

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه صنعتی اصفهان  
دانشکده مهندسی مکانیک

## شبیه‌سازی عددی جریان چند جزیی به کمک روش شبکه بولتزمن

پایان نامه‌ی کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک

محمد هادی علیجانیان

استاد راهنما

دکتر ابراهیم شیرانی



دانشگاه صنعتی اصفهان  
دانشکده مهندسی مکانیک

پایان نامه‌ی کارشناسی ارشد رشته مهندسی مکانیک آقای محمد هادی علیجانیان  
تحت عنوان

**شبیه‌سازی عددی جریان چند جزیی به کمک روش شبکه بولتزمن**

در تاریخ ۲۲ / اردیبهشت / ۸۸ توسط کمیته تخصصی زیر مورد بررسی و تصویب نهایی قرار گرفت.

دکتر ابراهیم شیرانی

۱- استاد راهنمای پایان نامه

دکتر احمدرضا پیشه‌ور

۲- استاد مشاور پایان نامه

دکتر محمود اشرفی‌زاده

۳- استاد داور

دکتر سلیم‌پور

۴- استاد داور

دکتر کشمیری

سرپرست تحصیلات تکمیلی دانشکده

## تشر و قدردانی

در جهان بهترین چیزها را نیز ارجی نیست تا آنکه نخست کسی آنها را به نمایش گذارد، مردم این "نمایشگران" را مردان بزرگ می خوانند.

سپاس و حمد بیکران خداوند سبحان را که به من توانایی داد تا به انجام رسانم هر آنچه با یادش آغاز کردم. صمیمانه ترین سپاسها را نثار خانواده ام می کنم، پدر و مادر عزیزم که موی خود را سپید کردند تا روی من سپید بماند و به معنای واقعی سوختند تا زندگی من روشن شود. همراه خاطرات شیرین کودکی ام، علی برادرم، که همیشه پشتیبان من بود و خواهر مهربان و دلسوزم که علی رغم کوچکی سن همواره غمخوارم بود.

بر خود واجب می دانم از جناب پروفیسور ابراهیم شیرانی به پاس همه محبت هایشان تشکر کنم. بدون شک به ثمر رسیدن این پروژه بدون همراهی و راهنمایی های ارزنده ایشان میسر نبود. قدردان خداوند بزرگ هستم و بر خود می - بالم که افتخار شاگردیشان را داشتم، افتخاری که در تمام مراحل زندگی خود با غرور و سربلندی بر آن می بالم. از جناب دکتر احمدرضا پیشه‌ور سپاس گزارم که همواره همگام با من در این پروژه همفکری نمودند و از راهنمایی های ارزنده ایشان بسی فراوان سود بردم. بدیهی است آنچه که در این کار خوب می نماید از راهنماییهای این عزیزان است و کاستیها از اینجانب. تحصیل در صنعتی فرصتی بود تا از این عزیزان و سایر اساتید عزیزم هم علم بیاموزم و هم اخلاق و شخصیت بلالی انسانی. از آقایان پروفیسور لی شی لو و پروفیسور ساکوپ که در طول انجام این پروژه همواره همچون یک دوست مشاور و راهنمای مشکلات کار بودند تشکر می کنم و کراهنمایی های ایشان را ارج می نهم. از جناب دکتر اشرفی زاده و دکتر سلیم پور که علیرغم مشغله فراوانی که داشتند زحمت بازخوانی پایان نامه اینجانب را بر عهده گرفتند صمیمانه تشکر می کنم. از آقایان مهندس رضا جلیوند، مهندس ناصر ملکان و مهندس سعید صادقی که در مراحل مختلف این پژوهش یاریگر اینجانب بودند، و علاوه بر آن همنشین لحظه های خستگی و تنهایی من نیز بودند سپاسگزاری نموده و سعادت ایشان را در تمامی مراحل زندگی آرزو مندم. یاد و خاطره همکلاسیها و همه دوستان عزیزم در دانشگاه صنعتی اصفهان که خاطرات ماندگاری را برای همیشه در ذهن من رقم زدند و ذکر نام یکایک ایشان در این مجال نمی گنجد را گرامی داشته و برای تمامی آنها سعادت، سلامت و پیروزی را از درگاه آسمانی خداوند بزرگ آرزو دارم.

محمد هادی علیجانیان

بهار ۸۸

کلیه حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات،  
ابتکارات و نوآوری‌های ناشی از تحقیق  
موضوع این پایان‌نامه (رساله) متعلق به  
دانشگاه صنعتی اصفهان است.

## فهرست مطالب

صفحه	عنوان
هشت	فهرست مطالب
۱	چکیده
۲	۱ فصل اول: مقدمه
۳	۱-۱ اهمیت مطالعه و شبیه سازی عددی جریان های چند فازی
۴	۲-۱ مدل سازی عددی جریان های چند فازی
۵	۱-۲-۱ روش های ماکروسکوپیك
۷	۲-۲-۱ روش های میکروسکوپیك
۸	۳-۲-۱ روش های مزوسکوپیك
۸	۳-۱ روش شبکه بولتزمن
۱۲	۴-۱ مراحل انجام تحقیق
۱۳	۲ فصل دوم: روش شبکه بولتزمن
۱۴	۱-۲ معادله بولتزمن
۱۶	۲-۲ گسسته سازی معادله بولتزمن
۱۷	۳-۲ گسسته سازی زمانی
۱۸	۴-۲ محاسبه متغیرهای هیدرودینامیکی
۱۹	۵-۲ استخراج معادله شبکه بولتزمن و تابع توزیع تعادلی
۱۹	۱-۵-۲ تقریب عدد ماخ کم
۲۰	۲-۵-۲ گسسته سازی روی فضای فاز
۲۱	۶-۲ روش شبکه بولتزمن در دو بعد و فضای سرعت ۹ مؤلفه ای
۲۴	۷-۲ شرایط مرزی
۲۵	۱-۷-۲ شرایط مرزی دیوار
۲۸	۲-۷-۲ شرط مرزی پرودیك
۲۹	۸-۲ اعمال نیروی خارجی

۳۰	۹-۲ جریان دوبعدی پریودیک تحت تاثیر نیروی جاذبه .....
۳۴	<b>۳ فصل سوم: مدل‌های دوفازی شبکه بولتزمن .....</b>
۳۴	۱-۳ روش گرادیان رنگ .....
۳۶	۲-۳ مدل اندرکنش محلی .....
۳۸	۳-۳ مدل انرژی آزاد .....
۴۰	۴-۳ مطالعه جزئیات مدل چند فازی چند جزئی شان-چن .....
۴۱	۳-۴-۱ بقای مومتوم کل .....
۴۲	۳-۴-۲ بررسی پتانسیل بین مولکولی در مدل شان-چن .....
۴۶	۳-۴-۳ فشار و کشش سطحی در مدل شان-چن .....
۴۶	۳-۴-۴ مدل شان-چن در مجاورت سطح جامد .....
۴۸	<b>۴ فصل چهارم: اصلاح نیروی اندرکنش بین ذره ای در روش شان-چن .....</b>
۴۸	۱-۴ نیروی اندرکنش بین ذره ای .....
۵۱	۲-۴ بررسی پتانسیل بین ذره ای در مدل تک جزئی چند فازی (SCMP) شان-چن .....
۵۳	۳-۴ بررسی پتانسیل بین مولکولی در مدل چند جزئی - چند فازی (MCMP) شان-چن .....
۵۴	۴-۴ بررسی کشش سطحی مدل شان-چن .....
۵۵	۵-۴ اصلاح نیروی اندرکنش بین ذره ای در مدل شان-چن .....
۵۸	<b>۵ فصل پنجم: بررسی نتایج عددی .....</b>
۵۸	۱-۵ شبیه سازی قطره ساکن در محیط پریودیک به کمک مدل شان-چن .....
۶۲	۱-۱-۵ پروفیل دانسیته و شکل قطره .....
۶۴	۲-۱-۵ سرعت های پارازیتی و ایزوتروپی .....
۶۷	۳-۱-۵ اختلاف فشار و کشش سطحی .....
۶۹	۲-۵ شبیه سازی قطره ساکن در محیط پریودیک به کمک مدل شان-چن اصلاح شده .....
۷۰	۱-۲-۵ استفاده از پتانسیل بین ذره ای $\psi'_\sigma = \rho_\sigma$ برای ذرات هر فاز .....
۸۰	۲-۲-۵ استفاده از پتانسیل بین ذره ای $\psi'_\sigma = \psi_{0,\sigma} \exp\left(\frac{-\rho_{0,\sigma}}{\rho_\sigma}\right)$ برای ذرات هر فاز .....
۸۵	۳-۵ شرایط اولیه مناسب در مدل جدید .....

۴-۵- شیشه سازی قطره روی سطح جامد ..... ۸۹

۵-۵- جمع بندی کلی نتایج ..... ۹۱

۶-۵- پیشنهادات ..... ۹۲

۶ مراجع ..... ۹۳



## فهرست شکل ها

- شکل ۱-۱: روشهای عددی مدلسازی سیال با توجه به طول مشخصه روش عددی. ۴
- شکل ۲-۱: نمایی تقریبی از شبکه محاسباتی روش شبکه با مرزهای محدود شده [۴]. ۵
- شکل ۳-۱: شکل شماتیکی از روش علامتگذاری و سلول. ۷
- شکل ۱-۲: شماتیکی از ذرات سیستم و حرکت آنها. ۱۴
- شکل ۲-۲: نحوه حرکت ذرات در مراحل برخورد و انتشار. ۲۳
- شکل ۳-۲: نمایی کلی از شرط مرزی کمانه ای. ۲۵
- شکل ۴-۲: نحوه اعمال شرط مرزی بازگشت کامل. ۲۶
- شکل ۵-۲: نحوه اعمال شرط مرزی بازگشت نیمه. ۲۷
- شکل ۶-۲: نحوه اعمال شرط مرزی بازگشت اصلاح شده نیمه. ۲۸
- شکل ۷-۲: وضعیت توابع توزیع و اعمال شرط مرزی پرودیک در ورودی و خروجی کانال. ۲۸
- شکل ۸-۲: مشخصات هندسی مدل عددی برای شبیهسازی جریان پویسویل. ۳۰
- شکل ۱۰-۲: نمایه سرعت حاصل از شبیهسازی شبکه بولتزمن در مقاطع مختلف کانال. ۳۳
- شکل ۹-۲: کانتورهای سرعت و فشار برای جریان دو بعدی پویسویل. ۳۳
- شکل ۱-۳: شبکه  $D2Q9$ . ۴۳
- شکل ۱-۴: پتانسیل بین مولکولی لnard-جونز. ۴۹
- شکل ۲-۴: معادله حالت وندروالز. ۵۳
- شکل ۳-۴: انبساط سیال چگالتر در نسبت دانسیته های غیر یک در مدل شان-چن، ۵۴
- شکل ۱-۵: تغییرات سرعت نسبی بدون بعد با زمان برای قدرت نیروی اندرکنش  $G = 1/2$ . ۶۱
- شکل ۲-۵: تغییرات زمانی شکل قطره سیال ۱ در محیط سیال ۲. ۶۲
- شکل ۳-۵: نمودار دانسیته در طول خط مرکزی  $\gamma = 32$  برای حالت اولیه  $\rho_1 = 2/0.93$ ،  $\rho_2 = 2/0.11$  و  $G = 1/4$ . ۶۳
- شکل ۴-۵: نمودار دانسیته در  $\gamma = 32$  برای دانسیته اولیه های  $\rho_1 = 2/0.93$ ،  $\rho_2 = 2/0.11$  و مقادیر مختلف  $G$ . ۶۴
- شکل ۵-۵: سرعتهای پارازیتی برای مقادیر مختلف  $G$  و دانسیته اولیه های  $\rho_1 = 2/0.93$ ،  $\rho_2 = 2/0.11$ . ۶۵
- شکل ۶-۵: دانسیته نقاط مختلف شبکه بر اساس فاصله شعاعی از مرکز قطره. ۶۶
- شکل ۷-۵: دانسیته نقاط مختلف شبکه بر اساس فاصله شعاعی از مرکز قطره [۶۹]. ۶۷
- شکل ۸-۵: نمودار دانسیته فاز ۱ و فشار کل سیال برای  $G = 1/4$ . ۶۸
- شکل ۹-۵: اختلاف فشار بیرون و درون قطره بر حسب انحنائی سطح مشترک  $G = 1/2$ . ۶۹
- شکل ۱۰-۵: اثر تغییر قدرت نیروی اندرکنش ذرات فاز قطره  $G_1$ . ۷۲
- شکل ۱۱-۵: اثر تغییر قدرت نیروی اندرکنش محیط اطراف قطره  $G_2$ . ۷۳
- شکل ۱۲-۵: شبیه سازی حباب (الف) و قطره (ب) به کمک مدل جدید. ۷۴
- شکل ۱۳-۵: اثر تغییر قدرت نیروی اندرکنش بین دو سیال (بر روی سطح مشترک)  $G$  بر حل شدن دو سیال. ۷۶

- شکل ۱۴-۵: اثر تغییر قدرت نیروی اندرکنش بین دو سیال (بر روی سطح مشترک)  $G$  بر سرعت‌های پارازیتی ..... ۷۷
- شکل ۱۵-۵: دانسیته نقاط مختلف شبکه بر اساس فاصله شعاعی از مرکز قطره (تغییر قدرت نیروی اندرکنش بین دو سیال) ... ۷۸
- شکل ۱۶-۵: دانسیته نقاط مختلف شبکه بر اساس فاصله شعاعی از مرکز قطره (تغییر قدرت نیروی اندرکنش ذرات سیال دوم) ۷۹
- شکل ۱۷-۵: دانسیته نقاط مختلف شبکه بر اساس فاصله شعاعی از مرکز قطره (تغییر قدرت نیروی اندرکنش ذرات سیال اول) ۷۹
- شکل ۱۸-۵: اختلاف فشار بیرون و درون قطره بر حسب انحنای سطح مشترک ..... ۸۰
- شکل ۱۹-۵: نمایه دانسیته در مقطع مرکزی دامنه حل برای پتانسیل بین ذره‌های  $\psi'_{\sigma} = \psi_{0,\sigma} \exp\left(\frac{-\rho_{0,\sigma}}{\rho_{\sigma}}\right)$  ..... ۸۱
- شکل ۲۰-۵: اثر تغییر قدرت نیروی اندرکنش بین دو سیال بر تفکیک پذیری آنها ..... ۸۳
- شکل ۲۱-۵: تغییرات کانتور دانسیته قطره با پیشروی در زمان محاسبات برای شرایط اولیه  $\rho_1 = 4$  و  $\rho_2 = 2$  ..... ۸۵
- شکل ۲۲-۵: نمایه دانسیته قطره و سیال پیرامون آن برای شرایط اولیه  $\rho_1 = 4$  و  $\rho_2 = 2$  ..... ۸۶
- شکل ۲۳-۵: اثر تغییر قدرت نیروی اندرکنش بین دو سیال بر تفکیک پذیری آنها ..... ۸۷
- شکل ۲۴-۵: اختلاف فشار بیرون و درون قطره بر حسب انحنای سطح مشترک ..... ۸۹
- شکل ۲۵-۵: رفتار قطره قرار گرفته بر روی سطح آیدوست با زاویه تماس نهایی ۶۵ درجه با پیشروی در زمان ..... ۹۰
- شکل ۲۶-۵: رفتار قطره قرار گرفته بر روی سطح آیدوست با زاویه تماس ۶۰ درجه ..... ۹۰

## فهرست جدول‌ها

- جدول ۱-۲: پارامترهای اولیه مدل عددی ..... ۳۲
- جدول ۱-۵: پارامترهای اولیه مدل عددی ..... ۶۱
- جدول ۲-۵: ماکزیمم سرعت پارازیتی برای مقادیر مختلف نیروی اندرکنش بین ذره ای  $G$ . ..... ۶۶
- جدول ۳-۵: تعاریف متغیرهای رابطه (۸-۵) ..... ۶۸
- جدول ۴-۵: ماکزیمم سرعت پارازیتی برای مقادیر مختلف نیروی اندرکنش بین ذره ای  $G$ . ..... ۷۷
- جدول ۵-۵: ماکزیمم سرعت پارازیتی برای مقادیر مختلف قدرت نیروی اندرکنش بین ذره ای  $G$  ..... ۸۳
- جدول ۶-۵: ماکزیمم سرعت پارازیتی برای مقادیر مختلف قدرت نیروی اندرکنش بین ذرات قطره  $G_1$  ..... ۸۴
- جدول ۷-۵: متغیرهای اولیه مدل عددی اصلاح شده با پتانسیل  $\psi'_\sigma = \psi_{0,\sigma} \exp\left(\frac{-\rho_{0,\sigma}}{\rho_\sigma}\right)$  ..... ۸۵
- جدول ۸-۵: ماکزیمم سرعت پارازیتی برای مقادیر مختلف قدرت نیروی اندرکنش بین ذرات دو سیال  $G$ . ..... ۸۸

## چکیده

شبیه‌سازی جریان‌های چند فاز، با توجه به کاربرد زیاد آنها در صنعت، از جمله مهمترین مسایل روز مهندسی مکانیک هستند. به منظور شبیه‌سازی رفتار سیستم‌های چند جزئی از مدل چند جزئی شبکه بولترمن شان-چن استفاده شده است. با انجام شبیه‌سازی قطره وارد شده در محیط پرپودیک از سیال فاز دوم مشخص شد، این مدل قادر به شبیه‌سازی رفتار سیستم‌های چند فاز با نسبت دانسیته بیش از یک بین دو سیال نیست. با بررسی دقیق معادلات حاکم بر مدل فوق و شناسایی جملات معادله بولترمن، و همچنین با مطالعه نیروهای بین مولکولی در سیال‌های غیر ایده‌آل، نقاط ضعف مدل چند فاز چند جزئی شان-چن شناسایی شده و تغییرات مناسبی برای بهبود نتایج آن در نیروهای بین مولکولی استفاده شده در این مدل انجام شده است. مدل اصلی شان-چن تنها از یک نیروی بین مولکولی دافعه بین ذرات دو جزء استفاده می‌کند که فقط در سطح مشترک دو سیال عمل می‌کند. در مدل جدید، علاوه بر نیروی فوق، نیروهای اندرکنش بین ذره‌ای جداگانه‌ای بین ذرات هر یک از سیال‌ها نیز وارد شده است. افزودن این نیروها معادله حالت هر فاز را تغییر می‌دهد و موجب خواهد شد مدل عددی سازگاری بیشتری با فیزیک سیالات غیر ایده‌آل داشته باشد. نتایج حاصل از استفاده مدل جدید برای شبیه‌سازی قطره وارد شده در سیال دوم نشان می‌دهد، مدل جدید قادر است بر خلاف مدل شان-چن اصلی، سیستم‌های چند فاز چند جزئی با نسبت دانسیته بیش از دو را نیز شبیه‌سازی کند. علاوه بر این، با استفاده از نیروی بین ذره‌ای برابر با مدل اصلی شان-چن در مدل جدید، می‌توان به کشش سطحی بزرگتر نسبت به کشش سطحی مدل شان-چن دست یافت. این در حالی است، که در مدل شان-چن بمنظور دستیابی به کشش سطحی بزرگتر و تنظیم دلخواه آن باید قدرت نیروی اندرکنش بین ذره‌ای بین ذرات دو سیال را افزایش داد که خود باعث افزایش سرعت‌های پارازیتی و ناپایداری مدل عددی می‌شود. به منظور بررسی توانایی مدل شان-چن در شبیه‌سازی سیالات چند فاز در مجاورت سطح جامد و خط تماس سیال-جامد-سیال، شبیه‌سازی قطره قرار گرفته بر روی سطح جامد نیز به کمک این روش انجام شده است. نتایج نشان می‌دهد، این مدل قادر است زاویه تماس استاتیکی قطره با سطح جامد و رفتار قطره بر روی سطوح با خصوصیات سطح متفاوت از آب‌دوست تا آب‌گریز را بخوبی مدل کند.

## کلمات کلیدی

شبیه‌سازی سیالات چندفازی چندجزئی، روش شبکه بولترمن، مدل عددی شان-چن، کشش سطحی، نیروی اندرکنش بین ذره‌ای

## فصل اول: مقدمه

جریان های چند فازی و با سطح مشترک<sup>۱</sup> بخش بزرگی از مسایل سیالاتی را بخود اختصاص می دهند و کاربردهای فراوانی در زمینه های مختلف زیست محیطی، ژئوفیزیک مهندسی و مبانی فیزیک دارند. آن دسته از جریان هایی که دو سیال در یک سطح مشترک با یکدیگر در تماس هستند، نظیر سیال های چند جزئی<sup>۲</sup> همانند تماس آب و روغن و یا جریان های چند فازی<sup>۳</sup> نظیر هوا و سوخت مایع در فرآیندهای احتراقی، جریان های با سطح مشترک نام دارند. سطح مشترک در سیال به علت وجود نیروی کشش سطحی و ایجاد پدیده هایی نظیر ناپایداری کلونین- هلم هلتز و ناپایداری ریلی- تیلور از پیچیدگی زیادی برخوردار است. همچنین به دلیل متحرک بودن سطح مشترک و پیچیدگی شکل سطح که می تواند به شدت با زمان تغییر کند، این مسئله از لحاظ عددی نیز از پیچیدگی های خاصی برخوردار است [۱].

در این پایان نامه مسائلی بررسی می شود که دو سیال در یکدیگر حل نشده<sup>۴</sup> و انتقال جرم بین دو سیال نقش مهمی در مسئله ایفا نماید. در چنین جریان هایی سطح مشترک را می توان یک سطح در نظر گرفت که خواص سیال نظیر فشار و چگالی در دو طرف آن متفاوت بوده و به صورت توابعی ناپیوسته می باشند.

---

<sup>۱</sup> . Interfacial Flows

<sup>۲</sup> . Multi-component Flows

<sup>۳</sup> . Multi phase Flows

<sup>۴</sup> . Immiscible Fluids

### ۱-۱- اهمیت مطالعه و شبیه سازی عددی جریان های چند فازی

جریان های چند فازی و پدیده های سطح مشترک بخش بزرگی از مسائل سیالاتی در زندگی روزانه انسان را به خود اختصاص می دهند و به دلیل کاربرد فراوان جریان های چند فازی در صنعت و طبیعت، مطالعه این جریان ها از اهمیت بالایی برخوردار است. طراحی و عملکرد سیستم هایی که این گونه جریان ها در آن به کار می روند نیازمند فهم مکانیزم فیزیکی اساسی حاکم بر این گونه جریان هاست. لیکن به دلیل رفتار پیچیده جریان های چند فازی، درک ماهیت فیزیکی آن ها به آسانی مقدور نیست. بنابراین در گام اول مطالعه سیالات چند فازی و چند جزئی ساده، قدمی مناسب و حیاطی در درک ماهیت این جریان ها در مسائل واقعی تر است.

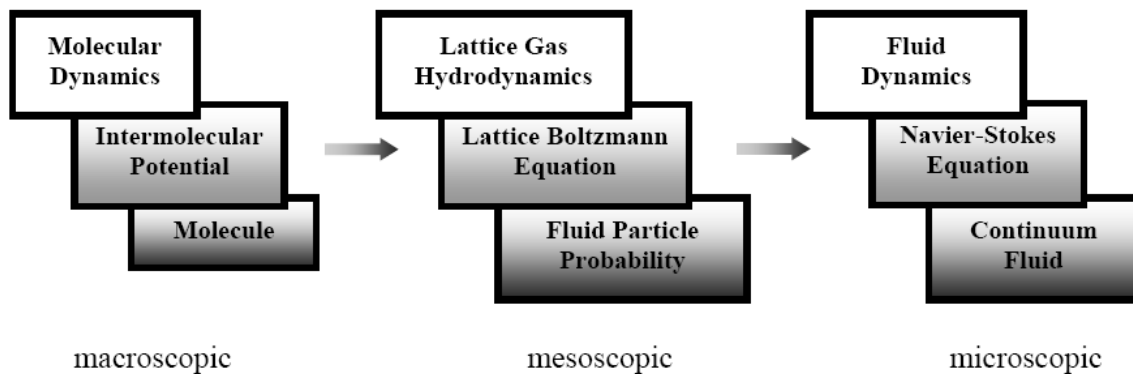
از طرف دیگر، برخلاف سیالات چند فازی، دینامیک و خواص سیالات تک فازی به جز در موارد خاصی همانند جریان مغشوش، تاکنون به خوبی درک شده است. لیکن تا این زمان هنوز مسائل حل نشده بسیاری در زمینه خواص ماکروسکوپیک مواد چند فازی مطرح است. از جمله مشکلات اولیه در شبیه سازی عددی جریان های چند فازی پیش بینی محل سطح مشترک دو سیال، شکل و توپولوژی سطح آن است. روش های آزمایشگاهی و تکنیک های اندازه گیری خواص سیال ها نیز معمولاً برای این گونه جریان ها طراحی نشده اند و معمولاً مشکلات فراوانی در آشکارسازی سطح مشترک و اندازه گیری خواص سیال در فازهای متفاوت دو طرف این سطح دارند.

از جمله روش های آزمایشگاهی بررسی جریان های چند فازی، صرف نظر از خواص اصلی جریان چند فازی است. با این فرض، سیال به صورت یک سیستم تک فاز با سیال غیر نیوتنی در نظر گرفته می شود. اگرچه در بسیاری از مسائل که درصد حجمی ذرات فاز دوم، قطره و یا حباب پایین است، ممکن است سیستم همانند یک سیال تک فاز عمل کند، لیکن اگر غلظت فاز دوم زیاد باشد تغییرات عمده ای در خصوصیات فیزیکی جریان بوجود خواهد آمد و در نظر گرفتن سیستم چند فازی به صورت یک سیال تک فاز فرض معقولی نیست. همچنین در صورتیکه بررسی خصوصیات فاز قطره مورد نظر باشد، روش فوق کاربردی نخواهد داشت. به عنوان مثال در یک سیال تک فاز انتقال مومنتوم به دلیل حرکت یا اندرکنش ذرات سیال با یکدیگر است. در حالی که در یک سیال چند فازی مقاومت سیال در برابر حرکت، تحت تأثیر مکانیزم های زیادی همچون اندرکنش بین دو فاز است. به عنوان نمونه، حرکت قطره در فاز دوم به میزان زیادی به کشش سطحی دو فاز بستگی خواهد داشت، در صورتی که فرض جریان تک فاز از اثرات فوق چشم پوشی می کند. با توجه به دلایل فوق، امکان بررسی آزمایشگاهی جریان های چند فازی به آسانی میسر نیست در حالی که شبیه سازی عددی این جریان ها امکان بررسی انواع مختلف جریان های چند

فازی همچون حرکت قطره و حباب، جریان اسلاگ<sup>۱</sup> جریان چند فازی حلقوی<sup>۲</sup> یا جریان انگشتی (سیال پیوسته در اطراف دیواره کانال و فاز گاز در میان کانال) و نمونه‌های دیگر را فراهم خواهند آورد.

## ۲-۱- مدل سازی عددی جریان های چند فازی

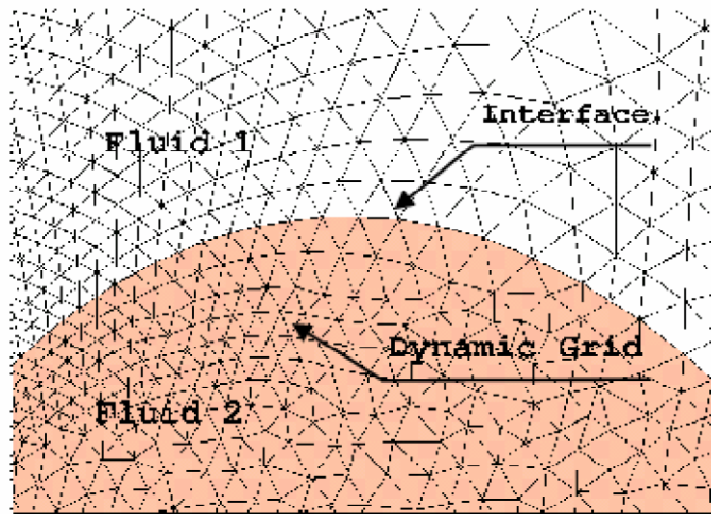
همان گونه که می دانیم معادلات اساسی مکانیک سیالات، پیوستگی و ناویر- استوکس، به صورت کلی برای سیستم‌های تک فازی استخراج شده اند. اگرچه برای یک مخلوط چندگانه دلخواه استخراج مستقیم معادلات پیوستگی و مومنتوم امکان پذیر است ولی به صورت کلی این معادلات [۲] هیچ گونه شباهتی با معادلات ناویر- استوکس ندارند. لیکن استخراج معادلات میانگیری شده حاکم بر سیستم های چند فازی که به صورت کلی دینامیک هرگونه سیستم چند فازی را توضیح دهد به کمک روش انتگرال گیری حجمی امکان پذیر است [۲]. به منظور استخراج معادلات میانگیری شده حاکم بر جریان‌های چند فازی روش های متفاوتی همچون میانگیری زمانی و میانگیری کلی [۳] وجود دارد که همگی به نتایج مشابهی خواهند انجامید. بررسی این معادلات نشان می دهد، معادلات حاکم بر سیستم های چند فازی به قدری پیچیده هستند که امکان حل تحلیلی آن ها به صورت کلی امکان ناپذیر است. لیکن، گسترش توان محاسباتی کامپیوترها در طی سالیان اخیر، حل عددی این معادلات را امکان پذیر نموده است. در این زمینه با توجه به طول مشخصه روش عددی می توان روش های حل عددی این گونه معادلات را به سه دسته‌ی روش های ماکروسکوپی، روش های میکروسکوپی و روش های مزوسکوپی تقسیم کرد:



شکل ۱-۱: روش های عددی مدل سازی سیال با توجه به طول مشخصه روش عددی.

<sup>۱</sup>. Slug Flow

<sup>۲</sup>. Annular Flow



شکل ۲-۱: نمایی تقریبی از شبکه محاسباتی روش شبکه با مرزهای محدود شده [۴].

### ۱-۲-۱- روش های ماکروسکوپیک

روش های ماکروسکوپیک که در واقع استفاده از روش های ریاضی برای حل مستقیم این معادلات است، شامل گسسته سازی معادلات پیوستگی و مومنتوم به کمک روش های دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) و سپس حل معادلات گسسته شده با در نظر گرفتن شرایط اولیه و مرزی مناسب به کمک یک الگوریتم عددی مناسب است. از جمله عمده ترین مشکلات روش های دینامیک سیالات محاسباتی در شبیه سازی جریان های چند فاز، تشخیص محل سطح مشترک و اعمال شرط فیزیکی مناسب برای کشش سطحی آن هاست به گونه ای که با توجه به نوع ردیابی سطح مشترک، این روش ها را می توان به روش های دنبال کننده سطح مشترک<sup>۱</sup> و روش های گیرنده سطح مشترک<sup>۲</sup> تقسیم کرد.

#### الف. روش های دنبال کننده سطح مشترک

این روش ها مستقیماً موقعیت سطح مشترک دو سیال را دنبال می کنند. بنابراین، محاسبه دقیقتر انحناى سطح مشترک به کمک این روش ها امکان پذیر است [۵] شبکه مورد استفاده در این روش ها متحرک است و با توجه به شکل و موقعیت مرز به گونه ای مناسب تغییر می کند. از پرکاربردترین روش های دنبال کننده جبهه می توان به روش شبکه با مرزهای محدود شده<sup>۳</sup> [۴]، روش ترکیبی تریگواسون<sup>۴</sup> [۶] و روش المان مرزی<sup>۵</sup> [۷] اشاره کرد.

<sup>۱</sup> Front Tracking Methods

<sup>۲</sup> Front Capturing Methods

<sup>۳</sup> Boundary Fitted Grid Method

<sup>۴</sup> Tryggvasson's Hybrid Method

<sup>۵</sup> Boundary Element Method (BEM)



در روش شبکه با مرزهای محدود شده، دو دسته معادله ناویراستکوس ( برای هر فاز یک معادله) حل می شوند و شبکه محاسباتی به گونه ای ساخته می شود که سطح مشترک بین دو فاز در طول خط شبکه قرار می گیرد (شکل ۲-۱). حرکت سطح مشترک در این روش به کمک بالانس نیروهای وارد بر این سطح تعیین می شود. در روش تریگواسون دو دسته شبکه مورد استفاده قرار می گیرد. یک شبکه ثابت برای تعیین حرکت سیال و یک شبکه کوچکتر برای دنبال کردن سطح مشترک. در روش المان مرزی گروه بزرگی از گره های مرزی برای تعیین موقعیت سطح مشترک بکار می روند که حرکت این گروه های مرزی براساس معادلات توابع پتانسیل بکار رفته در روش کنترل می شود.

#### ب. روش های گیرنده سطح مشترک

این روش ها ابتدا در هر گام زمانی حرکت سیال را دنبال می کنند و سپس به تعیین موقعیت و شکل سطح مشترک می پردازند. در این روش ها، دو سیال به صورت یک فاز پیوسته با یک ناپوستگی خواص ماکروسکوپی در محل سطح مشترک در نظر گرفته می شوند. بنابراین معادلات جریان سیال که در واقع یک معادله با خواص متغیر است روی یک شبکه محاسباتی و به صورت اویلری حل می شوند که منجر به هزینه محاسباتی پایین تر این روش ها نسبت به روش های دنبال کننده سطح مشترک می شود. بسته به چگونگی تعیین موقعیت سطح مشترک روش های گیرنده جبهه را می توان به صورت کلی به سه دسته تقسیم نمود: روش علامت گذاری و سلول<sup>۱</sup> (MAC) [۸] و [۹]، روش کسر حجمی سیال<sup>۲</sup> (VOF) [۱۰] و روش مکان هندسی<sup>۳</sup> [۱۱].

در روش اول، برای بیان موقعیت سیال مایع ( یکی از فازها) از علامت گذاری های لاگرانژی استفاده می شود. سپس براساس موقعیت این علامت ها سطح مشترک ساخته می شود. خصوصیات فیزیکی همانند ویسکوزیته و دانسیته، برای سیال در هر نقطه شبکه با توجه به فاز نمایش داده شده انتخاب می شود. شکل ۱-۳ اصول روش فوق را بیان می کند. روش MAC از نظر محاسباتی بسیار پرهزینه است زیرا به منظور تعیین دقیق سطح مشترک نیازمند دنبال کردن تعداد زیادی علامت هستیم.

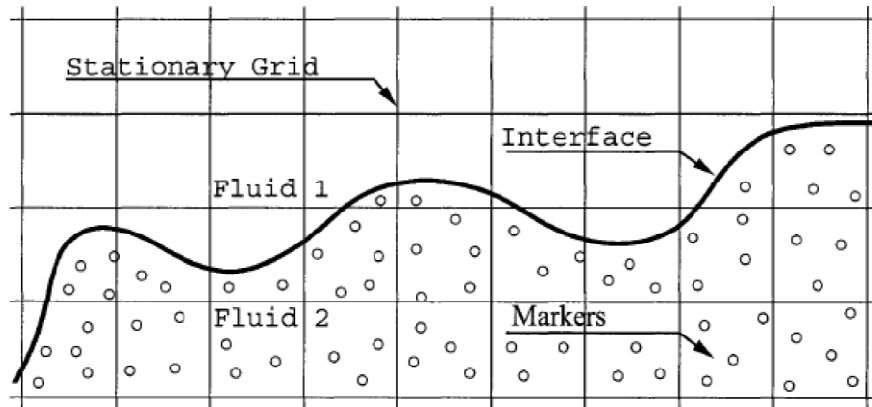
برای کاهش هزینه محاسباتی زیاد روش MAC، روش کسر حجمی سیال VOF معرفی شد. در این روش، به جای دنبال کردن تعداد زیادی علامت، کسر حجمی سیال در هر سلول محاسبه می شود. سلول هایی که کسر حجمی محاسبه شده آن ها بیانگر وجود هر دو سیال در درون سلول است، نشان دهنده سطح مشترک هستند. این روش به خوبی قوانین بقاء را ارضا می کند ولی به دلیل دامنه تغییر کسر حجمی محاسبه شده از صفر

<sup>1</sup> Marker- and – Cell Method (MAC)

<sup>2</sup> Volume of Fluid Method (VOF)

<sup>3</sup> Level Set Method

( فقط فاز ۱) تا یک ( فقط فاز ۲)، در تعیین مکان دقیق سطح مشترک با مشکلاتی روبرو است و قادر به شبیه سازی سطح مشترک بدون ضخامت نیست. لذا در شبیه سازی جریان های با هندسه پیچیده و یا همراه با تغییر توپولوژی بزرگ دچار مشکل خواهد شد.



شکل ۱-۳: شکل شماتیکی از روش علامت گذاری و سلول.

روش های مکان هندسی از دودسته معادله برای شبیه سازی جریان دو فازی استفاده می کنند. دسته اول، همانند دو روش دیگر، معادله ناویر-استوکس حاکم بر یک سیال است که برای تعیین مومنتوم سیال استفاده می شود. دسته دوم، معادله عددی گذرا جابجایی (advection) است که تابع مکان هندسی را دنبال می کند. تابع مکان هندسی در سطح مشترک مقدار صفر خواهد گرفت و برای موقعیت های درون یک فاز مقادیر منفی و برای نقاط درون فاز دیگر مقادیر مثبت به آن تعلق می گیرد. در روش های مکان هندسی، سطح مشترک بسیار آسانتر از روش های VOF و MAC مشخص می شود و می تواند جریان های با هندسه یا تغییر توپولوژی پیچیده همچون جدایش یا اختلاط را که با سایر روش ها به راحتی قابل بررسی نیستند، مدل کند. لیکن نسبت به روش VOF در ارضای قوانین بقاء کم دقت است.

### ۱-۲-۲- روش های میکروسکوپی

مسائل جریان سیال، اعم از مسائل چند فازی و غیره، را میتوان در محدوده میکروسکوپی به کمک روش های دینامیک مولکولی<sup>۱</sup> شبیه سازی نمود. لیکن به منظور دستیابی به نتایج واقعی تر، این روش ها نیازمند افزایش هر چه بیشتر تعداد مولکول های استفاده شده برای شبیه سازی هستند. در مسائل دو فازی، افزایش تعداد مولکول های بیان کننده فاز مایع تا جایی که بتوان وجود فاز دیگر با مولکول های متفاوت را در آن اثر گذار دانست، نیازمند سیستم های محاسباتی بزرگ، پردازش موازی و هزینه محاسباتی بسیار بالاست.

<sup>۱</sup> Molecular Dynamics

### ۱-۲-۳- روش های مزوسکوپیک

جهت پرهیز از مشکلات بکارگیری معادلات ماکروسکوپیک، و همچنین پرهیز از هزینه محاسباتی زیاد روش های MD، می توان از تکنیک شبیه سازی های مزوسکوپیک استفاده کرد. در طول دو دهه گذشته روش هایی همچون شبکه گاز [۱۲]، شبکه بولتزمن [۱۳] و یا روش های دینامیک استهلاکی ذره<sup>۱</sup> (DPD) [۱۴] و [۱۵] که به جای حل معادلات ماکروسکوپیک پیوسته و یا دنبال کردن مولکول های منفرد، براساس تکنیک های روش های مزوسکوپیک عمل می کنند، کاربرد وسیعی یافته اند. هزینه محاسباتی پایین، امکان پردازش موازی، استفاده از شبکه های ساده و منظم، و همچنین ردیابی اتوماتیک سطح مشترک در مسائل چند فازی باعث شده امروزه توجه بسیاری به این گونه روش ها به خصوص در حل مسائل چند فازی شود. در ادامه این فصل تاریخچه مختصری از روش شبکه بولتزمن و سپس مدل های دو فازی شبکه بولتزمن ارائه خواهد شد. جزئیات این روش و مدل دوفازی شبکه بولتزمن و معادلات حاکم بر آن ها که موضوع اصلی پایان نامه فوق را تشکیل می دهد در فصول بعدی این رساله ارائه خواهند گردید.

### ۱-۳- روش شبکه بولتزمن

در سال های اخیر روش شبکه بولتزمن<sup>۲</sup> (LBM) [۱۳؛ ۱۶؛ ۱۷؛ ۱۸؛ ۱۹] که برای اولین بار در سال ۱۹۸۸ توسط مک نامارا و زانتی ارائه شد، به عنوان یک روش دینامیک سیالات محاسباتی توجه زیادی به خود جلب کرده است. ایده اصلی این روش توصیف سیال به صورت مجموعه ای از ذرات است که به صورت محلی در گره های یک شبکه منظم با یکدیگر برخورد می کنند. می توان نشان داد مدل گسسته مزوسکوپیک فوق قوانین بقا دینامیک سیال را حفظ می کند [۱۷] و [۱۸] و بنابراین امکان محاسبه متغیرهای ماکروسکوپیک همانند دانسیته و سرعت را فراهم می آورد. از نظر تاریخی، روش شبکه بولتزمن از ایده روش شبکه گاز<sup>۳</sup> [۲۰؛ ۲۱؛ ۲۲] برای گسسته سازی معادله سینتیک بولتزمن و حل آن استفاده می کند و بنابراین برخی از مزایای این روش (همانند امکان پردازش موازی، عدم وجود دستگاه معادلات خطی و غیر خطی و ...) نسبت به روش های سنتی دینامیک سیالات محاسباتی، در واقع از روش شبکه گاز به ارث رسیده اند. به عنوان مثال از مزایای این روش می توان به انتقال محلی اطلاعات در زمان و مکان اشاره کرد بنابراین همان گونه که ذکر شد معادلات حاکم بر روش شبکه بولتزمن برای محاسبات موازی بسیار مناسب هستند. به علاوه، چون روش فوق به خواص فیزیکی در محدوده دینامیک میکروسکوپی<sup>۴</sup> می پردازد شامل

<sup>1</sup> Dissipative Particle Dynamics

<sup>2</sup> Lattice Boltzmann Method

<sup>3</sup> Lattice Gas Automata

<sup>4</sup> Micro-kinetic Level

هیچ گونه سیستم معادلات خطی یا غیرخطی نمی شود. ماهیت خطی و محلی این روش با توجه به شبکه محاسباتی آن، کاربرد این روش برای شبیه سازی پدیده های سطح مشترک را بسیار مناسب کرده است. ذکر این نکته حائز اهمیت است، اصول اساسی روابط ساختاری روش شبکه بولترمن از ترمودینامیک آماری استخراج می شوند و لذا نسبت به روش های سنتی محیط پیوسته دید فیزیکی متفاوتی در برخورد با مسائل دو فازی همچون جدایی فازها [۲۳]; [۲۴; ۲۵] دیفیوژن [۲۶] و [۲۷]، ترشدگی [۲۸] و [۲۹]، تبخیر [۳۰]، محلول های سیال - ذره [۳۱]، حرکت سیال در محیط متخلخل [۳۲] و [۳۳] و انتقال حرارت [۳۴; ۳۵; ۳۶] دارند.

تا کنون مدل های شبکه بولترمن بسیاری برای شبیه سازی سیالات چندفازی و چندجزئی معرفی شده است (برای مرور مدل های موجود به مقاله مرور گر چن و همکارانش [۳۷] مراجعه کنید). لیکن به صورت کلی می توان همه آنها را در چهار دسته کلی معرفی نمود: مدل گردایان رنگ [۳۸] توسط گانستن سان<sup>۱</sup> در سال ۱۹۹۱، مدل اندرکنش محلی [۲۶; ۳۹; ۴۰; ۴۱] توسط شان و چن<sup>۲</sup> در سال ۱۹۹۴، مدل انرژی آزاد [۴۲] و [۴۳] توسط سوئیفت<sup>۳</sup> و همکارانش در سال ۱۹۹۵ و مدل HSD [۳۵] توسط هی، شان و دولن<sup>۴</sup> در سال ۱۹۹۸. اگرچه برخی از مدل های جدید از دیدگاهی متفاوت با این چهار مدل استفاده می کنند، لیکن امروزه متداولترین و مهمترین مدل های چندفازی شبکه بولترمن به نوعی زیر شاخه این مدل ها محسوب می شوند. لذا در فصل سوم به صورت خلاصه به معرفی هر یک از این مدل ها پرداخته خواهد شد.

روش گردایان رنگ به دلیل مشکلات سازگاری ترمودینامیکی وعدم وجود ایزوتروپی لازم امروزه از کاربرد کمی برخوردار است. لیکن از میان روش های دو فازی عنوان شده در بالا روش شان و چن به دلیل سادگی معادلات حاکم و اعمال آن ها در الگوریتم عددی کاربرد فراوانی یافته است. مدل اصلی در دو نوع مدل چند فازی تک جزئی<sup>۵</sup> [۳۹] و [۴۰] و مدل چند فازی چند جزئی<sup>۶</sup> [۲۶; ۴۱; ۴۴] ارائه شده است که هر دو از یک پتانسیل بین ذره ای برای اعمال نیروی اندرکنش بین ذرات به عنوان ایده اصلی استفاده می کنند. رسکینماکی [۲۸] فرآیند پخش یک قطره کوچک بر روی سطوح جامد هموار و زبر را به کمک این مدل شبیه سازی کرد. فان و همکارانش [۴۵] روش فوق را برای شبیه سازی زاویه تماس در یک کانال دوبعدی موئینه بکار برد و وابستگی سرعت به زاویه تماس را برای دو سطح متفاوت با خصوصیات ترشدگی متفاوت مطالعه نمود. در کارهای جداگانه ای ساکی و ساکوپ [۴۶] و

<sup>1</sup> Gunstensen

<sup>2</sup> Shan and Chen

<sup>3</sup> Swift

<sup>4</sup> He, Shan and Doolen (HSD)

<sup>5</sup> Single Component Multi Phase (SCMP)

<sup>6</sup> Multi Component Multi Phase (MCMP)