





دانشکده مهندسی معدن، نفت و ژئوفیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد مهندسی نفت-اکتشاف

معادلات حالت و ارزیابی شبیه سازی جریان دوفازی به روش شبکه بولتزمن

نگارنده:

سید محمد جواد سید صبور

استاد راهنما:

دکتر یوسف شیری

اسفند ۱۴۰۰

شماره: ۴۰۱/۱۵۸
تاریخ: ۱۴۰۲/۰۵/۲۵
ویرایش:

باسمه تعالی

فرمهای ارزشیابی پایان نامه کارشناسی ارشد
مربوط به ورودی‌های ۹۴ به بعد



مدیریت تحصیلات تکمیلی

فرم شماره (۳) صورتجلسه نهایی دفاع از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد

با نام و یاد خداوند متعال، ارزیابی جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد آقای سیدمحمدجواد سیدصور با شماره دانشجویی ۹۸۰۶۹۹۴ رشته مهندسی نفت گرایش اکتشاف تحت عنوان معادلات حالت و ارزیابی شیه سازی جریان دوفازی به روش شبکه بولترمن که در تاریخ ۱۴۰۰/۱۲/۱۱ با حضور هیأت محترم داوران در دانشگاه صنعتی شاهرود برگزار شد به شرح ذیل اعلام میگردد:

الف) درجه عالی: نمره ۲۰-۱۹ ☒			
ب) درجه خیلی خوب: نمره ۱۸-۱۷ ☐			
ج) درجه خوب: نمره ۱۶-۱۵ ☐			
د) درجه متوسط: نمره ۱۴-۱۳ ☐			
ه) کمر از ۱۴ غیر قابل قبول و نیاز به دفاع مجدد دارد ☐			
نوع تحقیق: نظری ☒ عملی ☐			

عضو هیأت داوران	نام و نام خانوادگی	مرتبه علمی	امضاء
۱- استاد راهنمای اول	دکتر یوسف شیرینی	استادیار	
۲- استاد راهنمای دوم			
۳- استاد مشاور			
۴- استاد داور اول	دکتر ابوالقاسم کامکار روحانی	دانشیار	
۵- استاد داور دوم	دکتر سجاد نگهبان	استادیار	
۶- نماینده تحصیلات تکمیلی	دکتر معصومه کردی	استادیار	

نام و نام خانوادگی رئیس دانشکده: دکتر سید محمدجواد سیدصور

تاریخ و امضاء:



این پایان نامه با حمایت مالی واحد پژوهش و فناوری

شرکت نفت فلات قاره ایران

به انجام رسیده است.

تقدیم به ساحت مقدس حضرت ولی عصر عجل الله تعالی فرجه الشریف؛

تقدیم به پدر و مادرم؛

و تقدیم به همسر عزیز و مهربانم که صبورانه تنها مشوق و رفیق این سالهای پر مشقت بود.

اینجانب سید محمد جواد سید صبور، مراتب اتنان و تشکر خود را نسبت به استاد ارجمند جناب آقای دکتر یوسف شیری

ابراز می دارم. بدون شک بدون راهنمایی ها، حمایت ها و روحیه بخشی ایشان این امر محقق نمی گشت؛ بدین وسیله از

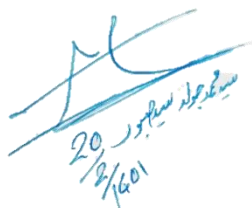
حسن سلوک و حمایت های بی دریغ و شبانه روزی ایشان تشکر کرده و برای ایشان سلامتی، طول عمر و موفقیت در تمامی

عرصه های زندگی را آرزو مندم.

تهدنامه

اینجانب سیدمحمدجواد سیدصبور دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته مهندسی نفت دانشکده معدن، نفت و ژئوفیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه **معادلات حالت و ارزیابی شبیه سازی جریان دوفازی به روش شبکه بولتزمن** تحت راهنمایی جناب دکتر یوسف شیرینی متعهد می شوم.

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است .
- در استفاده از نتایج پژوهشهای محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است .
- مطالب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است .
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه صنعتی شاهرود » و یا « Shahrood University of Technology » به چاپ خواهد رسید .
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان نامه تأثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می گردد.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه ، در مواردی که از موجود زنده (یا بافتهای آنها) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است .
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری ، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است.


سیدمحمدجواد سیدصبور
20/8/1401

چکیده

طی دو دهه اخیر، روش شبکه بولتزمن به یکی از محبوب‌ترین روش‌های عددی شبیه‌سازی جریان سیال در هندسه‌های پیچیده تبدیل شده است. این روش علاوه بر شبیه‌سازی‌های تک فاز، امکان مطالعه و شبیه‌سازی نمونه‌های چندفازی-چند جزئی را با نسبت چگالی‌های بسیار بالا فراهم ساخته که یکی از بزرگ‌ترین مزیت‌های این روش به حساب می‌آید؛ اما علاوه بر مزیت‌ها، نقاط ضعفی مانند ناپایداری‌ها و جریان‌های جعلی ناخواسته و... نیز دارد. در این پایان‌نامه به بررسی شبکه بولتزمن و ارزیابی نقاط ضعف و ناپایداری‌های آن در شبیه‌سازی سیستم‌های دوفازی (گاز و مایع) پرداخته‌ایم.

ابتدا تئوری مدل شبه‌پتانسیل، بهبودبخشی‌های اخیر و ارزیابی مدل شبه‌پتانسیل تک جزئی دوفازی مورد بررسی قرار گرفت و سپس با طراحی و بهبود کد مدل شبه‌پتانسیل شان و چن و اجرای آن توسط نرم افزار MATLAB، سرعت‌های جعلی، ناپایداری‌ها، محاسبه کشش سطحی و زاویه تماس مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج نشان داد که نمونه اولیه مدل شبه‌پتانسیل ارائه‌شده توسط شان و چن دارای ناپایداری‌هایی از جمله جریان‌های جعلی بزرگ و نسبت چگالی پایین بود که این ناپایداری‌های مورد ارزیابی و بحث و بررسی قرار گرفت. علاوه بر این، ناپایداری در تعیین زاویه تماس در مقادیر مشخصی از G مشاهده شد که تا به امروز در مطالعات پیشین به آن اشاره‌ای نشده بود؛ همچنین چهار رابطه جدید برای محاسبه زاویه تماس بدون انجام شبیه‌سازی با بالاترین ضریب تعیین ($R^2=98$) ارائه شد.

در ادامه به کاربردی‌ترین موضوع این مطالعه یعنی استفاده از معادلات حالت مختلف و جایگزینی آن با معادله شان و چن پرداخته شد. در این پژوهش نحوه وارد کردن معادلات حالت در شرایط هم‌ارز و معادل مورد بررسی قرار گرفت. دو معادله حالت وندروالس و کارناهان-استارلینگ با روش شان و چن مقایسه گردید و تغییرات کشش سطحی و نسبت چگالی فازها در مقادیر مختلف G مورد ارزیابی قرار گرفت. این پژوهش می‌تواند به‌عنوان یک معیار مناسب برای مطالعات و شبیه‌سازی‌های آینده به روش شبکه بولتزمن در شبیه‌سازی‌های یک جزئی-دو فاز مورد استفاده قرار گیرد.

کلمات کلیدی (۵ تا ۷ کلیدواژه): روش شبکه بولتزمن، معادلات حالت، مدل شبه‌پتانسیل شان و چن، شبیه‌سازی دوفازی

لیست مقالات استخراج شده از پایان نامه:

1- Droplet Behavior and Instability Analysis of Two-phase Pseudo-potential Model of Lattice Boltzmann Method; Status: Under review in Physics of Fluids Journal.

۱ فصل اول مقدمه.....	۱
۱.۱ پیش گفتار.....	۲
۱.۲ سابقه تحقیق.....	۲
۱.۳ اهداف و ضرورت انجام تحقیق.....	۷
۱.۴ روش انجام تحقیق.....	۱۰
۱.۵ ساختار پایان نامه.....	۱۱
۲ فصل دوم مروری بر ادبیات موضوع.....	۱۳
۲.۱ مقدمه.....	۱۴
۲.۲ روش های عددی در مدل سازی جریان.....	۱۵
۲.۳ شبیه سازی جریان به روش شبکه بولتزمن.....	۱۸
۲.۳.۱ معادله بولتزمن.....	۲۳
۲.۳.۲ گسسته سازی معادله بولتزمن.....	۲۷
۲.۳.۳ آرایش شبکه.....	۳۰
۲.۳.۴ الگوریتم روش شبکه بولتزمن.....	۳۱
۲.۳.۵ مدل شان و چن.....	۳۲
۲.۳.۶ شرایط مرزی.....	۳۹
۲.۳.۶.۱ شرط مرزی کمانه کردن.....	۴۰
۲.۳.۶.۲ شرط مرزی پریودیک.....	۴۱
۲.۳.۷ معادله حالت و کشش سطحی.....	۴۲
۲.۳.۸ قانون ساختار ماکسول.....	۴۴
۲.۳.۹ تعیین لزجت.....	۴۶
۲.۳.۱۰ معادله حالت شان و چن.....	۴۷
۲.۳.۱۱ جریان های ساختگی.....	۵۳
۳ فصل سوم تجزیه و تحلیل.....	۵۷
۳.۱ تجزیه و تحلیل معادله حالت شان و چن (C-S).....	۵۸
۳.۲ محدودیت های مدل شان و چن.....	۵۹
۳.۲.۱ محدودیت نسبت چگالی و لزجت.....	۶۰
۳.۲.۲ وابستگی بین پارامترها.....	۶۰
۳.۲.۳ جریان ساختگی.....	۶۱
۳.۲.۴ ناسازگاری ترمودینامیکی.....	۶۴
۳.۳ آزمون لاپلاس برای تخمین کشش سطحی.....	۶۸

۳.۴	نمودار فازی.....	۷۳
۳.۵	ترشوندگی، زاویه تماس و فعل وانفعال سیال-جامد.....	۷۷
۳.۶	جایگزینی معادله حالت وندروالس با معادله حالت شان و چن.....	۸۶
۳.۷	معادله حالت کارناهان-استارلینگ.....	۹۶
۳.۸	جمع بندی.....	۹۸
۴	فصل چهارم نتیجه گیری و پیشنهادها.....	۱۰۳
۴.۱	نتیجه گیری.....	۱۰۴
۴.۲	پیشنهادها.....	۱۰۶
	منابع و مراجع.....	۱۰۸
	پیوست ۱: کد شبکه بولتزمن شان و چن.....	۱۱۴

شکل ۱-۲ مکان و سرعت ذرات قبل و بعد از اعمال نیرو [۳۱].....	۲۴
شکل ۲-۲ مدل‌های سرعت گسسته (a) شبکه D1Q3, D2Q9(b, D3Q15(c, D3Q19 (d و D3Q27(e) [۴۱].....	۲۹
شکل ۳-۲ انواع شبکه‌های دوبعدی استفاده‌شده در روش بولتزمن؛ از چپ به راست به ترتیب: D2Q9, D2Q7, D2Q5, D2Q4 [۲۴].....	۳۰
شکل ۴-۲ الگوریتم روش شبکه بولتزمن.....	۳۲
شکل ۵-۲ شبکه D2Q9.....	۳۶
شکل ۶-۲ شرط مرزی کمانه کردن نیم‌فاصله [۵۰].....	۴۰
شکل ۷-۲ شرط مرزی پریودیک در شبیه‌سازی جریان‌های چند فاز [۴۵].....	۴۱
شکل ۸-۲ قانون ساختار ماکسول برای معادله حالت واندروالس در دمای ثابت T. باید به این نکته توجه کرد که انتقال فاز در فشار p_0 اتفاق می‌افتد که مناطق پایین (خاکستری تیره) و بالا (خاکستری روشن) را برابر می‌کند [۴۹].....	۴۵
شکل ۹-۲ نمودار فازی آب به کمک معادلات حالت شان و چن [۴۸].....	۴۸
شکل ۱۰-۲ نتایج جریان‌های ساختگی معادلات حالت مورد استفاده توسط یوان و شافر [۱۴].....	۵۴
شکل ۱۱-۲ رابطه بین چگالی و تابع پتانسیل برای سه معادله حالت مختلف [۲].....	۵۵
شکل ۱-۳ نمونه‌ای از جریان‌های ساختگی اطراف قطره ساکن [۴۹].....	۶۱
شکل ۲-۳ مقایسه اندازه سرعت جریان ساختگی معادلات حالت مختلف با روش گانگ-چنگ [۲۴].....	۶۳
شکل ۳-۳ نمودار سرعت در لحظه $t = 3000$ (ts) در آزمون لاپلاس (شکل سمت چپ در $G = -5$ و شکل سمت راست در $G = -8$).....	۶۴
شکل ۴-۳ آزمون لاپلاس جهت بررسی صحت کد نوشته‌شده در یک شبکه 100×100 با $G = -5$	۶۶
شکل ۵-۳ آزمون لاپلاس برای بررسی صحت کد نوشته‌شده در یک شبکه 100×100 با $G = -8$	۶۷
شکل ۶-۳ بررسی میزان کشش سطحی در محاسبات با تکرار ۵۰۰.....	۷۰
شکل ۷-۳ بررسی میزان کشش سطحی در محاسبات با تکرار ۱۰۰۰.....	۷۰
شکل ۸-۳ بررسی میزان کشش سطحی در محاسبات با تکرار ۱۵۰۰.....	۷۱
شکل ۹-۳ بررسی میزان کشش سطحی در محاسبات با تکرار ۲۰۰۰.....	۷۱
شکل ۱۰-۳ نتایج آزمون لاپلاس برای شبکه 100×100 به منظور محاسبه کشش سطحی.....	۷۳
شکل ۱۱-۳ تغییرات چگالی بر روی امتداد طولی ناحیه حل در شبکه 100×100	۷۵
شکل ۱۲-۳ نمودار تغییرات چگالی کاهش یافته در مقادیر متفاوت دمای کاهش یافته.....	۷۶
شکل ۱۳-۳ نمودار تغییرات چگالی با مقادیر مختلف پارامتر G	۷۶
شکل ۱۴-۳ مقایسه تغییرات زاویه تماس و چگالی جامد در مقدار $G = -6/5$	۷۸
شکل ۱۵-۳ مقایسه تغییرات زاویه تماس در مقادیر متفاوت پارامتر G	۸۰

- شکل ۳-۱۶ ناپایداری و ترکیدگی قطره در $G=-7$ و چگالی جامد بین $1/5$ تا $2/4$ ۸۱
- شکل ۳-۱۷ برازش خطی ارتباط بین زاویه تماس با پارامتر G و چگالی جامد ۸۲
- شکل ۳-۱۸ برازش چندجمله‌ای دوبعدی ارتباط بین زاویه تماس با پارامتر G و چگالی جامد ۸۳
- شکل ۳-۱۹ برازش سهموی ارتباط بین زاویه تماس با پارامتر G و چگالی جامد ۸۴
- شکل ۳-۲۰ برازش نمایی دوبعدی ارتباط بین زاویه تماس با پارامتر G و چگالی جامد ۸۵
- شکل ۳-۲۱ چگالی‌های مایع و گاز در مقدار دمای (T) متفاوت - شبیه سازی قطره معلق با معادله وندروالس ۹۵
- شکل ۳-۲۲ چگالی‌های مایع و گاز در مقدار دمای (T) متفاوت - شبیه‌سازی آزمون قطره معلق با استفاده از معادله حالت کارناهان-استارلینگ ۹۸
- شکل ۳-۲۳ چگالی‌های مایع و گاز در مقدار G معین - شبیه‌سازی آزمون قطره معلق با استفاده از معادله حالت شان وچن ۹۹
- شکل ۳-۲۴ چگالی‌های مایع و گاز در مقدار G معین - شبیه‌سازی آزمون قطره معلق با استفاده از معادله حالت وندروالس ۹۹
- شکل ۳-۲۵ چگالی‌های مایع و گاز در مقدار G متفاوت - شبیه‌سازی آزمون قطره معلق با استفاده از معادله حالت کارناهان-استارلینگ ۱۰۰
- شکل ۳-۲۶ نمودار تاثیر پارامتر G بر کشش سطحی ۱۰۰

جدول ۱-۲ ضرایب وزنی توابع توزیع و بردارهای سرعت در شبکه‌های دوبعدی روش شبکه بولتزمن.....	۳۱
جدول ۱-۳ خلاصه‌ای از مقادیر بحرانی و پارامترهای معادلات حالت مختلف بر اساس رویکرد پیشنهادی.....	۹۱
جدول ۲-۳ نتایج بدست آمده از مدل شان و چن با $G=-5$ و معادل آن در مدل وندروالس و کارناهان-استارلینگ.....	۹۳
جدول ۳-۳ نتایج بدست آمده از آزمون شبیه‌سازی قطره معلق جهت بدست آوردن کشش سطحی با استفاده از معادله حالت وندروالس.....	۹۴
جدول ۴-۳ نتایج بدست آمده از آزمون شبیه‌سازی قطره معلق جهت محاسبه کشش سطحی با استفاده از معادله شبه‌پتانسیل شان و چن.....	۹۵
جدول ۵-۳ نتایج بدست آمده از آزمون شبیه‌سازی قطره معلق جهت بدست آوردن کشش سطحی با استفاده از معادله حالت کارناهان-استارلینگ.....	۹۷

فهرست علائم و اختصارات

h	ارتفاع قطره بر روی سطح جامد
$C(f)$	تابع برخورد بین ذرات
f^{eq}	تابع توزیع تعادلی
$\psi(x)$	تابع پتانسیل مولکولی-تابع شبه پتانسیل-تابع جرم موثر
G	تابع گرین
w_i	ضریب وزنی مولفه های سرعت
ω	ثابت وابسته به نوع سیال
R	ثابت گازها/شعاع قطره
ρ	چگالی
ρ_r	چگالی کاهش یافته
v	حجم مولی
b	حداقل حجم مولی موثر
T	دما
T_c	دمای بحرانی
T_r	دمای کاهش یافته
τ	زمان آسایش
c_s	سرعت صوت در واحد شبکه
u	سرعت ماکروسکوپیک
e	سرعت در گره

U'	سرعت ماکروسکوپیک ترکیبی
u_{eq}	سرعت تعمیم یافته
σ	کشش سطحی
Δt	گام زمانی
Δx	گام مکانی
P	فشار
P_c	فشار بحرانی
P_r	فشار کاهش یافته
Ma	عدد ماخ
ν	لزجت

فصل اول

مقدمه

۱.۱ پیش‌گفتار

بررسی و فهم جریان سیالات طی هزاران سال گذشته مورد توجه بسیاری از دانشمندان و اندیشمندان بوده است. ارشمیدس در حدود ۲۵۰ سال قبل از میلاد مسیح از پیشگامان این عرصه در بررسی و پیش‌بینی رفتار سیالات به شمار می‌رود و این امر تا به امروز توجه بسیاری از محققین را در صنایع نفت و مکانیک سیالات به خود جلب کرده است. با پیشرفت تکنولوژی، شبیه‌سازی جریان سیال با ابررایانه‌ها بهبود یافت به‌طوری‌که در سال ۲۰۱۳ بالغ بر پانصد ابررایانه در اروپا به بررسی و پیش‌بینی دقیق وضعیت آب و هوایی می‌پرداختند.

از نظر ویژگی‌های شیمیایی سیستم‌های سیالاتی را می‌توانیم به دو دسته تک‌جزئی و چندجزئی تقسیم کنیم. به‌طور کلی جریان تک‌جزئی چندفازی به جریانی اطلاق می‌شود که سیال در دوفاز متفاوت مخلوط شدنی باشد که از طریق معادلات حالت به یکدیگر مرتبط می‌شوند. اهمیت این موضوع زمانی مشخص می‌شود که در صنعت نفت با استفاده از روش‌های شبیه‌سازی جریان با صرف کمترین هزینه می‌توان به بهبود و بهره‌وری مخازن نفت کمک شایانی نمود. در این پژوهش سعی بر آن شد که با استفاده از روش‌های مختلف ارائه‌شده بر مبنای شبکه بولتزمن به بهبود معادلات و بررسی نقاط ضعف و قوت این روش‌ها پردازیم.

۱.۲ سابقه تحقیق

از اواخر دهه ۸۰ در قرن گذشته، روش شبکه بولتزمن یک روش مزوسکوپی جدید بر پایه تئوری جنبشی گسسته به‌عنوان یک ابزار قدرتمند برای شبیه‌سازی و بررسی عددی گسترده جریان‌های پیچیده

پدیدار شد؛ که این جریان‌ها شامل جریان در محیط متخلخل، جریان‌های حرارتی، جریان‌های آشفته و جریان‌های چند فاز می‌باشند [۱].

روش شبکه بولتزمن را می‌توان یک روش مزوسکوپیک قلمداد کرد. روشی که مابین روش میکروسکوپیک و ماکروسکوپیک قرار دارد [۲]. مدل‌های مختلفی از روش شبکه بولتزمن در بیست سال گذشته توسعه داده شده است. اولین مدل که مدل روتمن-کلر^۱ نامیده می‌شود که با استفاده از گرادیان رنگ‌ها برای جداسازی و مدل‌سازی فعل و انفعالات در سطوح چند فاز توسط گانستسن و همکاران^۲ ارائه شد [۳]. این مدل بر مبنای مدل شبکه گازی ارائه شده توسط روتمن-کلر می‌باشد [۴]. دومین مدل، مدل شبه‌پتانسیل^۳ بود که توسط شان و چن^۴ ارائه شد. این روش بیانگر محاسبه فعل و انفعالات ذرات غیر محلی می‌باشد [۵-۹]؛ مدل دیگر مدل انرژی آزاد است که توسط سوئیفت و همکاران^۵ ارائه شد [۱۰]. مدل‌های چند فاز بولتزمن دیگری هم مانند مدل هی و همکاران^۶ وجود دارد که برای رفتار چند فاز استفاده می‌شوند [۱۱].

^۱ Rothman-Keller

^۲ Gunstensen et al.

^۳ Pseudo-potential

^۴ Shan and Chen

^۵ Swift et al.

^۶ He et al.

پس از معرفی مدل شبه پتانسیل برای شبیه سازی جریان های تک جزئی -دوفازی [۹] و جریان های چند جزئی -چند فازی [۶] توسط شان و چن، در سال ۱۹۹۷ هو و همکاران^۱ [۱۲] به بررسی و مقایسه مدل شبه پتانسیل با مدل گرادیان رنگ پرداختند. آن ها توانایی دو روش را در محاسبه بهتر کشش سطحی با آزمون لاپلاس و میزان سرعت های جعلی مقایسه کردند و به این نتیجه رسیدند که مدل شبه پتانسیل، در تمامی فاکتورها نسبت به مدل گرادیان رنگ برتری دارد و در مجموع روش بهتری محسوب می شود.

در سال ۲۰۰۲ گو و همکاران^۲ روش نیرویی جدیدی را برای اضافه کردن نیروی برهمکنش فازها ارائه کردند [۱۳]. در مدل شبه پتانسیل اصلی، نیروی برهمکنش فازها در سرعت ها اعمال می شود که باعث وابستگی کشش سطحی و نسبت چگالی به ضریب تخفیف می شود. گو و همکاران با ارائه این روش نیرویی توانستند این وابستگی را از بین ببرند اما در این مدل همچنان مشکل سرعت های جعلی بزرگ و نسبت چگالی پایین وجود دارد. در سال ۲۰۰۶ یوان و شافر^۳ یکی از مهم ترین اصلاحات را در مدل شبه پتانسیل شان و چن ایجاد نمودند [۱۴]. با قراردادن معادله حالت سیال واقعی در تابع پتانسیل توانستند نسبت چگالی را تا ۱۰۰۰ برابر افزایش دهند و همچنین باعث کاهش سرعت های جعلی و ناسازگاری ترمودینامیکی مدل شبه پتانسیل شدند. یوان و شافر از معادله حالت های واندروالس، ردلیش -کوانگ^۴، پنگ -رابینسون^۵،

^۱ Hou et al.

^۲ Gou et al.

^۳ Yuan and Schaefer

^۴ Redlich-Kwong

^۵ Peng-Robinson

کارناهان-استارلینگ^۱ در تابع پتانسیل بهره بردند و با مقایسه این معادلات دریافتند که معادلات پنگ-رابینسون و کارناهان-استارلینگ سازگاری ترمودینامیکی بهتری دارند. شان در سال ۲۰۰۶ با افزایش مرتبه همسانگردی در محاسبه نیروی برهمکنش بین فازها را از ۴ به ۸ افزایش داد و باعث کاهش سرعت‌های جعلی شد [۱۵]. با توجه به اینکه سایر جنبه‌های مدل پیشنهادی او با مدل شبه پتانسیل اصلی یکسان بود، همچنان وابستگی کشش سطحی و نسبت چگالی به ضریب تخفیف و محدودیت در نسبت چگالی در این مدل نیز دیده می‌شود. اسبراگلیا و همکاران^۲ در سال ۲۰۰۷ مدلی را پیشنهاد دادند که در آن نیروی برهمکنش بین دو فاز از رابطه جدیدی به دست می‌آمد و مرتبه همسانگردی تا ۱۰ افزایش یافت [۱۶]. سرعت‌های جعلی در این مدل به مقدار قابل توجهی کاهش یافت و همچنین کشش سطحی و نسبت چگالی به صورت مستقل قابل محاسبه بود. کوپرشتوخ و همکاران^۳ در سال ۲۰۰۹ مدلی ارائه کردند که هم برای محاسبه نیروی برهمکنش فازها و هم برای چگونگی اعمال این نیرو در معادله اصلی شبکه بولتزمن قابل استفاده بود [۱۷]. روش نیرویی معرفی شده توسط کوپرشتوخ و همکاران به روش نیرویی اختلاف دقیق معروف شد. آن‌ها از معادلات حالت واندروالس کاپلون-مشکالین^۴، کارناهان-استارلینگ^۵ و کاپلون-مشکالین اصلاح شده استفاده کردند. با ارائه این مدل، توانستند شبیه‌سازی آزمون لاپلاس را تا نسبت چگالی ۱۰^۹ انجام دهند و نشان دادند که معادلات حالت کارناهان-استارلینگ و کاپلون-مشکالین اصلاح شده از

^۱ Carnahan-Starling

^۲ Sbragaglia et al.

^۳ Kupershtokh et al.

^۴ Kaplun-Meshkalin

^۵ Carnahan-Starling

سازگاری ترمودینامیکی خوبی برخوردارند. مدل آن‌ها باعث کاهش سرعت‌های جعلی و مستقل شدن کشش سطحی و نسبت چگالی از ضریب تخفیف شد. در سال ۲۰۱۲ لی و همکاران روش نیرویی گو^۱ [۱۳] را با تعریف یک سرعت جدید بهبود دادند [۱۸]. آن‌ها برای سنجش اعتبار مدلشان از آزمون لاپلاس استفاده کردند. این مدل از نظر ترمودینامیکی سازگاری بهتری داشت و کشش سطحی و نسبت چگالی به ضریب تخفیف وابسته نبودند؛ همچنین در سال ۲۰۱۳ روش شبکه بولتزمن با ضریب تخفیف چندتایی را بر مدلی که قبلاً معرفی کرده بودند اعمال کردند [۱۸]؛ علاوه با بررسی میزان تأثیر ثابت a در معادله حالت کارناهان-استارلینگ به این نتیجه رسیدند که ضخامت سطح مشترک با ثابت a به صورت تقریبی رابطه معکوس دارد. آن‌ها با کمک این مدل جدید سرعت‌های جعلی را با افزایش ضخامت سطح مشترک کاهش دادند و نسبت چگالی و کشش سطحی را به صورت مستقل تعیین کردند و توانستند شبیه‌سازی را تا نسبت چگالی ۵۰۰ برابر انجام دهند. در سال ۲۰۱۵ هو و همکاران روشی برای تنظیم کردن کشش سطحی در مدل کوپرشتوخ ارائه کردند [۱۹]؛ آن‌ها روش شبکه بولتزمن با ضریب تخفیف چندتایی را همراه با روش نیرویی گو در این مدل اعمال کردند و با بیان مشکلات سایر روش‌ها، روش نیرویی گو اصلاح‌شده را روش مطمئن‌تری معرفی کردند. از دیگر اصلاحات اخیر در مدل شبه‌پتانسیل شان و چن می‌توان به مطالعات خواجه پور و همکاران [۲۰]، براون و لو^۲ [۲۱] در سال ۲۰۱۵ و باکیم و همکاران^۳ [۲۲] در سال ۲۰۲۰ اشاره کرد. به دلیل تغییرات مدل کوپرشتوخ نسبت به مدل اصلی شبه‌پتانسیل در سال‌های اخیر این مدل به نام مدل شبه‌پتانسیل اصلاح‌شده معروف شده است.

^۱ Gou Force Method

^۲ Brown and lu

^۳ Baakim et al.

در ایران نیز پژوهش‌هایی به صورت پایان‌نامه در این زمینه صورت گرفته است که می‌توان به پایان‌نامه‌هایی با عنوان مدل شبه‌پتانسیل اصلاح‌شده شبکه بولتزمن برای شبیه‌سازی جریان تک جزئی-دوفازی توسط امین زراره [۲۳] و شبیه‌سازی جریان‌های چند فازی با نسبت چگالی بالا به روش شبکه بولتزمن توسط میثم خاتون‌آبادی [۲۴] اشاره کرد.

از پژوهش‌های صورت گرفته در دانشگاه صنعتی شاهرود نیز می‌توان به بررسی نفوذ و پیمایش قطره و لایه نازک مایع داخل محیط متخلخل توسط حانیه صالح‌آبادی [۲۵] و مدل‌سازی عددی تغییر شکل قطره غیر نیوتونی در کانال میکرو توسط فاطمه عزیزی [۲۶] و بررسی دوفازی تشکیل و جدایش جت سیال توسط هاجر محمدزاده ثانی [۲۷] و شبیه‌سازی نانو سیالات با استفاده از روش بولتزمن توسط احد ضرغامی [۲۸] اشاره کرد.

۱.۳ اهداف و ضرورت انجام تحقیق

در بسیاری از بخش‌های صنعتی و کشاورزی با جریان‌های دوفازی در محیط متخلخل روبرو هستیم. از جمله کاربردهای جریان‌های دوفازی در محیط متخلخل می‌توان به فرآیند اکتشاف نفت، بازیابی منابع آب زیرزمینی و پیل سوختی با غشای تبادل کننده پروتون نام برد. بهترین راه برای محاسبه نفوذپذیری محیط متخلخل در جریان دوفازی، استخراج داده‌ها توسط اندازه‌گیری آزمایشگاهی است. به دلیل پرهزینه بودن مطالعات آزمایشگاهی در این زمینه و سخت بودن بازیابی نمونه آزمایشگاهی محیط متخلخل پس از انجام یک آزمایش و با توجه به این واقعیت که آزمایش، همواره منعکس‌کننده شرایط حاکم بر سطح مورد مطالعه نمی‌باشد، در سال‌های اخیر شبیه‌سازی کامپیوتری مورد توجه قرار گرفته است. به دلیل مشکلات ذکر شده در مطالعات آزمایشگاهی، شبیه‌سازی عددی جریان سیال در محیط متخلخل و در

مقیاس حفره در حال گسترش و افزایش است. وارد کردن فرآیندها در مقیاس میکرو برای کنترل پدیده‌ها در مقیاس بزرگ از مهم‌ترین مزیت‌های این‌گونه شبیه‌سازی‌ها می‌باشد. تعامل بین دو فاز و تعامل هر یک از فازها با اجزا جامد محیط متخلخل از جمله مثال‌هایی از این فرآیندها در مقیاس میکرو می‌باشد و تأثیر مهمی بر رژیم جریان در مقیاس بزرگ دارند. در حال حاضر به دلیل محدودیت سرعت پردازش رایانه‌ها، حل این‌گونه جریان‌ها در مقیاس واقعی، برای کاربردهای مهندسی امکان‌پذیر نیست؛ به همین دلیل شبیه‌سازی در مقیاس حفره یا قطره به عنوان راه جایگزین و ابزاری مکمل به منظور تولید روابط سازنده برای شبیه‌سازی‌ها در مقیاس بزرگ مورد استفاده قرار می‌گیرد. شبیه‌سازی عددی برای پیش‌بینی نفوذپذیری نسبی جریان دوفازی در محیط متخلخل بر اساس ساختار حفره‌ها و ویژگی‌های سیال و اجزاء جامد، یکی از مثال‌های استفاده از شبیه‌سازی در مقیاس حفره است. آورام و پایاتاکیس^۱ در سال ۱۹۹۵ جزو اولین محققانی بودند که جریان دوفازی در محیط متخلخل را به‌صورت آزمایشگاهی و شبیه‌سازی عددی مورد بررسی قرار دادند [۲۹].

در سال‌های اخیر محققان زیادی برای توسعه شبکه بولتزمن جهت شبیه‌سازی جریان‌های چند فازی مدل‌های مختلفی پیشنهاد کردند. این مدل‌ها به‌طور کلی به سه دسته گرادیان رنگ^۲، شان و چن و انرژی آزاد^۳ تقسیم می‌شوند [۱]. بدیهی است که هر مدل مزایا و معایب خاص خود را دارا می‌باشد. متأسفانه سایر مدل‌ها در مدل نمودن جریان چند فازی با نسبت چگالی بالا ناتوان بودند و تنها روشی که قابلیت استفاده در نسبت چگالی‌های بسیار بالاتر را داشت روش شبه‌پتانسیل شان و چن بود. نسبت چگالی

^۱ Avram and Payatakes

^۲ Color Gradient

^۳ Free Energy

بالا بین دو فاز در طبیعت امری معمول است به طوری که در محدوده دمایی بین ۲۰ تا ۱۰۰ درجه سلسیوس نسبت چگالی از ۸۰۰ تا ۱۰۰۰۰ متغیر است. البته مدل شبه پتانسیل شان و چن در مسائل استاتیکی قابلیت خود را نشان داده است اما عملکرد آن برای مسائل پیچیده تر به خصوص مسائل دینامیکی به شدت کاهش پیدا می کند [۳۰]. در نتیجه در این پژوهش ابتدا مدل های مختلف ارائه شده بر مبنای روش شبه پتانسیل شان و چن را بررسی و سپس به آنالیز و مقایسه نتایج برگرفته از روش های ارائه شده پرداختیم. مدل شبه پتانسیل با وجود داشتن مزایای بسیار، نواقص بزرگی نیز دارد. وجود این نواقص در سال های اخیر باعث شده است که پژوهشگران مدل های اصلاحی را جهت رفع یا کم کردن این معایب و مشکلات ابداع کنند. از جمله این کاستی ها می توان به وجود سرعت های جعلی، شبیه سازی در نسبت چگالی پایین، ناسازگاری ترمودینامیکی، نسبت لزجت پایین بین دو فاز و وابستگی کشش سطحی و نسبت چگالی به ضریب تخفیف اشاره کرد. باید به این نکته اشاره کرد که در این پژوهش مدل های اصلاحی برای جریان تک جزئی-چند فازی مورد بررسی قرار می گیرند. زیرا هنوز مدل های اصلاحی روش شان و چن برای جریان چند جزئی-چند فازی قادر به شبیه سازی جریان های واقعی با نسبت چگالی و لزجت بالا نیستند. برای رفع و اصلاح مشکلات مدل اصلی شبه پتانسیل، مدل های مختلفی در سال های اخیر ابداع شده است که آن ها را می توانیم به چهار دسته تقسیم کنیم [۲]:

(۱) به کارگیری معادلات حالت مختلف

(۲) افزایش همسانگردی در محاسبه نیروی برهمکنش دو فاز

(۳) اصلاح معادله نیروی برهمکنش بین فازها

(۴) به کارگیری روش های نیرویی مختلف برای اضافه کردن نیروی برهمکنش به معادله

تابع توزیع چگالی

تا حدود ده سال پس از ارائه مدل شان و چن توابعی که ارائه شدند حداکثر برای نسبت چگالی‌های کمتر از ۶۰ قابل استفاده بودند. این مقادیر تنها برای مواردی که نیروی موئینگی غالب باشد و نسبت چگالی نقش مهمی در جریان ایفا نکند قابل قبول هستند. البته برای شبیه‌سازی محدوده وسیعی از جریان‌های دوفازی در طبیعت قابل استفاده نیست زیرا نسبت چگالی در آن‌ها در محدوده ۱۰۰۰ می‌باشد.

نسبت لزجت نیز یکی دیگر از مشکلات موجود در این روش است. مشابه نسبت چگالی، با افزایش نسبت لزجت مقدار جریان ساختگی نیز افزایش می‌یابد و باعث ناپایداری روش می‌گردد [۳۱]. نسبت لزجت در مقایسه با نسبت چگالی چالش بزرگ‌تری است؛ زیرا حتی مدل‌های جدید ارائه شده که مشکل نسبت چگالی را تا حدود زیادی حل کرده‌اند برای نسبت لزجت بالا سازگار نشده‌اند.

در سال‌های اخیر روش‌های متعددی برای بهبود و توسعه مدل شان و چن ارائه شده است. وارد کردن معادله حالت واقعی در مدل شان و چن یکی از مهم‌ترین آن‌هاست که چندین مزیت از جمله کاهش جریان ساختگی و افزایش نسبت چگالی به همراه داشته و همچنین ناسازگاری ترمودینامیکی را به حداقل رسانده است [۳۲]. علاوه بر این موارد در مدل اصلی شان و چن تنها گره‌های نزدیک برای محاسبات ایزوتوپی مرتبه ۴ استفاده شده‌اند. با افزایش ایزوتوپی اپراتور نیرو، جریان ساختگی به مقدار قابل توجهی کاهش می‌یابد [۱]. یکی دیگر از تغییرات بسیار مؤثر، استفاده از روش‌های نیرویی متفاوت است که ترکیب تقریب محلی و تقریب مقدار میانگین نتایج را به‌طور قابل ملاحظه‌ای بهبود می‌دهد [۳۳].

۱.۴ روش انجام تحقیق

پژوهشگران زیادی در سال‌های اخیر از روش شبکه بولتزمن برای شبیه‌سازی جریان‌های چند فازی استفاده کرده‌اند و آن را توسعه داده‌اند. مدل شبه پتانسیل شان و چن تنها روشی است که قابلیت شبیه‌سازی

جریان‌های چند فازی در نسبت چگالی‌های بالا را دارد. در این تحقیق سعی کرده‌ایم ابتدا برخی از مدل‌های مبتنی بر مدل شبه‌پتانسیل شان و چن را بررسی کنیم سپس به ارزیابی میزان چگالی مایع و گاز بر پایداری شبیه‌سازی جریان تک جزئی-دوفازی به روش بولتزمن با استفاده از مدل شبه‌پتانسیل پرداختیم. همچنین در این مطالعه کد شبکه بولتزمن برای اعمال معادلات حالت جدید اصلاح شد تا محدودیت‌های شبکه بولتزمن در شبیه‌سازی جریان دوفازی با نسبت چگالی بالا و ناپایداری‌های موجود در آن کاهش یابد. همچنین با استفاده از کد مذکور، شبیه‌سازی‌های این مطالعه با استفاده از اجرای آن در محیط نرم افزار MATLAB و محیط برنامه نویسی C انجام پذیرفت.

۱.۵ ساختار پایان‌نامه

این پایان‌نامه شامل چهار فصل می‌باشد.

فصل اول مقدمه، کلیات، ضرورت، اهمیت، پیشینه و اهداف تحقیق انجام‌شده را بیان می‌کند. در فصل دوم به معرفی معادله بولتزمن و روش‌های گسسته‌سازی این معادله، انواع شرایط مرزی، انواع معادله حالت و ... پرداخته شده است. در فصل سوم به تجزیه و تحلیل معادله حالت شان و چن پرداختیم و محدودیت‌های این مدل مورد بحث و بررسی قرار گرفت. در این فصل با استفاده از کد نوشته‌شده، آزمون لاپلاس برای بررسی کشش سطحی یک قطره معلق در سیال دوم با معادلات حالت مختلف انجام شد و همچنین با استفاده از داده‌های بدست آمده از ارتباط بین پارامترها و زاویه تماس، چهار فرمول جدید برای محاسبه زاویه تماس قطره با دقت بسیار بالا ارائه شده است. در انتها با جایگزینی معادلات حالت وندروالس^۱ و

^۱ Van der Waals EOS

کارناهان-استارلینگ در معادله شان و چن به بررسی و مقایسه نتایج پرداخته ایم. در فصل چهارم نیز نتایج حاصل از این تحقیق بیان شده و پیشنهادهای لازم ارائه گردیده است.

فصل دوم

مروری بر ادبیات موضوع

۲.۱ مقدمه

می‌دانیم که معادلات انتقال مانند گرما، تکانه و جرم قابلیت این را دارند بتوان آن‌ها را شبیه‌سازی کرد. برای این منظور برای شبیه‌سازی آن‌ها در مقیاس میکروسکوپی از معادلات ناویر-استوکس^۱ استفاده می‌کنند. از آنجاییکه این معادلات غیرخطی هستند و با وجود هندسه پیچیده و شرایط مرزی، حل تحلیلی آن‌ها مشکل است، با استفاده از روش‌های مختلفی مانند روش حجم محدود^۲ (FVM) و یا روش تفاضل محدود^۳ (FDM) آن‌ها را به یک دستگاه معادلات جبری تبدیل و حل می‌کنند.

روش بعدی روشی است که در مقیاس میکروسکوپی ذرات ریز را شبیه‌سازی می‌کند. در این روش موقعیت و سرعت هر ذره تعریف می‌شود که با استفاده از معادله همیلتون^۴ این کار را انجام می‌دهند. این روش به دلیل میکروسکوپی بودن باید در آن ساده‌سازی‌هایی انجام شود تا بتوان آن را حل نمود [۳۱].

روش شبکه بولتزمن روشی است که فاصله میان روش‌های میکروسکوپی و ماکروسکوپی را پر کرده است. در واقع این روش توده‌ای از ذرات را به‌عنوان یک ذره واحد در نظر می‌گیرد و بر مبنای مدل میکروسکوپی و معادلات جنبشی مزوسکوپی رفتار سیال را شبیه‌سازی می‌کند. ایده اصلی این روش ساخت مدل‌های جنبشی است که با فیزیک فرآیند میکروسکوپی همراه شده و از خواص ماکروسکوپی و معادلات ماکروسکوپی پیروی کند [۱].

^۱ Navier-Stokes Equations

^۲ Finite Volume Method

^۳ Finite Difference Method

^۴ Hamilton Equation

۲.۲ روش‌های عددی در مدل‌سازی جریان

جریان‌های سیالات در قسمت‌های مختلف زندگی ما وجود دارند و به همین دلیل است که مطالعه دینامیک سیالات به دلیل کاربردهای گسترده‌ای که در زمینه‌های مختلف صنعت دارد، از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. با توجه به اینکه سیالات از ویژگی‌های ساختاری و شیمیایی متنوعی برخوردار هستند، همواره دینامیک سیالات چندفازی به دلیل پیچیدگی‌های خاص و کاربردهای مؤثر آن در صنایع مختلف، مورد توجه پژوهشگران و دانشمندان قرار داشته است.

وجود دو سیال با ویژگی‌های متفاوت، جریان چند جزئی^۱ و یک سیال با دو فاز مختلف به‌طوری‌که این دو فاز در یک محیط در حال فعل‌وانفعال با یکدیگر باشند، جریان چند فازی^۲ نامیده می‌شود.

جریان‌های سطح مشترک جریان‌هایی هستند که در آن دو سیال با سطح مشترک در تماس می‌باشند که می‌تواند مانند تماس آب و نفت چند جزئی باشد یا مثل هوا و سوخت مایع در فرایند احتراق چندفازی باشد. این‌گونه جریان‌های در فرایندهای مهندسی بسیار رایج می‌باشند. از کاربرد این‌گونه جریان‌ها می‌توان به شبیه‌سازی جریان سیالات مخزن در مهندسی نفت اشاره کرد.

جریان چندفازی سیال در طبیعت و علوم و سیستم‌های مهندسی بسیار رایج است. یک سیستم چند فازی می‌تواند شامل موارد ذیل باشد [۲]:

اجزاء یکسان و فازهای متفاوت مانند سیستم آب مایع و بخار آب

اجزاء مختلف با نسبت‌های بسیار متفاوت چگالی مانند سیستم آب مایع و هوا

^۱ Multi-Component flow

^۲ Multiphase flow

اجزاء مختلف با اختلاف چگالی کم مانند سیستم نفت و آب مایع

یکی از موضوعات اساسی جریان چندفازی، رفتار دینامیکی قطره یا حباب است که از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است و مورد توجه بسیاری از پژوهشگران قرار گرفته است که از کاربردهای آن می‌توان به طراحی موتور راکت با سوخت مایع، دستگاه‌های پمپاژ خون، موتورهای دیزل، توربین‌ها و دستگاه‌های خنک‌کننده اشاره کرد [۳۴].

برای شبیه‌سازی جریانات چندفازی، پیش‌بینی سطح مشترک بین دو سیال و شکل و توپولوژی سطح مشترک آن‌ها از مشکلات اولیه این کار به شمار می‌آیند. تکنیک‌های اندازه‌گیری خواص سیالات و روش‌های آزمایشگاهی برای این‌گونه جریان‌ها طراحی نشده‌اند و مشکلات زیادی برای اندازه‌گیری خواص در دو طرف فازهای آن وجود دارد.

وجود دو ویژگی این جریان‌ها را پیچیده کرده است؛ اولاً، در سطح مشترک دو سیال به دلیل وجود کشش سطحی ناپایداری‌های بسیاری رخ می‌دهد. دوماً، شبیه‌سازی این جریان‌ها به دلیل حرکت سطح مشترک و تغییرات شدید آن باگذشت زمان از لحاظ عددی بسیار پیچیده می‌باشند. علاوه بر تمام این موارد در صورت وجود اختلاف چگالی زیاد بین دو سیال، به دلیل نقش مهم نیروهای بین دو سیال پیچیدگی محاسبات چندین برابر می‌شود.

در بررسی دینامیک سیالات، تعداد زیادی از روش‌های عددی بر پایه دینامیک سیالات محاسباتی سنتی و روش شبکه بولتزمن استوار می‌باشند که با استفاده از آن‌ها می‌توان جریان‌های چندفازی را شبیه‌سازی نمود. روش دینامیک سیالات محاسباتی سنتی بر اساس معادلات ناویر-استوکس می‌باشد که قابلیت بسیار بالایی در شبیه‌سازی محدوده وسیعی از جریان‌ها دارد اما باین وجود روش شبکه بولتزمن به دلیل سادگی و عدم وجود شرط پیوستگی به منظور مدل‌سازی ابعاد میکرو و نانو گسترش یافته است [۳۵].

این مدل دید مولکولی سیال را نادیده می‌گیرد و آن را یک محیط پیوستار که با تغییرات زمان، مکان، چگالی، سرعت، فشار، دما و دیگر خواص ماکروسکوپیک قابل توصیف است، در نظر می‌گیرد. در مدل‌های پیوستار، خواصی مانند سرعت، چگالی و غیره را می‌توان به صورت میانگین این خواص در المان‌هایی تعریف کرد که این المان‌ها در مقایسه با ساختار ماکروسکوپیک به اندازه کافی کوچک و در مقایسه با ساختار میکروسکوپیک به اندازه کافی بزرگ می‌باشند که می‌توان با استفاده از معادلات دیفرانسل روابط بین آنها را تبیین کرد.

روش شبکه بولتزمن شامل تعدادی تکرار می‌باشد که در هر تکرار دو عمل برخورد و انتشار اطلاعات صورت می‌پذیرد. یکی از مهم‌ترین ویژگی‌های این روش، توانایی در شبیه‌سازی جریان‌های حاوی سطح مشترک است. روش شبکه بولتزمن توانایی تشخیص خودکار سطح مشترک را دارد و همچنین زمان حل معادلات در این روش کاهش چشمگیری دارد. از مزیت‌های دیگر آن می‌توان به انتقال محلی اطلاعات در زمان و مکان اشاره کرد که زمینه را برای انجام محاسبات موازی فراهم می‌کند.

با گسترش روش شبکه بولتزمن و مورد توجه قرار گرفتن این روش توسط محققان در دهه‌های اخیر، مدل‌های زیادی بر مبنای این روش برای شبیه‌سازی این گونه جریان‌ها ابداع شد که به‌طور کلی به سه دسته مدل‌های گرادیان رنگ، شان و چن و انرژی آزاد تقسیم می‌شوند [۱]. بدیهی است که هر کدام از این مدل‌ها معایب و مزایای خاصی را دارا می‌باشند که با توجه به قابلیت مدل شان و چن در شبیه‌سازی جریان‌های چند فاز با نسبت چگالی بالا و ساده‌تر بودن این روش نسبت به سایر روش‌ها این روش را انتخاب کرده‌ایم. همچنین به دلیل گستردگی مدل‌های ارائه‌شده بر مبنای این روش سعی شده است تا مناسب‌ترین مدل برای شبیه‌سازی جریان چند فاز با نسبت چگالی‌های بالا انتخاب شود.

۲.۳ شبیه‌سازی جریان به روش شبکه بولتزمن

روش‌های عددی متفاوتی جهت بررسی و حل مسائل مختلف در دینامیک سیالات محاسباتی بکار برده می‌شود. تلاش اصلی این دانش حل معادلات گسسته ناویر-استوکس با روش‌های رایج عددی مانند حجم محدود، اجزاء محدود^۱ و غیره می‌باشد که قابلیت خود را در حل مسائل مختلف نشان داده‌اند. البته وجود برخی پدیده‌های پیچیده کار را برای شبیه‌سازی به کمک این روش‌ها مشکل کرده است. به همین دلیل تلاش برای ابداع روش‌های جدید و کارآمد جهت حل این مسائل امری ضروری و شایسته است.

از اواخر دهه ۸۰ قرن گذشته روش شبکه بولتزمن به‌عنوان یک روش مزوسکوپی جدید بر پایه تئوری جنبشی گسسته و یک ابزار قدرتمند برای شبیه‌سازی و بررسی عددی کلاس گسترده جریان‌های پیچیده پدیدار شد که این جریان‌ها شامل جریان‌های متخلخل، جریان‌های حرارتی، انتقال واکنشی، جریان‌های توربولنت^۲ یا آشفته و جریان‌های چندفازی می‌باشند [۲]. این روش محصول مشترک روش تئوری سینتیک و روش عددی شبکه گاز خودکار^۳ است. از نقاط قوت این روش می‌توان به این نکته اشاره کرد که در این روش دید محیط پیوسته که در روش‌های معمول عددی رایج است وجود ندارد. در این روش سیستم شامل تعداد محدودی ذره است که استفاده از کمیت اسکالر نامحدودی به نام تابع توزیع^۴ احتمال حضور هر ذره را در زمان و مکان و با سرعتی مشخص بیان می‌کند. برای به دست آوردن دینامیک

^۱ Finite Element Method

^۲ Turbulent Flows

^۳ Lattice gas cellular automata (LGCA)

^۴ Distribution Function

حاکم بر سیستم، با استفاده از معادله بولتزمن، تغییرات این تابع توزیع به واسطه برخوردهای ممکن بین ذرات به دست خواهد آمد.

این روش در نهایت مانند سایر روش‌های عددی به حل معادلات معروف ناویر-استوکس^۱ می‌پردازد اما برتری و قدرتمندی این روش را می‌توان در مدل‌سازی پدیده‌های نسبتاً پیچیده مثل محیط‌های متخلخل و سیالات چندفازی مشاهده کرد. همچنین این روش باعث شده است که در برخورد با مسائل پیچیده بتوان با ارائه یک مدل فیزیکی آن پدیده را به راحتی حل نمود [۱].

از نظر تاریخی روش شبکه بولتزمن الهام گرفته از روش شبکه گاز خودکار است که در سال ۱۹۷۶ توسط هاردی و همکاران^۲ ارائه شد [۳۶]. این روش دو اشکال عمده داشت که برای ابداع روش شبکه بولتزمن به محققان ایجاد انگیزه نمود؛ نخستین و مهم‌ترین اشکال این روش نداشتن شرط "نامتغیر گالیلای"^۳ بود. این شرط زمانی برقرار می‌شود که سیستم ذرات در دستگاه ساکن و همچنین در دستگاه با سرعت ثابت، عملکرد یکسانی داشته باشند و دینامیک حاکم بر آن تغییر نکند؛ دیگر اشکال این روش وجود اختلالات فراوان در جواب‌های حالت پایدار است.

روش بولتزمن به عنوان یک روش دینامیک سیالات محاسباتی^۴ نخستین بار در سال ۱۹۸۸ توسط مک نامارا^۵ و زانتی ارائه شد [۳۷]. این روش سیال را به صورت مجموعه‌ای از ذرات در نظر می‌گیرد که این

^۱ Navier-Stocks Equations

^۲ Hardi et al.

^۳ Galilean Invariant

^۴ Computational Fluids Dynamics

^۵ McNamara & Zanetti

ذرات در گره‌های یک شبکه منظم با هم برخورد می‌کنند. همان‌گونه که اشاره شد، روش شبکه بولتزمن از ایده روش شبکه گاز برای گسسته سازی معادلات سینتیک بولتزمن و حل آن‌ها استفاده می‌کند. به همین دلیل این روش برخی از مزایای روش شبکه گاز مانند امکان پردازش موازی و عدم وجود دستگاه معادلات خطی و غیرخطی را دارد. از دیگر مزیت‌های این روش انتقال محلی اطلاعات در زمان و مکان است که زمینه را برای انجام محاسبات موازی فراهم می‌کند. با توجه به شبکه محاسباتی و ماهیت خطی و محلی این روش، استفاده از آن برای شبیه‌سازی پدیده‌های سطح مشترک مناسب است. با توجه به این نکته که روابط ارائه‌شده در روش شبکه بولتزمن از ترمودینامیک آماری استخراج شده است، دید فیزیکی متفاوتی نسبت به روش‌های محیط پیوسته در مورد مسائل دوفازی دارد.

روش شبکه بولتزمن به‌عنوان یک روش محاسباتی از جنبه‌های مختلفی با روش‌هایی که مبتنی بر معادله ناویر-استوکس هستند متفاوت است که این تفاوت‌ها را می‌توان در موارد زیر خلاصه کرد:

(۱) معادله ناویر-استوکس دارای جملات جابجایی غیرخطی به شکل $u \cdot \nabla u$ است،

درحالی‌که در روش بولتزمن چنین جملاتی وجود ندارد.

(۲) معادله ناویر-استوکس یک معادله دیفرانسیل غیرخطی گسسته است. درحالی‌که

وقتی معادله بولتزمن با استفاده از تقریب بی-جی-کی^۱ استخراج می‌گردد، یک

معادله‌ی پاره‌ای از مرتبه اول است. این اختلاف در نحوه گسسته سازی معادلات و

سادگی برنامه‌نویسی دو روش تأثیرگذار است.

^۱ Bahatnagar-Gross-Krook Approximation

(۳) جهت محاسبه میدان فشار در محاسبات مبتنی بر معادلات ناویر-استوکس، در اکثر

موارد منوط به حل معادلاتی می باشد که مستلزم استفاده از تمام اطلاعات میدان

سیال و تبادل آن‌ها در کل میدان سیال است. درحالیکه در روش شبکه بولتزمن تبادل

اطلاعات به صورت محلی و فشار عملاً با بکار گیری معادله حالت محاسبه می شود.

(۴) به دلیل اینکه روش شبکه بولتزمن بر مبنای ذرات است مطابق با فیزیک مسائلی که

در سطح مولکولی ارتباط دارند می باشد؛ لذا می توان از این روش برای شبیه سازی

سیال در ابعاد میکرو و نانو نیز استفاده کرد.

روش شبکه بولتزمن برخلاف اکثر روش های عددی که روی گسسته سازی معادلات ماکروسکوپی

استوار هستند، بر روی مدل های میکروسکوپی و مدل های جنبشی مزوسکوپی استوار است. یکی از

مهم ترین کاربردهای روش شبکه بولتزمن که بیشترین توجهات را نسبت به خود جلب کرده است،

شبیه سازی و مدل کردن جریان های چند جزئی یا چندفازی است. شبیه سازی این گونه جریان ها با

روش های عددی مرسوم، یعنی حل ماکروسکوپی معادلات ناویر-استوکس به دلیل سطح مشترک های

پیچیده در جریان های ناهمگن، بسیار مشکل است. اما به دلیل ماهیت طبیعی جنبشی روش شبکه بولتزمن

این گونه مسائل را به راحتی می توان با این روش حل کرد [۳۸].

همان طور که اشاره شد روش های دینامیک سیالات محاسباتی با ایجاد چالش هایی در زمینه

شبیه سازی جریان های چندفازی، محققان را بر این داشته است که مدل های جدیدی بر مبنای روش شبکه

بولتزمن طراحی و ارائه کنند.

برای بدست آوردن دینامیک حاکم بر سیستم، تغییرات تابع f با استفاده از تئوری سینتیک (معادله

بولتزمن) به واسطه برخورد های ممکن بین ذرات بدست می آید. در معادله شبکه بولتزمن مفهوم تابع برخورد

با استفاده از مجموعه‌ای از ساده‌سازی‌ها به صورت خطی درمی‌آید. این تابع با فرض دور نبودن تابع توزیع ذرات از تابع توزیع تعادلی به دست آمده است.

روش شبکه بولتزمن سعی کرده است که با الگوریتمی یکسان اما از منظری متفاوت مشکلات شبکه گاز خودکار را حل کند. به همین منظور این روش این ایده را مبنای خود قرار داده است که بجای دنبال کردن یک ذره مجموعه‌ای از ذرات دنبال شوند.

کمیتی اسکالر بنام تابع توزیع برای درک بهتر این روش معرفی شده است که به صورت $f = f(x, c_i, t)$ نشان داده می‌شود. این تابع احتمال حضور هر ذره را در زمان t با سرعت c_i در مکان x بیان می‌کند. با کمک این تابع که مقداری نامنفی و حقیقی دارد می‌توان دینامیک ذرات و تمام مشخصات میکروسکوپیک آن‌ها را مشخص کرد [۳۲].

تغییرات یک سامانه برخوردی که شامل تعداد محدودی ذره می‌باشد با رابطه زیر تعریف می‌شود:

$$C(f) = \frac{df}{dt} \quad (1-2)$$

رابطه (۱-۲) تابع برخورد بین ذرات می‌باشد. از آنجایی که تمامی مشخصات میکروسکوپیک یک سیستم تابعی از مقادیر میکروسکوپیک آن سیستم هستند با توجه به تعریف تابع توزیع می‌توان کمیت‌های میکروسکوپیک سیستم را به صورت زیر تعریف کرد:

$$\rho(x, t) = \int f(x, c_i, t) dx \quad (2-2)$$

$$u(x, t) = \frac{1}{\rho} \int f(x, c_i, t) c_i dx \quad (3-2)$$

که در این معادلات ρ چگالی، c_i سرعت در هر گره و u سرعت میکروسکوپیک می‌باشد.

۲.۳.۱ معادله بولتزمن

لودویگ بولتزمن^۱ دانشمندی اتریشی بود که فرضیاتی را ارائه کرد که بعدها به فرضیات بولتزمن معروف شد تا انتگرال جمله برخورد را بدست آورد. این فرضیات به این صورت عنوان می‌شوند [۳۳]:

(۱) تمامی برخوردها دوتایی هستند اما این فرض تا زمانی معتبر است که سیال چگال نباشد.

(۲) زمان برخوردها در مقایسه با زمان مشخصه سیستم بسیار ناچیز است.

(۳) برخوردها کاملاً الاستیک می‌باشد.

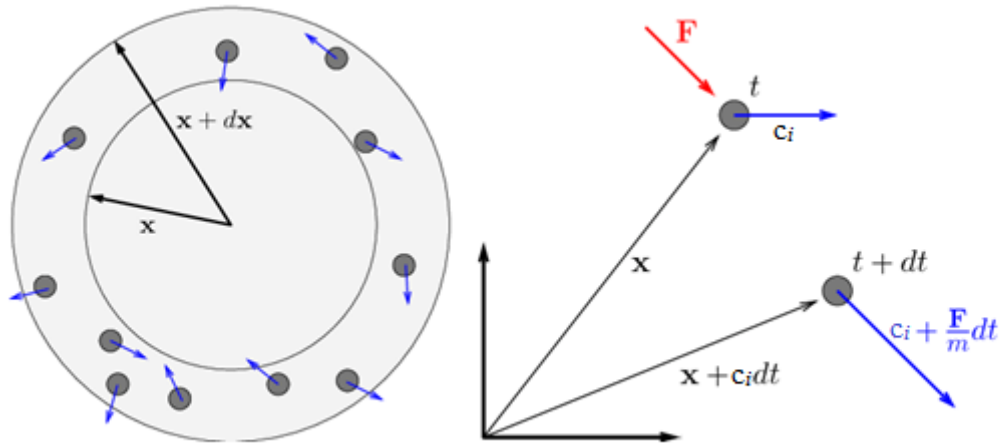
(۴) برخوردها در بعد میکروسکوپی به صورت برگشت پذیر هستند.

(۵) سرعت برخوردها در قبل و بعد از برخورد هیچ ارتباطی با یکدیگر ندارند.

با در نظر گرفتن این فرضیات و انجام عملیات ساده سازی ریاضی، انتگرال برخورد $c(f)$ بدست می‌آید. تابع توزیع که به صورت $f=f(x, c_i, t)$ بیانگر تعدادی ذره با جرم m در زمان t می‌باشد که بین مکان x و $x+dx$ با سرعت بین c_i و c_i+dc_i در حال جابجایی هستند. لازم به ذکر است که با اعمال نیروی F ، این ذرات بعد از زمان dt ، مکان و سرعت جدیدی را به خود می‌گیرند:

$$\begin{aligned} x &\rightarrow x + c_i dt \\ c_i &\rightarrow c_i + \frac{F}{m} dt \end{aligned} \quad (۴-۲)$$

^۱ Ludwig Boltzmann



شکل ۱-۲ مکان و سرعت ذرات قبل و بعد از اعمال نیرو [۳۱]

اگر برخوردی صورت نگیرد تعداد ذرات قبل و بعد از اعمال نیرو ثابت می‌ماند:

$$f(x + c_i dt, c_i + \frac{F}{m} dt, t + dt) dx dc_i = f(x, c_i, t) dx dc_i \quad (۵-۲)$$

اگر برخورد بین ذرات اتفاق بیفتد، تمامی ذرات به موقعیت جدید خود نمی‌رسند و برای بدست آوردن میزان تغییر بین وضعیت ابتدایی و انتهایی ذره، تابع توزیع عملگر برخورد را معرفی می‌کنیم. معادله بدست آمده که به همراه عبارت برخورد است این‌گونه نوشته می‌شود:

$$f(x + c_i dt, c_i + \frac{F}{m} dt, t + dt) dx dc_i - f(x, c_i, t) dx dc_i = \Omega(f) dx dc_i dt \quad (۶-۲)$$

اگر معادله (۶-۲) بر $dx dc_i dt$ تقسیم کنیم و dt نیز به سمت صفر میل پیدا کند، معادله (۷-۲) بدست می‌آید. این معادله نشان می‌دهد که نرخ تغییر توابع توزیع برابر با نرخ برخورد است [۳۹]. Df به صورت رابطه (۷-۲) بسط داده می‌شود:

$$Df = \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial c_i} dc_i + \frac{\partial f}{\partial t} dt \quad (۷-۲)$$

با تقسیم رابطه بالا بر dt رابطه زیر حاصل می‌شود:

$$Df = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial f}{\partial c_i} \frac{dc_i}{dt} + \frac{\partial f}{\partial t} \quad (۸-۲)$$

همان‌طور که می‌دانیم تغییرات مکان نسبت به زمان یعنی $\frac{dx}{dt}$ برابر با سرعت یعنی c_i می‌باشد.

همچنین تغییرات سرعت نسبت به زمان یعنی $\frac{dc}{dt}$ برابر با شتاب یعنی a است که بنابر قانون دوم نیوتون

می‌توان آن را به صورت $a = \frac{f}{m}$ نوشت و در نهایت فرمول بالا به این صورت درمی‌آید:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} c_i + \frac{F}{m} \frac{\partial f}{\partial c_i} = C(f) \quad (۹-۲)$$

در غیاب نیروهای خارجی می‌توان معادله (۹-۲) را به صورت زیر ساده نمود:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c_i \cdot \nabla f = C(f) \quad (۱۰-۲)$$

از آنجایی که تابع انتگرالی بدست آمده با فرضیات بولتزمن بسیار شکل پیچیده‌ای دارد و حل آن

بسیار زمان‌بر است، با استفاده از مفروضات محدودکننده این انتگرال را به اشکال ساده‌تر تبدیل نموده و

سپس آن را حل می‌کنیم.

باهاتناگار و همکاران^۱ با این فرض که سیستم به حالت تعادل نزدیک است، پارامتری را به نام زمان آسایش^۲ تعریف نمودند و تابع برخورد بولتزمن را به صورت زیر ساده کردند [۴۰]:

$$C(f) = -\frac{1}{\tau} (f - f^{eq}) \quad (۱۱-۲)$$

در رابطه (۱۱-۲)، τ زمان آسایش و f^{eq} تابع توزیع تعادلی می باشد. عملگر برخورد همان عبارت ویسکوز درون معادله ناویر-استوکس می باشد. پارامتر τ در تمامی جهات ثابت است و بین آن و لزجت رابطه زیر برقرار است:

$$\nu = \left(\tau - \frac{\Delta t}{2}\right) c_s^2 \quad (۱۲-۲)$$

که در آن، ν لزجت و c_s سرعت صوت در شبکه می باشد که برابر با $c_s = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\Delta x}{\Delta t}$ است. Δx گام مکانی و Δt گام زمانی می باشد که معمولاً گام های زمانی و مکانی برابر با واحد هستند. معادله زیر که به معادله ماکسول-بولتزمن^۳ معروف است بدین صورت تعریف می شود:

$$f^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{\frac{D}{2}}} \exp\left(-\frac{(c_i - u)^2}{2RT}\right) \quad (۱۳-۲)$$

در رابطه بولتزمن-ماکسول T برابر با دما، u سرعت ماکروسکوپی، ρ برابر با چگالی و R ثابت گاز و تقریباً برابر یک می باشد.

^۱ Bhatnagar et al

^۲ Relaxation Time

^۳ Maxwell-Boltzmann Equation

۲.۳.۲ گسسته سازی معادله بولتزمن

با در نظر گرفتن تقریب بی جی کی در معادله (۲-۱۰) می توان معادله بولتزمن را به صورت زیر ساده کرد:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c_i \cdot \nabla f = -\frac{1}{\tau} (f - f^{eq}) \quad (۲-۱۴)$$

با استفاده از معادله (۲-۱۵) معادله (۲-۱۴) را به شکل یک معادله دیفرانسیل معمولی (۲-۱۶) بازنویسی می کنیم:

$$\frac{\partial}{\partial t} + c_i \cdot \nabla = \frac{d}{dt} \quad (۲-۱۵)$$

$$\frac{df}{dt} + \frac{1}{\tau} f = \frac{1}{\tau} f^{eq} \quad (۲-۱۶)$$

پس انتگرال گیری از معادله (۲-۱۶) روی گام زمانی δt و کوچک فرض کردن آن و با استفاده از بسط تیلور تا مرتبه ۲، معادله (۲-۱۷) به صورت زیر نوشته می شود:

$$f(x + c_i \delta t, c_i, t + \delta t) - f(x, c_i, t) = -\frac{1}{\tau} [f(x, c_i, t) - f^{eq}(x, c_i, t)] \quad (۲-۱۷)$$

معادله (۲-۱۷) به صورت زمانی گسسته شده است و دقت مرتبه اول دارد. گرچه f^{eq} به صورت تابعی از زمان نوشته شده است اما تابعیت آن به زمان به متغیرهای هیدرودینامیکی u, ρ باز می گردد:

$$f^{eq}(x, c_i, t) = f^{eq}(x, c_i, \rho, u, t) \quad (۲-۱۸)$$

معادله حاکم بر شبکه بولتزمن به شکل معادله (۲-۱۷) می باشد که در آن فضای سرعت به مجموعه ای کوچک تر از سرعت، گسسته شده است.

قوانین بقای کمیت‌های هیدرودینامیکی به شکل معادلات زیر می‌باشند:

$$\rho = \sum_i f_i = \sum_\alpha f_i^{eq} \quad (19-2)$$

$$\rho u = \sum_i c_i f_i = \sum_i c_i f_i^{eq} \quad (20-2)$$

یکی از اجزای دیگر معادله شبکه بولتزمن، تابع توزیع تعادلی مناسبی است که باعث تبدیل معادلات شبکه بولتزمن به معادلات ناویر-استوکس شود. تابع توزیع تعادلی برای مدل دوبعدی با ۹ مؤلفه سرعت $D2Q9$ به صورت زیر تعیین می‌شود.

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left\{ 1 + \frac{c_i \cdot u}{RT} + \frac{(c_i \cdot u)^2}{2(RT)^2} - \frac{u^2}{2RT} \right\} \quad (21-2)$$

با جایگذاری $RT = c_s^2 = \frac{c}{3}$ در معادله (۲۱-۲) تابع توزیع تعادلی در نهایت به صورت معادله زیر

تعریف می‌شود:

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left\{ 1 + \frac{c_i \cdot u}{c_s^2} + \frac{(c_i \cdot u)^2}{2(c_s^2)^2} - \frac{u^2}{2c_s^2} \right\} \quad (22-2)$$

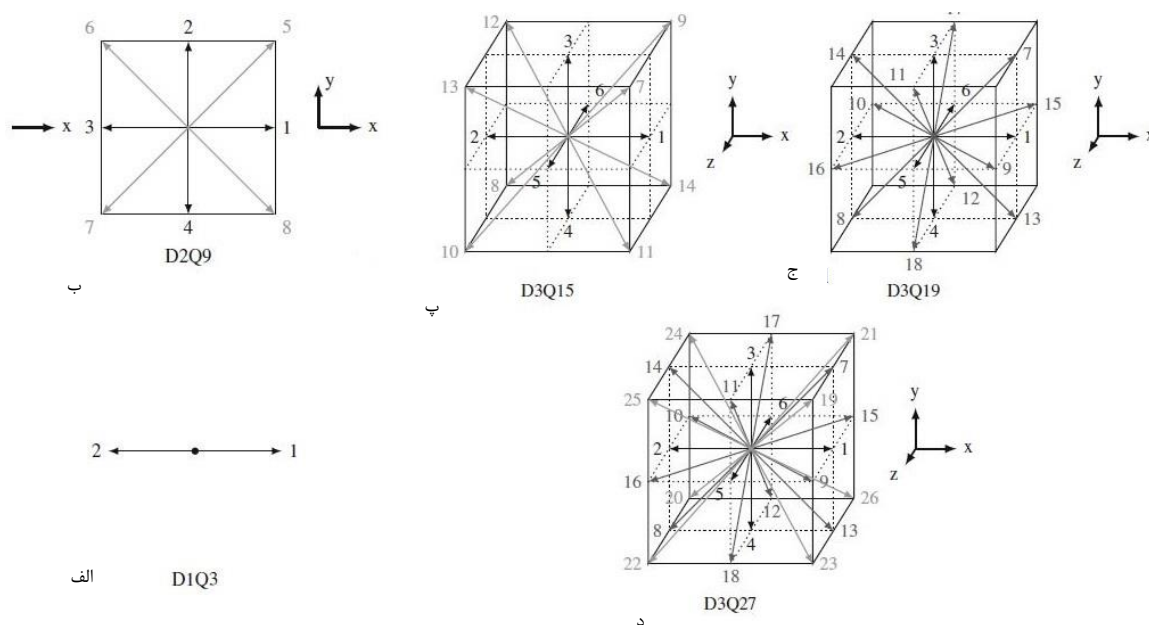
باید به این نکته توجه شود که c تابع توزیع شبکه (سرعت) و برابر با $c = \frac{\Delta x}{\Delta t}$ است. در صورتی که

از شبکه $D2Q9$ استفاده شود، ضرایب وزنی و سرعت‌های گسسته شده به صورت زیر محاسبه می‌شوند:

$$c_{i\alpha} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \quad (23-2)$$

$$w_i = \begin{bmatrix} \frac{4}{9} & \frac{1}{9} & \frac{1}{9} & \frac{1}{9} & \frac{1}{9} & \frac{4}{9} & \frac{4}{9} & \frac{4}{9} & \frac{4}{9} \end{bmatrix} \quad (24-2)$$

در هر دو معادله (۲۳-۲) و (۲۴-۲) بیان گر جهت سرعت گسسته شده و α بعد آن می باشد. به عنوان مثال α در مسائل دوبعدی می تواند یکی از جهت های کارتیزی x یا y باشد. برای یک شبکه با نه جهت برای سرعت های گسسته نام گذاری جهت ها به صورت زیر است:



شکل ۲-۲ مدل های سرعت گسسته الف) شبکه D1Q3، ب) D2Q9، پ) D3Q15، ج) D3Q19 و د) D3Q27 [۴۱].

بدلیل صرفه جویی در وقت و قابل قبول بودن نتایج، در شبیه سازی های انجام شده در این تحقیق از روش D_2Q_9 استفاده شده است.

با مشخص شدن تابع توزیع تعادلی به راحتی می توان از معادله (۱۷-۲) استفاده کرد با توجه به مباحث اشاره شده و معادلات (۱۹-۲) و (۲۰-۲) می توان روش شبکه بولتزمن را برای هریک از جهات گسسته شده بصورت زیر بازنویسی کرد.

۱- مرحله برخورد:

$$f_i^*(x, t) = f_i(x, t) - \frac{1}{\tau} [f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)] \quad (25-2)$$

۲- مرحله انتشار:

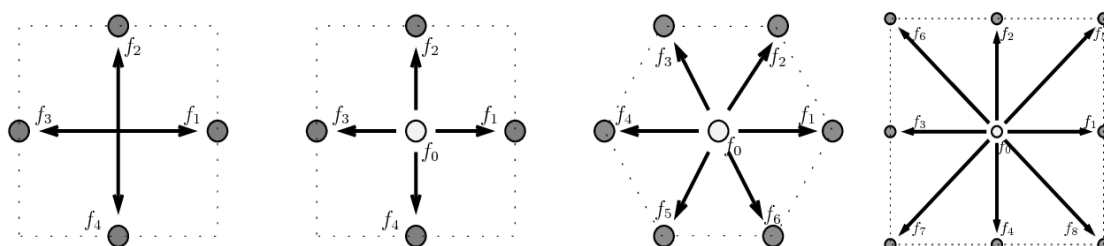
$$f(x+c_i\delta t, t+\delta t) = f_i^*(x, t) \quad (2-26)$$

مراحل انجام روش‌های عددی با استفاده از شبکه بولتزمن در قسمت‌های بعدی به تفصیل توضیح داده شده است.

۲.۳.۳ آرایش شبکه

در این بخش انواع شبکه‌های دوبعدی مورد استفاده در شبکه بولتزمن را بررسی می‌کنیم. همان‌طور که در مباحث گذشته اشاره شد برای نشان دادن نوع شبکه از عبارت $D_m Q_n$ استفاده می‌شود. n تعداد جهات ممکن برای حرکت هر گره و m بعد مسئله را نشان می‌دهد.

لازم به ذکر است که نقاط شبکه در فواصل مختلفی نسبت به گره وسط قرار دارند که این موضوع باعث به وجود آمدن ضرایب وزنی در شبکه بولتزمن شده است و این موضوع در محاسبه توابع توزیع تعادلی مشهود می‌باشد. مقادیر پارامتر ضریب وزنی به فاصله گره‌ها با گره وسطی بستگی دارد و مجموع این ضرایب برای هر شبکه برابر با یک می‌باشد ($\sum w_i = 1$).



شکل ۲-۳ انواع شبکه‌های دوبعدی استفاده شده در روش بولتزمن؛ از چپ به راست به ترتیب:

[۲۴] D2Q9, D2Q7, D2Q5, D2Q4

جدول ۱-۲ ضرایب وزنی توابع توزیع و بردارهای سرعت در شبکه‌های دوبعدی روش شبکه بولتزمن

$F_k(w_k)$	بردار سرعت	آرایش شبکه
$f_{1,2,3,4}(\frac{1}{4})$	$(\pm 1, 0), (0, \pm 1)$	D_2Q_4
$f_{1,2,3,4}(\frac{1}{4}) f_0(\frac{4}{6}), f_{1,2,3,4}(\frac{1}{12})$	$(0, 0), (\pm 1, 0), (0, \pm 1)$	D_2Q_5
$f_0(\frac{1}{2}), f_{1,2,\dots,6}(\frac{1}{12})$	$(0, 0), (\pm 1, 0), (\pm \frac{1}{2}, \pm \frac{\sqrt{3}}{2})$	D_2Q_7
$\frac{1}{2} f_0(\frac{4}{9}), f_{1,2,3,4}(\frac{1}{9}), f_{5,6,7,8}(\frac{1}{36})$	$(0, 0), (\pm 1, 0), (0, \pm 1), (\pm 1, \pm 1)$	D_2Q_9

با وجود اینکه از نظر محاسبات کامپیوتری شبکه D_2Q_9 زمان بیشتری نسبت به شبکه D_2Q_9 و بقیه

شبکه‌ها صرف می‌کند اما به دلیل دقت بسیار بالاتر روش مطلوبی به حساب می‌آید.

۲.۳.۴ الگوریتم روش شبکه بولتزمن

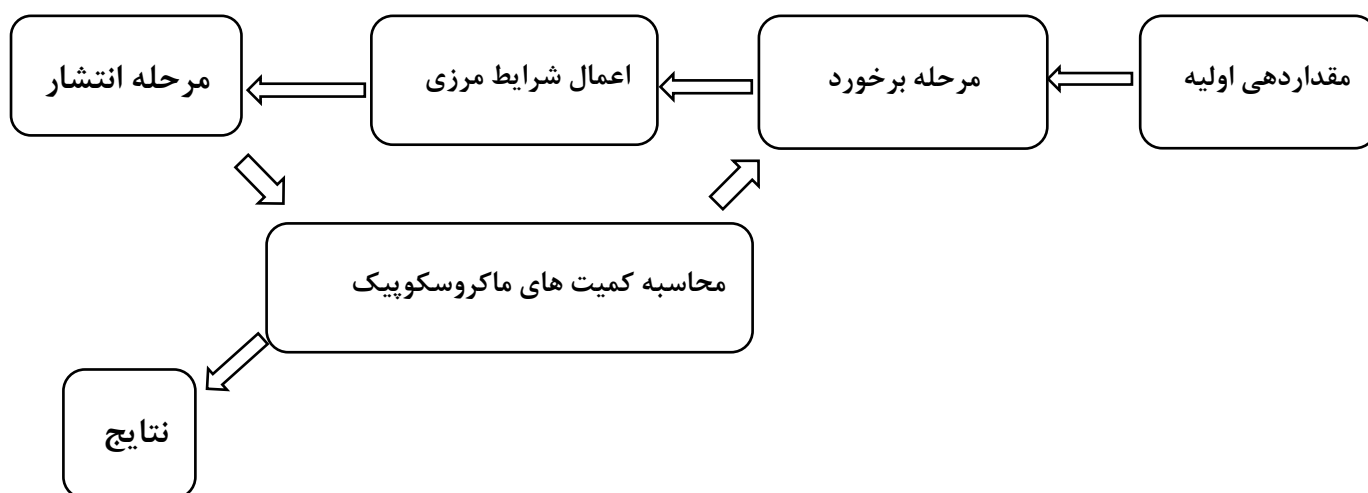
روش شبکه بولتزمن شامل مراحل زیر می‌باشد:

۱- تعادل: تابع توزیع تعادلی f_i^{eq} برای تمامی گره‌های سیال، با استفاده از متغیرهای ماکروسکوپی گره (ρ, u) و با استفاده از رابطه (۲-۲۲) باید محاسبه شود.

۲- برخورد: محاسبه تابع توزیع برای تمامی گره‌های سیال بعد از برخورد ذرات با استفاده از سمت راست معادله (۲-۲۵)

۳- انتشار: توزیع ذره با انتشار، پس از برخورد ذره در یک گام شبکه در جهت برخورد با استفاده از معادله (۲-۲۶)

۴- خواص ماکروسکوپیک: محاسبه خواص ماکروسکوپیک (ρ, u) برای هر گره از توابع توزیع جدید ذرات با استفاده از معادلات (۱۹-۲) و (۲۰-۲).



شکل ۴-۲ الگوریتم روش شبکه بولتزمن

در شکل ۴-۲ مراحل الگوریتم روش شبکه بولتزمن نشان داده شده است. نکته قابل توجه در تکرارپذیر بودن این الگوریتم می باشد که با تکرارهای بیشتر به نتایج قابل قبول تر و پایدارتری دست خواهیم یافت.

۲.۳.۵ مدل شان و چن

شان و چن در سال های ۱۹۹۴ [۸] و ۱۹۹۵ [۹] برای میدان های جریان چندجزیی و چندفازی مدل شبکه بولتزمن پیشنهادی خود را ارائه دادند. مدل فعل و انفعالات محلی شان و چن به دلیل سادگی معادلات و اعمال آسان آن ها در برنامه های عددی، توجه بسیاری را به خود جلب کرده است. این مدل که پایه فیزیکی صحیحی دارد، معادله حالت غیر ایده آل را برآورده می کند. همچنین ایزوتروپی کشش سطحی واقع در سطح مشترک را بهبود می دهد و در آن یک سیال چندجزیی به صورت اتوماتیک بدون دنبال کردن یا تسخیر سطح مشترک، به اجزایش تبدیل می شود. هرچند این مدل در نسبت چگالی های بالا در جریان

تک جزئی به خوبی عمل می کند اما کشش سطحی و نسبت های چگالی و گرانیروی را به طور مستقل نمی تواند معین کند و برخی از کمیت ها با آزمایش های عددی محاسبه می شوند. لازم به ذکر است که اولین مدل ارائه شده، در نسبت چگالی های بالاتر از ۳ جهت شبیه سازی جریان سیالات چند جزئی-چندفازی به دلیل وجود ناپایداری عددی نتایج قابل قبولی را ارائه نمی کرد.

مدل شان و چن علاوه بر مزیت هایی که دارد نقاط ضعفی نیز دارد که از جمله آن ها می توان به ناسازگاری ترمودینامیکی و بزرگی سرعت های پارازیتی^۱ اشاره کرد [۳۰]. همچنین این مدل در بیشتر شبیه سازی های عددی در نسبت چگالی های پایین محدود می شود. در راستای حل مشکلات این مدل، مطالعات زیادی از دیدگاه تئوریک و عددی انجام شده است. شان برای کاهش سرعت های پارازیتی از عبارات های مرتبه بالاتر برای محاسبه مشتقات اول و دوم استفاده کرد [۱۵]. سبراگالیا و همکاران^۲ با وارد کردن گره های مجاور متوالی^۳ مدل شبه پتانسیل چند مرحله ای^۴ را تولید کردند [۱۶]. همچنین سبراگالیا و همکاران مدلی را ارائه کردند که در آن تابع انرژی آزاد با مدل شبه پتانسیل شان و چن همراه شده است [۴۲]. برای از بین بردن محدودیت چگالی مطالعاتی توسط یوان و شافر^۵ [۱۴]، فالكوچی^۶ [۴۳]

^۱ Spurious Currents

^۲ Sbragaglia et al.

^۳ Nearest-neighbor and next-nearest-interaction

^۴ Multi Pseudo-potential Model

^۵ Yuan and Schaefer

^۶ Falcucci

و کوپرشتوخ^۱ [۱۷] انجام شده است. کوزمین^۲ توانایی مدل شان و چن را در مدل سازی جریان های چند فازي با اعمال برنامه عددی بررسی نمود و محدودیت پایداری مدل شان و چن را با چند زمانه کردن عبارت برخورد بهبود بخشید [۴۴]. جی بائو^۳ در رساله دکتری خود توانست با اعمال معادلات حالت در معادلات حاکم، جریان های چند جزئی-چندفازی با نسبت چگالی بالا را شبیه سازی کند [۴۵]. به تازگی لی و همکاران^۴ مدل دیگری را بر مبنای مدل شان و چن ارائه کرده اند که توانایی این را دارد طیف وسیعی از اعداد رینولدز در نسبت چگالی های بالا را برای جریان نازکی از فیلم روغن روی سطح جامد حل کند [۴۶].

مدل شبه پتانسیل شان و چن به دلیل سادگی و انعطاف پذیری در میان تمامی مدل های چندفازی-چندجزئی شبکه بولتزمن کاربرد وسیعی دارد. این مدل ابتدا فقط برای سیالات تک جزئی-چندفازی ارائه شد اما در ادامه برای سیالات چندجزئی-چندفازی بهبود داده شده و مورد استفاده قرار گرفت [۹]. محققان زیادی از فرمولاسیون اصلی این مدل استفاده کرده اند که البته با فیزیک موجود اختلافات زیادی دارد. از جمله این اختلافات می توان به وابستگی لزجت قطره به سایر پارامترها در شرایط دائم اشاره کرد. هر چند این روش قابلیت شبیه سازی سه بعدی را نیز دارد اما به دلیل سادگی آن در دو بعد با ۹ مؤلفه سرعت (D_2Q_9) مورد استفاده قرار می گیرد.

همان گونه که قبلاً اشاره شد، برای شبیه سازی و مدل کردن جریانات چندفازی با استفاده از روش شبکه بولتزمن از معادله (۲-۲۷) استفاده می کنیم:

^۱ Kupershtokh

^۲ Kuzmin

^۳ Ji Bao

^۴ Li et al.

$$f_i^\sigma(x + c_i \delta t, t + \delta t) - f_i^\sigma(x, t) = -\frac{1}{\tau_\sigma} \left[f_i^\sigma(x, t) - f_i^{\sigma, eq}(x, t) \right] + F_{\sigma, \alpha}(x, t) \quad (27-2)$$

که در این معادله τ_σ زمان آسایش می باشد و به لزجت هر یک از اجزای سیال وابسته است. f_i^σ و $f_i^{\sigma, eq}$ توابع توزیع و توزیع تعادلی برای جزء σ می باشند. برای محاسبه $f_i^{\sigma, eq}$ از معادله (2-33) استفاده می کنیم. لازم به ذکر است که هر جزء از سیال به وسیله معادله ای مجزا حل می شود. مهم ترین تفاوت میان معادلات تک فازی با چند فازی شبکه بولتزمن وجود ترم نیرویی F در معادلات چندفازی می باشد که وظیفه آن شبیه سازی رفتار دوفاز در سطح مشترک می باشد. اگر بخواهیم مراحل شبیه سازی یک جریان دوفازی را توصیف کنیم، در فرایند زیر خلاصه می شود:

(۱) مرحله انتشار: توابع توزیع تعادلی هر جزء که f_i^1 و f_i^2 هستند به نزدیک ترین همسایه های خود با سرعت های شبکه مختص به آن مطابق شکل 2-5 حرکت می کنند.

(۲) اعمال شرایط مرزی

(۳) محاسبه سرعت ماکروسکوپیک ترکیبی (U): با استفاده از معادله زیر:

$$U' = u + \frac{\Delta t \cdot F}{2\rho} \quad (28-2)$$

(۴) محاسبه نیروهای بین مولکولی با استفاده از معادله (2-30)

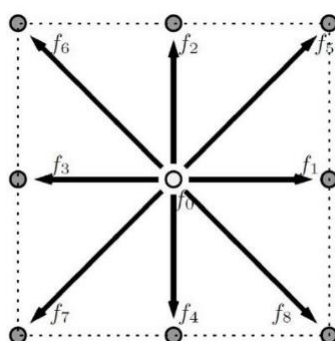
(۵) محاسبه سرعت تعمیم یافته (u^{eq}) برای هر جزء معادله: با استفاده از معادله (2-34)

(۶) محاسبه توابع توزیع تعادلی برای هر جزء: با استفاده از معادله (2-33)

(۷) مرحله برخورد: این مرحله از معادله زیر پیروی می‌کند و توابع توزیع تعادلی جدید

را برای مرحله انتشار بعدی محاسبه می‌کند [۳۰]:

$$f_i^\sigma = \left(1 - \frac{1}{\tau_\sigma}\right) f_i^\sigma + \frac{1}{\tau_\sigma} f_i^{\sigma,eq} \quad (29-2)$$



شکل ۲-۵ شبکه D2Q9

در این مدل علاوه بر برخورد محلی که با استفاده از تقریب بی-جی-کی در معادله شبکه بولتزمن شبیه‌سازی می‌شود، ذرات یک سیال با کمک یک نیروی برهم‌کنش بین‌ذره‌ای دوربرد با ذرات سیال دیگر و یا با ذرات فاز دوم خود که در همسایگی آن‌ها قرار دارد تبادل تکانه یا مومنتوم می‌کند. از نقطه‌نظر میکروسکوپی، جدایی فازها را می‌توان به علت وجود این نیروی بین‌ذره‌ای دانست [۳۰]. بنابراین با توجه به شرایط موردنظر شبیه‌سازی جریان سیالات چندجزئی-چندفازی و چندجزئی-تک‌فازی با این روش امکان‌پذیر می‌باشد. عمده تحقیقات انجام‌شده در شبیه‌سازی جریان سیالات با نسبت چگالی بالا مربوط به سیالات چندفازی-تک‌جزئی می‌باشد. به همین دلیل برای شبیه‌سازی جریان سیالات تک‌جزئی، برای تمام محدوده سیال تنها یک شبکه حل می‌شود. لازم به ذکر است که از این قسمت به بعد هر جا سخن از جریان چندفازی شد، منظور وجود دو یا چند فاز از یک جزء است [۴۷].

در مدل چندفازی-تک جزئی شان و چن نیروی اندرکنش^۱ بین ذره‌ای که در میان ذرات واقع در نقطه x و نقطه x' وجود دارد، با استفاده از رابطه زیر تعریف می‌شوند [۹].

$$F(x, t) = -\psi(x, t) c_s^2 \sum_{i=1} G(x, x') w(|c_i|^2) \psi(x + c_i) c_i \quad (30-2)$$

در رابطه بالا w برابر با ضرایب وزنی برای وارد کردن اثر گره‌های مختلف در نیرو، c_i سرعت انتقال اطلاعات در واحد شبکه است که در قسمت‌های قبل بیان شد و $G(x, x')$ تابع گرین^۲ است که این تابع قدرت اندرکنش بین ذره‌ای را کنترل می‌کند. مقادیر منفی این تابع بیانگر نیروی جاذبه بین ذرات می‌باشد که این موضوع در ادامه مورد بررسی دقیق‌تر قرار می‌گیرد. برای حفظ همسانگردی^۳ (ایزوتروپی) این روش، همیشه باید شرط تقارن را در تنظیم آن حفظ کنیم $\{G(x, x') = G(x', x)\}$. $\psi(x)$ تابع پتانسیل مولکولی، تابع جرم مؤثر یا شبه پتانسیل نامیده می‌شود که به دلیل وابستگی آن به چگالی به صورت تابعی از x نوشته می‌شود [۱۶].

$$\psi(x) = \psi(\rho(x)) \quad (31-2)$$

شان و چن این تابع را به صورت زیر تعریف کرده‌اند [۹]:

$$\psi(x) = \rho_0 \left[1 - \exp\left(-\frac{\rho(x, t)}{\rho_0}\right) \right] \quad (32-2)$$

^۱ Interaction

^۲ Green Function

^۳ Isotropy

در رابطه (۳۲-۲) ثابت ρ_0 چگالی مرجع نامیده می‌شود. با تغییر رابطه بالا و ارائه شکل‌های متفاوت برای $\psi(x)$ ، می‌توان به معادلات حالت متفاوت برای سیال غیر ایده‌آل چندفازی-تک جزئی دست پیدا کرد. از مهم‌ترین ویژگی‌های توابع شبه‌پتانسیل این است که این توابع در نسبت چگالی بالا دارای حد هستند و در نسبت چگالی پایین نیز به صورت خطی عمل می‌کنند. مقادیر محاسبه‌شده نیروی اندرکنش فوق را می‌توان به صورت نیروهای حجمی که تکانه و مومنتوم ذرات را تغییر می‌دهند در محاسبه تابع توزیع تعادلی ذرات وارد کرد [۴۷]:

$$f_i^{eq}(x, t) = w_i \rho(x, t) \left[1 + \frac{c_i \cdot u^{eq}}{c_s^2} + \frac{(c_i \cdot u^{eq})^2}{2c_s^4} + \frac{u^{eq2}}{2c_s^2} \right] \quad (۳۳-۲)$$

$$u^{eq} = u + \frac{\tau F}{\rho(x, t)} \quad (۳۴-۲)$$

ذکر این نکته ضروری است که در این حالت پارامتر F در معادله (۲۷-۲) حذف می‌گردد زیرا تأثیر آن از طریق سرعت در معادلات اعمال می‌شود. تابع گرین در معادله اصلی شان و چن نقش تعیین‌کننده‌ای را ایفا می‌کند؛ به طوری که پدیده جدایش و نسبت چگالی کاملاً تحت تأثیر این پارامتر می‌باشند. شان و چن برای انجام شبیه‌سازی عددی استفاده از نیروی اندرکنش بین ذره حاصل از نزدیک‌ترین همسایه‌ها را پیشنهاد کردند. به این معنی که در شبیه‌سازی عددی فقط اندرکنش بین نزدیک‌ترین همسایه‌ها اعمال می‌شوند:

$$G(x, x') = \begin{cases} G & |x - x'| \leq c \\ 0 & |x - x'| > c \end{cases} \quad (۳۵-۲)$$

در رابطه (۳۵-۲) c طول مبنای شبکه (فاصله بین دو گره) و G قدرت اندرکنش بین ذره‌ای می‌باشد. تحقیقات نشان داده است که اگر در استفاده از مدل $D2Q9$ همسایه‌های بیشتری را در محاسبه اندرکنش بین ذره‌ای در نظر بگیریم باعث افزایش همسانگردی و کاهش سرعت‌های پارازیته (ساختگی) می‌شود [۴۷].

مدل دوفازی شان و چن باوجود کاستی‌هایی که دارد قادر به شبیه‌سازی طیف گسترده‌ای از مسائل دوفازی با سیالات متفاوت اعم از تک‌جزئی یا چندجزئی می‌باشد. همچنین روش شبکه بولتزمن قابلیت شبیه‌سازی جریان سیال در هندسه‌های پیچیده را نیز دارد که این ویژگی امکان به‌کارگیری آن برای شبیه‌سازی جریان سیال در محیط متخلخل را فراهم می‌کند. این مدل در بررسی سیالات تک‌جزئی - چندفازی قادر به شبیه‌سازی جریان‌ها با اختلاف چگالی، لزجت و کشش سطحی متفاوت برای دو سیال است و به‌خوبی می‌تواند جریان‌های زیادی با مدل‌های متفاوت را مدل کند. از مشکلات رایج در این مدل می‌توان به وجود سرعت‌های پارازیتی در مرز جامد بین دو سیال اشاره کرد. از نظر فیزیکی دلیل به وجود آمدن این سرعت‌ها عدم بقای محلی مومنتوم می‌باشد که علت به وجود آمدن این سرعت‌ها اعمال نیروهای بین‌ذره‌ای به معادله بولتزمن است اما بقای مومنتوم کلی کاملاً تثبیت می‌شود [۴۸].

۲.۳.۶ شرایط مرزی

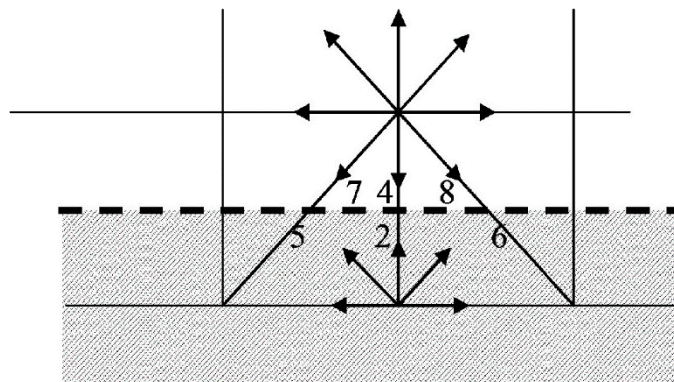
یکی از مهم‌ترین قسمت‌های شبیه‌سازی جریان سیال با استفاده از روش شبکه بولتزمن، تعیین شرایط مرزی و دقت بالا در مدل‌سازی آن می‌باشد. تعیین شرایط مرزی در معادلات ناویر-استوکس نسبتاً ساده بود اما برای روش شبکه بولتزمن این‌گونه نیست. در این روش باید توابع توزیع ورودی بر روی مرزها مشخص شود، بنابراین برای یک شرط مرزی مشخص، روش مناسبی برای اختصاص توابع توزیع بر روی مرزها نیاز است. در ادامه با دو نمونه از شرایط مرزی پرکاربرد در روش شبکه بولتزمن آشنا می‌شویم [۳۱].

۲.۳.۶.۱ شرط مرزی کمانه کردن^۱

- روش کمانه کردن برای مدل سازی شرط مرزی جامد ایستا یا متحرک و شرایط جریان بدون لغزش یا جریان بر روی موانع استفاده می شود. علت نام گذاری این شرط این است که ذره ای که به سمت مرز جامد می آید، دوباره به سمت جریان بازمی گردد و دقت مرتبه اول دارد.

- روش کمانه نیم فاصله: آرایش برخورد این روش در شکل زیر نشان داده شده است. در این روش دیوار در میان دو محیط جامد و سیال است و دقت مرتبه دو دارد و

$$f_6 = f_8, f_5 = f_7, f_2 = f_4 \text{ می باشد [۴۹].}$$



شکل ۲-۶ شرط مرزی کمانه کردن نیم فاصله [۵۰]

^۱ Bounce back Boundary Condition

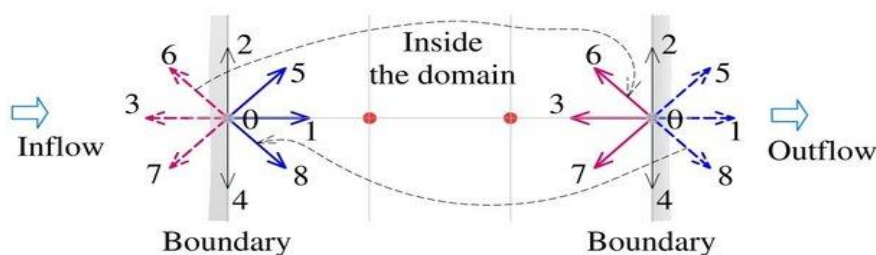
۲.۳.۶.۲ شرط مرزی پریودیک^۱

یکی از ساده‌ترین شرایط مرزی که ما می‌توانیم از آن استفاده کنیم شرط مرزی پریودیک است. با استفاده از این شرط، تأثیر اندازه بر مرزهای واقعی موجود در سیستم فیزیکی برداشته می‌شود. اعمال شرط مرزی پریودیک بسیار ساده است. بر طبق این شرط توابع توزیع ورودی در مرز ورودی جریان از توابع توزیع خروجی در مرز خروجی جریان و توابع توزیع ورودی در مرز خروجی جریان از توابع توزیع خروجی در مرز ورودی جریان گرفته می‌شود. [۴۹].

این شرط را می‌توان به‌عنوان یک شرط مرزی ورودی/خروجی در جهت جریان بکار برد. در پروسه شبیه‌سازی با استفاده از این شرط در خروجی و ورودی می‌توانیم نیروی حجمی یکنواختی را با گرادیان فشار ثابت بعد از عمل برخورد قرار دهیم:

$$f_{i,inlet} = f_{i,outlet} - w_i \frac{3}{c^2} \frac{dp}{dx} c_i \cdot \bar{x} \quad (۳۶-۲)$$

که در این معادله $\frac{dp}{dx}$ گرادیان فشار ثابت و $\bar{x}$ بردار واحد در جهت x (جهت جریان) می‌باشد.



شکل ۷-۲ شرط مرزی پریودیک در شبیه‌سازی جریان‌های چند فازی [۴۵]

^۱ Periodic Boundary Condition

۲.۳.۷ معادله حالت و کشش سطحی

مهم‌ترین پارامترها برای بیان جریان‌های چندفازی مختلف عبارت‌اند از: کشش سطحی و چگالی محاسبه‌شده در دماهای مختلف که منجر به فشارهای متفاوت می‌شود. مهم‌ترین نقش معادله حالت توصیف رابطه بین فشار و حجم و چگالی برای یک ماده خاص یا مخلوط دو ماده می‌باشد. از طریق بسط تیلور برای نیروی بیان‌شده در معادله (۲-۳۰) عبارت زیر برای نیرو بدست می‌آید.

$$F = -G(c_s^2 \psi \nabla \psi + \frac{c_s^4}{2} \psi \nabla (\Delta \psi) + \dots) \quad (۲-۳۷)$$

اگر از سایر جملات مراتب بالاتر صرف‌نظر کنیم معادله فوق به‌صورت زیر نوشته می‌شود:

$$F_\alpha((x)) = -G\psi(x) \left(\frac{1}{3} \partial_\alpha \psi + \frac{1}{18} \partial_\alpha \Delta \psi \right) \quad (۲-۳۸)$$

در معادله (۲-۳۸) بخش اول بیان‌کننده معادله حالت و بخش دوم بیان‌کننده کشش سطحی می‌باشد و این نکته واضح است که هر دو به پارامتر G وابسته هستند که این ویژگی، یکی از محدودیت‌های مدل به حساب می‌آید. محاسبات جبری ترم نیرو و قسمت‌های غیر گرادیانی برای کشش سطحی و مابقی برای پتانسیل نیروی می‌باشد. هدف از این کار فهمیدن سهم معادله حالت و کشش سطحی می‌باشد [۵۱].

$$\begin{aligned} F_\alpha &= G\psi \left(\frac{1}{3} \partial_\alpha \psi + \frac{1}{18} \partial_\alpha \Delta \psi \right) = G \left(\frac{1}{6} \partial_\alpha \psi^2 + \frac{1}{18} (\partial_\alpha (\psi \Delta \psi) - \Delta \psi \partial_\alpha \psi) \right) \\ &= G \left(\frac{1}{6} \partial_\alpha \psi^2 + \frac{1}{18} (\partial_\alpha (\psi \Delta \psi) + \frac{1}{2} \partial_\alpha |\nabla \psi|^2 - \partial_\beta \partial_\alpha \psi \partial_\beta \psi) \right) \end{aligned} \quad (۲-۳۹)$$

با کمک مهندسی معکوس تانسور شار مومنتوم را از نیرو بدست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} \partial_\beta p_{\alpha\beta} &= F_\alpha \\ p_{\alpha\beta} &= \left(\frac{\rho}{3} + \frac{G}{6} (\psi)^2 + \frac{G}{36} (\nabla \psi)^2 + \frac{G}{18} \psi (\Delta \psi) \right) \delta_{\alpha\beta} - \frac{G}{18} \partial_\alpha \psi \partial_\beta \psi \end{aligned} \quad (۲-۴۰)$$

با مقایسه تانسور شار مومنتوم با روش پخش سطح مشترک:

$$P_{\alpha\beta} = (P_0 - \frac{k}{2}(\nabla\rho)^2 - k\rho\Delta\rho)\delta_{\alpha\beta} + k\partial_\alpha\rho\partial_\beta\rho \quad (41-2)$$

حالت ایده آل این است که روابط به صورت زیر فرض شوند:

$$\psi(\rho) = \rho, k = -\frac{G}{8}, P = \frac{\rho}{3} + \frac{G}{6}\psi(\rho)^2 \quad (42-2)$$

این شکل از تابع جرم مؤثر یا همان شبه پتانسیل به دلیل دقت بسیار بالای آن برای نسبت چگالی‌های پایین تا سال ۲۰۰۳ مورداستفاده بسیاری از محققان قرار می‌گرفت ولی لازم به ذکر است که انتخاب $\psi = \rho(x, t)$ بهترین مورد برای پایداری نیست؛ چون با انتخاب $\psi = \rho$ برای نسبت چگالی‌های بزرگ‌تر مقدار ψ بسیار زیاد می‌شود گرادیان بزرگی ایجاد می‌کند که در نهایت باعث ناپایداری می‌شود. به همین دلیل $\psi = \rho$ تنها برای مقادیر کوچک نسبت چگالی مایع به بخار مناسب است [۵۱].

با حذف جملات با تغییرات جزئی از معادله (۲-۳۷) می‌توان معادله (۲-۴۲) را برای معادله حالت به صورت زیر می‌توان بیان کرد:

$$P = \rho c_s^2 + \frac{G c_s^2}{2} \psi^2(x) \quad (43-2)$$

در رابطه فوق عبارت اول سمت راست معادله یعنی ρc_s^2 نشان‌دهنده رفتار ایده آل سیال و عبارت دوم سمت راست نشان‌دهنده رفتار غیر ایده آل می‌باشد. پارامتر G به صورت عکس دمای مؤثر سیستم عمل می‌کند و جدایش فاز زمانی رخ می‌دهد که این پارامتر از یک مقدار بحرانی فراتر برود. به بیانی دیگر در این مدل هنگامی که پارامتر G از مقدار بحرانی خود فراتر برود به علت کاهش دمای سیستم به دمایی پایین‌تر از دمای بحرانی بطور خودکار جدایش فاز صورت می‌پذیرد [۵۱].

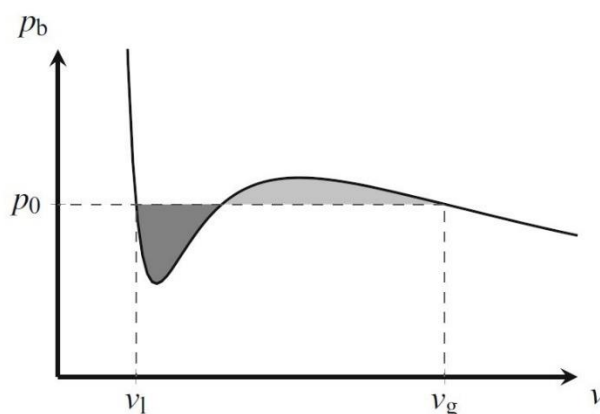
۲.۳.۸ قانون ساختار ماکسول^۱

وقتی با یک سیستم مولتی فاز مانند مایع و بخار آب روبرو هستیم، سؤال کلیدی این است که شرایط تعادل بخار مایع چیست؟ نسبت چگالی‌های ρ_l و ρ_g چه مقدار می‌باشد و چگالی چگونه با فشار وابسته است؟ در طبیعت موقعیت‌های متفاوتی را می‌توان مشاهده کرد که فازها و اجزای یک سیال در کنار هم وجود داشته باشند. برای داشتن یک ترکیب چندفازی باید عامل محدودکننده‌ای را بر روی معادله حالت قرار بدهیم که یک مجموعه وابستگی بین فشار P ، حجم مولی v (جایگزین آن می‌تواند چگالی باشد $\rho \propto \frac{1}{v}$) و یک پارامتر ϕ که دمای در نظر گرفته شده T را توصیف کند [۴۹]. معادله حالت $p = p_b(\rho, \phi, T, \dots)$ منحصراً حالت ترمودینامیکی حفره‌ها را در سیستم چند جزئی و چندفازی توصیف می‌کند.

یکی از رایج‌ترین معادلات حالت مورد استفاده در سیستم‌های بخار-مایع معادله حالت وندروالس نام دارد که در شکل ۲-۸ نشان داده شده است. در این شکل می‌بینیم که نمودار فشار-حجم مولی دارای یک کمینه و بیشینه می‌باشد. هر معادله حالتی که دارای این ویژگی باشد اجازه دوفاز به صورت هم‌زمان را می‌دهد. درواقع بین این دو نقطه اکسترمم ناپایداری ترمودینامیکی وجود دارد. اگر سیستم برای هر یک از این حالات میانی آماده شده باشد، خودبه‌خود به دو بخش مایع و گاز تبدیل می‌شود. حجم مولی فازهای گاز و مایع برای فشار p_0 به ترتیب v_g و v_l می‌باشند. شکل زیر بیانگر این است که دامنه‌ای از فشارها وجود دارد که می‌توان دو حجم مولی مشخص v را برای یک فشار P در نظر گرفت. برای تصمیم‌گیری در مورد

^۱ Maxwell Area Construction Rule

اینکه سیستم کدام فشار را اتخاذ می‌کند (یعنی در کدام p_0 سیستم آرام می‌شود) و اینکه چه مقادیری را برای حجم‌های مولی فازهای گاز و مایع فرض کنیم باید از قانون ساختار ماکسول استفاده کنیم [۴۹].



شکل ۸-۲ قانون ساختار ماکسول برای معادله حالت واندروالس در دمای ثابت T . باید به این نکته توجه کرد که انتقال فاز

در فشار p_0 اتفاق می‌افتد که مناطق پایین (خاکستری تیره) و بالا (خاکستری روشن) را برابر می‌کند [۴۹].

قانون ساختار ماکسول فرض می‌کند که در دمای مشخص T ، همزیستی گاز و مایع در فشار p_0 رخ می‌دهد به‌طوری‌که هر دو منطقه خاکستری در شکل ۸-۲ مساوی باشند.

$$\int_{v_g}^{v_l} (p_0 - p_b(v', T)) dv' = 0 \quad (۴۴-۲)$$

شرط تعادل این است که پتانسیل شیمیایی در فازهای گاز و مایع برابر باشند؛ اگر این‌گونه نباشد یا مایع تبخیر می‌شود و یا گاز متراکم و به گاز تبدیل می‌شود. حجم مولی v پارامتر مناسبی برای شبیه‌سازی به روش بولتزمن نمی‌باشد. از آنجایی که v متناسب با معکوس چگالی می‌باشد ($v \propto \frac{1}{\rho}$) قانون ساختار ماکسول را از نظر چگالی می‌توان این‌گونه بازنویسی کرد [۴۹]:

$$\int_{\rho_g}^{\rho_l} (p_0 - p_b(\rho', T)) \frac{d\rho'}{\rho'^2} = 0 \quad p_0 = p_b(\rho_g, T) = p_b(\rho_l, T) \quad (۴۵-۲)$$

معادله (۲-۴۵) دستگاه سه معادله با سه مجهول p_0 , ρ_l و ρ_g را فراهم می‌کند. با توجه به شکل معادله حالت $p_b(\rho, T)$ در یک دمای ثابت T این دستگاه معادلات قابل حل می‌باشد [۴۹].

۲.۳.۹ تعیین لزجت

برای تعیین لزجت ویسکوزیتی در روش بولتزمن از زمان آسایش که توسط (τ) نشان داده می‌شود استفاده می‌کنیم. به عنوان مثال برای شبکه دوبعدی با نه گره لزجت سینماتیکی از رابطه $v = (\tau - 0.5) \times \frac{1}{3}$ به دست می‌آید. این پارامتر نیز مشابه بسیاری از پارامترهای فیزیکی دیگر به صورت مستقیم وارد مسئله نمی‌شود. با تغییر زمان آسایش از ۰.۵ تا مقادیر بسیار بزرگ‌تر از ۱ مقدار لزجت نیز تغییر می‌کند. بهترین مقدار زمان آسایش از لحاظ عددی که بیشترین پایداری را دارد مقدار ۱ می‌باشد. مثلاً اگر τ را برابر با ۱ فرض کنیم مقدار لزجت سینماتیکی 0.167 بدست می‌آید. حال با توجه به نسبت چگالی مقدار لزجت دینامیکی هر فاز به صورت زیر بدست می‌آید [۴۴]:

$$v_f = v_v = 0.167 \longrightarrow \frac{\mu_l}{\mu_v} = \frac{\rho_l}{\rho_v} \quad (۲-۴۶)$$

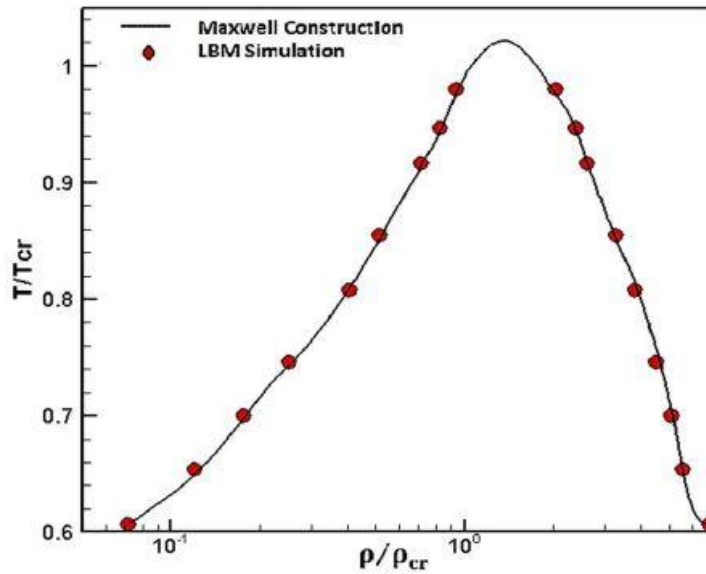
در نتیجه نسبت لزجت برای مایع و بخار با نسبت چگالی‌های حاصل، برابر می‌باشد. البته لازم به تذکر است که از نظر فیزیکی این مقادیر نمی‌توانند در بازه‌های گسترده دمایی دقت بالایی داشته باشند؛ البته می‌توان با استفاده از مقادیر دیگر زمان آسایش، دقت نتایج را بهبود بخشید. در حالت کلی عدم پیش‌بینی دقیق لزجت در این روش با استفاده از یک زمان آسایش غیرقابل حل می‌باشد [۴۴].

۲.۳.۱۰ معادله حالت شان و چن

در سال‌های اخیر مدل‌ها و روش‌های متعددی در راستای توسعه مدل شبه‌پتانسیل شان و چن ارائه شده است. یکی از مهم‌ترین این روش‌ها وارد کردن معادله حالت واقعی در مدل شان و چن می‌باشد. از مهم‌ترین مزیت این روش، کاهش جریان ساختگی و افزایش نسبت چگالی می‌باشد که همچنین ناسازگاری ترمودینامیکی را نیز به حداقل می‌رساند [۵۲]. علاوه بر موارد ذکر شده، در مدل اصلی شان و چن تنها گره‌های نزدیک برای محاسبات ایزوتروپی مرتبه چهار استفاده شده‌اند. با افزایش ایزوتروپی اپراتور نیرو، جریان ساختگی به مقدار قابل توجهی کاهش می‌یابد [۱۶].

همان‌طور که اشاره کردیم، پژوهشگران پیش از بکار بردن معادلات حالت مختلف برای سیالات متفاوت، از توابع پیشنهادی استفاده می‌کردند. جهت بررسی رفتار این معادلات حالت، معادله شان و چن به‌عنوان نمونه انتخاب شده است.

با شبیه‌سازی یک قطره ساکن در یک محفظه با در نظر گرفتن چگالی‌های اولیه اختیاری، می‌توان نمودار فازی آن را به‌صورت شکل ۲-۹ ترسیم کرد. از نتایج بدست آمده مشخص است که دقت این روش بسیار بیشتر از روش یوان و شافر می‌باشد اما باید به این نکته توجه کرد که معادلات حالت شان و چن کماکان مشکل عدم سازگاری ترمودینامیکی را دارا می‌باشند [۱۴].



شکل ۹-۲ نمودار فازي آب به کمک معادلات حالت شان و چن [۴۸]

در شبکه بولتزمن معادله حالت اصلی برای گاز ایده آل به صورت زیر بیان می شود:

$$P = \rho c_s^2 \quad (۴۷-۲)$$

در این معادله c_s^2 به نوع شبکه وابسته است و همچنین در این معادله دما نیز به طور مستقیم وارد نشده است. لازم به ذکر است که این معادله برای سیالات دوفازی واقعی قابل قبول نمی باشد زیرا باید تأثیر فاز دوم نیز همان طور که قبلاً گفته شد به صورت زیر وارد معادله گردد :

$$P = \rho c_s^2 + \frac{c_0}{2} G[\psi(\rho)]^2 \quad (۴۸-۲)$$

در معادله فوق دما را به صورت ضمنی از طریق پارامتر G تعریف می کنیم. در حالت کلی برای محاسبه مقادیر بحرانی باید دو معادله زیر در نظر گرفته بشوند:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_T = \left(\frac{\partial^2 p}{\partial^2 \rho}\right)_T = 0 \quad (۴۹-۲)$$

حال با این فرض که تابع ψ فقط به ρ وابسته باشد می‌توان مقادیر بحرانی G_c و ρ_c را از معادلات زیر بدست آورد:

$$\begin{aligned}\frac{dp}{d\rho} &= c_s^2 + \frac{G}{3}\psi\dot{\psi} = 0 \\ \frac{d^2p}{d\rho^2} &= \frac{G}{3}(\psi\ddot{\psi} + (\dot{\psi})^2) = 0\end{aligned}\quad (50-2)$$

به عنوان مثال تابع پتانسیل $\psi(\rho) = \rho_0 \left[1 - \exp\left(-\frac{\rho}{\rho_0}\right) \right]$ در نظر گرفته می‌شود و مقادیر بحرانی عبارت‌اند از:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_T = \left(\frac{\partial^2 p}{\partial^2 \rho}\right)_T = 0 \Rightarrow \rho_{cr} = \rho_0 \ln 2 \quad (51-2)$$

در معادله حالت شان و چن نقش دما را پارامتر G ایفا می‌کند و می‌توان دما را برابر با معکوس قرینه G تعریف نمود. مقدار بحرانی دما را نیز می‌توان این‌گونه تعریف کرد:

$$T_c = \frac{-1}{G_c} \quad (52-2)$$

بدست آوردن مقادیر بحرانی برای سایر توابع پتانسیل، همچنین معادلات حالت مختلف به همین روش امکان‌پذیر است. لذا هنگامی که $G < G_c$ باشد در یک فشار خاص دو چگالی وجود خواهد داشت. برای ایجاد جدایی فاز شرط دیگری نیز باید رعایت شود که عبارت است از: $\rho_g < \bar{\rho} < \rho_l$. این شرط تضمین می‌کند که سیستم در حالت دوفازی قرار دارد و در غیر این صورت سیستم شامل یک‌فاز می‌باشد و جدایی فاز اتفاق نمی‌افتد.

استفاده از توابع شبه پتانسیل قدیمی امری منسوخ می‌باشد، زیرا نسبت چگالی بدست آمده با استفاده از این توابع بسیار محدود است به همین دلیل در این تحقیق وارد نمودن معادلات حالات مختلف واقعی به تفصیل مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

تاکنون معادله حالت‌های مختلفی بر اساس نوع سیالات مورد استفاده ارائه شده است. هر کدام از این معادلات بر حسب دقت کاربرد خاصی دارند؛ به همین دلیل تعیین دقیق‌ترین معادله حالت امکان‌پذیر نمی‌باشد. از آنجایی که در بیشتر موارد، جریان‌های دوفازی مورد بررسی شامل سیالات نیوتنی می‌شوند، می‌توانیم معادلاتی که دقت قابل قبولی برای این دسته از سیالات دارند را بیشتر مورد توجه قرار دهیم. اولین ایده استفاده از معادلات حالت در شبیه‌سازی جریان‌های چندفازی به روش بولتزمن را یوان و شافر در سال ۲۰۰۶ مطرح کردند. معادلات حالتی که توسط آن‌ها مورد بررسی قرار گرفت از معادلات حالت رایج بودند و متأسفانه تاکنون معادلات حالت به صورت گسترده مورد ارزیابی قرار نگرفته‌اند و بررسی‌ها به معادلات حالت خاصی محدود شده است. ابتدا مروری بر معادلات حالت رایج در علوم مهندسی خواهیم داشت [۱۴].

وندروالس معادله حالتی ارائه داد که در آن می‌توان پارامتر فشار را به کمک دو پارامتر مستقل دیگر که دما و چگالی می‌باشند بیان نمود. فرم کلی این مدل معادلات حالت به صورت زیر می‌باشد:

$$P = P_{att} + P_{rep} \quad (۵۳-۲)$$

که این معادله بیانگر وجود دو نیروی دافعه P_{rep} و جاذبه P_{att} در فشار سیال می‌باشد. بسیاری از پژوهشگران با اصلاح ترم جاذبه یا دافعه یا هر دو آن‌ها معادلات حالت مختلفی ارائه نموده‌اند. معادلاتی

که از اصلاح جمله جاذبه بدست می‌آید را معادلات حالت مکعبی^۱ و معادلات حالتی که از اصلاح جمله دافعه بدست می‌آید را معادلات حالت غیر مکعبی^۲ می‌نامند. در سال‌های اخیر با ترکیب معادلات حالت مکعبی و غیر مکعبی معادلات حالتی بدست آمده است که از دقت بالایی برخوردار می‌باشد. معادله حالت وندروالس به صورت زیر می‌باشد [۱۷]:

$$P = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} + a\rho^2 \quad (۵۴-۲)$$

در این معادله R پارامتر ثابت و a و b تابعی از مقادیر بحرانی معادله می‌باشند. با ارائه معادله حالت وندروالس تحول شگرفی در بررسی خواص سیالات رخ داد. پس از آن ردلیش-کوانگ^۳ با اصلاح ترم جاذبه معادله دیگری را ارائه دادند که دقت بیشتری داشت [۵۳]. پس از آن محققان با اصلاح این ترم سعی در افزایش میزان دقت برای محدوده وسیعی از سیالات نمودند اما یکی از دقیق‌ترین معادلات حالت مکعبی توسط پنگ و رابینسون^۴ ارائه شد که نتایج بسیار دقیقی برای سیالات مختلف در دماهای متفاوت در اختیارمان قرار داد. آن‌ها در معادلات خود اثر نوع سیالات مختلف را به صورت تابعی به شکل زیر وارد معادله حالت کردند [۵۴]:

$$\alpha(\omega, T) = \left[1 + (0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2) \times \left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_{cr}}} \right) \right]^2 \quad (۵۵-۲)$$

^۱ Cubic Equation of State

^۲ Non-Cubic Equation of State

^۳ Redlich-Kwong

^۴ Peng and Robinson

در معادله (۵۵-۲) ω به نوع سیال مورد استفاده بستگی دارد. به عنوان مثال این پارامتر در آب برابر با $0/344$ می باشد. T_{cr} دمای بحرانی معادله حالت می باشد.

پس از سال ها بررسی معادلات حالت مختلف، ریس و همکاران^۱ با اصلاح جمله جاذبه معادله حالت وندروالس، قابلیت این مدل را افزایش دادند. در میان تمام معادلات حالت مکعبی که تاکنون ارائه شده است معادلات حالت گائنهیم^۲ و کارناهان-استارلینگ^۳ کاربرد وسیع تری یافته اند [۵۵].

در نهایت کارناهان-استارلینگ با استفاده از جمله جاذبه معادله حالت ردلیش-کوآنگ و جمله دافعه معادله حالت خود ترکیبی از معادلات حالت مکعبی و غیر مکعبی را پیشنهاد نمودند [۵۶]. البته معادلات حالت دیگری نیز با ترکیب معادلات حالت قبلی ابداع شده اند که از معروف ترین آن ها می توان به ترکیب معادله حالت کارناهان-استارلینگ با ردلیش کوآنگ و پنگ-رابینسون اشاره کرد. بر اساس مقایسه نتایج به دست آمده این معادلات حالت از نظر تئوری دقت بیشتری نسبت به سایر معادلات حالت دارند.

در سال ۲۰۰۶ یوان و شافر رابطه ای را ارائه نمودند که در عین سادگی، مؤثر نیز بود. این رابطه به صورت زیر تعریف می شود [۱۴]:

$$\psi = \sqrt{\frac{2(p - \rho c_s^2)}{c_s^2 G}} \quad (56-2)$$

^۱ Reiss et al.

^۲ Guggenhiem

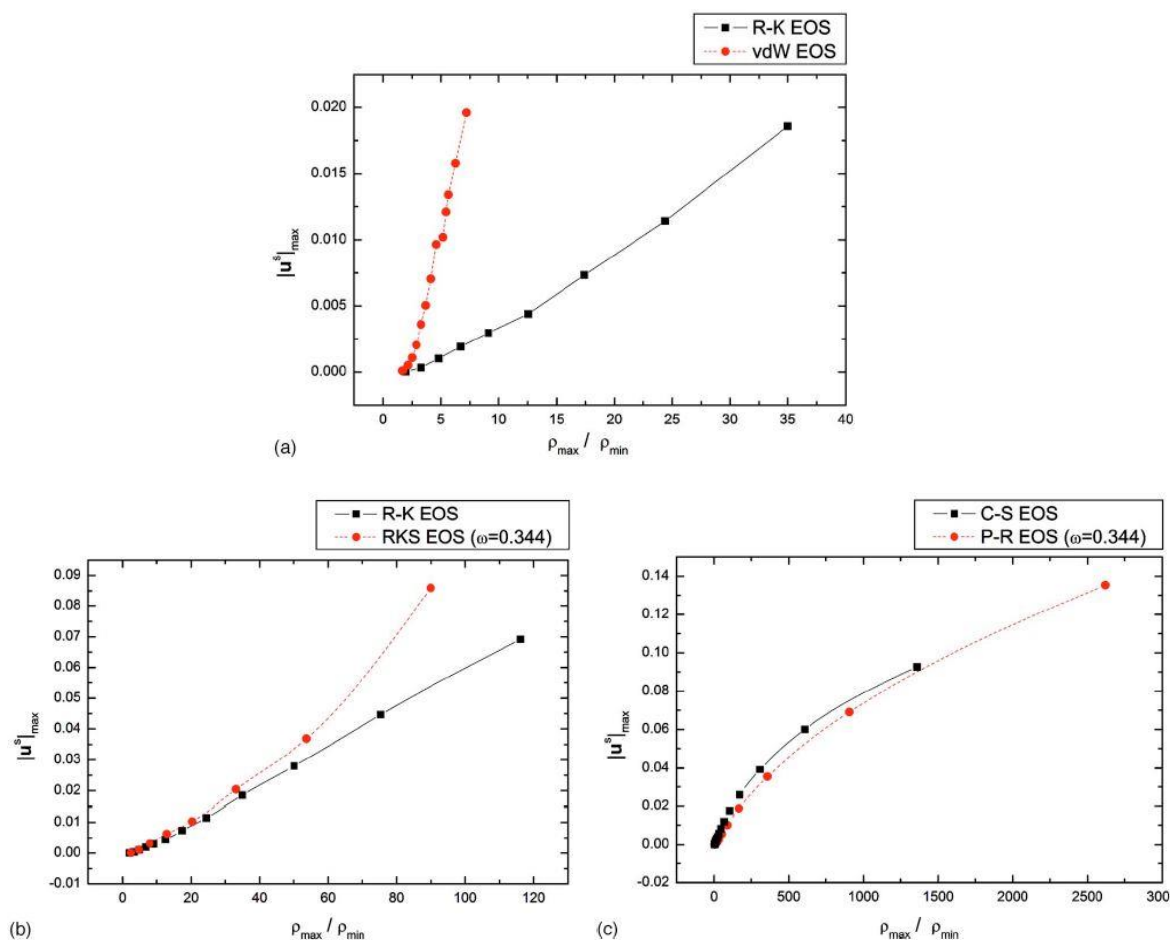
^۳ Carnahan-Starling

در رابطه فوق مقدار کمیت G تأثیری بر روی چگالی‌های بدست آمده ندارد و برای پیش‌بینی جدایی فازها، تنها کافی است که در یک بازه مشخص قرار بگیرد. با استفاده از رابطه فوق می‌توانیم معادله حالت را به راحتی در معادله وارد کنیم. همان‌طور که می‌دانیم با کاهش دما میزان نسبت چگالی افزایش پیدا می‌کند به همین دلیل برای دستیابی به نسبت چگالی بالاتر، باید روش مورد استفاده قابلیت بالایی در دماهای پایین داشته باشد.

۲.۳.۱۱ جریان‌های ساختگی^۱

جریان‌های ساختگی در شبیه‌سازی جریان‌های چندفازی از اهمیت بالایی برخوردار می‌باشند. به همین منظور یوان و شافر جریان‌های ساختگی بدست آمده از معادلات حالت مختلف را با یکدیگر مقایسه کردند. شکل ۲-۱۰ حداکثر مقدار این جریان‌ها را در شبیه‌سازی آن‌ها در نسبت چگالی‌های مختلف نشان می‌دهد [۱۴].

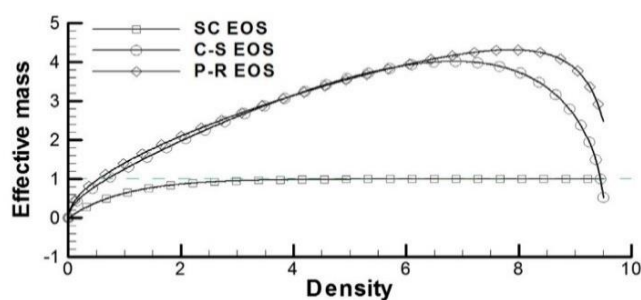
^۱ Spurious Currents



شکل ۲-۱۰ نتایج جریان‌های ساختگی معادلات حالت مورد استفاده توسط یوان و شافر [۱۴]

جریان‌های ساختگی با افزایش نسبت چگالی افزایش پیدا می‌کنند و به عقیده بسیاری از محققان دلیل واگرایی حل در نسبت چگالی‌های بالا همین موضوع می‌باشد. همچنین اندازه این جریان‌ها در مواردی بسیار زیاد است و جریان اصلی سیال را تحت تأثیر قرار می‌دهد. در پایان ذکر این نکته ضروری می‌باشد که روش یوان و شافر با وجود معایب و کاستی‌هایی که دارد قادر به شبیه‌سازی جریان‌های چندفازی با نسبت چگالی بالا نیز می‌باشد [۱۴].

باوجود مزایای زیاد روش یوان و شافر، ژانگ و تیان^۱ به این نکته اشاره کردند که این روش اساس فیزیکی مدل شان و چن را از بین برده است [۵۲]. دلیل آن‌ها این نکته بود که تابع پتانسیل در روش یوان و شافر در چگالی‌های مختلف مقادیر یکسانی می‌دهد. شکل ۲-۱۱ تغییرات تابع پتانسیل چندین معادله حالت مختلف در یک دمای معین با تغییر چگالی را نشان می‌دهد. با توجه به این شکل دلیل پیدایش ناگهانی قطره و یا حباب‌های کوچک در مسئله مشخص می‌شود. دلیل اصلی این پدیده تغییرات چگالی قبل از همگرایی کامل مسئله می‌باشد. به عنوان مثال، وقتی که چگالی نقطه در نظر گرفته شده کمی بیشتر از چگالی متناظر با پیک تابع پتانسیل باشد، این احتمال وجود دارد که به دلیل اختلاف در چگالی‌ها مقدار آن کمتر محاسبه شود به این معنی که تغییر فاز داده و در نتیجه حباب کوچکی به وجود بیاید. اگرچه این حباب‌ها و قطرات کوچک با ادامه محاسبات و همگرا شدن مقادیر چگالی از بین می‌روند و تأثیری در روند جریان اصلی نخواهند داشت. در بسیاری از مواقع تغییر مقادیر اولیه می‌تواند مانع از پیدایش این مشکل شود. یکی از مهم‌ترین چالش‌های شبیه‌سازی جریان‌های چند فازی با نسبت چگالی بالا نیز همین پدیده می‌باشد [۲].



شکل ۲-۱۱ رابطه بین چگالی و تابع پتانسیل برای سه معادله حالت مختلف [۲]

^۱ Zhang and Tian

فصل سوم

تجزیه و تحلیل

۳.۱ تجزیه و تحلیل معادله حالت شان و چن (C-S)

در این بخش به بررسی معادله حالت شان و چن می‌پردازیم. در کار با این معادله حالت با محدودیت‌هایی روبرو هستیم. محدودیت‌هایی شامل جریان‌های ساختگی بزرگ، ناپایداری ترمودینامیکی، پایین بودن نسبت‌های چگالی، جفت بودن معادله حالت و کشش سطحی، وابستگی کشش سطحی و نسبت چگالی. در ادامه به تفصیل به بررسی برخی از این محدودیت‌ها خواهیم پرداخت.

سیستم‌های چندفازی و ویژگی‌های آن‌ها با استفاده از معادلات حالت شان و چن قابل بسط در سیستم‌های چند جزئی نیز می‌باشند. فرض کنید که نیروهای بین مولکولی بین دو مولکول رخ دهند؛ بنابراین مولکول با چگالی بالاتر باعث اعمال نیروی قوی‌تری خواهد شد. در نتیجه انتظار داریم که اندازه برخورد بین عناصر سیال در x و $\tilde{x}$ متناسب با $\rho(x)$ و $\rho(\tilde{x})$ باشد. همچنین می‌دانیم که برخورد بین ذرات تابعی از فاصله بین ذرات می‌باشد. در نتیجه تابع مهمی با عنوان $G(x, \tilde{x})$ را معرفی می‌کنیم که حاوی اطلاعات مربوط به وابستگی فضایی نیرو باشد. بنابراین مجموع نیروهای اعمال شده بر روی سیال در x برابر است با انتگرال گیری در سرتاسر محل‌های قابل برخورد $\tilde{x}$ [۴۹].

$$F^{SC}(x) = - \int (\tilde{x} - x) G(x, \tilde{x}) \psi(x) \psi(\tilde{x}) d \quad (۱-۳)$$

در معادله فوق تابع چگالی مؤثر ψ را جایگزین چگالی ρ کرده‌ایم که این تابع را تابع شبه‌پتانسیل^۱ نیز می‌نامند. فرم اغلب پذیرفته‌شده و بیشتر مورد استفاده قرار گرفته تابع شبه‌پتانسیل که در فصل پیش نیز معرفی شد، به صورت رابطه (۲-۳) می‌باشد:

^۱ Pseudo-potential

$$\psi(\rho) = \rho_0 \left[1 - e^{\frac{-\rho}{\rho_0}} \right] \quad (2-3)$$

در رابطه فوق ρ_0 چگالی مرجع می باشد که در این مطالعه و اغلب شبیه سازی ها برابر با یک در نظر گرفته شده است. تابع شبه پتانسیل در رابطه (2-3) برای تمامی مقادیر ρ بین صفر و ρ_0 محدود می شود؛ به همین دلیل انرژی برخوردهای داخلی در رابطه (1-3) حتی برای چگالی های خیلی بزرگ مقداری متناهی و محدود دارد.

ساده ترین شکل نیروی گسسته شده مدل شان و چن برای مدل های تک جزئی، از طریق مجموع برخوردهای شبه پتانسیل با گره های همسایه با رابطه زیر بیان می شود:

$$F^{SC}(x) = -\psi(x)G \sum_i w_i \psi(x + c_i \Delta t) c_i \Delta t \quad (3-3)$$

که در رابطه فوق c_i سرعت و w_i وزن شبکه می باشد. همچنین تابع $\psi(x)$ را می توان از طریق رابطه (2-3) در این معادله اعمال کرد. ضریب G یک کمیت اسکالر ساده است که قدرت برخورد را کنترل می کند. مقادیر منفی G بیانگر نیروی جاذبه و مقادیر مثبت آن بیانگر نیروی دافعه می باشند [49].

۳.۲ محدودیت های مدل شان و چن

باوجود آسان بودن این روش در شبیه سازی جریان های چندفازی با محدودیت هایی نیز روبرو هستیم. در سال های اخیر بسیاری از محققان سعی بر این داشته اند که این محدودیت ها را از بین ببرند یا دست کم آن ها را کاهش دهند. معایبی که در ادامه ذکر می شود تمامی محدودیت های این مدل را در برنمی گیرد اما شامل مهم ترین نواقص این روش می باشند که برخی از آن ها با ارائه مدل های جدید کاهش یافته یا از بین رفته اند.

۳.۲.۱ محدودیت نسبت چگالی و لزجت

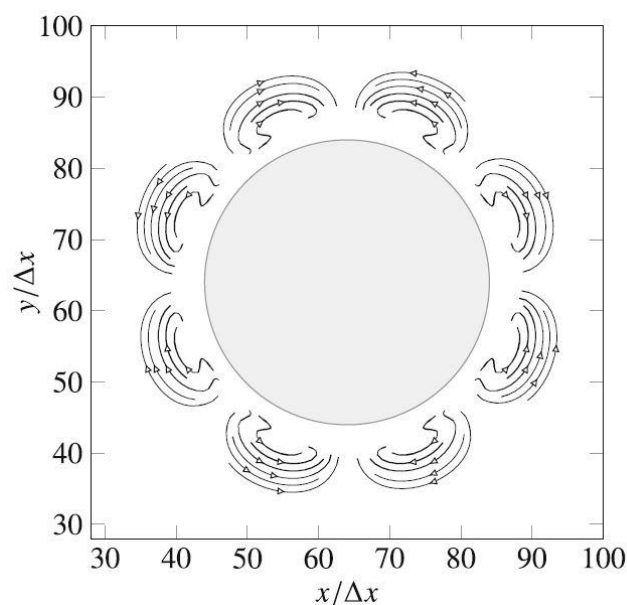
تا یک دهه پس از ارائه مدل اولیه شان و چن توابع پتانسیل مختلفی ارائه شد اما این توابع حداکثر برای نسبت چگالی‌های کمتر از ۶۰ قابل استفاده بودند. این توابع برای مواردی که نیروی موئینگی غالب باشد و نسبت چگالی نقش مهمی را در جریان نداشته باشد قابل قبول هستند. البته محدوده وسیعی از جریان‌های دوفازی در طبیعت نسبت چگالی در محدوده ۱۰۰۰ دارند که این توابع در آن‌ها قابل استفاده نمی‌باشند. نسبت لزجت نیز یکی دیگر از مشکلات این روش می‌باشد. همان‌طور که با افزایش نسبت چگالی جریان‌های ساختگی زیاد می‌شدند با افزایش نسبت لزجت نیز جریان‌های ساختگی افزایش می‌یابند و باعث ناپایداری روش می‌شود [۵۷]. در مقایسه با نسبت چگالی، نسبت لزجت چالش بزرگ‌تری می‌باشد زیرا حتی مدل‌های جدید ارائه شده که مشکل جریان‌های ساختگی در نسبت چگالی‌های بالا را حل کرده‌اند هنوز برای نسبت لزجت بالا سازگار نشده‌اند.

۳.۲.۲ وابستگی بین پارامترها

یکی از محدودیت‌های دیگر مدل شان و چن این است که کشش سطحی و معادله حالت در این مدل به پارامتر G وابسته هستند. با در نظر گرفتن پارامتر G بیشتر نه تنها نسبت چگالی گاز-مایع کاهش می‌یابد بلکه عرض سطح مشترک به دلیل کشش سطحی بزرگ‌تر افزایش می‌یابد و به صورت معکوس با افزایش نسبت چگالی با کاهش سطح مشترک باعث ناپایداری می‌شود. با در نظر گرفتن لایه اول گره‌های همسایه جهت محاسبه نیروی فعل و انفعال بین ذرات، نسبت چگالی و کشش سطحی را نمی‌توان به طور مستقل بررسی کرد. از سویی دیگر با تغییر زمان آسایش، مقدار کشش سطحی و نسبت چگالی تغییر می‌کند که امری غیر فیزیکی می‌باشد. همچنین زمان آسایش کمتر از ۰/۵ نیز باعث واگرایی حل عددی می‌شود که بیانگر محدود بودن لزجت می‌باشد [۱۶].

۳.۲.۳ جریان ساختگی

جریان‌های ساختگی، نوسان‌های مصنوعی در میدان سرعت هستند که ناشی از عدم تعادل بین گسسته سازی نیروها می‌باشند و از دستیابی به حالت تعادلی صحیح جلوگیری می‌کنند. در شکل زیر نمونه‌ای از این مدل جریان را مشاهده می‌کنید:



شکل ۳-۱ نمونه‌ای از جریان‌های ساختگی اطراف قطره ساکن [۴۹]

عدم بالانس نیرو در منحنی سطح مشترک رخ می‌دهد و میزان جریان ساختگی با کشش سطحی و معکوس لزجت متناسب می‌باشد. مشکل این جریان‌ها پیدایش ناپایداری و مشکل شدن تشخیص سرعت فیزیکی شبیه‌سازی شده از جریان ساختگی یا همان سرعت پارازیتی^۱ می‌باشد. همان‌طور که پیش‌تر گفته شد در شبکه بولتزمن تابع توزیع تعادلی به صورت رابطه (۳-۴) می‌باشد:

^۱ Spurious Currents

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left\{ 1 + \frac{c_i \cdot u}{c_s^2} + \frac{(c_i \cdot u)^2}{2(c_s^2)^2} - \frac{u^2}{2c_s^2} \right\} \quad (4-3)$$

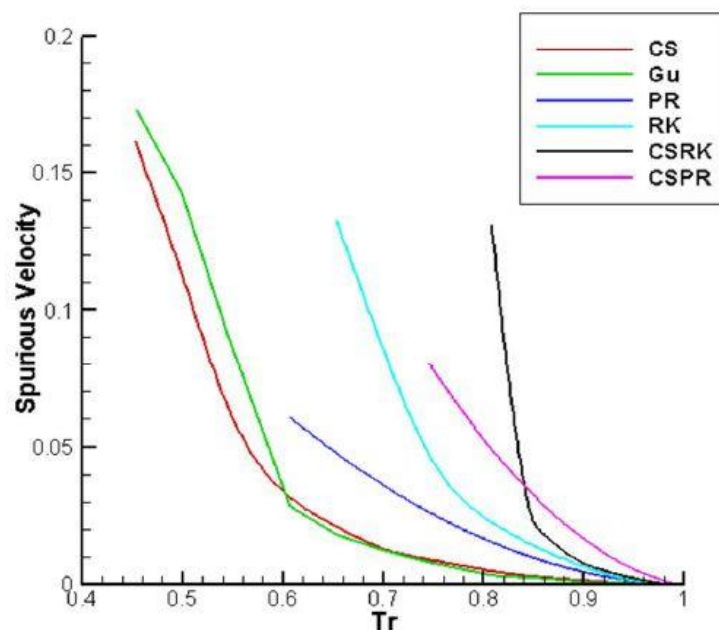
بسط بالا فقط برای اعداد ماخ کوچک مناسب است. عدد ماخ به صورت $Ma = \frac{u}{c_s}$ می باشد. این معادلات فقط برای اعداد ماخ کوچکتر از ۰/۱ معتبر هستند که با تغییر چگالی $\frac{\Delta \rho}{\rho} < 0.01$ مطابقت دارد.

به عنوان مثال در یک شبکه دوبعدی با ۹ گره که $c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}$ می باشد هر سرعتی بزرگتر از ۰/۵۸ باشد

غیرقابل اعتماد است: $u > Ma \times c_s = 0.1 \times 0.58 = 0.058$

با افزایش نسبت چگالی، جریان های ساختگی در ناحیه حل به شدت افزایش می یابند به طوری که در نسبت چگالی های بالا مقادیر سرعت جریان اصلی را تحت تأثیر قرار می دهند. روش های مختلفی برای کاهش این جریان ها پیشنهاد شده است که وارد کردن لایه های بیشتر در گسسته سازی و استفاده از معادلات حالت از جمله مهم ترین روش های کاهش این سرعت های اضافی می باشد.

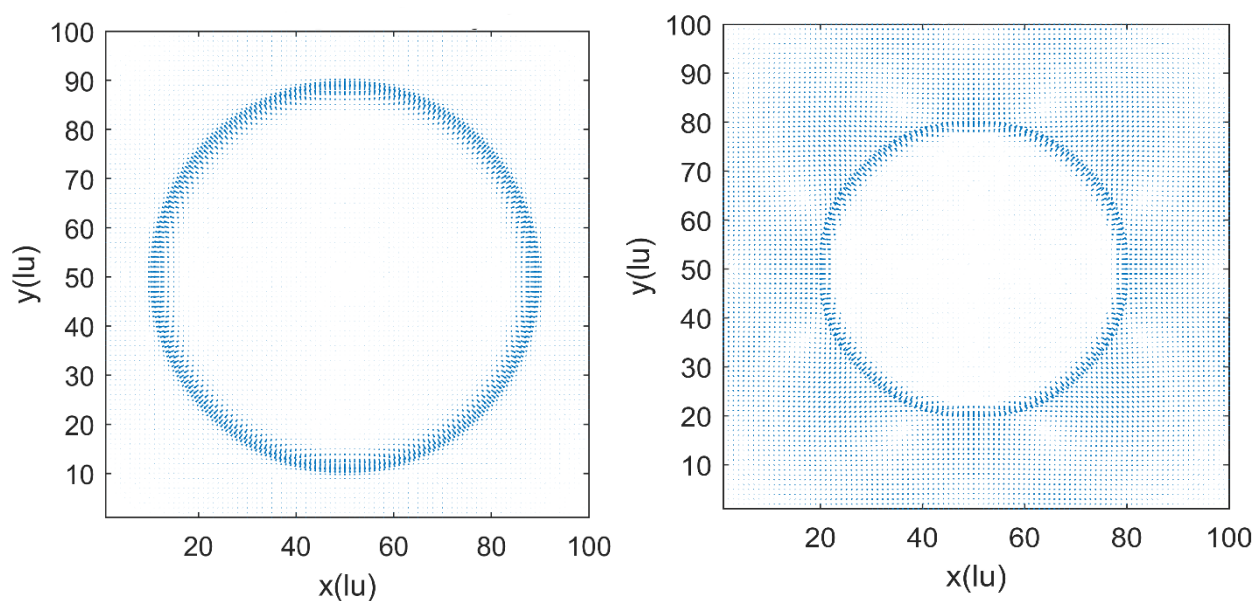
همان طور که اشاره شد، در ناحیه حل یک جریان ساختگی به وجود می آید. برای مقایسه تغییرات این جریان ساختگی به وسیله معادلات حالت مختلف باید مقدار بیشینه سرعت ساختگی آن در دماهای مختلف اندازه گیری شود. شکل ۲-۳ اندازه سرعت جریان ساختگی شش معادله حالت مختلف را نشان می دهد.



شکل ۳-۲ مقایسه اندازه سرعت جریان ساختگی معادلات حالت مختلف با روش گانگ-چنگ [۲۴]

تغییرات اندازه سرعت جریان ساختگی با نوع معادلات حالت و همچنین تغییرات دما رابطه مستقیم دارد. بطوریکه معادلات حالت غیر مکعبی کمترین جریان ساختگی را دارند. به همین دلیل به نظر می‌رسد که برای شبیه‌سازی مسائل مختلف، عملکرد بهتری را از خود نشان می‌دهند. لازم به ذکر است که در حداقل دماهای مورد استفاده مقدار این جریان بزرگ می‌باشد و می‌تواند باعث به وجود آمدن مشکلاتی در جریان اصلی سیال شود.

شکل ۳-۳ با اجرای کد نوشته شده توسط نرم افزار MATLAB بر مبنای مدل شبه پتانسیل شان و چن با ۳۰۰۰۰ تکرار بدست آمده است. این شکل نشان می‌دهد که در مقادیر کوچک تر G با نسبت چگالی‌های یکسان، در هنگام تشکیل قطره و رسیدن به نقطه تعادل، به دلیل وجود ناپایداری، مشکل جریان‌های ساختگی یا سرعت‌های پارازیتی برقرار می‌باشد، اما در مقادیر بزرگ تر G این جریان‌ها به‌طور قابل توجهی کمتر می‌باشد و قطره در حالت تعادل با سیال دیگر می‌باشد.



شکل ۳-۳ نمودار سرعت در لحظه $t = 30000$ (ts) در آزمون لاپلاس (شکل سمت چپ در $G=5$ و شکل سمت راست

در $G=8$)

۳.۲.۴ ناسازگاری ترمودینامیکی

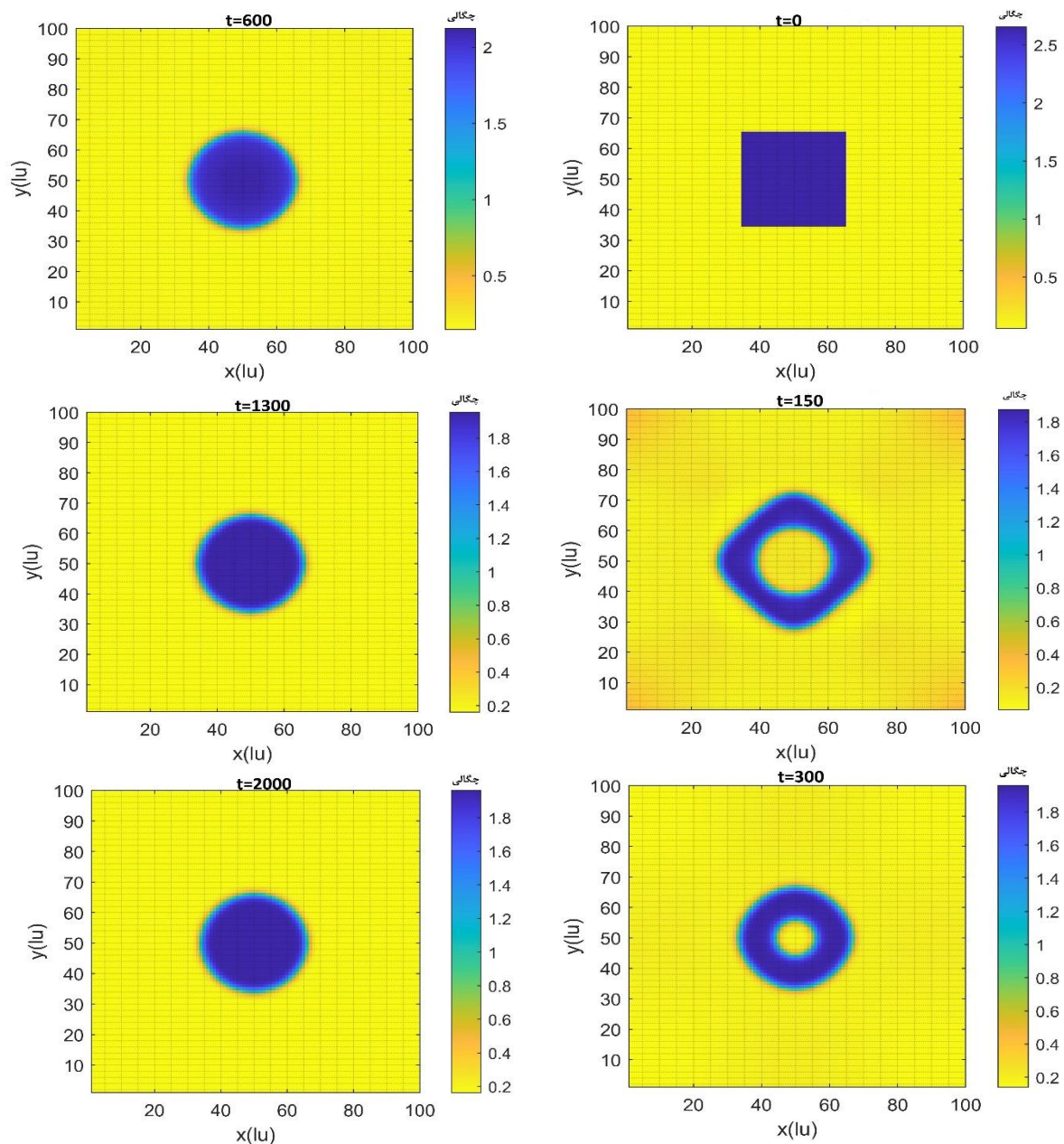
مهم‌ترین و پیچیده‌ترین بخش تحلیل جریان‌های حاوی سطح مشترک، مربوط به دینامیک سطح مشترک بین دو سیال است. مهم‌ترین بخش اثبات صحت شبیه‌سازی جریان، بررسی این موضوع می‌باشد. جهت تأیید صحت برنامه عددی برای هر مدل چندفازی روش شبکه بولتزمن، قطره معلق در سیال ساکن را شبیه‌سازی می‌کنند که به آزمون لاپلاس^۱ شناخته می‌شود. این آزمون به این صورت است که یک قطره را در مرکز یک محفظه مربعی قرار می‌دهند و در هر دو جهت این محفظه شرط مرزی پرئودیک اعمال می‌کنند. در این آزمون هیچ میدان سرعت یا نیرویی قطره وارد نمی‌شود.

^۱ Laplace Test

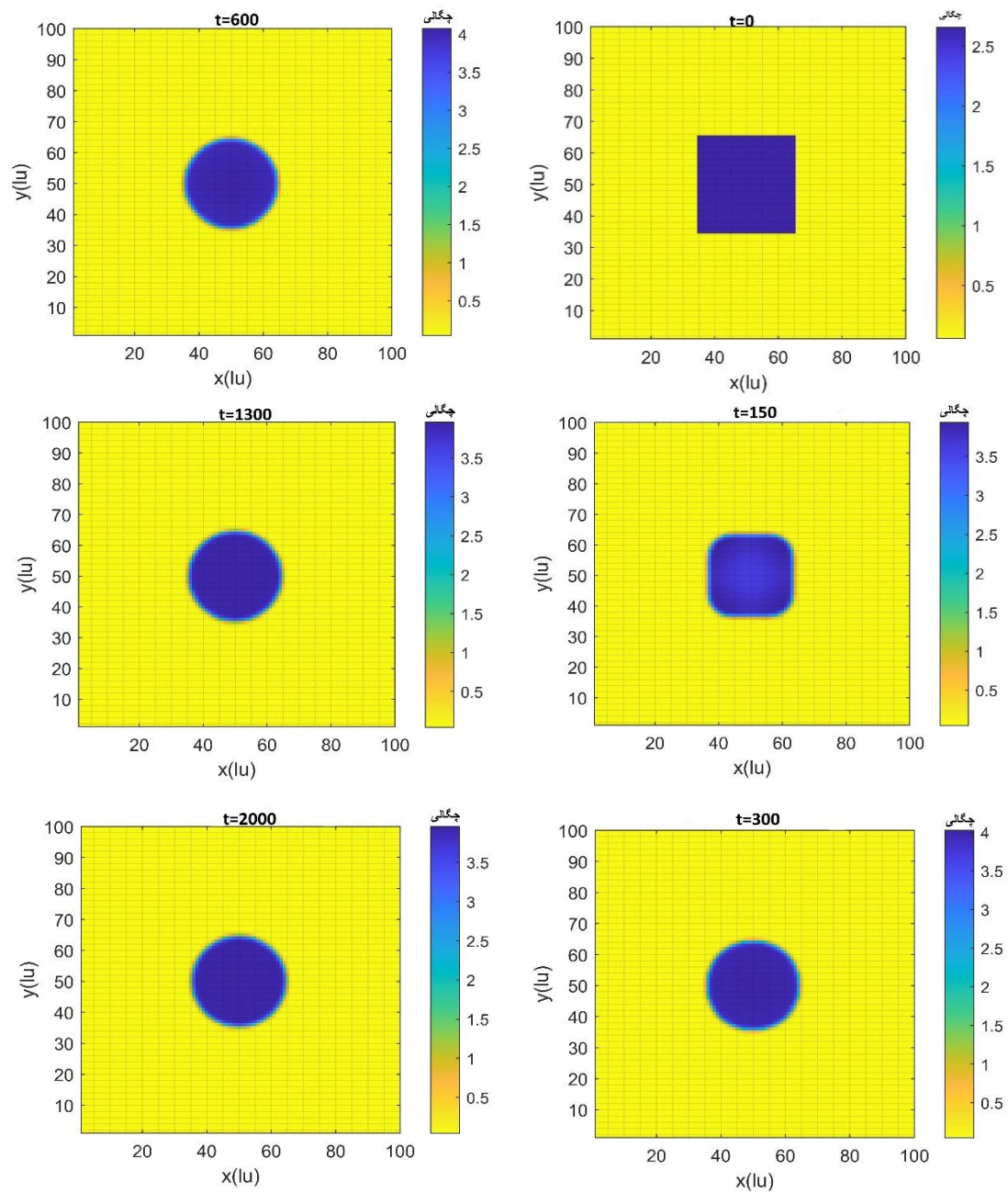
در ادامه با کد نوشته شده و بهبودیافته مدل شان-چن و اجرای آن توسط نرم افزار MATLAB، تغییر شکل یک حباب دوبعدی مربعی رها شده در یک صفحه افقی را نشان داده ایم. فضای حل دارای ابعاد 100×100 می باشد و ضلع حباب مربعی اولیه نصف بعد فضای حل یعنی ۵۰ واحد است. با توجه به اثرات کشش سطحی بین دو سیال، حباب تمایل دارد که به پایدارترین شکل با کمترین سطح مشترک تبدیل شود. در هر دو جهت هیچ میدان سرعتی به جریان اعمال نشده و شرط مرزی پریودیک است.

در ادامه دو شبیه سازی با $G=-5$ و $G=-8$ انجام شده است که نتایج آن نشان می دهد که با افزایش چگالی، نوسانات سطح مشترک کاهش می یابد و سریع تر به حالت دایره ای شکل تعادلی میل پیدا می کند. همان طور که در شکل ۳-۴ مشاهده می شود در فرآیند تبدیل قطره مربعی به دایره ای قبل از رسیدن به تعادل، اعوجاجاتی وجود دارد که از دلایل آن می توان به اندازه قطره و همچنین نامتناسب بودن مقدار پارامتر G با چگالی اشاره کرد. در آزمون فوق چگالی مایع برابر با $1/2$ و چگالی گاز برابر با $0/39$ می باشد.

شکل ۳-۵ آزمون لاپلاس حاصل از اجرای کد نوشته شده در یک شبکه 100×100 با $G=-8$ می باشد. در فرآیند به تعادل رسیدن قطره روند طبیعی را شاهد هستیم که از دلایل آن به انتخاب مناسب مقدار پارامتر G با نسبت چگالی های انتخابی اشاره کرد. در این آزمون چگالی گاز برابر با $0/056$ و چگالی مایع برابر $2/3$ می باشد.



شکل ۳-۴: آزمون لاپلاس جهت بررسی صحت کد نوشته شده در یک شبکه 100×100 با $G=-5$



شکل ۳-۵ آزمون لاپلاس برای بررسی صحت کد نوشته شده در یک شبکه 100×100 با $G=-8$

۳.۳ آزمون لاپلاس برای تخمین کشش سطحی

در نسبت چگالی‌های بالا مقادیر فشار تغییرات شدیدی در مقایسه با نسبت چگالی‌های کم دارد. به همین دلیل ابتدا به بررسی تأثیرات اندازه شبکه و زمان پایداری با کشش سطحی می‌پردازیم و سپس کشش سطحی را با شبکه انتخابی مناسب در دماهای مختلف (نسبت چگالی‌های متفاوت) ارزیابی می‌کنیم. بر اساس قانون لاپلاس اختلاف بین فشار درون قطره (P_{in}) و فشار خارج قطره (P_{out}) با کشش سطحی بین دو سیال رابطه دارد. به همین دلیل بین کشش سطحی و اختلاف فشار رابطه زیر برقرار است:

$$P_{in} - P_{out} = \frac{\sigma}{R} \quad (۵-۳)$$

رابطه فوق بیان می‌کند که بین اختلاف فشار میان دو سیال و معکوس شعاع قطره، یک رابطه خطی برقرار می‌باشد. به این دلیل که در مدل شبه پتانسیل شان و چن، ضریب کشش سطحی به‌طور مستقل تنظیم نمی‌شود از این آزمون برای تأیید صحت برنامه عددی استفاده می‌شود. برای این کار با تغییر اندازه شعاع قطره و محاسبه اختلاف فشار در هر قطره نمودار اختلاف فشار برحسب عکس رسم می‌شود که شیب نمودار به‌خوبی کشش سطحی را نشان می‌دهد [۴۹].

اگرچه در بین پارامترهای مختلف سیال، کشش سطحی به‌طور مستقیم با متغیر G مرتبط است، اما به‌طور مستقیم نمی‌توان آن را معین کرد و نیازمند شبیه‌سازی‌های متعدد می‌باشد. با شبیه‌سازی قطره با شعاع‌های مختلف و محاسبه اختلاف فشار داخل و خارج قطره و ترسیم اختلاف فشار بر حسب معکوس شعاع مقدار کشش سطحی بدست می‌آید؛ به عبارت دیگر میزان کشش سطحی شیب نمودار اختلاف فشار داخل و خارج دایره با معکوس شعاع می‌باشد. با در نظر گرفتن یک قطره به شکل مربع از سیال اول (مایع) در سیال دوم (گاز) در وسط مدل و با توجه به اینکه شرایط مرزی متناوب در چهار طرف مدل وجود دارد شبیه‌سازی صورت می‌گیرد. برای محاسبه فشار در روش شان و چن از رابطه زیر استفاده می‌شود [۵۸]:

$$p(x) = c_s^2 \sum_{\sigma} \rho_{\sigma}(x) + \frac{c_s^2}{2} \sum_{\sigma, \bar{\sigma}} G_{\sigma\bar{\sigma}} \psi_{\sigma}(x) \psi_{\bar{\sigma}}(x) \quad (6-3)$$

جهت اندازه گیری شعاع به صورت گرافیکی نمودار تغییرات چگالی دو سیال از مرکز شبکه به اطراف

آن به شعاع $R = \sqrt{(i - \frac{L}{2})^2 + (j - \frac{L}{2})^2}$ رسم می شود که نقطه تلاقی برابر با شعاع قطره می باشد. همچنین

جهت محاسبه شعاع قطره از رابطه زیر نیز استفاده می شود:

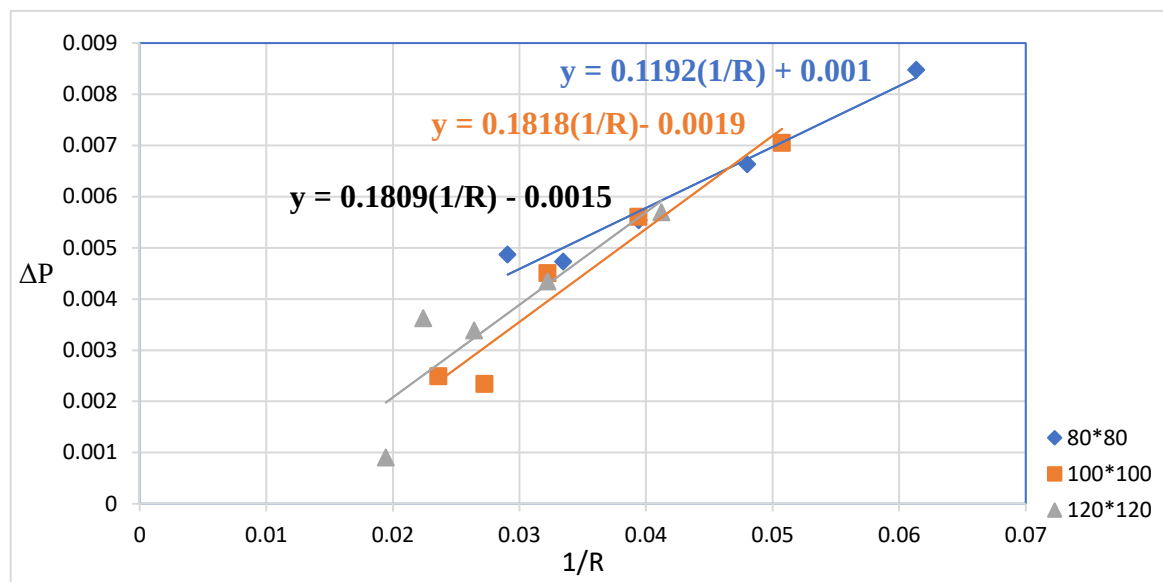
$$\rho_{1Max} \pi R^2 + (L^2 - \pi R^2) \rho_{1Min} = \bar{\rho} L^2 \quad (7-3)$$

که در آن $\bar{\rho}$ میانگین چگالی در سرتاسر شبکه برای سیال اول (مایع) یا به عبارتی دیگر سیالی که قطره را تشکیل داده می باشد [۱۲].

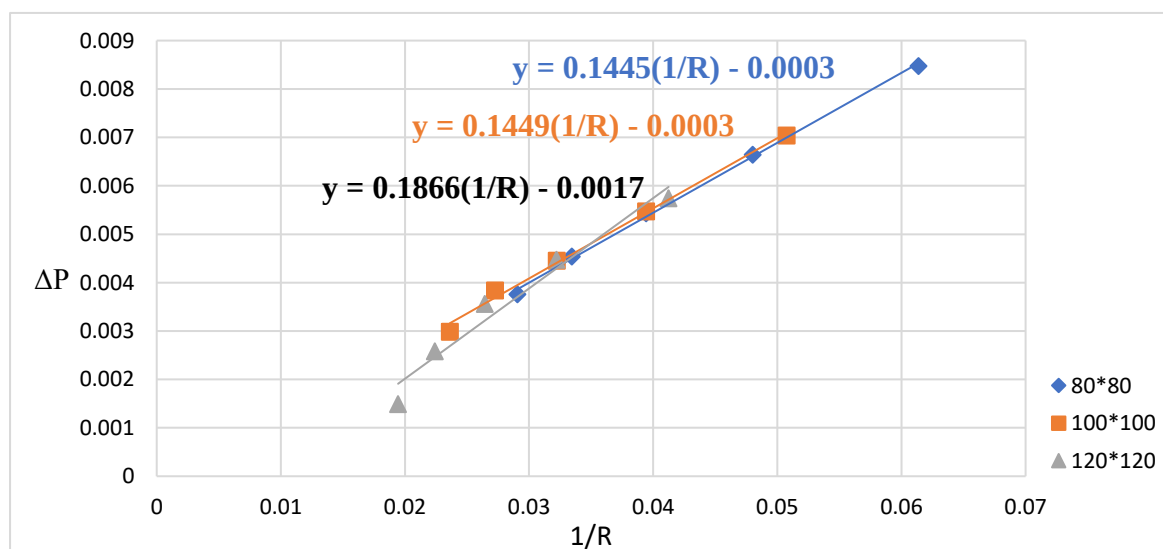
نتایج شکل ۳-۹ در شبیه سازی با ۲۰۰۰۰ تکرار نشان می دهد که با تغییر اندازه شبکه با مقدار ثابت G ، نتایج تغییر زیادی نمی کند. با توجه به اینکه شبکه های کوچک زمان کمتری را در محاسبات صرف می کنند از بین سه شبکه با سایزهای مختلف، از شبکه 100×100 در آزمون لاپلاس استفاده می کنیم.

نکته دیگری که در دستیابی به نتایج ایده آل قابل توجه می باشد تعداد تکرار محاسبات تا رسیدن به نتیجه قابل قبول است. به طوری که میزان تعداد تکرار محاسبات باید به گونه ای باشد که با تغییرات اندازه شبکه در مقدار G ثابت به مقدار کشش سطحی تقریباً یکسانی دست پیدا کنیم. بدین منظور برای تعیین میزان تکرار ایده آل، محاسبات را در چهار مرحله با میزان تکرارهای ۵۰۰۰ و ۱۰۰۰۰ و ۱۵۰۰۰ و ۲۰۰۰۰

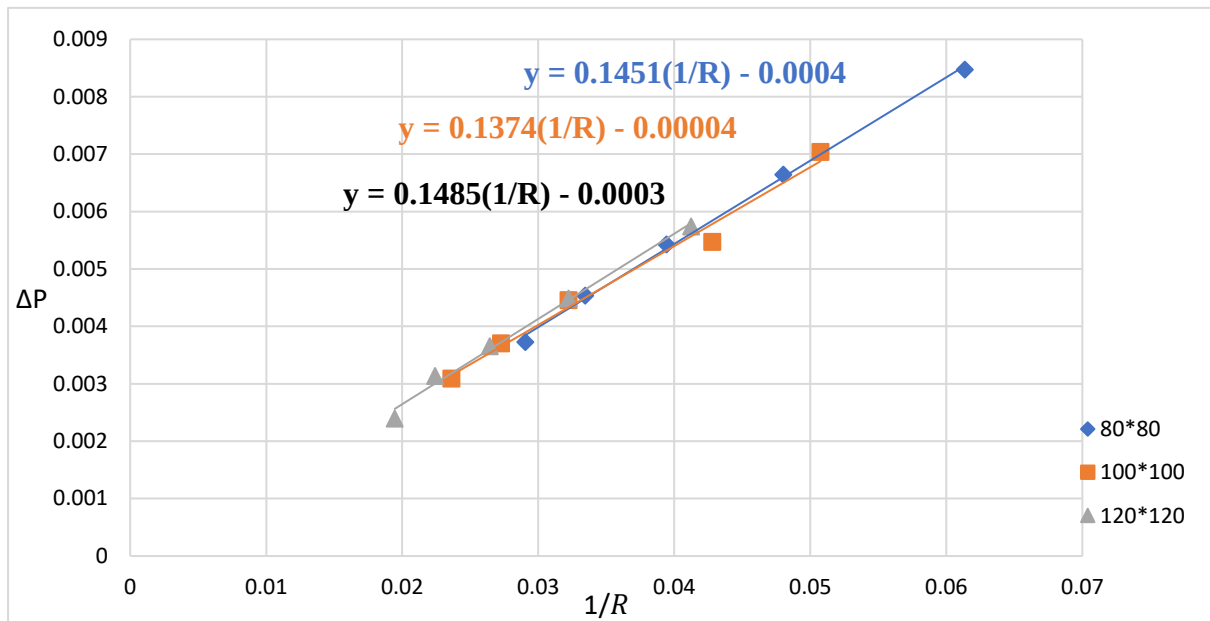
انجام دادیم. در این چهار مرحله مقدار G ثابت و برابر با ۶- و مقدار چگالی‌های مایع و گاز $\rho_g = 0.079$ $\rho_l = 2.675$ در نظر گرفته شد.



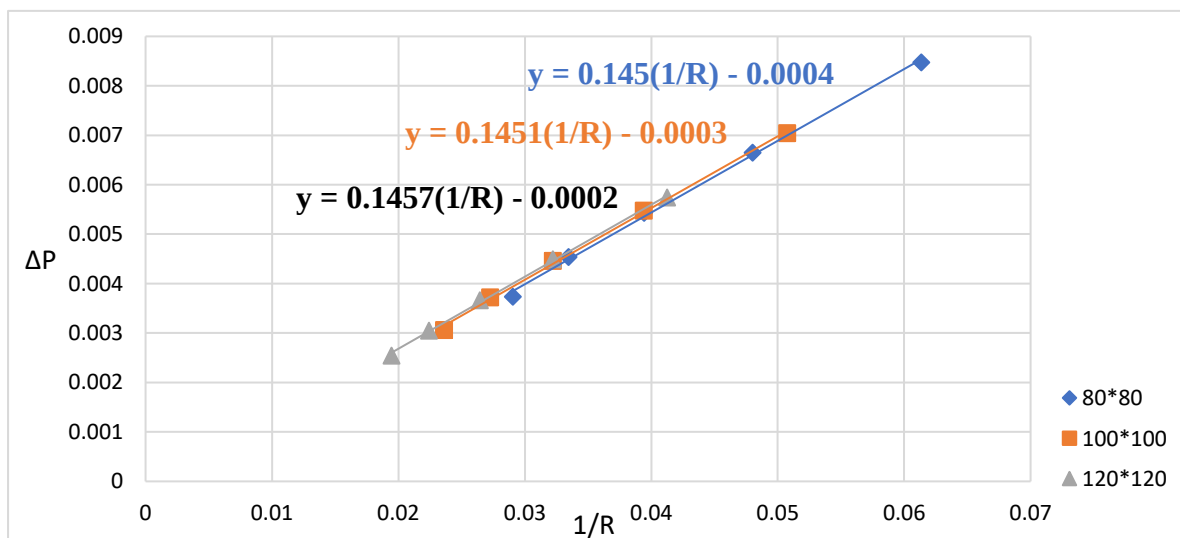
شکل ۳-۶ بررسی میزان کشش سطحی در محاسبات با تکرار ۵۰۰۰



شکل ۳-۷ بررسی میزان کشش سطحی در محاسبات با تکرار ۱۰۰۰۰



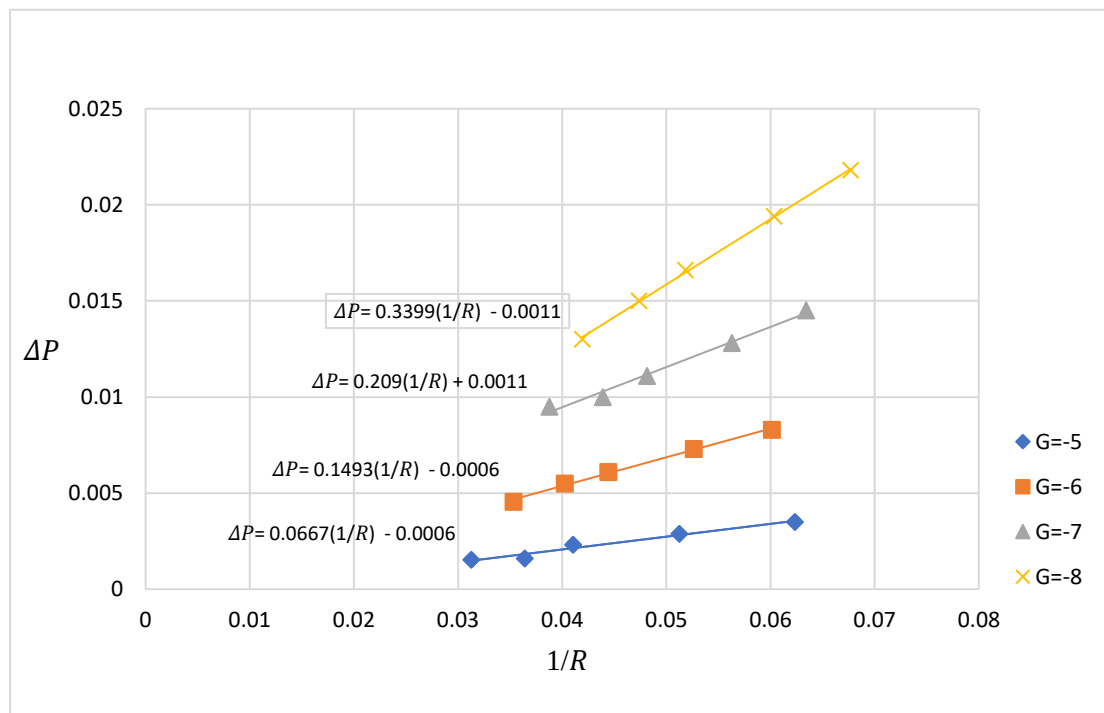
شکل ۳-۸ بررسی میزان کشش سطحی در محاسبات با تکرار ۱۵۰۰۰



شکل ۳-۹ بررسی میزان کشش سطحی در محاسبات با تکرار ۲۰۰۰۰

با بررسی چهار شکل قبلی به این نتیجه می‌رسیم که هرچند در محاسبات با تکرار ۱۵۰۰۰ به نتایج نسبتاً پایدار و قابل قبولی می‌رسیم اما برای اطمینان از صحت شبیه سازی ها، تعداد تکرار را حداقل ۲۰۰۰۰ در نظر گرفتیم. همچنین، با توجه به یکسان بودن تقریبی نتایج در اندازه‌های مختلف شبکه، به‌منظور بهینه‌سازی زمان انجام محاسبات، انتخاب شبکه 100×100 توصیه می‌شود.

تغییرات کشش سطحی به اندازه چگالی سیال و پارامتر G وابسته است. مقادیر کوچک‌تر G باعث ضخیم شدن مرز بین دو سیال می‌شوند و به همین دلیل اندازه این پارامتر باید به اندازه کافی بزرگ باشد. شکل ۳-۱۰ نتایج حاصل از شبیه‌سازی در یک شبکه 100×100 را با مقادیر مختلف G نشان می‌دهد. این شکل نشان می‌دهد که نتایج به‌دست‌آمده با پیش‌بینی آزمایش لاپلاس که بر لزوم رابطه خطی بین تغییرات فشار و معکوس شعاع تأکید دارد مطابقت قابل قبولی را دارد. شیب نمودار اختلاف فشار برحسب عکس شعاع قطره برابر با کشش سطحی می‌باشد که به راحتی قابل محاسبه می‌باشد. همان‌گونه که از نتایج شبیه‌سازی در شکل ۳-۱۰ مشخص است با افزایش مقدار G میزان کشش سطحی نیز کاهش می‌یابد و همان‌طور که قبلاً اشاره شد با کوچک‌تر شدن مقدار G مرز بین سیال نازک‌تر شده و در نتیجه کشش سطحی افزایش می‌یابد.



شکل ۳-۱۰ نتایج آزمون لاپلاس برای شبکه ۱۰۰×۱۰۰ به منظور محاسبه کشش سطحی

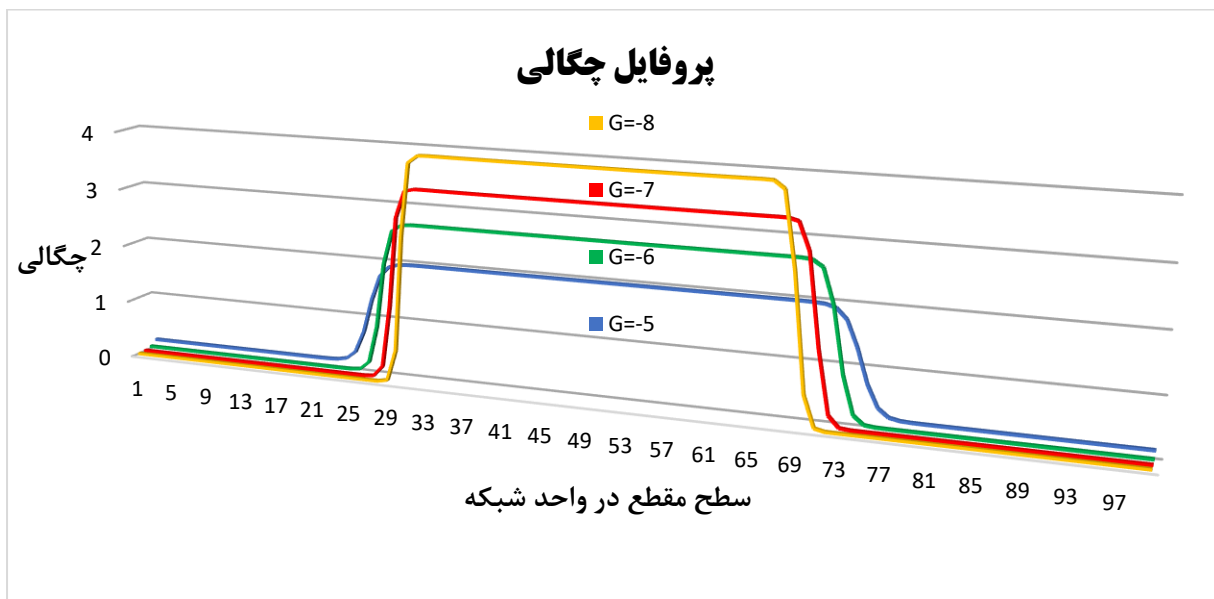
۳.۴ نمودار فازي

یکی از مهم‌ترین معایب اولین مدل پیشنهادی شان و چن، عدم کارایی جهت پیش‌بینی دقیق چگالی‌های دو فاز در یک دمای ثابت بود. با مشاهده جدول‌های ترمودینامیکی می‌بینیم که دو فاز گاز و مایع در هر دما دارای چگالی‌های مشخصی هستند که از روش‌های عددی انتظار می‌رود علاوه بر شبیه‌سازی جدایش دو فاز، چگالی‌های هر فاز را نیز به‌درستی پیش‌بینی کنند. همان‌طور که در توابع شبه‌پتانسیل مشخص است ترم دما مستقیماً وجود ندارد و فشار و چگالی مستقیماً به یکدیگر وابسته می‌باشند [۱۴].

تنها پارامتری که در تغییرات چگالی مؤثر است پارامتر G می باشد که نسبت چگالی دوفاز با تغییرات آن تغییر می کند. پارامتر G برعکس دمای مؤثر سیستم عمل می کند. جدایش فازها هنگامی که این پارامتر از مقدار بحرانی فراتر رود روی می دهد به عبارتی دیگر کاهش دمای سیستم به دمایی پایین تر از دمای بحرانی باعث جدایش فازها می شود. با انتخاب مناسب تابع شبه پتانسیل $\psi(x)$ این تابع، می تواند جدایی فاز را به خوبی توصیف کند. با در نظر گرفتن مقدار ثابت ρ_0 مقدار فشار در مدل شان و چن به صورت زیر محاسبه می شود:

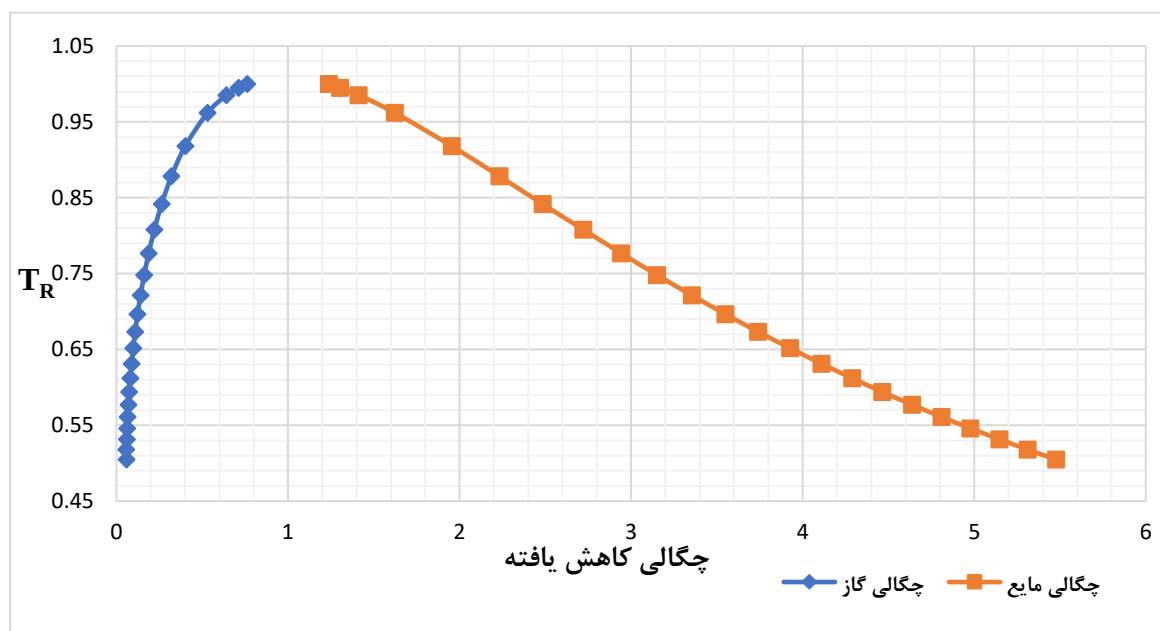
$$P = c_s^2 \rho + \frac{c_s^2 G}{2} \psi^2 \quad (۸-۳)$$

که در این رابطه c_s سرعت صوت در شبکه می باشد. شکل ۳-۱۱ حاصل ترسیم نمودار تغییرات چگالی در شبکه ۱۰۰×۱۰۰ می باشد. همان طور که مشاهده می شود با کاهش مقدار G طول قطره کمتر می شود و همچنین به دلیل بیشتر شدن کشش سطحی در G های کوچک تر، قطره برجسته تر شده و تغییر ناگهانی چگالی را نمودار مشاهده می کنیم اما در G های بزرگ تر شاهد اندازه بزرگ تر قطره و همچنین تغییر ملایم تر چگالی هستیم.

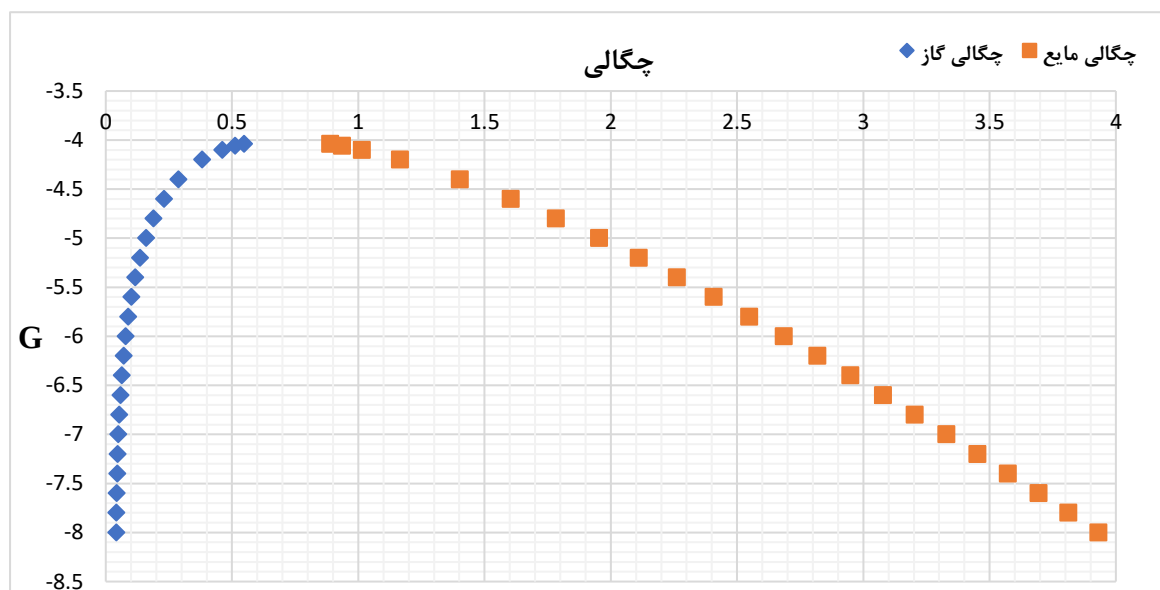


شکل ۳-۱۱ تغییرات چگالی بر روی امتداد طولی ناحیه حل در شبکه 100×100

در ادامه با بررسی معادله حالت شان و چن و اجرای کد نوشته شده ثابت می‌کنیم که معادله حالت شان و چن توانایی برآورده سازی نیازهای خواسته شده را دارا می‌باشد. با انجام محاسبات و ثبت مقدار چگالی‌های دو سیال مایع و گاز در مقادیر مختلف پارامتر G ، شکل ۳-۱۳ بدست می‌آید. همان‌گونه که قبلاً اشاره کردیم مقدار G بحرانی برابر با ۴- می‌باشد و محاسبات در کمتر از این مقدار به دلیل ناپایداری شرایط آزمایش قابل انجام نمی‌باشد. G بحرانی بزرگ‌ترین مقداری است که در آن دو فاز جداگانه مایع و گاز هم‌زمان می‌تواند وجود داشته باشد. در مقادیر کوچک‌تر از مقدار G بحرانی دو مقدار چگالی در فشار ثابت موجود است. در ادامه به بررسی مقادیر بحرانی در این معادلات خواهیم پرداخت.



شکل ۱۲-۳ نمودار تغییرات چگالی یافته در مقادیر متفاوت دمای کاهش یافته



شکل ۱۳-۳ نمودار تغییرات چگالی با مقادیر مختلف پارامتر G

۳.۵ ترشوندگی، زاویه تماس و فعل وانفعال سیال-جامد

تمامی مسائلی که تاکنون مورد بحث و بررسی قرار گرفت مربوط به فعل وانفعالات بین ذرات دو سیال متفاوت بود؛ اما همان طور که می دانیم تماس یک سیال با سطح جامد در طبیعت و همچنین در فرایندهای صنعتی و موضوعات علمی از اهمیت خاصی برخوردار می باشد. زاویه سطح تماس به عنوان مقیاسی از قابلیت ترشوندگی سطح جامد در نظر گرفته می شود.

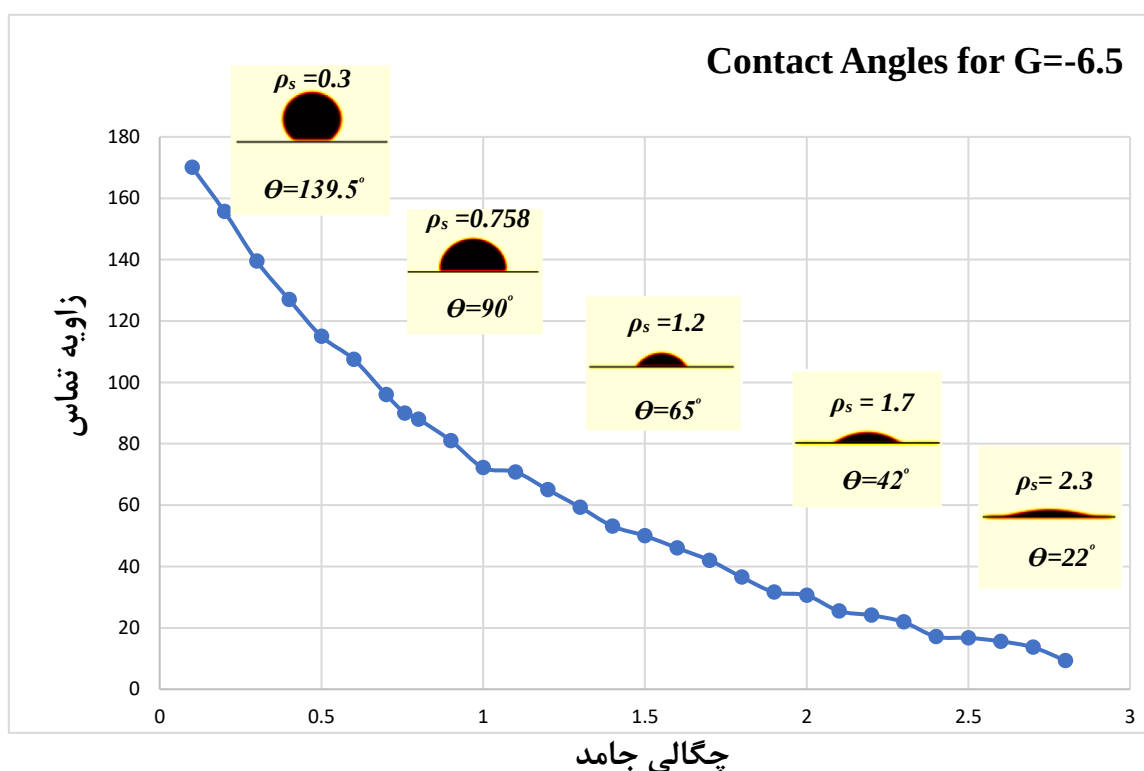
سطح تماس سیال با مرز جامد دارای یک زاویه تماس مشخص می باشد که می توان آن را با قراردادن یک قطره بر سطح جامد بررسی کرد. ساده ترین راه برای گنجاندن گره های جامد با یک ترشوندگی مشخص، استفاده از نیروی برهمکنش یا فعل وانفعال شان و چن بین گره های جامد و گره های مرزی (مثل گره های سیال مجاور گره های جامد) می باشد. نیروی فعل وانفعال بین ذرات سیال و سطح جامد را می توانیم به وسیله یک نیرو به صورت زیر وارد رابطه کنیم [۴۹]:

$$F^{SC}(x) = -G\psi(x) \sum_i^{solid} w_i \psi(\rho_s) c_i \Delta t \quad (۹-۳)[۵۹]$$

در معادله فوق، نیرو بر روی یک گره سیال در X اعمال می شود. عملگر جمع یا سامیشتن در تمامی جهات c_i عمل می کند و هر گره جامد برابر با $x + c_i \Delta t$ می باشد. گره های جامد دارای چگالی مشخصی می باشند که با ρ_s نشان داده می شوند. پارامتر ρ_s به طور غیرمستقیم کنترل کننده زاویه تماس در مرز جامد می باشد.

در حالت کلی سه روش متفاوت برای بدست آوردن زاویه های تماس مختلف وجود دارد. در رایج ترین روش که به صورت وسیع مورد استفاده قرار می گیرد، $\rho_s = Constant$ را در نظر می گیرند و G تغییر می کند تا زاویه تماس مدنظر حاصل شود. مقادیر مثبت این پارامتر به زاویه تماس کمتر از ۹۰ درجه و

مقادیر منفی آن به زوایای بزرگتر از 90° درجه منجر می‌شود. در روش دوم G ثابت است و ρ_s تغییر می‌کند. لازم به ذکر است که این چگالی ارتباطی با چگالی ماده مورد استفاده در سطح جامد ندارد. اگر فرض را بر این بگذاریم که $\rho_s = \rho_l$ باشد، آنگاه مقدار زاویه تماس صفر می‌باشد. همچنین اگر $\rho_s = \rho_g$ باشد، زاویه تماس 180° درجه‌ای به وجود می‌آید. روش سوم شامل تلفیقی از دو روش قبل می‌باشد، بطوریکه هر دو پارامتر G و ρ_s تغییر می‌کنند. در پژوهش‌های انجام شده مزیت خاصی برای هیچ‌کدام از این روش‌ها بیان نشده است و نوع روش در دقت نتایج یا پایداری محاسبات تفاوت محسوسی ایجاد نمی‌کند. ما در این تحقیق از روش دوم، یعنی در نظر گرفتن مقدار G ثابت و تغییر چگالی جامد (ρ_s) استفاده کرده‌ایم.



شکل ۳-۱۴ مقایسه تغییرات زاویه تماس و چگالی جامد در مقدار $G = -6/5$

شکل ۳-۱۴ حاصل اجرای کد در مقدار G ثابت در مقادیر متفاوت چگالی سطح جامد می‌باشد. مشاهده می‌شود که با در نظر گرفتن مقدار ثابت چگالی مایع و پارامتر G در مقادیر متفاوت چگالی جامد،

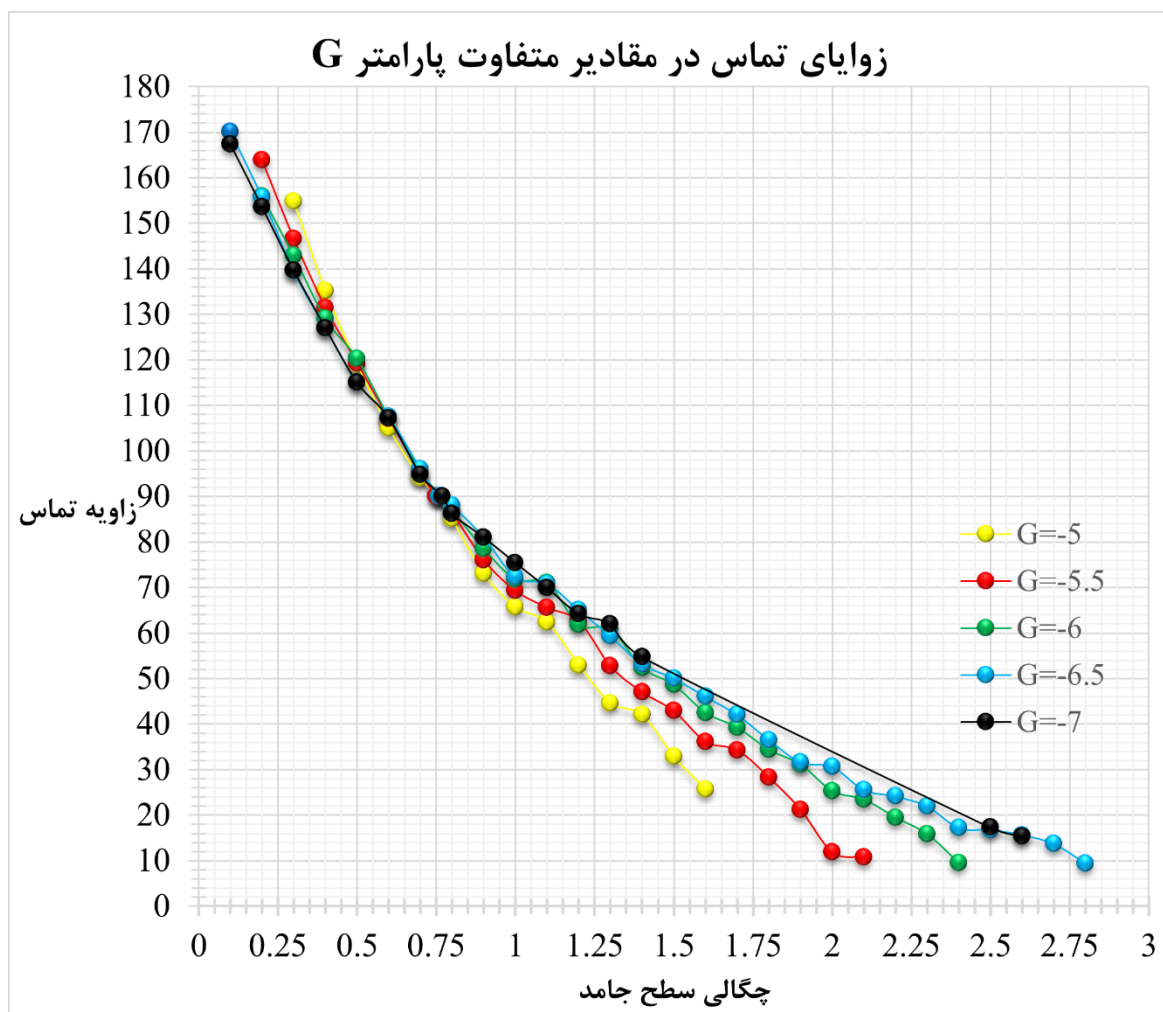
زاویه تماس‌های مختلفی را خواهیم داشت که هرگاه چگالی جامد به چگالی مایع نزدیک‌تر باشد، زاویه تماس کوچک‌تری خواهیم داشت و در مواردی که چگالی جامد به چگالی سیال گاز نزدیک‌تر باشد زاویه تماس بزرگ‌تری خواهیم داشت.

جهت محاسبه زاویه تماس قطره مایع بر روی سطح جامد می‌توان از رابطه (۳-۱۱) کمک گرفت. البته مرز بین دو فاز سیال گره‌ای در نظر گرفته می‌شود که چگالی آن برابر با نصف مجموع چگالی فاز گاز و مایع می‌باشد.

$$r = \frac{4h^2 + b^2}{8h} \quad (۳-۱۰)$$

$$\theta = \begin{cases} \arcsin\left(\frac{h}{2r}\right) & \theta < 90 \\ \pi - \arcsin\left(\frac{h}{2r}\right) & \theta > 90 \end{cases} \quad (۳-۱۱)$$

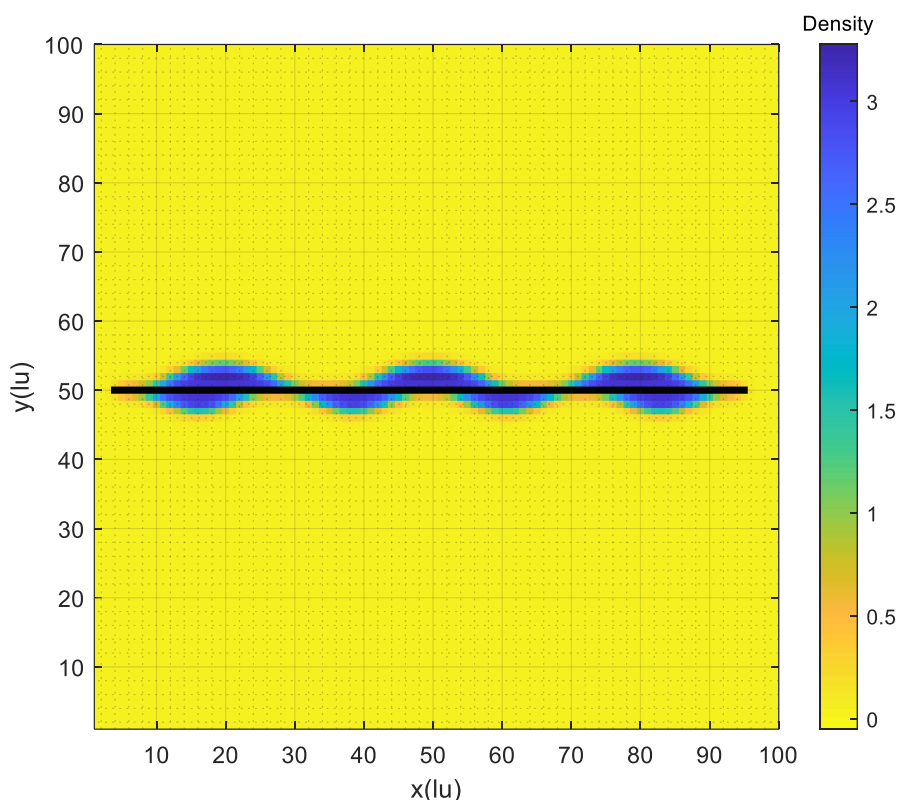
که h و b به ترتیب ارتفاع قطره هنگام قرار گرفتن بر روی سطح و عرض قطره قرار گرفته بر روی سطح جامد می‌باشند. به کمک این مدل می‌توان برخورد قطره با سطح جامد را مدل‌سازی نمود. در این پدیده علاوه بر زاویه تماس، سایر پارامترها نیز تأثیر مهمی در نحوه تغییر شکل قطره و شکل تعادلی نهایی آن خواهند داشت اما عمده مطالعات و پژوهش‌های صورت گرفته بر روی این مسئله مربوط به هنگامی است که قطره پس از برخورد دچار ازهم‌پاشیدگی نشود؛ به این دلیل که در این حالت تغییرات سطح تماس قطره با سطح جامد از الگوهای تقریباً یکسانی پیروی می‌کنند.



شکل ۳-۱۵ مقایسه تغییرات زاویه تماس در مقادیر متفاوت پارامتر G

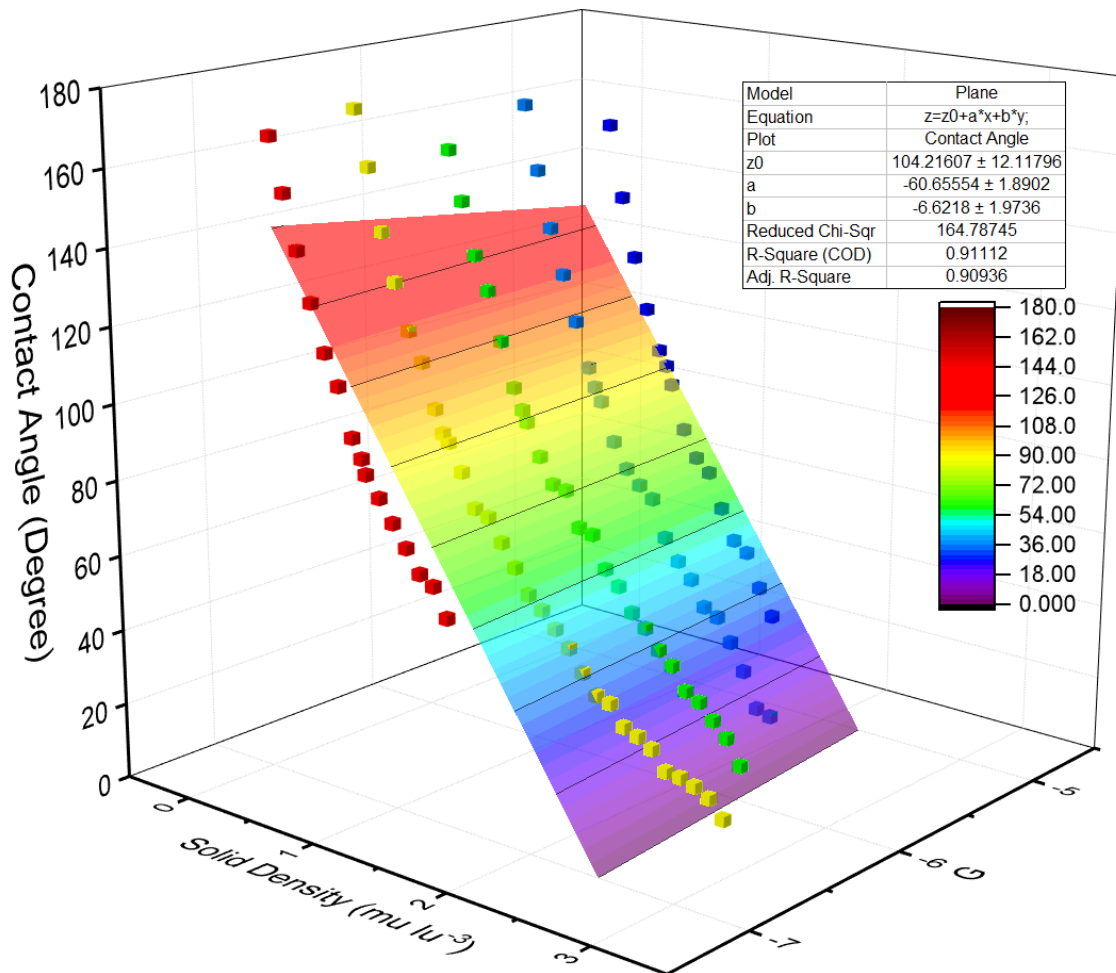
نتایج شکل ۳-۱۵ حاصل اجرای کد و محاسبه زاویه تماس با استفاده از رابطه (۳-۱۱) و راستی آزمایی آن با زاویه تماس تصویر قطره می‌باشد. لازم به ذکر است که نتایج حاصل از خروجی کد و زاویه تماس محاسبه شده از تصویر قطره اختلاف محسوسی نداشتند. نتایج برای چگالی‌های سطح جامد در برای هر پارامتر G محاسبه و رسم شده است. نکته قابل توجه، همگرایی این نمودار در زاویه تماس 90° درجه می‌باشد که همان گونه که مشاهده می‌شود در زاویه تماس 90° درجه در تمامی مقادیر پارامتر G ، چگالی سطح جامد تقریباً یکسان است. همچنین در $G=-7$ به دلایلی نامعلوم از چگالی جامد $1/5$ تا $2/4$ قطره حالت ناپایداری شدیدی را دارا بود که بعد از آن شاهد پایداری و ثبت زاویه تماس قطره بودیم که در شکل

۱۶-۳ قابل مشاهده می‌باشد. این ناپایداری نکته‌ای حائز اهمیت است که در مطالعات بعدی جای بحث و بررسی خواهد داشت. از علل احتمالی این پدیده می‌توان به وجود جریان‌های جعلی شدید اشاره کرد. بهترین و بیشترین پایداری قطره در محاسبه زاویه تماس را در $G=-6/5$ شاهد بودیم و همان‌طور که در شکل ۱۵-۳ مشاهده می‌شود از بیشترین بازه در زاویه تماس برخوردار است.



شکل ۱۶-۳ ناپایداری و ترکیدگی قطره در $G=-7$ و چگالی جامد بین $1/5$ تا $2/4$

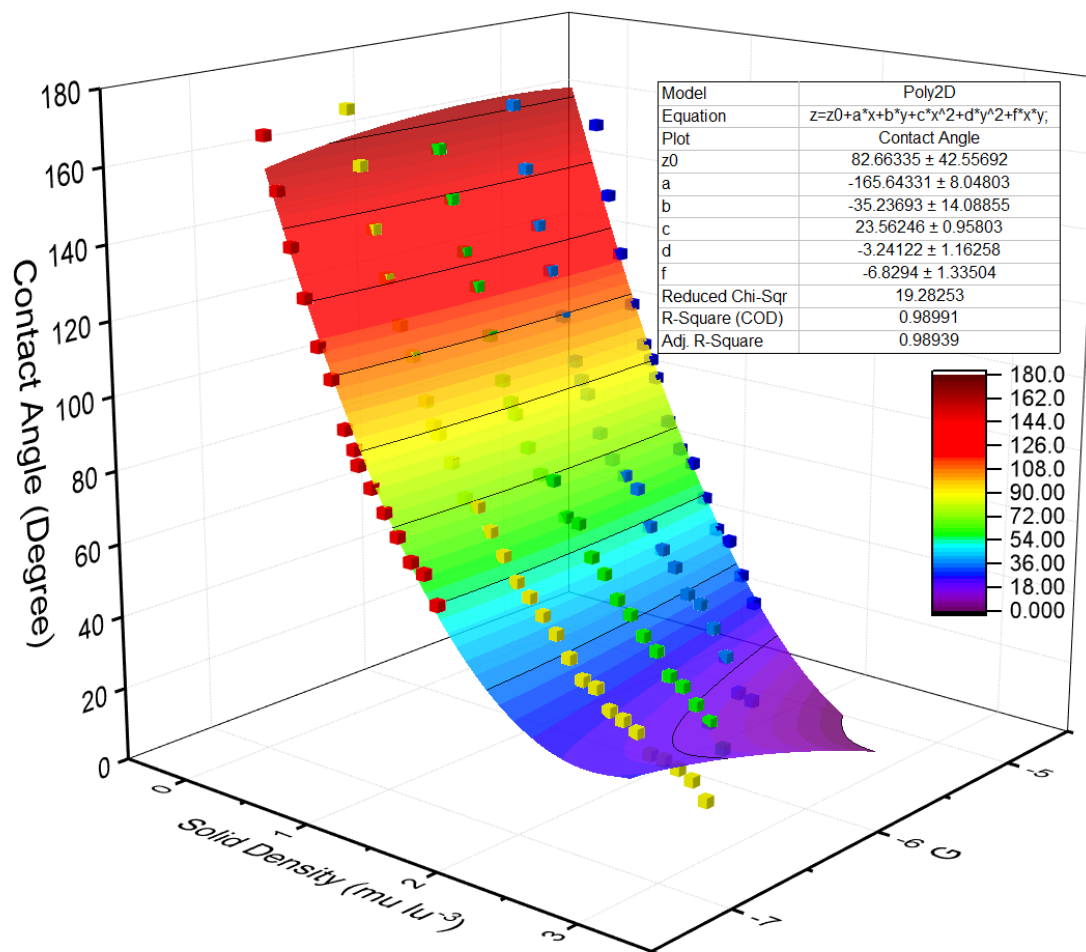
مطالعات مختلفی رابطه بین اندازه زاویه تماس و ارتباط آن را با اندازه برهمکنش بین سیال و جامد را بدست آورده‌اند [۶۰، ۶۱]، اما زاویه تماس در روش شبه‌پتانسیل شان و چن تنها وابسته به برهمکنش بین سیال و جامد نیست و با توجه به تغییر کشش سطحی با اندازه G ، پارامتر G بر روی زاویه تماس نیز اثرگذار است که روابط آن در این پژوهش برای اولین بار استخراج شد و چهار معادله جدید با ضرایب تعیین (R^2) 0.91 ، 0.98 ، 0.98 ، 0.98 بدست آمد که به صورت زیر است:



شکل ۳-۱۷ برازش خطی ارتباط بین زاویه تماس با پارامتر G و چگالی جامد

در رابطه زیر فرمول بدست آمده از برازش خطی ارتباط بین زاویه تماس با پارامتر G و چگالی جامد با $R^2=91$ نشان داده شده است.

$$CA = 104.21 - 60.65\rho_s - 6.62G \quad (3-12)$$

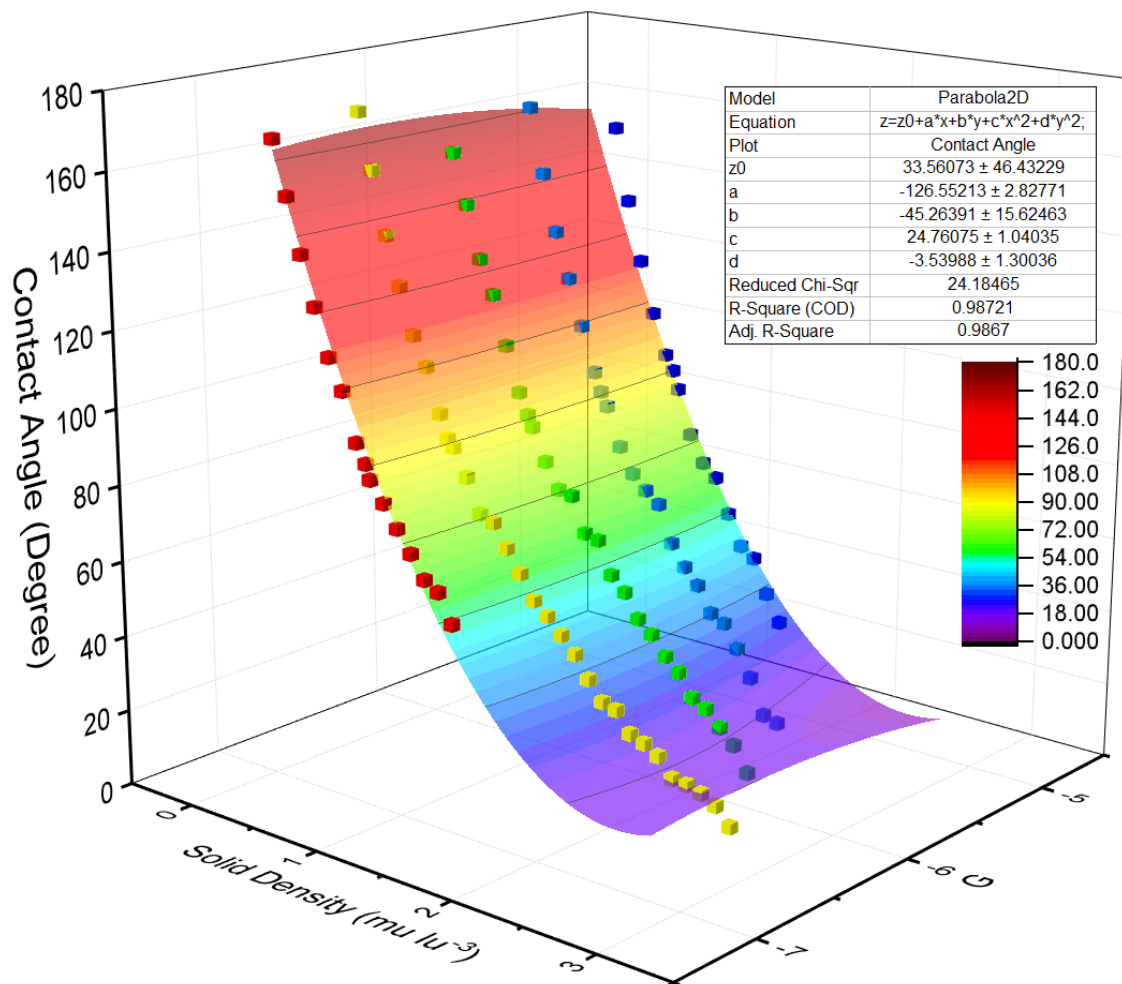


شکل ۳-۱۸ برازش چندجمله‌ای دوبعدی ارتباط بین زاویه تماس با پارامتر G و چگالی جامد

در رابطه زیر فرمول بدست آمده از برازش چندجمله‌ای دوبعدی ارتباط بین زاویه تماس با پارامتر

G و چگالی جامد با $R^2=98$ نشان داده شده است.

$$CA = 82.66 - 165.64\rho_s - 35.23G + 2356\rho_s^2 - 3.24G^2 - 6.82\rho_s G \quad (3-13)$$

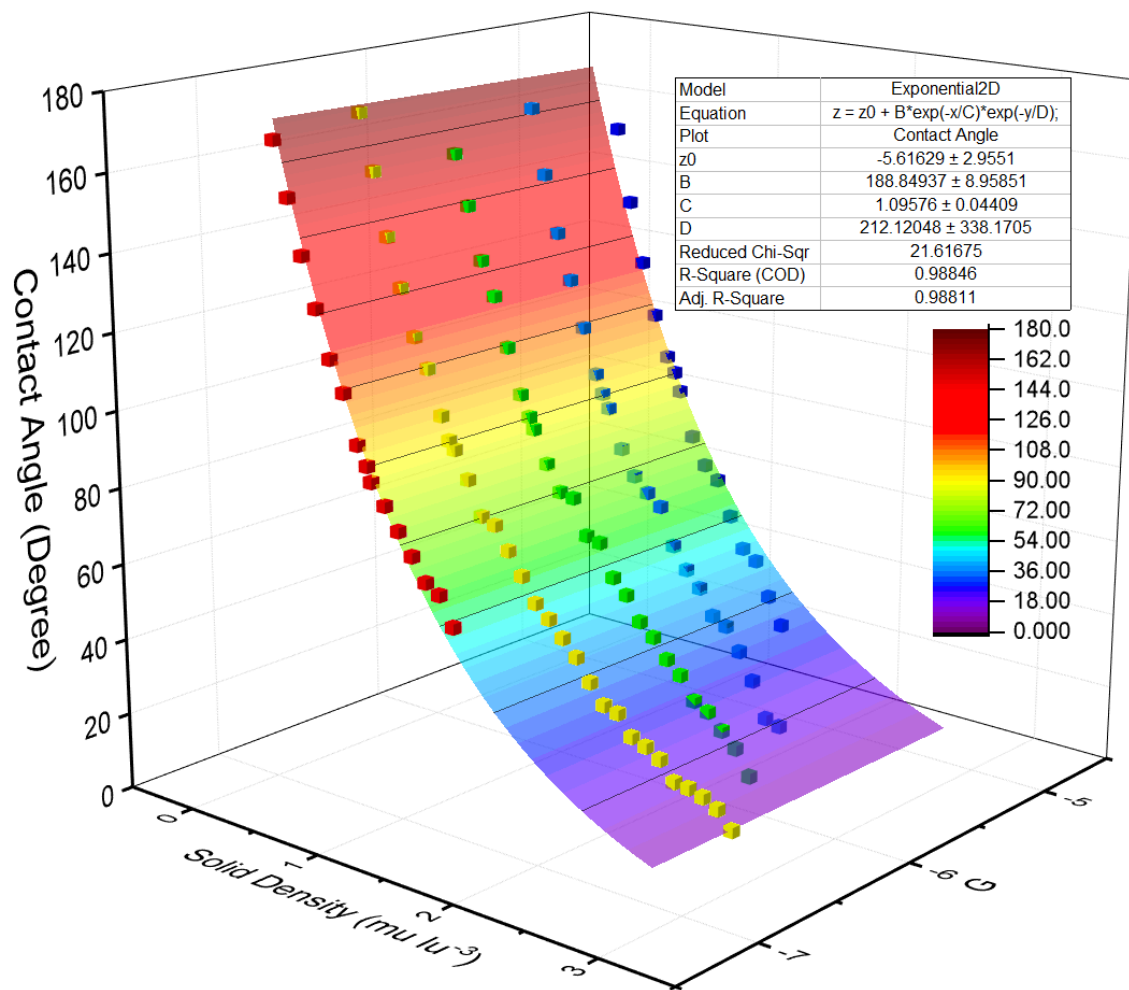


شکل ۳-۱۹ برازش سهموی ارتباط بین زاویه تماس با پارامتر G و چگالی جامد

در رابطه زیر فرمول بدست آمده از برازش سهموی ارتباط بین زاویه تماس با پارامتر G و چگالی

جامد با $R^2=98$ نشان داده شده است.

$$CA = 33.56 - 126.55\rho_s - 45.26G + 24.76\rho_s^2 - 3.53G^2 \quad (3-14)$$



شکل ۳-۲۰ برازش نمائی دوبعدی ارتباط بین زاویه تماس با پارامتر G و چگالی جامد

در رابطه زیر فرمول بدست آمده از برازش نمائی دوبعدی ارتباط بین زاویه تماس با پارامتر G و چگالی جامد با $R^2=98$ نشان داده شده است.

$$CA = -5.61 + 188.84 \exp \left\{ -\frac{\rho_s}{1.09} - \frac{G}{212.12} \right\} \quad (15-3)$$

۳.۶ جایگزینی معادله حالت وندروالس با معادله حالت شان و چن

فرم اغلب پذیرفته شده و بیشتر مورد استفاده قرار گرفته تابع شبه پتانسیل شان و چن به شکل زیر

می باشد:

$$\psi(\rho) = \rho_0 \left[1 - e^{\frac{-\rho}{\rho_0}} \right] \quad (۱۶-۳)$$

در رابطه فوق ρ_0 چگالی مرجع می باشد که در این مطالعه و اغلب شبیه سازی ها به صورت واحد یا

یک در نظر گرفته می شود. با در نظر گرفتن مقدار ثابت ρ_0 مقدار فشار در مدل شان و چن به صورت زیر

محاسبه می شود:

$$p(x) = c_s^2 \sum_{\sigma} \rho_{\sigma}(x) + \frac{c_s^2}{2} \sum_{\sigma, \bar{\sigma}} G_{\sigma\bar{\sigma}} \psi_{\sigma}(x) \psi_{\bar{\sigma}}(x) \quad (۱۷-۳)$$

یا

$$P = c_s^2 \rho + \frac{c_s^2 G}{2} \psi^2 \quad (۱۸-۳)$$

با معادل سازی فشار در مدل شان و چن با فشار در معادلات حالت جدید، تابع پتانسیل برای اعمال

معادلات حالت جدید به صورت زیر نوشته می شود [۱۴]:

$$\psi(G, c_s, P) = \sqrt{\frac{2\{P(\text{New EOS}) - c_s^2 \rho\}}{c_s^2 G}} \quad (۱۹-۳)$$

برای جلوگیری از هرگونه خطا در همسان سازی مدل شان و چن با معادلات حالت، نیروی

بین ذره ای و چسبندگی به صورت زیر باید در نظر گرفته بشوند:

$$F_{int}(x, t) = \psi(\rho(x, t)) \sum_i \omega_i \psi(\rho(x + c_i \Delta t, t)) c_i$$

$$F_{ads}(x, t) = \psi(\rho(x, t)) \sum_i \omega_i \psi(\rho_w(x_w, t)) s(x + c_i \Delta t, t) c_i$$
(۲۰-۳)

که در آن:

$$\psi = \sqrt{\frac{2\{c_s^2 \rho - P_{EOS}\}}{c_s^2}}$$
(۲۱-۳)

در نتیجه علامت G وقتی که در تابع شبه پتانسیل شان و چن یا در معادلات حالت به کار می رود باید منفی باشد. همچنین مقدار G باید جهت تست فیزیکی شبیه سازی منفی در نظر گرفته شود. با توجه به ناپایداری هایی که در تخصیص چگالی اولیه و یا نقاطی که با کنتراست بالای چگالی هستند ممکن است اتفاق بیفتد، بهتر این است که در معادله تابع بالا از قدر مطلق استفاده کنیم.

$$\psi = \sqrt{\left| \frac{2\{c_s^2 \rho - P_{EOS}\}}{c_s^2} \right|}$$
(۲۲-۳)

در مدل شان و چن تابع پتانسیل متوسط تنها تابعی از فشار بود؛ اما معادله فوق که توسط یوان و شافر ارائه شد، تابعی از G (مرتبط با دما) و سرعت صوت و فشار می باشد. در نتیجه مواجه شدن با تابع پتانسیل متوسط در فرمی که یوان و شافر به آن رسیدند ثبات بیشتر و بهتر در شرایط تجربی دارد.

بهتر است پارامترهای معادله حالت (مانند پارامترهای a و b در معادله حالت وندروالس) به صورت یک تابع با خصوصیات بحرانی مواد تعریف شود تا اینکه، مانند آنچه یوان و شافر بدست آوردند با مقادیر ثابت تعریف شود. بنابراین، مرتبط ساختن فشار بحرانی از معادله حالت جدید به معادله حالت مدل شان و چن، نکته کلیدی و اصلی تحقیق در این بخش می باشد. بنابراین از فشار بحرانی در معادلات حالت شان و چن و وندروالس روابط زیر بدست می آیند.

با انتخاب مناسب تابع شبه پتانسیل $\psi(\rho)$ ، این معادله می‌تواند جدایی فاز را توصیف کند. با فرض اینکه تابع ψ فقط به ρ وابسته باشد، جهت محاسبه مقادیر بحرانی P و ρ و G مشتق اول و دوم نسبت به چگالی را از رابطه (۲۲-۳) بدست می‌آوریم:

$$\begin{aligned}\frac{\partial P}{\partial \rho_c} &= c_s^2 + c_s^2 G_c \psi_c \dot{\psi}_c = 0 \\ \frac{\partial^2 P}{\partial \rho_c^2} &= c_s^2 G_c [\psi_c \ddot{\psi}_c + \dot{\psi}_c^2] = 0\end{aligned}\quad (23-3)$$

که در ادامه داریم:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \psi}{\partial \rho_c} &= e^{-\frac{\rho_c}{\rho_0}} \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial \rho_c^2} &= -\frac{e^{-\frac{\rho_c}{\rho_0}}}{\rho_0}\end{aligned}\quad (24-3)$$

در روابط فوق اندیس c به معنای مقادیر بحرانی می‌باشد.

با جایگذاری معادله (۲۴-۳) در دستگاه معادلات (۲۳-۳) مقادیر بحرانی ρ و G به این صورت بدست می‌آیند:

$$\begin{aligned}\rho_c &= \ln(2)\rho_0 \\ G_c &= -\frac{4}{\rho_0} = \frac{-4\ln(2)}{\rho_c}\end{aligned}\quad (25-3)$$

و با جایگذاری معادله (۲۵-۳) در رابطه (۱۸-۳) مقدار فشار بحرانی این‌گونه بدست می‌آید:

$$P_c \approx \frac{0.3863}{2\ln(2)} c_s^2 \rho_c \approx 0.0929 \rho_c \quad (26-3)$$

حال روابط فوق را با استفاده از پارامترهای بدون بعد زیر معرفی می‌کنیم. این پارامترهای بدون بعد به دلیل راحت بودن در مقایسه و محاسبه مورد استفاده قرار می‌گیرند:

$$\begin{aligned} P_r &= \frac{P}{P_c} \\ T_r &= \frac{T}{T_c} \\ \rho_r &= \frac{\rho}{\rho_c} \\ G_r &= \frac{G}{G_c} \end{aligned} \quad (27-3)$$

که در روابط فوق P_r فشار کاهش یافته، T_r دمای کاهش یافته، ρ_r چگالی کاهش یافته و در نهایت G_r که به معنای پارامتر قدرت برخورد کاهش یافته می‌باشند. در نتیجه فشار کاهش یافته P_r در مدل شان و چن با ضرب $\frac{G_c}{G_c}$ در سمت چپ معادله (3-18) و تقسیم نتیجه بر معادله (3-26) این گونه بدست می‌آید

[22]:

$$P_r = 3.5887\rho_r - 10.3549G_r(1 - e^{-0.6932\rho_r})^2 \quad (28-3)$$

اکنون رابطه فشار در معادله حالت وندروالس به صورت رابطه (3-29) بیان می‌شود:

$$P = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - a\rho^2 \quad (29-3)$$

که در معادله (3-19) جایگزین می‌شود. در معادله فوق a پارامتر جذب گاز در ذرات و b حداقل حجم مولی مؤثر می‌باشد [51]. با مشتق‌گیری مرتبه اول و دوم از معادله فوق و برابر صفر قراردادن آن مقادیر نهایی برای پارامترهای a و b به صورت زیر بدست می‌آید.

$$a = \frac{9RT_c}{8\rho_c} \quad b = \frac{1}{3\rho_c} \quad (30-3)$$

با جایگذاری روابط (30-3) در معادله (29-3) فشار بحرانی به صورت زیر بدست می آید:

$$p_c = \frac{\rho_c RT_c}{1 - \frac{\rho_c}{3\rho_c}} - \frac{9RT_c}{8\rho_c} \rho_c^2 = \frac{3}{8} RT_c \rho_c \quad (31-3)$$

فشار کاهش یافته نیز به این صورت بدست می آید:

$$P_r = \frac{8\rho_r T_r}{3 - \rho_r} - 3\rho_r^2 \quad (32-3)$$

همان طور که اشاره شد، بهتر است پارامترهای معادله حالت (مانند پارامترهای a و b در معادله حالت وندروالس) به صورت یک تابع با خصوصیات بحرانی مواد تعریف شود. بنابراین مرتبط ساختن فشار بحرانی از معادله حالت جدید به معادله حالت شان و چن، نکته کلیدی و اصلی ارتباط فشار بحرانی بین این دو مدل است که به صورت زیر انجام می شود.

$$P_c(vdW) = \frac{3}{8} RT_c \rho_c = P_c(SC) \approx \frac{0.3863}{2\ln(2)} C_s^2 \rho_c \approx 0.0929 \rho_c \quad (33-3)$$

با ساده سازی معادله (33-3) رابطه زیر برای دمای بحرانی برای معادله حالت وندروالس بدست

می آید:

$$RT_c \approx 0.7431 c_s^2 \approx 0.2477 \quad (34-3)$$

با جایگذاری معادلات (25-3) و (34-3) در (30-3)، پارامترهای a و b این گونه بدست می آیند:

$$a \approx \frac{0.2787}{\ln(2)\rho_0}, b = \frac{1}{3\ln(2)\rho_0} \quad (35-3)$$

$$\rho_0 = 1 \Rightarrow a = 0.402079, b = 0.480898$$

برای سایر معادلات حالت نیز به همین نحو مشخصات بحرانی و پارامترهای a و b به دست می‌آیند که در جدول ۳-۱ بر اساس رویکرد پیشنهادی آن را خلاصه کرده‌ایم. تمامی مدل‌ها فرم یکسانی از چگالی و فشار بحرانی را دارند که تابعی از ρ_0 هستند. مقدار RT_c در هر معادله حالت تفاوت اندکی دارد که با توجه به دقت هر کدام قابل قبول می‌باشد. به دلیل عدم مغایرت با تحقیق‌های قبلی مقدار R را در این پژوهش برابر با یک در نظر گرفته‌ایم. بنابراین برخلاف رویکرد یوان و شافر پارامترهای معادله حالت را می‌توان با تعیین مقدار ρ_0 مشخص کرد.

جدول ۳-۱ خلاصه‌ای از مقادیر بحرانی و پارامترهای معادلات حالت مختلف بر اساس رویکرد پیشنهادی

مدل	ρ_c	P_c	G_c or T_c	Z_c	a	b
SC	$\ln(2)\rho_0$	$0.0929\rho_c$	$\frac{-4}{\rho_0}$	0.279	-	-
vdW	$\ln(2)\rho_0$	$0.0929\rho_c$	0.2477	0.375	$1.125 \frac{RT_c}{\rho_c}$	$\frac{0.3333}{\rho_c}$
K-R	$\ln(2)\rho_0$	$0.0929\rho_c$	0.2785	0.334	$1.282 \frac{RT_c \sqrt{T_c}}{\rho_c}$	$\frac{0.2597}{\rho_c}$
S-C	$\ln(2)\rho_0$	$0.0929\rho_c$	0.2588	0.359	$1.3829 \frac{RT_c}{\rho_c}$	$\frac{0.5218}{\rho_c}$

یوان و شافر این گونه فرض کردند که ارتباط بین دما و پارامتر G به صورت $T = -\frac{1}{G}$ می‌باشد و

بنابر آن مفروضات فشار کاهش یافته را این گونه معرفی کردند:

$$T_r = \frac{1}{G_r} \quad (36-3)$$

از آنجایی که فشار محاسبه شده توسط معادله حالت وندروالس با آنچه شان و چن محاسبه کردند برابر نیست، تعریفی که یوان و شافر نیز از دما کردند نیازمند تصحیح و اصلاح می باشد.

در ادامه به معرفی یک رابطه جدید که G_r و T_r را با یکدیگر مرتبط می سازد می پردازیم. ایده اصلی ترکیب معادلات حالت در مدل شان و چن برابر هم قراردادن رابطه فشار در این دو معادله است

$$P(EOS) = P(SC) \quad (37-3)$$

با برابر قراردادن فشار کاهش یافته در معادله وندروالس با فشار کاهش یافته معادله شان و چن داریم:

$$\left(\frac{8\rho_r T_r}{3 - \rho_r} - 3\rho_r^2 \right)_{vdW} = (3.5887\rho_r - 10.3549G_r(1 - e^{-0.6932\rho_r})^2)_{SC} \quad (38-3)$$

همان طور که مشاهده شد پارامتر T_r تابعی است از $(\rho_r)_{SC}, G_r$ و $(\rho_r)_{vdW}$ به عبارتی دیگر:

$$T_r = f\{G_r, (\rho_r)_{vdW}, (\rho_r)_{SC}\}$$

معادله حالت وندروالس متفاوت خواهد بود. استفاده از رابطه (38-3) برای بدست آوردن ارتباط بین G_r و T_r کاربردی ندارد زیرا نیاز به مشخص بودن چگالی های کاهش یافته در هر دو مدل شان و چن و وندروالس داریم. به همین دلیل در نظر گرفتن فشار کاهش یافته در مدل شان و چن و معادله حالت وندروالس به صورت تابعی از G_r و T_r روشی است که راه را برای رسیدن به هدف آسان می کند:

$$3.6444T_r^2 - 3.5587T_r - 11.036e^{-2.425G_r} + 0.903 = 0 \quad (39-3)$$

رابطه بین G_r مدل شان و چن و T_r مدل کارناهان-استارلینگ به صورت زیر خواهد شد:

$$5.276T_r^2 - 6.0691T_r - 11.036e^{-2.425G_r} + 1.7799 = 0 \quad (40-3)$$

همان طور که قبلاً اشاره شد می‌دانیم که:

$$\rho = \rho_r \times \rho_c, P = P_r \times P_c, T = T_r \times T_c, G = G_r \times G_c \quad (3-41)$$

با استفاده از معادلات بالا، با قراردادن G_r روش شان و چن دمای معادل معادله حالت وندروالس و کارناهان-استارلینگ برحسب T_r بدست می‌آید که با توجه به دمای بحرانی هر روش دمای معادل هر معادله حالت بدست می‌آید. با توجه به توضیحات ارائه‌شده، نتایج شبیه‌سازی با $\rho_0=1$ برای روش شان و چن ($G_r=1.25$ یا $G=-5$) و معادل آن برای وندروالس (دمای $T=0.2125$ یا $G=-4/7$ یا $T=0.883$ یا $T_r=0.883$) و معادله کارناهان-استارلینگ (دمای $T=0.2285$ یا $G=-4/38$ یا $T_r=0.883$) به صورت جدول ۲-۳ بدست آمد:

جدول ۲-۳ نتایج بدست آمده از مدل شان و چن با $G=-5$ و معادل آن در مدل وندروالس و کارناهان-استارلینگ

SC Model, $G=-5$				vdW EOS, $G=-4.7$				C-S EOS, $G=-4.38$			
G_r	$\rho_{r,l}$	$\rho_{r,g}$	IFT(σ)	T_r	$\rho_{r,l}$	$\rho_{r,g}$	IFT(σ)	T_r	$\rho_{r,l}$	$\rho_{r,g}$	IFT(σ)
۱/۲۵	۲/۸	۰/۲۲۸	۰/۰۵۷	۰/۸۵۸	۱/۷۸۷	۰/۳۴۱	۰/۰۲۲۴	۰/۸۳۳	۱/۳۸	۰/۲۱۵	۰/۰۳۰۵

با مقایسه کشش سطحی بدست آمده در مدل شان و چن و دو مدل دیگر مشاهده می‌شود که کشش سطحی بدست آمده در مدل شان و چن حدود ۲/۵ برابر از مدل وندروالس و ۱/۸ برابر از مدل کارناهان-استارلینگ بیشتر می‌باشد. بدلیل اختلاف چگالی دو فاز در مدل شان و چن کشش سطحی بیشتری را شاهد هستیم. این تفاوت بین مدل کارناهان-استارلینگ و وندروالس ناچیز می‌باشد.

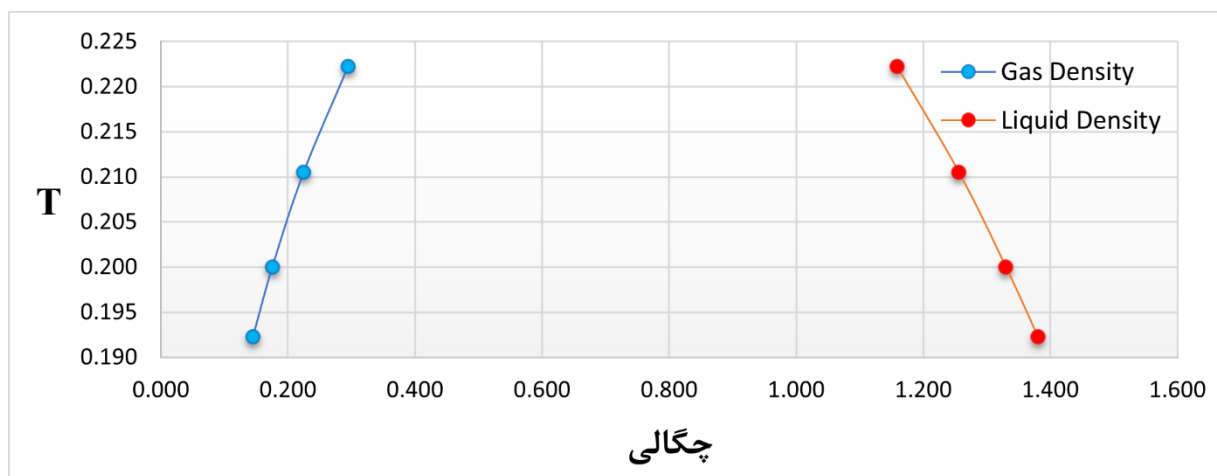
در ادامه به شبیه‌سازی قطره معلق برای محاسبه کشش سطحی برای چهار G مختلف $-4/5$ ، $-4/75$ ، -5 ، $-5/2$ که معادل G_r شان و چن 0.2125 ، 0.1875 ، 0.25 و $1/3$ انجام شده است که نتایج آن در جدول ۳-۳ قابل مشاهده است.

جدول ۳-۳ نتایج بدست آمده از آزمون شبیه‌سازی قطره معلق جهت بدست آوردن کشش سطحی با استفاده از معادله

حالت وندروالس

نسبت چگالی	کشش سطحی	G	T	چگالی مایع	چگالی گاز
۳/۹	۰/۰۱۴۲	-۴/۵	۰/۲۲۲	۱/۱۵۹	۰/۲۹۴
۵/۶	۰/۰۲۴۷	-۴/۷۵	۰/۲۱۱	۱/۲۵۶	۰/۲۲۵
۷/۶	۰/۰۳۳۵	-۵	۰/۲۰۰	۱/۳۳۰	۰/۱۷۵
۹/۵	۰/۰۴۴	-۵/۲	۰/۱۹۲	۱/۳۸۰	۰/۱۴۵

با توجه به نتایج به‌دست‌آمده در جدول فوق همان‌گونه که مشاهده می‌شود با افزایش نسبت چگالی کشش سطحی افزایش می‌یابد و همچنین با کاهش پارامتر G و T به علت ضخیم شدن سطح تماس قطره کشش سطحی افزایش خواهد یافت. لازم به ذکر است که با روش معادله حالت وندروالس در انتخاب مقادیر کوچک‌تر G انعطاف‌پذیری بیشتری خواهیم داشت که یکی از مزیت‌های این روش نسبت به روش شان و چن می‌باشد. در ادامه نتایج به دست آمده توسط شبیه‌سازی قطره معلق با استفاده از معادله حالت وندروالس را در مقادیر متفاوت T محاسبه کردیم که در دوفاز مایع و گاز مقادیر چگالی به دست آمده توسط شکل ۳-۲۱ نشان داده شده است.



شکل ۳-۲۱ چگالی‌های مایع و گاز در مقدار دمای (T) متفاوت - شبیه سازی قطره معلق با معادله وندروالس

با شبیه سازی قطره معلق و آزمون لاپلاس با استفاده از معادله شبه پتانسیل شان و چن نتایج بدست آمده در جدول ۳-۴ قرار گرفته اند.

جدول ۳-۴ نتایج بدست آمده از آزمون شبیه‌سازی قطره معلق جهت محاسبه کشش سطحی با استفاده از معادله

شبه پتانسیل شان و چن

نسبت چگالی	کشش سطحی	G	T	چگالی مایع	چگالی گاز
۱/۷	۰/۰۰۰۵	-۴/۰۵	۰/۲۴۷	۰/۹۱۲	۰/۵۲۳
۳//۵	۰/۰۰۷۹	-۴/۲۵	۰/۲۳۵	۱/۲۳۰	۰/۳۵۲
۵/۹	۰/۰۲۱	-۴/۵	۰/۲۲۲	۱/۵۰۴	۰/۲۵۶
۱۲/۳	۰/۰۵۰۷	-۵	۰/۲۰۰	۱/۹۴۵	۰/۱۵۸
۲۱/۶	۰/۰۹۹۰	-۵/۵	۰/۱۸۲	۲/۳۲۵	۰/۱۰۸
۳۴/۱	۰/۱۴۲۲	-۶	۰/۱۶۷	۲/۶۷۳	۰/۰۷۸
۴۹/۸	۰/۱۸۸۱	-۶/۵	۰/۱۵۴	۲/۹۹۸	۰/۰۶۰
۶۷/۲	۰/۲۳۸۳	-۷	۰/۱۴۳	۳/۳۱۰	۰/۰۴۹
۸۱/۶	۰/۳۲۶۰	-۷/۵	۰/۱۳۳	۳/۶۱۰	۰/۰۴۴
۳۴/۱	۰/۱۴۲۲	-۶	۰/۱۶۷	۲/۶۷۳	۰/۰۷۸

۳.۷ معادله حالت کارناهان-استارلینگ^۱

معادله حالت کارناهان-استارلینگ در عین پیچیده‌تر بودن نسبت به معادله حالت وندروالس، به دقیق‌تر بودن نیز شناخته می‌شوند. همان‌طور که قبل‌تر اشاره شد، هر معادله حالت با روابط بین پارامترهای a و b ، دما، فشار و چگالی بحرانی شناخته می‌شود. کارناهان و استارلینگ معادله حالت خود را به صورت زیر ارائه نمودند:

$$P = \rho RT \left\{ \frac{1 + \left(\frac{b\rho}{4}\right) + \left(\frac{b\rho}{4}\right)^2 - \left(\frac{b\rho}{4}\right)^3}{\left(1 - \frac{b\rho}{4}\right)^3} \right\} - a\rho^2 \quad (۴۲-۳)$$

که در این معادله حالت پارامترهای a و b عبارت‌اند از:

$$a = 0.4963 \frac{R^2 T_c^2}{P_c} = 1.3829 \frac{RT_c}{\rho_c} \quad (۴۳-۳)$$

$$b = 0.18727 \frac{RT_c}{P_c} = \frac{0.521776}{\rho_c}$$

همچنین فشار بحرانی به صورت زیر بیان می‌شود:

$$P_c = 0.3589 RT_c \rho_c \quad (۴۴-۳)$$

متغیر RT_c به صورت تقریبی برابر است با:

$$R \approx 1 \Rightarrow RT_c \approx 0.2588 \quad (۴۵-۳)$$

^۱ Carnahan-Starling (C-S) EOS

حال پارامترهای a و b را به صورت تابعی از ρ_0 این گونه می نویسیم:

$$\begin{aligned}\rho_0 &= 1 \\ a &\approx \frac{0.3579}{\ln(2)\rho_0} = 0.51634 \\ b &= \frac{0.521776}{\ln(2)\rho_0} = 0.75276\end{aligned}\quad (3-46)$$

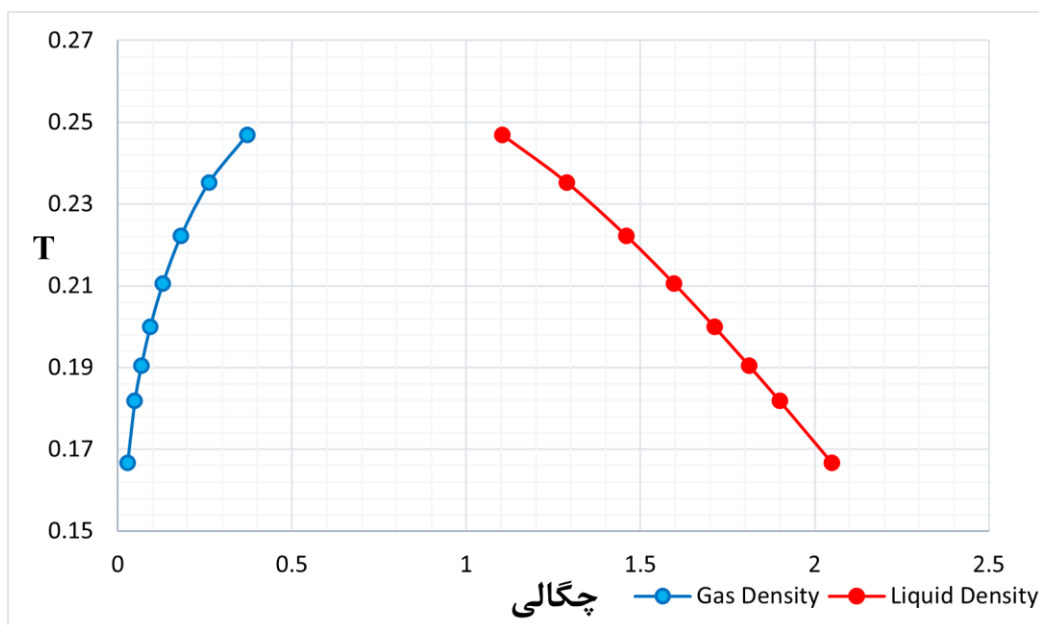
نتایج بررسی کشش سطحی در شبیه سازی قطره معلق با استفاده از معادله حالت کارناهان-

استارلینگ با استفاده از کد نوشته شده و تکرار ۵۰۰۰۰ در جدول ۳-۵ قابل مشاهده می باشند:

جدول ۳-۵ نتایج بدست آمده از آزمون شبیه سازی قطره معلق جهت بدست آوردن کشش سطحی با استفاده از معادله

حالت کارناهان-استارلینگ

نسبت چگالی	کشش سطحی	G	T	چگالی مایع	چگالی گاز
۲/۹۷۱۳	۰/۰۰۷۵	-۴/۰۵	۰/۲۴۶۹	۱/۱۰۴۲	۰/۳۷۱۶
۴/۹۱۹۸	۰/۰۲۰۸	-۴/۲۵	۰/۲۳۵۲۹	۱/۲۸۹	۰/۲۶۲
۸/۰۵۲۹	۰/۰۴۰۶	-۴/۵۰	۰/۲۲۲۲۲	۱/۴۶	۰/۱۸۱۳
۱۲/۳۷۰۲	۰/۰۶۳۷	-۴/۷۵	۰/۲۱۰۵۲	۱/۵۹۷	۰/۱۲۹۱
۱۸/۳۹۲۰	۰/۰۸۵۶	-۵	۰/۲	۱/۷۱۲۳	۰/۰۹۳۱
۲۶/۸۴۴۴	۰/۱۰۷۴	-۵/۲۵	۰/۱۹۰۴۷	۱/۸۱۲	۰/۰۶۷۵
۳۸/۷۷۵۵	۰/۱۲۱۲	-۵/۵	۰/۱۸۱۸۱۸	۱/۹	۰/۰۴۹
۷۳/۶۳۵۰	۰/۱۷۹۱	-۶	۰/۱۶۶۶۶	۲/۰۵	۰/۰۲۷۸۴

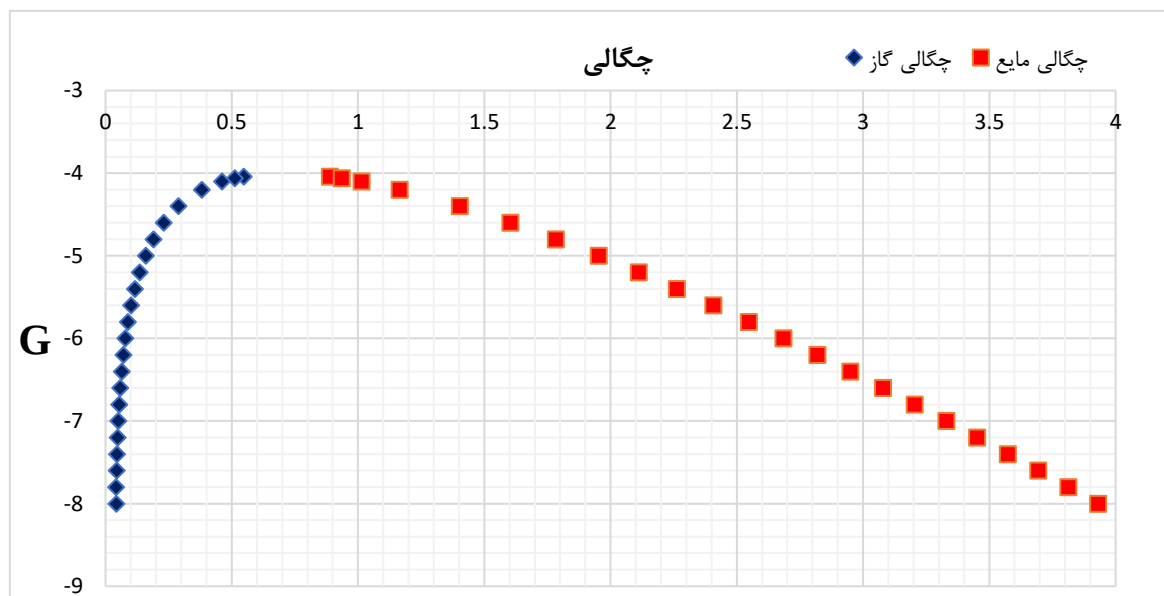


شکل ۳-۲۲ چگالی‌های مایع و گاز در مقدار دمای (T) متفاوت - شبیه‌سازی آزمون قطره معلق با استفاده از معادله حالت

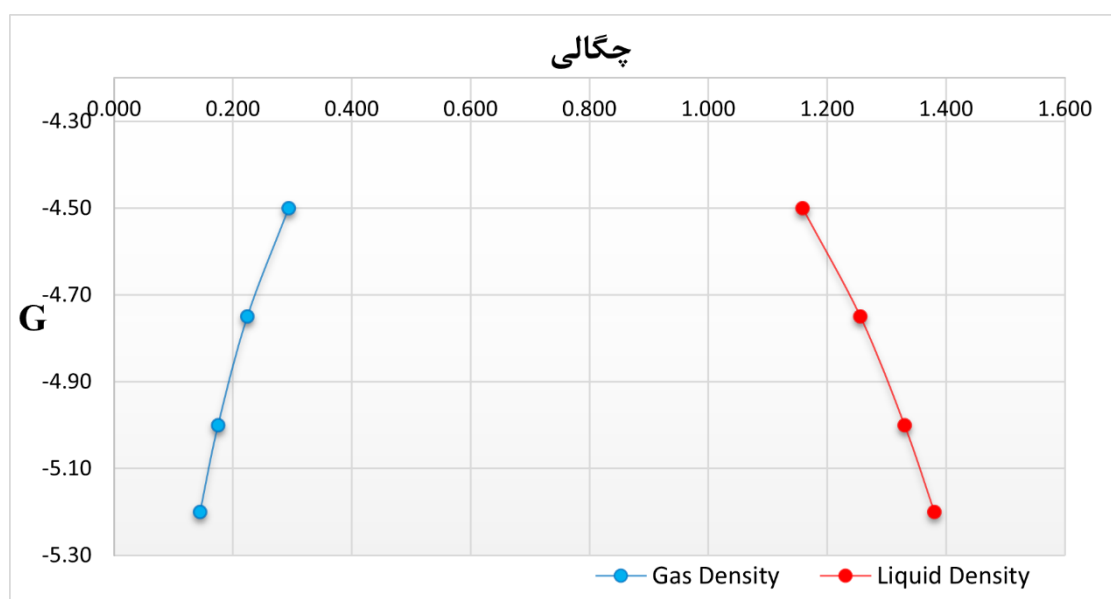
کارناهان-استارلینگ

۳.۸ جمع‌بندی

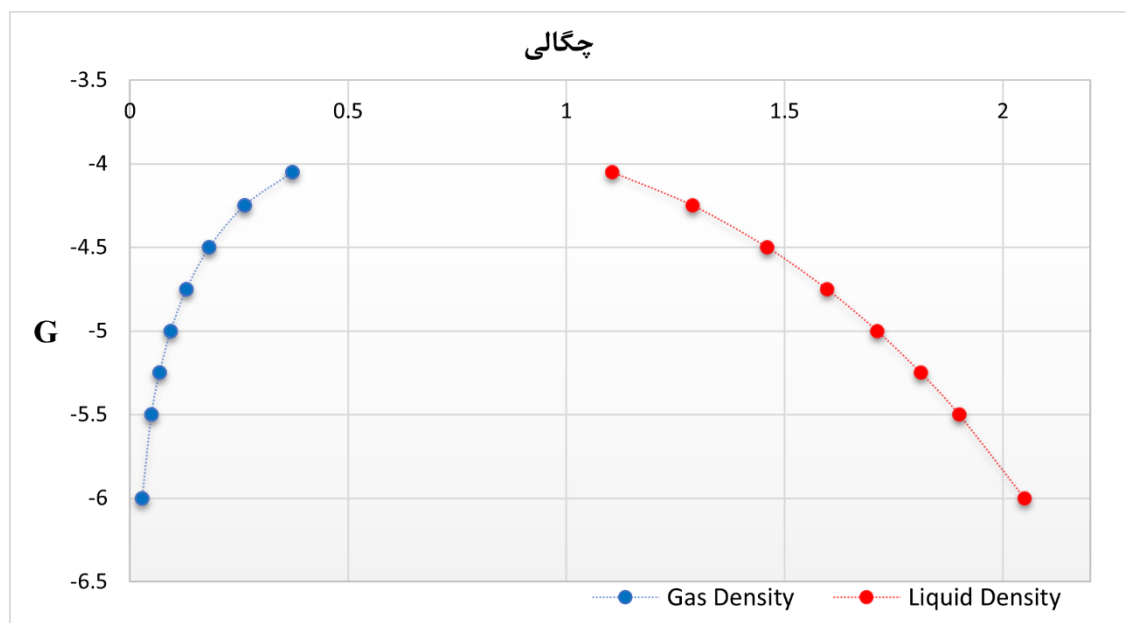
با استفاده از نظریه تئوری ساختار ماکسول، نمودار اختلاف دوفاز برحسب چگالی و پارامتر G برای مدل شان و چن و معادلات حالت وندروالس و کارناهان-استارلینگ در شکل ۳-۲۴ و شکل ۳-۲۵ نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود هر مدل دارای بازه خاصی می‌باشد که مدل شان و چن بازه بزرگ‌تری را در بر می‌گیرد. دلیل این تفاوت می‌تواند به علت تأثیر تابع نمایی در مدل شان و چن می‌باشد. معادله حالت وندروالس به دلیل سادگی بازه کمتری را نسبت به نمودار معادله حالت کارناهان-استارلینگ دارد. معادله حالت کارناهان-استارلینگ به دلیل دقت بالاتر نسبت به دو معادله وندروالس و شان و چن کاربرد وسیع‌تری در صنعت دارد.



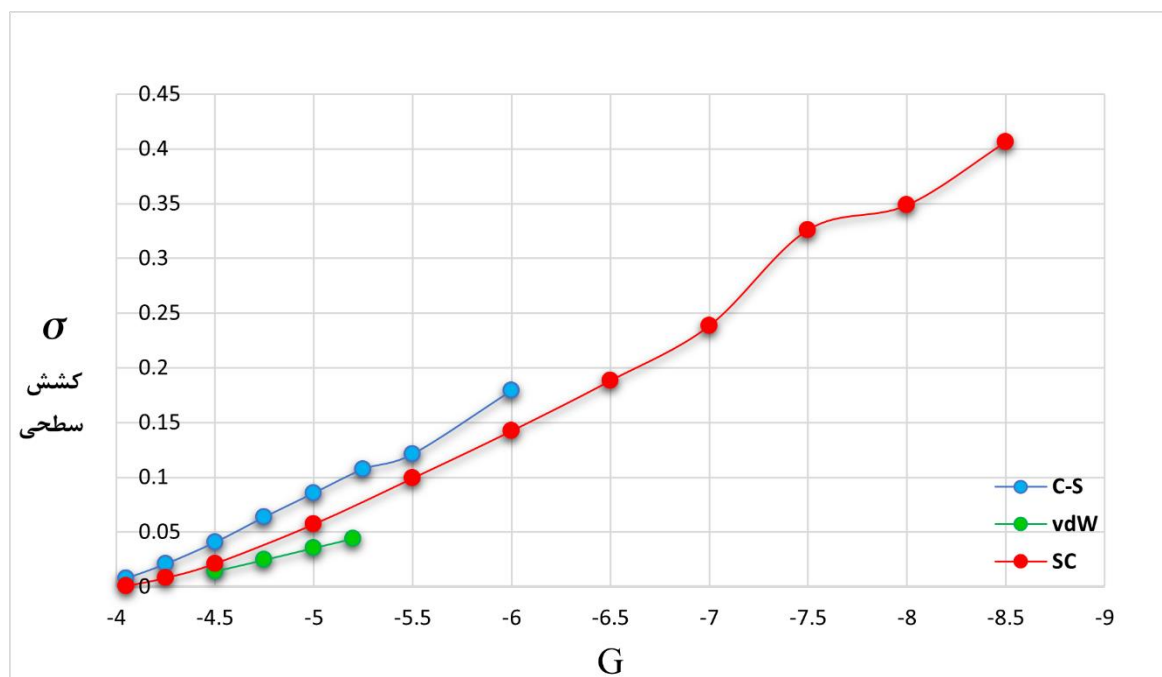
شکل ۳-۲۳ چگالی‌های مایع و گاز در مقدار G معین - شبیه‌سازی آزمون قطره معلق با استفاده از معادله حالت شان وچن



شکل ۳-۲۴ چگالی‌های مایع و گاز در مقدار G معین - شبیه‌سازی آزمون قطره معلق با استفاده از معادله حالت وندروالس



شکل ۳-۲۵ چگالی‌های مایع و گاز در مقدار G متفاوت- شبیه‌سازی آزمون قطره معلق با استفاده از معادله حالت کارناهان-استارلینگ



شکل ۳-۲۶ نمودار تاثیر پارامتر G بر کشش سطحی

در شکل ۳-۲۶ تاثیر تغییرات پارامتر G بر میزان کشش سطحی (σ) نشان داده شده است. همانطور که پیش تر به تفصیل توضیح داده شد، با کاهش مقدار G به دلیل ضخیم شدن مرز بین دو سیال، مقدار کشش سطحی بیشتر می شود. ارتباط خطی برای هر معادلات حالت و کشش سطحی به خوبی مشخص می باشد بطوریکه هرگاه به سمت مقدار بحرانی G حرکت کنیم میزان کشش سطحی به سمت صفر میل خواهد کرد.

با توجه به معادلات حالت و ارزیابی ها ناپایداری انجام شده، در معادله حالت وندروالس برخلاف آن دو معادله دیگر که دلیل ناپایداری در آن ها سرعت های جعلی می باشد، دلیل ناپایداری خود معادله حالت است. بنابراین معادله حالت وندروالس مناسب یک سیستم بخار-مایع که دمای آن خیلی کمتر از دمای بحرانی باشد نمی باشد. با این حال می توانیم با جایگزینی معادلات حالت اصلاح شده واقع گراتر مانند معادله حالت کارناهان-استارلینگ به جای وندروالس، عملکردی بهتر، دامنه دمایی بیشتر، نسبت چگالی های بالاتر و جریان های جعلی کمتری داشته باشیم. علاوه بر این با استفاده از معادله حالت کارناهان-استارلینگ می توانیم تا نسبت چگالی ۱۰۰۰ نیز سیستم پایداری داشته باشیم که البته در این مرحله جریان جعلی مقادیر قابل توجهی دارند. به عنوان مثال اگر مقدار جریان جعلی در شبیه سازی کمتر از ۰/۰۲ باشد در مدل شان و چن نسبت چگالی حدود ۲۵/۶ خواهد بود اما در شبیه سازی با معادله حالت کارناهان-استارلینگ با حفظ این مقدار سرعت جعلی، نسبت چگالی را می توان تا ۱۲۴/۶ بالا برد که حدود ۴/۸۶ برابر مدل شان و چن می باشد.

فصل چهارم

نتیجه‌گیری و پیشنهادها

۴.۱ نتیجه گیری

در این پایان نامه با رویکرد ارزیابی معادلات حالت و بررسی جریان دوفازی به روش شبکه بولتزمن، ابتدا مدل پیشنهادی شان و چن مورد بررسی قرار گرفت و شبیه سازی و ارائه کد بر اساس این روش، به این ناپایداری ها و نقاط قوت و ضعف این روش پرداخته شد. سپس روشهای توسعه این روش با ارائه معادلات حالت جدید مورد بحث و بررسی قرار گرفت و در کنار معادله حالت شان و چن، دو معادله حالت وندروالس و کارناهان-استارلینگ به تفصیل مورد بحث و بررسی قرار گرفت. در نهایت به طور خلاصه نتایج بررسی های صورت گرفته در این پژوهش عبارت اند از:

(۱) در شبیه سازی های انجام شده مبتنی بر روش شان و چن دریافتیم که با افزایش نسبت چگالی جریان های ساختگی افزایش یافته که این امر در افزایش نسبت لزجت نیز صادق می باشد که از ناپایداری های قابل توجه این روش می باشد. همچنین در این شبیه سازی مشاهده کردیم که با مقایسه نتایج دو $G=-5$ و $G=-8$ به این نتیجه می رسیم که با افزایش چگالی نوسانات سطح مشترک کاهش می یابد و سریع تر به حالت دایره ای شکل تعادلی میل پیدا می کند.

(۲) آزمون لاپلاس با شبیه سازی قطره معلق در سیال ساکن انجام شده که با انجام این آزمون دریافتیم که اندازه قطره حتماً باید با پارامتر G متناسب باشد، همچنین از آنجایی که تغییرات اندازه شبکه با مقدار G ثابت در نتایج تأثیر چندانی نداشت انتخاب شبکه 100×100 با تکرار محاسبات حداقل ۱۵۰۰۰ توصیه شد.

(۳) با انجام شبیه سازی و بررسی کشش سطحی نتیجه گرفتیم که کشش سطحی کاملاً به چگالی و پارامتر G وابسته است، بطوریکه در مقادیر کوچک تر G به دلیل ضخیم

شدن مرز بین دو سیال کشش سطحی افزایش می‌یابد و بالعکس در مقادیر بزرگ‌تر G کشش سطحی مقدار کمتری را دارا می‌باشد.

(۴) با بررسی تغییرات چگالی در شبکه 100×100 دریافتیم که با کاهش مقدار G طول قطره کم می‌شود بطوریکه در G های کوچک‌تر به دلیل بیشتر شدن کشش سطحی قطره برجسته‌تر شده و در نتیجه تغییر ناگهانی چگالی را خواهیم داشت در حالی که در مقادیر بزرگ‌تر پارامتر G اندازه قطره بزرگ‌تر است و تغییر چگالی ملایم‌تر صورت می‌پذیرد.

(۵) ثابت کردیم که مدل ارائه‌شده توسط شان و چن توانایی جداسازی فازها را در زیر سطح بحرانی دارا می‌باشد و با انجام محاسبات و ثبت چگالی‌ها در مقادیر متفاوت پارامتر G ، مقادیر بحرانی پارامتر G را مورد ارزیابی قرار دادیم.

(۶) با استفاده از روش پیشنهادی شان و چن و کد نوشته‌شده اثبات کردیم که هرگاه چگالی سطح جامد به چگالی سیال مایع نزدیک‌تر باشد، زاویه تماس کوچک‌تری خواهیم داشت در حالیکه اگر چگالی سطح جامد به سیال گاز نزدیک‌تر باشد زاویه تماس بزرگ‌تری را خواهیم داشت. همچنین به بررسی و مقایسه تغییرات زاویه تماس در مقادیر متفاوت پارامتر G پرداختیم که در نتیجه این بررسی‌ها اثبات شد که در پایدارترین حالت یعنی $G = -6/5$ بیشترین بازه زوایای تماس یعنی از کمتر از 10° درجه تا حدود 170° درجه را در برمی‌گرفت.

(۷) با اثبات تأثیر پارامتر G بر زاویه تماس برای اولین بار با استفاده از داده‌های استخراج‌شده از معادله حالت شان و چن در مقادیر مختلف G و چگالی‌های مختلف

سطح جامد، چهار معادله با ضرایب تعیین ۰/۹۱ و ۰/۹۸ ارائه شد که از این معادلات

برای تعیین زوایای تماس با دقتی بسیار بالا می‌توان بهره برد.

(۸) در بحث بررسی زوایای تماس با اجرای کد نوشته‌شده بر اساس روش شان و چن در

مقادیر G متفاوت زوایای تماس را بررسی کردیم. در این فرآیند هم از طریق روابط

ارائه‌شده و هم از طریق محاسبه شکل قطره، زوایای تماس محاسبه شدند که از نکات

حائز اهمیت این موضوع می‌توان به نزدیک بودن زاویه بدست آمده توسط کد با شکل

ظاهری قطره اشاره کرد.

(۹) با بررسی و شبیه‌سازی قطره مربعی و تبدیل آن به دایره به این نتیجه رسیدیم که

نسبت‌های چگالی تفاوتی در زمان انجام محاسبات ندارد و از موارد مؤثر بر زمان انجام

محاسبات به میزان تکرار سیکل محاسبات، سایز قطره و همچنین اندازه شبکه نام

برد.

(۱۰) در اعمال معادلات حالت مختلف در روش شبه پتانسیل شان چن دریافتیم که

با وجود انعطاف پذیری بیشتر معادلات جدید از نظر تئوری، همچنان در بعد نرم

افزاری و اجرای کد، روش شان و چن از پایداری بهتری برخوردار می‌باشد.

۴.۲ پیشنهادها

برای ادامه و گسترش این پژوهش پیشنهادهای زیر ارائه‌شده است:

- استفاده و اعمال روش‌های نیرویی مختلف جهت بهبود روش‌های ارائه‌شده در نسبت

چگالی‌های بالا برای نسبت لزجت‌های بالاتر.

- بررسی دلیل ناپایداری زاویه تماس در $G=-7$ که در قسمت بررسی زاویه تماس به آن پرداخته شد.
- بهبود کد نوشته شده برای معادلات حالت وندروالس و کارناهان-استارلینگ جهت انعطاف و پایداری بهتر در بازه های بزرگتر پارامتر G و نسبت چگالی های بزرگ تر.

منابع و مراجع

- [1] Chen S., Doolen G. D., (1998), "Lattice boltzmann method for fluid flows", **Annu. Rev. Fluid Mech.**, 30, 1, pp. 329–364.
- [2] Chen L., Kang Q., Mu Y., He Y. L., *et al.*, (2014), "A critical review of the pseudopotential multiphase lattice Boltzmann model: Methods and applications", **Int. J. Heat Mass Transf.**, 76, , pp. 210–236.
- [3] Gunstensen A. K., Rothman D. H., Zaleski S., Zanetti G., (1991), "Lattice Boltzmann model of immiscible fluids", **Phys. Rev. A**, 43, 8, pp. 4320–4327.
- [4] Rothman D. H., Keller J. M., (1988), "Immiscible cellular-automaton fluids", **J. Stat. Phys.**, 52, 3–4, pp. 1119–1127.
- [5] Shan X., Doolen G., (1995), "Multicomponent lattice-Boltzmann model with interparticle interaction", **J. Stat. Phys.**, 81, 1–2, pp. 379–393.
- [6] Shan X., Doolen G., (1996), "Diffusion in a multicomponent lattice Boltzmann equation model", **Phys. Rev. E - Stat. Physics, Plasmas, Fluids, Relat. Interdiscip. Top.**, 54, 4, pp. 3614–3620.
- [7] Chao J., Mei R., Singh R., Shyy W., (2011), "A filter-based, mass-conserving lattice Boltzmann method for immiscible multiphase flows", **Int. J. Numer. Methods Fluids**, 66, 5, pp. 622–647.
- [8] Shan X., Chen H., (1993), "Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components", **Phys. Rev. E**, 47, 3, pp. 1815–1819.
- [9] Shan X., Chen H., (1994), "Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation", **Phys. Rev. E**, 49, 4, pp. 2941–2948.
- [10] Swift M. R., Orlandini E., Osborn W. R., Yeomans J. M., (1996), "Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems", **Phys. Rev. E - Stat. Physics, Plasmas, Fluids, Relat. Interdiscip. Top.**, 54, 5, pp. 5041–5052.

- [11] He X., Shan X., Doolen G. D., (1998), "Discrete Boltzmann equation model for nonideal gases", **Phys. Rev. E - Stat. Physics, Plasmas, Fluids, Relat. Interdiscip. Top.**, 57, 1, pp. R13–R16.
- [12] Hou S., Shan X., Zou Q., Doolen G. D., *et al.*, (1997), "Evaluation of two lattice Boltzmann models for multiphase flows", **J. Comput. Phys.**, 138, 2, pp. 695–713.
- [13] Guo Z., Zheng C., Shi B., (2002), "Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method", **Phys. Rev. E - Stat. Physics, Plasmas, Fluids, Relat. Interdiscip. Top.**, 65, 4, p. 6.
- [14] Yuan P., Schaefer L., (2006), "Equations of state in a lattice Boltzmann model", **Phys. Fluids**, 18, 4, p. 42101.
- [15] Shan X., (2006), "Analysis and reduction of the spurious current in a class of multiphase lattice Boltzmann models", **Phys. Rev. E - Stat. Nonlinear, Soft Matter Phys.**, 73, 4, p. 47701.
- [16] Sbragaglia M., Benzi R., Biferale L., Succi S., *et al.*, (2007), "Generalized lattice Boltzmann method with multirange pseudopotential", **Phys. Rev. E - Stat. Nonlinear, Soft Matter Phys.**, 75, 2, p. 26702.
- [17] Kupershtokh A. L., Medvedev D. A., Karpov D. I., (2009), "On equations of state in a lattice Boltzmann method", **Comput. Math. with Appl.**, 58, 5, pp. 965–974.
- [18] Li Q., Luo K. H., Li X. J., (2012), "Forcing scheme in pseudopotential lattice Boltzmann model for multiphase flows", **Phys. Rev. E - Stat. Nonlinear, Soft Matter Phys.**, 86, 1, p. 16709.
- [19] Hu A., Li L., Uddin R., (2015), "Force method in a pseudo-potential lattice Boltzmann model", **J. Comput. Phys.**, 294, , pp. 78–89.
- [20] Khajepour S., Wen J., Chen B., (2015), "Multipseudopotential interaction: A solution for thermodynamic inconsistency in pseudopotential lattice Boltzmann models", **Phys. Rev. E - Stat. Nonlinear, Soft Matter Phys.**, 91, 2, p. 23301.
- [21] Lycett-Brown D., Luo K. H., (2015), "Improved forcing scheme in pseudopotential lattice Boltzmann methods for multiphase flow at arbitrarily high density ratios",

- Phys. Rev. E - Stat. Nonlinear, Soft Matter Phys.**, 91, 2, p. 23305.
- [22] Baakeem S. S., Bawazeer S. A., Mohamad A. A., (2020), "Comparison and evaluation of Shan–Chen model and most commonly used equations of state in multiphase lattice Boltzmann method", **Int. J. Multiph. Flow**, 128, , p. 103290.
- [23] زرارہ ا، (۱۳۹۳)، "مدل شبه پتانسیل اصلاح شده شبکه بولتزمن برای شبیه سازی جریان تک جزئی-دوفازی، پایان نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه کاشان.
- [24] خاتون آبادی م، (۱۳۹۳)، "شبیه سازی جریان های چند فازی با نسبت چگالی بالا به روش شبکه بولتزمن"، پایان نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه صنعتی اصفهان.
- [25] صالح آبادی ح، (۱۳۹۲)، "بررسی نفوذ و پیمایش قطره و لایه نازک مایع داخل محیط متخلخل"، پایان نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه صنعتی شاهرود.
- [26] عزیزی ف، (۱۳۹۳)، "مدل سازی عددی تغییر شکل قطره غیر نیوتونی در کانال میکرو"، پایان نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه صنعتی شاهرود.
- [27] محمدزاده ه، (۱۳۹۵)، "بررسی دوفازی تشکیل و جدایش جت سیال"، پایان نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه صنعتی شاهرود.
- [28] ضرغامی ا، (۱۳۹۱)، "شبیه سازی نانو سیالات با استفاده از روش بولتزمن"، پایان نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه صنعتی شاهرود.
- [29] Avraam D. G., Payatakes A. C., (1995), "Generalized relative permeability coefficients during steady-state two-phase flow in porous media, and correlation with the flow mechanisms", **Transp. Porous Media**, 20, 1–2, pp. 135–168.
- [30] He X., Doolen G. D., (2002), "Thermodynamic foundations of kinetic theory and Lattice Boltzmann models for multiphase flows", **J. Stat. Phys.**, 107, 1–2, pp. 309–328.
- [31] Succi S., Sbragaglia M., Ubertini S., (2010), "**Lattice Boltzmann Method**", 5, 5, Springer.

- [32] Cercignani C., (1972), "On the boltzmann equation for rigid spheres", **Transp. Theory Stat. Phys.**, 2, 3, pp. 211–225.
- [33] Boltzmann L., (2013), "**Über die Beziehung zwischen dem zweiten Hauptsatze der mechanischen Wärmetheorie und der Wahrscheinlichkeitsrechnung resp. den Sätzen über das Wärmegleichgewicht**", Wien: Kk Hof-und Staatsdruckerei.
- [34] Clift R., Grace J. R., Weber M. E., (2005), "**Bubbles, drops, and particles**", Courier Corporation.
- [35] Dadvand A., Mirzaee I., Shayan E., Fadayee N., (2008), "Numerical Simulation of Incompressible Viscous Flows using a Mesh-Free Lattice Boltzmann Method", 07th Conference of Iranian Aerospace Society.
- [36] Hardy J., De Pazzis O., Pomeau Y., (1976), "Molecular dynamics of a classical lattice gas: Transport properties and time correlation functions", **Phys. Rev. A**, 13, 5, pp. 1949–1961.
- [37] McNamara G., Zanetti G., (1988), "Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata", **Phys. Rev. Lett.**
- [38] Sukop M., (2006), "DT Thorne, Jr. Lattice Boltzmann Modeling Lattice Boltzmann Modeling".
- [39] Komrakova A. E., Shardt O., Eskin D., Derksen J. J., (2014), "Lattice Boltzmann simulations of drop deformation and breakup in shear flow", **Int. J. Multiph. Flow**, 59, , pp. 24–43.
- [40] Bhatnagar P. L., Gross E. P., Krook M., (1954), "A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems", **Phys. Rev.**, 94, 3, pp. 511–525.
- [41] Huang H., Sukop M. C., Lu X. Y., (2015), "**Multiphase Lattice Boltzmann Methods: Theory and Application**", Wiley Blackwell.
- [42] Sbragaglia M., Chen H., Shan X., Succi S., (2009), "Continuum free-energy formulation for a class of lattice Boltzmann multiphase models", **Epl**, 86, 2, p. 24005.
- [43] Falcucci G., Ubertini S., Succi S., (2010), "Lattice Boltzmann simulations of phase-

- separating flows at large density ratios: The case of doubly-attractive pseudo-potentials", **Soft Matter**, 6, 18, pp. 4357–4365.
- [44] Kuzmin A., (2009), "**Multiphase simulations with lattice Boltzmann scheme**", 85, 9 Suppl, CALGARY, ALBERTA.
- [45] Bao J., (2010), "**High Density Ratio Multi-Component Lattice Boltzmann Flow Model for Fluid Dynamics and Cuda Parallel Computation**", University of Pittsburgh.
- [46] Li Q., Luo K. H., Li X. J., (2013), "Lattice Boltzmann modeling of multiphase flows at large density ratio with an improved pseudopotential model", **Phys. Rev. E - Stat. Nonlinear, Soft Matter Phys.**, 87, 5, p. 53301.
- [47] Zou Q., He X., (1997), "On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model", **Phys. Fluids**, 9, 6, pp. 1591–1596.
- [48] Rannou G., (2008), "**Lattice-Boltzmann method and immiscible two-phase flow**", December, Georgia Institute of Technology.
- [49] Krüger T., Kusumaatmaja H., Kuzmin A., Shardt O., *et al.*, (2017), "**The lattice Boltzmann method**", 10, 978–3, CALGARY: Springer.
- [50] Mohamad A. A., (2019), "**Nonisothermal Incompressible Fluid Flow**", Lattice Boltzmann Method.
- [51] Ahmed T., (2013), "**Equations of state and PVT analysis**", Houston: Elsevier.
- [52] Zhang J., Tian F., (2008), "A bottom-up approach to non-ideal fluids in the lattice Boltzmann method", **Epl**, 81, 6, p. 66005.
- [53] Redlich O., Kwong J. N. S., (1949), "On the thermodynamics of solutions. V. An equation of state. Fugacities of gaseous solutions", **Chem. Rev.**, 44, 1, pp. 233–244.
- [54] Peng D. Y., Robinson D. B., (1976), "A New Two-Constant Equation of State", **Ind. Eng. Chem. Fundam.**, 15, 1, pp. 59–64.
- [55] Carnahan N. F., Starling K. E., (1969), "Equation of state for nonattracting rigid spheres", **J. Chem. Phys.**, 51, 2, pp. 635–636.

- [56] Carnahan N. F., Starling K. E., (1972), "Intermolecular repulsions and the equation of state for fluids", **AIChE J.**, 18, 6, pp. 1184–1189.
- [57] Yu Z., Fan L.-S., (2010), "Multirelaxation-time interaction-potential-based lattice Boltzmann model for two-phase flow", **Phys. Rev. E**, 82, 4, p. 046708.
- [58] Rahmani A., Ashrafizaade M., Rahmati A., Meysam S., (2014), "ICHMT2014-HN10102230187 Evaluation of Shan-Chen lattice Boltzmann model ability on simulation of multiphase and multicomponent flows", Conf.Semnan.Ac.Ir, 19, September.
- [59] Benzi R., Biferale L., Sbragaglia M., Succi S., *et al.*, (2006), "Mesoscopic modeling of a two-phase flow in the presence of boundaries: The contact angle", **Phys. Rev. E - Stat. Nonlinear, Soft Matter Phys.**, 74, 2, p. 21509.
- [60] Moradi B., Ghasemi S., Hosseini Moghadam A., Rasaei M. R., *et al.*, (2021), "Dynamic behavior investigation of capillary rising at various dominant forces using free energy lattice Boltzmann method", **Meccanica**, 56, 12, pp. 2961–2977.
- [61] Lu G., Wang X. D., Duan Y. Y., (2013), "Study on initial stage of capillary rise dynamics", **Colloids Surfaces A Physicochem. Eng. Asp.**, 433, , pp. 95–103.

پیوست ۱: کد شبکه بولتزمن شان و چن

```
function LBMD2Q9
%Start main function#####
%Revised 2021-08-25
%      C7 C3 C6
%      \ | /
%      C4-C1-C2
%      / | \
%      C8 C5 C9
clc
clear;
close all
Ny=100;
Nx=100;

TotalIteration=5000;%All time steps
IterationIn=5000;%dividing all time steps to IterationIn

DensityGas=0.056;
DensityOil=2.659;
GCohGasOil=-8;%fluid-fluid interation
Tau=1;
DissolvedDensity=0.01;
Squarelength=60;%Size of square droplet in the chamber
IterationOut=round(TotalIteration/IterationIn);%outter loop
Omega = 1./Tau; % Relaxation parameter for fluid 1,
T=1/omega,niu=1/3*(T-1/2),miu=rho*niu
Cs=1/((3)^0.5);% Cs=c/(3)^0.5 , c=1
Q=9;
cx=[0, 1, 0, -1, 0, 1, -1, -1, 1];
cy=[0, 0, 1, 0, -1, 1, 1, -1, -1];
w=[4/9,1/9,1/9,1/9,1/9,1/9,1/36,1/36,1/36,1/36];

isSolidNode=zeros (Ny,Nx) ;
%Create Solid Pattern
for j=1:Ny
    for i=1:Nx
        if ( j==1 || j==Ny)
            % isSolidNode(j,i)=1;
        end
    end
end
%% Initialization-----

%Determine Saturation
Density=zeros (Ny,Nx) ;
for j=1:Ny
    for i=1:Nx
```

```

    if ( (i>=(Nx/2)-(Squarelength/2)) && i<=((Nx/2)+(Squarelength/2)) &&
(j>=(Ny/2)-(Squarelength/2)) && j<=((Ny/2)+(Squarelength/2)) )
        Density(j,i)=DensityOil;
    else
        Density(j,i)=DensityGas;
    end
end
end

vEquiX=zeros(Ny,Nx);
vEquiY=zeros(Ny,Nx);

[fIn]=fEq(vEquiX,vEquiY,cx,cy,w,Density,Ny,Nx,Q,isSolidNode);
[Density,Pressure,Psi,vEquiX,vEquiY,Vx,Vy,Velocity]=DensityVelocity(fIn,
GCohGasOil,cx,cy,Ny,Nx,Q,isSolidNode);
plotVariables(Density,Velocity,Pressure,1,Ny,Nx)
%% Time marching process start-----

for OutIteration=1:IterationOut
for InIteration=1:IterationIn

[vEquiX,vEquiY]=FluidSolidIntraction(Density,DissolvedDensity,Psi,vEquiX,
vEquiY,GCohGasOil,Omega,cx,cy,w,Ny,Nx,Q,isSolidNode);

[fPC]=fPostC(vEquiX,vEquiY,cx,cy,w,Density,Ny,Nx,Q,isSolidNode,fIn,Omega
);

[fIn]=streamingandBC(fPC,cx,cy,Ny,Nx,Q,isSolidNode,Density,w,DensityGas,
DensityOil,DissolvedDensity,Cs);

[Density,Pressure,Psi,vEquiX,vEquiY,Vx,Vy,Velocity]=DensityVelocity(fIn,
GCohGasOil,cx,cy,Ny,Nx,Q,isSolidNode);
end
    Progress=round(100*OutIteration/IterationOut);
    plotVariables(Density,Velocity,Pressure,Progress,Ny,Nx);
end

end%=====
%#####

%% functions
% function in the main code by order
function
[fEqu]=fEq(vEquiX,vEquiY,cx,cy,w,Density,Ny,Nx,Q,isSolidNode)%fEq-----
-----
    fEqu=zeros(Ny,Nx);
for j=1:Ny
    for i=1:Nx
        if isSolidNode(j,i)==0

            vEqui=(vEquiX(j,i).^2+vEquiY(j,i).^2);

            for k=1:Q
                cuVeq= (cx(k)*vEquiX(j,i)+cy(k)*vEquiY(j,i));% cs=c/(3)^0.5 , c=1
                fEqu(j,i,k)= Density(j,i) * w(k) * ...
                    ( 1 + 3*cuVeq + (9/2)*(cuVeq.^2) - 1.5*vEqui);
            end
        end
    end
end

```

```

        end
    end
end
end%=====

function [Density,Pressure,
Psi,vEquiX,vEquiY,Vx,Vy,Velocity]=DensityVelocity(fIn,GCohGasOil,cx,cy,N
y,Nx,Q,isSolidNode)%Calculating Density and Velocity-----
Density=zeros(Ny,Nx);
Velocity=zeros(Ny,Nx);
Pressure=zeros(Ny,Nx);
Psi=zeros(Ny,Nx);
Vx=zeros(Ny,Nx);
Vy=zeros(Ny,Nx);
vEquiX=zeros(Ny,Nx);
vEquiY=zeros(Ny,Nx);

for j=1:Ny
    for i=1:Nx
        if isSolidNode(j,i)==0
            for k=1:Q%calculate rho1 & rho2 in any lattice
                Density(j,i)=Density(j,i)+fIn(j,i,k);
            end
            Psi(j,i)=1-exp(-Density(j,i));

            Pressure(j,i)=(1.0/3)*(Density(j,i))+(1./6.)*GCohGasOil*Psi(j,i)*Psi(j,i
            );

            for k=1:Q%calculate Vx & Vy in any lattice
                Vx(j,i)=Vx(j,i)+((fIn(j,i,k)*cx(k))/1);
                Vy(j,i)=Vy(j,i)+((fIn(j,i,k)*cy(k))/1);
            end

            if (Density(j,i)>=0)
                %calculate V'x & V'y in any lattice
                vEquiX(j,i) = (Vx(j,i)) / (Density(j,i));
                vEquiY(j,i) = (Vy(j,i)) / (Density(j,i));
            else
                vEquiX(j,i) = 0;
                vEquiY(j,i) = 0;
            end

            %calculate Velocity in any lattice
            Velocity(j,i)=sqrt((Vx(j,i)*Vx(j,i))+(Vy(j,i)*Vy(j,i)));
            else% if it is solid node: plot black
                Density(j,i)=-0.05;
            end

        end
    end
end
end%=====

function plotVariables(Density,Velocity,Pressure,Progress,Ny,Nx)%plotting
variables
Radius=zeros(Ny,Nx);
meanRhoW=mean(mean(Density));
maxRhoW=max(max(Density));

```

```

minRhoW=min(min(Density));
radius=sqrt((meanRhoW*Nx*Nx-minRhoW*Nx*Nx)/(pi*maxRhoW-pi*minRhoW));
for j=1:Ny
    for i=1:Nx
        Radius(j,i)=sqrt((i-(Nx/2))^2+(j-(Ny/2))^2);
    end
end

figure%if you want to have all image, active this line
fig = gcf; % current figure handle
fig.Name=(['ShanChen-D2Q9-LBM, Progress= ',num2str(Progress)]);
fig.NumberTitle='off';
set(fig,'Units','normalized','Position',[0,0,1,1]);
cm=colormap; cm=flipud(cm); colormap(cm);
subplot(2,2,1);
imagesc(Density);grid on;grid minor;
S = whos('Density');
title(['Plotting of ',S.name]);
set(gca,'YDir','Normal')
colorbar
myColorMap = colormap;
colormap(myColorMap);
axis equal on;
xlim([1 Nx])
ylim([1 Ny])

subplot(2,2,2);
imagesc(Pressure);grid on;grid minor;
S = whos('Pressure');
DeltaPresuure=Pressure(Ny/2,Nx/2)-Pressure(Ny-2,Nx-2);
title(['Plotting of ',S.name,', Pressure in-
out=',num2str(DeltaPresuure)]);
set(gca,'YDir','Normal')
colorbar
myColorMap = colormap;
colormap(myColorMap);
axis equal on;
xlim([1 Nx])
ylim([1 Ny])

subplot(2,2,3);
imagesc(Velocity);grid on;grid minor;
S = whos('Velocity');
title(['Plotting of ',S.name]);
set(gca,'YDir','Normal')
colorbar
myColorMap = colormap;
colormap(myColorMap);
axis equal on;
xlim([1 Nx])
ylim([1 Ny])

subplot(2,2,4);
plot(Radius,Density,'. b');
grid on;grid minor;
title(['Density Profile from the center to the corner, Radius by
Formula=',num2str(radius)]);

```

```

xlabel('Radius');ylabel('Density');
set(gca,'YDir','Normal')
xlim([1 Nx])

pause(0.5)
end

function
[vEquiX,vEquiY]=FluidSolidInteraction(Density,DissolvedDensity,Psi,vEquiX
,vEquiY,GCohGasOil,Omega,cx,cy,w,Ny,Nx,Q,isSolidNode)

for j=1:Ny
for i=1:Nx

    %Force of other fluids on the node by neighbourhood lattice
    rhoContributionx = 0;
    rhoContributiony = 0;

for k=2:Q

% Fluid-Fluid intraction in Boundaries.
tempj=j;tempi=i;

if (i+cx(k)==0 && j+cy(k)>=1 && j+cy(k)<=Ny)% left wall
tempj=j;tempi=Nx+1; end
if (i+cx(k)==Nx+1 && j+cy(k)>=1 && j+cy(k)<=Ny)% right wall
tempj=j;tempi=0; end
if (j+cy(k)==0 && i+cx(k)>=1 && i+cx(k)<=Nx)% bottom wall
tempj=Ny+1;tempi=i; end
if (j+cy(k)==Ny+1 && i+cx(k)>=1 && i+cx(k)<=Nx)% top wall
tempj=0;tempi=i; end

if (i+cx(k)==0 && j+cy(k)==Ny+1)% left top corner
tempj=0;tempi=Nx+1; end
if (i+cx(k)==Nx+1 && j+cy(k)==0)% right bottom corner
tempj=Ny+1;tempi=0; end
if (i+cx(k)==0 && j+cy(k)==0)% left bottom corner
tempj=Ny+1;tempi=Nx+1; end
if (i+cx(k)==Nx+1 && j+cy(k)==Ny+1)% right top corner
tempj=0;tempi=0; end

% fluid-fluid condition-----
rhoContributionx=rhoContributionx-
Psi(j,i)*(GCohGasOil*Psi(tempj+cy(k),tempi+cx(k))*w(k)*cx(k));% fluid-
fluid intraction
rhoContributiony=rhoContributiony-
Psi(j,i)*(GCohGasOil*Psi(tempj+cy(k),tempi+cx(k))*w(k)*cy(k));% fluid-
fluid intraction

end% End of k=2:Q

%Equivalent Velocity

if(Density(j,i)>DissolvedDensity)

```

```

    vEquiX(j,i) =
vEquiX(j,i)+(1/Omega)*(rhoContributionx)/Density(j,i); %POTENTIAL
CONTRIBUTION OF FLUID 2 ON Node+Gravity Force
    vEquiY(j,i) = vEquiY(j,i)+(1/Omega)*(rhoContributiony)/Density(j,i);
    else
    vEquiX(j,i) = vEquiX(j,i);
    vEquiY(j,i) = vEquiY(j,i);
    end

end
end
end%=====

function
[fPostC]=fPostC(vEquiX,vEquiY,cx,cy,w,Density,Ny,Nx,Q,isSolidNode,fIn,Ome
ega)%Collbgk---
fPostC=zeros(Ny,Nx,Q);
    for j=1:Ny
        for i=1:Nx;
            if isSolidNode(j,i)==0
                vEqui=(vEquiX(j,i).^2+vEquiY(j,i).^2);

                for k=1:Q
                    cuVeq= (cx(k)*vEquiX(j,i)+cy(k)*vEquiY(j,i));% cs=c/(3)^0.5 , c=1

                    fEqu= Density(j,i) * w(k) * ...
                        ( 1 + 3*cuVeq + (9/2)*(cuVeq.^2) - 1.5*vEqui);

                    fPostC(j,i,k) = fIn(j,i,k) - Omega * (fIn(j,i,k)-fEqu);

                end
            end
        end
    end
end%=====

function
[fIn]=streamingandBC(fPostC,cx,cy,Ny,Nx,Q,isSolidNode,Density,w,DensityG
as,DensityOil,DissolvedDensity,Cs)%Streaming-----
fIn=zeros(Ny,Nx,Q);
    for j=1:Ny
        for i=1:Nx;
            if isSolidNode(j,i)==0
                for k=1:Q

                    if (i-cx(k)>=1 && i-cx(k)<=Nx && j-cy(k)>=1 && j-cy(k)<=Ny)
                        %*****
                    if (isSolidNode(j-cy(k),i-cx(k))==0) % no walls condition

                        fIn(j,i,k)=fPostC(j-cy(k),i-cx(k),k);

                    end
                    %*****
                    if isSolidNode(j-cy(k),i-cx(k))==1 % Walls condition and half way bounce
                        back
                    switch k
                        case {2, 3, 6, 7}

```

```

        fIn(j,i,k)=fPostC(j,i,k+2);

        case {4, 5, 8, 9}
            fIn(j,i,k)=fPostC(j,i,k-2);
        end
    end
end
%*****
end %if (i-cx(k)>=1 && i-cx(k)<=Nx && j-cy(k)>=1 && j-cy(k)<=Ny)

%Periodic boundary condition
if (i==1)%Left wall
    fIn(j,i,2)=fPostC(j,Nx,2);
    if (j<Ny && j>=1)
        fIn(j+1,i,6)=fPostC(j, Nx,6);
        fIn(j,i,9)=fPostC(j+1,Nx,9);
    end
end

if (i==Nx)%Right wall
    fIn(j,Nx,4)=fPostC(j,1,4);
    if (j<Ny && j>=1)
        fIn(j+1,Nx,7)=fPostC(j,1,7);
        fIn(j,Nx,8)=fPostC(j+1,1,8);
    end
end

if (j==1)%Bottom wall
    fIn(1,i,3)=fPostC(Ny,i,3);
    if (i<Nx && i>=1)
        fIn(1,i+1,6)=fPostC(Ny,i,6);
        fIn(1,i,7)=fPostC(Ny,i+1,7);
    end
end

if (j==Ny)%Top wall
    fIn(Ny,i,5)=fPostC(1,i,5);
    if (i<Nx && i>=1)
        fIn(Ny,i+1,9)=fPostC(1,i,9);
        fIn(Ny,i,8)=fPostC(1,i+1,8);
    end
end

end%end of k=1:Q
end
end%end of i
end%end of j

%Corner node related to periodic boundary condition
fIn(1,1,6)=fPostC(Ny,Nx,6);
fIn(Ny,Nx,8)=fPostC(1,1,8);
fIn(1,Nx,7)=fPostC(Ny,1,7);
fIn(Ny,1,9)=fPostC(1,Nx,9);
end%=====

```


Abstract

The lattice Boltzmann method (LBM) has gained increasing popularity among the most favorable numerical methods for simulating fluid flow in complex geometries. This method is used not only for single-phase simulations but also for multi-phase / multi-component simulations with a high-density ratio. However, it also has some limitations, so we must recognize and evaluate these limitations to have the highest efficiency. This study aimed to investigate droplet behavior and assess and identify instabilities of the pseudo-potential LBM model that can be used as a benchmark for future studies. Accordingly, spurious currents, thermodynamic inconsistency, parameters dependency, surface tension, two-phase diagram, and wettability were evaluated and examined. In this way, for the first time, four new equations were obtained to determine the contact angle with a maximum determination coefficient of 0.99. In addition, droplet behaviors analysis at different contact angles and interfacial tensions showed splitting of the droplet to lower volume in high interfacial tension and high adhesive force, which to the best of our knowledge was not reported yet and the theory needs more investigations and recommended for future studies. Moreover, we evaluated two kinds of equations of state and their properties. Besides, we investigated the instabilities, advantages, and disadvantages of the Van der Waals and Carnahan-Starling method. Then the fluid-solid interactions are presented and schemes to obtain different contact angles are discussed. Consequently, the contact angles and surface tension have been evaluated by these equations of state.

Keywords: Shan and Chen, Pseudopotential, Lattice Boltzmann Method (LBM), Two-phase Fluid flow, Instability Analysis.



Shahrood University of
Technology

Faculty of Mining, Petroleum and Geophysics Engineering

M.Sc. Thesis in Petroleum Engineering-Exploration

Equations of State and Evaluation of Two-Phase Fluid Flow Simulations by Lattice Boltzmann Method

By:

Seyed Mohammad Javad Seyed Sabour

Supervisor:

Dr. Yousef Shiri

March-2022