



روشی جدید برای دست‌یابی به نسبت چگالی‌های بالا و لزجت‌های کم بر پایه مدل دوفاز شان و چن در شبکه بولتزمن

سروش فلاح خارمیانی¹، محمد پسندیده‌فرد^{2*}

1- دانش آموخته، کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

2- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

*مشهد، صندوق پستی 9177948944، mpfard@um.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 14 خرداد 1396

پذیرش: 07 مرداد 1396

ارائه در سایت: 17 شهریور 1396

کلید واژگان:

شبکه بولتزمن

شان و چن

نسبت چگالی بالا

لزجت‌های کم

چکیده

در این مقاله یک روش جدید برای دست‌یابی به نسبت چگالی‌های بالا و لزجت‌های کم بر پایه مدل دوفاز شان و چن در روش شبکه بولتزمن ارائه می‌شود. در این روش جدید نیروی برهم‌کنش و به دنبال آن تانسور فشار به صورت هدفمند اصلاح می‌شود، به طوری که امکان تنظیم چگالی فازها برای تطابق با مقادیر متناظر ترمودینامیکی حاصل از قانون مساحت‌های برابر ماکسول فراهم می‌شود. این موضوع سبب افزایش قابل ملاحظه پایداری و در نتیجه دست‌یابی به اهداف یادشده می‌شود. از مزایای این روش سادگی و یکسان بودن روند به کارگیری آن در مسائل دو و سه بعدی با استفاده از توابع برخورد یک زمانه یا چند زمانه است. به منظور اعتبارسنجی این روش ابتدا تطابق مقادیر چگالی فازها در دماهای زیر بحرانی مختلف با مقادیر متناظر حاصل از قانون ماکسول نشان داده می‌شود، سپس صحت قانون لاپلاس برای قطره بررسی می‌گردد، در ادامه مقدار سرعت‌های ساختگی پیرامون سطح منحنی قطره بررسی شده و در نهایت مسأله شکستن سد مایع شبیه‌سازی و نتایج آن با داده‌های آزمایشگاهی مقایسه می‌شود. نتایج نشان از پایداری بالا و توانایی مدل بهبود داده شده برای شبیه‌سازی مسائل مختلف جریان دوفاز در محدوده وسیعی از نسبت چگالی و لزجت دارد.

A new method to reach high-density ratios and low viscosities based on the Shan-Chen multiphase model in lattice Boltzmann method

Soroush Fallah Kharמיانی, Mohammad Passandideh Fard*

Department of Mechanical Engineering, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad, Iran.

* P.O.B. 9177948944 Mashhad, Iran, mpfard@um.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper

Received 04 June 2017

Accepted 29 July 2017

Available Online 08 September 2017

Keywords:

Lattice Boltzmann

Shan-Chen

High density ratio

Low viscosity

ABSTRACT

In this paper, a new method is proposed to reach high density ratios and low viscosities based on the Shan-Chen multiphase model in the lattice Boltzmann Method. In this new method the interaction force and as a result the pressure tensor is modified purposefully so that the density of the phases can be adjusted to coincide with the corresponding values from the Maxwell equal area rule in thermodynamics. This leads to higher stability and therefore the mentioned purposes are achieved. This new method takes advantage of simplicity and the same implementing procedure in 2D and 3D problems with single or multi relaxation time collision operators. In order to validate the new method, first the coexistence densities of the phases at different subcritical temperatures are compared with those of the Maxwell rule, then the validity of the Laplace law for a droplet is evaluated, after that the spurious velocities around the droplet are evaluated, and finally the broken dam problem is simulated and its results are compared with an experimental data. Results show that the developed model is suitably stable and is capable of simulating different multiphase flows at a wide range of density ratios and viscosities.

1- مقدمه

استفاده از روش اختلاف محدود¹ و حجم محدود² برای گسسته‌سازی و حل معادلات ناویر-استوکس بوده است. البته حل این معادلات آسان نبوده و با مشکلاتی مانند وابسته بودن متغیرها به یکدیگر، غیرخطی بودن جمله جابجایی و نحوه به دست آوردن فشار همراه است، همچنین از آن‌جا که تشکیل سطح مشترک پدیده‌ای در مقیاس‌های کوچک و مولکولی است، روش‌های ماکروسکوپیک یادشده قادر به بیان فیزیک و بنیان تشکیل آن

در سال‌های اخیر روش شبکه بولتزمن به یک ابزار قدرتمند و بهینه برای شبیه‌سازی جریان سیال به ویژه جریان‌های پیچیده تبدیل شده است که از آن جمله می‌توان به جریان درهم، جریان در هندسه‌های پیچیده یک محیط متخلخل و جریان دوفاز اشاره کرد [2,1].

شبیه‌سازی جریان‌های دوفاز به دلیل پیچیدگی و کاربردهای فراوانی که در صنعت دارد، همواره مورد توجه بوده است. روش‌های رایج برای شبیه‌سازی این جریان‌ها تا پیش از گسترش مدل‌های دوفاز در شبکه بولتزمن بیشتر

¹ Finite difference method

² Finite volume method

Please cite this article using:

S. Fallah Kharמיانی, M. Passandideh Fard, A new method to reach high-density ratios and low viscosities based on the Shan-Chen multiphase model in lattice Boltzmann method, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 17, No. 9, pp. 145-152, 2017 (in Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

نیستند [3,1]. به همین دلیل روش‌های مختلفی مانند روش نشانگر و سلول¹ [4]، حجم سیال² [5] و سطح مینا³ [6] برای ردیابی و بازسازی موقعیت سطح مشترک به کمک الگوریتم‌های ریاضی ارائه شده است. به کارگیری این روش‌ها در کنار حل معادلات ناویر-استوکس بدون شک سبب افزایش قابل توجه هزینه محاسباتی و پیچیدگی شبیه‌سازی به ویژه در مختصات سه‌بعدی می‌شود.

ماهیت مولکولی و بهره‌گیری از معادلات سینتیک مولکول‌ها در روش شبکه بولتزمن سبب شده است که بتوان پدیده‌هایی مانند جداسازی فازهای یک سیال و تشکیل سطح مشترک که ریشه در برهم‌کنش مولکول‌ها و ابعادی بسیار کوچک‌تر از بعد ماکروسکوپی دارند، بدون نیاز به ردیابی سطح مشترک شبیه‌سازی و بررسی کرد، همچنین به دلیل ماهیت مولکولی این روش اعمال شرایط مرزی به نسبت بسیار راحت‌تر بوده و در نتیجه امکان بررسی مسائلی با شرایط مرزی پیچیده فراهم شده است [7].

از دیگر مزایای بسیار ارزشمند روش شبکه بولتزمن به دست آوردن فشار از معادله حالت حتی در جریان تراکم‌ناپذیر است که در محدوده عدد ماخ پایین حاصل می‌شود. این درحالی است که در روش‌های ماکروسکوپی نیاز به حل یک معادله پواسون برای فشار است که مشکلاتی را به همراه دارد [2]. توجه بسیاری از محققان و مهندسان به سمت استفاده از روش شبکه بولتزمن برای شبیه‌سازی مسائل مختلف از جمله جریان‌های دو فاز جلب شده است. مدل‌های دو فاز موجود در روش شبکه بولتزمن در مرجع [8] با جزئیات بیان شده است که در میان آن‌ها مدل شان و چن به دلیل سادگی و توانایی آن در شبیه‌سازی مسائل گوناگون جریان دوفاز پرکاربردترین روش است. البته تمامی این مدل‌ها در آغاز با مشکلاتی مانند ناپایداری در نسبت چگالی‌های بالا روبه‌رو بوده‌اند که با تلاش محققان این مشکل تا حدی برطرف شده است. ناپایداری در لزجت‌های کم از دیگر محدودیت‌های بیشتر مدل‌ها به ویژه مدل شان و چن است. به همین دلیل برای افزایش پایداری این مدل معمولاً از تابع برخورد چندزمانه⁴ استفاده می‌شود.

مدل‌سازی نیروی برهم‌کنش موجود بین ذرات سیال واقعی که منجر به دستیابی به معادله حالت واقعی می‌شود اساس مدل شان و چن است. این نیرو به همراه سایر نیروهای خارجی احتمالی مانند نیروی جاذبه برای قرار گرفتن در معادله روش شبکه بولتزمن نیاز به یک طرح نیرویی⁵ دارند. گاو و همکاران [9] با در نظر گرفتن تأثیر شبکه بولتزمن گسسته بر جمله نیرو توانستند طرحی ارائه کنند که بسط معادله شبکه بولتزمن حاصل از آن دقیقاً به معادلات بقای جرم و ناویر-استوکس در ابعاد ماکروسکوپی می‌رسد. با این وجود استفاده از این طرح نیرویی در مدل شان و چن برای نسبت چگالی‌های به نسبت بالا کارا نبوده و منجر به ناپایداری حل می‌شود. لی و همکاران [10] دریافتند که علت ناپایداری این طرح انحراف شدید چگالی فازها از مقادیر متناظر حاصل از ترمودینامیک است. آن‌ها برای رفع این مشکل در حالت استفاده از تابع برخورد یک زمانه به متغیر سرعت V در رابطه (4) که معرف طرح گاو است، جمله $eF/((\tau - 0.5)\psi^2)$ را اضافه کردند که در آن τ زمان آرامش تابع برخورد یک زمانه است. آن‌ها با تنظیم مقدار ϵ توانستند چگالی فازها حاصل از مدل را به مقادیر حاصل از ترمودینامیک بسیار نزدیک کنند که نتیجه آن افزایش قابل توجه پایداری بوده است. نتایج

2- مدل عددی

معادله شبکه بولتزمن با تابع برخورد چندگانه و در حضور نیروی خارجی عبارت از رابطه (1) است [14].

$$f_{\alpha}(x + e_{\alpha}\delta t, t + \delta t) = f_{\alpha}(x, t) - \sum_i A_{\alpha i} (f_i - f_i^{eq}) + \delta t \left(s_{\alpha} - \frac{1}{2} \sum_i A_{\alpha i} s_i \right) \quad (1)$$

در رابطه (1) مکان ذره، e_{α} مؤلفه سرعت شبکه در جهت α ، δt گام زمانی، f تابع توزیع ذره، A ماتریس زمان آرامش و s جمله نیرو در فضای سرعت است. برای جریان‌های تراکم‌ناپذیر (محدوده عدد ماخ پایین) تابع توزیع تعادلی از رابطه (2) به دست می‌آید [1].

$$f_{\alpha}^{eq} = \omega_{\alpha} \rho \left[1 + \frac{e_{\alpha} \cdot V}{c_s^2} + \frac{(e_{\alpha} \cdot V)^2}{2c_s^4} - \frac{V \cdot V}{2c_s^2} \right] \quad (2)$$

¹ Marker and cell
² Volume of fluid (VOF)
³ Level set
⁴ Multi relaxation time
⁵ Force scheme

این مقاله از معادله حالت پرکاربرد کارناهان-استارلینگ² به صورت رابطه (15) استفاده می‌شود [1]

$$P_{EOS} = \rho RT \frac{1 + b\rho/4 + (b\rho/4)^2 - (b\rho/4)^3}{(1 - b\rho/4)^3} - a\rho^2 \quad (15)$$

در رابطه (15)، $a = 0.4963 R^2 T_c^2 / P_c$ و $b = 0.18727 R T_c / P_c$ است؛ بنابراین دمای بحرانی برابر با $T_c = 0.3773 a / (bR)$ خواهد بود. P_c نیز فشار بحرانی است. در این مقاله $b = 4$ و $R = 1$ انتخاب شده است. کاهش پارامتر a موجب افزایش ضخامت سطح مشترک و پایداری می‌شود.

2-1- مدل بهبودیافته

بسط سری تیلور نیروی برهم‌کنش در رابطه (13) عبارت از رابطه (16) است [13,11].

$$F = -Gc^2 \left[\psi \nabla \psi + \frac{c^2}{6} \psi \nabla (\nabla^2 \psi) + \dots \right] \\ = \frac{-Gc^2}{2} \nabla \psi^2 - \frac{Gc^4}{6} [\nabla (\psi \nabla^2 \psi) - \nabla^2 \psi \nabla \psi] + \dots \\ = \frac{-Gc^2}{2} \nabla \psi^2 - \frac{Gc^4}{6} \nabla (\psi \nabla^2 \psi) + \frac{Gc^4}{6} [\nabla \cdot (\nabla \psi \nabla \psi) - \frac{1}{2} \nabla |\nabla \psi|^2] \quad (16)$$

که در آن $|\nabla \psi|^2 = (\partial \psi / \partial x)^2 + (\partial \psi / \partial y)^2$ است. با توجه به روابط (16,10) و به دلیل عدم وجود نیروهای خارجی مانند جاذبه، نیروی

برهم‌کنش توسط رابطه (17) جذب تانسور فشار می‌شود [17].

$$\nabla \cdot P = \nabla (\rho c_s^2) - F \quad (17)$$

بنابراین با توجه به روابط (17,16) تانسور فشار عبارت از رابطه (18) است [17].

$$P = \left(\rho c_s^2 + \frac{Gc^2}{2} \psi^2 + \frac{Gc^4}{12} |\nabla \psi|^2 + \frac{Gc^4}{6} (\psi \nabla^2 \psi) \right) I \\ - \frac{Gc^4}{6} \nabla \psi \nabla \psi \quad (18)$$

جملات اضافه شده به ρc_s^2 در تانسور فشار بخش غیرایده‌آل معادله حالت سیال واقعی را که ناشی از برهم‌کنش بین مولکولی است مدل می‌کند. در رابطه (18) تانسور واحد است؛ بنابراین مؤلفه نرمال تانسور فشار برای یک سطح مشترک تخت برابر با رابطه (19) است.

$$P_n = \rho c_s^2 + \frac{Gc^2}{2} \psi^2 + \frac{Gc^4}{12} \left[\alpha \left(\frac{d\psi}{dn} \right)^2 + \beta \psi \frac{d^2 \psi}{dn^2} \right] \quad (19)$$

در آن n جهت نرمال است که در حالت دوبعدی می‌تواند جهت x یا y باشد. با مقایسه رابطه (19) با رابطه (18) به آسانی می‌توان دریافت که $\alpha = -1$ و $\beta = 2$ است. توجه شود که جمله پایانی در رابطه (18) یعنی $-Gc^4 \nabla \psi \nabla \psi / 6$ ، دارای جمله $-2Gc^4 (d\psi/dn)^2 / 12$ است؛ بنابراین جمع این جمله با جمله $Gc^4 |\nabla \psi|^2 / 12$ منجر به $\alpha = -1$ می‌شود.

با تعریف پارامتر $\varepsilon = -2\alpha/\beta$ و کمی عملیات ریاضی در رابطه (19) و سپس انتگرال‌گیری از آن، رابطه (20) به دست می‌آید [11].

$$\int_{\rho_g}^{\rho_l} \left(p_0 - \rho c_s^2 - \frac{Gc^2}{2} \psi^2 \right) \frac{\psi'}{\psi^{1+\varepsilon}} dp = 0 \quad (20)$$

که همان فشار اشباع مایع و بخار در دمای اشباع در حالت تعادل و به دور از سطح مشترک است. در رابطه (20)، $\psi' = d\psi/dp$ است. چگالی مایع و بخار آن در مدل شان و چن توسط رابطه (20) به دست می‌آید. این در حالی است که چگالی مایع و بخار در ترمودینامیک توسط قانون مساحت‌های برابر ماکسول طبق رابطه (21) تعیین می‌شود [18,11,8].

در رابطه (2)، ω_α ضریب وزنی در جهت α بوده و c_s سرعت صوت در شبکه و برای شبکه D2Q9 مورد استفاده در این مقاله برابر با $c/\sqrt{3}$ است $c = \delta x / \delta t = 1$ و ρ و V نیز به ترتیب چگالی و سرعت ماکروسکوپیک بوده و عبارت از رابطه (3) است [9].

$$\rho = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \quad , \quad \rho V = \sum_{\alpha} f_{\alpha} e_{\alpha} + \frac{\delta t}{2} F \quad (3)$$

که در آن F مجموع تمام نیروهای وارد شده بر هر ذره سیال (هر گره شبکه) بوده که در این بخش تنها برابر با نیروی برهم‌کنش بین ذرات سیال است. جمله نیرو s نیز برابر با رابطه (4) است [9].

$$s_{\alpha} = \omega_{\alpha} \left[\frac{e_{\alpha} \cdot V}{c_s^2} + \frac{(e_{\alpha} \cdot V)}{c_s^4} e_{\alpha} \right] \cdot F \quad (4)$$

سمت راست معادله (1) با ضرب در ماتریس تبدیل M به فضای مومنتم به صورت رابطه (5) انتقال می‌یابد:

$$M((1)) = m = \hat{f}_{\alpha} - \sum_{i=1} \hat{\Lambda}_{\alpha i} (\hat{f}_i - \hat{f}_i^{eq}) \\ + \delta t \sum_i \left(I_{\alpha i} - \frac{1}{2} \hat{\Lambda}_{\alpha i} \right) \hat{s}_i \quad (5)$$

که در آن $\hat{f}_i = M f_i$ ، $\hat{s}_i = M s_i$ ، I ماتریس واحد و $\hat{\Lambda}$ ماتریس زمان آرامش قطری در فضای مومنتم به صورت رابطه (6) است [11].

$$\hat{\Lambda} = \text{diag}(s_0, s_1, s_2, s_3, s_4, s_5, s_6, s_7, s_8) = \\ \text{diag}(\tau_0^{-1}, \tau_e^{-1}, \tau_z^{-1}, \tau_j^{-1}, \tau_q^{-1}, \tau_j^{-1}, \tau_q^{-1}, \tau^{-1}, \tau^{-1}) \quad (6)$$

لزجت حجمی و سینماتیک به ترتیب از روابط (8,7) به دست می‌آیند [11].

$$\xi = \left(\frac{1}{s_1} - 0.5 \right) c_s^2 \quad (7)$$

$v = (\tau - 0.5) c_s^2$ (8) بدین ترتیب معادلات ماکروسکوپیک حاصل از بسط رابطه (1) دقیقاً همان معادلات بقای جرم و مومنتم به ترتیب در روابط (10,9) خواهد بود [11,9].

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V) = 0 \quad (9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho V) + \nabla \cdot (\rho V V) = -\nabla P + \\ v \nabla \cdot [\rho (\nabla V + (\nabla V)^T)] + F \quad (10)$$

در آن $P = \rho c_s^2$. با استفاده از میان‌یابی خطی ارائه شده در رابطه (11)، می‌توان برای هر فاز لزجت سینماتیک متفاوتی تعیین کرد [15,3].

$$\tau = \tau_g + \frac{\rho - \rho_g}{\rho_l - \rho_g} (\tau_l - \tau_g) \quad (11)$$

که ρ_l چگالی مایع و ρ_g چگالی بخار است. مرحله انتشار در میدان سرعت و طبق رابطه (12) انجام می‌گیرد [11].

$$f_{\alpha}(x + e_{\alpha} \delta t, t + \delta t) = M^{-1} m \quad (12)$$

نیروی برهم‌کنش بین ذرات سیال در مدل شان و چن عبارت از رابطه (13) است [16].

$$F = -G \psi(x, t) \left[\sum_{\alpha} w_{\alpha} (|e_{\alpha}|^2) \psi(x + e_{\alpha}, t) e_{\alpha} \right] \quad (13)$$

در آن G قدرت برهم‌کنش بوده و $w(1) = 1/3$ و $w(2) = 1/12$ و ضرایب وزنی هستند. تابع پتانسیل برهم‌کنش ψ نیز از رابطه (14) محاسبه می‌شود [13].

$$\psi = \sqrt{\frac{2(P_{EOS} - \rho c_s^2)}{Gc^2}} \quad (14)$$

تعریف تابع ψ طبق رابطه (14) سبب حذف پارامتر G در رابطه (13) می‌شود و بدین ترتیب تنها نقش آن مثبت نگه داشتن جمله زیر رادیکال است. در

² Carnahan-Starling

¹ Right Hand Side (RHS)

تانسور فشار ایجاد می‌شود. ضریب $\alpha_3 = -2$ نیز توسط جمله $-Gc^4 \nabla \psi \nabla \psi / 6$ همچنان باقی است. ضریب α کل عبارت از رابطه (22) است.

$$\alpha = \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = -1 - \lambda \quad (22)$$

در نتیجه با تغییر مقدار λ مقدار α و در نتیجه مقدار ε نیز تغییر می‌کند. نیروی برهم‌کنش جدید و بهبود یافته عبارت از رابطه (23) است.

$$F_{\text{new}} = F + \lambda \frac{Gc^4}{12} \nabla(|\nabla\psi|^2) \quad (23)$$

مشابه رابطه (18) رابطه تانسور فشار جدید با نیروی بهبود یافته به صورت رابطه (24) خواهد بود.

$$\nabla \cdot P_{\text{new}} = \nabla(\rho c_s^2) - F_{\text{new}} \quad (24)$$

با توجه به این که جمله $\lambda Gc^4 \nabla(|\nabla\psi|^2)$ به صورت گرادیان است و با توجه به رابطه (24) جمله $-\lambda Gc^4 |\nabla\psi|^2 / 12$ به تانسور فشار اولیه اضافه شده و تانسور فشار جدید به صورت رابطه (25) اصلاح می‌شود.

$$P_{\text{new}} = \left(\rho c_s^2 + \frac{Gc^2}{2} \psi^2 + (1 - \lambda) \frac{Gc^4}{12} |\nabla\psi|^2 + \frac{Gc^4}{6} (\psi \nabla^2 \psi) \right) I - \frac{Gc^4}{6} \nabla \psi \nabla \psi \quad (25)$$

بدین ترتیب طبق رابطه (19)، $\alpha = -1 - \lambda$ شده و $\beta = 2$ ، در نتیجه رابطه (26) به صورت زیر است.

$$\varepsilon = \frac{-2\alpha}{\beta} = 1 + \lambda \quad (26)$$

با تغییر پارامتر λ می‌توان مقدار ε را تنظیم کرد، به طوری که سازگاری ترمودینامیکی حاصل شود که افزایش قابل توجه پایداری را به دنبال دارد.

برای گسسته‌سازی مشتقات مرتبه اول در جمله $\lambda Gc^4 \nabla(|\nabla\psi|^2) / 12$ روابط (28,27) استفاده می‌شود [3]:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\phi(x+1, y) - \phi(x-1, y)}{3} + \frac{\phi(x+1, y+1) - \phi(x-1, y-1)}{12} + \frac{\phi(x+1, y-1) - \phi(x-1, y+1)}{12} \quad (27)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{\phi(x, y+1) - \phi(x, y-1)}{3} + \frac{\phi(x+1, y+1) - \phi(x-1, y-1)}{12} + \frac{\phi(x-1, y+1) - \phi(x+1, y-1)}{12} \quad (28)$$

در روابط (28,27) ابتدا $\phi = \psi$ جای‌گذاری شده و به کمک آن‌ها مقدار $|\nabla\psi|^2$ برای هر گره محاسبه و ذخیره می‌شود؛ سپس $\phi = |\nabla\psi|^2$ قرار داده شده و در نتیجه مقدار $\nabla(|\nabla\psi|^2)$ محاسبه می‌شود.

3- نتایج شبیه‌سازی و بحث

3-1- سازگاری ترمودینامیکی

بدین منظور یک فیلم مایع به ضخامت 50 سلول وسط یک شبکه 200×200 با استفاده از رابطه (29) قرار داده می‌شود [13].

$$\rho = \rho_g + \frac{\rho_l - \rho_g}{2} [\tanh(y_1) - \tanh(y_2)] \quad (29)$$

در رابطه (29)، $y_1 = 2(y - 75)/5$ و $y_2 = 2(y - 125)/5$ است. شرط مرزی پرریودیک به هر چهار مرز اعمال می‌شود. زمان‌های آرامش عبارت از $1 = s_3 = s_5 = s_0$ ، $s_4 = s_6 = 1.1$ ، $s_1 = s_2 = 0.51$ است، همچنین برای هر دو فاز $\tau = 0.6$ انتخاب شده است. مقادیر چگالی فازها پس از رسیدن

$$\int_{\rho_g}^{\rho_l} (p_0 - P_{\text{EOS}}) \frac{1}{\rho^2} d\rho = 0 \quad (21)$$

با مقایسه روابط (21,20) مشخص است که برای آن که دو رابطه با یکدیگر یکسان شوند باید دو شرط به طور هم‌زمان برقرار باشد. شرط اول این که باید $\psi = \rho$ باشد و شرط دوم این است که معادله حالت توسط رابطه $P_{\text{EOS}} = \rho c_s^2 + Gc^2 \psi^2 / 2$ تعریف شود. شرط دوم توسط رابطه (14) و استفاده از رابطه حالت واقعی کارناهان- استارلینگ و یا هر معادله حالت واقعی دیگری، ارضا می‌شود که قطعاً شرط اول را نقض می‌کند. بدین ترتیب به این عدم تطابق میان روابط (21,20) که در نتیجه تعریف تابع پتانسیل ψ توسط رابطه (14) یا همان به کارگیری معادله حالت واقعی در مدل شان و چن است، اصطلاحاً ناسازگاری ترمودینامیکی¹ می‌گویند. در مراجع [11,10] یکی از عوامل مهم ناپایداری مدل شان و چن با استفاده از طرح نیرویی گاو و همکاران همین ناسازگاری ترمودینامیکی تشخیص داده شده است.

هدف از این مقاله ارائه روشی است که بتوان به صورت عددی و با تقریب بسیار خوبی به سازگاری ترمودینامیکی یعنی یکسان بودن مقادیر چگالی فازها حاصل از مدل شان و چن به وسیله رابطه (20) با نظریه مساحت‌های برابر ماکسول یعنی رابطه (21) دست یافت که نتیجه آن افزایش قابل توجه پایداری خواهد بود، زیرا ناسازگاری ترمودینامیکی سبب می‌شود که به خصوص چگالی فاز بخار حاصل از مدل به سمت مقادیر بسیار کمتر از مقدار ترمودینامیکی انحراف پیدا کند که نتیجه آن افزایش گرادیان چگالی در سطح مشترک، افزایش سرعت‌های ساختگی و در نتیجه ناپایداری خواهد بود [10]. همانطور که اشاره شد با تعریف تابع ψ به وسیله رابطه (14) عبارت داخل پرانتز در روابط (21,20) دقیقاً یکسان خواهد شد. با این تعریف بدیهی است که عبارت $\psi' / \psi^{1+\varepsilon}$ هرگز برابر با $1/\rho^2$ نخواهد شد. با این وجود اگر امکان تغییر مقدار پارامتر ε در رابطه (20) فراهم شود می‌توان عبارت انتگرال را تنظیم کرد، به طوری که مقادیر چگالی حاصل از آن هدف مورد نظر یعنی یکسان شدن چگالی فازهای حاصل از نتایج شبیه‌سازی با نتایج ترمودینامیکی را محقق سازد [11,10]. همان‌طور که یاد شد در مدل اولیه مقدار پارامتر ε ثابت و برابر با یک است و امکان تغییر آن وجود ندارد که همین موضوع دلیل اصلی ناپایداری آن است. در ادامه شیوه جدید مطرح شده در این مقاله جهت متغیر کردن این پارامتر مهم بیان می‌شود.

همانطور که بیان شد $\varepsilon = -2\alpha/\beta$ تعریف می‌شود که در آن با توجه به رابطه (19)، α جمع ضرایب جملات دارای $(d\psi/dn)^2$ و β جمع ضرایب $\psi d^2\psi/dn^2$ است که از تانسور فشار به دست می‌آیند؛ بنابراین اگر بتوان α را متغیر کرد می‌توان مقدار پارامتر ε را نیز کنترل و تنظیم نمود.

یکی از جملاتی که در بسط سری تیلور نیروی برهم‌کنش F یعنی رابطه (16) دیده می‌شود جمله $-Gc^4 \nabla(|\nabla\psi|^2) / 12$ است. رابطه تانسور فشار با نیروی برهم‌کنش مطابق رابطه (18) است. طبق این رابطه هر جمله از نیروی F که به صورت گرادیان یک عبارت باشد، آن عبارت جذب تانسور فشار می‌شود که جمله $-Gc^4 \nabla(|\nabla\psi|^2) / 12$ یکی از آن‌هاست و به همین دلیل عبارت $Gc^4 |\nabla\psi|^2 / 12$ در تانسور فشار ظاهر شده است. از سوی دیگر برای سطح تخت این جمله برابر با $Gc^4 (d\psi/dn)^2 / 12$ است و بنابراین طبق رابطه (19) ایجاد ضریب $\alpha_1 = 1$ می‌کند. این ایده به ذهن نویسندگان این مقاله رسیده است که با اضافه کردن جمله $\lambda Gc^4 \nabla(|\nabla\psi|^2) / 12$ به نیروی F که در آن λ یک متغیر ورودی است با روندی که یاد شد ضریب $\alpha_2 = -\lambda$ نیز در

¹ Thermodynamic inconsistency

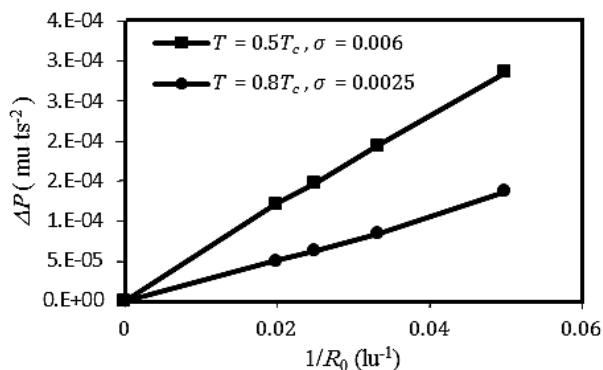


Fig. 1 Evaluation of Laplace law for a droplet

شکل 1 ارزیابی قانون لاپلاس برای قطره

نتایج شبیه‌سازی پس از گذشت 5000 گام زمانی در شکل 2 آورده شده است. همان‌طور که در نتایج ملاحظه می‌شود مقدار حداکثر سرعت‌های ساختگی از مقدار $u_s = 0.025$ در شکل 2a که در آن لزجت سینماتیک گاز برابر با لزجت مایع است، به مقدار 0.007 در شکل 2b که در آن لزجت سینماتیک گاز 5 برابر شده کاهش یافته است. دلیل این موضوع کاهش گرادیان لزجت دینامیک در سطح مشترک است که در نسبت چگالی‌های بالا سبب کاهش چشمگیر مقدار سرعت‌های ساختگی می‌گردد [20]. نکته دیگر آن است که این سرعت‌های ساختگی از سطح مشترک قطره فاصله خوبی دارند. البته با تنظیم مقادیر زمان‌های آرامش مقدار سرعت‌های ساختگی را می‌توان حتی به مقدار بیشتری کاهش داد که این موضوع از مزایای مهم استفاده از تابع برخورد چند زمانه است.

مقدار کم سرعت‌های ساختگی در نسبت چگالی به بزرگی نزدیک به 2400 و در لزجت کم مایع نشان از توانایی و پایداری بالای مدل حاضر دارد که امکان شبیه‌سازی جریان‌هایی با نسبت چگالی بالا و لزجت‌های کم را فراهم می‌کند.

4-3- شبیه‌سازی شکستن سد مایع

در این قسمت به منظور اعتبارسنجی کامل‌تر مدل عددی پیشنهادی مسئله معروف شکستن سد مایع شبیه‌سازی شده و نتایج آن با نتایج آزمایشگاهی مارتین و مویس [21] مقایسه می‌شود. بدین منظور یک ستون مربعی از مایع به طول و ارتفاع $r=100$ سلول، در شبکه‌ای به ابعاد 300×150 و در نسبت دمای 0.6 (نسبت چگالی 140) با شرط مرزی دیوار برای مرزهای پایین و چپ، لغزش آزاد¹ برای سطح بالا و شرط مرزی باز² برای سطح سمت راست، در نظر گرفته شده است. در این مسئله دو نیروی دیگر یعنی نیروی برهم‌کنش سیال-جامد با رابطه (31) و نیروی جاذبه با رابطه $F_{gr} = \rho g$ اضافه می‌شوند [20]، که $g = 5E - 05$ در واحد شبکه بولتزمن است.

$$F_{solid}(x, t) = -G\psi(x, t) \left[\sum_{\alpha} w(|e_{\alpha}|^2) \psi(\rho_w) S(x + e_{\alpha}) e_{\alpha} \right] \quad (31)$$

که در آن S روی سطح جامد برابر با یک و در غیر آن صفر است. ρ_w نیز چگالی مجازی سطح جامد است که با تغییر مقدار آن می‌توان مقدار آبدوست بودن سطح را تغییر داد.

به حالت تعادل ثبت می‌شود. نتایج شبیه‌سازی در جدول 1 آورده شده است. در این نتایج پارامتر a در معادله حالت برابر با $a=0.5$ بوده مگر آن‌که بیان شود. با توجه به جدول 1 ملاحظه می‌شود که با افزایش مقدار λ از صفر به 1.5 پایداری مدل افزایش پیدا کرده است، ولی مقادیر چگالی فاز بخار همچنان انحراف زیادی از مقادیر ترمودینامیکی دارد که این انحراف با کاهش دما افزایش یافته که در نهایت منجر به ناپایداری حل در نسبت دماهای کمتر از 0.6 شده است. با تنظیم مقدار λ در عدد 2.65 مقادیر چگالی حاصل از مدل با تقریب بسیار خوبی بر مقادیر حاصل از نظریه ماکسول منطبق شده که منجر به افزایش بسیار قابل توجه پایداری مدل و رسیدن به نسبت چگالی حدود 2400 در نسبت دمای 0.45 شده است.

2-3- ارزیابی قانون لاپلاس برای قطره

بدین منظور یک شبکه 100×100 با شرط مرزی تقارن [19] برای هر چهار مرز در نظر گرفته شده است. توزیع اولیه چگالی نیز با استفاده از رابطه (30) انجام می‌شود [1].

$$\rho = \frac{\rho_l + \rho_g}{2} - \frac{\rho_l - \rho_g}{2} \left\{ \tanh \left[\frac{2(\sqrt{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2} - R_0)}{5} \right] \right\} \quad (30)$$

که در آن x_0 و y_0 مختصات مرکز قطره و برابر با صفر است. به عبارت دیگر به دلیل تقارن قطره تنها یک چهارم آن در میدان حل قرار داده شده است. مقدار پارامترهای ورودی نیز دقیقاً مشابه قسمت 1-3 است.

شکل 1 نمودار اختلاف فشار داخل و بیرون قطره بر حسب معکوس شعاع آن را نشان می‌دهد که بیانگر رابطه خطی بین آن‌هاست. این موضوع با قانون لاپلاس یعنی رابطه $\Delta P = \sigma/R_0$ در آن کشش سطحی و R_0 شعاع قطره است؛ بنابراین شیب این نمودار بیانگر مقدار کشش سطحی که در شکل 1 مقدار آن برای دو دمای مختلف محاسبه شده است.

3-3- ارزیابی مقدار حداکثر سرعت‌های ساختگی پیرامون قطره

بدین منظور قطره‌ای به شعاع 30 سلول شبکه در نسبت دمای 0.45 در نظر گرفته شده است. لزجت سینماتیک مایع در مقدار $v_l = 0.0067$ ثابت بوده، ولی لزجت گاز یک بار برابر با $v_g = v_l = 0.0067$ و بار دیگر برابر با $v_g = 0.033 = 5v_l$ در واحد شبکه در نظر گرفته شده است. اندازه شبکه، شرایط مرزی و پارامترهای ورودی نیز مشابه قسمت 2-3 است.

جدول 1 بررسی سازگاری ترمودینامیکی مدل حاضر

Table 1 Investigation of thermodynamic consistency of the current model.

نسبت دما	نسبت چگالی مایع به گاز		
	مدل عددی حاضر	مدل عددی حاضر	مدل اولیه
نسبت	مدل عددی حاضر	مدل عددی حاضر	مدل اولیه
0.8	0.3072/0.0216	0.3071/0.0211	0.3032/0.0075
0.7	0.3581/0.0093	0.3582/0.0092	NaN
0.65	0.3823/0.0056	0.3823/0.006	NaN
0.6	0.4061/0.003	0.4062/0.0029	NaN
0.55	0.43/0.0015	0.43/0.0015	NaN
0.5	0.4541/0.00063	0.4541/0.00061	NaN
0.45	0.4786/0.0002	0.4786/0.00019	NaN

¹ free slip

² open boundary condition

لزجت‌های کم ارائه شد که در نسبت لزجت‌های دینامیک بالا نیز پایدار است. این مدل بهبود داده شده بر پایه مدل یک جزیبی، چندفاز شان و چن است که در آن نیروی برهم‌کنش به صورت هدفمند به گونه‌ای اصلاح شده که سبب اصلاح یکی از جملات کلیدی در تانسور فشار می‌شود. بدین ترتیب امکان تنظیم مدل برای رسیدن به سازگاری ترمودینامیکی فراهم شده که نتیجه آن افزایش بسیار قابل توجه پایداری مدل و دقت آن است.

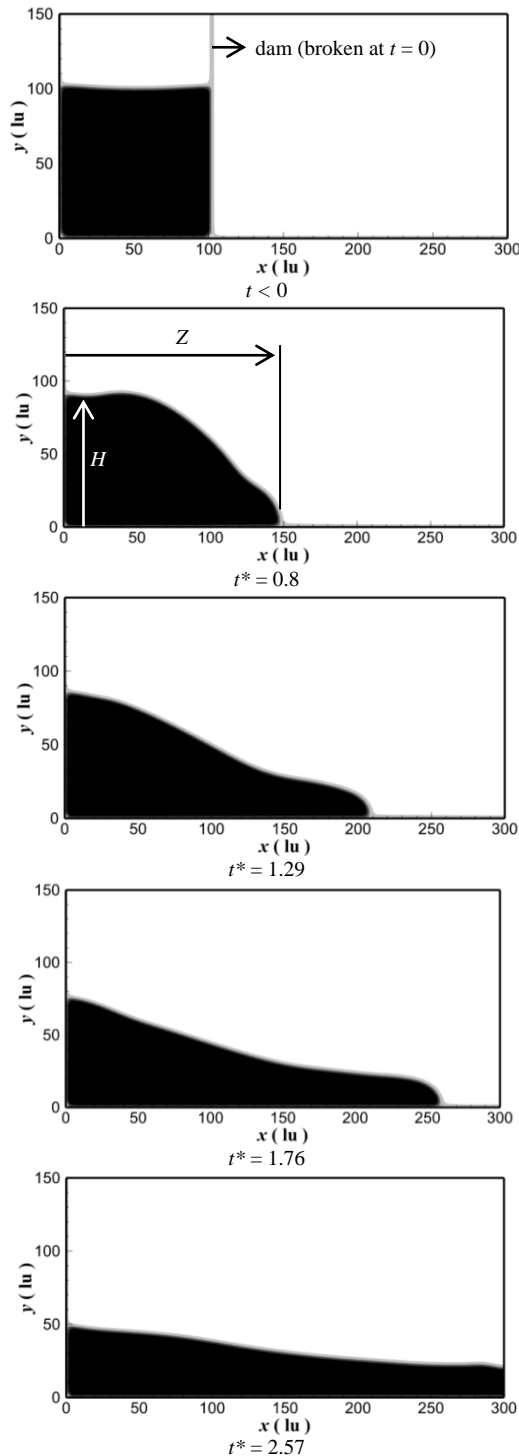


Fig. 3 Simulation images of the broken dam problem

شکل 3 تصاویر شبیه‌سازی مسئله شکستن سد مایع

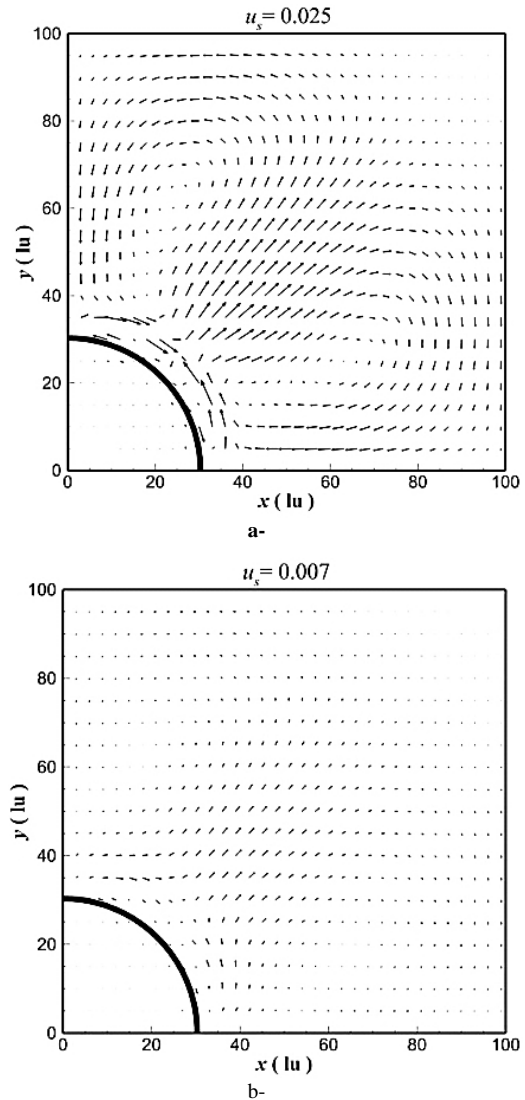


Fig 2 Evaluation of the spurious velocities around the interface of a droplet at $v_l=0.0067$ and $T=0.45 T_c$; a- $v_g = v_l$, b- $v_g=5v_l$.

شکل 2 ارزیابی سرعت‌های ساختگی پیرامون سطح مشترک قطره در $v_l = 0.0067$ و $T = 0.45 T_c$ الف- $v_g = v_l$ ب- $v_g = 5v_l$

مایع در اثر شکستن سد شروع به حرکت می‌کند که نتایج آن در شکل 3 نشان داده شده است. مهم‌ترین پارامتر تأثیرگذار در این مسئله نسبت g/r و یا به عبارت دقیق‌تر زمان بی‌بعد $t^* = t\sqrt{g/r}$ است که در آن r طول و ارتفاع ستون مایع و t زمان است. نقش لزجت و کشش سطحی در این مسئله ناچیز است [21]. با این وجود برای نشان دادن پایداری مدل حاضر لزجت مایع در این شبیه‌سازی مقداری نسبتاً پایین و برابر با $v_l = 0.0067$ و لزجت گاز برابر با $v_g = 0.0167$ در واحد شبکه انتخاب شده است. البته مقادیر بسیار کمتر لزجت هم کاملاً قابل انتخاب است و مدل پایدار خواهند ماند.

در شکل 4 مقدار بی‌بعد طول لبه موج، $Z^* = Z/r$ و در شکل 5 مقدار بی‌بعد ارتفاع موج، $H^* = H/r$ استخراج شده از نتایج شبیه‌سازی با نتایج آزمایشگاهی مارتین و مویس مقایسه شده است. همان‌طور که ملاحظه می‌شود تطابق به نسبت خوبی بین نتایج شبیه‌سازی و آزمایشگاهی وجود دارد.

4- نتیجه‌گیری

در این مقاله یک روش جدید برای دستیابی به نسبت چگالی‌های بالا و

g	شتاب جاذبه ($lu\ ts^{-2}$)
G	ضریب مرتبط با قدرت برهم‌کنش
H	ارتفاع موج (lu)
I	ماتریس واحد
m	ترم برخورد در فضای مومنتم
M	ماتریس تبدیل
P	فشار ($mu\ lu^{-1}\ ts^{-2}$)
P_c	فشار بحرانی ($mu\ lu^{-1}\ ts^{-2}$)
r	طول و ارتفاع ستون مایع (lu)
R	ثابت گاز در معادله حالت
R_0	شعاع قطره (lu)
s	جمله نیرو
s_8 تا s_0	زمان‌های آرامش ماتریس آرامش قطری
t	زمان (ts)
T	دما (tu)
T_c	دمای بحرانی (tu)
V	بردار سرعت ماکروسکوپیک ($lu\ ts^{-1}$)
w	ضریب وزن
x	بردار موقعیت مکانی
x	محور افقی
y	محور عمودی
Z	طول لبه موج
	علایم یونانی
v	لزجت سینماتیک ($lu^2\ ts^{-1}$)
$\alpha, \beta, \varepsilon$	پارامترهای موجود در فشار نرمال
∇	گرادیان
ξ	لزجت حجمی ($lu^2\ ts^{-1}$)
ρ	چگالی ($mu\ lu^{-3}$)
τ	زمان آرامش
Λ	ماتریس زمان آرامش
λ	ضریب تنظیم چگالی فازها
σ	کشش سطحی ($mu\ ts^{-2}$)
ψ	تابع جرم مؤثر
	بالانویس‌ها
eq	تعادلی
\wedge	بیانگر فضای مومنتم
*	نماد مقدار بی‌بعد
	زیرنویس‌ها
α	جهت
g	گاز
gr	جاذبه
l	مایع
n	نرمال
s	صوت یا سرعت ساختگی
w	دیوار
e	انرژی
ζ	مجذور انرژی

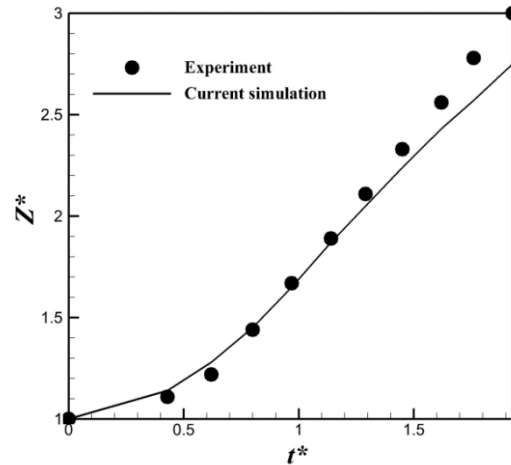


Fig. 4 Comparison between simulation results and experimental data of Martin and Moyce [21] for the dimensionless wave front

شکل 4 مقایسه بین نتایج شبیه‌سازی و نتایج آزمایشگاهی مارتین و مویس [21] برای طول بی‌بعد لبه موج

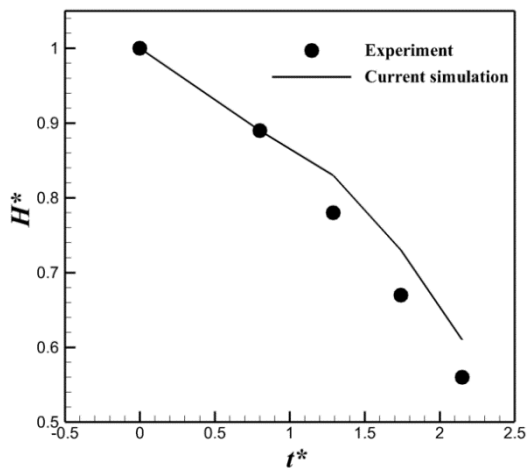


Fig. 5 Comparison between simulation results and experimental data of Martin and Moyce [21] for the dimensionless wave height

شکل 5 مقایسه بین نتایج شبیه‌سازی و نتایج آزمایشگاهی مارتین و مویس [21] برای ارتفاع بی‌بعد موج

مدل ارائه شده از سادگی نسبی و عمومیت برخوردار بوده و روند به کارگیری آن مستقل از دو یا سه‌بعدی بودن مسأله و یا استفاده از توابع برخورد یک‌زمانه یا چند زمانه است. نتایج اعتبارسنجی نشان می‌دهد که مدل ارائه شده در این مقاله از پایداری و دقت خوبی برخوردار بوده و در نتیجه می‌توان از آن برای شبیه‌سازی مسائل مختلف جریان دوفاز و جریان‌های با سطح آزاد بهره برد.

5- فهرست علایم

a, b	پارامترهای معادله حالت کارناهان - استارلینگ
c	اندازه سرعت شبکه ($lu\ ts^{-1}$)
c_s	سرعت صوت در شبکه ($lu\ ts^{-1}$)
e	بردار سرعت گسسته ($lu\ ts^{-1}$)
f	تابع توزیع ذره ($mu\ lu^{-3}$)
F	نیروی برهم‌کنش سیال - سیال ($mu\ lu\ ts^{-2}$)
F_{solid}	نیروی برهم‌کنش سیال - جامد ($mu\ lu\ ts^{-2}$)

ز مومنتم
 q شار انرژی

6- مراجع

- [11] Q. Li, K. Luo, X. Li, Lattice Boltzmann modeling of multiphase flows at large density ratio with an improved pseudopotential model, *Physical Review E*, Vol. 87, No. 5, pp. 053301, 2013.
- [12] D. Zhang, K. Papadikis, S. Gu, Three-dimensional multi-relaxation time lattice-Boltzmann model for the drop impact on a dry surface at large density ratio, *Multiphase Flow*, Vol. 64, pp. 11-18, 2014.
- [13] A. Xu, T. Zhao, L. An, L. Shi, A three-dimensional pseudo-potential-based lattice Boltzmann model for multiphase flows with large density ratio and variable surface tension, *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Vol. 56, pp. 261-271, 2015.
- [14] M. E. McCracken, J. Abraham, Multiple-relaxation-time lattice-Boltzmann model for multiphase flow, *Physical Review E*, Vol. 71, No. 3, pp. 036701, 2005.
- [15] S. F. Kharמיانی, M. Passandideh-Fard, H. Niazmand, Modeling of simultaneous impact of two parallel drops on a thin liquid film using Lattice Boltzmann Method, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 16, No. 7, pp. 373-384, 2016. (in Persian فارسی)
- [16] Q. Li, K. Luo, Achieving tunable surface tension in the pseudopotential lattice Boltzmann modeling of multiphase flows, *Physical Review E*, Vol. 88, No. 5, pp. 053307, 2013.
- [17] X. He, G. D. Doolen, Thermodynamic foundations of kinetic theory and lattice Boltzmann models for multiphase flows, *Statistical Physics*, Vol. 107, No. 1, pp. 309-328, 2002.
- [18] M. Sukop, D.T. Thorne, Jr., *Lattice Boltzmann Modeling*, pp. 72-73, Germany: Springer, 2006.
- [19] A. A. Mohamad, *Lattice Boltzmann Method: Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes*, pp. 80-81, London: Springer Science & Business Media, 2011.
- [20] S. F. Kharמיانی, M. Passandideh-Fard, H. Niazmand, Simulation of a single droplet impact onto a thin liquid film using the lattice Boltzmann method, *Molecular Liquids*, Vol. 222, pp. 1172-1182, 2016.
- [21] J. Martin, W. Moyce, Part IV, An experimental study of the collapse of liquid columns on a rigid horizontal plane, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, Vol. 244, No. 882, pp. 312-324, 1952.
- [1] L. Chen, Q. Kang, Y. Mu, Y. L. He, W. Q. Tao, A critical review of the pseudopotential multiphase lattice Boltzmann model: Methods and applications, *Heat and Mass Transfer*, Vol. 76, pp. 210-236, 2014.
- [2] S. Chen, G. D. Doolen, Lattice Boltzmann method for fluid flows, *Annual Review of Fluid Mechanics*, Vol. 30, No. 1, pp. 329-364, 1998.
- [3] T. Lee, C. L. Lin, A stable discretization of the lattice Boltzmann equation for simulation of incompressible two-phase flows at high density ratio, *Computational Physics*, Vol. 206, No. 1, pp. 16-47, 2005.
- [4] M. F. Tome, S. McKee, GENSMAC: A computational marker and cell method for free surface flows in general domains, *Computational Physics*, Vol. 110, No. 1, pp. 171-186, 1994.
- [5] C. W. Hirt, B. D. Nichols, Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries, *Computational Physics*, Vol. 39, No. 1, pp. 201-225, 1981.
- [6] M. Sussman, E. Fatemi, P. Smereka, S. Osher, An improved level set method for incompressible two-phase flows, *Computers & Fluids*, Vol. 27, No. 5, pp. 663-680, 1998.
- [7] X. Shan, H. Chen, Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components, *Physical Review E*, Vol. 47, No. 3, pp. 1815, 1993.
- [8] H. Huang, M. Sukop, X. Lu, *Multiphase Lattice Boltzmann Methods: Theory and Application*, pp. 24-25, United Kingdom: John Wiley & Sons, 2015.
- [9] Z. Guo, C. Zheng, B. Shi, Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method, *Physical Review E*, Vol. 65, No. 4, pp. 046308-1-046308-6, 2002.
- [10] Q. Li, K. Luo, X. Li, Forcing scheme in pseudopotential lattice Boltzmann model for multiphase flows, *Physical Review E*, Vol. 86, No. 1, pp. 016709, 2012.