

آنالیز دقت و پایداری مدل‌های گوناگون تقابل ذره‌ها در روش شبکه بولتزمن چند فازی

میلاذ شیربانی قزوینی، مصطفی ورمزیار*، آرش محمدی

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، تهران، ایران

چکیده: در این مطالعه روش‌های اعمال نیروی بین مولکولی را از زاویه تأثیر این نیروها بر معادله اصلی شبکه بولتزمن و سرعت‌های تعادلی، فیزیکی و جمله نیرو به سه دسته کلی و هفت زیر روش تقسیم بندی شد. مشاهده‌ها نشان می‌دهد پایداری روش‌های معرفی شده به سه عامل نسبت چگالی، زمان آرامش، دمای کاهیده وابسته و مستقل از فیزیک مسئله می‌باشد. نتیجه‌ها بیانگر آن است که در همه ی روش‌ها به جز روش کوپرشتاخ (مدل ۳ - ب) به ازای $\frac{T}{\Delta t} \geq 1.5$ چگالی گاز (چگالی کمینه) از چگالی بحرانی بزرگ‌تر شده و حل واگرا یا به پاسخ غیر فیزیکی همگرا می‌شود. هم چنین، با تغییر دمای کاهیده و به ازای $\frac{T}{T_c} \geq 0.9$ ، چگالی کمینه همه ی روش‌ها به جز روش هی (روش ۲ - د) بیش از چگالی بحرانی شده و حل واگرا یا به پاسخ غیر فیزیکی همگرا می‌شود. این در حالی است که روش هی به ازای $\frac{T}{T_c} \geq 0.7$ همگرا می‌شود. تغییر فیزیک مسئله و انتقال حباب از وسط میدان به کنار دیواره تأثیر چندانی بر روی چگالی تعادلی نمی‌گذارد و از اثر آن می‌توان صرف نظر کرد. این در حالی است که این موضوع می‌تواند بر وابستگی پایداری روش کوپرشتاخ به زمان آرامش تأثیرگذار باشد. سرانجام اثر روش نیرودهی بر مدل سازی زاویه تماس بررسی شد که نتیجه‌ها نشان می‌دهد روش‌های ۲-د و ۱-الف دارای پاسخ به تقریب یکسان بوده و اختلاف زاویه تماس محاسبه شده به کمک این روش‌ها نسبت به روش‌های ۳-الف یا ۳-ب حدود ۲۱٪ می‌باشد.

واژه‌های کلیدی: روش‌های نیرودهی؛ مدل شبه پتانسیلی؛ معادله کارناهان - استارلینگ؛ پایداری؛ دمای کاهیده.

KEYWORDS: Forcing schemes; Pseudo-potential model; Carnahan-Starling equation; Stability; Reduced temperature.

مقدمه

شبکه ی بولتزمن با کمک دیدگاه مزوسکوپی، به یک روش مهم جهت شبیه سازی جریان‌های چند فازی تبدیل شده است [۷]. برخلاف روش‌های سنتی که بر اساس گسسته سازی معادله‌های بقای ماکروسکوپی عمل می‌کنند، روش شبکه بولتزمن بر پایه نظریه جنبشی گازها و با استفاده از تابع توزیع احتمال به مدل سازی رفتار ذره‌ها می‌پردازد. پدیده جدایش فاز در روش شبکه بولتزمن در نتیجه ی مدل سازی تقابل ذره‌ها انجام می‌شود، در نتیجه با وجود

جریان‌های چند فازی به تعدد در فرایندهای صنعتی از جمله صنایع شیمیایی، الکترونیکی و صنایع مولد قدرت دیده می‌شوند [۴-۱]. به خاطر پیچیدگی تعامل ذرات در جریان‌های چند فازی، شبیه سازی رفتار این جریان‌ها از دیدگاه ماکروسکوپی چالش برانگیز است. پاره ای مطالعه‌ها به کمک معادله بولتزمن و البته از دیدگاه کوانتومی به مطالعه پدیده دوفاز پرداخته اند. برخی مطالعه‌ها از دیدگاه کوانتومی به بررسی پدیده دوفاز پرداخته‌اند [۵، ۶]. در سال‌های اخیر روش

* عهده دار مکاتبات

+E-mail: varmazyar.mostafa@srttu.edu

بخش نظری

روش شبکه بولتزمن

روش شبکه بولتزمن دو بعدی بر مبنای تقریب BGK به صورت زیر قابل ارایه می باشد [۱۰]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_s \nabla f + F \cdot \nabla_{\xi} f = -\frac{f - f^{eq}}{\tau} \quad (1)$$

که در آن $f(X, \xi, t)$ تابع توزیع تک ذره ای در مکان فاز (X, ξ) ، $f^{eq}(X, \xi)$ تابع توزیع ماکسول - بولتزمن، ξ سرعت میکروسکوپی، $F(X, t)$ نیروی تقابل ذرات و τ زمان آرامش است. بر این اساس شکل گسسته معادله شبکه بولتزمن به صورت زیر قابل بیان می باشد [۱۳]:

$$f_i(X + e_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(X, t) - \frac{\Delta t}{\tau} [f_i(X, t) - f_i^{eq}(X, t)] + S_i(X, t) \quad (2)$$

که در آن $f_i(X, t)$ تابع توزیع چگالی مربوط به سرعت گسسته شده در جهت i و $S_i(X, t)$ ترم چشمه اضافه شده به معادله بولتزمن استاندارد است. بر اساس آنالیز چاپمن انسکوگ زمان آرامش وابسته به ویسکوزیته سینماتیکی جریان است که با رابطه $v = c_s^2(\tau - 0.5\Delta t)$ بیان می شود. هم چنین تابع توزیع تعادلی $f_i^{eq}(X, t)$ با کمک رابطه ی زیر قابل محاسبه می باشد [۱۳]:

$$f_i^{eq}(X, t) = \omega_i \rho \left(1 + \frac{e_i \cdot u}{c_s^2} + \frac{(e_i \cdot u)^2}{2c_s^4} - \frac{(u \cdot u)^2}{2c_s^2} \right) \quad (3)$$

سرعت گسسته شبکه e_i در معادله های (۲) و (۳)، برای مدل D2Q9 به صورت زیر است [۱۷]:

$$[e_0 \ e_1 \ e_2 \ e_3 \ e_4 \ e_5 \ e_6 \ e_7 \ e_8] = c \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \quad (4)$$

ضریب های وزنی در معادله ی (۳) برابر $\omega_0 = \frac{4}{9}$ ، $\omega_i = \frac{1}{9}$ ($i = 1, 2, 3, 4$)، $\omega_i = \frac{1}{36}$ ($i = 5, 6, 7, 8$) و سرعت صوت شبکه برابر $c_s = \frac{c}{\sqrt{3}}$ برای شبکه D2Q9 می باشد، که در آن c نسبت فاصله ی شبکه به گام زمانی است. در اینجا شبکه مکانی یا Δx بر اساس واحد $l.u$ ، گام زمانی Δt بر اساس $t.s$ و واحد جرم بر اساس $m.u$ در نظر گرفته شده است. در معادله ی (۳) چگالی سیال است که از ممان درجه ی صفرم $\rho = \sum_i f_i$ به دست می آید و سرعت میکروسکوپی سیال برابر $u = \frac{\sum_i f_i e_i}{\rho}$ می باشد.

روش های دیگر عددی، نیازی به پایش سطح مشترک جهت مدل سازی مرز فازها نیست [۸].

به طور کلی در دیدگاه مزوسکوپی برای مدل سازی جدایش فازها، چهار روش گرادیان رنگ، شبه پتانسیلی، انرژی - آزاد و نظری جنبشی استفاده می شود [۹]. در بین این مدل ها روش شبه پتانسیلی، که به روش شن و چن نیز معروف می باشد به دلیل سادگی در مفهوم و کارایی بالای محاسباتی، توجه زیادی را به خود جلب کرده است [۱۰]. هم چنین این روش نسبت به سایر روش ها توانایی مدل سازی بازه ی گسترده تری از نسبت چگالی های گاز به مایع را داراست [۱۱]، گرچه انتقادهایی به خاطر مسائل جریان های بدلی و نبود سازگاری ترمودینامیکی به آن وارد است [۱۲]. بر این اساس پژوهش های بر روی چگونگی اعمال نیروی تقابل ذره ها با هدف اصلاح برخی از این موردها از جمله ناسازگاری ترمودینامیکی صورت پذیرفت [۱۳]. در عمل، در این مدل تقابل ذره های سیال با کمک یک پتانسیل مصنوعی شبیه سازی می شود، و جدایش فاز با اعمال جاذبه ای با برد کوتاه بین فاز های متفاوت انجام می پذیرد. در روش شن و چن، نیروی تقابل ذره ها به طور معمول با یک روش نیرودهی آمیخته شده است. بنابراین دقت و پایداری عددی به نوعی وابسته به روش نیرودهی می باشد [۸]. تاکنون مطالعه هایی در این زمینه صورت پذیرفته است [۱۴-۱۶، ۱۱، ۸]. شایان ذکر است که جامع ترین مطالعه ای که تاکنون انجام پذیرفته مربوط به کار هوانگ [۱۳] می باشد. هوانگ [۱۳] به تازگی پژوهشی روی کارایی روش های گوناگون نیرودهی در مدل شبه پتانسیلی انجام داده است. در این پژوهش تأثیر زمان آرامش τ بر روی دقت مدل سازی قطره (فاز مایع) در وسط میدان مورد مطالعه قرار گرفته است. این مطالعه دارای پنج روش نیرودهی است و بدون توضیحاتی در مورد تأثیر فیزیک مسئله می باشد. همچنین، در مقاله ی هوانگ قطره در وسط میدان و به دور از دیواره مدل شده است. مطالعه حاضر به بررسی مسئله حباب (فاز گاز) در کنار دیواره می پردازد. هم چنین تلاش شده است که دسته بندی دقیق تری، شامل هفت روش می شود، ارایه شود و نتیجه های این روش ها با یکدیگر مقایسه شوند. هم چنین به معرفی پارامترهای مؤثر در پایداری روش های نیرودهی و بررسی محدوده پایداری آن ها پرداخته شده است.

در مطالعه پیش رو، نخست مروری بر روی معادله های شبکه ای بولتزمن صورت می پذیرد و سپس روش های اعمال نیرو را به طور کوتاه بررسی و فرمولاسیون آن ها بیان می شود. سرانجام نتیجه ها بررسی شد و مقایسه ای بین روش ها ارایه خواهد شد.

هم‌چنین c_s^2 از رابطه ی زیر محاسبه می شود [۱۰]:

$$c_s^2 \delta_{\alpha\beta} = \sum_i \omega_i e_{i\alpha} e_{i\beta} \quad (۵)$$

که در آن $\delta_{\alpha\beta}$ دلتای کرانکر می باشد. به عنوان نمونه برای D2Q9 داریم [۱۰]:

$$\sum_{i=0}^8 \omega_i e_{ix} e_{ix} = c_s^2 \quad (۶)$$

همان‌گونه که در مقدمه اشاره شد روش شبکه ی بولتزمن چند فازی تک جزئی دارای چند مدل برای جداسازی فازها می باشد که در این مطالعه به بررسی مدل شبه پتانسیلی شِن و چِن [۲۰-۱۸] پرداخته شده است. در عمل معادله ی حالت گاز کامل به کمک جمله نیروی تقابل ذره‌ها در مدل شِن - چِن تک جزئی چند فازی به معادله حالت غیر ایده آل غیر یکنواخت تبدیل می‌شود. شایان ذکر است که در مطالعه حاضر، کمیت‌های بدون واحد با یکای شبکه ی بولتزمن مقدار دهی می شوند. یکاهای شبکه بولتزمن به صورت μ برای جرم، ts برای زمان، lu برای طول و tu برای دما می‌باشد.

نیرو دهی در مدل شِن و چِن

به طور کلی مشارکت ترم نیرو در روش شبکه بولتزمن به معنای افزودن جمله مازاد S_i به معادله شبکه بولتزمن برای ایفای نقش نیروی حجمی F_α در معادلات ناویر استوکس تراکم ناپذیر می باشد. اثر F_α در معادله ناویر استوکس به صورت زیر منعکس می شود [۱۰]:

$$D_t \rho + \rho \partial_\alpha u_\alpha = 0 \quad (۷)$$

$$\partial_t \rho u_\alpha + \rho u_\beta \partial_\beta u_\alpha = -\partial_\alpha p + \rho \nu \partial_\beta (\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta) + F_\alpha$$

که در آن $D_t = \partial_t + u_\alpha \partial_\alpha$ و همان مشتق مادی است. زیر وند های α, β مشخص کننده ی مختصات x یا y برای موردها دو بعدی است. قرارداد جمع زنی انیشتین نیز اختیار شده است. برای هر دو جریان های تک فازی و چند فازی، رفتار مناسب جمله نیرو در روش شبکه بولتزمن مسئله ی مهمی است. روش های نیرو دهی در این مطالعه به سه دسته ی کلی تقسیم بندی می‌شوند: دسته اول به کارگیری مستقیم ترم نیرو در ترم برخورد را در نظر می گیرد، دسته دوم شامل روش هایی است که اثر جمله نیرو را هم در جمله برخورد و هم در سرعت های درگیر در معادله شبکه بولتزمن لحاظ می‌کند و دسته سوم نیروی تقابل ذره‌ها را تنها در تصحیح سرعت‌های شبکه مؤثر می‌داند. فرمولاسیون روش‌های گوناگون به اختصار در جدول ۲ آورده شده است که در ادامه به تشریح آن پرداخته خواهد شد.

دسته اول

شکل کلی نیرو دهی در روش یک به صورت زیر است [۱۳]:

$$f_i(X + e_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(X, t) = -\frac{\Delta t}{\tau} [f_i(X, t) - f_i^{eq}(X, t)] + S_i \quad (۸)$$

که در آن S_i جمله مربوط به نیروی حجمی می باشد. اولین بار لو [۲۱] در سال ۱۹۹۳ میلادی تأثیر نیروی حجمی را در معادله شبکه بولتزمن افزوده که در این مطالعه با عنوان روش ۱-الف نام گذاری شده است. در این روش تأثیر نیروهای حجمی به صورت زیر در نظر گرفته می شود:

$$S_i = \frac{1}{c_s^2} \omega_i e_i \cdot \vec{F} \quad (۹)$$

در این روش سرعت ماکروسکوپی u^* و سرعت تعادلی u^{eq} با سرعت میکروسکوپی u برابر است $u^*(X, t) = u^{eq}(X, t) = u(X, t)$. این روش از معادله ی اوپلر در مقیاس زمانی \mathcal{E} تبعیت میکند. پارامتر \mathcal{E} عددی بی بعد است که نسبت مسافت آزاد میانگین مولکولی به مقیاس طول فیزیکی است و با عدد نودسون شناخته می شود ($Kn = \frac{\lambda}{L}$). از اثر تغییرهای دمایی و مکانی نیرو بر ممان و چگالی در این روش صرف نظر شده است. در ادامه روش ۱-ب توسط مارتیز [۲۲] و لو [۱۷] ارائه شد. آن‌ها در واقع روشی را برای مشارکت نیرو های حجمی در معادله ی بولتزمن ارائه دادند که برگرفته از معادله ی بولتزمن برای گازهای غیر ایده ال می‌باشد. بر این اساس ترم نیرو به صورت زیر به دست می‌آید:

$$S_i = \omega_i \left(\frac{(e_{i\gamma} - u_\gamma)}{c_s^2} + \frac{e_{i\alpha} u_\alpha e_{i\gamma}}{c_s^4} \right) F_\gamma \quad (۱۰)$$

و سرعت میکروسکوپی از رابطه ی زیر محاسبه می‌شود [۲۲، ۱۷]:

$$\rho u_\alpha = \sum_i f_i e_{i\alpha} \quad (۱۱)$$

دسته دوم

اولین بار در مطالعه لاد و وریبرگ [۲۳] افزون بر جمله برخورد، اثر نیرو بر سرعت‌های دخیل در معادله شبکه بولتزمن نیز لحاظ شد. این روش در مطالعه حاضر به روش ۲ - الف معروف است. آن‌ها پیشنهاد کردند که ترم نیرو به کمک یک سری توانی بر اساس سرعت ذره بسط داده شود. بر این اساس مدل زیر برای جمله نیرو قابل تعریف است:

$$S_i = \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \frac{1}{\rho c_s^2} F_\gamma (e_{i\gamma} - u_\gamma) f_i^{eq} \quad (17)$$

که در آن سرعت به کار رفته در ترم نیرو می‌بایست به صورت زیر محاسبه شود [۲۵]:

$$u_\alpha = \sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_\alpha \Delta t}{2\rho} \quad (18)$$

دسته سوم

این نوع روش‌ها اولین بار توسط شن و چن معرفی شد [۱۸] و بعدها کوپرشتاخ آن را دقیق‌تر شد [۲۶]. این روش بر اساس اعمال جمله نیرو به سرعت‌ها به طور مستقیم و دیدن اثر جانبی آن بر جمله برخورد به طور غیر مستقیم عمل می‌کند. بدون جمله نیرو و پس از گام برخورد ممان ذره‌ی سیال به صورت زیر قابل محاسبه است.

$$\rho u_\alpha = \sum_i f_i e_{i\alpha} \quad (19)$$

از قانون حرکت نیوتن، سرعت تعادلی u^{eq} توسط معادله‌ی زیر به دست می‌آید [۲۶]:

$$u_\alpha^{eq} = u_\alpha + \frac{F_\alpha \tau}{\rho} \quad (20)$$

این رابطه اساس روش ۳- الف را مشخص می‌سازد. این سرعت باید در معادله‌ی (۳) جایگزین شود تا f_i^{eq} به دست آید. در معادله (۷) نیروی تقابل ذره‌ها را می‌توان شامل نیروی داخلی F_{int} و نیروی خارجی F_{ext} در نظر گرفت، که برای سادگی را برابر با صفر در نظر می‌گیریم. سرعت ماکروسکوپی u^* بر اساس مطالعه شن و دوولن [۲۷] به صورت زیر به دست می‌آید:

$$u_\alpha^* = u_\alpha + \frac{F_\alpha \Delta t}{2\rho} \quad (21)$$

به تازگی کوپرشتاخ [۲۶] روش اختلاف دقیق را - که به طور مستقیم از معادله‌ی بولتزمن به دست آمده است - معرفی کرد که در دسته بندی این مطالعه روش ۳- ب نام دارد که در آن جمله نیروی یا همان چشمه از معادله‌ی زیر به دست می‌آید:

$$S_i = f_i^{eq}(\rho, u^{eq} + \Delta u) - f_i^{eq}(\rho, u^{eq}) \quad (22)$$

$$S_i = \omega_i \left(A + B_\gamma \frac{(e_{i\gamma})}{c_s^2} + \frac{C_{\alpha\gamma}}{2c_s^4} (e_{i\alpha} e_{i\gamma} - c_s^2 \delta_{\alpha\gamma}) \right) \quad (12)$$

که در آن سرعت به کار رفته در ترم نیرو از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید [۲۳]:

$$u_\alpha = \sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_\alpha \Delta t}{2\rho} \quad (13)$$

و A ، B_γ و $C_{\alpha\gamma}$ از بسط چپمن انسکگ به دست می‌آیند. روش دیگری که در مطالعه حاضر با عنوان روش ۲-ب معرفی شده است توسط بوییک و گرتید [۲۴] پیشنهاد شد که در آن سرعت به کار رفته در جمله نیرو از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$S_i = \omega_i \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \frac{e_{i\alpha} F_\alpha}{4c_s^2} \quad (15)$$

در ادامه‌ی روش ۲- الف، گو [۱۵] با تحلیل چپمن انسکگ روش جدیدی را معرفی کرد. او معادله‌های نویر استوکس را از روش شبکه‌ی بولتزمن دارای جمله اضافی - که با خطای روش شبکه بولتزمن ارتباط دارد - به دست آورد. وی دریافت که چنین جمله اضافی‌ای تأثیر به‌سزایی روی نتیجه‌های شبکه‌ی بولتزمن با فرض تغییرهای جمله نیرو بر روی زمان و مکان دارد. جمله نیرویی که گو پیشنهاد کرد از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید و روش ۲- ج نام دارد:

$$S_i = \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \omega_i \left(\frac{(e_{i\gamma} - u_\gamma)}{c_s^2} + \frac{e_{i\alpha} u_\alpha e_{i\gamma}}{c_s^4} \right) F_\gamma \quad (16)$$

به عبارت دیگر گو ضریب‌های روش لاد و ووربرگ را از بسط چپمن انسکگ طوری محاسبه نمود که خطای روش شبکه بولتزمن در قیاس با معادله‌های پیوسته نویراستوکس کمینه باشد. شایان ذکر است که در این روش سرعت‌های ماکروسکوپی، تعادلی و مؤثر در جمله نیرو برابر و از معادله‌ی (۱۴) به دست می‌آیند.

روش دیگری که در دسته روش‌های دوم می‌گنجد را، هی [۲۵] معرفی کرد، که ایده‌ی آن ساده است و در دسته بندی این مطالعه روش ۲-د نام دارد. در سمت چپ معادله‌ی (۱) یک جمله نیرو $F \cdot \nabla_\xi f \approx F \cdot \nabla_\xi f^{eq} = -F \cdot \frac{\xi - u}{c_s^2} f^{eq}$ وجود دارد که هی با در نظر گرفتن اثرهای گسسته‌سازی شبکه، فرمول متناظر برای جمله نیروی را بر اساس مرجع [۲۵] به صورت زیر معرفی کرد:

جدول ۱- مروری بر روش‌های نیرودهی در روش شبکه‌ی بولترمن شن و چن.

سرعت ترم نیرو	S_i	جمله اضافی	سرعت ماکروسکوپی u_α^*	سرعت تعادلی u_α^{eq}	روش
ندارد	$S_i = \frac{1}{c_s^2} \omega_i \vec{e}_i \cdot \vec{F}$	بله	$\sum_i f_i e_{i\alpha}$	$\sum_i f_i e_{i\alpha}$	روش ۱- الف
میکروسکوپی	$S_i = \omega_i \left(\frac{(e_{i\gamma} - u_\gamma)}{c_s^2} + \frac{e_{i\alpha} u_\alpha e_{i\gamma}}{c_s^4} \right) F_\gamma$	بله	$\sum_i f_i e_{i\alpha}$	$\sum_i f_i e_{i\alpha}$	روش ۱- ب
ماکروسکوپی	$S_i = \omega_i \left(A + B_\gamma \frac{(e_{i\gamma})}{c_s^2} + \frac{C_{\alpha\gamma}}{2c_s^4} (e_{i\alpha} e_{i\gamma} - c_s^2 \delta_{\alpha\gamma}) \right)$	بله	$\sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_\alpha \Delta t}{2\rho}$	$\sum_i f_i e_{i\alpha}$	روش ۲- الف
ندارد	$S_i = \omega_i \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \frac{e_{i\alpha} F_\alpha}{4c_s^2}$	بله	$\sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_\alpha \Delta t}{2\rho}$	$\sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_\alpha \Delta t}{2\rho}$	روش ۲- ب
ماکروسکوپی تعادلی	$S_i = \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \omega_i \left(\frac{(e_{i\gamma} - u_\gamma)}{c_s^2} + \frac{e_{i\alpha} u_\alpha e_{i\gamma}}{c_s^4} \right) F_\gamma$	بله	$\sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_\alpha \Delta t}{2\rho}$	$\sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_\alpha \Delta t}{2\rho}$	روش ۲- ج
ماکروسکوپی تعادلی	$S_i = \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \frac{1}{\rho c_s^2} F_\gamma (e_{i\gamma} - u_\gamma) f_i^{eq}$	بله	$\sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_\alpha \Delta t}{2\rho}$	$\sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_\alpha \Delta t}{2\rho}$	روش ۲- د
تدارد	ندارد	خیر	$\sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_\alpha \tau}{\rho}$	$\sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_\alpha \Delta t}{\rho}$	روش ۳- الف
تعادلی	$S_i = f_i^{eq} (\rho, u^{eq} + \Delta u) - f_i^{eq} (\rho, u^{eq})$	بله	$\sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_\alpha \Delta t}{2\rho}$	$\sum_i f_i e_{i\alpha}$	روش ۳- ب

که در آن:

$$\Delta u = \frac{F \Delta t}{\rho} \quad (23)$$

در این روش سرعت ماکروسکوپی سیال $u_{\alpha}^* = \sum_i f_i e_{i\alpha}$ و سرعت تعادلی $u_{\alpha}^{eq} = \sum_i f_i e_{i\alpha}$ با هم یکسان نیستند. با توجه به آن که این روش از روش شسن و چن به دست آمده است بنابراین روش کوپرشتاخ در دسته سوم قرار می گیرد.

جدول ۱ مروری بر روش های نیرودهی در روش شبکه‌ی بولتزمن شسن و چن را نشان می دهد. بر این اساس، تنها روشی که نیازی به جمله اضافی در معادله شبکه‌ی بولتزمن ندارد روش ۳-الف می باشد. در روش ۳-ب ترم نیرو به طور مستقل حضور ندارد و در عمل نیرو بر سرعت اثر گذاشته و به نوعی جمله برخورد متأثر از سرعت می باشد. آنچه تا به حال به عنوان روش های گوناگون نیرودهی بیان شد در واقع روش های گوناگون معرفی جمله چشمه S_i در معادله‌ی شبکه‌ی بولتزمن بود که برای ساده تر شدن در بیش تر منابع به عنوان نیرودهی معرفی می شود. در همه این جمله های چشمه یک نیروی F تأثیر دارد که همان گونه که قبلا ذکر شد در جریان های دو فاز بیانگر میزان تقابل ذره ها می باشد.

نیروهای بین ذره ها در مدل شسن و چن تک جزئی چند فاز

در مدل اصلی D2Q9 شسن و چن، نیروی بین ذره ای به صورت زیر مشخص می شود:

$$F_{int}(x, t) = -G \Psi(x, t) \sum_i \omega_i \Psi(x + e_i \Delta t, t) e_i \quad (24)$$

که در آن G پارامتری است که مقاومت نیروی بین ذره ای را کنترل می کند و Ψ پتانسیل متوسط میدان است. همان گونه که در معادله‌ی (۲۴) دیده می شود تقابل بین ذرات تنها به نزدیک ترین همسایه اعمال می شود. در روش شسن و چن (۱۹۹۳ میلادی) [۱۸] Ψ به صورت زیر معرفی شده است:

$$\Psi(\rho) = \rho_0 \left[1 - \exp\left(\frac{-\rho}{\rho_0}\right) \right] \quad (25)$$

که در آن ρ_0 ثابت می باشد. پس از مدتی این مقدار توسط شسن و چن در مطالعه [۱۹] به صورت زیر اصلاح شد:

$$(\rho) = \Psi_0 \left[-\exp\left(\frac{-\rho}{\rho_0}\right) \right] \quad (26)$$

که در آن Ψ_0 و ρ_0 مقدارهای دلخواه و ثابت اند. در عمل پتانسیل (۲۶) بیانگر مدلی است که با فرایند همدم سازگار است. این نیروی بین مولکولی به عنوان نیروی بین ذره ای مدل A شناخته می شود. اگر تبادل با همسایه نزدیک بعدی در محاسبه ها درگیر دخیل شود، مقدار کشش سطحی بدون تغییر نسبت چگالی تنظیم می شود. این نیروی بین ذره ای به صورت زیر مشخص می شود [۱۰]:

$$F_{int}(x, t) = \Psi(x, t) \sum_i \omega_i [G_1 \Psi(x + e_i \Delta t, t) + G_2 \Psi(x + 2e_i \Delta t, t)] e_i \quad (27)$$

که در آن G_1 و G_2 پارامترهای کنترل کننده ی تبادل با نزدیک ترین همسایه و نزدیک ترین همسایه ی بعدی هستند. این به عنوان نیروی بین ذره ای مدل B معرفی می شود.

در مقاله ی حاضر و در قسمت نتیجه های عددی تنها از نیروی بین ذره ای مدل A استفاده می شود. برای مدل A با استفاده از بسط تیلور و آنچه برای گاز ایده آل بیان شد، نیروی بین ذره ای می تواند به یک فشار اضافی تبدیل شود:

$$-\partial p_{\alpha\beta} + \partial_{\beta} (c_s^2 \rho) = F_{\beta} \quad (28)$$

بر این اساس تانسور فشار کل به صورت زیر قابل محاسبه است [۲۸]:

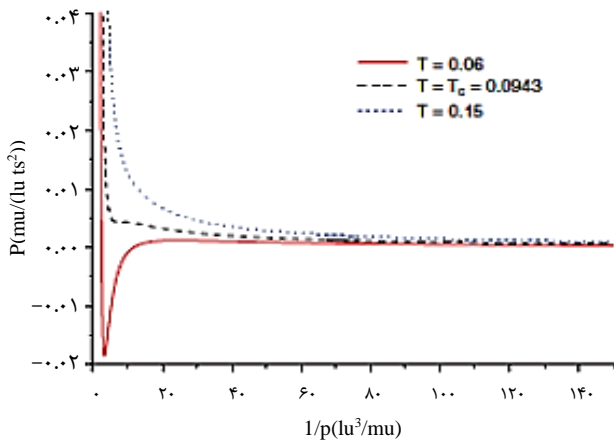
$$p_{\alpha\beta} = [c_s^2 \rho + 1/2 G c_s^2 \Psi^2 + 1/2 G c_s^4 (\Psi \nabla^2 \Psi + 1/2 |\nabla \Psi|^2)] \delta_{\alpha\beta} - 1/2 G c_s^4 \partial_{\alpha} \Psi \partial_{\beta} \Psi \quad (29)$$

اگر بسط تیلور معادله ی (۲۷) تنها تا $O(\Delta t)$ توسعه داده شود، با کمک معادله ی (۲۸) و با فرض نیروی بین ذره ای مدل A ، میتوان به معادله ی تک فاز چند جزئی شسن و چن برای فشار به صورت زیر رسید:

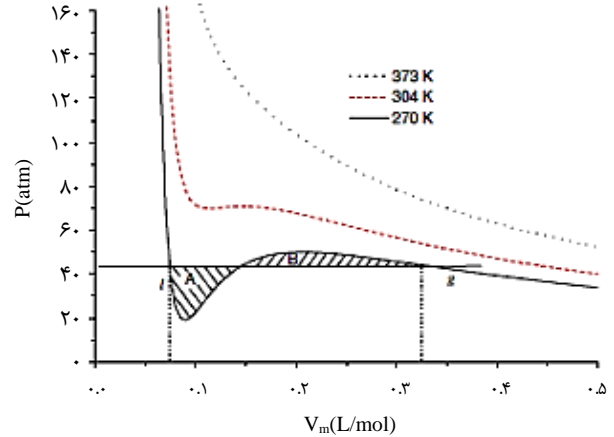
$$p = c_s^2 \rho + \frac{c_s^2 G}{2} \Psi^2(\rho) \quad (30)$$

محاسبه تحلیلی مقدار چگالی گاز و مایع در تعادل فازی معادله ی حالت

محاسبه ی تحلیلی مقدار چگالی گاز و مایع در تعادل فازی از ساختار ماکسول به دست می آید. برای معرفی ساختار ماکسول و محاسبه ی چگالی های فاز بخار و مایع در تعادل فازی بخار - مایع، نیاز است مروری بر معادله حالت کارناهان - استارلینگ صورت پذیرد. جهت مدل سازی نیروهای بین مولکولی می توان از معادله ی حالت



شکل ۲ نمودار $P - \frac{1}{p}$ برای معادله حالت کارناهان اس تارلینگ. ثابت‌ها برابر $R = 1 \text{ lu}^2/(\text{mu ts}^2)$ و $b = 4 \text{ lu}^3/\text{mu}$ ، $a = 1 \text{ lu}/(\text{mu ts}^2)$ و $T = 0.06 \text{ tu}$ ، $T = 0.0943 \text{ tu}$ و $T = 0.15 \text{ tu}$ در سه دمای مختلف رسم شده است [۱۰].



شکل ۱ نمودار $P - V$ برای گاز کربن دی اکسید به همراه خط فشار تعادلی فازها $p_0 = 44.8 \text{ atm}$ و دمای تعادلی $T = 270 \text{ K}$ در شرایط زیر بحرانی [۱۰].

کارناهان - استارلینگ که در عین سادگی رفتار بسیاری از گاز های واقعی را شبیه سازی می کند استفاده کرد [۱۰]:

$$P = \frac{\rho RT \left(1 + b \frac{\rho}{4} + \left(b \frac{\rho}{4}\right)^2 - \left(b \frac{\rho}{4}\right)^3\right)}{\left(1 - b \frac{\rho}{4}\right)^3} - a \rho^2 \quad (31)$$

که در آن P فشار گاز، V حجم گاز، n تعداد مول، R ثابت جهانی گازها، T دما و a و b مقادیر ثابت وابسته به سیال می باشند. حجم اشغالی توسط یک مول از ماده در دما و فشار مشخص $V_m = \frac{V}{n}$ می باشد. با کمک روابط ترمودینامیک می توان به محاسبه چگالی های فاز گاز و مایع در تعادل فاز گاز - مایع پرداخت.

در نمودار $P - V$ شکل ۱ برای محاسبه چگالی های دوفاز در تعادل فاز گاز - مایع می توان به طور تحلیلی از ساختار ماکسول استفاده کرد. برای این امر در دمای زیر بحرانی یک فشار را در نظر گرفته و با نمودار معادله ی حالت قطع داده می شود، که در سه نقطه آن را قطع می کند. نقطه ی اول فاز مایع است که حجم کمتری دارد (l)، نقطه دوم نسبت غیر فیزیکی ای با معادله ی حالت دارد و نقطه سوم که حجم بیشتری دارد فاز گازی است (g). ساختار ماکسول بیانگر آن است که مساحت قسمتی از نمودار که زیر این خط فشار ثابت می افتد با قسمتی که بالای این خط قرار می گیرد برابر است، یعنی مساحت دو قسمت مشخص شده ی A و B برابرند. بر این اساس رابطه زیر که به قانون مساحت برابر نیز مشهور است به دست می آید [۱۰]:

$$\int_{V_{m,l}}^{V_{m,g}} P dV_m = P_0 (V_{m,g} - V_{m,l}) \quad (32)$$

که در آن P فشار معادله ی حالت و p_0 فشار تعادلی فازها است. استفاده از معادله حالت و ساختار ماکسول برای حل p_0 ، $V_{m,g}$ ، $V_{m,l}$ به طور تحلیلی چالش بر انگیز است. در مرجع [۱۰] روشی ارائه شده است، که در آن به کمک رابطه زیر مقادیر چگالی تعادلی محاسبه می شود.

$$\int P dV_m = RT \ln(V_m - b) + \frac{a}{V_m} \quad (33)$$

پارامترهای معادله حالت کارناهان استارلینگ

آن چه در دمای بحرانی مشخص است آن است که مشتق اول و دوم تابع فشار نسبت به حجم صفر می باشد:

$$\frac{\partial P}{\partial V_m} = 0 \quad (34)$$

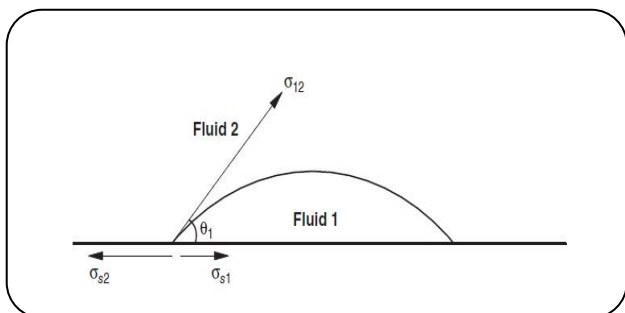
$$\frac{\partial^2 P}{\partial V_m^2} = 0 \quad (35)$$

با کمک دو معادله بالا و با فرض $R = 1 \text{ (lu}^2/(\text{ts}^2\text{tu}))$ می توان مقدار a و b را برای معادله ی حالت کارناهان استارلینگ به صورت زیر محاسبه نمود [۲۹]:

$$a = 0.4963 R^2 \frac{T_c^2}{P_c} = 11 \text{ lu}^5 / (\text{mu ts}^2) \quad (36)$$

$$b = 0.18727 R \frac{T_c}{P_c} = 4 (\text{lu}^2 / \text{mu})$$

که در آن زیر نویس c بیانگر وضعیت بحرانی می باشد.



شکل ۳ - حباب کنار دیواره، نحوه تعریف زاویه ی تماس و راستای نیروی کشش سطحی.

$$\frac{\partial p}{\partial \rho} = c_s^2 + G_c c_s^2 \Psi^2 \frac{\rho_0}{\rho_c^2} = 0 \quad (40)$$

$$\frac{\partial^2 p}{\partial \rho^2} = G_c c_s^2 \left(2\Psi^2 \frac{\rho_0}{\rho_c^2} \right) = 0 \quad (41)$$

باید توجه داشت در رابطه بالا از مشتق گیری زیر استفاده شده است.

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \rho} = \Psi_0 \exp\left(-\frac{\rho_0}{\rho}\right) \frac{\rho_0}{\rho^2} = \Psi \frac{\rho_0}{\rho^2} \quad (42)$$

با حل دو معادله ی (۴۰) و (۴۱) مقادیر G_c و ρ_c به صورت زیر به دست می آید [۱۰]:

$$\rho_c = \rho_0 \quad (43)$$

$$G_c = \frac{-\rho_0}{[\Psi(\rho_c)]^2} \quad (44)$$

شرط مرزی دیواره

در مطالعه‌ی حاضر برای مدل کردن اثر هیدرودینامیکی دیواره در شبکه بولتزن دو بعدی D2Q9 از شرط مرزی پیشنهاد شده توسط ژو و هی در سال ۱۹۹۷ میلادی [۳۲] استفاده شد، که الگوریتم بازگشت نام دارد. برای اعمال شرایط فازها در نزدیکی دیواره از چگالی مصنوعی دیواره استفاده شد که در ادامه به بررسی چگونگی اعمال آن پرداخته خواهد شد.

زاویه تماس بیانگر زاویه مرز بین دو فاز با راستای دیواره می‌باشد. بر این اساس می توان زاویه ی تماس را از معادله‌ی یانگ (۴۵) به صورت زیر به دست آورد [۱۳]:

$$\cos \theta = \frac{\sigma_{s2} - \sigma_{s1}}{\sigma_{12}} \quad (45)$$

که σ_{12} تانسور تنش متقابل بین دوفاز و σ_{s1} و σ_{s2} به ترتیب

همان گونه که در شکل ۲ مشخص است، بالاتر از دمای بحرانی، مرزی مشخص برای بخار و مایع قابل تبیین نیست، ولی در ناحیه‌ای زیر این دما، جدایش فاز امکان پذیر است و حجم مولی‌های متفاوتی از فازهای مایع و گاز می‌توانند در کنار یکدیگر و در یک تک فشار تعادلی وجود داشته باشند.

سازگاری ترمودینامیکی

همان گونه که پیش تر بیان شد، شن و چن معادله ی (۳۰) را برای محاسبه نیروهای بین ذره‌ای ارایه کردند. این معادله رابطه‌ای بین فشار و تابع پتانسیل برقرار می سازد. در ادامه معادله‌ی حالت کارناهان استارلینگ جهت محاسبه فشار بیان شد. برای محاسبه پارامترهای معادله‌ی حالت شن و چن شروطی لازم است که به آن سازگاری ترمودینامیکی گفته می شود. همان گونه که گفته شد، یکی از روش‌های مدل سازی جدایش فاز در شبکه‌ی بولتزن، روش انرژی آزاد است [۱۰]. در روش شن و چن نیز برای ارایه معادله حالت برای مدل سازی پتانسیل بین ذره‌ها، لازم است از مفهوم سازگاری ترمودینامیکی که در روش انرژی آزاد ارایه می‌شود استفاده شود و بر اساس آن تانسور فشار محاسبه شود. سازگاری ترمودینامیکی در اینجا به معنی پوشش حالت تعادل ترمودینامیکی است. بر اساس نظریه رولیسون و ویدموم [۳۰] و/وانس [۳۱] تانسور فشار از عملکرد انرژی آزاد، به صورت زیر به دست می آید:

$$\Psi = \int \left[\Psi(\rho, T) + \frac{k}{2} |\nabla \rho|^2 \right] dr \quad (37)$$

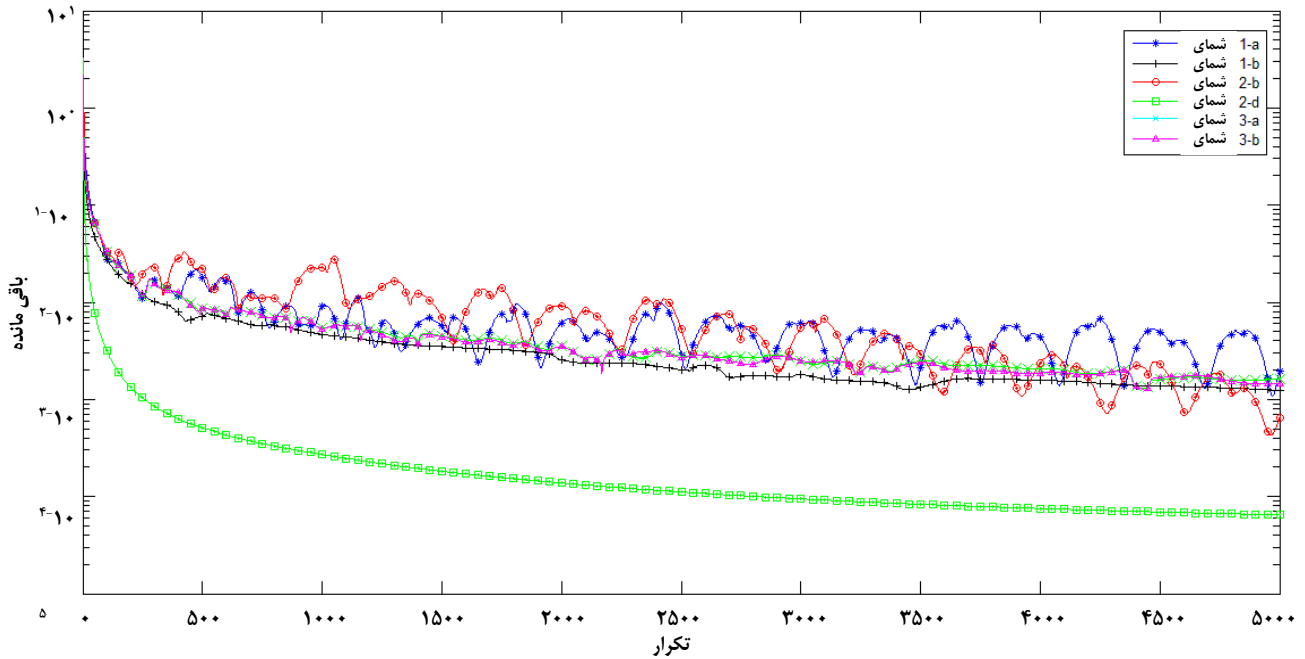
که در آن Ψ چگالی انرژی آزاد در دمای T ، dr نماینده حجم کوچکی از سیال و k یک مقدار ثابت است. پس از ساده سازی رابطه‌های مربوطه، به رابطه ی زیر برای تانسور فشار می‌توان رسید [۱۰]:

$$p_{\alpha\beta} = \left[p - k\rho \nabla^2 \rho - \frac{1}{2} k (\nabla \rho)^2 \right] \delta_{\alpha\beta} + k \partial_{\alpha} \rho \partial_{\beta} \rho \quad (38)$$

با مقایسه معادله‌های (۳۸) و (۲۹) با (۳۰) می‌توان به نتیجه‌های زیر رسید:

$$k = -\frac{1}{2} G_c^4 \Psi \propto \rho \quad (39)$$

سکوپ و ثورن [۲۰] نمونه‌های زیادی را با معادله (۳۰) که همان معادله‌ی شن و چن تک جزئی چند فازی است مورد بحث قرار دادند و برای به‌دست آوردن مقدار بحرانی G_c که همان G_c می‌باشند رابطه‌های زیر را استفاده کردند:



شکل ۴ مقایسه پایداری عددی روش‌های نیرودهی، نمودار باقی مانده بر حسب تعداد تکرار

روش باشد. همان‌گونه که گفته شد مشاهده‌ها بیانگر آن است که در پایداری روش‌ها سه پارامتر زمان آرامش τ ، نسبت چگالی مایع به گاز (ρ_l/ρ_g) ، و دمای کاهیده (نسبت دما به دمای بحرانی (T/T_c)) مؤثر است. به عنوان مثال روش ۱-ب و ۲-ج در نسبت چگالی‌های بیش از ۲ و کمتر از ۴ همگرا می‌شوند و در عمل بیرون از این بازه، واگرایی اتفاق می‌افتد که در مطالعه حاضر با عبارت N/A در نتیجه‌ها مشخص شده است. با توجه به حجم بالای نتایج، روش‌های ۱-الف، ۲-د و ۳-ب به عنوان نماینده دسته روش‌های معرفی شده برای قیاس با یکدیگر انتخاب شده‌اند. افزون بر آن، از نتیجه‌های روش شن و چن اصلی (روش ۳-الف) نیز برای مقایسه‌ی بهتر در برخی تحلیل‌ها استفاده شد. در ادامه این بخش، روند حل به این صورت است که تحلیل با یک مقدار اولیه چگالی برای فاز مایع و گاز آغاز می‌شود. سرانجام نتیجه‌ها در شرایط مشخص می‌بایست به چگالی محاسبه شده به کمک روابط بخش ۵ همگرا شود. نزدیکی مقدار چگالی محاسبه شده به مقدار تحلیلی بخش ۵، بیانگر سازگاری ترمودینامیکی روش عددی و مدل اعمال نیرو است.

نتیجه‌ها و بحث

در این بخش به بررسی رفتار جریان دوفاز ساکن تحت شرایط گوناگون و تأثیر پارامترهای مختلف بر روی پایداری حل پرداخته می‌شود. از معادله حالت کارناهان - استارلینگ جهت تخمین مقدار

بیانگر تنش متقابل فاز یک و دو با سطح جامد می‌باشند. شکل ۳ نمودار شمایی از زاویه تماس را نشان می‌دهد.

زاویه تماس دلخواه می‌تواند به وسیله‌ی اعمال یک مقدار چگالی مصنوعی بر روی دیواره ρ_w مدل سازی شود. نیروی چسبندگی بین فاز گاز و مایع با دیوارهای جامد توسط معادله (۴۶) محاسبه می‌شود [۱۳]:

$$F_{ads}(x, t) = -G\Psi(\rho(x, t)) \sum_a w_a \Psi(\rho_w) s(x + e_a \Delta t, t) e_a \quad (46)$$

تابع $s(x + e_a \Delta t, t)$ برای نقطه‌های سیال برابر صفر و برای نقطه‌های جامد برابر یک می‌باشد. شایان ذکر است که مقدار ρ_w هیچ ارتباطی با چگالی دیوار ندارد و تنها تنظیم کننده مقدار کشش سطحی بین سیال و دیواره در مدل عددی می‌باشد.

پایداری عددی

برای پایش پایداری عددی کمیت باقی‌مانده (Residual) به صورت زیر تعریف شد:

$$Residual = \sum_i \sum_j u_{i,j}^*(t+1) - u_{i,j}^*(t) \quad (47)$$

در عمل رفتار به طور کامل نزولی باقیمانده می‌تواند بیانگر پایداری مناسب و رفتار نوسانی - نزولی باقیمانده می‌تواند بیانگر پایداری ضعیف

جدول ۲ - نسبت چگالی‌های به دست آمده با تغییر τ برای چهار روش انتخابی به ازای $\frac{T}{T_c} = 0.825$ و مقدار تحلیلی نسبت چگالی مایع به گاز برابر $\frac{\rho_l}{\rho_g} = 0.29/0.025$ است.

$\tau/\Delta t$	روش ۱- الف ρ_l/ρ_g	روش ۲- د ρ_l/ρ_g	روش ۳- الف ρ_l/ρ_g	روش ۳- ب ρ_l/ρ_g
۰.۶	N/A	N/A	N/A	۰.۰۲۰۳۴۹ / ۰.۲۹۸۴۲
۰.۷	N/A	N/A	N/A	۰.۰۲۱۹۸۷ / ۰.۲۹۸۱۸
۰.۸	N/A	N/A	N/A	۰.۰۲۲۳۴۳ / ۰.۲۹۷۸۷
۰.۹	N/A	N/A	N/A	۰.۰۲۲۴۳۰ / ۰.۲۹۵۷۱
۱	۰.۰۱۲۴ / ۰.۲۹۵۵	۰.۰۱۸۸ / ۰.۲۹۳۴۱	۰.۰۲۲۴ / ۰.۲۹۷۱۵	۰.۰۲۲۴۸۸ / ۰.۲۹۷۱۵
۲	۰.۰۱۸۴۵۱ / ۰.۲۹۳۷۶	۰.۱۲۰۱۹ / ۰.۲۸۹۸۵ غیر فیزیکی	۰.۱۸۷۶۹ / ۰.۳۰۰۶۱ غیر فیزیکی	۰.۰۲۲۸۴۹ / ۰.۲۹۴۹۳

پاسخ فیزیکی بوده و در شرط $\tau < 1$ و اگر می‌شوند. تحت شرط $\tau > 1$ همه این روش‌ها پایدارند لیکن روش‌های ۲ - د و ۳ - الف دارای جواب غیر فیزیکی می‌باشند که با عبارت غیر فیزیکی در جدول مشخص گردیده است. این درحالی است که روش ۳ - ب بدون قید و شرط بر روی زمان آرامش، پایدار و دارای پاسخ فیزیکی است. هم چنین میزان خطای این روش نیز به نسبت سایر روش‌ها کمینه بوده و تغییر چگالی تعادلی گاز به ازای تغییر τ از ۱ به ۲ برابر ۱۶٪ و با تغییر τ از ۰.۶ تا ۱ برابر ۱۲.۲٪ است.

اثر نسبت چگالی

شکل ۴ مقدار باقیمانده روش‌های مختلف را در وضعیت $\tau = 1$ در ۵۰۰ تکرار اول نشان می‌دهد. همان‌گونه که می‌بینید در این شرایط شیب باقیمانده همه روش‌ها نزولی است. روش ۱- الف ضعیف‌ترین وضعیت همگرایی و روش ۲- د بالاترین سرعت همگرایی را داراست.

تأثیر دمای کاهیده

تأثیر نسبت دما به دمای بحرانی را نمی‌توان به صورت مستقل دید چرا که به نوعی نسبت دما وابسته به نسبت چگالی اولیه می‌باشد. اما تنها برای سنجشی مقایسه‌ای بین روش‌ها، با ثابت فرض کردن پارامترهای موثر دیگر می‌توان اثر این پارامتر را نیز بررسی کرد. جدول (۳) با فرض $\tau = 1$ ، $\frac{\rho_l}{\rho_g} = 0.29/0.025$ و $T_c = 0.3773/4$ به دست آمده است.

فشار بر اساس چگالی و دما استفاده شده است. در گام اول، به بررسی حوزه پایداری روش‌های مختلف نیرو در شرایط گوناگون از جمله تغییر زمان آرامش، نسبت چگالی و دمای کاهیده پرداخته خواهد شد. فیزیک مورد مطالعه در گام اول حباب (فاز گاز) ساکن چسبیده به دیواره می‌باشد. در گام دوم، به قیاس سه حالت مختلف برای جریان دوفاز ساکن پرداخته می‌شود. این سه حالت شامل قطره (فاز مایع) غوطه‌ور داخل فاز گاز، حباب (فاز گاز) غوطه و داخل فاز مایع و حباب چسبیده به دیواره می‌باشند. در پایان به بررسی تأثیر روش اعمال نیرو بر روی زاویه تماس پرداخته می‌شود. ابعاد شبکه‌ی مورد استفاده برابر $200 \text{ lu} \times 200 \text{ lu}$ ، شعاع اولیه حباب برابر 30 lu و مقدار گام زمانی $\Delta t = 1$ است. شعاع اولیه حباب در پایداری روش‌ها تأثیری ندارد [۱۰] لیکن کاهش بیش از حد آن می‌تواند منجر به ناپدید شدن حباب شود.

اثر زمان آرامش

در این قسمت میزان وابستگی نسبت چگالی کمینه و بیشینه (چگالی کمینه همان چگالی فاز گاز و چگالی بیشینه همان چگالی فاز مایع می‌باشد) به زمان آرامش τ تحت شرایط $\left(\frac{T}{T_c} = 0.825, \frac{\rho_l}{\rho_g} = 0.29/0.025\right)$ بحث شده است و تأثیر آن در چهار روش یاد شده مورد بررسی قرار گرفته است. جدول ۲ چگالی‌های تعادلی مایع ρ_l و گاز ρ_g را برای حباب کنار دیواره درون یک محیط مایع نشان می‌دهد. همان‌گونه که دیده می‌شود روش‌های ۱- الف، ۲- د و ۳- الف صرفاً برای زمان آرامش در بازه یک پایدار و دارای

جدول ۳ نسبت چگالی محاسبه شده به ازای تغییر دمای کاهیده $\frac{T}{T_c}$ برای چهار روش (با فرض نسبت چگالی تحلیلی $\frac{\rho_l}{\rho_g} = 0.29/0.025$ و $\tau = 1$).

$\frac{T}{T_c}$	روش ۱- الف ρ_l/ρ_g	روش ۲- د ρ_l/ρ_g	روش ۳- الف ρ_l/ρ_g	روش ۳- ب ρ_l/ρ_g
۰.۶	N/A	۰.۰۰۰۴۸۶۴۳/۰.۳۳۳۲۸ غیر فیزیکی	N/A	N/A
۰.۶۵	N/A	۰.۰۰۹۴۰۹۳/۰.۳۰۷۳۴ غیر فیزیکی	N/A	۰.۰۰۱۷۷۴/۰.۴۱۱۵ غیر فیزیکی
۰.۷	N/A	۰.۰۱۶۱۳۷/۰.۲۹۷۸۶ غیر فیزیکی	۰.۰۰۵۰۵۵۷/۰.۳۷۵۵۳ غیر فیزیکی	۰.۰۰۵۰۵۵۷/۰.۳۷۵۵۳ غیر فیزیکی
۰.۷۵	N/A	۰.۰۱۷۷۴۷/۰.۲۹۵۳۹ غیر فیزیکی	۰.۰۱۰۴۱۱/۰.۳۳۸۰۴ غیر فیزیکی	۰.۰۰۸۱۷۳۵/۰.۳۶۰۷۹ غیر فیزیکی
۰.۸	N/A	۰.۱۸۵۲۵/۰.۲۹۳۹۴ غیر فیزیکی	۰.۰۱۷۶۴۸/۰.۳۳۰۶۳ غیر فیزیکی	۰.۰۱۷۴/۰.۳۱۶۲۴ غیر فیزیکی
۰.۸۵	N/A	۰.۰۱۹۱۹۹/۰.۲۹۲۹۷ غیر فیزیکی	۰.۰۲۷۲۱۱/۰.۲۹۹۳۵ غیر فیزیکی	۰.۰۳۲۴۳۸/۰.۲۷۷۴۵ غیر فیزیکی
۰.۹	N/A	۰.۰۱۹۷۸۶/۰.۲۹۲۲۸ غیر فیزیکی	۰.۱۹۰۵/۰.۲۸۲۲ غیر فیزیکی	۰.۱۹۰۵/۰.۲۸۲۲۰ غیر فیزیکی
۰.۹۵	N/A	۰.۰۲۰۲۹۹/۰.۲۹۱۷۸ غیر فیزیکی	۰.۱۷۴/۰.۲۷۵۱۹ غیر فیزیکی	۰.۱۷۴۰۰۱۱/۰.۲۷۵۱۸۴ غیر فیزیکی
۱	N/A	۰.۲۰۷۴۹/۰.۲۹۱۳۹ غیر فیزیکی	۰.۲۲۹۴۶/۰.۲۸۲۴ غیر فیزیکی	۰.۲۲۹۴۶/۰.۲۷۵۱۸۴ غیر فیزیکی

که در بازه مورد بررسی، روش ۲-د هم در طیف وسیع تری، دارای پاسخ فیزیکی و هم درصد تغییرهای چگالی کم تری را داراست.

تأثیر فیزیک مسئله

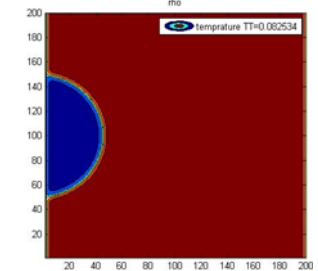
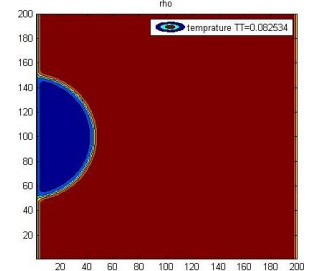
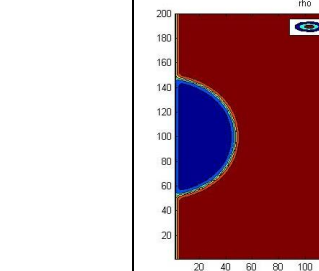
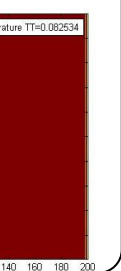
برای درک تاثیر فیزیک مسئله بر چگالی تعادلی، نتیجه‌ها با مطالعه‌ی هوانگ [۱۳]، که در آن فیزیک استفاده شده قطره در وسط میدان گازی بدون دیواره و با مرزهای پرپودیک است، مقایسه خواهد شد. در این بخش پارامترهای مربوط به دو فیزیک جدید محاسبه و قیاس صورت می‌گیرد. یک بار جای فاز گاز و مایع در مطالعه هوانگ جابجا شده و در عمل به مطالعه حباب گاز در وسط میدان مایع با مرزهای پرپودیک پرداخته خواهد شد، و بار دیگر حباب گاز به کنار دیوار منتقل شده و همزمان اثر دیواره بر روی فاز گاز مورد مطالعه قرار خواهد گرفت. در جدول ۴ چگالی‌های تعادلی فاز گاز و مایع، که با کمک روش ۳-ب در شرط $\frac{T}{T_c} = 0.825$ به ازای زمان آرامش و فیزیک‌های گوناگون محاسبه شده، آورده شده است.

مشاهده‌ها نشان دهنده آن است که روش ۱-الف در طیف گسترده‌ای از نسبت چگالی پایدار می‌ماند. اما نتیجه‌های جدول ۳ عکس این موضوع را نشان می‌دهد و بیانگر آن است که روش ۱-الف به ازای همه دماهای کاهیده مندرج در جدول یاد شده، ناپایدار بوده و حل و اگر می‌شود، علت آن است که رفتار مدل‌ها افزون بر نسبت چگالی و زمان آرامش، به دمای کاهیده نیز مرتبط است. در عمل با ثابت گرفتن زمان آرامش و نسبت چگالی، می‌توان بازه‌ی همگرایی روش را بر اساس تغییر دمای کاهیده تعیین کرد. با بررسی جزئی تر می‌توان به این نتیجه دست یافت که روش ۱-الف برای $\tau = 1$ و نسبت چگالی $\frac{\rho_l}{\rho_g} = 0.29/0.025$ تنها در نسبت دمای $\frac{T}{T_c} = 0.825$ پایدار می‌ماند. نتایج مندرج در جدول ۳ نشان می‌دهد که روش ۲-د در قیاس با سایر روش‌ها در رنج وسیع تری از نسبت دما، پاسخ فیزیکی خواهد داشت. هم چنین می‌توان فهمید که تغییر چگالی فاز گاز در روش ۲-د به ازای $0.7 < \frac{T}{T_c} < 0.95$ حدود ۲۲٪ است. این درحالی است که این مقدار در روش ۳-الف حدود ۱۶۰٪ و در روش ۳-ب حدود ۸۶٪ می‌باشد. لذا می‌توان نتیجه گرفت

جدول ۴- مقایسه‌ی فیزیک مسئله برای روش ۳- ب به ازای زمان آرامش‌های گوناگون.
(نسبت چگالی تحلیلی $\frac{\rho_l}{\rho_g} = 0.29/0.025$ بوده و $\frac{T}{T_c} = 0.825$ می‌باشد.)

$\tau/\Delta t$	قطره وسط میدان مقاله حاضر ρ_l/ρ_g	حباب وسط میدان ρ_l/ρ_g	حباب کنار دیواره ρ_l/ρ_g
۰.۶	۰.۲۹۲۹۲/۰.۰۲۲۱۶۲	۰.۲۹۴۶۸/۰.۰۱۹۱۲۹	۰.۲۹۸۴۲/۰.۰۲۰۳۴۹
۰.۷	۰.۲۹۲۱۳/۰.۰۲۲۵۴۷	۰.۲۹۳۸۸/۰.۰۲۰۹۸۳	۰.۲۹۸۱۸/۰.۰۲۱۹۷۸
۰.۸	۰.۲۹۲۳۳/۰.۰۲۲۷۷۹	۰.۲۹۳۴۵/۰.۰۲۱۹۳۴	۰.۲۹۷۸۷/۰.۰۲۲۳۴۳
۰.۹	۰.۲۹۲۴۹/۰.۰۲۲۹۹۹	۰.۲۹۳۱۷/۰.۰۲۲۳۲۹	۰.۲۹۷۵۱/۰.۰۲۲۴۳
۱	۰.۲۹۲۶۳/۰.۰۲۳۱۹۲	۰.۲۹۲۹۷/۰.۰۲۲۵۴۶	۰.۲۹۷۱۵/۰.۰۲۲۴۸۸
۲	۰.۲۹۳۲۹/۰.۰۲۴۳۲۸	۰.۲۹۲۱۸/۰.۰۲۳۲۶۷	۰.۲۹۴۹۳/۰.۰۲۲۸۴۹

جدول ۵- زاویه ی تماس برای حباب کنار دیوار با استفاده از چهار روش نیرودهی برای $\rho_w = 0.12$ و نسبت چگالی $\frac{\rho_l}{\rho_g} = \frac{0.265}{0.038}$

روش	روش ۱- الف	روش ۲- د	روش ۳- الف	روش ۳- ب
زاویه تماس	۵۱.۶	۵۰.۵۳	۶۳.۹۹	۶۳.۹۹
کانتور حباب در میدان				

بیانگر تغییر وابستگی دقت روش ۳- ب به زمان آرامش به ازای فیزیک‌های گوناگون می‌باشد.

تأثیر روش اعمال نیرو بر زاویه تماس

در این قسمت به بررسی روش اعمال نیرو بر زاویه تماس پرداخته خواهد شد. زاویه ی تماس برای حباب کنار دیواره بر اساس زاویه منحنی چگالی میانگین $\rho = \frac{\rho_l + \rho_g}{2}$ با راستای افق تعریف می‌شود. یعنی مرز حباب مکان هندسی نقطه‌هایی است که دارای چگالی میانگین باشند. این زاویه در حالت تعادل برای چهار روش اعمال نیرو در جدول ۵ نمایش داده شده است. نتیجه‌ها بیانگر آن است که روش‌های ۳- الف و ۳- ب پاسخ یکسانی دارند. این در حالی است که نتیجه‌های روش‌های ۱- الف و ۲- د دارای ۲٪ تغییر و روش ۱- الف با دو روش ۳- الف و ۳- ب به اندازه ۱۹.۳٪ تفاوت دارد. این میزان نشان می‌دهد که روش انتخابی اعمال نیرو بر زاویه تماس نیز موثر است.

نتیجه‌های جدول ۴ حاکی از آن است که تحت شرایط به طور کامل یکسان، تغییر فیزیک می‌تواند بر چگالی‌های تعادلی تأثیرگذار باشد. با مقایسه‌ی همه ستون‌های ردیف مربوط به $\tau = 1$ (مقایسه‌ی سطری) نتیجه‌های جالب توجهی حاصل می‌شود. با مقایسه‌ی نتایج قطره وسط میدان مطالعه حاضر با حباب وسط میدان برای $\tau = 1$ می‌توان چنین گفت که با جا به جا کردن مقدار چگالی کمینه و بیشینه (تبدیل قطره به حباب)، مقدار چگالی تعادلی کمینه به اندازه ۲.۷٪ تغییر می‌کند. حال به مقایسه حباب وسط میدان با حباب کنار دیواره برای $\tau = 1$ پرداخته خواهد شد. نتیجه‌ها بیانگر آن است که چگالی تعادلی کمینه ۰.۲٪ تغییر می‌یابد، لذا می‌توان از اثر فیزیک بر چگالی تعادلی صرف نظر کرد. همچنین برای مقایسه‌ی پایداری روش ۳- ب در فیزیک‌های مطرح شده، با تغییر $\tau/\Delta t$ از ۰.۶ تا ۱، چگالی تعادلی گاز برای قطره وسط میدان ۴٪، برای حباب وسط میدان ۱۷٪ و برای حباب کنار دیواره ۱۰٪ تغییر داشته است که این

نتیجه گیری

در این مطالعه به معرفی هفت مدل شبیه ساز نیرو تحت چهارچوب سه دسته کلی پرداخته شد. بررسی ها بیانگر آن است که سه عامل نسبت چگالی حباب به فاز مایع، زمان آرامش، دمای کاهیده بر پایداری حل موثر و از تاثیر فیزیک مسئله می توان صرف نظر کرد. در همه ی روش ها بجز روش ۳- ب به ازای $\frac{T}{T_c} \geq 1.5$ ، چگالی گاز (چگالی کمینه) از چگالی بحرانی بزرگ تر شده و حل واگرا می شود. هم چنین، با تغییر دمای کاهیده برای معادله ی حالت کارناهان استارلینگ، به ازای $\frac{T}{T_c} \geq 0.9$ ، چگالی کمینه همه ی روش ها به جز روش ۲- د بیش از چگالی بحرانی شده و حل واگرا می شود. روش ۲- د به ازای $\frac{T}{T_c} \geq 0.7$ همواره همگرا می شود. روش ۳- الف به ازای $0.75 \leq \frac{T}{T_c} \leq 0.85$ همگرا شده و روش ۳- ب به ازای $0.8 \leq \frac{T}{T_c} \leq 0.85$ پایدار است. تغییر فیزیک مسئله تاثیر چندانی بر چگالی تعادلی ندارد و در مورد روش کوپرشتاخ (۳- ب)، تنها وابستگی روش نیرودهی را به زمان آرامش تحت تاثیر قرار می دهد. همچنین بررسی اثر روش های نیرودهی بر زاویه تماس نشان می دهد که روش انتخابی اعمال نیرو بر زاویه تماس موثر است.

سرانجام با قیاس میان روش های معرفی شده می توان به این نتیجه رسید که دو روش ۲- د و ۳- الف در طیف گسترده تری از نسبت دمای کاهیده و نسبت چگالی و روش کوپرشتاخ (۳- ب) در بازه گسترده تری از زمان آرامش پایدار می باشند.

فهرست نمادها

Cs سرعت صوت (lu/ts)
e_i سرعت منفصل شده (lu/ts)

مراجع

- [1] Brennen C. E., "Fundamentals of Multiphase Flow", Cambridge University Press, (2005).
- [2] Izadpanah A. A., Vafaie Sefti M., Varaminian F., Multi-Component-Multiphase Flash Calculations for Systems Containing Gas Hydrates by Direct Minimization of Gibbs Free Energy, *Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering (IJCCE)*, **25**(3): pp. 27-34 (2006).
- [3] Bahramian A. R., Kalbasi M., CFD Modeling of TiO₂ Nano-Agglomerates Hydrodynamics in a Conical Fluidized Bed Unit with Experimental Validation, *Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering (IJCCE)*, **29**(2): 105-120 (2010).

F	نیرو (مومنتوم) (mu.lu/ts ²)
f	تابع توزیع
f ^{eq}	تابع توزیع تعادلی
G	پارامتر کنترل کننده تقابل
P	فشار (mu/(lu ts ²))
R	ثابت جهانی گاز ها (lu ² /(ts ² tu))
T	دما (tu)
T _c	دمای بحرانی (tu)
g	شتاب جاذبه (/ts ² lu)
m	جرم مولکولی جزء
u	سرعت میدان سیال (lu/ts)
x	مختصات (lu)

نمادهای یونانی

α, β, γ	مولفه های مختصاتی
δ	تابع دلتای کروئکر
v	ویسکوزیته جنبشی (lu ² /ts)
ξ	سرعت میکروسکوپی
ρ	چگالی (mu/lu ²)
τ	زمان آرامش (ts)
Ψ	تابع پتانسیل تعادلی
ω	ضرایب وزنی

تاریخ دریافت: ۱۳۹۶/۱۲/۲ ؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۷/۳/۲۰

- [4] Gorji M., Bozorgmehry Boozarjomehry R., Kazemeini M., CFD Modeling of Gas-Liquid Hydrodynamics in a Stirred Tank Reactor, *Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering (IJCCE)*, **26**(2): 85-96 (2007).
- [5] Nasiri R., Luo K.H., Specificity Switching Pathways in Thermal and Mass Evaporation of Multicomponent Hydrocarbon Droplets: A Mesoscopic Observation, *Scientific Reports*, **7**(1): 1-12 (2017).
- [6] Nasiri R., Revisiting Kinetic Boundary Conditions at the Surface of Fuel Droplet Hydrocarbons: An Atomistic Computational Fluid Dynamics Simulation, *Scientific Reports*, **6**: 1-9 (2016).
- [7] Li Q., Luo K., Kang Q., He Y., Chen Q., Liu Q., Lattice Boltzmann Methods for Multiphase Flow and Phase-Change Heat Transfer, *Progress in Energy and Combustion Science*, **52**: 62-105 (2016).
- [8] Li Q., Luo K., Li X., Forcing Scheme in Pseudopotential Lattice Boltzmann Model for Multiphase Flows, *Physical Review E*, **86**(1): 016709(1)-016709(9), (2012).
- [9] Chen S., Doolen G. D., Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows, *Annual Review of Fluid Mechanics*, **30**(1): 329-364 (1998).
- [10] Huang H., Sukop M., Lu X., "Multiphase Lattice Boltzmann Methods: Theory and Application", John Wiley & Sons, Inc., (2015).
- [11] Huang H., Li Z., Liu S., Lu X.Y., Shan-and-Chen-Type Multiphase Lattice Boltzmann Study of Viscous Coupling Effects for Two - Phase Flow in Porous Media, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **61**(3): 341-354 (2009).
- [12] He X., Doolen G.D., Thermodynamic Foundations of Kinetic Theory and Lattice Boltzmann Models for Multiphase Flows, *Journal of Statistical Physics*, **107**(1): 309-328 (2002).
- [13] Huang H., Krafczyk M., Lu X., Forcing Term in Single-Phase and Shan-Chen-Type Multiphase Lattice Boltzmann Models, *Physical Review E*, **84**(4): 046710(1)-046710(15), 10/25, (2011).
- [14] He X., Chen S., Zhang R., [A Lattice Boltzmann Scheme for Incompressible Multiphase Flow and Its Application in Simulation of Rayleigh–Taylor Instability](#), *Journal of Computational Physics*, **152**(2): 642-663 (1999).
- [15] Guo Z., Zheng C., Shi B., [Discrete Lattice Effects on the Forcing Term in the Lattice Boltzmann Method](#), *Physical Review E*, **65**(4): 046308-046314 (2002).
- [16] Sun K., Wang T., Jia M., Xiao G., Evaluation of Force Implementation in Pseudopotential-Based Multiphase Lattice Boltzmann Models, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **391**(15): 3895-3907 (2012).
- [17] Luo L.-S., [Unified Theory of Lattice Boltzmann Models for Nonideal Gases](#), *Physical Review Letters*, **81**(8): 1618-1621 (1998).
- [18] Shan X., Chen H., [Lattice Boltzmann Model for Simulating Flows With Multiple Phases and Components](#), *Physical Review E*, **47**(3): 1815-1819 (1993).

- [19] Shan X., Chen H., [Simulation of Nonideal Gases and Liquid-Gas Phase Transitions by the Lattice Boltzmann Equation](#), *Physical Review E*, **49**(4): 2941-2948 (1994).
- [20] Sukop M., Thorne, D.T. Jr., [Lattice Boltzmann Modeling](#), Springer, (2006).
- [21] Luo L.-S., [Lattice-Gas Automata and Lattice Boltzmann Equations for Two-Dimensional Hydrodynamics](#), **54**(10): 5220 (1993).
- [22] Martys N.S., Shan X., Chen H., [Evaluation of the External Force Term in the Discrete Boltzmann Equation](#), *Physical Review E*, **58**(5): 6855-6857 (1998).
- [23] Ladd A., Verberg R., [Lattice-Boltzmann Simulations of Particle-Fluid Suspensions](#), *Journal of Statistical Physics*, **104**(5-6): 1191-1251 (2001).
- [24] Buick J., Greated C., [Gravity in a Lattice Boltzmann Model](#), *Physical Review E*, **61**(5): 5307-5320 (2000).
- [25] He X., Shan X., Doolen G.D., [Discrete Boltzmann Equation Model for Nonideal Gases](#), *Physical Review E*, **57**(1): R13-R16 (1998).
- [26] Kupershtokh A., Medvedev D., Karpov D., [On Equations of State in a Lattice Boltzmann Method](#), *Computers & Mathematics with Applications*, **58**(5): 965-974 (2009).
- [27] Shan X., Doolen G., [Multicomponent Lattice-Boltzmann Model with Interparticle Interaction](#), *Journal of Statistical Physics*, **81**(1): 379-393 (1995).
- [28] Benzi R., Biferale L., Sbragaglia M., Succi S., Toschi F., [Mesoscopic Modeling of a Two-Phase Flow in the Presence of Boundaries: the Contact Angle](#), *Physical Review E*, **74**(2): 021509-021523 (2006).
- [29] Seyyed Meysam Khatoonabadi M.A., [Comparison and Development of Multiphase Pseudo-Potential Model for Various Equations of State](#), *MME*, **15**(12): 376-386 (2015). [Full paper in Persian]
- [30] Rowlinson J., Widom B., "Molecular Theory of Capillarity, International Series of Monographs on Chemistry", Clarendon: Oxford, UK, (1982).
- [31] Evans R., [The Nature of the Liquid-Vapour Interface and other Topics in the Statistical Mechanics of Non-Uniform, Classical Fluids](#), *Advances in Physics*, **28**(2): 143-200 (1979).
- [32] He X., Zou Q., Luo L.-S., Dembo M., [Analytic Solutions of Simple Flows and Analysis of Nonslip Boundary Conditions for the Lattice Boltzmann BGK Model](#), *Journal of Statistical Physics*, **87**(1): 115-136 (1997).