



مقایسه و توسعه مدل چند فازي شبه پتانسیل برای معادلات حالت مختلف

سید میثم خاتون آبادی¹، محمود اشرفی زاده^{2*}

1- کارشناس ارشد، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

2- دانشیار، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

* اصفهان، صندوق پستی 841568311، mahmud@cc.iut.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 19 مرداد 1394

پذیرش: 08 آبان 1394

ارائه در سایت: 14 آذر 1394

کلید واژگان:

روش شبکه بولتزمن

جریان های چند فازي

مدل شبه پتانسیلی

معادله حالت

چکیده

تاکنون مدل های متعددی به منظور ترکیب معادلات حالت با مدل شبه پتانسیل پیشنهاد شده است. در این مقاله، معادلات حالت مختلف بر پایه مدل گانگ و چنگ در جریان های تک جزئی - چند فازي به کمک روش شبکه بولتزمن بررسی شده است. در ابتدا، هشت معادله در 4 دسته طبقه بندی شده که شامل معادله حالت شان و چن، معادله حالت مکعبی، معادله حالت غیرمکعبی و معادله حالت ترکیبی مکعبی و غیرمکعبی می باشد، بررسی شده اند. نتایج این بررسی نشان می دهد که هر نوع از معادلات حالت به طور نسبی جریان های پارازیتی و بیشینه نسبت چگالی قابل دستیابی یکسانی دارند. به علاوه، اگرچه با انتخاب یک پارامتر وزنی مناسب برای هر معادله حالت خطای شبیه سازی به طور قابل ملاحظه ای کاهش می یابد، نتایج این بررسی نشان می دهد که دستیابی به یک پارامتر ثابت برای معادله حالت غیرمکعبی، غیرممکن است. بنابراین، ابتدا یک معادله برای پیش بینی پارامتر بهینه برای معادلات حالت شان و چن و مکعبی ارائه شده است. همچنین، یافته ها حاکی از آن است که معادله های غیرمکعبی، مکعبی و ترکیبی مکعبی و غیرمکعبی به ترتیب قابلیت استفاده در گستره وسیع تر دما و نسبت چگالی بزرگ تر را دارند. بنابراین در این مقاله، یک عبارت جدید برای محاسبه پارامتر وزنی مناسب که تابعی از دما است، در نظر گرفته شده است تا جایگزین پارامتر ثابت برای معادلات غیرمکعبی شود. نتایج به دست آمده با استفاده از این تابع، مطابقت بسیار خوبی با ساختار ماکسول (نتایج تئوری) حاصل از معادلات حالت را نشان می دهند.

Comparison and development of multiphase pseudo-potential model for various equations of state

Seyyed Meysam Khatoonabadi, Mahmud Ashrafizaadeh*

Department of Mechanical Engineering, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran.

* P.O.B. 841568311 Isfahan, Iran, mahmud@cc.iut.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 10 August 2015
Accepted 30 October 2015
Available Online 05 December 2015

Keywords:

Lattice Boltzmann method (LBM)
Multiphase Flows
Pseudo Potential Model
Equation of State

ABSTRACT

Numerous models have been proposed to incorporate various equations of state (EOS) into the pseudo potential model. This paper presents an investigation of different EOS types based on the Gong and Cheng model in multiphase-single component flows by the lattice Boltzmann method. Primarily, it is conducted to investigate eight EOS's classified in four categories; the Shan-Chen EOS, the cubic EOS, the non-cubic EOS, and the cubic and non-cubic combination EOS. The results show that each EOS type results in producing relatively similar spurious currents and has a maximum achievable density ratio. Although by choosing a proper beta parameter for every EOS the simulation errors decrease dramatically, our results show it is impossible to set a constant parameter for the non-cubic EOS. Therefore, a new equation is introduced to predict an efficient beta for the cubic and the Shan-Chen EOS's. It is also found that the non-cubic, cubic, and non-cubic and cubic combination EOS's have a wider temperature range and larger density ratios respectively. Hence, we determine a temperature dependent function for the beta parameter prediction instead of using a fixed value for the non-cubic EOS. The results are noticeably in better agreement with those of the Maxwell construction (theoretical results).

1- مقدمه

در چند دهه اخیر، پس از ابداع روش شبکه بولتزمن¹ [1]، بسیاری از محققان از این روش به منظور شبیه سازی در شاخه های مختلف علم مهندسی به ویژه جریان های پیچیده بهره برده اند. جریان های چند فازي به عنوان یکی از برجسته ترین مسائل در نظر گرفته می شوند و کاربردهای وسیعی در صنایع پتروشیمی، بویلرها، کندانسورها و همچنین طبیعت دارند [2,3]. به دلیل ماهیت مزوسکوپیک² جریان های چند فازي، روش شبکه بولتزمن ابزار

قدرتمندی برای تحلیل این مسائل است [4]. چراکه این روش بر پایه معادلات جنبشی مزوسکوپیک بوده و می تواند فعل و انفعالات بین ذره ای را به طور مستقیم با هم ترکیب کند.

مدل های چند فازي بسیاری با استفاده از روش شبکه بولتزمن ارائه شده اند، اما به طور کلی آن ها را در سه دسته تقسیم بندی می نمایند. اولین مدل به نام مدل گرادیان رنگ شناخته می شود که توسط گانستنسن و همکاران [5] ارائه شده است. در این مدل از تغییرات رنگ برای جداسازی فازها استفاده شده است. مدل بعدی، شبه پتانسیل شان-چن است که بر پایه فعل و انفعالات دوربرد توسط شان و چن [6] پیشنهاد شده است. و بالاخره

1- Lattice Boltzmann Method (LBM)
2- Mesoscopic

همچنین یک رابطه ساده برای پیش بینی مقادیر پارامتر مناسب برای معادلات مکعبی و شان و چن پیشنهاد شده است. به علاوه نتایج این بررسی نشان می دهد که معادلات غیر مکعبی نسبت چگالی به مراتب بالاتری نسبت به سایر معادلات حالت دارند. این در حالی است که به کمک یک پارامتر وزنی ثابت نمی توان به نتایج دقیقی در تمام دماها دست یافت. در نتیجه عبارتی برای این پارامتر به صورت تابعی از دما جهت ارتقای دقت مدل مربوط به معادلات غیر مکعبی پیشنهاد شده است. با وجود رسم نمودار فازی آب به کمک معادلات حالت مختلف و مقایسه آن ها با مقادیر تئوری، در نهایت نیز با انجام دو آزمون، صحت برنامه عددی اعتبارسنجی می شود.

2- مدل شبه پتانسیل

ایده اصلی روش شبکه بولتزمن، حل یک معادله واحد برای محاسبه تابع توزیع ذرات است. در روش شبکه بولتزمن مشخصات از طریق توابع توزیع ذره توصیف می شوند. روش شبکه بولتزمن برای سیال دما ثابت با جمله معروف برخورد بهاتنکار-گراس و کروک [15] و ترم نیروی خارجی به صورت رابطه (1) بیان می شود:

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

که در آن f_i و f_i^{eq} به ترتیب مربوط به توابع توزیع و تابع توزیع تعادلی ذره در موقعیت مشخص x ، زمان t ، زمان آسایش τ و ΔF_i مربوط به نیروهای حجمی است. مدل شبه پتانسیل ترم نیرو، عکس العمل های مولکولی بین دو فاز یا دو مؤلفه را مدل می کند. با اضافه کردن یک نیرو مربوط به فعل و انفعالات بین ذره ای جدایش و تفکیک دو فاز اتفاق می افتد. در مقایسه با مدل سرعت انتقالی که اثرات فعل و انفعالات سطح مشترک را در u^{eq} وارد معادله ی شبکه بولتزمن می کند، مدل نیرویی اختلاف دقیق با نیروی حجمی ΔF_i مشخص می شود که از رابطه (2) به دست می آید [13]:

$$\Delta F_i(x, t) = f_i^{eq}\left(\rho, u + \frac{F_i(x, t) \delta t}{\rho}\right) - f_i^{eq}(\rho, u) \quad (2)$$

متغیرهای U و ρ سرعت و چگالی در گره مورد نظر هستند. و f_i^{eq} تابع توزیع تعادل ذرات است که از رابطه (3) به دست می آید:

$$f_i^{eq}(x, t) = w_i \rho(x, t) \left[1 + \frac{e_i \cdot u}{c_s^2} + \frac{(e_i \cdot u)^2}{2c_s^4} + \frac{u^2}{2c_s^2} \right] \quad (3)$$

در این معادله c_s سرعت صوت در شبکه بولتزمن است. مقدار سرعت صوت از رابطه $c_s = c/\sqrt{3}$ بدست می آید. که $C = \delta x / \delta t = 1$ ، δx فاصله مکانی و δt فاصله زمانی شبکه هستند. با انتخاب $C = \delta x / \delta t = 1$ برابر یک می شود. همچنین ω_i فاکتورهای وزنی و e_i سرعت های گسسته شبکه می باشند. برای مثال در این مطالعه، شبکه D2Q9 و مدل اختلاف دقیق به کار گرفته شده اند، بنابراین e_i و ω_i به صورت رابطه های (4) و (5) ارائه شده اند:

$$e_i = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \quad (4)$$

$$\omega_i = \begin{cases} \frac{4}{9} & i = 0 \\ \frac{1}{9} & i = 1, 2, 3, 4 \\ \frac{1}{36} & i = 5, 6, 7, 8 \end{cases} \quad (5)$$

بعد از هر مرحله، چگالی میکروسکوپی و سرعت از روابط (6) و (7) به دست می آیند:

سویفت و همکاران [7] مدلی بر پایه انرژی آزاد به دست آوردند که معادلات آن اساس فیزیکی دارند. از میان این مدل ها، مدل شبه پتانسیل شان-چن توجه بیشتری را به خود جلب کرده است که دلیل آن کارایی محاسباتی بالا و سادگی درک مفاهیم این مدل است. از دیگر ویژگی های این مدل می توان به قابلیت استفاده برای نسبت چگالی بالا (گستره وسیع دمایی) اشاره کرد.

اولین بار شان و چن مدل شبه پتانسیل را در سال 1993 در شبیه سازی های خود در نظر گرفتند [6]. در مدل شان و چن، یک مؤلفه نیرو در معادله شبکه بولتزمن قرار داده شده که از طریق آن فعل و انفعالات غیر محلی بین ذره ای اعمال شده بین شبکه های همسایه به وسیله یک تابع شبه پتانسیلی (جرم مؤثر) وارد معادلات می شود. این تابع فرم معادله حالت سیال و تغییر فاز را کنترل می کند. همچنین جدایش فازها به طور خودکار در حالت دوفازی به کمک این تابع اتفاق می افتد.

مدل اصلی شان-چن معایبی نظیر جریان پارازیتی بزرگ، عدم سازگاری ترمودینامیکی و پایداری کم در نسبت چگالی بالا دارد. به همین دلیل محققان زیادی در راستای بهبود عملکرد مدل تلاش کرده اند. فرم تابع شبه پتانسیل نقش بسزایی در این مدل ایفا می کند [2، 8، 9]. ژانگ و چن یک ترم نیرویی را به منظور ترکیب معادلات حالت متنوع پیشنهاد کرده اند [10]. یوان و شافر تغییر کوچکی در تابع شبه پتانسیل ایجاد کردند که به افزایش دقت و گستره دمایی به میزان قابل توجه انجامید [11]. با اینکه انتخاب یک معادله حالت مناسب موجب افزایش گستره دمایی قابل استفاده و نسبت چگالی می شود، اما هنوز معایبی در مدل وجود دارد. برای مثال، نمودارهای فازی به دست آمده از شبیه سازی با ساختار ماکسول متفاوت اند، این تفاوت در دماهای پایین و به ویژه در چگالی بخار افزایش می یابد [12]. از سوی دیگر، جریان های پارازیتی با کاهش دما به طور چشم گیری افزایش می یابند که همین امر موجب شکست پایداری شبیه سازی می شود. کوپرشتوخ و همکاران یک مدل اختلاف دقیق به منظور افزایش نسبت چگالی و بهبود دقت این مدل پیشنهاد کرده اند [13]. این مدل نیرویی نتایج قابل قبولی را ارائه می دهد، اما به خواص سیال محدود است و در محدوده ی پایین سرعت قابل استفاده است. به علاوه، مشخصه ای که مدل اختلاف دقیق را از دیگر مدل ها متمایز می کند استقلال از زمان آسایش است. به همین دلیل، تمام محققان بعد از کوپرشتوخ که پیرامون این موضوع مطالعاتی انجام داده اند، از مدل اختلاف دقیق استفاده کرده اند. گانگ و چنگ یک پارامتر وزنی مناسب بر اساس مدل اختلاف دقیق پیشنهاد کرده اند [12]. نتایج بررسی آن ها نشان داده است که استفاده از این پارامتر دقت چگالی بخار را به طور قابل ملاحظه ای ارتقا می دهد. اما آن ها فقط برای سه معادله شبیه سازی انجام داده اند و به چگونگی پیش بینی پارامترهای وزنی اشاره نکرده اند. اخیراً، هو و همکاران یک ثابت k را در معادله حالت ضرب نموده اند و نسبت چگالی و گستره دمایی بالاتری را به دست آورده اند [14]. آن ها همچنین ادعا کرده اند که مدل ارائه شده برای تمامی معادلات حالت مفید است، اما به دلیل اثرات آشکار این ثابت روی کشش سطحی، کشش سطحی نسبتاً کوچک است. یکی از کامل ترین بررسی ها در مورد این مدل توسط چن و همکاران انجام شده است که در آن ابعاد مختلفی از مدل های شبه پتانسیل در نظر گرفته شده است [2].

در این مطالعه، مدل توسعه یافته گانگ و چنگ در نرم افزار منبع باز پالابوس¹ به منظور یافتن یک مدل فراگیر و جامع و طبقه بندی معادلات حالت متداول و پرکاربرد بر اساس گستره دمایی و نسبت چگالی استفاده شده است.

متفاوت است ولی بر اساس ادعای آنها مقدار به دست آمده برای تمام دماها قابل استفاده می باشد [12]. اگرچه این پارامتر تغییر زیادی در چگالی بخار ایجاد می کند اما نمی تواند نسبت چگالی را افزایش دهد. در مدل گانگ و چنگ پارامتر بتا یک پارامتر تعیین کننده است که تأثیر زیادی بر چگالی فاز بخار به ویژه در دمای پایین دارد. همان طور که بررسی های گانگ و چنگ نشان داده شده است، این پارامتر توانایی ارائه نتایج نسبتاً دقیق را دارد. علی-رغم اهمیت زیاد این پارامتر، متأسفانه در بررسی های گذشته تنها به این نکته بسنده شده است که بتا از شبیه سازی ها به دست می آید و برای همه معادلات حالت قابل استفاده است. علاوه بر آن در این مورد پارامتر G برای گروه های متفاوت از رابطه (13) به دست می آید:

$$G(x, x') = \begin{cases} 2g & |x - x'| = 1 \\ \frac{g}{2} & |x - x'| = \sqrt{2} \\ 0 & \text{در سایر حالات} \end{cases} \quad (13)$$

3- معادله حالت

در این بخش مختصراً به معرفی انواع معادله حالت پرداخته شده است. معادلات حالت رابطه بین سه خاصیت مستقل چگالی، دما و فشار را بیان می کنند، به گونه ای که بتوان با دانستن دو پارامتر مستقل، خاصیت دیگر را برای سیال مورد نظر با دقت قابل قبول محاسبه نمود. همان طور که انتظار می رود در یک دمای مشخص معادله حالت یک منحنی است که تغییرات دو پارامتر فشار و چگالی را بر حسب یکدیگر نشان می دهد. ولی ازلحاظ فیزیکی یک ماده در دمای زیر بحرانی در دو حالت مایع و بخار می تواند یافت شود که هر کدام از این فازها نیز چگالی مشخصی دارند. جداول ترمودینامیکی نیز بر مبنای همین چگالی ها بیان شده اند.

در روش شبکه بولتزمن معادله حالت برای یک گاز ایده آل به صورت رابطه (14) است:

$$p = \rho c_s^2 \quad (14)$$

که برای شبکه D2Q9، $c_s^2 = \frac{1}{3}$ ، این معادله حالت برای مدل کردن رفتار پیچیده دو فاز بیش از اندازه ساده است. به عبارت دیگر، این شکل توان شبیه سازی فرایند جدایش فازها را ندارد. بنابراین شان و چن [6] مدل دیگری که به تابع شبه پتانسیل وابسته است را پیشنهاد داده اند. با در نظر گرفتن رایج ترین تابع شبه پتانسیل به صورت رابطه (15)، معادله حالت پیشنهادی شان و چن 93 از رابطه (16) به دست می آید:

$$\psi = \rho_0 \left[1 - \exp\left(-\frac{\rho}{\rho_0}\right) \right] \quad (15)$$

$$p = \frac{\rho}{3} + \frac{c_0}{2} g \rho_0^2 \left[1 - \exp\left(-\frac{\rho}{\rho_0}\right) \right]^2 \quad (16)$$

ρ فشار و ρ_0 چگالی مرجع نامیده می شود و یک پارامتر دلخواه است که در این مطالعه برابر 1 است [16]. معادله حالت شان و چن یک معادله تئوری نیست زیرا دما به طور ضمنی از پارامتر g به صورت $T = -1/g$ به دست می آید و منجر به ناسازگاری ترمودینامیکی می شود. به عبارت دیگر در صورتی که از این تابع استفاده گردد چگالی های به دست آمده در دمای مورد نظر با مقادیر موجود در جداول ترمودینامیکی تفاوت قابل توجهی دارد. علاوه بر تابع شبه پتانسیل که در معادله (15) اشاره شده است، توابع دیگری نیز پیشنهاد شده اند که به دلیل نسبت چگالی پایین تر آن ها به طور گسترده استفاده نشده اند. در شاخه بررسی معادلات حالت، پارامترهای بحرانی نقش مهمی دارند چون خواص در مقایسه با آن ها تعیین می شوند. برای تخمین پارامترهای بحرانی باید روابط (17) ارضا شوند:

$$\rho = \sum_i f_i = \sum_i f_i^{eq} \quad (6)$$

$$\rho u = \sum_i e_i f_i + \frac{F \Delta t}{2} \quad (7)$$

ویسکوزیته سینماتیکی نیز در شبکه D2Q9 با زمان آسایش τ به شکل معادله (8) رابطه دارد:

$$\nu = \frac{(\tau - 0.5)}{3} \quad (8)$$

دو عبارت نیروی اصلی در مدل شبه پتانسیل شان - چن استفاده شده اند. مورد اول یک نیروی عکس العملی است که توسط ژانگ و همکارانش [10] معرفی شده و به صورت رابطه (9) تعریف می شود:

$$F(x, t) = - \sum_{x'} \frac{G(x, x')}{c_0 g} U(x')(x - x') \quad (9)$$

که $U = P - \rho c_s^2$ و $G(x, x')$ تابع گرین نامیده می شود که شدت عکس العمل ها و قدرت بین ذرات را بازتاب می کند که تابعی از یک عدد ثابت مانند g است. پارامتر C_0 به ساختار شبکه مربوط است و برای شبکه D2Q9، $C_0 = 6$ و ρ از معادله حالت مورد نظر به دست می آید. در این مورد، دم - سم به طور صریح از طریق معادله حالت وارد مسئله می شود. در معادله (9)، x' گره نزدیک به گره ای است که محاسبات برای آن انجام می شود.

یوان و شافر نیز از یک نیرو به صورت رابطه (10) استفاده کردند که همان نیروی استفاده شده در مدل اصلی شان و چن است:

$$F = - \psi(x) \sum_{x'} G(x, x') \psi(x')(x - x') \quad (10)$$

در رابطه (10)، $\psi(x)$ تابع شبه پتانسیل است و در مدل اصلی شان - چن مقدار این تابع بر روی نتایج تأثیر دارد، اما با معرفی تابع پتانسیل جدید که یوان و شافر پیشنهاد کردند، تابع گرین باید در یک گستره مشخص باشد تا جدایش اتفاق بیفتد و اندازه G بر روی چگالی نهایی دو فاز بی تأثیر می شود. این تابع به صورت رابطه (11) بیان شده است:

$$\psi = \sqrt{\frac{2(p - \rho c_s^2)}{c_0 g}} \quad (11)$$

همان طور که قبلاً بیان شد پارامتر g یک عدد ثابت است و مقدار آن در مقادیر چگالی تأثیری ندارد و تنها باید در یک محدوده خاص قرار گیرد تا جدایی بین دو فاز اتفاق بیفتد. این دو ترم نیرویی فعل و انفعالی در بسیاری از تحقیقات مورد استفاده قرار گرفته اند. تقریباً تمامی محققان معتقدند که هر دو مدل در چگالی بخار خطای نسبتاً بزرگی دارند. بنابراین، برای کاهش خطای شبیه سازی برخی از محققان ترکیبی از دو طرح را پیشنهاد کرده اند. نتایج آن ها انطباق خوبی با نتایج تئوری برخوردار است [12-14].

گانگ و چنگ [12] نیروی فعل و انفعالی جدیدی پیشنهاد کرده اند که در آن از ترکیب دو طرح مشابه با آنچه کوپرشتوخ و همکارانش ارائه دادند، استفاده شده است و یک پارامتر برای بهبود دقت پیش بینی چگالی بخار، بکار رفته است. آن ها تأکید کردند که این مدل برای تمام معادلات حالت قابل استفاده است. جمله نیرویی این مدل به صورت رابطه (12) است:

$$F(x, t) = \beta \psi(x) \sum_{x'} G(x, x') \psi(x')(x - x') - \frac{1 - \beta}{2} \times \sum_{x'} G(x, x') \psi(x')(x - x') \quad (12)$$

که در آن β فاکتور به دست آمده از شبیه سازی است و برای هر معادله حالت

که ω فاکتور بی مرکز وابسته به نوع سیال و T_- دما می باشد. به این معنی که سیال مورد نظر نسبت به سیال مرجع که معادله حالت برای آن به دست آمده چه مقدار تفاوت دارد. بطور مثال، مقدار این پارامتر برای آب برابر 0.334 بدست آمده است. البته پس از آن نیز معادلات دیگری مشابه رابطه (20) برای افزایش دقت نتایج ارائه شده است.

به علاوه ریس و همکاران ترم دافعه معادله حالت واندروالس را اصلاح کرده اند و کارایی مدل را ارتقا داده اند. محققان دیگری هم معادلات حالت غیرمکعبی را بررسی کرده اند. معادلات حالت گانگنیم و کارناهان استارلینگ [19] در این گروه کاربرد بیشتری دارند.

کارناهان و استارلینگ [20] ترم جاذبه معادلات ردلیک-کوانگ و ترم دافعه معادله خود را با یکدیگر به طور همزمان استفاده کردند و معادلات ترکیبی را به وجود می آورند. معادلات ترکیبی متعددی وجود دارند، اما معادله کارناهان استارلینگ با ردلیک کوانگ و معادله ترکیبی کارناهان استارلینگ با پنگ رایینسون کاربردهای گسترده تری در مهندسی دارند.

به منظور روشن شدن تأثیر نوع معادله حالت در کارایی مدل شبه پتانسیل شان - چن، از هر نوع معادلات حالت دو نمونه انتخاب شده است. معادلات حالت مختلف در جدول 1 ساده سازی و نشان داده شده است. پارامترهای بحرانی با استفاده از معادله (17) محاسبه شده اند.

در شبیه سازی مقدار ثابت های معادلات حالت برای سیال آب به صورت $a = 1, b = 4, R = 1$ برای معادلات غیرمکعبی و برای سایر معادلات حالت $a = 2/49, b = 2/21, R = 1$ انتخاب شده است.

4- محاسبه ضریب وزنی

ضریب β مورد استفاده در معادله (12) به منظور افزایش دقت چگالی های حاصل از شبیه سازی در مقایسه با مقادیر بدست آمده از معادله حالت مورد

$$\frac{\partial p}{\partial \rho} = \frac{\partial^2 p}{\partial \rho^2} = 0 \quad (17)$$

بنابراین به عنوان مثال برای معادله حالت شان و چن 93 مقدار چگالی بحرانی ρ_{cr} و دمای بحرانی T_{cr} از روابط (18) تعیین می شود:

$$T_{cr} = -4.5\rho_0, \rho_{cr} = \rho_0 \ln 2 \quad (18)$$

در علوم مختلف از معادلات حالتی استفاده می گردد که دقت بسیار خوبی در مقایسه با نتایج آزمایشگاهی دارند. به عنوان مثال معادله حالت واندروالس یکی از معادلات شناخته شده است. در این معادله فرض شده که بین ذرات سیال نیروهای عکس العملی به صورت جاذبه و دافعه وجود دارند و فشار را به صورت رابطه (19) در نظر گرفت:

$$p = p_{att} + p_{rep} = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - a\rho^2 \quad (19)$$

مقادیر a و b به ترتیب پارامتر جاذبه و دافعه نام دارند اغلب مطالعات موفق انجام گرفته بر روی اصلاح ترم های جاذبه و دافعه تمرکز کرده اند. بنابراین معادلات حالت وان در والس به سه گروه تقسیم می شوند: معادلات حالت با ترم جاذبه اصلاح شده یا مکعبی، معادلات حالت با ترم دافعه اصلاح شده یا غیرمکعبی، معادلات حالت ترکیبی مکعبی و غیرمکعبی.

ردلیک و کوانگ [17] معادله حالتی به کمک اصلاح جمله جاذبه معادله حالت واندروالس ارائه کردند. پس از آن، برخی محققان با اعمال تغییرات در این رابطه، معادلاتی با دقت بالاتر ارائه داده اند. البته اصلاحات اصلی بر روی معادله حالت مکعبی توسط پنگ و رایینسون [18] انجام شده است. آن ها یک پارامتر α که اثرات نوع ماده بر روی معادله حالت را منعکس می کند به صورت رابطه (20) معرفی کردند:

$$\alpha(\omega, t) = [1 + (0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2) \times (1 - \sqrt{T/T_{cr}})] \quad (20)$$

جدول 1 پارامترهای مربوط به معادلات حالت مختلف

Table 1 Parameters of different equations of state

ردیف	معادله حالت	ترم دافعه	ترم جاذبه	a	b
1	شان-چن 93 (SC)	$p = \frac{\rho}{3} + \frac{c_0}{2} g \rho_0^2 \left[1 - \exp\left(-\frac{\rho}{\rho_0}\right) \right]^2$	-	-	-
2	وان در والس (vdW)	$\frac{\rho RT}{1 - b\rho}$	$a\rho^2$	$\frac{27R^2T_{cr}^2}{64p_{cr}}$	$\frac{RT_{cr}}{8p_{cr}}$
3	پنگ-رایینسون (PR)	$\frac{\rho RT}{1 - b\rho}$	$\frac{a\alpha(T, \omega)\rho^2}{(1 + 2b\rho - b^2\rho^2)}$	$0.45724 \frac{R^2T_{cr}^{2.5}}{p_{cr}}$	$0.0778 \frac{RT_{cr}}{p_{cr}}$
4	ردلیک-کوانگ (RK)	$\frac{\rho RT}{1 - b\rho}$	$\frac{a\rho^2}{\sqrt{T(1 + b\rho)}}$	$0.42748 \frac{R^2T_{cr}^{2.5}}{p_{cr}}$	$0.08664 \frac{RT_{cr}}{p_{cr}}$
5	کارناهان-استارلینگ (CS)	$\frac{\rho RT(1 + \frac{b\rho}{4} + (\frac{b\rho}{4})^2 - (\frac{b\rho}{4})^3)}{(1 - \frac{b\rho}{4})^3}$	$a\rho^2$	$0.4963 \frac{R^2T_{cr}^2}{p_{cr}}$	$0.18727 \frac{RT_{cr}}{p_{cr}}$
6	گانگنیم (Gu)	$\frac{\rho RT}{(1 - \frac{b\rho}{4})^4}$	$a\rho^2$	$0.49002 \frac{R^2T_{cr}^2}{p_{cr}}$	$0.18284 \frac{RT_{cr}}{p_{cr}}$
7	ترکیبی کارناهان-استارلینگ و پنگ-رایینسون (CSPR)	$\frac{\rho RT(1 + \frac{b\rho}{4} + (\frac{b\rho}{4})^2 - (\frac{b\rho}{4})^3)}{(1 - \frac{b\rho}{4})^3}$	$\frac{a\alpha(T, \omega)\rho^2}{(1 + 2b\rho - b^2\rho^2)}$	$0.45724 \frac{R^2T_{cr}^{2.5}}{p_{cr}}$	$0.0778 \frac{RT_{cr}}{p_{cr}}$
8	ترکیبی کارناهان-استارلینگ و ردلیک-کوانگ (CSRK)	$\frac{\rho RT(1 + \frac{b\rho}{4} + (\frac{b\rho}{4})^2 - (\frac{b\rho}{4})^3)}{(1 - \frac{b\rho}{4})^3}$	$\frac{a\rho^2}{\sqrt{T(1 + b\rho)}}$	$0.42748 \frac{R^2T_{cr}^{2.5}}{p_{cr}}$	$0.08664 \frac{RT_{cr}}{p_{cr}}$

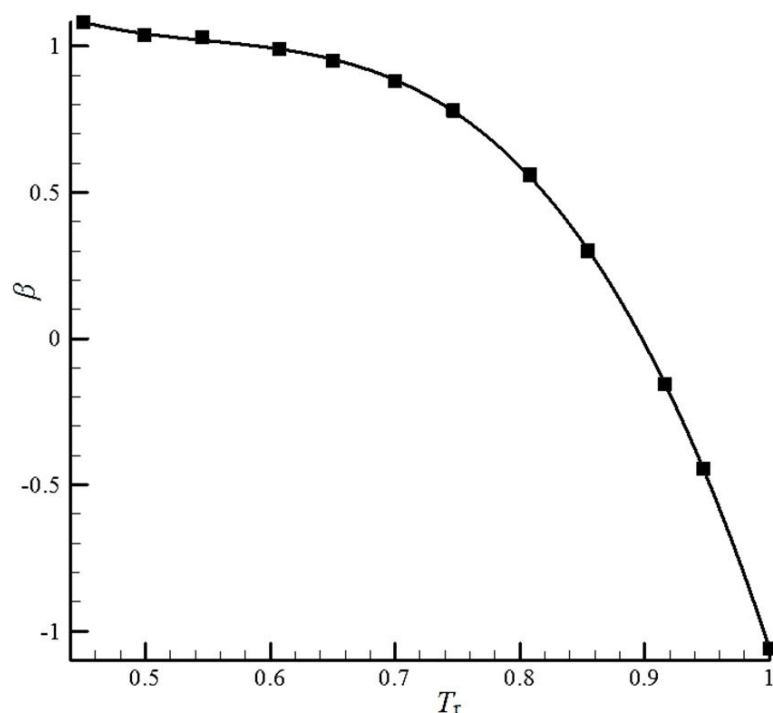


Fig. 1 Proper β coefficient in different temperatures

شکل 1 مقادیر ضریب β مناسب در دماهای مختلف

در رابطه (23)، T_r دما بی بعد می باشد. این رابطه برای تمام دماها قابل استفاده است. علاوه با استفاده از این معادله می توان ضرایب بتا برای سایر معادلات حالت که از نوع غیرمکعبی می باشند، نیز با دقت بالایی تخمین زد. دلیل اصلی این امر نیز به کمک ماهیت معادلات غیرمکعبی قابل درک است. زیرا معادلات مکعبی مختلف معمولاً در پیش بینی چگالی فاز مایع با یکدیگر اختلاف دارند و چگالی فاز بخار محاسبه شده به وسیله آن ها بسیار به هم نزدیک است [2]. این در حالی است که ضریب بتا در مدل گانگ و چنگ تأثیرات اندکی بر فاز مایع دارد و بیشترین اثر را بر چگالی بخار می گذارد. نمودارهای فازی حاصل از دو نمونه معادله حالت غیرمکعبی در بخش بعد نشان داده شده است.

5- شبیه سازی و نتایج

برای شبیه سازی و ترسیم نمودار فازی هر معادله ای حالت مشابه مقاله گانگ و چنگ [12] یک قطره کوچک ساکن در یک حفره مربعی، شبکه 81×81 در نظر گرفته شده است و شرایط مرزی برای هر دو جهت x و y متناوب (پریودیک) هستند. مدل به کار گرفته شده همان مدل گانگ و چنگ است که پارامترهای موثر آن در بخش قبل توضیح داده شده است. برای اطمینان از شرایط حالت پایدار شبیه سازی برای 40000 تکرار زمانی انجام گرفته است. نتایج در دو بخش اصلی نسبت چگالی (گستره دمایی) و جریان پارازیتی دسته بندی شده اند. در این پژوهش علاوه بر معادلات حالت که از توابع شبه پتانسیل اولیه بدست می آیند (معادلات حالت شان-چن)، معادلات حالت مکعبی، غیر مکعبی و ترکیب معادلات حالت مکعبی و غیر مکعبی مورد شبیه سازی قرار گرفته اند. در ضمن، هر نوع از معادلات حالت به صورت تابعی از نسبت چگالی به منظور درک تاثیر نوع معادله حالت بر روی موارد مختلف به طور جداگانه بررسی شده است.

از آنجا که مقایسه معادلات حالت مختلف با یکدیگر مد نظر است، لذا تمام پارامترها به صورت بدون بعد بکار گرفته می شوند. جهت این امر چگالی، دما و فشار بدون بعد به ترتیب به صورت $\rho_r = \rho/\rho_{cr}$ و $T_r = T/T_{cr}$ و $p_r = p/p_{cr}$ بی بعد می شوند.

5-1- گستره دمایی و نسبت چگالی

با توجه به جداول ترمودینامیکی آب، با کاهش دما نسبت چگالی افزایش می -

نظر (تئوری) کاربرد دارد. بررسی ها نشان می دهد که مقدار خطا بطور کلی به نوع معادله حالت و دما (نسبت چگالی) مورد نظر بستگی دارد. همچنین معادلات حالت بیان شده در بخش قبل مهم ترین معادلات مورد استفاده در علوم مختلف می باشند. علاوه بر آن ها معادلات حالت دیگری نیز وجود دارد که برای سیالات خاصی دقت بیشتری دارند. در نتیجه با توجه به گستردگی معادلات حالت دسته بندی آن ها و به دست آوردن روابط کلی برای هر گروه می تواند بسیار راهگشا باشد.

همان طور که در مراجع اشاره شده است ضریب بتای بهینه برای هر معادله حالت به کمک شبیه سازی به دست می آید [12-14]. لذا برای استفاده از هر معادله حالت باید شبیه سازی های متعددی انجام گیرد تا بتای مناسب به دست آید. جهت محاسبه یک رابطه واحد به منظور تخمین مقدار بتای بهینه برای تمام معادلات حالت شان-چن و مکعبی، در این مطالعه با توجه به ضرایب بتای به دست آمده از هر معادله حالت و روند تغییرات آن ها بر اساس چگالی و دمای بحرانی معادله حالت مورد نظر، در این مقاله مشابه ضرایب جاذبه و دافعه a و b ، شکل کلی به صورت معادله ی (21) برای آن پیشنهاد شده است:

$$\beta = \frac{K}{\rho_{cr}^\epsilon T_{cr}^\mu} \quad (21)$$

در رابطه (21) سه پارامتر K, ϵ, μ را می توان به کمک سه معادله حالت به دست آورد. برای این منظور از سه معادله حالت شان-چن، واندروالس و پنگ-رابینسون که توسط گانگ و چنگ [12] نیز مورد استفاده قرار گرفته، بهره برده شده است و معادله قبل به صورت رابطه (22) حاصل می شود.

$$\beta = \frac{0.6223}{\rho_{cr}^{0.2459} T_{cr}^{0.3298}} \quad (22)$$

همان طور که انتظار می رود رابطه (22) برای سه معادله ذکر شده دقت بسیار خوبی دارد. با وجود این که این ضرایب به کمک سه معادله حالت بدست آمده است نکته حائز اهمیت این است که می توان این رابطه را برای سایر معادلات حالت نیز که جزء یکی از دو گروه شان-چن و مکعبی باشند، بدون نیاز به شبیه سازی استفاده نمود. برای یافتن مقدار بتا تنها دانستن دما و چگالی بحرانی معادله مورد نظر کافی است که این مقادیر از رابطه (17) حاصل می شوند. نتایج نمودارهای فازی هر معادله حالت که با ضریب بتای محاسبه شده از رابطه (22) به دست آمده اند، در بخش بعد مورد بررسی و ارزیابی قرار می گیرد. بنابراین معادله (22) نشان می دهد که خطا در مقادیر چگالی دو فاز تابعی از شکل معادله حالت و بخصوص مقادیر بحرانی است.

از سوی دیگر به دلیل ویژگی های تابع معادلات حالت غیرمکعبی، مقادیر بحرانی این معادلات بسیار به هم نزدیک است بنابراین یافتن یه رابطه واحد برای پیش بینی مقدار β امری دور از ذهن نیست البته تابع این معادلات به گونه ای است که با یک مقدار ثابت β نمی توان به دقت بالایی در تمام دماها دست یافت. برای مشخص شدن این موضوع نمودار تغییرات ضریب بتای بهینه در دماهای مختلف برای معادله غیرمکعبی کارناهان-استارلینگ در شکل 1 ترسیم شده است.

همان طور که از شکل 1 مشخص است، با افزایش دما، ضریب بتای مناسب برای معادله حالت کارناهان-استارلینگ کاهش می یابد. در نتیجه برخلاف معادلات حالت شان-چن و مکعبی، با یک ضریب بتای ثابت برای تمام دماها نمی توان به نتایج دقیق دست یافت. به کمک برازش منحنی بر روی داده های حاصل معادله (23) حاصل می شود:

$$\beta = -20.715T_r^3 + 34.1932T_r^2 - 19.2381T_r + 4.7035$$

$$R^2 = 0.9996 \quad (23)$$

برخلاف این حقیقت که استفاده از معادلات حالت اثر مطلوبی بر مدل شبه پتانسیل می گذارد، اما این نتیجه گیری برای تمام معادلات حالت صادق نیست. معادله حالت واندروالس بر اساس بیشینه نسبت چگالی به خوبی معادله شان-چن نیست (شکل 3). به همین دلیل، در بیشتر مطالعات علاوه بر معادله حالت معادله حالت واندروالس از معادله شان-چن 93 استفاده می شود. اما به طور کلی با توجه به بررسی های انجام گرفته، معادلات مکعبی نسبت به معادلات شان-چن قوی تر هستند زیرا اساس فیزیکی دارند. به عنوان نمونه، اگرچه کمینه دمای مورد استفاده در معادله حالت شان-چن حدود 0.6 دمای بحرانی است ولی نسبت چگالی حاصل (60) بسیار کمتر از مقدار مورد انتظار از جداول ترمودینامیکی (800) است که دلیل آن عدم سازگاری ترمودینامیکی این دسته (شان-چن) از معادلات حالت که از توابع شبه پتانسیل پیشنهادی به دست آمده اند، است [11]. البته معادلات حالت ردلیک-کوانگ اصلاح شده، پنگ-رابینسون اصلاح شده و همچنین شان-چن 94 نیز به وسیله رابطه (22) مورد ارزیابی قرار گرفته اند و نتایج حاصل بیانگر دقت بالای این رابطه بوده است.

به منظور بررسی و تحلیل معادلات مکعبی در این مقاله معادلات حالت ردلیک-کوانگ [17] و پنگ-رابینسون [18] که از متداول ترین معادلات حالت مکعبی می باشند، استفاده شده اند. شکل های 4 و 5 به ترتیب نتایج مربوط به این معادلات را نشان می دهد. آنچه در شکل ها نشان داده شده است حاکی از آن است که پارامتر بتا تأثیر قابل توجهی بر سایر معادلات مکعبی دارد اما خطای کوچکی در معادله ردلیک کوانگ مشاهده می شود که قابل چشم پوشی است.

این معادلات در گستره دمایی بیشتری قابل قبول هستند. بنابراین با استفاده از آن ها نسبت چگالی می تواند به آسانی تا مقدار 1000 نیز می رسد به عنوان یک قانون کلی مقدار نسبت چگالی در سایر معادلات مکعبی تا 1000 نیز افزایش پیدا می کند که برای کاربردهای مختلف مناسب است. لازم به ذکر است علاوه بر معادلات حالت بیان شده، معادله ی (22) برای معادلات حالت ردلیک کوانگ اصلاح شده، پنگ رابینسون اصلاح شده و همچنین تابع شان-چن 94 نیز مورد استفاده قرار گرفته است و مقادیر β در جدول 2 ذکر شده اند.

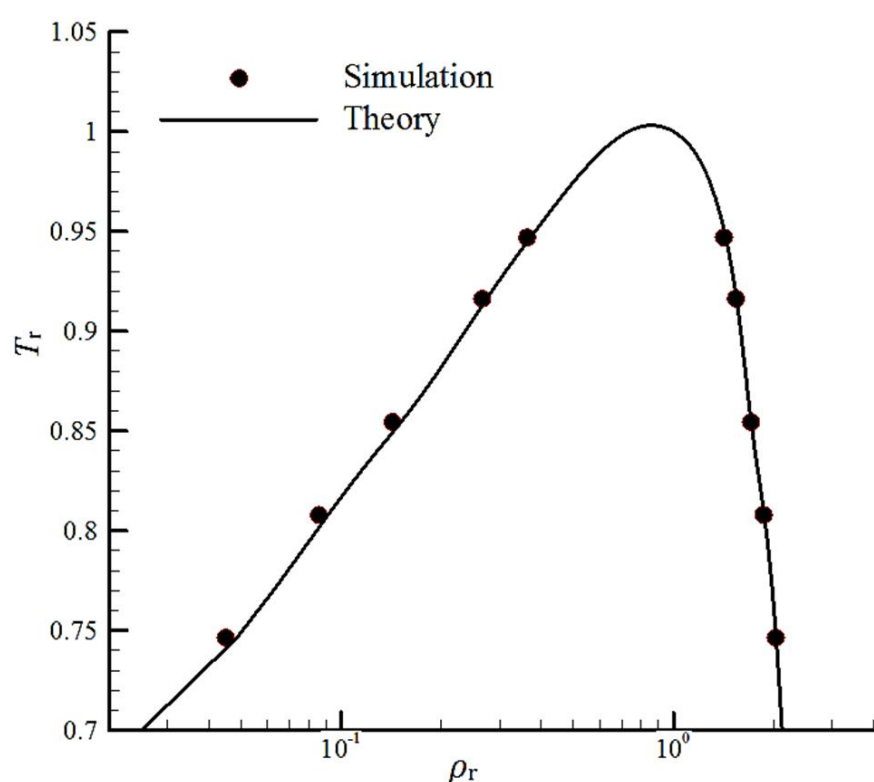


Fig. 3 Water phase diagram – Van der Waals EOS

شکل 3 نمودار فازی آب - معادله حالت واندروالس

یابد. بنابراین، این خواص کاملاً به یکدیگر وابسته هستند. اگرچه تقریباً همه معادلات حالت توانایی پیش بینی نسبت چگالی را در تمام گستره دمایی دارند، اما دقت و کارایی آن ها با یکدیگر هم در مقادیر تئوری و هم هنگام استفاده در تابع شبه پتانسیل متفاوت است. برای بررسی این حقیقت معادلات در بخش های مختلفی مورد بحث قرار گرفته اند.

5-1-1- معادلات شان-چن و حالت مکعبی

همان طور که پیش از این بیان شد، چندین تابع شبه پتانسیل اولیه وجود دارند که معادله (15) رایج ترین آن ها می باشد. برای ترسیم نمودار فازی این معادله دما به صورت $T = -1/g$ انتخاب شده است. همچنین ضریب وزنی بتا بهینه برابر 0.886 لحاظ شده و نمودار حاصل در شکل 2 نشان داده شده است. در نمودارهای فازی منحنی رسم شده از مقادیر چگالی تئوری به دست آمده از معادله حالت مورد نظر و دایره های توپر، چگالی فازهای بخار و مایع حاصل از شبیه سازی عددی با ضرایب مورد نظر است. به کمک نمودار فازی می توان علاوه بر اعتبارسنجی برنامه عددی موجود، مقدار بیشینه نسبت چگالی قابل دستیابی را نیز محاسبه نمود که کمتر از 60 است.

پیش از بررسی سایر معادلات حالت لازم است مقادیر پارامتر بتا بهینه به کمک معادله (22) برای معادلات حالت مختلف محاسبه شود. نتایج حاصل در جدول 2 ارائه شده است.

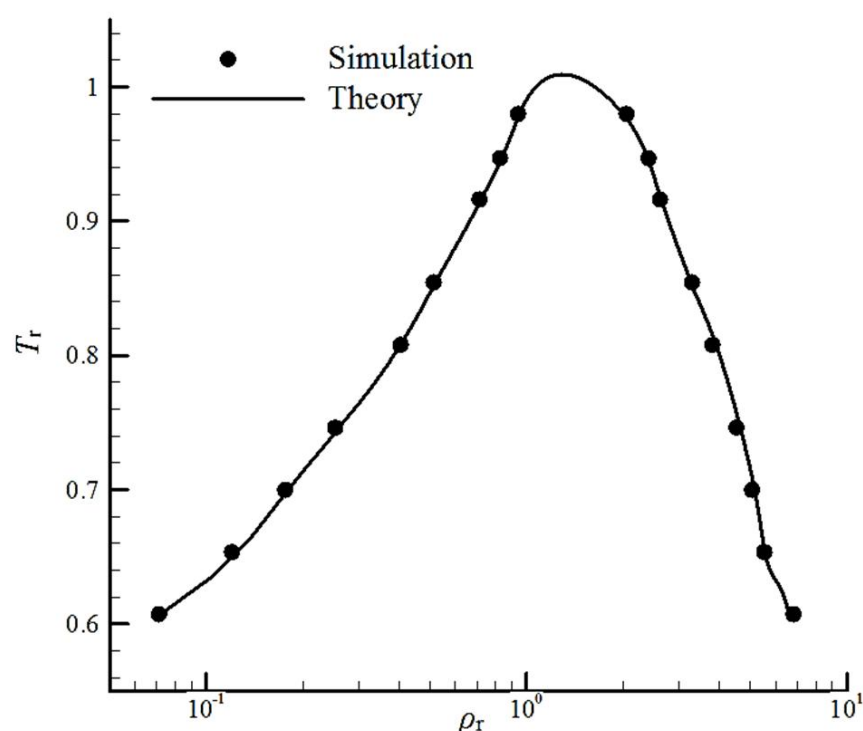


Fig. 2 Water phase diagram – Shan-Chen93 EOS

شکل 2 نمودار فازی آب - معادله حالت شان-چن 93

جدول 2 فاکتور وزنی معادلات حالت مختلف

Table 2 Weighting factor of different equations of state

فاکتور وزنی β	نوع معادله حالت
0.886	شان-چن 93
0.551	وان در والس
1.156	پنگ-رابینسون
0.850	ردلیک-کوانگ
1.093	ردلیک کوانگ اصلاح شده
1.150	پنگ رابینسون اصلاح شده
0.464	شان-چن 94

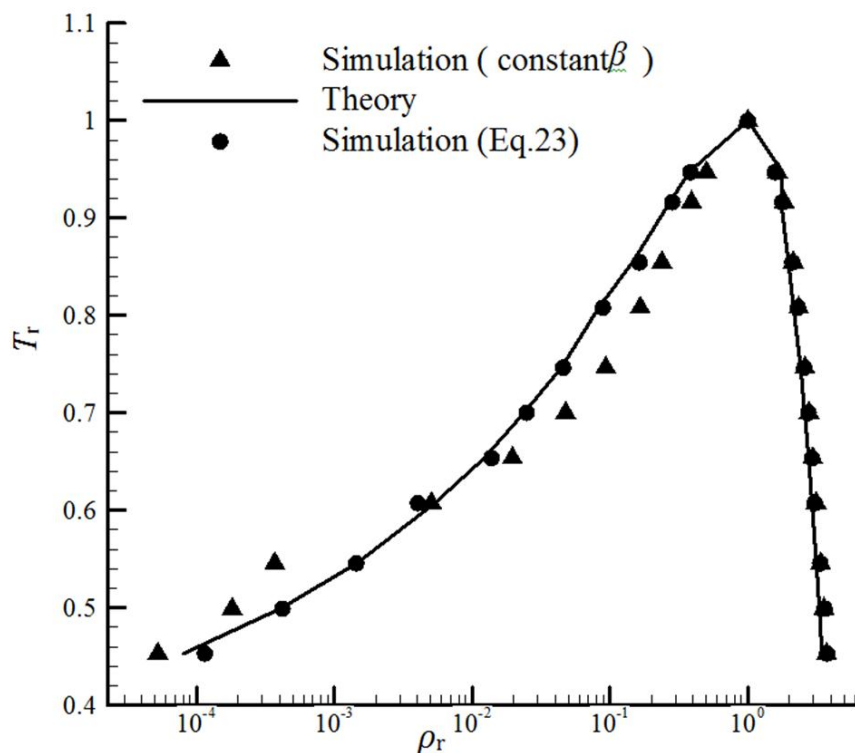


Fig. 6 Water phase diagram – Carnahan-Starling EOS

شکل 6 نمودار فازي آب - معادله حالت کارناهان - استارلینگ

همان طور که در این شکل مشاهده می شود، اگرچه $\beta = 0.93$ دقت چگالی بخار را بهبود می دهد، اما نتایج آن به خوبی معادلات مکعبی نیست. شکل 7 نیز به طور مشابه برای معادله حالت گانگنیم به دست آمده است. این نمودار فازي با استفاده از $\beta = 0.91$ به دست آمده است که بهترین پارامتر به دست آمده برای معادله گانگنیم است. شکل 7 این حقیقت را به وضوح بیان می کند که استفاده از یک عدد ثابت به عنوان پارامتر مؤثر برای معادلات غیرمکعبی مناسب نیست و این دسته از معادلات حالت به یک پارامتر بتای متغیر با دما نیاز دارند. این خطا با تعریف یک عبارت مشابه رابطه (23) تصحیح می شود. نکته جالب توجه دقت بالای این رابطه برای معادله حالت گانگنیم است. زیرا این مقادیر بتا به کمک معادله کارناهان - استارلینگ حاصل شده اند ولی همان طور که در شکل 7 مشخص است برای معادله گانگنیم هم نتایج بسیار خوبی می دهد.

نتایج حاصل پتانسیل بالای رابطه (23) را برای افزایش دقت نتایج در شبیه سازی معادلات حالت غیرمکعبی را به خوبی نشان می دهد. البته معادله (23) برای معادله حالت کالفا - نزدبا نیز نتایج مشابهی را نشان می دهد.

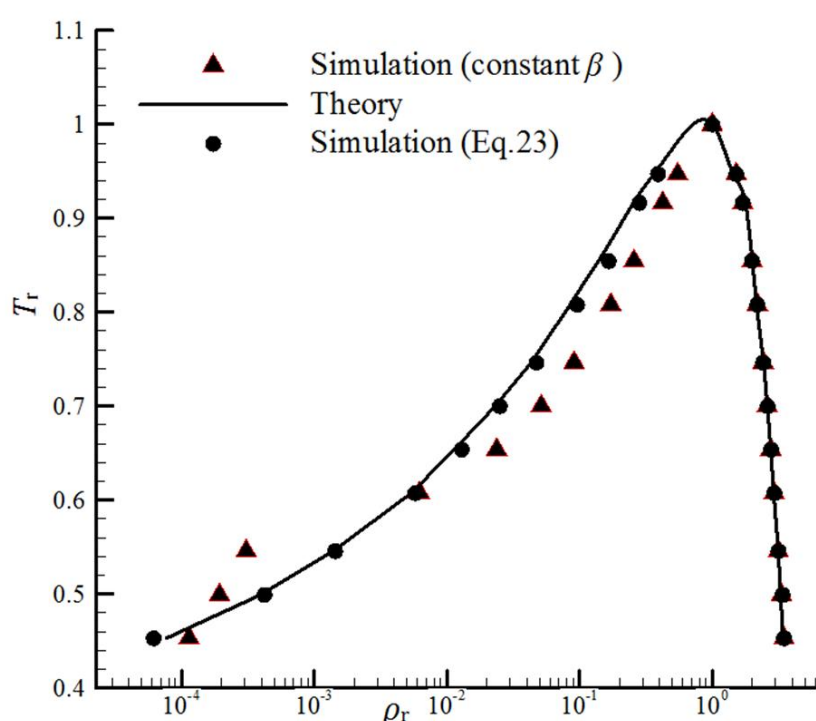


Fig. 7 Water phase diagram – Guggenheim EOS

شکل 7 نمودار فازي آب - معادله حالت گانگنیم

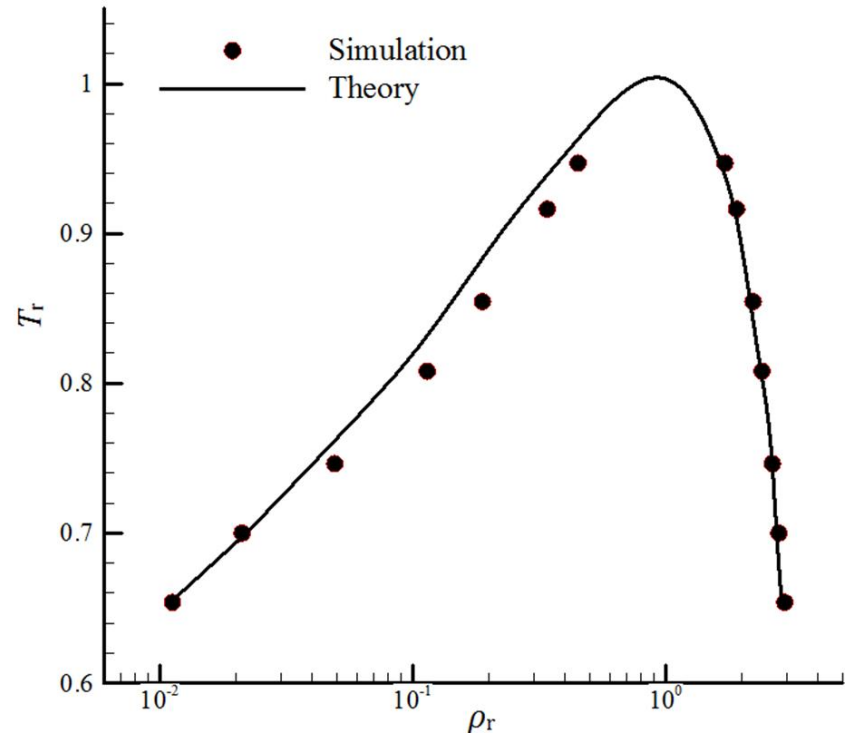


Fig. 4 Water phase diagram – Redlich-Kwong EOS

شکل 4 نمودار فازي آب - معادله حالت ردلیک - کوانگ

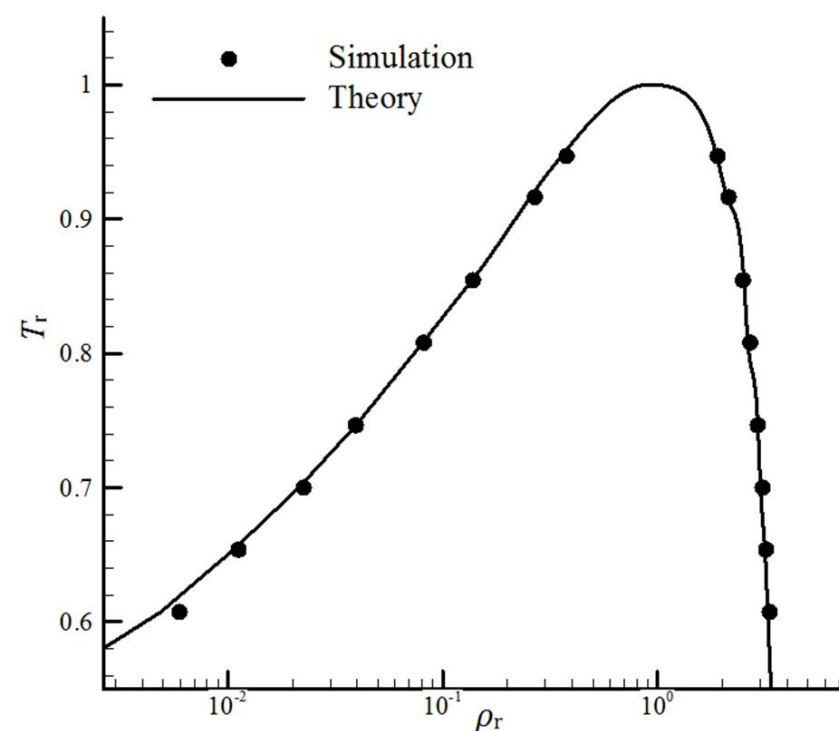


Fig. 5 Water phase diagram – Peng- Robinson EOS

شکل 5 نمودار فازي آب - معادله حالت پنگ - رابینسون

نتایج حاصل بر قابلیت مدل گانگ - چنگ در افزایش دقت چگالی های به دست آمده از شبیه سازی در مقایسه با مقادیر تئوری به دست آمده از معادلات حالت تأکید می کند.

5-1-2- معادلات غیرمکعبی

در بررسی های قبلی معادله حالت کارناهان - استارلینگ به طور گسترده بکار رفته است. البته این معادله به همراه سایر معادلات حالت بدون لحاظ نمودن نوع آن ها مقایسه شده اند [11-12]. علاوه بر معادله کارناهان - استارلینگ در این قسمت معادله حالت گانگنیم نیز برای درک بهتر رفتار این نوع از معادلات بررسی شده است. مهم ترین مشخصه معادلات غیرمکعبی، نسبت چگالی قابل دستیابی آن هاست که تا مقدار 10^5 هم می تواند افزایش یابد و عملکرد قوی آن ها که می توانند در کاربردهای گسترده تری مورد استفاده قرار گیرند. به همین دلیل یافتن پارامتر مناسب بتا به منظور تصحیح نتایج آن بسیار مهم به نظر می رسد. در شکل 6 علاوه بر نتایج تئوری معادله حالت کارناهان - استارلینگ، نمودار فازي حاصل از یک بتا ثابت و بتای حاصل از معادله (23) رسم شده اند.

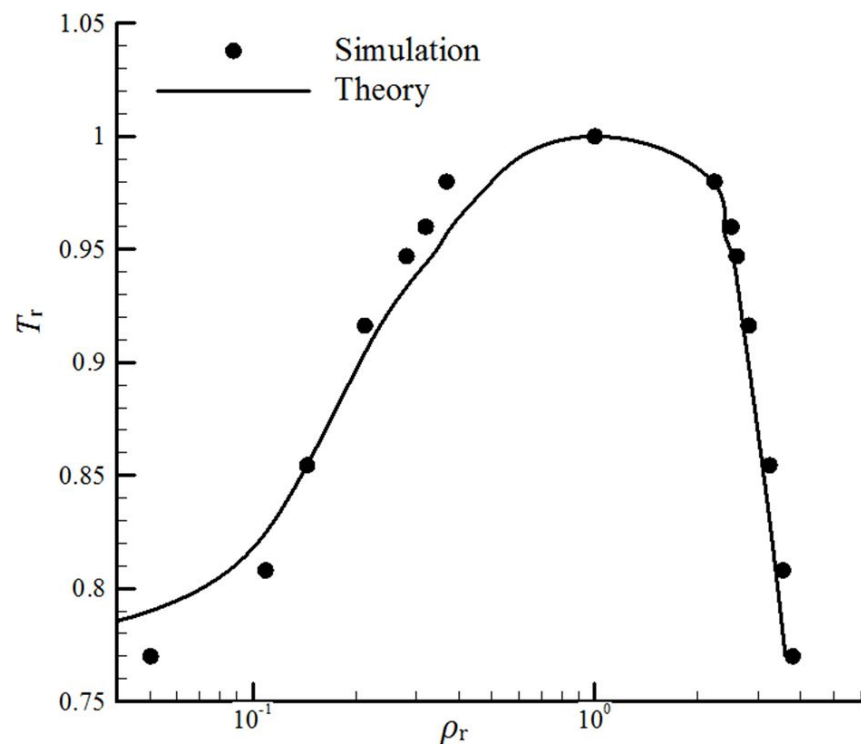


Fig. 9 Water phase diagram – Combination of Carnahan Starling and Peng Robinson EOS

شکل 9 نمودار فازي آب - معادله حالت ترکیبی کارناهان استارلینگ و پنگ رابینسون

کامل غیرممکن است، بسیاری از محققان در تحقیقات خود به این نکته اشاره کرده‌اند که با به کارگیری یک روش گسسته سازی مناسب می‌توان جریان پارازیتی را کاهش داد [23,22]. از طرف دیگر با افزایش نسبت چگالی و کشش سطحی، اندازه جریان پارازیتی نیز افزایش می‌یابد و همین امر موجب واگرایی ناگهانی روش عددی می‌شود.

در این قسمت برای مقایسهٔ بیشینه سرعت جریان پارازیتی ایجاد شده هنگام استفاده از معادلات حالت مختلف در تابع شبه پتانسیل مقادیر بیشینه سرعت پارازیتی نسبت به سرعت صوت شبکه در شکل 10 بر حسب دمای بدون بعد ترسیم شده است. با توجه به شکل 10، می‌توان دریافت که جریان پارازیتی با کاهش دما (افزایش نسبت چگالی) به صورت نمایی افزایش می‌یابد. همچنین شکل 10 نشان می‌دهد که هر نوع از توابع حالت جریان پارازیتی تقریباً یکسانی دارند. در نسبت چگالی‌های پایین، اندازه جریان پارازیتی یکسان است، اما با کاهش دما برای هر نوع از معادله‌های حالت نمودارها با شیب‌های متفاوت از یکدیگر متمایز می‌شوند. بنابراین هر سه نوع معادلات حالت مکعبی، غیرمکعبی و ترکیبی از مکعبی و غیرمکعبی جریان پارازیتی نسبتاً بزرگی در بیشینه نسبت چگالی قابل استفاده را دارند. همچنین، معادلات غیرمکعبی نسبت به سایر معادلات برای شبیه‌سازی مسائل مختلف مناسب‌تر هستند زیرا در یک دمای مشخص کمترین جریان پارازیتی در اطراف سطح مشترک بوجود می‌آید.

اثر معادلات حالت در کاهش جریان پارازیتی همچنین می‌تواند نشان دهد که استفاده از سایر معادلات حالت که تاکنون در تابع شبه پتانسیل مورد استفاده قرار نگرفته است نیز شاید بتواند به عنوان یک روش کاهش جریان پارازیتی مورد استفاده قرار بگیرد. لازم به ذکر است که هیچ کدام از روش‌های کاهش جریان پارازیتی برای این مقایسه اعمال نشده است که دلیل آن بررسی مقدار جریان پارازیتی بوجود آمده توسط این مدل است. کاملاً مشخص است که در صورت استفاده از روش‌های گسسته‌سازی مناسب می‌تواند نقش بسزایی در کاهش مقدار این جریان‌ها داشته باشد.

جریان پارازیتی مختص این روش نیست و کلیهٔ مدل‌های چندفازی شبکه بولتزمن با این اثرات غیر فیزیکی مواجه هستند. بطور مثال لی و لین [24] در مدل پیشنهادی خود مقادیر بسیار کمتری برای مقدار این جریان

لازم به ذکر است که تأثیر این معادله بر چگالی بخار در دماهای پایین بیشتر بوده و این تأثیر در دماهای بالا رفته‌رفته کاهش می‌یابد.

با مقایسه کمینه دمای قابل استفاده بوسیلهٔ معادلات حالت غیر مکعبی مانند کارناهان - استارلینگ با سایر مدل‌های چندفازی می‌توان به قابلیت بالای روش شبه پتانسیل هنگام استفاده از معادلات غیرمکعبی در مقایسه با سایر روش‌ها پی برد. البته به وسیلهٔ معادلات حالت دیگر نیز می‌توان به چنین نسبت چگالی دست یافت. این محدودهٔ وسیع به کاربر کمک می‌کند تا بتواند جریان‌هایی با نسبت چگالی‌های بسیار بزرگتری را شبیه‌سازی نماید.

3-1-5 اصلاح هر دو ترم جاذبه و دافعه، معادلات حالت ترکیبی

در طبیعت، سیالات مختلفی وجود دارند که هر کدام خواص مخصوص به خود را دارند و هر معادله حالتی برای سیال به خصوصی قابل استفاده است. برای مثال معادله ترکیبی کارناهان - استارلینگ و ردلیک - کوانگ از لحاظ تئوری جهت پیش‌بینی چگالی هیدروکربن‌ها نتایج دقیق‌تری می‌دهد [20]. بنابراین بررسی انواع مختلف معادله حالت ضروری است. شکل‌های 8 و 9 نموداری فازي حاصل از دو معادله حالت ترکیبی کارناهان - استارلینگ و ردلیک - کوانگ با $\beta = 1.45$ و کارناهان - استارلینگ و پنگ - رابینسون با $\beta = 1.56$ را نشان می‌دهند. این نمودارها توانایی کمتر این دسته معادلات حالت برای استفاده در نسبت چگالی بالا را نشان می‌دهند. کمترین دمایی که این مدل در آن معتبر است $0.78T_{cr}$ است و نسبت چگالی مربوط به این دما کمتر از 100 است. همچنین، پارامتر بتا نتایج را دقیق‌تر می‌کند، اما در برخی دماها برای معادله ترکیبی کارناهان و ردلیک کوانگ خطای کمی وجود دارد. بنابراین این دسته معادلات جهت استفاده در این مدل مناسب نیستند. اگرچه از لحاظ تئوری نسبت به مقادیر آزمایشگاهی دقت بالاتری نسبت به سایر معادلات حالت دارند. در نتیجه برای این دسته از معادلات حالت نمی‌توان به روند مشخصی از تغییرات خطای بوجود آمده در مقادیر چگالی دست یافت که دلیل آن ترکیبی بودن این معادلات است.

2-5 جریان‌های پارازیتی

جریان پارازیتی یک میدان سرعت غیر فیزیکی است که در نزدیکی فصل مشترک اتفاق می‌افتد [21]. اگرچه جلوگیری از وقوع جریان پارازیتی به‌طور

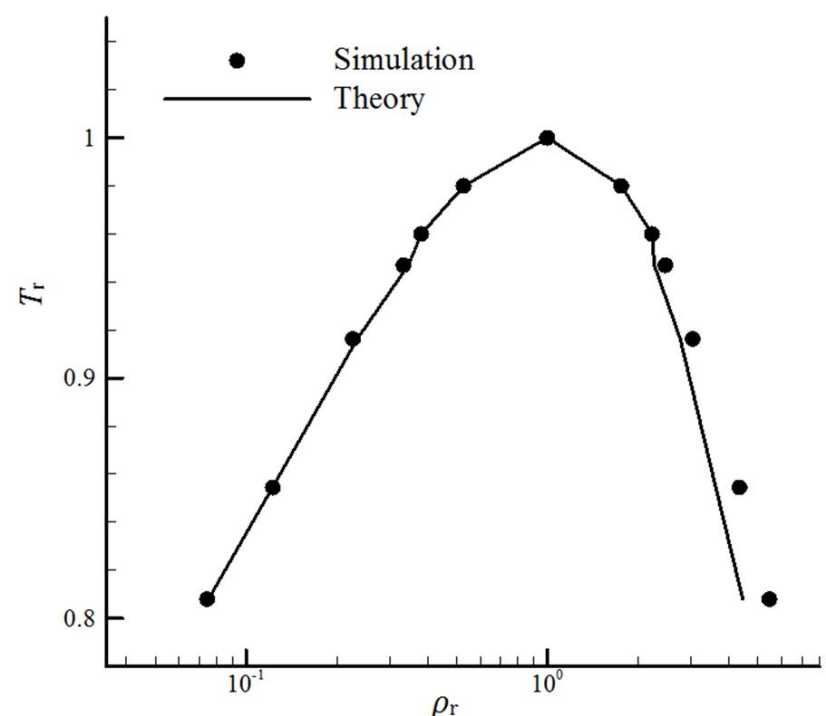


Fig. 8 Water phase diagram – Combination of Carnahan Starling and Redlich Kwong EOS

شکل 8 نمودار فازي آب - معادله حالت ترکیبی کارناهان استارلینگ و ردلیک کوانگ

ترمودینامیکی کشش سطحی آب با کاهش دما افزایش می‌یابد. شیب نمودارهای به‌دست‌آمده نیز صحت نتایج حاصل را تأیید می‌کنند، زیرا با کاهش دما و افزایش نسبت چگالی، شیب نمودارها افزایش یافته است.

2-6- حباب مربعی

از آنجا که مهم‌ترین و پیچیده‌ترین بخش تحلیل جریان‌های حاوی سطح مشترک، مربوط به دینامیک سطح مشترک بین دو سیال است، یک گام مهم در نشان دادن صحت شبیه‌سازی، بررسی این موضوع است. به این منظور همانطور که در مراجع [26,25] نیز اشاره شده است آزمون‌های حباب مربعی و به هم آمیختگی دو قطره معیار مناسبی برای بررسی قابلیت برنامه‌ی عددی هستند.

برای شبیه‌سازی حباب مربعی، یک حباب با ضلعی برابر نصف طول ناحیه حل (120×120) و اعمال شرایط مرزی پریودیک در تمام جهات در نظر گرفته شده است. نسبت چگالی دو سیال در دمای 0.6 دمای بحرانی برابر 800 است. شکل 12، نتایج شبیه‌سازی حباب مربعی با نسبت چگالی 800 در گام‌های زمانی مختلف را نشان می‌دهد. همان‌طور که انتظار می‌رود، این حباب پس از مدتی به شکل دایره‌ای که کمترین سطح مشترک را با محیط دارد، تبدیل می‌شود. نکته قابل توجه در مقایسه با سایر مراجع [26,25] سرعت بالای همگرایی این مدل در مقایسه با سایر مدل‌های چند فازی شبکه بولتزمن است. لازم به ذکر است که در حالت تعادل نهایی مقدار بیشینه سرعت پارازیته 0.032 سرعت صوت است.

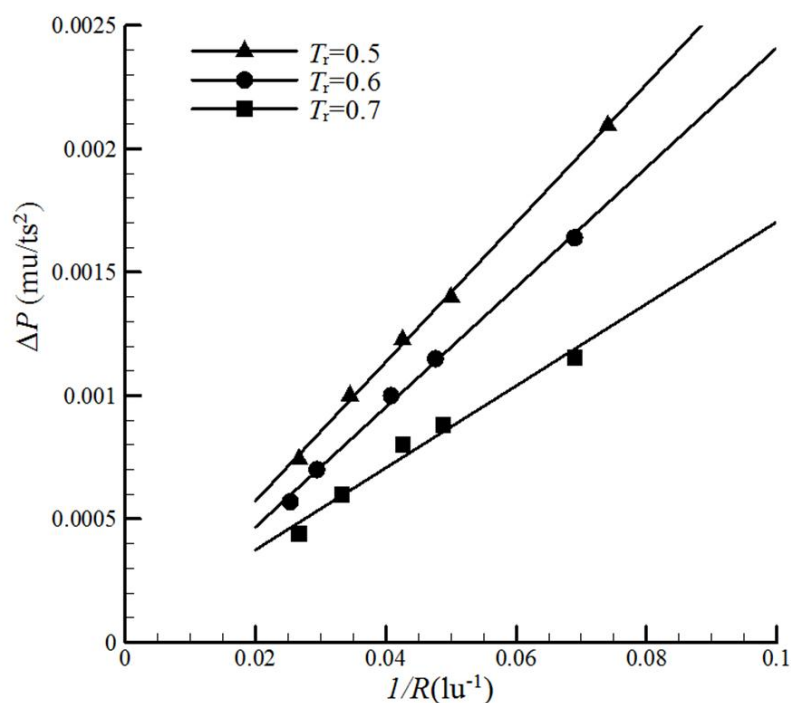


Fig. 11 Comparison of different density ratios in the Laplace law

شکل 11 مقایسه نسبت چگالی‌های مختلف در قانون لاپلاس

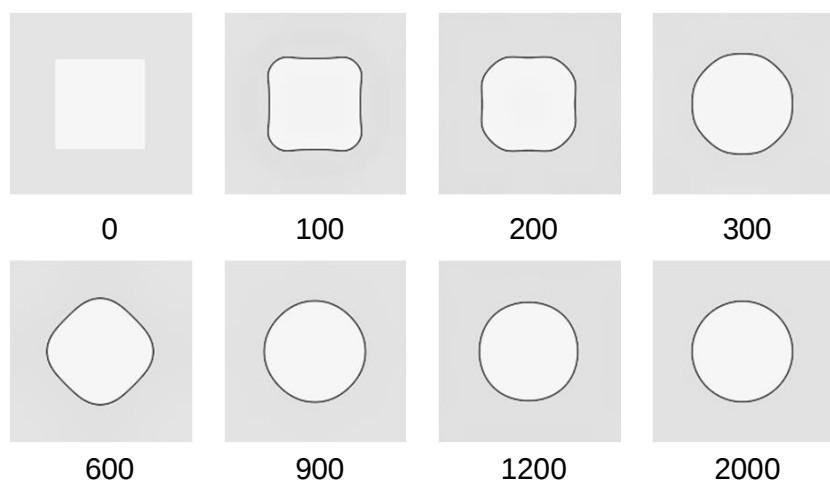


Fig. 12 Squared bubble deformation- density ratio 800

شکل 12 تغییر شکل حباب مربعی - نسبت چگالی 800

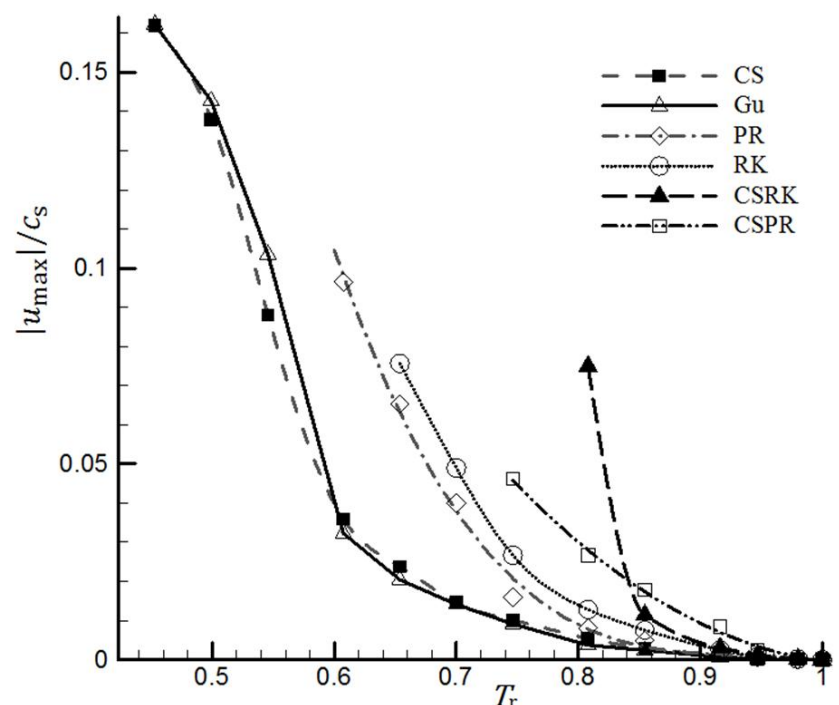


Fig. 10 Spurious current magnitude of equations of state in different temperatures

شکل 10 اندازه سرعت پارازیته معادلات حالت در دماهای مختلف

گزارش نمودند ولی با دقت در مقادیر کشش سطحی می‌توان دریافت که مقدار کشش سطحی قابل استفاده در مدل آنها بسیار کمتر از این روش است. به عبارت دیگر، جهت شبیه‌سازی جریان‌هایی با کشش سطحی بالا (مشابه این مدل) مقدار جریان پارازیته نیز افزایش می‌یابد. علاوه بر مقدار کشش سطحی انحنای سطح مشترک و ضخامت سطح مشترک نیز نقش مهمی در مقدار جریان پارازیته بوجود آمده ایفا می‌کنند.

6- اعتبارسنجی

1-1- آزمون لاپلاس

علاوه بر مقایسه نتایج تئوری و شبیه‌سازی نمودار فازی آب، برای اعتبارسنجی نتایج، آزمون لاپلاس که معیاری از بررسی مقدار کشش سطحی است، مورد ارزیابی قرار گرفته است. برای این منظور در تمام موارد بررسی شده در بخش اعتبارسنجی از معادله حالت کارناهان استارلینگ با ضریب وزنی بدست آمده از معادله (23) استفاده شده است. بر اساس این قانون، برای یک قطره مایع دایره‌ای شکل با شعاع R که در یک سیال دیگر در حال تعادل قرار دارد، اختلاف فشار (ΔP) در داخل و خارج قطره با شعاع آن به‌صورت زیر رابطه دارد:

$$\Delta P = P_{in} - P_{out} = \frac{\sigma}{R} \quad (24)$$

در این رابطه σ کشش سطحی است. در این مدل برخلاف سایر روش‌های شبکه بولتزمن کشش سطحی به‌صورت مقادیر اولیه تعیین نمی‌شود و باید در نهایت محاسبه گردد، طبق قانون لاپلاس شیب نمودار اختلاف فشار برحسب معکوس شعاع باید یک خط راست باشد که شیب این خط مقدار کشش سطحی را بیان می‌کند. بنابراین شبیه‌سازی برای قطرهایی با شعاع‌های اولیه و دما (نسبت چگالی)های مختلف انجام گرفته است و فشار و شعاع نهایی برای هر مورد در حالت تعادلی محاسبه شده است. برای این منظور یک قطره ساکن در شبکه 120×120 با مرزهای پریودیک شبیه‌سازی شده است.

شکل 11، نتایج مربوط به شبیه‌سازی در دماهای بدون بعد (T_r) 0.7، 0.6 و 0.5 که به ترتیب دارای نسبت چگالی 110، 800 و 8300 می‌باشند را نشان می‌دهد. همان‌طور که در مراجع مختلف اشاره شده است نتایج حاصل یک خط راست و شیب آن نیز کشش سطحی است. طبق جداول

3-6- به هم آمیختگی دو قطره

یکی دیگر از شبیه سازی های عددی انجام شده فرایند به هم آمیختن دو قطره در فاصله اندکی از یکدیگر است. در تمام مدل های چند فازی شبکه بولتزمن میدان جریان پارازیتی اطراف سطح مشترک وجود دارد که این به هم آمیختگی به همین دلیل بوجود می آید. برای این منظور دو قطره با شعاع اولیه 30 واحد شبکه در داخل یک شبکه 300×300 در نظر گرفته شده است. شرایط مرزی در دو جهت پریودیک است و هیچ میدان خارجی وجود ندارد. شبیه سازی برای نسبت چگالی 800 انجام گرفته است.

شکل 13، نتایج این شبیه سازی در گام های زمانی مختلف را نشان می دهد. همانطور که در سایر مدل های چند فازی نیز اشاره شده است، قطره حاصل پس از چند نوسان به شکل بیضی افقی و عمودی تبدیل می شود و در نهایت به شکل یک قطره دایره ای به تعادل می رسد. با مقایسه زمان مورد نیاز برای رسیدن قطره نهایی به حالت تعادلی با سایر مدل ها [26,25] به وضوح مشخص می باشد که این زمان به صورت قابل توجهی کمتر است که بیان کننده قابلیت بالای این مدل است. البته این مساله در زمینه ی پلیمر و هواشناسی بطور گسترده ای مورد مورد بررسی و تحلیل قرار می گیرد. لازم به ذکر است که مثال های مورد استفاده در قسمت اعتبارسنجی نتایج بطور کامل در دماهای مختلف نیز مورد شبیه سازی و مقایسه قرار گرفته اند [27].

7- بحث و نتیجه گیری

در مطالعه انجام شده در این مقاله، معادلات حالت مختلف به کمک مدل گانگ و چنگ به منظور درک اثر نوع معادله حالت و تعریف ضرایب بتای مناسب برای هر دسته از آن ها صورت گرفته است. به طور کلی، نتایج زیر از شبیه سازی های انجام شده به دست آمده است:

- هر نوع معادلات حالت کمترین دمای قابل دستیابی یا بیشترین نسبت چگالی و جریان پارازیتی تقریباً یکسانی دارند. در نتیجه، یافته ها حاکی از آن است که معادلات مکعبی، غیرمکعبی و ترکیبی و معادله شان-چن به ترتیب در نسبت چگالی بیشتری قابل استفاده هستند.
- دقت مدل گانگ و چنگ با یک بتای ثابت تنها برای معادلات حالت شان-چن و مکعبی بسیار بالا می باشد، در حالی که برای معادلات حالت غیر مکعبی یافتن یک بتای ثابت که بتواند دقت نتایج را در تمام نسبت چگالی ها افزایش دهد غیر ممکن است.
- به کمک رابطه (22) می توان مقدار بتای بهینه برای معادلات

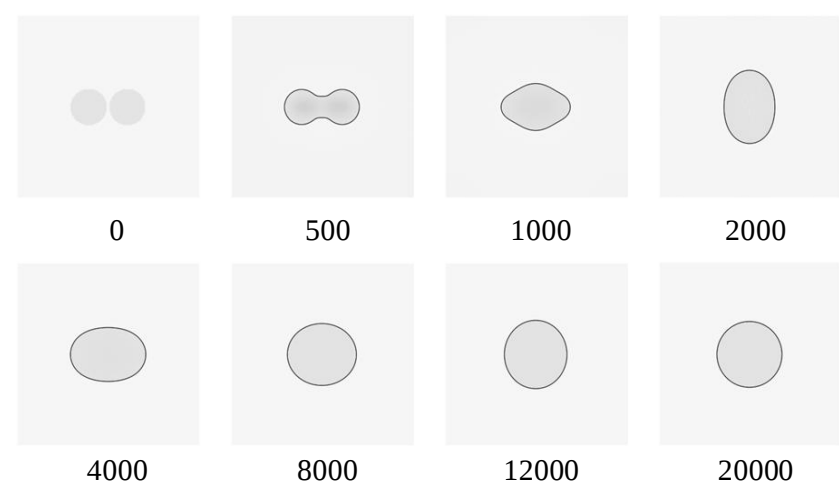


Fig. 13 Droplets coalescence process in density ratio 800

شکل 13 فرایند به هم آمیختگی دو قطره در نسبت چگالی 800

حالت شان-چن و مکعبی را به آسانی و بدون نیاز به شبیه سازی، به کمک مقادیر بحرانی معادله حالت مورد نظر محاسبه نمود.

- به دلیل قابلیت معادلات حالت غیرمکعبی برای استفاده در نسبت چگالی های بالاتر، پیش بینی پارامتر بتای مناسب معادلات حالت غیرمکعبی در دماهای مختلف به کمک رابطه پیشنهادی (23) بسیار کاربردی است.

8- فهرست علائم

C_s	سرعت صوت
e_i	سرعت شبکه
f_i	توابع توزیع
g	مقدار تابع گرین
u	سرعت مایکروسکوپی تعادلی
w_i	فاکتورهای وزن

علائم یونانی

β	ضریب وزنی معادله گانگ و چنگ
ρ	چگالی
τ	زمان آسایش
ψ	تابع شبه پتانسیل

بالانویس ها

att	جاذبه
e	مقدار تعادلی
q	
rep	دافعه

زیرنویس ها

cr	مقدار بحرانی
r	نسبت مقدار یک پارامتر به مقدار بحرانی آن

9- مراجع

- [1] R. Guy, G. McNamara, G. Zanetti, Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata, *Physical Review*, Vol. 20, No. 61, pp. 2332–2335, 1988.
- [2] L. Chen, Q. Kang, Y. Mu, Y. He, W. Tao, A critical review of the pseudo-potential multiphase lattice Boltzmann model: Methods and applications, *International Journal of Heat Mass Transfer*, Vol. 76, pp. 210–236, 2014.
- [3] X. Quan, P. Cheng, H. Wu, Transition from annular flow to plug/slug flow in condensation of steam in micro-channels, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 51, pp. 707–716, 2008.
- [4] S. Hou, X. Shan, Q. Zou, G. D. Doolen, W. Soll, Evaluation of two lattice Boltzmann models for multiphase flows, *Journal of Computing and Physics*, Vol. 138, No. 2, pp. 138–695, 1997.
- [5] A. K. Gunstensen, D. H. Rothman, S. Zaleski, Lattice Boltzmann model of immiscible fluids, *Physical Review A*, Vol. 43, No. 8, pp. 4320–4327, 1991.
- [6] X. Shan, H. Chen, Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components, *Physical Review E*, Vol. 47, No. 3, pp. 1815–1819, 1993.
- [7] M. R. Swift, W. R. Osborn, J. M. Yeomans, Lattice Boltzmann simulation of nonideal fluids, *Physical Review Letters*, Vol. 75, No. 5, pp. 830–833, 1994.
- [8] R. Nourgaliev, T. Dinh, T. Theofanous, and D. Joseph, The lattice Boltzmann equation method: Theoretical interpretation, numerics and implications, *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 29, No. 1, pp. 117–189, 2003.
- [9] M. Sbragaglia, R. Benzi, L. Biferale, S. Succi, K. Sugiyama, F. Toschi, Generalized lattice Boltzmann method with multi-range pseudo-potential, *Physical Review E*, Vol. 75, No. 2, 026702, 2007.

- [20] N. F. Carnahan, K. E. Starling, Intermolecular repulsions and the equation of state for fluids, *American Institute of Chemical Engineers*, Vol. 18, No. 6, pp. 1184-1189, 1972.
- [21] K. Connington, T. Lee, A review of spurious currents in the lattice Boltzmann method for multiphase flow, *Journal of Mechanical Science and Technology*, Vol. 26, No. 12, pp. 3577-3584, 2011.
- [22] T. Lee, Effects of incompressibility on the elimination of parasitic currents in the lattice Boltzmann equation method for binary fluids, *At Computer and Mathematic Application*, Vol. 58, No. 5, pp. 987-994, 2008.
- [23] X. Shan, Analysis and reduction of the spurious current in a class of multiphase lattice Boltzmann models, *Physical Review E*, Vol. 73, No. 4, 047701, 2006.
- [24] T. Lee, C. L. Lin, A stable discretization of the lattice Boltzmann equation for simulation of incompressible two-phase flows at high density ratio, *Journal of Computing Physics*, Vol. 206, No.1, pp. 16-47, 2005.
- [25] E. Sattari, M. Aghajani Delavar, E. Fattahi, K. Sedighi, Investigation of two bubble coalescence with large density differences with lattice Boltzmann method, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 14, No. 10, pp. 93-100, 2014. (in Persian فارسی)
- [26] M. A. Bijarchi, M. H. Rahimian, Numerical simulation of droplet collision in the two phase flow using lattice Boltzmann method, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 14, No. 2, pp. 85-96, 2014. (in Persian فارسی)
- [27] S. M. Khatoonabadi, *Lattice Boltzmann model for simulation of multiphase flows with large density ratios*, Master Thesis, Department of Mechanical Engineering, Isfahan University of Technology, Isfahan, 2015. (in Persian فارسی)
- [10] R. Zhang, H. Chen, Lattice Boltzmann method for simulations of liquid vapor thermal flows, *Physical Review E*, Vol. 67, No. 6, 066711, 2003.
- [11] P. Yuan, L. Schaefer, Equations of state in a lattice Boltzmann model, *Physics Fluids*, Vol. 4, No. 18, 042101, 2006.
- [12] S. Gong, P. Cheng, Numerical investigation of droplet motion and coalescence by an improved lattice Boltzmann model for phase transitions and multiphase flows, *Computers and Fluids*, Vol. 53, pp. 93-104, 2012.
- [13] A. L. Kupershtokh, D. A. Medvedev, D. I. Karpov, On equations of state in a lattice Boltzmann method, *Computers and Mathematics with Application*, Vol. 58, No. 5, pp. 965-974, 2009.
- [14] A. Hu, L. Li, S. Chen, Q. Liao, J. Zheng, On equations of state in pseudo-potential multiphase lattice Boltzmann model with large density ratio, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 67, pp. 159-163, 2013.
- [15] P. L. Bhatnagar, E. P. Gross, M. Krook, A model for collision processes in gases. I. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems, *Physical Review*, Vol. 94, No. 3, pp. 511-525, 1954.
- [16] S. Succi, *The lattice boltzmann equation for fluid dynamics and beyond*, 1st Edition, pp. 112-123, Oxford: Clarendon Press Oxford, 2001.
- [17] O. Redlich, J.N.S. Kwong, On the thermodynamics of solutions: an equation of state, fugacities of gaseous solutions, *Chemical Review*, Vol. 44, No. 1, pp. 233-244, 1949.
- [18] D. Y. Peng, D. B. Robinson, A new two-constant equation of state, *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, Vol. 15, No.1, pp. 59-64, 1976.
- [19] N. F. Carnahan, K. E. Starling, Equation of state for non-attracting rigid spheres, *Journal of chemical physics*, Vol. 51, No. 2, pp. 635-648, 1969.