

# بررسی دقت و پایداری یک مدل بهبودیافته اعمال نیروی بین مولکولی در روش شان و چن برای شبیه‌سازی حباب ساکن واقع در یک میدان دوفازی

راحله شریفی، مصطفی ورمزیار<sup>\*,\*\*</sup>

گروه حرارت و سیالات، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، تهران

**چکیده:** این مطالعه به بررسی دقت و پایداری یک مدل بهبود یافته اعمال نیروی بین مولکولی در کنار روش‌های ادغام این نیرو و معادله‌های حالت گوناگون می‌پردازد. برای ارزیابی این مدل از هشت روش نیرودهی و پنج معادله حالت شان-چن، کارنهان-استارلینگ، پنگ-راینسون، و اندروالس و سواو-ردلیچ-وانگ استفاده شد. تأثیر زمان آسایش و دمای کاهیده بر دقت، بازه پایداری و میزان تولید سرعت‌های جعلی حباب مورد بررسی قرار گرفت. در بین مدل‌های ادغام نیرویی روش اختلاف دقیق در کنار روش اعمال نیروی بهبود یافته و همچنین معادله حالت کارنهان-استارلینگ بهترین دقت و بازه پایداری را دارا می‌باشد. نتیجه‌ها نشان می‌دهد که این ترکیب کم‌ترین میزان سرعت‌های جعلی را در میدان ایجاد می‌کند. میزان خطا در مدل بهبود یافته در مقایسه با مدل‌های بین مولکولی موجود به میزان چشمگیری کاهش یافته است، کم‌ترین میزان خطای مدل بهبود یافته در کنار روش ادغام نیرویی اختلاف دقیق و معادله حالت کارنهان-استارلینگ اتفاق می‌افتد که برابر  $0/4\%$  می‌باشد. این در حالی است که این خطا در شرایط همانند برای مدل نیرویی بین مولکولی برابر  $3/6\%$  است. در زمان‌های آسایش گوناگون، هم‌زمان بیش‌ترین بازه پایداری و کم‌ترین خطا مربوط به روش اختلاف دقیق می‌باشد. این روش بهترین عملکرد را در بازه زمان آسایش  $0/8$  تا  $1$  دارد. کم‌ترین خطای این روش برابر  $1/8\%$  است که در کنار معادله حالت کارنهان-استارلینگ و در زمان آسایش  $0/8$  و دمای کاهیده  $0/54$  اتفاق می‌افتد. با مقایسه تغییرهای سرعت‌های جعلی روش‌های معرفی شده در بازه زمان آسایش  $0/57$  تا  $2$  مشخص شد که سرعت‌های جعلی همواره با کاهش دمای کاهیده افزایش پیدا می‌کنند.

**واژگان کلیدی:** شبکه بولتزمن، روش شان و چن، مدل‌های نیروی بین مولکولی، روش‌های ادغام نیرویی، معادله حالت غیر ایده‌آل، تابع شبه پتانسیل، زمان آسایش، شبیه‌سازی حباب ساکن.

**KEYWORDS:** Lattice Boltzmann, Shan and Chen method, Inter-particle force models, Non-ideal equation of state, Relaxation time, Incorporating force methods, Pseudopotential, Simulation stationary bubble.

## مقدمه

به تازگی مطالعه بر روی مدل سازی جریان های دوفازی به دلیل کاربرد گسترده آن در بهینه سازی میکرو میدل های گرمایی، صنایع نفت و گاز، تهویه مطبوع، توربین های بخار، بویلر های نیروگاهی، رفتار آب و خاک، پدیده های رطوبت سطح، عملکرد سلول سوختی، راکتورها و سینی های غربالی مورد توجه ویژه قرار گرفته است [۶-۱]، این پدیده در بسیاری از فرایندهای صنعتی از جمله صنایع شیمیایی، الکترونیکی و صنایع مولد قدرت دیده می شود [۷-۱۰]. امروزه استفاده از روش های عددی در مقابل روش های آزمایشگاهی به دلیل تأثیر پارامترهای گوناگون فیزیکی، هزینه های بالای تجهیزات آزمایشگاهی و محدودیت استفاده از دستگاه های اندازه گیری در کاربردهای مهندسی افزایش یافته است [۱۱]. علم دینامیک سیالات محاسباتی یک ابزار پر قدرت و توانا برای تحلیل رفتار جریان سیال و پدیده های همراه در سامانه های با هندسه ناموزون و معادله های پیچیده می باشد [۱۲]. در دینامیک سیالات محاسباتی کلاسیک، جریان دوفاز به جریانی اطلاق می شود که در آن دو فاز از یک سیال یا دو سیال مخلوط نشدنی با تشکیل یک سطح مشترک از یکدیگر قابل تفکیک باشند. شناسایی این فصل مشترک در محاسبه های عددی کلاسیک با سختی هایی همراه است. این در حالی است که در روش نوین شبکه بولتزمن، بدون صرف هزینه محاسبه ای اضافی می توان موقعیت این سطح مشترک را با دقت خوبی مدل سازی نمود [۹، ۱۰، ۱۳، ۱۴]. این برتری در کنار برتری های هیدرودینامیکی منجر به آن شده است که رویکرد گسترده ای نسبت به شبکه بولتزمن برای مدل سازی جریان های دوفازی به وجود آید. از جمله برتری های هیدرودینامیکی این روش می توان به نبود نیاز به حل معادله پواسون برای محاسبه فشار اشاره کرد [۱۳]. در واقع شبکه بولتزمن بر پایه تئوری جنبشی گازها استوار می باشد و به نوعی از دیدگاه مزوسکوپیک برای شبیه سازی مسئله ها استفاده می کند. همچنین پدیده جدایش فاز در روش شبکه بولتزمن در نتیجه مدل سازی تقابل ذره ها انجام می پذیرد. این موضوع می تواند حجم محاسبه ها را در مسئله های دوفاز و دوجزئی نسبت به مدل های کلاسیک کاهش دهد.

در شبکه بولتزمن برای شبیه سازی جریان های دوفازی چهار مدل گرادیان رنگ [۱۵]، شان و چن [۱۶، ۱۷]، انرژی آزاد [۱۸، ۱۹] و پایش سطح مشترک [۲۰] معرفی شده است. مدل شان و چن استاندارد، با وجود برخی محدودیت ها از جمله وابستگی ضریب کشش سطحی به دمای کاهیده، به دلیل سادگی و توانایی مدل سازی بازه گسترده ای از نسبت چگالی گاز به مایع، در مطالعه های پیشین بسیار مورد استفاده

قرار گرفته است [۲۸-۲۱]. اساس این مدل بر پایه ادغام یک تابع تعامل بین مولکولی یا شبه پتانسیلی با دامنه گسترده در معادله بولتزمن می باشد و جدایش فاز با اعمال جاذبه ای با برد کوتاه بین فازهای متفاوت انجام می شود. نگرانی اصلی در استفاده از این مدل وجود ناسازگاری ترمودینامیکی است که به نوعی تحت تأثیر گسسته سازی شبکه ایجاد می شود. ناسازگاری ترمودینامیکی نشان دهنده نقص در حفظ انرژی مدل دوفاز از جمله شان و چن می باشد [۲۹]. بر این اساس سازگاری ترمودینامیکی به عنوان یک معیار مهم در سنخش دقت مدل های گوناگون جریان های دوفاز در شبکه بولتزمن مطرح است. هی و دولن [۳۰] پیش تر اشاره کردند که برای سازگاری ترمودینامیکی باید  $\rho \propto \psi$  باشد.

نخستین بار شان و چن تابع شبه پتانسیلی را به صورت  $\psi(\rho) = \rho_0 [1 - \exp(-\rho/\rho_0)]$  در نظر گرفتند که  $\rho$  چگالی و  $\rho_0$  ثابت دلخواه می باشد [۱۶]. تابع مورد نظر سازگاری ترمودینامیکی نداشت و پس از مدتی در مطالعه مرجع [۱۷] این تابع به صورت  $\psi = \psi_0 \exp(-\rho_0/\rho)$  اصلاح شد. پس از بررسی این شبه پتانسیل مشخص شد که هر چند سازگاری ترمودینامیکی تابع یاد شده بهتر از تابع پیش است لیکن لازم است از منظر پایداری عددی و کاهش سرعت های جعلی مورد مطالعه و اصلاح قرار گیرد [۳۱]. بر این اساس پژوهش هایی بر روی چگونگی اعمال نیروی تقابل ذره ها با هدف اصلاح برخی از این موارد از جمله ناسازگاری ترمودینامیکی صورت پذیرفت [۳۲].

در روش شان و چن، نیروی تقابل ذره ها به طور معمول با یک روش نیرودهی آمیخته شده است، در نتیجه دقت و پایداری عددی به نوعی وابسته به روش نیرودهی نیز می باشد [۳۳]. تاکنون مطالعه هایی در این زمینه صورت پذیرفته است [۳۵-۳۳، ۱۳، ۹]. از دیگر برتری های مدل شان و چن این است که هر معادله حالت به سادگی با آن ادغام می شود. یوان و شفر [۳۶] در ارتباط با ادغام معادله حالت های گوناگون در روش شان و چن پژوهش کردند. آن ها تمرکز شان را بر نسبت چگالی، جریان های جعلی و بازه پایداری معادله حالت های گوناگون گذاشتند. بر اساس نتیجه های آن ها عملکرد مدل شان و چن مانند بیشترین چگالی، جریان های جعلی و بازه پایداری، به معادله حالت استفاده شده وابسته می باشد. به عنوان نمونه برای معادله حالت واندروالس حل تا نسبت چگالی ۷/۲ پایدار است و پس از آن به دلیل افزایش شدت جریان های جعلی حل ناپایدار می شود. از سوی دیگر استفاده از معادله های حالت پنگ-رایبسون و کارنهان-استارلینگ منجر به آن می شود که محاسبه ها تا نسبت چگالی نزدیک ۱۰۰۰ پایدار بماند.

$$f_i(x + e_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i(x, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)] + \Delta f_i(x, t) \quad (1)$$

که در آن  $f(x, t)$  تابع توزیع ذره با سرعت  $e_i$  در مکان  $x$  و زمان  $t$  می‌باشد. زمان آسایش و  $\Delta f_i(x, t)$  جمله نیروی حجمی یا جمله چشمه مانند نیروی گرانش یا نیروهای الکتریکی است [۳۵].  $f_i^{eq}(x, t)$  تابع توزیع تعادلی می‌باشد که به صورت زیر قابل تعریف است [۱۳]:

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

$\omega_i$  ها ضریب‌های وزنی و  $c_s$  سرعت شبکه می‌باشد. در اینجا برای شبیه‌سازی دو بعدی از مدل D2Q9 استفاده می‌شود که ضریب‌ها وزنی در این مدل به صورت  $\omega_i = 4/9$  ( $i = 0$ )،  $\omega_i = 1/9$  ( $i = 1 - 4$ ) و  $\omega_i = 1/36$  ( $i = 5 - 8$ ) می‌باشند. بردارهای سرعت گسسته شده نیز به صورت زیر تعریف می‌شوند [۱۳]:

$$e_i = \begin{cases} (0, 0), & i = 0 \\ (\pm 1, 0)c, (0, \pm 1)c, & i = 1 - 4 \\ (\pm 1, \pm 1)c, & i = 5 - 8 \end{cases} \quad (3)$$

در اینجا  $c = \delta_x / \delta_t$  است که در آن  $\delta_x$  گام مکانی شبکه و  $\delta_t$  گام زمانی شبکه می‌باشد. مقدارهای گام زمانی و مکانی به‌طور معمول در شبکه بولتزمن برابر واحد در نظر گرفته می‌شود. شبکه مکانی بر اساس واحد  $lu$  و گام زمانی بر اساس  $ts$  و واحد جرم بر اساس  $\mu$  می‌باشند. سرعت صوت شبکه برابر  $c_s = \frac{c}{\sqrt{3}}$  برای شبکه D2Q9 است. گرانیوی سینماتیک به صورت زیر از زمان آسایش به دست می‌آید [۱۳]:

$$v = C_s^2 \left( \tau - \frac{1}{2} \right) \delta_t \quad (4)$$

چگالی و سرعت سیال نیز بر اساس معادله‌های زیر قابل محاسبه هستند [۱۳]:

$$\rho = \sum_i f_i \quad \rho u = \sum_i f_i e_i \quad (5)$$

### مدل‌های نیروی بین مولکولی

در این بخش، نخست مروری بر دو مدل موجود برای نیروی بین مولکولی انجام می‌شود و در آخر مدل بهبودیافته بررسی می‌شود.

#### مدل‌های موجود برای نیروی بین مولکولی

در مدل شان و چن [۱۶] و یوان و شفر [۳۶] نیروی بین مولکولی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$F_{int}(x) = -C_0 \psi(x) g \nabla \psi(x) \quad (6)$$

که  $\psi(x)$  تابع شبه پتانسیل و تابعی از چگالی محلی است و ثابت  $G$

یکی از جامع‌ترین مطالعه‌هایی که تاکنون انجام پذیرفته است مربوط به کار هوانگ و همکاران [۱۳] می‌باشد. هوانگ و همکاران به تازگی پژوهشی روی کارایی روش‌های گوناگون نیرودهی در مدل شان و چن انجام داده‌اند. در این پژوهش تأثیر زمان آسایش  $\tau$  بر روی دقت مدل‌سازی قطره مورد مطالعه قرار گرفته است. در این مطالعه ضمن مروری بر دو مدل نیروی بین مولکولی و پنج مدل ادغام جمله نیرویی و معرفی سه معادله حالت، تنها معادله حالت کارنهان-استارلینگ مورد بررسی قرار گرفته است. در این شبیه‌سازی‌ها قطره در وسط میدان بخار قرار دارد.

در مطالعه جامع دیگری، شیربانی و همکاران [۳۷] رفتار حباب در کنار دیواره را مورد بررسی و تأثیر پارامترهای فیزیکی مسئله از جمله زمان آسایش و دمای کاهیده بر بازه پایداری و دقت شبیه‌سازی را ارزیابی نمودند. همچنین گانگ و چنگ [۱۴] به معرفی یک معادله تازه‌ای برای نیروی بین مولکولی پرداخته‌اند. آن‌ها نشان دادند که مدل معرفی شده دقت بالایی نسبت به مدل‌های دیگر دارد. نتیجه‌های این مطالعه مبتنی بر ارزیابی سه روش نیروی بین مولکولی و سه معادله حالت می‌باشد.

در ادامه کارهای پیشین، این مطالعه به بررسی مسئله حباب (فاز گاز) در وسط میدان بخار می‌پردازد. در این پژوهش از سه روش نیروی بین مولکولی، هشت روش گوناگون ادغام نیرویی و پنج معادله حالت متداول استفاده شد. شایان ذکر است که روش سوم نیروی بین مولکولی، روشی است که توسط گانگ و چنگ پیشنهاد شده است و برای اولین بار در کنار روش‌های ادغام نیرویی ژانگ و چن، لاد و ووربرگ، هی و معادله‌های حالت کارنهان-استارلینگ، ساوا-ردلیچ-وانگ، واندوالس، شان-چن و پنگ-راینسون مورد ارزیابی قرار می‌گیرد. سرانجام تأثیر زمان آسایش  $\tau$  و دمای کاهیده بر دقت، پایداری و میزان سرعت‌های جعلی با به کارگیری ترکیبی از مدل‌های گوناگون بررسی می‌شود.

### بخش نظری

در این بخش نخست توضیح مختصری در مورد روش شبکه بولتزمن ارایه می‌شود. در ادامه دو مدل نیرویی متداول در کنار مدل بهبود یافته به تفصیل مورد بررسی قرار می‌گیرد.

#### روش شبکه بولتزمن

در این روش رفتار ذره‌های میکروسکوپی سیال در قالب تابع توزیع احتمال حضور ذره مدل‌سازی می‌شود. معادله تکامل یافته تابع توزیع ذره بر مبنای تقریب BGK به صورت زیر قابل ارایه می‌باشد [۳۸]:

تازه ارایه کرده‌اند. شکل دیگری از مدل ژانگ و چن به صورت زیر بازنویسی می‌شود:

$$F_{int}(x) = -C_0 g \nabla \psi^2(x) / 2 \quad (۱۳)$$

حال با ترکیب نیرویی معادله (۱۳) و (۶) و استفاده از ضریبی ثابت مدل نیرویی بهبودیافته به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۴]:

$$F_{int}(x) = -\beta c_0 \psi(x) g \nabla \psi(x) - (1-\beta) c_0 g \nabla \psi^2(x) / 2 \quad (۱۴)$$

که  $\beta$  فاکتور وزن و وابسته به نوع معادله حالت استفاده شده است. که در ادامه در مورد این فاکتور توضیح‌های بیش‌تری داده خواهد شد. معادله (۱۴) را می‌توان به صورت زیر گسسته کرد [۱۴]:

$$F_{int}(x) = -\beta \psi(x) \sum_{x'} G(x, x') \psi(x')(x' - x) - \frac{1-\beta}{2} \sum_{x'} G(x, x') \psi^2(x')(x' - x) \quad (۱۵)$$

در ادامه گانگ و چنگ برای  $G(x, x')$  رابطه زیر را ارایه داده‌اند. طبق بررسی‌های انجام شده برای حباب، رابطه زیر بهترین جواب را می‌دهد [۳۶، ۳۷]:

$$G(x, x') = \begin{cases} g_1, & |x' - x| = 0 \\ g_2, & |x' - x| = \sqrt{2} \\ 0, & otherwise \end{cases} \quad (۱۶)$$

که  $g_1 = 2g$  و  $g_2 = g/2$  می‌باشد.

### روش‌های ادغام جمله نیرویی

روش‌های ادغام نیروی بین مولکولی در روش شبکه بولتزمن به دلیل اهمیت زیادش در دقت مدل در دو دهه اخیر علاقه زیادی را به خود جلب نموده است [۴۹-۴۵، ۱۶]. به طور کلی ادغام جمله نیرو در روش شبکه بولتزمن به معنای افزودن جمله  $\Delta f_i(x, t)$  به معادله شبکه بولتزمن برای ایفای نقش نیروی حجمی در معادله ناویر استوکس تراکم ناپذیر می‌باشد. روش‌های ادغام نیرویی را می‌توان به سه دسته کلی تقسیم نمود: روش تغییر سرعت [۱۶]، روش گسسته سازی نیرو [۴۹-۴۶] و روش اختلاف دقیق [۴۵]. در ادامه به صورت مختصر هر روش توضیح داده می‌شود.

#### روش تغییر سرعت (VSM)

این روش نخست توسط شان و چن ارایه شد [۱۶]. در این روش، ادغام جمله نیرویی به وسیله تغییر جمله سرعت  $u$  در هنگام محاسبه تابع توزیع تعادلی تحقق می‌یابد. در واقع سرعت  $u$  در معادله (۲) با  $u^{eq}$  که به صورت زیر می‌باشد، جایگزین می‌شود [۱۶]:

$$u^{eq} = u + \frac{\tau F}{\rho} \delta t \quad (۱۷)$$

قدرت نیروی بین مولکولی را نشان می‌دهد.  $C_0$  نیز به وسیله ساختار شبکه تعیین می‌شود که برای D2Q9 برابر ۶ می‌باشد. معادله حالت سیال متناظر با معادله (۶) برابر است با [۱۴]:

$$p = \rho c_s^2 + \frac{c_0}{2} g [\psi(\rho)]^2 \quad (۷)$$

که می‌توان آن را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$\psi(\rho) = \sqrt{\frac{2(p - \rho c_s^2)}{c_0 g}} \quad (۸)$$

با حل فشار از معادله حالت مشخص شده و جای‌گذاری آن در معادله (۸) تابع شبه پتانسیل به دست می‌آید. بنابراین، یک معادله حالت اختیاری به آسانی می‌تواند از روش معادله (۶) در نیروی بین مولکولی ادغام شود. از این رو معادله‌های حالت گوناگون جمله‌های نیروی بین مولکولی گوناگون را موجب می‌شوند.

برای انجام حل عددی معادله (۶) به صورت زیر گسسته می‌شود [۱۶]:

$$F_{int}(x) = -\psi(x) \sum_{x'} G(x, x') \psi(x')(x' - x) \quad (۹)$$

تابع  $G(x, x')$  نشان‌دهنده قدرت برهمکنش ذره‌های همسایه در سیال می‌باشد. مقدار منفی برای این تابع به معنی نیروی جاذبه است که سیال را به دو فاز با چگالی‌های گوناگون تقسیم می‌کند (فاز مایع و فاز بخار). در ادامه مقادری برای این تابع ارایه می‌شود [۴۲-۴۰]. از سوی دیگر ژانگ و چن [۴۳] راه ساده‌ای را برای ادغام یک معادله حالت اختیاری در مدل‌شان ارایه دادند. نیرو در این مدل به صورت زیر می‌باشد:

$$F_{int}(x) = -\nabla U = -\nabla(p - \rho c_s^2) \quad (۱۰)$$

که  $U = p - \rho c_s^2$  با جای‌گذاری  $p$  از معادله حالت مورد نظر به صورت مستقیم در جمله نیرویی معادله (۱۰) هر معادله حالت اختیاری می‌تواند به سادگی با نیروی بین مولکولی ادغام شود. زنگ و همکاران [۴۴] نیز از این جمله نیروی بین مولکولی در مدل‌شان استفاده می‌کنند. برای انجام حل عددی معادله (۱۰) به صورت زیر گسسته می‌شود [۴۳]:

$$F_{int}(x) = -\frac{1}{c_0} \sum_{x'} \frac{G(x, x')}{g} U(x')(x' - x) \quad (۱۱)$$

با جای‌گذاری مقدار  $U$  و با استفاده از معادله (۸)، رابطه بالا به صورت زیر ساده می‌شود [۴۳]:

$$F_{int}(x) = -\frac{1}{2} \sum_{x'} G(x, x') \psi^2(x')(x' - x) \quad (۱۲)$$

#### مدل بهبودیافته اعمال نیروی بین مولکولی

گانگ و چنگ [۱۴] با ترکیب دو مدل پیشین، یک اسکیم

$$F_i = \omega_i \left( A + B_\gamma \frac{1}{c_s^2} (e_{i\gamma}) + \frac{C_{\alpha\gamma}}{2c_s^4} (e_{i\alpha} e_{i\gamma} - c_s^2 \delta_{\alpha\gamma}) \right) \quad (22)$$

که در آن سرعت میکروسکوپی از معادله (۵) به دست می‌آید و سرعت تعادلی نیز با میکروسکوپی برابر می‌باشد. سرعت به کار رفته در جمله نیرو همان سرعت ماکروسکوپی است و از معادله زیر به دست می‌آید [۵۲]:

$$U = u_\alpha = \sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_\alpha \delta t}{2\rho} \quad (23)$$

و  $A$ ،  $B_\gamma$  و  $C_{\alpha\gamma}$  از بسط چپمن/نسکوگ به دست می‌آیند.

### روش بوییک (Buick) و گریته

این روش توسط بوییک و گریته [۵۳] پیشنهاد شده است. که جمله نیروی در این روش به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$F_i = \omega_i \left( 1 - \frac{1}{2\tau} \right) \frac{e_{i\alpha} F_\alpha}{4c_s^2} \quad (24)$$

سرعت ماکروسکوپی و سرعت تعادلی برابر و به صورت زیر می‌باشد [۵۳]:

$$U = u^{eq} = \sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_\alpha \delta t}{2\rho} \quad (25)$$

### روش گو (Guo) و همکاران

گو و همکاران [۳۴] روش تازه‌ای را در سال ۲۰۰۲ میلادی پیشنهاد دادند. نتیجه‌ها نشان داد که این روش نتیجه‌های بهتری نسبت به سایر روش‌های ارائه شده در دسته گسسته‌سازی نیرو دارد. در این روش جمله نیروی ارائه شده به صورت زیر می‌باشد [۳۴]:

$$F_i = \left( 1 - \frac{1}{2\tau} \right) \omega_i \left[ \frac{(e_{i\gamma} - u_\gamma)}{c_s^2} + \frac{e_{i\alpha} u_\alpha e_{i\gamma}}{c_s^4} \right] F_\gamma \quad (26)$$

در این روش سرعت‌های ماکروسکوپی، تعادلی و به کار رفته در جمله نیرو برابر و به صورت زیر می‌باشند [۳۴]:

$$U = u_\alpha = u^{eq} = \sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_\alpha \delta t}{2\rho} \quad (27)$$

### روش هی (He) و همکاران

هی و همکاران [۴۷] در سال ۱۹۹۸ میلادی جمله نیروی زیر را ارائه نمودند:

$$F_i = \left( 1 - \frac{1}{2\tau} \right) \frac{1}{\rho c_s^2} F_\gamma (e_{i\gamma} - u_\gamma) f_i^{eq} \quad (28)$$

که در اینجا سرعت به کار رفته در جمله نیرو با سرعت تعادلی و ماکروسکوپی برابر است و به صورت زیر محاسبه می‌شود [۴۷]:

$$U = u_\alpha = u^{eq} = \sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_\alpha \delta t}{2\rho} \quad (28)$$

که  $F$  همان نیروی بین مولکولی است. بنابراین، سرعت کل سیال به وسیله میانگین مومنتوم پیش و پس از برخورد به صورت زیر بازنویسی می‌شود [۵۰]:

$$\rho u^{eq} = \rho u + \frac{\delta t}{2} F \quad (18)$$

### روش‌های گسسته سازی نیرو

در این روش‌ها، فرم گسسته شده نیرو به سمت راست معادله (۱) افزوده می‌شود. جمله نیروی در حالت کلی به صورت زیر می‌باشد:

$$\Delta f_i(x, t) = F_i(x, t) \cdot \delta t \quad (19)$$

در اینجا  $F_i(x, t)$  همان شکل گسسته شده جمله نیروی است. روش‌های زیادی به وسیله گروه‌های گوناگون در این دسته ارائه شده است که در ادامه به آن‌ها پرداخته می‌شود.

### روش ژانگ و چن (Zhang)

این روش توسط ژانگ و چن ارائه شده است [۴۳]. که در این روش شکل گسسته شده نیرو به صورت زیر می‌باشد:

$$F_i = \omega_i \frac{\bar{e}_i \bar{F}}{c_s^2} \quad (20)$$

در این روش، سرعت سیال و تابع توزیع تعادلی با معادله‌های (۵) و (۲) حساب می‌شود و سرعت ماکروسکوپی  $U$  و سرعت تعادلی  $u^{eq}$  با سرعت میکروسکوپی  $u$  برابر است  $U(x, t) = u^{eq}(x, t) = u(x, t)$

### روش مارتیز و لو (Luo)

این روش توسط مارتیز [۴۶] و لو [۵۱] ارائه شده است. در این روش، شکل گسسته شده نیرو به صورت زیر می‌باشد:

$$F_i = \omega_i \left[ \frac{1}{c_s^2} (e_{i\gamma} - u_\gamma) + \frac{1}{c_s^4} e_{i\alpha} u_\alpha e_{i\gamma} \right] F_\gamma \quad (21)$$

سرعت میکروسکوپی در اینجا از معادله (۲) حساب می‌شود و مانند حالت پیش سرعت میکروسکوپی، ماکروسکوپی و تعادلی با یکدیگر برابر هستند. و سرعت استفاده شده در جمله نیرو با سرعت میکروسکوپی برابر می‌باشد.

### روش لاد و وریگ (Ladd)

این روش توسط لاد و وریگ [۵۲]. آن‌ها پیشنهاد کردند که جمله نیرو به کمک یک سری توانی بر اساس سرعت ذره بسط داده شود. بر این اساس معادله (۲۲) برای جمله نیرو قابل تعریف است:

جدول ۱ - مروری بر روش‌های نیرودهی در روش شبکه بولتزمن شن و چن

روش	سرعت تعادلی $u_{\alpha}^{eq}$	سرعت ماکروسکوپی $U$	$F_i$	سرعت در ترم نیرویی $F_i$
تغییر سرعت	$\sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_{\alpha} \delta t}{\rho}$	$\sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_{\alpha} \tau}{\rho}$	ندارد	ندارد
ژانگ و چن	$\sum_i f_i e_{i\alpha}$	$\sum_i f_i e_{i\alpha}$	$\omega_i \frac{\vec{e}_i \vec{F}}{c_s^2}$	ندارد
مارتیز و لو	$\sum_i f_i e_{i\alpha}$	$\sum_i f_i e_{i\alpha}$	$\omega_i \left[ \frac{1}{c_s^2} (e_{i\gamma} - u_{\gamma}) + \frac{1}{c_s^4} e_{i\alpha} u_{\alpha} e_{i\gamma} \right] F_{\gamma}$	$\sum_i f_i e_{i\alpha}$
لاد و وربرگ	$\sum_i f_i e_{i\alpha}$	$\sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_{\alpha} \delta t}{2\rho}$	$\omega_i \left( A + B_{\gamma} \frac{1}{c_s^2} (e_{i\gamma}) + \frac{C_{\alpha\gamma}}{2c_s^4} (e_{i\alpha} e_{i\gamma} - c_s^2 \delta_{\alpha\gamma}) \right)$	$\sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_{\alpha} \delta t}{2\rho}$
بویک و گریند	$\sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_{\alpha} \delta t}{2\rho}$	$\sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_{\alpha} \delta t}{2\rho}$	$\omega_i \left( 1 - \frac{1}{2\tau} \right) \frac{e_{i\alpha} F_{\alpha}}{4c_s^2}$	ندارد
گو	$\sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_{\alpha} \delta t}{2\rho}$	$\sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_{\alpha} \delta t}{2\rho}$	$\left( 1 - \frac{1}{2\tau} \right) \omega_i \left[ \frac{(e_{i\gamma} - u_{\gamma})}{c_s^2} + \frac{e_{i\alpha} u_{\alpha} e_{i\gamma}}{c_s^4} \right] F_{\gamma}$	$\sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_{\alpha} \delta t}{2\rho}$
هی	$\sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_{\alpha} \delta t}{2\rho}$	$\sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_{\alpha} \delta t}{2\rho}$	$\left( 1 - \frac{1}{2\tau} \right) \frac{1}{\rho c_s^2} F_{\gamma} (e_{i\gamma} - u_{\gamma}) f_i^{eq}$	$\sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_{\alpha} \delta t}{2\rho}$
اختلاف دقیق	$\sum_i f_i e_{i\alpha}$	$\sum_i f_i e_{i\alpha} + \frac{F_{\alpha} \delta t}{2\rho}$	$f_i^{eq}(\rho, u^{eq} + \Delta u) - f_i^{eq}(\rho, u^{eq})$	$\sum_i f_i e_{i\alpha}$

به اختصار بررسی می‌شوند.

روش اختلاف دقیق (Edm)

روش اختلاف دقیق توسط کوپرشتاخ و مدودف [۴۵] برای ادغام یک جمله نیرویی الکتریکی ارایه شد. این جمله نیرویی به صورت مستقیم و بدون گسسته شدن به سمت راست معادله بولتزمن افزوده می‌شود و به صورت زیر می‌باشد:

$$\Delta f_i(x, t) = f_i^{eq}(\rho, u^{eq} + \Delta u) - f_i^{eq}(\rho, u^{eq}) \quad (29)$$

$$\Delta u = \frac{F \delta t}{\rho} \quad (30)$$

در این روش سرعت ماکروسکوپی سیال  $U = \sum_i f_i e_{i\alpha}$  و سرعت تعادلی  $u^{eq} = \sum_i f_i e_{i\alpha}$  می‌باشند.

مروری بر همه‌ی آن چه در این بخش گذشت به همراه معادله‌های مربوط به سرعت‌های ماکروسکوپی، تعادلی و موثر در جمله نیرو، در جدول ۱ آورده شده است. همان‌گونه که دیده می‌شود تنها روشی که نیازی به جمله فزونی در معادله شبکه بولتزمن ندارد روش تغییر سرعت می‌باشد. در روش کوپرشتاخ جمله نیرو به‌طور مستقل حضور ندارد و در عمل نیرو بر سرعت اثر گذاشته و به نوعی ترم برخورد متاثر از سرعت می‌باشد. در همه ترم‌های نیرویی ادغام شده در معادله بولتزمن یک نیروی  $F$  تأثیر دارد که در جریان‌های دو فاز بیانگر میزان تقابل ذره‌ها می‌باشد.

معادله‌های حالت

در این مطالعه از پنج معادله حالت استفاده شد که در ادامه

معادله حالت شان و چن (SC)

این معادله حالت توسط شان و چن [۱۶] پیشنهاد شده است.

$$p = \frac{1}{3} \rho + \frac{c_0}{2} g \rho_0^2 [1 - \exp(-\rho/\rho_0)]^2 \quad (31)$$

در اینجا  $\rho_0$  برابر یک در نظر گرفته شده است. با استفاده از مشتق اول و دوم معادله (۳۱) نسبت به فشار و صفر قرار دادن چگالی می‌توان نقاط بحرانی معادله حالت شان و چن را به دست آورد که این ویژگی‌های بحرانی به صورت زیر می‌باشند [۱۶]:

$$\rho_c = \rho_0 \ln 2 \quad (32)$$

$$g_c = -\frac{2}{9\rho_c} \quad (33)$$

اندیس  $c$  نشان‌دهنده حالت بحرانی است. برخلاف سایر معادله‌های حالت در این معادله حالت پارامتر دما وجود ندارد. بنابراین دما از معادله  $T = -1/g$  به دست می‌آید و با استفاده از معادله (۳۳) دمای بحرانی برابر می‌شود با  $T_c = 4.5\rho_0$ .

معادله حالت واندروالس (Vdw)

$$p = \frac{\rho RT}{1-b\rho} - a\rho^2 \text{ or } \left( p + \frac{a}{v^2} \right) (V - b) = RT \quad (34)$$

این معادله حالت شناخته شده‌ترین معادله حالت برای گازهای

واقعی می‌باشد. در این معادله حالت  $a$  پارامتر جذب برای توضیح نیروی جاذبه بین مولکول‌ها و  $b$  پارامتر دافعه برای وصف حجم مولکول‌های غیر قابل چشم‌پوشی می‌باشد. ویژگی‌های بحرانی برای معادله حالت واندروالس برابر است با:  $\rho_c = 1/3b$ ,  $p_c = 27/b^2$ ,  $T_c = 8a/27Rb$  و  $R = 1$  و  $b = 2/21$  و  $a = 9/49$  ضریب‌ها می‌باشد. و به صورت دلخواه  $\rho_c = 3/5$  و  $T_c = 4/7$  است.

**معادله حالت پنگ-رایسنون (P-R)**

$$p = \frac{\rho RT}{1-b\rho} - \frac{a\rho^2\alpha(T)}{1+2b\rho-b^2\rho^2} \quad (35)$$

که

$$\alpha(T) = [1 + (0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2)(1 - \sqrt{T/T_c})]^2$$

و  $\omega$  ضریب بی‌مرکزی می‌باشد و بر اساس نوع ماده تحت بررسی تعیین می‌شود که در اینجا ماده ما آب است و این ضریب برای آب برابر است با ۰/۴۴۳. ویژگی‌های بحرانی برای این معادله حالت را می‌توان با استفاده از ضریب‌های،  $a = 0.45724R^2T_c^2/p_c$  و  $b = 0.0778RT_c/p_c$  به دست آورد. برای این معادله حالت پنگ-رایسنون پیچیده‌تر از معادله حالت واندروالس می‌باشد ولی نسبت به واندروالس دقت و پایداری بسیار بالاتری دارد به ویژه برای آب و آمونیاک.

**معادله حالت کارنهان-استارلینگ (C-S)**

$$p = \frac{\rho RT(1+b_4^2 + (b_4^2)^2 - (b_4^2)^3)}{(1-b_4^2)^3} - a\rho^2 \quad (36)$$

که در این معادله حالت ویژگی‌های بحرانی را می‌توان با استفاده از  $a = 0.4963 R^2 T_c^2/p_c$  و  $b = 0.18727RT_c/p_c$  به دست آورد که این ضریب‌ها برابر هستند با:  $\alpha = 1$ ,  $b = 4$  و  $R = 1$ .

**معادله حالت سواو-ردلیج-وانگ (SRK)**

$$p = \frac{\rho RT}{1-b\rho} - \frac{a\rho^2\alpha(T)}{1+b\rho} \quad (37)$$

$$\alpha(T) = [1 + (0.48 + 1.574\omega - 0.176\omega^2) \times (1 - \sqrt{T/T_c})]^2$$

در این معادله حالت نیز ویژگی‌های بحرانی را می‌توان با استفاده از

**نتیجه‌ها و بحث**

در این بخش نخست توضیح مختصری در مورد ساختار ماکسول برای معادله‌های حالت غیر ایده‌آل داده می‌شود و سپس شیوه به دست آوردن چگالی‌های سازگار با قانون ماکسول برای هر معادله حالت به‌منظور ارزیابی‌های آتی بیان می‌شود. عملکرد مدل‌های نیروی بین مولکولی و روش‌های ادغام این نیرو از منظر دقت و پایداری برای هر معادله حالت به ترتیب در بخش‌های بعدی مقایسه می‌شوند. تأثیر زمان آسایش بر عملکرد هر روش بررسی شده است و همچنین برای همه روش‌ها سرعت‌های جعلی رسم شده‌اند.

**نمودار  $p-v$  ساختار ماکسول**

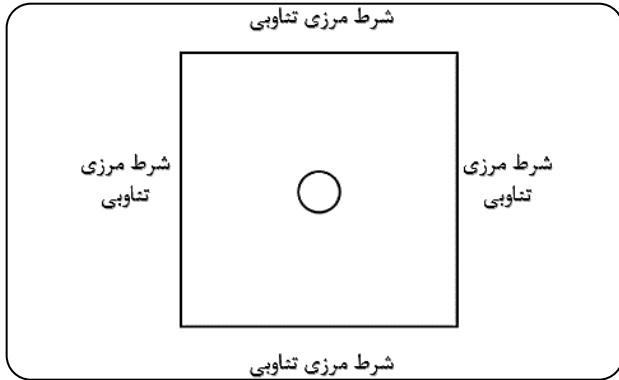
شکل الف نمودار  $p-v$  یک ماده خالص، در یک دمای معین برای تمامی معادله‌های حالت غیر ایده‌آل که در قسمت پیشین توضیح داده شد را نشان می‌دهد. اگر ماده فوق بحرانی باشد ( $T > T_c$ ) نمودار  $p-v$  در دمای ثابت یکنواخت است و هر مقدار از فشار متناظر با یک مقدار از چگالی می‌باشد. در این حالت بین فاز مایع و بخار تفاوتی وجود ندارد. اگر ماده زیر حالت بحرانی باشد ( $T < T_c$ ) نمودار ماکسول دیگر به صورت یکنواخت نمی‌باشد و در یک فشار دو چگالی متفاوت مایع و بخار به وجود می‌آید که این نشان‌دهنده اتفاق افتادن جدایش فاز می‌باشد. چگالی‌ها را می‌توان با استفاده از ساختار ماکسول به دست آورد. ایده اصلی ساختار ماکسول به صورت معادله زیر است [۱۳]:

$$\int_{v_l}^{v_g} p dv = p_s(v_g - v_l) \quad (38)$$

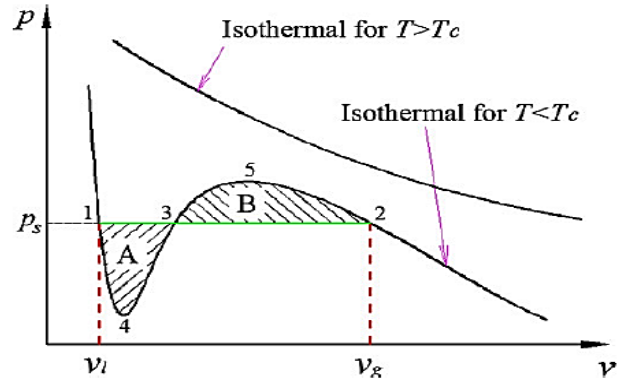
که در اینجا  $v_l$  و  $v_g$  حجم ویژه مایع و بخار اشباع و  $p_s$  فشار اشباع متناظر با دمای  $T$  می‌باشند. معادله (۳۸) هم ارز برابری ناحیه‌های  $A$  و  $B$  در شکل الف است. حل عددی معادله (۳۸) برای یک معادله حالت مشخص و دمای مشخص به این صورت است که نخست از معادله معادله حالت مورد بررسی مقدار متناظر با  $p$  در معادله (۳۸) جای‌گذاری می‌شود و با یک حدس اولیه برای مقدارهای  $v_l$ ,  $v_g$ ,  $p_s$  و روش سعی و خطا، مقدارهای نهایی برای  $v_l$ ,  $v_g$ ,  $p_s$  به دست می‌آید.

**مقایسه نتیجه‌های شبیه‌سازی با نتیجه‌های ساختار ماکسول**

الگوریتم حل عددی استفاده شده در این قسمت، که در شکل ب



شکل ۱ - هندسه مسئله مورد مطالعه و شرایط مرزی اعمالی



شکل الف - نمایش رفتار فوق بحرانی و زیر بحرانی و ساختار ماکسول [۱۴]

نشان داده شده، یک حباب با شعاع ۳۰ در وسط میدان مایع مطابق شکل ۱ در نظر گرفته شده است. شایان ذکر است شعاع اولیه حباب در پایداری روش‌ها تأثیری ندارد [۱۳] ولی کاهش بیش از حد آن می‌تواند منجر به ناپدید شدن حباب شود. همچنین شرط مرزی تناوبی برای مرزها انتخاب شده است. شبکه محاسبه‌ای انتخاب شده ۲۰۱ × ۲۰۱ می‌باشد.

در این مطالعه از دو نوع خطای نسبی و مطلق استفاده شده است که فرمول این خطاها به صورت زیر می‌باشد.  
خطای نسبی:

$$E_R = \frac{|\rho_{LBM} - \rho_{Maxwell}|}{\rho_{Maxwell}}$$

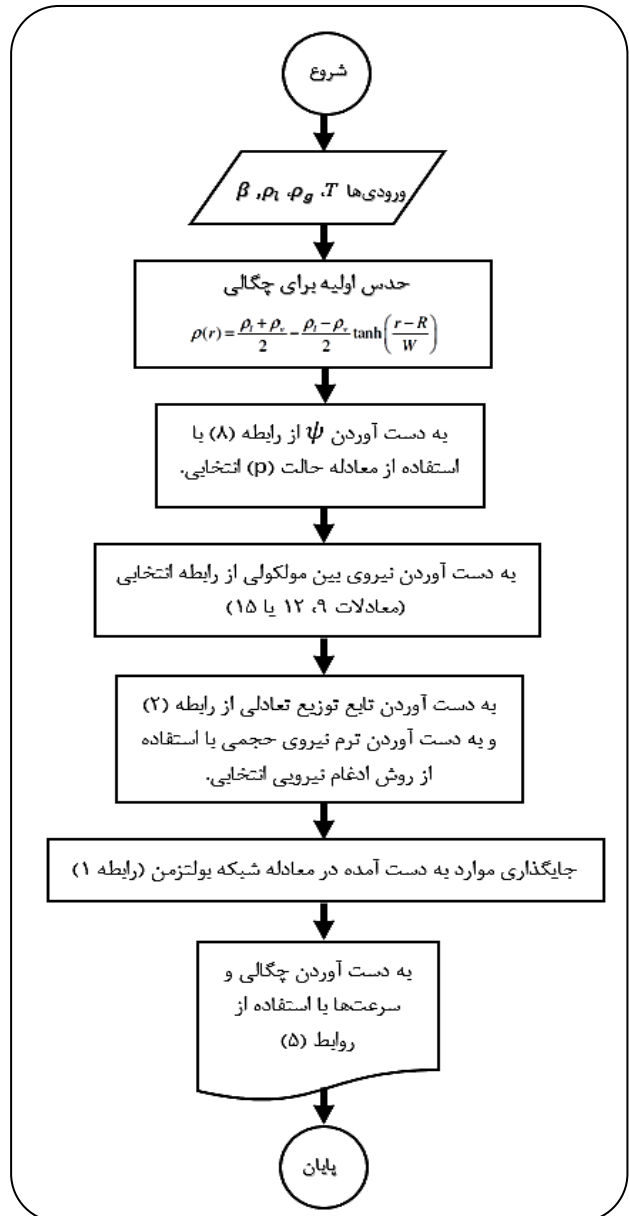
خطای مطلق:

$$E_A = |\rho_{LBM} - \rho_{Maxwell}|$$

که در آن  $\rho_{Maxwell}$  چگالی محاسبه شده از معیار ماکسول توسط معادله (۳۸) و  $\rho_{LBM}$  چگالی محاسبه شده توسط مدل شبکه بولتزمن است. در همه مدل‌های ادغام نیرو از مدل بهبود یافته استفاده شده است. برای قیاس با مدل‌های گذشته، از جمله‌های نیرویی مربوط به دو معادله (۹) و (۱۲) در کنار روش اختلاف دقیق استفاده خواهد شد. مطالعه‌های پیشین نشان می‌دهد که استفاده از روش اختلاف دقیق همراه با معادله‌های (۹) و (۱۲)، کم‌ترین مقدار خطا را برای این دو روش در پی خواهد داشت [۱۳، ۳۷].

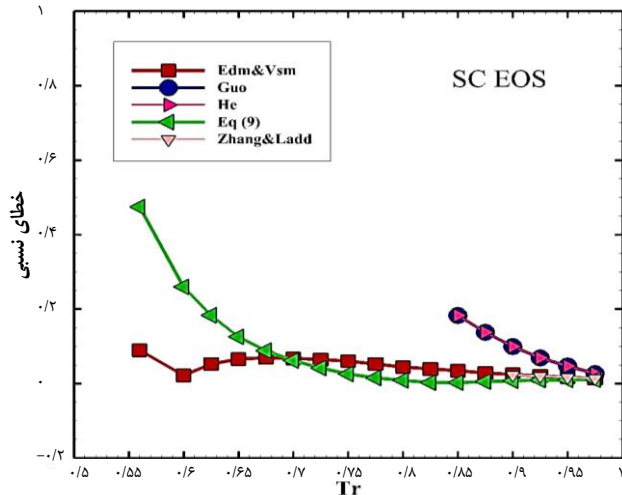
#### مقایسه مدل‌های گوناگون اعمال نیرو بین مولکولی و تعیین ضریب وزنی $\beta$

در اینجا عملکرد سه اسکیم نیرویی معادله‌های (۹)، (۱۲) و (۱۵) بررسی می‌شوند. افزون بر این از همه روش‌های ادغام نیرویی برای مدل بهبود یافته معادله (۱۵) استفاده شده و روش‌ها با استفاده از پنج معادله حالت گوناگون با یکدیگر مقایسه شده‌اند.

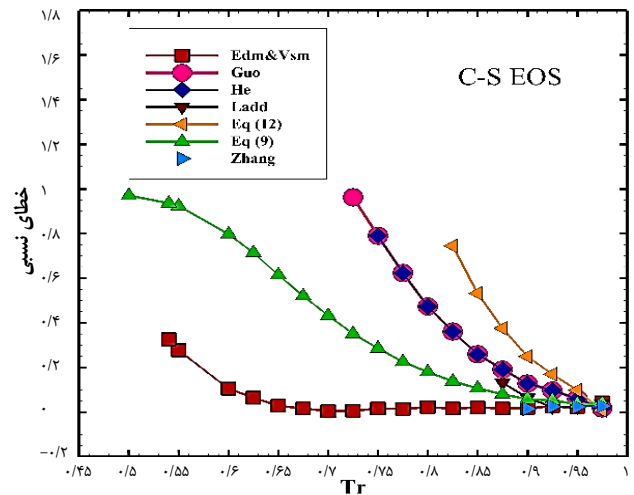


شکل ب- الگوریتم حل عددی استفاده شده

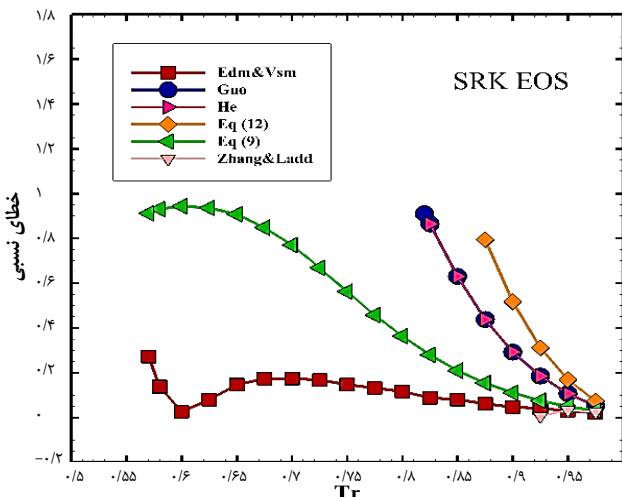




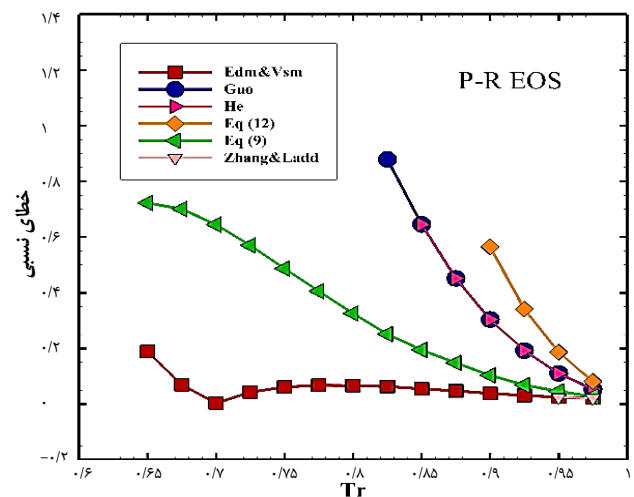
شکل ۴ - نمودارهای خطای نسبی معادله حالت شان-چن برای مدل‌های نیرویی بین مولکولی گوناگون با استفاده از روش‌های گوناگون ادغام این نیرو



شکل ۲ - نمودار خطای نسبی معادله حالت کارنهان-استارلینگ برای مدل‌های نیرویی بین مولکولی گوناگون با استفاده از روش‌های گوناگون ادغام این نیرو



شکل ۵ - نمودارهای خطای نسبی معادله حالت سواو-ردلیچ-وانگ برای مدل‌های نیرویی بین مولکولی گوناگون با استفاده از روش‌های گوناگون ادغام این نیرو



شکل ۳ - نمودارهای خطای نسبی معادله حالت پنگ-رابینسون برای مدل‌های نیرویی بین مولکولی گوناگون با استفاده از روش‌های گوناگون ادغام این نیرو

و روش‌های ادغام نیرویی میزان خطا افزایش می‌یابد. در معادله‌های (۹) و (۱۲) مقدارهای به دست آمده توسط روش شبکه بولتزمن در دماهای کاهیده پایین، از مقدارهای ماکسول دور می‌شوند و میزان خطا به شدت افزایش می‌یابد و در برخی معادله‌های حالت به حدود ۹۰ درصد هم می‌رسد. در جدول ۲ بازه پایداری و بیش‌ترین نسبت چگالی معادله‌های حالت گوناگون در کنار مدل بهبودیافته و روش ادغام اختلاف دقیق با فرض  $\tau = 1$  آرایه شده است. نتیجه‌های این جدول نشان می‌دهد معادله کارنهان-استارلینگ در بین ۵ معادله

ضریب  $\beta$  در معادله (۱۵) برای پنج معادله حالت گوناگون بر اساس تطبیق نتیجه‌های شبیه‌سازی با ساختار ماکسول تعیین شده و در جدول ۲ نشان داده شده است. در تمامی شکل‌های ۲ الی ۶ میزان خطای نسبی چگالی بخار نسبت به مقدارهای ماکسول سنجیده شده است.

همان‌گونه که در این شکل‌ها دیده می‌شود، خطای نسبی همه مدل‌ها با نزدیک شدن به نقطه بحرانی کاهش می‌یابد. همچنین با کاهش دمای کاهیده  $T_r = T/T_c$  در همه مدل‌های نیرویی

جدول ۲ - بررسی بازه پایداری و بیشترین نسبت چگالی معادله‌های حالت گوناگون با استفاده از مدل بهبودیافته و روش ادغام اختلاف دقیق ( $\tau = 1$ ) و مقدار ضریب  $\beta$  معادله‌های حالت

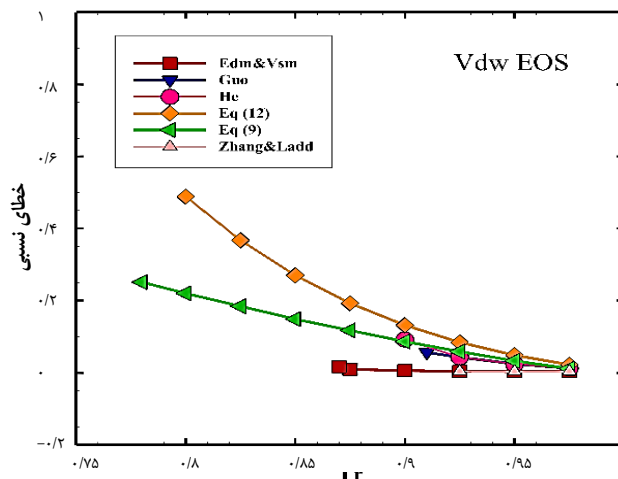
معادله‌های حالت	بیشترین بازه پایداری	بیشترین نسبت چگالی $\rho_l/\rho_g$ عددی	بیشترین نسبت چگالی $\rho_l/\rho_g$ ماکسول	ضریب وزنی $\beta$
شان و چن	$0.56 \leq T_r \leq 0.975$	۳,۳۲۷۲ / ۰,۳۴۱	۳,۳۵۴۱ / ۰,۳۱۳	۰,۸۸۶
واندروالس	$0.87 \leq T_r \leq 0.975$	۶,۱۳۹۶ / ۱,۲۳۳۲	۶,۱۲۸۳ / ۱,۲۵۳۸	۰,۵۵
پنگ-رابینسون	$0.638 \leq T_r \leq 0.975$	۸,۵۹۶۴ / ۰,۲۶۵	۸,۵۰۰۹ / ۰,۲۰۸۸	۱,۱۶
کارنهان-استارلینگ	$0.56 \leq T_r \leq 0.975$	۰,۴۳۶۴ / ۰,۰۰۱۷	۰,۴۳۴۹ / ۰,۰۰۱۲۸	۱,۲۳۶
سواو-ردلیچ-وانگ	$0.57 \leq T_r \leq 0.975$	۸,۸۷۱۱ / ۰,۰۰۷۳۱	۸,۷۸۲۵ / ۰,۰۰۵۷۴	۱,۱۷

دمای کاهیده پایدار نمی‌باشند. برخلاف سایر معادله‌های حالت، در معادله حالت واندوالس بازه پایداری معادله (۱۲) از سایر مدل‌های بین مولکولی بیش‌تر و برابر  $0.8 < T_r < 0.975$  می‌باشد. مشاهده‌ها بیانگر آن است که دقت همه روش‌ها و مدل‌ها از مدل بهبودیافته در کنار روش ادغام نیرویی اختلاف دقیق و تغییر سرعت کم‌تر می‌باشد. شکل ۵ نشان می‌دهد که برای معادله حالت سواو-ردلیچ-وانگ میزان خطا در مدل بهبودیافته و روش اختلاف دقیق در دمای کاهیده  $0.6$  برابر  $2.5\%$  است. در حالی که در معادله (۹)، میزان خطا در همان دمای کاهیده برابر  $94/4\%$  می‌باشد. همچنین مدل نیرویی معادله (۱۲) و مدل نیرویی بهبودیافته با روش‌های ادغام نیرویی گو و همکاران، هی و همکاران، ژانگ و چن و لاد و وربرگ در این دمای کاهیده پایدار نمی‌باشند و در مجموع بازه پایداری کم‌تری دارند. بازه پایداری معادله (۱۲) از دمای کاهیده  $0.875$ ، گو و همکاران  $0.82$ ، هی و همکاران  $0.825$ ، هر دو مدل ژانگ و چن و لاد و وربرگ  $0.925$  آغاز می‌شود. شایان ذکر است که روش‌های ادغام نیرویی بوییک و لو در هیچ دمای کاهیده‌ای پایدار نمی‌مانند.

#### بررسی اثر زمان آسایش بر نتیجه‌های شبیه‌سازی

در این قسمت اثر زمان آسایش در بیشترین نسبت چگالی مایع به گازی که مدل در آن پایدار می‌ماند بررسی می‌شود و خطای مطلق در اندازه‌گیری این نسبت مشخص خواهد شد. شکل‌های ۷ تا ۱۱ برای بررسی بیشترین نسبت چگالی، که در آن معادله حالت طبق روش انتخابی پایدار می‌ماند، رسم شده است.

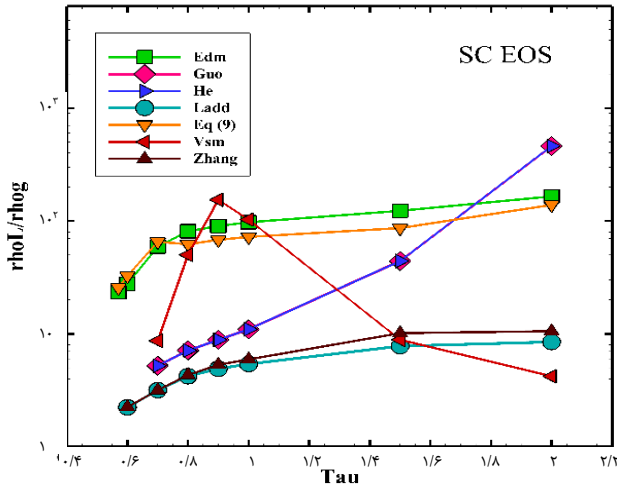
شکل ۷ بیشترین نسبت چگالی مدل‌های گوناگون شبکه بولتزن را با در نظر گرفتن معادله حالت کارنهان-استارلینگ نشان می‌دهد. طبق این شکل با افزایش زمان آسایش تا مقدار  $1/5$  برای مدل‌های لاد و وربرگ، ژانگ و چن، هی و همکاران و گو و همکاران نسبت چگالی به طور پیوسته افزایش می‌یابد. در روش تغییر سرعت



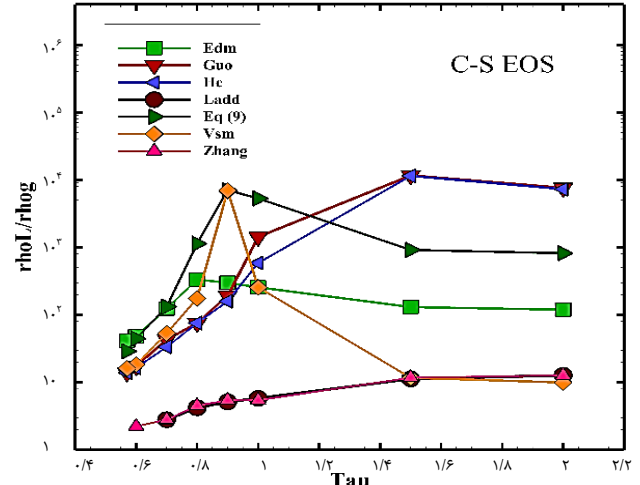
شکل ۶ - نمودارهای خطای نسبی معادله حالت واندروالس برای مدل‌های نیرویی بین مولکولی گوناگون با استفاده از روش‌های گوناگون ادغام این نیرو

حالت ارابه شده بیشترین بازه پایداری را دارد. معادله (۹) نیز بازه پایداری بالایی دارد ولی به دلیل خطای بالا در دمای کاهیده پایین، استفاده از آن پیشنهاد نمی‌شود.

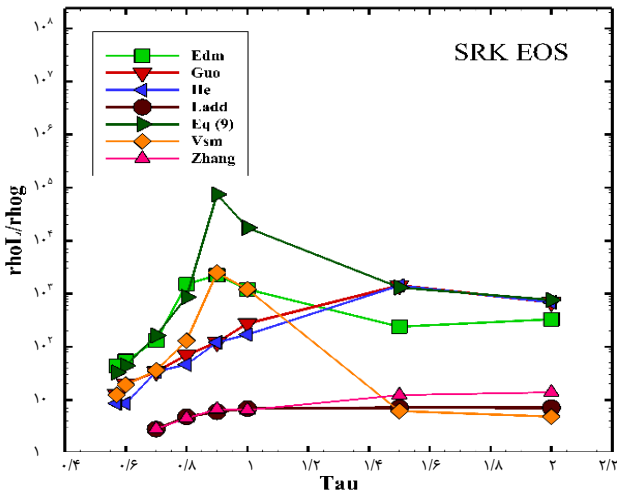
معادله (۹) در دمای کاهیده  $0.7$  برای معادله حالت کارنهان-استارلینگ خطایی برابر  $43/3\%$  دارد در حالی که در همین دمای کاهیده خطای مدل بهبود یافته همراه با روش اختلاف دقیق برابر  $41\%$  است. با توجه به شکل‌های رسم شده تا ۶ نتیجه‌های معادله (۹) از نتیجه‌های روش‌های ادغام نیرویی گو و همکاران، هی و همکاران و معادله (۱۲) بهتر می‌باشد ولی نسبت به مدل بهبود یافته با روش ادغام نیرویی اختلاف دقیق و تغییر سرعت ضعیف عمل می‌کند. برای معادله حالت کارنهان-استارلینگ در  $T_r=0.775$  میزان خطای معادله (۹) برابر  $22/5\%$  و برای مدل بهبودیافته معادله (۱۵) با روش‌های ادغام اختلاف دقیق، گو و همکاران به ترتیب برابر  $1/4\%$  و  $62/4\%$  می‌باشد. معادله (۱۲) و روش‌های ادغام نیرویی ژانگ و چن، و لاد و وربرگ نیز در این



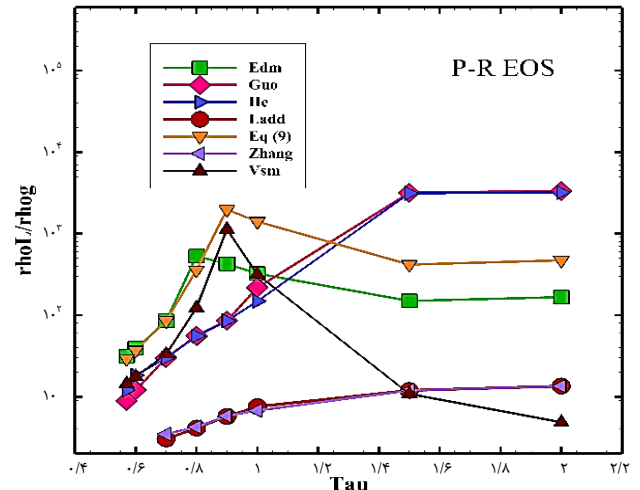
شکل ۹ - بیشترین نسبت چگالی برای معادله حالت شان و چن در مدل‌های گوناگون نیرو و روش‌های گوناگون ادغام نیرویی



شکل ۷ - بیشترین نسبت چگالی برای معادله حالت کارنهان-استارلینگ در مدل‌های گوناگون نیرو و روش‌های گوناگون ادغام نیرویی



شکل ۱۰ - بیشترین نسبت چگالی برای معادله حالت سواو-ردلیچ-وانگ در مدل‌های گوناگون نیرو و روش‌های گوناگون ادغام نیرویی

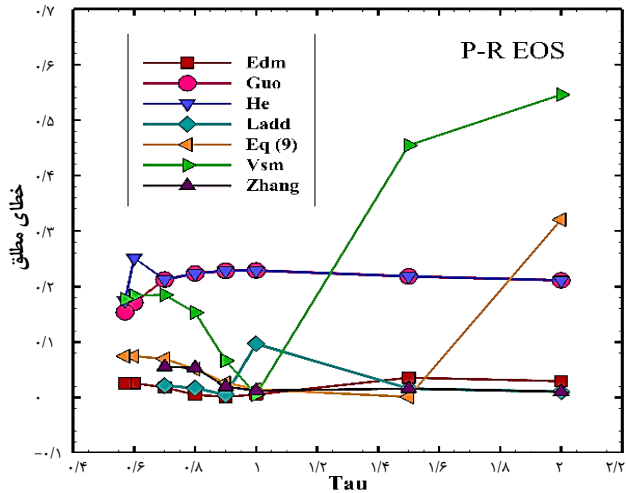


شکل ۸ - بیشترین نسبت چگالی برای معادله حالت پنگ-رایبسنون در مدل‌های گوناگون نیرو و روش‌های گوناگون ادغام نیرویی

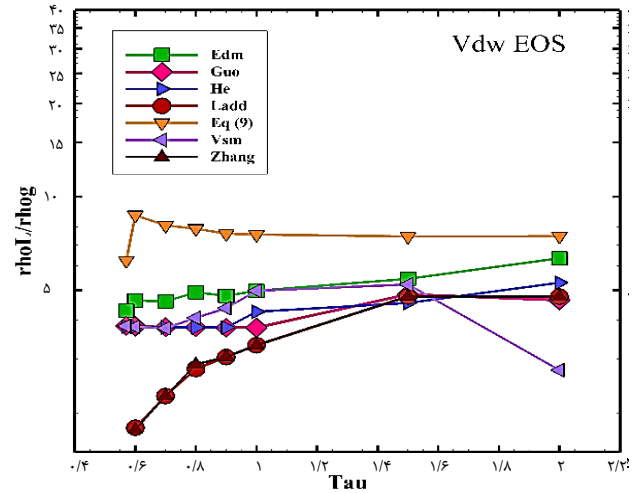
که دیده می‌شود روند تغییرهای بیشترین نسبت چگالی مایع به گاز در این معادله‌ها به تقریب همانند معادله حالت کارنهان-استارلینگ می‌باشد. از جمله تفاوت بین این نمودارها می‌توان به ثابت نشدن شیب نمودارهای هی و همکاران و گو و همکاران پس از زمان آسایش ۱/۵ در معادله حالت شان و چن اشاره نمود. همچنین در معادله حالت واندروالس بیشترین نسبت چگالی در زمان‌های آسایش گوناگون مربوط به معادله (۹) می‌باشد که تا حدود نسبت چگالی ۸/۷ پایدار می‌ماند ولی روش اختلاف دقیق سرانجام تا حدود ۶/۳ پایدار می‌ماند. در شکل‌های ۱۲ الی ۱۶ خطای مطلق متناظر با نقطه‌های ترسیم شده در شکل‌های ۱۷ تا ۱۱ آورده شده است. نتیجه‌ها نشان می‌دهد

و معادله (۹) تا زمان آسایش ۰/۹ چگالی افزایش دارد و پس از آن نمودار نزولی شده طوری که بیشترین نسبت چگالی برای این دو مدل در زمان آسایش نخست ۰/۹ و پس از آن در یک اتفاق می‌افتد. در روش اختلاف دقیق نیز تا زمان آسایش ۰/۸ نسبت چگالی صعودی می‌باشد و پس از آن با شیب ملایم نمودار نزولی می‌شود. سرانجام در زمان آسایش ۱/۵ تا ۲ نسبت چگالی مایع به گاز برای همه روش‌ها به تقریب ثابت می‌ماند.

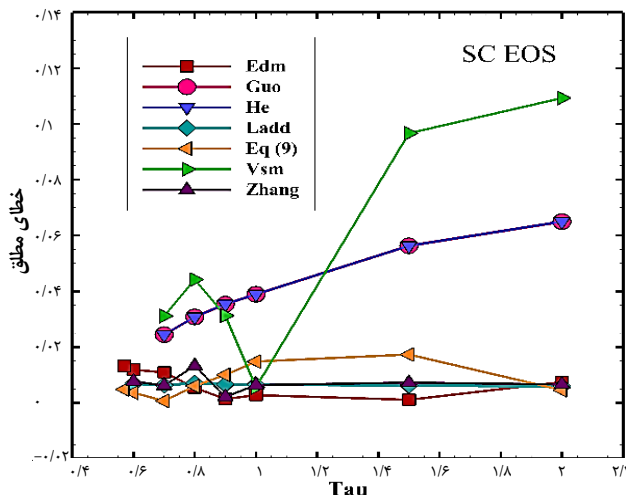
شکل‌های ۸ الی ۱۱ بیشترین نسبت چگالی را در معادله‌های حالت پنگ-رایبسنون، شان و چن، سواو-ردلیچ-وانگ و واندروالس نسبت به تغییرهای زمان آسایش نشان می‌دهند. همان‌گونه



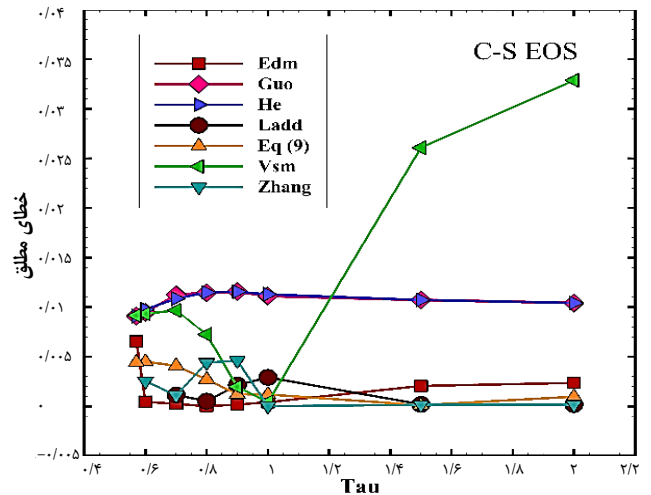
شکل ۱۳ - نمودارهای خطای مطلق معادله حالت پنگ-رایبسون برای مدل‌های نیرویی بین مولکولی گوناگون با استفاده از روش‌های گوناگون ادغام این نیرو در زمان‌های آسایش گوناگون



شکل ۱۱ - بیش‌ترین نسبت چگالی برای معادله حالت واندروالس در مدل‌های گوناگون نیرو و روش‌های گوناگون ادغام نیرویی



شکل ۱۴ - نمودارهای خطای مطلق معادله حالت شان و چن برای مدل‌های نیرویی بین مولکولی گوناگون با استفاده از روش‌های گوناگون ادغام این نیرو در زمان‌های آسایش گوناگون



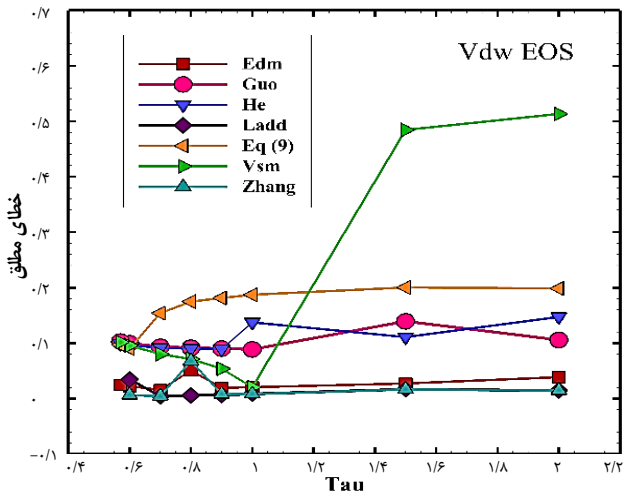
شکل ۱۲ - نمودارهای خطای مطلق معادله حالت کارنهان-استارلینگ برای مدل‌های نیرویی بین مولکولی گوناگون با استفاده از روش‌های گوناگون ادغام این نیرو در زمان‌های آسایش گوناگون

که در بیش‌ترین نسبت‌های چگالی حساب شده، خطای برخی مدل‌ها افزایش چشم‌گیری داشته که قابل قبول نیست.

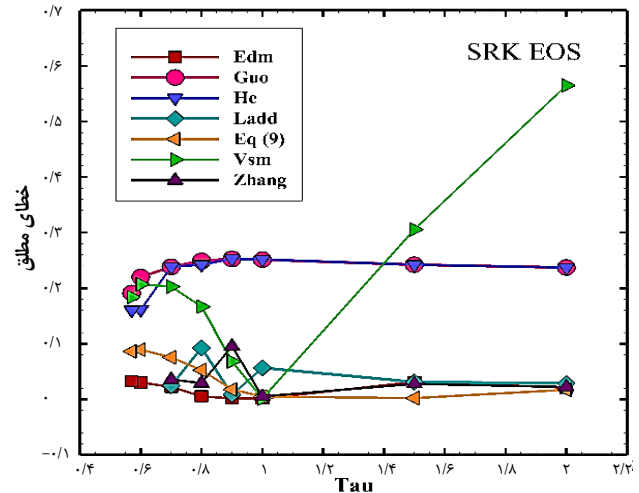
شکل ۱۲ برای مدل شبکه بولتزمن با معادله حالت کارنهان-استارلینگ رسم شده است. طبق این شکل میزان خطای مطلق تا زمان آسایش ۱/۲ برای روش‌های هی و همکاران و گو و همکاران حدود ۹۸٪ است که از سایر روش‌ها بیش‌تر می‌باشد. پس از این زمان آسایش، خطا برای روش تغییر سرعت از سایر روش‌ها بیش‌تر و برابر ۱۰۰٪ می‌شود. در روش تغییر سرعت کم‌ترین خطا در زمان آسایش یک اتفاق می‌افتد که در مرز بالای پایداری کم‌تر از ۳۰٪ است. خطا

در روش‌های گو و همکاران، و هی و همکاران در زمان آسایش ۰/۵۷ کم‌ترین مقدار را دارد و در مرز بالای پایداری حدود ۳۱٪ است همچنین تا زمان آسایش ۰/۸ با شیب کم افزایش می‌یابد و پس از آن ثابت می‌ماند. در روش اختلاف دقیق تا زمان آسایش یک، خطا به‌تقریب ثابت می‌ماند و پس از آن، با شیب کم افزایش می‌یابد.

در معادله (۹) از زمان آسایش ۰/۵۷ تا ۰/۸ خطا کم می‌شود و پس از زمان آسایش ۱/۵ ثابت می‌ماند. در روش لاد بیش‌ترین خطا برای زمان آسایش یک می‌باشد که در مرز بالای پایداری حدود ۶/۴٪ است.



شکل ۱۶ - نمودارهای خطای مطلق معادله حالت واندروالس برای مدل‌های نیرویی بین مولکولی گوناگون با استفاده از روش‌های گوناگون ادغام این نیرو در زمان‌های آسایش گوناگون



شکل ۱۵ - نمودارهای خطای مطلق معادله حالت سواو-ردلیچ-وانگ برای مدل‌های نیرویی بین مولکولی گوناگون با استفاده از روش‌های گوناگون ادغام این نیرو در زمان‌های آسایش گوناگون

با این که خطای پایینی دارند ولی نمی‌توانند نسبت چگالی‌های بالا را شبیه‌سازی کنند و در نتیجه بازه پایداری کوچکی دارند.

**بررسی سرعت‌های جعلی مدل‌های نیرویی بین مولکولی و روش‌های ادغام این نیرو**  
در این بخش به بررسی میزان سرعت‌های جعلی پرداخته شده است. این پارامتر به عنوان یکی از پارامترهای موثر در خطا و پایداری محسوب می‌شود [۵۳]. در نتیجه هرچه مقدار این سرعت‌ها کمتر باشد، به معنای مناسب‌تر بودن مدل است.

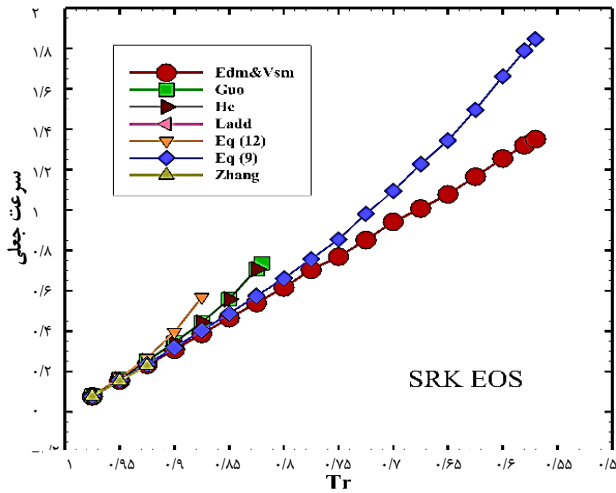
شکل‌های ۱۷ تا ۲۱ سرعت‌های جعلی را بر حسب دمای کاهیده برای معادله‌های حالت گوناگون نشان می‌دهد. شکل‌ها نشان می‌دهند که همواره کم‌ترین مقدار سرعت جعلی در دماهای کاهیده نزدیک به یک اتفاق می‌افتد. همچنین با کم شدن دمای کاهیده، سرعت‌های جعلی افزایش می‌یابند. در معادله‌های حالت کارنهان-استارلینگ، پنگ-رایینسون و سواو-ردلیچ-وانگ نخست روش ژانگ و چن و سپس اختلاف دقیق کم‌ترین میزان سرعت‌های جعلی را دارند. در معادله‌های حالت واندروالس و شان و چن مقدار سرعت‌های جعلی معادله (۹) کمی کمتر از روش اختلاف دقیق می‌باشد. این در حالی است که بررسی‌های پیشین نشان می‌دهد چگالی به دست آمده از مدل نیرویی بین مولکولی بهبودیافته به همراه روش ادغام نیرویی اختلاف دقیق خطای کم‌تری نسبت به معادله (۹) و (۱۲) دارد.

در ادامه به بررسی تغییرهای سرعت‌های جعلی بر اساس زمان‌های آسایش گوناگون پرداخته خواهد شد. برای این منظور شکل‌های ۲۲ تا ۲۶ برای معادله‌های حالت گوناگون رسم شده است.

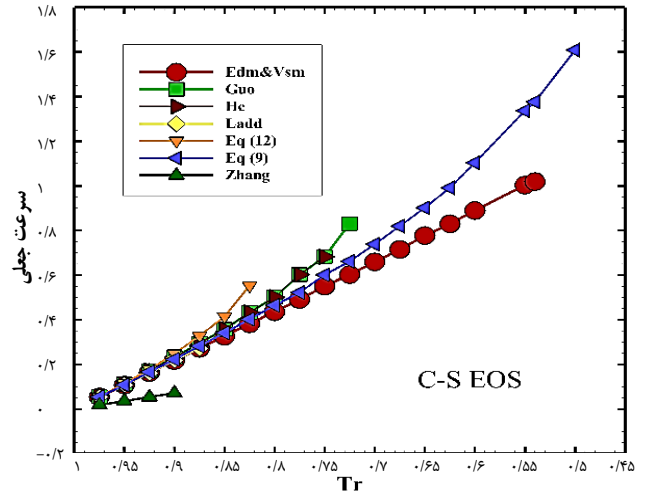
در مدل ژانگ و چن کم‌ترین خطا در زمان آسایش یک می‌باشد. با مقایسه شکل ۷ و ۱۲ مشخص می‌شود که بهترین زمان آسایش برای روش تغییر سرعت زمان آسایش یک می‌باشد. همچنین در زمان آسایش برابر یک همه مدل‌ها خطای کم‌تر یا به تقریب ثابتی نسبت به مقدارهای زمان آسایش دیگر دارند. در این میان مدل بهبودیافته با روش ادغام نیرویی اختلاف دقیق هم‌زمان بیش‌ترین نسبت چگالی مایع به گاز و خطایی کم‌تر از ۱/۸٪ درصد را در مرز بالای پایداری ارایه می‌کند.

شکل‌های ۱۳ تا ۱۶ خطای مطلق را به ترتیب در معادله‌های حالت پنگ-رایینسون، شان-چن و سواو-ردلیچ-وانگ نشان می‌دهند. روند تغییرات در این معادله‌های حالت نیز مانند معادله حالت کارنهان-استارلینگ می‌باشد. از جمله تفاوت بین این نمودارها می‌توان به افزایش چشمگیر خطا به دنبال افزایش زمان آسایش به بیش‌تر از ۱/۵ در نمودار معادله (۹) مربوط به معادله حالت پنگ-رایینسون اشاره نمود. همچنین در شکل ۱۶ مربوط به معادله حالت واندروالس بیش‌ترین خطا تا زمان آسایش ۱/۲ برای معادله (۹) می‌باشد و پس از آن مربوط به روش تغییر سرعت است.

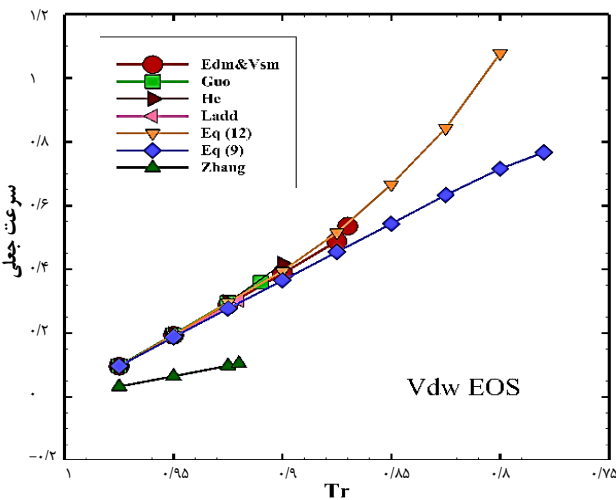
در همه معادله‌های حالت کم‌ترین خطا در بین زمان‌های آسایش ۰/۸ تا ۱ مربوط به روش اختلاف دقیق می‌باشد. همچنین این مدل توانایی محاسبه نسبت چگالی‌های بالا را نیز دارد. سایر مدل‌ها مثل مدل گو و همکاران، می و همکاران و معادله (۹) هم توانایی محاسبه چگالی‌های بالا را دارند ولی طبق شکل‌های ۱۲ تا ۱۶ این مدل‌سازی‌ها با خطای زیاد همراه هستند. روش‌های ژانگ و چن، ولاد و وربرگ نیز



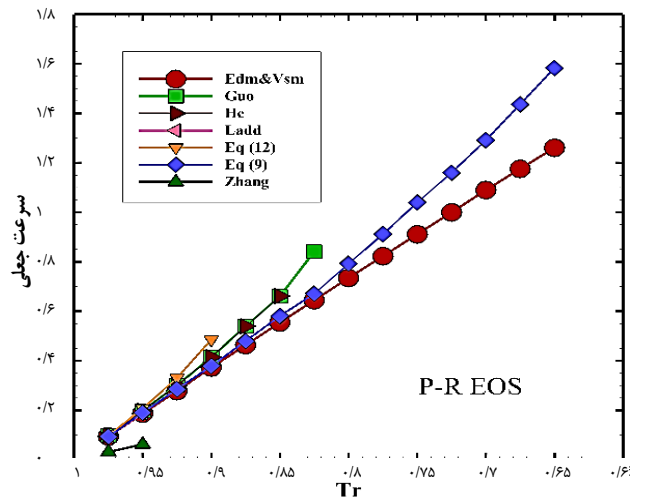
شکل ۲۰ - مقایسه سرعت‌های جعلی برای معادله سواو-ردلیچ-وانگ



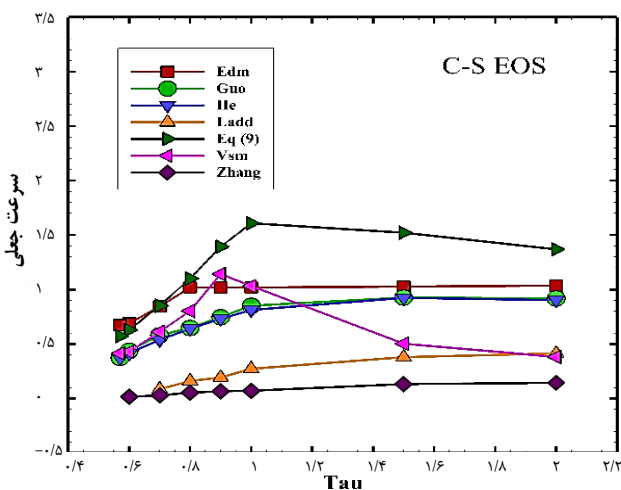
شکل ۱۷ - مقایسه سرعت‌های جعلی برای معادله کارنهان-استارلینگ



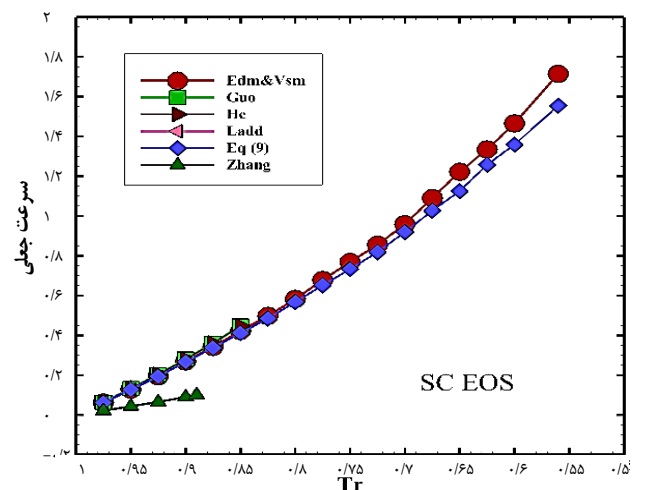
شکل ۲۱ - مقایسه سرعت‌های جعلی برای معادله واندروالس



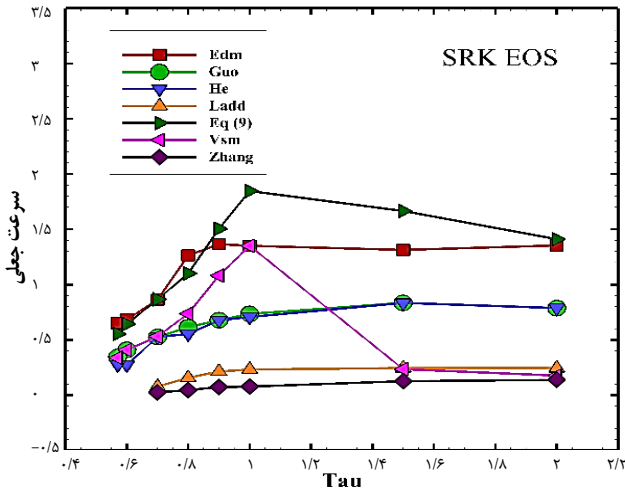
شکل ۱۸ - مقایسه سرعت‌های جعلی برای معادله پنگ-رابینسون



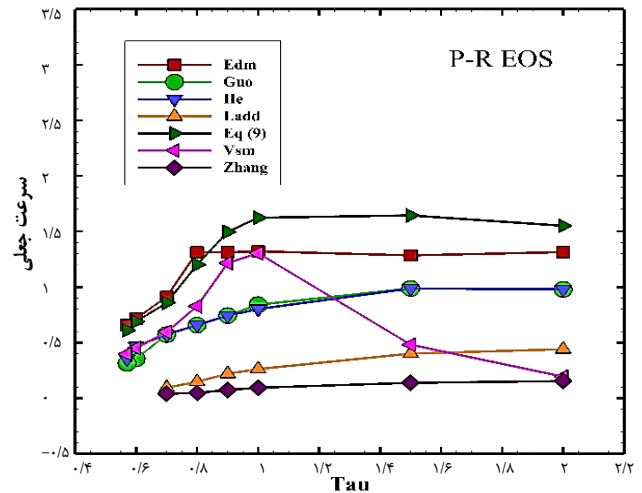
شکل ۲۲ - مقایسه سرعت‌های جعلی در زمان‌های آسایش گوناگون برای معادله حالت کارنهان-استارلینگ



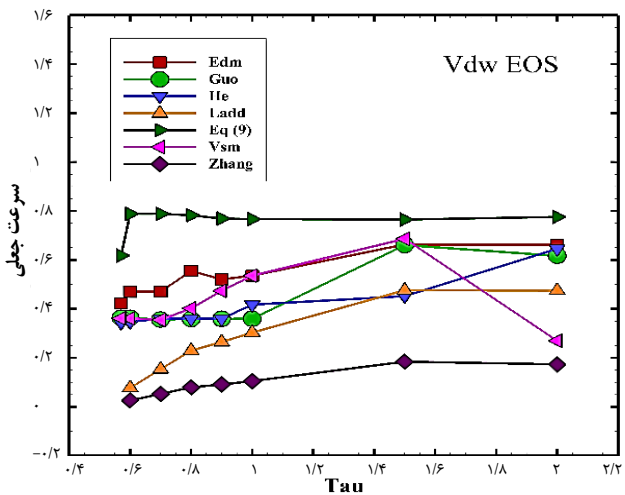
شکل ۱۹ - مقایسه سرعت‌های جعلی برای معادله شان و چن



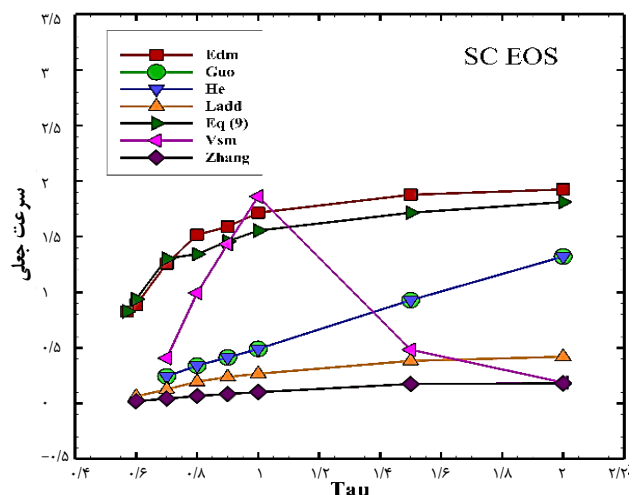
شکل ۲۵ - مقایسه سرعت‌های جعلی در زمان‌های آسایش گوناگون برای معادله حالت سواو-ردلیچ-وانگ



شکل ۲۳ - مقایسه سرعت‌های جعلی در زمان‌های آسایش گوناگون برای معادله حالت پنگ-رابینسون



شکل ۲۶ - مقایسه سرعت‌های جعلی در زمان‌های آسایش گوناگون برای معادله حالت واندروالس



شکل ۲۴ - مقایسه سرعت‌های جعلی در زمان‌های آسایش گوناگون برای معادله حالت شان و چن

می‌توان به داشتن بیش‌ترین سرعت جعلی در روش اختلاف دقیق برای معادله حالت شان و چن اشاره نمود.

### نتیجه‌گیری

در این مطالعه به بررسی یک مدل نیروی بین مولکولی بهبودیافته تحت عنوان نیروی بین مولکولی گانگ پرداخته شده است. در کنار این روش، از انواع معادله‌های حالت و روش‌های ادغام نیرویی گوناگون برای رسیدن به یک جمع بندی کامل بهره برده شد. در این پژوهش مشخص شد همزمان مدل نیروی بین مولکولی و روش ادغام نیرو نقش مهمی را در پایداری و دقت محاسبه‌های

شکل ۲۲ معادله حالت کارنهان-استارلینگ را نشان می‌دهد. برای روش‌ها و مدل‌های گوناگون با افزایش زمان آسایش از ۰/۵۸ تا ۱ روش‌های جعلی افزایش پیدا خواهد کرد و پس از زمان آسایش یک مقدار این سرعت‌ها به تقریب ثابت خواهد ماند. در این معادله حالت بیش‌ترین سرعت جعلی در زمان‌های آسایش گوناگون مربوط به نمودار معادله (۹) و کم‌ترین آن مربوط به نمودار ژانگ و چن می‌باشد. شکل‌های ۲۳ تا ۲۶ به ترتیب برای معادله‌های حالت پنگ-رابینسون، شان-چن، سواو-ردلیچ-وانگ و واندروالس رسم شده است. روند تغییرات سرعت‌های جعلی در این معادله‌های حالت مانند کارنهان-استارلینگ می‌باشد. از جمله تفاوت بین این نمودارها



۵- با توجه به موارد بررسی شده برای معادله‌های حالت گوناگون، معادله حالت کارنهان-استارلینگ بیش‌ترین بازه دقت و پایداری را دارد.  
۶- به طور کلی، استفاده از معادله حالت کارنهان-استارلینگ، در کنار مدل نیروی بین مولکولی بهبودیافته به همراه روش ادغام نیرویی اختلاف دقیق، می‌تواند هم‌زمان گسترده‌ترین بازه پایداری و بیش‌ترین دقت را به همراه داشته باشد.

### فهرست نمادها

$c_s$	سرعت صوت $(\frac{lu}{ts})$
$e_i$	سرعت منفصل شده $(\frac{lu}{ts})$
$F$	نیرو (مومنتوم) $(\mu \cdot \frac{lu}{ts^2})$
$f$	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 $(tu)$
$T_r$	دمای کاهیده
$Edm$	روش اختلاف دقیق
$Vsm$	روش تغییر سرعت
$Guo$	روش ادغام نیرویی گو
$He$	روش ادغام نیرویی هی
$Zhang$	روش ادغام نیرویی ژانگ
$Ladd$	روش ادغام نیرویی لاد
$u$	سرعت میدان سیال $(\frac{lu}{ts})$
$x$	مختصات $(lu)$
$\alpha, \beta, \gamma$	مولفه های مختصاتی
$v$	ویسکوزیته جنبشی $(\frac{lu^2}{ts})$
$\rho$	چگالی $(\frac{\mu}{lu^2})$
$\tau$	زمان آسایش $(ts)$
$\Psi$	تابع پتانسیل تعادلی

عددی بازی می‌کنند. مهم‌ترین نتیجه‌های به دست آمده در مطالعه حاضر به صورت زیر است:

۱- همه معادله‌های حالت را می‌توان به سادگی با مدل گانگ ادغام نمود. نتیجه‌های شبیه‌سازی حباب با مدل گانگ و پنج معادله حالت نشان داد که این مدل نیروی بین مولکولی می‌تواند در بازه گسترده‌ای پایدار بماند و دقت آن نیز تا ۶۵٪ بیش‌تر از دقت مدل‌های موجود دیگر در این مقاله یعنی معادله (۹) و (۱۲) باشد.

۲- عملکرد سه دسته روش ادغام نیرویی نیز در این مقاله بررسی شد و مشخص شد دو روش ارایه شده توسط مارتیز-لو، و گریند-بوئیک از دسته روش‌های گسسته‌سازی نیرو برای شبیه‌سازی جریان‌های دوفازی مناسب نمی‌باشند و در هیچ دمای کاهیده‌ای پایدار نیستند. از بین روش‌های گسسته‌سازی جمله نیرو، روش‌های گو و همکاران و هی و همکاران، بازه پایداری بیش‌تر ولی دقت پایینی دارند. در بین هر سه دسته روش، روش اختلاف دقیق بیش‌ترین بازه پایداری و دقت را دارا می‌باشد.

۳- با بررسی اثر دمای کاهیده بر میزان خطا در محاسبه چگالی‌ها مشخص شد با کاهش دمای کاهیده، اختلاف بین نتیجه‌های عددی و ماکسول در همه مدل‌ها بیش‌تر شده و در نتیجه میزان خطا افزایش می‌یابد. در دماهای کاهیده گوناگون روش اختلاف دقیق و تغییر سرعت در میان سایر روش‌ها کم‌ترین خطا و بیش‌ترین بازه پایداری را دارد.

۳- اثر زمان آسایش بر مدل‌های نیروی بین مولکولی و روش‌های ادغام این نیرو نشان می‌دهد که روش ادغام نیرویی تغییر سرعت تنها در زمان آسایش برابر یک می‌تواند نتیجه‌های خوبی ارایه دهد. روش اختلاف دقیق در زمان‌های آسایش گوناگون بازه پایداری و دقت بیش‌تری نسبت به سایر مدل‌ها دارد. بهترین بازه زمان آسایش برای روش اختلاف دقیق در این حالت بین ۰/۸ تا ۱ می‌باشد.

۴- مقدار سرعت‌های جعلی تأثیر مستقیمی در دقت و ناپایداری حل عددی دارد و هر چه مقدار سرعت‌های جعلی بیش‌تر باشد دقت مسئله کم‌تر است. در مقدارهای سرعت جعلی بالا ناپایداری عددی به دست می‌آید. بررسی تغییرات سرعت‌های جعلی با دماهای کاهیده و زمان‌های آسایش گوناگون نشان می‌دهد که سرعت‌های جعلی با کاهش دمای کاهیده افزایش می‌یابند. کم‌ترین میزان سرعت‌های جعلی در تمامی معادله‌های حالت به جز روش شان-چن برای مدل اختلاف دقیق می‌باشد. در بررسی تغییرهای این سرعت‌ها نسبت به زمان آسایش نیز مشخص شد که زمان آسایش بیش‌تر از یک، تغییرهای چشمگیری در افزایش یا کاهش سرعت‌های جعلی موجب نمی‌شود.

تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۰۶/۱۹؛ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۱/۰۹/۱۴



## مراجع

- [1] Cheng P., Wu H.Y., *Mesoscale and Microscale Phase-Change Heat Transfer*, *Advances in heat Transfer*, **39**: 461-563 (2006).
- [2] Gong S., Cheng P., *Lattice Boltzmann Simulations for Surface Wettability Effects in Saturated Pool Boiling Heat Transfer*, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **85**: 635-646 (2015).
- [3] Sukop M.C., Huang H., Lin C.L., Deo M.D., Oh K., Miller J.D., *Distribution of Multiphase Fluids in Porous Media: Comparison between Lattice Boltzmann Modeling and Micro-X-Ray Tomography*, *Physical Review E*, **77(2)**: 026710 (2008).
- [4] Ishii M., Hibiki T., "Thermo-Fluid Dynamics of Two-Phase Flow", Springer Science & Business Media, (2010).
- [۵] جابرزاده س.، حقیقی اصل ع.، صفدری س.ج.، رشیدی ع.، بررسی تأثیر افزودن الکل و فعال کننده‌های سطحی بر روی هیدرودینامیک راکتور هوا بالابر در شرایط سه فاز، نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران، (۴) ۳۳: ۶۹ تا ۷۷ (۱۳۹۳).
- [۶] رحیمی م.، مطالعه اختلاط فازها در سینی غربالی با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی، نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران، (۱) ۳۱: ۱۰۱ تا ۱۱۳ (۱۳۹۱).
- [7] Brennen CE, Brennen CE. "Fundamentals of Multiphase Flow", Cambridge University Press (2005).
- [8] Izadpanah A.A., Vafaei S.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)**: 27-34 (2006).
- [9] Bahramian A.R., Kalbasi M., *CFD Modeling of TiO<sub>2</sub> 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).
- [10] Gorji M., BOZORG M.B., KAZEMINI 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).
- [۱۱] باباپور ع.، پیشکارآذری ر.، گلستانه س.ا.، قاضی طباطبائی ز.، شبیه‌سازی مدیریت گرمایی مواد نانوکامپوزیت تغییرفازدهنده توسط فناوری CFD، نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران، (۴) ۳۷: ۱۹۵ تا ۲۱۰ (۱۳۹۷).
- [۱۲] بابایی گورچین لو ف.، علی حسینی ا.، مدل سازی فرایند تبخیر سطحی آب در سد های آبی با استفاده از CFD (مطالعه موردی سد امیرکبیر کرج)، نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران، (۴) ۳۵: ۱۲۵ تا ۱۳۶ (۱۳۹۵).
- [13] Huang H., Sukop M., Lu X., "Multiphase Lattice Boltzmann Methods: Theory and Application", John Wiley & Sons, (2015).
- [14] Gong S., Cheng P., *Numerical Investigation of Droplet Motion and Coalescence by an Improved Lattice Boltzmann Model for Phase Transitions and Multiphase Flows*, *Computers & Fluids*, **53**: 93-104 (2012).

- [15] Gunstensen A.K., Rothman D.H., Zaleski S., Zanetti G., [Lattice Boltzmann Model of Immiscible Fluids](#), *Physical Review A.*, **43(8)**: 4320 (1991).
- [16] Shan X., Chen H., [Lattice Boltzmann Model for Simulating Flows with Multiple Phases and Components](#), *Physical Review E.*, **47(3)**: 1815 (1993).
- [17] Shan X., Chen H., [Simulation of Nonideal Gases and Liquid-Gas Phase Transitions by the Lattice Boltzmann Equation](#), *Physical Review E.*, **49(4)**: 2941 (1994).
- [18] Swift M.R., Osborn W.R., Yeomans J.M., [Lattice Boltzmann Simulation of Nonideal Fluids](#), *Physical Review Letters.*, **75(5)**: 830 (1995).
- [19] Swift M.R., Orlandini E., Osborn W.R., Yeomans J.M., [Lattice Boltzmann Simulations of Liquid-Gas and Binary Fluid Systems](#), *Physical Review E.*, **54(5)**: 5041 (1996).
- [20] 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).
- [21] Kupershtokh A.L., Medvedev D.A., Karpov D.I., [On Equations of State in a Lattice Boltzmann Method](#), *Computers & Mathematics with Applications.*, **58(5)**: 965-974 (2009).
- [22] Hyväluoma J., Harting J., [Slip Flow over Structured Surfaces with Entrapped Microbubbles](#), *Physical Review Letters.*, **100(24)**: 246001 (2008).
- [23] Sbragaglia M., Benzi R., Biferale L., Chen H., Shan X., Succi S., [Lattice Boltzmann Method with Self-Consistent Thermo-Hydrodynamic Equilibria](#), *Journal of Fluid Mechanics.*, **628**: 299-309 (2009).
- [24] Shan X., [Analysis and Reduction of the Spurious Current in a Class of Multiphase Lattice Boltzmann Models](#), *Physical Review E.*, **73(4)**: 047701 (2006).
- [25] Bao J., Schaefer L., [Lattice Boltzmann Equation Model for Multi-Component Multi-Phase Flow with High Density Ratios](#), *Applied Mathematical Modelling.*, **37(4)**: 1860-1871 (2013).
- [26] Yu Z., Fan L.S., [An Interaction Potential based Lattice Boltzmann Method with Adaptive Mesh Refinement \(AMR\) for Two-Phase Flow Simulation](#), *Journal of Computational Physics.*, **228(17)**: 6456-6578 (2009).
- [27] Pan C., Hilpert M., Miller C.T., [Lattice - Boltzmann Simulation of Two - Phase Flow in Porous Media](#), *Water Resources Research.*, **40(1)**: (2004).
- [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 (2006).
- [29] Succi S., ["The Lattice Boltzmann Equation: for Fluid Dynamics and Beyond"](#), Oxford University Press, (2001).
- [30] He X., Doolen G.D., [Thermodynamic Foundations of Kinetic Theory and Lattice Boltzmann Models for Multiphase Flows](#), *Journal of Statistical Physics.*, **107(1-2)**: 309-328 (2002).
- [31] Chen L., Kang Q., Mu Y., He Y.L., Tao W.Q., [A Critical Review of the Pseudopotential Multiphase Lattice Boltzmann Model: Methods and Applications](#), *International Journal of Heat and Mass Transfer.*, **76**: 210-236 (2014).

- [32] Chen S., Doolen G.D., [Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows](#), *Annual Review of Fluid Mechanics*, **30(1)**: 329-364 (1998).
- [33] Li Q., Luo K.H., Kang Q.J., He Y.L., 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).
- [34] Guo Z., Zheng C., Shi B., [Discrete Lattice Effects on the Forcing Term in the Lattice Boltzmann Method](#), *Physical Review E.*, **65(4)**: 046308 (2002).
- [35] 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).
- [36] Yuan P., Schaefer L., [Equations of State in a Lattice Boltzmann Model](#), *Physics of Fluids*, **18(4)**: 042101 (2006).
- [۳۷] شیربانی م، ورمزیار م، محمدی آ، آنالیز دقت و پایداری مدل‌های گوناگون تقابل ذره‌ها در روش شبکه بولتزمن چند فاز، نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران، **۳۸(۳)**: ۲۵۳ تا ۲۶۲ (۱۳۹۸).
- [38] Qian Y.H., d'Humières D., Lallemand P., [Lattice BGK Models for Navier-Stokes Equation](#), *EPL (Europhysics Letters)*, **17(6)**: 479 (1992).
- [39] Gong S., Cheng P., Quan X., [Lattice Boltzmann Simulation of Droplet Formation in Microchannels under an Electric Field](#), *International Journal of Heat and Mass Transfer.*, **53(25-26)**: 5863-5870 (2010).
- [40] Kang Q., Zhang D., Chen S., [Displacement of a Two-Dimensional Immiscible Droplet in a Channel](#), *Physics of Fluids.*, **14(9)**: 3203-3214 (2002).
- [41] Kang Q., Zhang D., Chen S., [Displacement of a Three-Dimensional Immiscible Droplet in a Duct](#), *Journal of Fluid Mechanics.*, **545**: 41-66 (2005).
- [42] Sukop M.C., Or D., [Lattice Boltzmann Method for Modeling Liquid - Vapor Interface Configurations in Porous Media](#), *Water Resources Research.*, **40(1)**: (2004).
- [43] Zhang R., Chen H., [Lattice Boltzmann Method for Simulations of Liquid-Vapor Thermal Flows](#), *Physical Review E.*, **67(6)**: 066711 (2003).
- [44] Zeng J., Li L., Liao Q., Cui W., Chen Q., Pan L., [Simulation of Phase Transition Process using Lattice Boltzmann Method](#), *Chinese Science Bulletin*, **54(24)**: 4596-4603 (2009).
- [45] Kupershtokh A.L., Medvedev D.A., [Lattice Boltzmann Equation Method in Electrohydrodynamic Problems](#), *Journal of Electrostatics.*, **64(7-9)**: 581-585 (2006).
- [46] Martys N.S., Shan X., Chen H., [Evaluation of the External Force Term in the Discrete Boltzmann Equation](#), *Physical Review E.*, **58(5)**: 6855 (1998).
- [47] He X., Shan X., Doolen G.D., [Discrete Boltzmann Equation Model for Nonideal Gases](#), *Physical Review E.*, **57(1)**: (1998).
- [48] 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(1-2)**: 115-136 (1997).

- [49] Guo Z., Zheng C., Shi B., [Discrete Lattice Effects on the Forcing Term in the Lattice Boltzmann Method](#), *Physical Review E.*, **65(4)**: 046308 (2002).
- [50] Shan X., Doolen G., [Multicomponent Lattice-Boltzmann Model with Interparticle Interaction](#), *Journal of Statistical Physics.*, **81(1-2)**: 379-393 (1995).
- [51] Luo L.S., [Unified Theory of Lattice Boltzmann Models for Nonideal Gases](#), *Physical Review Letters.*, **81(8)**: 1618 (1998).
- [52] Ladd A.J., Verberg R., [Lattice-Boltzmann Simulations of Particle-Fluid Suspensions](#), *Journal of Statistical Physics.*, **104(5-6)**: 1191-1251 (2001).
- [53] Khajepour S., [Multipseudopotential Interaction: A Lattice Boltzmann Scheme for Simulation of Multiphase Flows](#), *Doctoral Dissertation*, Heriot-Watt University (2017).