6 \dots 13,9$

Если посмотреть на сравнение результатов для обеих теорий (рис. 5), то можно увидеть незначительное отклонение на более высоком уровне разреженности при давлении ниже  $P = 0,5$  атм, но при увеличении давления возросшее количество атомов влечет за собой увеличение шанса на столкновения атомов между собой, что приводит к отклонениям результатов.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исходя из результатов, полученных в результате моделирования потоков методом молекулярной динамики, можно сказать, что этот метод полностью учитывает взаимодействие молекул между собой.

Согласно результатам, при увеличении длины канала поток уменьшается нелинейно. При этом форма графика напоминает зависимость расхода жидкости от длины трубы в законе Пуазейля.

При увеличении давления в области его высокого значения (с фиксированным давлением в другой области) поток  $J_{out}$  увеличивается, но при обратных условиях он уменьшается из-за возрастания встречного суммарного импульса молекул.

Оперируя различными параметрами, метод молекулярной динамики (ММД) позволяет с высокой точностью определить наиболее выгодные условия для переноса целевого газа в целевую емкость.

Достоверность результатов обусловлена сходимостью с результатами, полученными в рамках молекулярно-кинетической теории (МКТ) в условиях ультраразреженности.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Golovnev I.F., Ozhgibesov M.S., Fomin V.M. Molecular-dynamic study of a gas-dynamic flow in nanochannels // 13th International Conference on the Methods of Aerophysical Research, 5–10 February, 2007, Novosibirsk, Russia: Proceedings. – Novosibirsk: Parallel Publ., 2007. – Pt. 5. – P. 57–61.
2. Modeling of the gas dynamic process during the deposition of nanolayers on the surface of submicrometer channels of porous solids / I.F. Golovnev, M.S. Ozhgibesov, V.M. Fomin, B.M. Kuchumov // ESC Transactions. – 2009. – Vol. 25, iss. 8, pt. 1: EuroCVD 17/CVD 17. – P. 357–363. – doi: 10.1149/1.3207613.
3. Ожгибесов Д.С., Головнев И.Ф., Фомин В.М. Исследование газодинамических потоков гелия в наноканалах и влияния учета столкновений атомов // Научный вестник НГТУ. – 2013. – № 2 (51). – С. 130–135.
4. Rafii-Tabar H. Computational modeling of thermo-mechanical and transport properties of carbon nanotubes // Physics Reports. – 2004. – Vol. 390, iss. 4–5. – P. 235–452. – doi:10.1016/j.physrep.2003.10.012.
5. Запорожцова И.В., Лебедев Н.Г. Механизмы заполнения углеродных однослойных нанотрубок атомарным водородом // Химическая физика. – 2006. – Т. 25, № 5. – С. 91–96.
6. Karniadakis G., Beskok A., Aluru N. Simple Fluids in Nanochannels // Microflows and nanoflows: fundamentals and simulation. – New York: Springer-Verlag, 2005. – P. 365–401. – (Interdisciplinary Applied Mathematics; vol. 29).
7. Adsorption phenomena in the transport of a colloidal particle through a nanochannel containing a partially wetting fluid / G. Drazer, J. Koplik, A. Acrivos, B. Khusid // Physical Review Letters. – 2002. – Vol. 89, iss. 24. – Art. 244501. – P. 1–4. – doi: 10.1103/PhysRevLett.89.244501.
8. Han Y.-L., Muntz E.P., Alexeenko A., Young M. Experimental and computational studies of temperature gradient-driven molecular transport in gas flows through nano/micro-scale channels // Nanoscale and Microscale Thermophysical Engineering. – 2007. – Vol. 11, iss. 1–2. – P. 151–175. – doi:10.1080/15567260701337209.
9. Knudsen compressor as a micro and macroscale vacuum pump without moving parts or fluids / S.E. Vargo, E.P. Muntz, G.R. Shiflett, W.C. Tang // Journal of Vacuum Science & Technology A. – 1999. – Vol. 17, iss. 4. – P. 2308–2313. – doi: 10.1116/1.581765.
10. Sharipov F., Kozak D.V. Rarefied gas flow through a thin slit at an arbitrary pressure ratio // European Journal of Mechanics – B/Fluids. – 2011. – Vol. 30, iss. 5. – P. 543–549. – doi:10.1016/j.euromechflu.2011.05.004.
11. Wang M., Lan X., Li Z. Analyses of gas flows in micro- and nanochannels // International Journal of Heat and Mass Transfer. – 2008. – Vol. 51, iss. 13–14. – P. 3630–3641. – doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2007.10.011.
12. Xu J.L., Zhou Z.Q. Molecular dynamics simulation of liquid argon flow at platinum surfaces // Heat and Mass Transfer. – 2004. – Vol. 40, iss. 11. – P. 859–869. – doi: 10.1007/s00231-003-0483-3.
13. Song X., Chen J.K. A comparative study on poiseuille flow of simple fluids through cylindrical and slit-like nanochannels // International Journal of Heat and Mass Transfer. – 2008. – Vol. 51, iss. 7–8. – P. 1770–1779. – doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2007.07.019.
14. Ozhgibesov M.S., Leu T. S., Cheng C.H. Rarefied gas flow through nanoscale tungsten channels // Journal of Molecular Graphics and Modelling. – 2013. – Vol. 42. – P. 32–38. – doi: 10.1016/j.jmgs.2013.02.013.
15. Hu G., Li D. Multiscale phenomena in microfluidics and nanofluidics // Chemical Engineering Science. 2007. – Vol. 62, iss. 13. – P. 3443–3454. – doi:10.1016/j.ces.2006.11.058.

*Ожгибесов Дмитрий Сергеевич*, лаборант лаборатории № 4 ИТПМ. Аспирант 1-го года обучения в НГТУ. Основное направление научных исследований – численное моделирование движения атомов в наноканалах методом молекулярной динамики. Количество публикаций – 15. E-mail: dozhgibesov@mail.ru

*Головнев Игорь Федорович*, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории № 4 ИТПМ. Основное направление научных исследований – численное моделирование неравновесных явлений в твердых телах методом молекулярной динамики. Количество публикаций – 68. E-mail: golovnev@itam.nsc.ru

*Фомин Василий Михайлович*, Действительный член РАН, директор ИТПМ СО РАН, доктор физико-математических наук, профессор. Основное направление научных исследований – математическое моделирование задач механики сплошных сред и машиностроения. Количество публикаций – 357. E-mail: fomin@itam.nsc.ru

### **The study of colliding helium gas-dynamic flows in the nanochannels and an impact of atom collision assessment\***

D.S. OZHIGIBESOV<sup>1</sup>, I.F. GOLOVNEV<sup>2</sup>, V.M. FOMIN<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Novosibirsk State Technical University, 20 K. Marx Prospekt, Novosibirsk, 630092, Russian Federation; a laboratory assistant. PhD student, aerodynamics department of the Novosibirsk State Technical University. E-mail: dozhgibesov@mail.ru.

<sup>2</sup> Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB RAS, 4/1 Institutskaya Street, Novosibirsk, 630090, Russian Federation; PhD, member of the New York Academy of Sciences, a senior fellow at ITAM laboratory № 4. E-mail: golovnev@itam.nsc.ru.

<sup>3</sup> Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB RAS, 4/1 Institutskaya Street, Novosibirsk, 630090, Russian Federation; D.Sc.(Phys. & Math.), professor. E-mail: fomin@itam.nsc.ru

In the present study colliding helium gas-dynamic flows in nanochannels of a cylindrical shape are investigated. The relevance of this work is due to the rapid development of the energy sector, namely in the field of nuclear fusion, where helium acts as a raw material. This results in developing new ways of extraction and separation of helium through the use of nanotechnologies. The flow of gas from the pressure vessel and a low-pressure reservoir is presented in the paper. The gas temperature in all calculations was assumed to be 300 K. The interaction of helium atoms with each other was described by the Lennard-Jones potential, and a specular reflection model was used to describe the interaction of atoms with the walls of the channel. Studies were performed in the following parameter ranges: pressure was from 0.1 to 5 atmospheres and the channel length was from 100 to 10 Å. Particular attention was paid to the channels with a radius of 110 Å, as it is the size of channels in the membranes commercially available at the moment. The results obtained make it possible to see some dependence of gas flows under various conditions, as well as to partially understand the processes occurring within the channels in a wide range of parameters. The results also provide information about the gas flow rate through circular cross sections, which in turn can be used for its comparison with the Poiseuille flow under certain conditions. To prove the reliability of the results obtained a comparison with the molecular-kinetic theory was made, which revealed the influence of atomic collision assessment on the numerical value of flows in nanochannels.

**Keywords:** helium, gas, flow, nanochannel, cenospheres, method, molecular, dynamics, calculation, modeling, extracting, energy, environment, nanotechnology

#### REFERENCES

1. Golovnev I.F., Ozhgibesov M.S., Fomin V.M. Molecular-dynamic study of a gas-dynamic flow in nanochannels. *13th International Conference on the Methods of Aerophysical Research*, 5–10 February, 2007, Novosibirsk, Russia: Proceedings. Novosibirsk, Parallel Publ., 2007, pt. 5, pp. 57–61.
2. Golovnev I.F., Ozhgibesov M.S., Fomin V.M., Kuchumov B.M. Modeling of the gas dynamic process during the deposition of nanolayers on the surface of submicrometer channels of porous solids. *ESC Transactions*, 2009, vol. 25, iss. 8: EuroCVD 17/CVD 17, pt. 1, pp. 357–363.
3. Ozhgibesov D.S., Golovnev I.F., Fomin V.M. Issledovanie gazodinamicheskikh potokov geliya v nanokanalakh i vliyaniya ucheta stolknovenii atomov [Study of helium flow in nanochannels and accounting impact collisions of atoms]. *Nauchnyi vestnik NGTU – Science Bulletin of Novosibirsk State Technical University*, 2013, no. 2 (51), pp. 130–135.
4. Rafii-Tabar H. Computational modeling of thermo-mechanical and transport properties of carbon nanotubes. *Physics Reports*, 2004, vol. 390, iss. 4-5, pp. 235–452. doi:10.1016/j.physrep.2003.10.012
5. Zaporotskova I.V., Lebedev N.G. Mekhanizmy zapolneniya uglerodnykh odnosloinykh nanotrubok atomarnym vodorodom [Mechanisms for filling carbon nanotubes with atomic hydrogen]. *Khimicheskaya fizika – Russian Journal of Physical Chemistry B*, 2006, vol. 25, no. 5, pp. 91–96. (In Russian)
6. Karniadakis G., Beskok A., Aluru N. Simple Fluids in Nanochannels. *Microflows and nanoflows: fundamentals and simulation*. New York, Springer-Verlag, 2005, pp. 365–401. *Interdisciplinary Applied Mathematics*, vol. 29.
7. Drazer G., Koplik J., Acrivos A., Khusid B. Adsorption phenomena in the transport of a colloidal particle through a nanochannel containing a partially wetting fluid. *Physical Review Letters*, 2002, vol. 89, iss. 24, art. 244501, pp. 1–4. doi: 10.1103/PhysRevLett.89.244501
8. Han Y.-L., Muntz E.P., Alexeenko A., Young M. Experimental and computational studies of temperature gradient-driven molecular transport in gas flows through nano/micro-scale channels. *Nanoscale and Microscale Thermophysical Engineering*, 2007, vol. 11, iss. 1–2, pp. 151–175. doi:10.1080/15567260701337209
9. Vargo S.E., Muntz E.P., Shiflett G.R., Tang W.C. Knudsen compressor as a micro and macroscale vacuum pump without moving parts or fluids. *Journal of Vacuum Science & Technology A*, 1999, vol. 17, iss. 4, pp. 2308–2313. doi: 10.1116/1.581765

---

\* Received 11 August 2014.

10. Sharipov F., Kozak D.V. Rarefied gas flow through a thin slit at an arbitrary pressure ratio. *European Journal of Mechanics – B/Fluids*, 2011, vol. 30, iss. 5, pp. 543–549. doi:10.1016/j.euromechflu.2011.05.004
11. Wang M., Lan X., Li Z. Analyses of gas flows in micro- and nanochannels. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2008, vol. 51, iss. 13–14, pp. 3630–3641. doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2007.10.011
12. Xu J.L., Zhou Z.Q. Molecular dynamics simulation of liquid argon flow at platinum surfaces. *Heat and Mass Transfer*, 2004, vol. 40, iss. 11, pp. 859–869. doi: 10.1007/s00231-003-0483-3
13. Song X., Chen J.K. A comparative study on poiseuille flow of simple fluids through cylindrical and slit-like nanochannels. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2008, vol. 51, iss. 7–8, pp. 1770–1779. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2007.07.019
14. Ozhgibesov M.S., Leu T.S., Cheng C.H. Rarefied gas flow through nanoscale tungsten channels. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 2013, vol. 42, pp. 32–38. doi: 10.1016/j.jmgm.2013.02.013
15. Hu G., Li D. Multiscale phenomena in microfluidics and nanofluidics. *Chemical Engineering Science*, 2007, vol. 62, iss. 13, pp. 3443–3454. doi:10.1016/j.ces.2006.11.058