ماهنامه علمى پژوهشى



مهندسی مکانیک مدرس

mme.modares.ac.ir

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

سروش فلاح خارمىانى1، محمد يسندىدەفرد2*

1- دانش أموخته، کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد 2- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد *مشهد، صندوق پستی pipfard@um.ac.ir ،9177948944

چکیدہ	اطلاعات مقاله
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	مقاله پژوهشی کامل دریافت: 14 خرداد 1396 پذیرش: 07 مرداد 1396 ارائه در سایت: 17 شهریور 1396
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	کلید واژگان: شبکه بولتزمن
دماهای زیربحرانی 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 آنمایشگاهی مقاسبه میشود. نتایج نشان از بایداری بالا و تمانایی مدار بومود داده شده برای شبیهسازی مسائل	شان و چن نسبت چگالی بالا لزجتهای کم
به معندی از سیندی سیند می سرد مایچ مین از پایساری با و توادیی مین بهبود درما مینا برای میبید. سری منتقل ما منت 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 Kharmiani, 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	ABSTRACT
Original Research Paper Received 04 June 2017 Accepted 29 July 2017 Available Online 08 September 2017	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
Keywords: Lattice Boltzmann Shan-Chen High density ratio Low viscosity	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 محدود^۱ و حجم محدود^۲ 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

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

¹ Finite difference method

² Finite volume method

نیستند [3,1]. به همین دلیل روشهای مختلفی مانند روش نشانگر و سلول^۱ [4]، حجم سیال^۲ [5] و سطح مبنا^۳ [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 می شود.

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 برهم کنش مولکولها و ابعادی بسیار کوچکتر از بعد ماکروسکوپیک 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 درنتیجه 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 ماکروسکوپیک 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 جزییات 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 چندزمانه^۴ استفاده میشود.

مدلسازی نیروی برهم کنش موجود بین ذرات سیال واقعی که منجر به دستیابی به معادله حالت واقعی می شود 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 نیرویی^۵ دارند. گااو و همكاران [9] با در نظر گرفتن تأثیر شبكه بولتزمن گسسته بر جمله نیرو توانستند طرحي ارائه كنند كه بسط معادله شبكه بولتزمن حاصل از آن دقيقاً به معادلات بقای جرم و ناویر- استوکس در ابعاد ماکروسکوپیک می سد. 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 گااو است، جمله $\epsilon F/((au-0.5)\psi^2)$ را اضافه کردند که (4) ϵ در آن au 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

آنها محدود به مسائل استاتیک مانند قطره ساکن بود. به همین دلیل آنها در مقاله بعدی خود [11] از تابع برخورد چندزمانه بهره گرفتند و توانستند به نسبت چگالی نزدیک به 1000 و لزجتهای نسبتاً پایین دست یابند و همچنین دینامیک برخورد قطره با سطح مایع را با موفقیت شبیهسازی کنند. یکی از مشکلات روش آنها در حالتی که از تابع برخورد چند زمانه استفاده می شود، حذف برخی از جملات اضافه شده و حفظ برخی دیگر در جملهی $\epsilon = 0$ نيرو در مقايسه با جمله نيرو حاصل از طرح اوليه گااو يعنى در حالت است. در حالت چند زمانه به تعداد جهتهای شبکه زمان استراحت وجود دارد که به طور طبیعی باید در مخرج جمله $\epsilon F/((au-0.5)\psi^2)$ قرار گیرند، ولی آنها جملات اضافه شدهای را که تنها شامل دو زمان استراحت است در نظر گرفتند. این موضوع سبب شد که آنها مجبور به محاسبه دستی عبارات ریاضی شوند و سپس جمله نیرو را به صورت مستقیم و دستی وارد مدل کنند. این موضوع وقتی که از شبکههای سهبعدی استفاده میشود کمی آزاردهنده و مشكلساز است، زيرا حجم محاسبات افزايش مى يابد [13,12]. مشکل دیگر روش آنها نیاز به استخراج معادلات ماکروسکوپیک حاصله به منظور تشخيص جملات اضافه شده به معادلات ناوير- استوكس است. آنها در تعریف متغیر سرعتی که برای محاسبه جمله نیرو توسط گااو و همکاران برای رسیدن به معادلات دقیق ناویر- استوکس محاسبه شده بود تغییراتی دادند که بی شک سبب تغییر در این معادلات می شود؛ بنابراین طبیعی است که به دست آوردن این معادلات در حالت استفاده از تابع برخورد چند زمانه به ویژه در حالت سهبعدی که تعداد جهتهای شبکه چندین برابر می شود کار آسانی نبوده و نیاز به محاسبات ریاضی طولانی و به نسبت پیچیده دارد [13,12]

در این مقاله یک مدل جدید برای افزایش پایداری مدل شان و چن با استفاده از طرح گااو و همکاران ارائه میشود، اگرچه هدف آن همان نزدیک کردن مقادیر چگالی حاصل از مدل به مقادیر حاصل از ترمودینامیک است. این مدل جدید هیچ یک از مشکلات یادشده در مدل لی و همکاران را ندارد و روش به کارگیری و معادلات آن در حالت دو و سه بعدی و یا تابع برخورد یک یا چندگانه یکسان است، همچنین نیاز به محاسبات دستی و روابط ریاضی پیچیده نداشته و از سادگی خوبی برخوردار است. در معادلات ناویر-استوکس هیچ تغییری ایجاد نمیشود، زیرا برخلاف مدل لی و همکاران در برهمکنش در مدل شان و چن جملهای اضافه میشود که نتیجه آن تنها اصلاح هدفمند ضریب یکی از جملات موجود در تانسور فشار است.

2- مدل عددی

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

$$f_{\alpha}(x + e_{\alpha}\delta t, t + \delta t) = f_{\alpha}(x, t)$$

$$-\sum_{i} \Lambda_{\alpha i} \left(f_{i} - f_{i}^{eq}\right) + \delta t \left(s_{\alpha} - \frac{1}{2}\sum_{i} \Lambda_{\alpha i}s_{i}\right)$$

$$(1)$$

f در رابطه (1) x مکان ذره، e_a مؤلفه سرعت شبکه در جهت a گام زمانی، f تابع توزیع ذره، h 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].

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

DOR: 20.1001.1.10275940.1396.17.9.20.6

¹ Marker and cell

² Volume of fluid (VOF) ³ Level set

⁴ Multi relaxation time

⁵ Force scheme

در رابطه (2)، $\omega_a \, \phi_{zr}$ وزنی در جهت α بوده و $c_s \, o$ سرعت صوت در شبکه و برای شبکه D2Q9 مورد استفاده در این مقاله برابر با $C/\sqrt{3}$ است = $c \, \lambda \, \delta t = 1$ $\delta x/\delta t = 1$ و گام زمانی و مکانی برابر با یک است. ρ و V نیز به ترتیب چگالی و سرعت ماکروسکوپیک بوده و عبارت از رابطه (3) است [9].

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

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 برهم کنش بین ذرات سیال است. جمله نیرو ۶ نیز برابر با رابطه (4) است [9].

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

سمت راست^۱ معادله (1) با ضرب در ماتریس تبدیل *M* به فضای مومنتم به صورت رابطه (5) انتقال مییابد:

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

که در آن
$$\hat{f}_i = Mf_i$$
 ماتریس واحد و \hat{h} ماتریس زمان آرامش $\hat{f}_i = Mf_i$ که در آن آزامش قطری در فضای مومنتم به صورت رابطه (6) است [11].

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

$$\nu = (\tau - 0.5)c_{\rm s}^2 \tag{8}$$

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].

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

$$\frac{\partial t}{\partial t} \frac{\partial V}{\partial v} + \nabla \cdot \left[\rho(\nabla V + (\nabla V)^T) \right] + F$$
(10)
c. $\vec{l} = \rho c_s^2$
(11), c. $\vec{l} = \rho c_s^2$

می توان برای هر فاز لزجت سینماتیک متفاوتی تعیین کرد [15,3].
$$au = au_{g} + rac{
ho -
ho_{g}}{
ho}(au_{1} - au_{g})$$

طبق رابطه (12) العجام می دیرد (۲۱۱).
(12)
$$f_{\alpha}(x + e_{\alpha}\delta t, t + \delta t) = M^{-1}m$$

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

$$F = -G\psi(x,t) \left[\sum_{\alpha} w(|e_{\alpha}|^{2})\psi(x+e_{\alpha},t) e_{\alpha} \right]$$
(13)
c, \bar{l} generative $W(2) = 1/12 e^{-1} W(1) = 0$

وزنی هستند. تابع پتانسیل برهمکنش ψ نیز از رابطه (14) محاسبه می شود [13].

$$\psi = \sqrt{\frac{2(P_{\text{EOS}} - \rho c_{\text{S}}^2)}{Gc^2}} \tag{14}$$

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

این مقاله از معادله حالت پرکاربرد کارناهان- استارلینگ^۲ به صورت رابطه (15) استفاده می شود [1]

$$\begin{split} P_{\rm EOS} &= \rho RT \, \frac{1 + b\rho/4 + (b\rho/4)^2 - (b\rho/4)^3}{(1 - b\rho/4)^3} - a\rho^2 \end{split} \tag{15}$$

2-1- مدل بهبوديافته

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

$$F = -Gc^{2} \left[\psi \nabla \psi + \frac{c^{2}}{6} \psi \nabla (\nabla^{2} \psi) + \cdots \right]$$

$$= \frac{-Gc^{2}}{2} \nabla \psi^{2} - \frac{Gc^{4}}{6} \left[\nabla (\psi \nabla^{2} \psi) - \nabla^{2} \psi \nabla \psi \right] + \cdots$$

$$= \frac{-Gc^{2}}{2} \nabla \psi^{2} - \frac{Gc^{4}}{6} \nabla (\psi \nabla^{2} \psi) + \frac{Gc^{4}}{6} \left[\nabla \cdot (\nabla \psi \nabla \psi) - \frac{1}{2} \nabla |\nabla \psi|^{2} \right]$$
(10)

کُه 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]. (17) F = ∇(ρc_s^2) - F بنابراین با توجه به روابط (17,16) تانسور فشار عبارت از رابطه (18) است [17].

$$P = \left(\rho c_s^2 + \frac{G c^2}{2} \psi^2 + \frac{G c^4}{12} |\nabla \psi|^2 + \frac{G c^4}{6} (\psi \nabla^2 \psi)\right) I$$
$$-\frac{G c^4}{6} \nabla \psi \nabla \psi \qquad (1)$$

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

$$P_{\rm n} = \rho c_{\rm s}^2 + \frac{Gc^2}{2}\psi^2 + \frac{Gc^4}{12} \left[\alpha \left(\frac{d\psi}{dn}\right)^2 + \beta \psi \frac{d^2\psi}{dn^2} \right]$$
(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 $1 - = \alpha e^4 \nabla \psi \nabla \psi \nabla \psi$ (18) یعنی $/\psi \nabla \psi \nabla \psi \nabla \psi = 2$ $-Gc^4 \nabla \psi \nabla \psi \nabla \psi \nabla \psi$ (18) یعنی $/\psi \nabla \psi \nabla \psi \nabla \psi \nabla \psi$ 6، دارای جمله 21/2 - 12 است؛ بنابراین جمع این جمله با جمله 21/2 - 12 منجر به $1 - = \alpha$ میشود.

$$\int_{\rho_{g}}^{\rho_{1}} \left(p_{0} - \rho c_{s}^{2} - \frac{Gc^{2}}{2} \psi^{2} \right) \frac{\psi^{'}}{\psi^{1+\varepsilon}} d\rho = 0$$
(20)

که $p_0 = P_n$ 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].

DOR: 20.1001.1.10275940.1396.17.9.20.6]

¹ Right Hand Side (RHS)

² Carnahan-Starling

تانسور فشار ایجاد می شود. ضریب 2 = -2 نیز توسط جمله . همچنان باقی است. ضریب α کل عبارت از رابطه (22) است. $-Gc^4
abla \psi
abla \psi / 6$ $\alpha = \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = -1 - \lambda$ (22).در نتيجه با تغيير مقدار λ مقدار α و در نتيجه مقدار z نيز تغيير مى كند نیروی برهم کنش جدید و بهبود یافته عبارت از رابطه (23) است. $F_{\rm new} = F + \lambda \frac{Gc^4}{12} \nabla (|\nabla \psi|^2)$ (23)مشابه رابطه (18) رابطه تانسور فشار جدید با نیروی بهبود یافته به صورت رابطه (24) خواهد بود. $\nabla \cdot P_{\text{new}} = \nabla (\rho c_{\text{s}}^2) - F_{\text{new}}$ (24)با توجه به این که جمله $\lambda Gc^4
abla (|
abla \psi|^2)$ به صورت گرادیان است و با توجه به رابطه (24) جمله $2/12 = -\lambda G c^4 |
abla \psi|^2$ به تانسور فشار اوليه اضافه شده و تانسور فشار جديد به صورت رابطه (25) اصلاح مي شود. $P_{\text{new}} = \left(\rho c_{\text{s}}^2 + \frac{Gc^2}{2}\psi^2 + (1-\lambda)\frac{Gc^4}{12}|\nabla\psi|^2\right)$

$$+\frac{Gc^{4}}{6}(\psi\nabla^{2}\psi)\bigg)I - \frac{Gc^{4}}{6}\nabla\psi\nabla\psi$$
(25)

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

$$\varepsilon = \frac{-2\alpha}{\beta} = 1 + \lambda \tag{26}$$

با تغییر پارامتر λ میتوان مقدار ع 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 12/(²|√µ|)∂*Gc*⁴ از روابط (28,27) استفاده میشود [3]:

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

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

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

3- نتایج شبیهسازی و بحث

1-3- سازگاری ترمودینامیکی

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

$$\begin{split} \rho &= \rho_{\rm g} + \frac{\rho_{\rm l} - \rho_{\rm g}}{2} [\tanh(y_1) - \tanh(y_2)] \end{split} \tag{29}$$

<b

$$\int_{\rho_{\rm g}}^{\rho_{\rm l}} \left(p_0 - P_{\rm EOS} \right) \frac{1}{\rho^2} d\rho = 0 \tag{21}$$

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 $P_{\rm EOS}$ = شرط دوم این است که معادله حالت توسط رابطه $P_{\rm EOS}$ = $pc_{\rm s}^2 + Gc^2 \psi^2/2$ حالت واقعی کارناهان- استارلینگ و یا هر معادله حالت واقعی دیگری، ارضا می شود که قطعاً شرط اول را نقض می کند. 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 دیگری، ارضا ناسازگاری ترمودینامیکی ^۱ می گویند. در مراجع [11,10] یکی از عوامل مهم ناپایداری مدل شان و چن با استفاده از طرح نیرویی گااو 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 ماكسول يعنى رابطه (21) دست يافت كه نتيجه آن افزايش 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 $\psi'/\psi^{1+arepsilon}$ هرگز برابر با $1/
ho^2$ نخواهد شد. با این وجود اگر امکان تغییر مقدار پارامتر z در رابطه (20) فراهم شود می توان 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]. همان طور که یاد شد در مدل اولیه مقدار پارامتر sثابت و برابر با یک است و امکان تغییر آن وجود ندارد که همین موضوع دلیل اصلی ناپایدری آن است. در ادامه شیوه جدید مطرح شده در این مقاله جهت متغير كردن اين پارامتر مهم بيان مىشود.

همانطور که بیان شد $\epsilon = -2\alpha/\beta$ تعریف می شود که در آن با توجه به رابطه (19)، α جمع ضرایب جملات دارای $(d\psi/dn)^2 (\phi/dn)$ و β جمع ضرایب γdu (19)، α جمع ضرایب جملات دارای ψ/dn^2 است که از تانسور فشار به دست می آیند؛ بنابراین اگر بتوان α را متغیر کرد می توان مقدار پارامتر σ را نیز کنترل و تنظیم نمود.

یکی از جملاتی که در بسط سری تیلور نیروی برهم کنش T یعنی رابطه (16) دیده میشود جمله 12/(²| Ψ |) ∇ - است. رابطه تانسور فشار با نیروی برهم کنش مطابق رابطه (18) است. طبق این رابطه هر جمله از نیروی T که به صورت گرادیان یک عبارت باشد، آن عبارت جذب تانسور فشار میشود که جمله 21/(²| Ψ |) ∇ - یکی از آنهاست و به همین دلیل عبارت 21/2²| Ψ [Ψ] کار در تانسور فشار ظاهر شده است. از سوی دیگر برای سطح تخت این جمله برابر با 21/2⁽¹ Ω) است و بنابراین طبق رابطه سطح تخت این جمله برابر با 21/2⁽¹ Ω) ایده به ذهن نویسندگان این مقاله (19) ایجاد ضریب 1 = n می کند. این ایده به ذهن نویسندگان این مقاله رسیده است که با اضافه کردن جمله 21/($|\nabla \Psi|$

148

¹ Thermodynamic inconsistency

به حالت تعادل ثبت می شود. نتایج شبیه سازی در جدول 1 آورده شده است. در این نتایج پارامتر a در معادله حالت برابر با a=0.5 بوده مگر آن که بیان شود. با توجه به جدول 1 ملاحظه می شود که با افزایش مقدار λ از صفر به 1.5 پايدارى مدل افزايش پيدا كرده است، ولى مقادير چگالى 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.

3-2- ارزيابي قانون لاپلاس براي 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 مى شود [1].

$$\rho = \frac{\rho_{1} + \rho_{g}}{2} - \frac{\rho_{1} - \rho_{g}}{2} \left\{ \tanh\left[\frac{2(\sqrt{(x - x_{0})^{2} + (y - y_{0})^{2}} - R_{0})}{5}\right] \right\}$$
(30)

که در آن x₀ و y₀ 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 3-1 است.

شكل 1 نمودار اختلاف فشار داخل و بيرون قطره بر حسب معكوس شعاع آن را نشان میدهد که بیانگر رابطه خطی بین آنهاست. این موضوع با قانون لاپلاس يعنى رابطه $\Delta P = \sigma/R_0$ تطابق دارد كه در آن σ كشش سطحى و شعاع قطره است؛ بنابراین شیب این نمودار بیانگر مقدار کشش سطحی R_0 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 $v_{\rm l}=0.0067$ ثابت بوده، $v_{
m g} = v_{
m l}$ و بار دیگر بار با $v_{
m g} = v_{
m l} = 0.0067$ و ار دیگر $v_{
m g}$ شرایط، شبکه، شرایط، است. اندازه شبکه، شرایط $v_{\rm l}=0.033$ مرزی و پارامترهای ورودی نیز مشابه قسمت 3-2 است.

جدول 1 بررسی سازگاری ترمودینامیکی مدل حاضر Table 1 Investigation of thermodynamic consistency of the current

model.				
بايع به گاز	نسبت چگالی م	گالی مایع به گاز	نسبت چ	
قانون	مدل عددی حاضر	مدل عددی حاضر	مدل اوليه	نسبت
ماكسول	$\lambda = 2.65$	$\lambda = 1.5$	$\lambda = 0$	دما
0.3072/ 0.0216	0.3071/0.0211	0.3057/ 0.0156	0.3032/ 0.0075	0.8
0.3581/ 0.0093	0.3582/0.0092	0.3571/0.0025	NaN	0.7
0.3823/ 0.0056	0.3823/ 0.006	0.3817/ 0.0004	NaN	0.65
0.4061/ 0.003	0.4062/0.0029 (a = 0.25)	0.4059/ 0.0002	NaN	0.6
0.43/ 0.0015	0.43 / 0.0015 (a= 0.22)	NaN	NaN	0.55
0.4541/ 0.00063	0.4541/0.00061 (a=0.17)	NaN	NaN	0.5
0.4786/ 0.0002	0.4786/ 0.00019 (<i>a</i> = 0.13)	NaN	NaN	0.45



Fig. 1 Evaluation of Laplace law for a droplet

شكل 1 ارزيابي قانون لاپلاس براي قطره نتایج شبیهسازی پس از گذشت 5000 گام زمانی در شکل 2 آورده شده است. همان طور که در نتایج ملاحظه می شود مقدار حداکثر سرعت های ساختگی از مقدار $u_{\rm s}=0.025$ از مقدار $u_{\rm s}=0.025$ که در آن لزجت سینماتیک گاز برابر با لزجت مايع است، به مقدار 0.007 در شكل 2b كه در آن لزجت سينماتيك 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 مي کند.

4-3- شبیهسازی شکستن سد مایع

در این قسمت به منظور اعتبارسنجی کامل تر مدل عددی پیشنهادی مسأله معروف شکستن سد مایع شبیهسازی شده و نتایج آن با نتایج آزمایشگاهی مارتین و مویس [21] مقایسه می شود. بدین منظور یک ستون مربعی از مایع به طول و ارتفاع r=100 و در نسبت به ابعاد 150 □ 300 و در نسبت دمای 0.6 (نسبت چگالی 140) با شرط مرزی دیوار برای مرزهای پایین و چپ، لغزش آزاد ا برای سطح بالا و شرط مرزی باز ۲ برای سطح سمت راست، در نظر گرفته شده است. در این مسأله دو نیروی دیگر یعنی نیروی $F_{\rm gr} =
ho g$ برهم کنش سیال- جامد با رابطه (31) و نیروی جاذبه با رابطه $F_{\rm gr}$ اضافه می شوند [20]، که g = 5E - 05 در واحد شبکه بولتزمن است.

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

که در آن S روی سطح جامد برابر با یک و در غیر آن صفر است. $ho_{
m w}$ نیز چگالی مجازی سطح جامد است که با تغییر مقدار آن می توان مقدار آبدوست بودن سطح را تغيير داد.

¹ free slip ² open boundary condition



Fig 2 Evaluation of the spurious velocities around the interface of a droplet at v_1 =0.0067 and T=0.45 T_c ; a- $v_g = v_1$, b- v_g =5 v_1 . $v_1 = 0.0067$, and T=0.45 T_c ; a- $v_g = v_1$, b- $v_g = 5v_1$. $v_1 = 0.0067$, and $T = 0.45 T_c$. $v_g = 5v_1 - v_g = v_1$.

مایع در اثر شکستن سد شروع به حرکت میکند که نتایج آن در شکل 3 نشان داده شده است. مهم ترین پارامتر تأثیرگذار در این مسأله نسبت g/r و یا به عبارت دقیق تر زمان بی بعد $t^* = t\sqrt{g/r}$ است که در آن r طول و ارتفاع ستون مایع و t زمان است. نقش لزجت و کشش سطحی در این مسأله ناچیز است [21]. با این وجود برای نشان دادن پایداری مدل حاضر لزجت مایع در این شبیهسازی مقداری نسبتاً پایین و برابر با 0.0067 = v و لزجت گاز برابر با 0.0167 = $v_{\rm g}$ 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 بی بعد طول لبه موج، $Z^* = Z/r$ و در شکل 5 مقدار بی بعد ارتفاع موج، $H^* = H/r$ استخراج شده از نتایج شبیه سازی با نتایج آزمایشگاهی مارتین و مویس مقایسه شده است. همان طور که ملاحظه می شود تطابق به نسبت خوبی بین نتایج شبیه سازی و آزمایشگاهی وجود دارد.

4- نتیجه گیری

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

لزجتهای کم ارائه شد که در نسبت لزجتهای دینامیک بالا نیز پایدار است. این مدل بهبود داده شده بر پایه مدل یک جزیی، 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.



شکل 3 تصاویر شبیهسازی مسأله شکستن سد مایع



Fig. 4 Comparison between simulation results and experimenal 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 بىبعد لبه موج



Fig. 5 Comparison between simulation results and experimenal data of Martin and Moyce [21] for the dimensionless wave height شکل 5 مقایسه بین نتایج شبیهسازی و نتایج آزمایشگاهی مارتین و مویس [21] براي ارتفاع بيبعد 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 یک زمانه یا چند زمانه است. نتایج اعتبارسنجی نشان میدهد که مدل ارائه شده در این مقاله از پایداری و دقت خوبی برخوردار بوده و درنتیجه میتوان از آن برای شبیهسازی مسائل مختلف جریان دوفاز و جریانهای با سطح آزاد بهره برد.

5- فهرست علايم

- a, b پارامترهای معادله حالت کارناهان استارلینگ
 - اندازه سرعت شبکه (lu ts⁻¹) С
 - (lu ts⁻¹) سرعت صوت در شبکه (c_s
 - بردار سرعت گسسته (lu ts⁻¹) е
 - تابع توزيع ذره (mu lu⁻³) f
 - نيروى برهم كنش سيال- سيال (mu lu ts⁻²) F
 - (mu lu ts⁻²) نیروی برهم کنش سیال جامد F_{solid}

- شتاب جاذبه (lu ts⁻²) g
- ضريب مرتبط با قدرت برهم كنش G
 - H ارتفاع موج (lu)
 - ماتريس واحد I
 - ترم برخورد در فضای مومنتم m
 - ماتريس تبديل М
 - فشار (mu lu⁻¹ ts⁻²) Р
 - (mu lu⁻¹ ts⁻²) فشار بحرانی P_{c}
 - طول و ارتفاع ستون مايع (lu) r
 - ثابت گاز در معادله حالت R
 - (lu) شعاع قطره R_0
 - جمله نيرو S
- زمانهای آرامش ماتریس آرامش قطری s₈ تا s₈
 - زمان (ts) t
 - دما (tu) Т
 - (tu) دمای بحرانی T_c
 - بردار سرعت ماکروسکوپیک (lu ts⁻¹) V
 - ضريب وزن w
 - x بردار موقعیت مکانی
 - محور افقى x
 - y محور عمودی
 - Z طول لبه موج

علايم يوناني

```
(lu<sup>2</sup> ts<sup>-1</sup>) لزجت سينماتيک v
```

- پارامترهای موجود در فشار نرمال α, β, ϵ
 - گرادیان V
 - (lu² ts⁻¹) لزجت حجمی ξ
 - چگالی (mu lu⁻³) 0
 - τ زمان آرامش
 - ماتریس زمان آرامش Λ
 - ضریب تنظیم چگالی فازها λ
 - کشش سطحی (mu ts⁻²)
 - σ
 - تابع جرم مؤثر ψ
 - بالانويسها
 - تعادلى eq
 - بیانگر فضای مومنتم Λ
 - نماد مقدار بیبعد *
 - زيرنويسها
 - جهت α
 - گاز g
 - جاذبه gr
 - مايع 1
 - نرمال n
 - صوت یا سرعت ساختگی S
 - ديوار W
 - e انرژی
 - ζ مجذور انرژی

- [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
- [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. Kharmiani, 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 نفارسی)
- [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, DT 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. Kharmiani, 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.

j مومنتم

q شار انرژی

6- مراجع

- 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
- [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.