بسم الله الرحمن الرحیم

فهرست

عنوان **صفحه**

فصل اول: مقدمه

۱-۱مقدمه ۲

۱-۲ تاریخچه روش شبکه بولتزمن ۴

۱-۳ مدل های روش شبکه بولتزمن ۵

۱-۴ مروری بر کارهای گذشته ۷

۱-۴-۱ جریان با هندسه ساده ۷

۱-۴-۲ جریان با هندسه پیچیده ۸

۱-۴-۳ میکرو/نانو جریان ها ۹

۱-۴-۴ جریان های چند فازی ۱۲

۱-۴-۵ جریان همراه با واکنش شیمیایی ۱۳

۱-۵ هدف پژوهش ۱۵

فصل دوم: مبانی روش شبکه بولتزمن

۲-۱ مقدمه ۱۸

۲-۲ الگوریتم حل ۲۳

۲-۳ تبدیل واحد ۲۶

۲-۴ حدس اولیه ۲۸

۲-۵ شرایط مرزی ۲۹

۲-۵-۱ شرط مرزی دیوار ۳۰

۲-۵-۲ شرط مرزی ورودی ۳۳

۲-۵-۳ شرط مرزی خروجی ۳۵

۲-۶ میدان دما ۳۶

۲-۶-۱ شرایط مرزی ۳۸
۲-۶-۱-۱ ورودی (دما ثابت) ۳۸
۲-۶-۱-۲ دیوار (دما ثابت) ۳۹
۲-۶-۱-۳ خروجی (عدم گرادیان) ۳۹
۲-۷ واکنش شیمیایی ۳۹
۲-۷-۱ شرایط مرزی ۴۱
۲-۷-۱-۱ ورودی (غلظت ثابت) ۴۲
۲-۷-۱-۲ دیوار (شار صفر) ۴۳
۲-۷-۱-۳ خروجی (عدم گرادیان) ۴۴

فصل سوم: ارزیابی کد

۳-۱ مقدمه ۴۷
۳-۲ جریان حول استوانه ۴۸
۳-۲-۱ شرایط مرزی ۴۹
۳-۲-۲ نتایج ۵۰
۳-۳ جریان جابجایی آزاد درون محفظه ۵۵
۳-۳-۱ شرایط مرزی ۵۶
۳-۳-۲ نتایج ۵۶

فصل چهارم: واکنش های سطحی

۴-۱ مقدمه ۶۴
۴-۲ فرضیات ۶۵
۴-۳ تعریف مسئله ۶۶
۴-۴ استقلال از شبکه ۶۷
۴-۵ نتایج ۶۹

۴-۵-۱ اثر سرعت ورودی ۷۸
۴-۵-۲ اثر اندازه دانه بندی ۷۹
۴-۵-۳ اثر چیدمان ۸۱

فصل پنجم: نتیجه گیری و پیشنهادات

۵-۱ مقدمه ۸۶
۵-۲ جمع بندی ۸۶
۵-۳ پیشنهاد برای پژوهش های آینده ۸۹

پیوست ها

پیوست الف: بسط چپمن-انسکاگ ۹۱
منابع ۹۵

فهرست شکل ها

عنوان **صفحه**

شکل ۱-۱: جزئیات میدان جریان در یک محیط متخلخل، شکل سمت چپ نتایج ازمایشگاهی، شکل سمت راست نتایج روش شبکه بولتزمن [۱۶]..... ۸

شکل ۱-۲: رژیم های جریان و روش های عمده تحلیل براساس عدد نادسن..... ۱۰

شکل ۲-۱: ساختار سلول دو بعدی D2Q9 و جهت های مجاز ۲۰

شکل ۲-۲ : سلول D1Q3..... ۲۱

شکل ۲-۳ : سلول D3Q19..... ۲۱

شکل ۲-۴: نمایش برخورد و انتشار توابع توزیع. مرحله برخورد تنها درون گره A اتفاق می افتد سپس توابع توزیع به گره های مجاور منتقل می گردد..... ۲۴

شکل ۲-۵: فلوچارت روش شبکه بولتزمن..... ۲۵

شکل ۲-۶: روش عقب گرد استاندارد. دایره های توخالی و تو پر به ترتیب بیان گر گره سیال و گره دیوار می باشند..... ۳۱

شکل ۲-۷: روش عقب گرد نیمه راه. دایره های توخالی و تو پر به ترتیب بیان گر گره سیال و گره دیوار می باشند..... ۳۱

شکل ۲-۸: توابع توزیع در مرز ورودی (چپ) و خروجی (راست) کانال..... ۳۳

شکل ۲-۹: توابع توزیع مجهول (خط چین) و معلوم (خط توپر) در مرز ورودی..... ۴۲

شکل ۲-۱۰: توابع توزیع مجهول (دایره) روی دیوار بالا..... ۴۳

شکل ۳-۱: هندسه جریان حول استوانه مربعی..... ۴۹

شکل ۳-۲: خطوط جریان اطراف استوانه در Re=1، شکل سمت چپ روش شبکه بولتزمن و شکل راست حجم محدود..... ۵۱

شکل ۳-۳: خطوط جریان اطراف استوانه در Re=30، شکل سمت چپ روش شبکه بولتزمن و شکل راست حجم محدود ۵۱

شکل ۳-۴: خطوط جریان اطراف استوانه در Re=200، شکل بالا روش شبکه بولتزمن، شکل پایین حجم محدود ۵۲

شکل ۳-۵: کانتور سرعت در راستای x در Re=200 ..... ۵۳

شکل ۳-۶: توزیع سرعت بی بعد در راستای x برای Re=100 ..... ۵۳

شکل ۳-۶: مقایسه ضریب پسای بدست امده از روش شبکه بولتزمن با نتایج روش حجم محدود بر حسب عدد رینولدز ۵۵

شکل ۳-۷: هندسه مسئله و شرایط مرزی ۵۶

شکل ۳-۸: مقایسه عدد ناسلت میانگین بدست امده از روش شبکه بولتزمن با نتایج روش حجم محدود ۵۸

شکل ۳-۹: خطوط هم دما برای اعداد رایلی مختلف، سمت راست نتایج شبکه بولتزمن، سمت چپ حجم محدود ۶۰

شکل ۳-۱۰: توزیع دمای بی بعد در y/L=0.5 و $Ra=10^5$ ۶۱

شکل ۳-۱۱: توزیع سرعت بی بعد u_x در x/L=0.5 و $Ra=10^5$ ۶۱

شکل ۳-۱۲: توزیع سرعت بی بعد u_y در y/L=0.5 و $Ra=10^5$ ۶۲

شکل ۴-۱: هندسه مسئله مورد مطالعه ۶۷

شکل ۴-۲: توزیع دما در مقطع x/H=1.1 برای سه شبکه متفاوت و Re=52.26 ..... ۶۸

شکل ۴-۳: شبکه مورد استفاده به منظور ارائه نتایج ۶۹

شکل ۴-۴: روند همگرایی میدان جریان ۶۹

شکل ۴-۵: مقایسه کانتور سرعت بدست امده از روش شبکه بولتزمن (شکل بالا) و روش حجم محدود (شکل پایین) بر حسب متر بر ثانیه ۷۰

شکل ۴-۶: خطوط جریان در Re=52.26 ..... ۷۱

شکل ۴-۷: مقایسه کانتور دمای محاسبه شده توسط روش شبکه بولتزمن (بالا) با روش حجم محدود (پایین) برحسب درجه کلوین ۷۲
شکل ۴-۸: کانتور کسر جرمی استون ۷۳
شکل ۴-۹: مقایسه کانتور کسر جرمی محاسبه شده توسط روش شبکه بولتزمن (بالا) و روش حجم محدود (پایین) در Re=52.26 ..... ۷۴
شکل ۴-۱۰: مقایسه نمودار سرعت بدست امده از روش شبکه بولتزمن با نتایج حجم محدود در x=0.09m ۷۵
شکل ۴-۱۱: مقایسه توزیع دمای بدست امده از روش شبکه بولتزمن با نتایج حجم محدود در x=0.09m ۷۶
شکل ۴-۱۲: مقایسه توزیع غلظت ایزوپروپانول بدست امده از روش شبکه بولتزمن با نتایج حجم محدود در x=0.09m ۷۷
شکل ۴-۱۳: درصد تبدیل ایزوپروپانول برحست عدد رینولدز ورودی ۷۹
شکل ۴-۱۴: کانتور غلظت ایزوپروپانول برای دو اندازه دانه متفاوت، شکل بالا (a=6 mm)، شکل پایین (a=3 mm) در Re=34.5 ..... ۸۰
شکل ۴-۱۵: کانتور سرعت u_x برحسب واحدهای شبکه برای چیدمان جابجا شده (بالا) و منظم (پایین) در رینولدز ورودی Re=5.85 ..... ۸۲
شکل ۴-۱۶: کانتور کسر جرمی ایزوپروپانول برای چیدمان جابجا شده (بالا) و منظم (پایین) در رینولدز ورودی Re=5.85 ..... ۸۳

نمادها			
نماد	نام فارسی	نام انگلیسی	واحد
a	طول ضلع	Edge length	m
A	سطح مقطع	Cross section	m^2
c	سرعت شبکه	Lattice speed	___
C_D	ضریب پسا	Drag coefficient	___
C_p	ظرفیت گرمایی ویژه	Specific heat capacity	$J/Kg.K$
C_s	سرعت صوت شبکه	Lattice sound speed	___
D	ضریب نفوذ جرم	Mass diffusivity Coefficient	m^2/s
e	سرعت گسسته شده ذره	Discrete particle velocity	___
f	تابع توزیع	Disribution function	___
F	نیرو	Force	N
g	تابع توزیع دما	Temperature distribution function	___
g	شتاب گرانش	Gravitational acceleration	m^2/s
H	عرض	Width	m
k	ثابت بولتزمن	Boltzmann constant	$W/m^2.K$
L	طول	Length	m
Ma	عدد ماخ	Mach number	___
N	تعداد گره	Grid number	___
Nu	عدد ناسلت	Nusselt number	___
P	فشار	Pressure	Pa

Pe	عدد پکلت	Peclet number	___
Pr	پرانتل	Prandtl	___
Q	گرمای واکنش	Reaction heat	J/mol
R	ثابت جهانی گاز	Universal gas constant	$J/mol.K$
R	نرخ واکنش	Reaction rate	$mol/m^3.s$
Ra	عدد رایلی	Rayleigh number	___
Re	عدد رینولدز	Reynolds number	___
S	جمله چشمه	Source term	$1/s$
t	زمان	Time	s
T	دما	Temperature	K
T^*	دمای بی بعد	Dimensionless temperature	___
u	سرعت	Velocity	m/s
U	اندازه سرعت	Velocity magnitude	m/s
U^*	سرعت بی بعد در راستای x	Dimensionless x velocity	___
v	سرعت ذره	Particle velocity	m/s
V	سرعت نسبی	Relative velocity	m/s
V^*	سرعت بی بعد در راستای y	Dimensionless y velocity	___
w	ضریب وزنی	Weight coefficient	___
W	جرم مولکولی	Molecular mass	Kg/mol
x	مکان	Position	m
y	مکان	Position	m

Y	کسر جرمی	Mass fraction	___
علائم یونانی			
نماد	**نام فارسی**	**نام انگلیسی**	**واحد**
α	ضریب نفوذ گرمایی	Thermal diffusivity coefficient	m^2/s
β	ضریب انبساط حرارتی	Thermal expansion coefficient	$1/K$
θ	زاویه	Angle	rad
δt	گام زمانی شبکه	Lattice time step	___
δx	فاصله گره	Mesh spacing	___
λ	طول آزاد متوسط	Mean free path	m
λ	ضریب استوکیومتریک	Stoichiometric coefficient	___
μ	گرانروی دینامیکی	Dynamic viscosity	$Kg/m.s$
υ	گرانروی سینماتیک	Kinematic viscosity	m^2/s
ρ	چگالی	Density	Kg/m^3
τ	زمان آسایش بی بعد	Dimentionless relaxation time	___
τ_w	تنش برشی	Shear stress	N/m^2
ς	زمان آسایش	Relaxation time	s
زیرنویس ها			
نماد	**نام فارسی**	**نام انگلیسی**	**واحد**
Ace	استون	Acetone	___
c	سرد	Cold	___
g	حرارتی	Thermal	___

h	گرم	Hot	___
i	جهت سرعت گسسته شده	Discrete velocity direction	___
Ipa	ایزوپروپانول	Isopropanol	___
H_2	هیدروژن	Hydrogen	___
L	شبکه	Lattice	___
o	خروجی	outlet	___
p	فیزیکی	Physical	___
x	راستای محور x	x-direction	___
y	راستای محور y	y-direction	___
Y	شیمیایی	Chemical	___
σ	شماره گونه	Species number	___
0	مقدار مرجع	Reference value	___
بالانویس ها			
eq	تعادلی	Equiliberium	___

فصل اول: مقدمه

فصل اول: مقدمه

۱-۱ مقدمه

از دیرباز مدل های ریاضی نظیر معادلات ناویر استوکس و یا معادله بولتزمن به منظور توضیح رفتار جریان سیال مورد توجه بوده اند. با این وجود، حل تحلیلی این معادلات بسیار پیچیده و در اغلب موارد امری ناممکن در محدوده دانش فعلی می باشد. با رشد فزاینده فناوری سخت افزاری و نرم افزاری در سال های اخیر، شبیه سازی عددی، به عنوان روشی قدرتمند در دینامیک سیالات، توجه بسیاری از محققین را به خود جلب نموده است.

در این میان، روش دینامیک سیالات محاسباتی[۱] که بر پایه پیوستگی رژیم جریان توسعه پیدا نموده از جایگاه ویژه ای برخوردار می باشد. در این روش حوزه محاسباتی به اجزاء کوچکی تجزیه گردیده و معادلات ریاضی با روش هایی نظیر المان محدود[۲] و حجم محدود[۳] گسسته می گردند. پس از آن از یک برنامه محاسباتی به منظور حل معادلات جبری بوجود امده استفاده می شود. همچنین، چندین نرم افزار

[1] Computational fluid dynamics
[2] Finite element
[3] Finite volume

تجاری برپایه روش فوق توسعه پیدا نموده اند که از آن جمله می توان به فلوئنت[۱]، سی اف ایکس[۲] و استار سی دی[۳] بر پایه روش حجم محدود و کامسول[۴] بر اساس روش المان محدود اشاره نمود.

در مقابل، رشد روزافزون ابزارهای در ابعاد میکرو/نانو در دهه گذشته نیاز به انجام مطالعات عددی و ازمایشگاهی در این زمینه را به شکل قابل ملاحظه ای افزایش داده است. از آنجا که انجام مطالعات ازمایشگاهی با توجه به ابعاد کوچک میکرو/نانو ابزارها امری دشوار و هزینه بر می باشد، مطالعات عددی چنین جریان هایی از محبوبیت بالایی برخوردار می باشد. عدد بی بعد مهم در مطالعه جریان های در ابعاد میکرو/نانو عدد نادسن[۵] می باشد که بصورت زیر تعریف می گردد [۱]:

$$Kn = \lambda / H \qquad (۱-۱)$$

در رابطه فوق λ طول آزاد متوسط گاز و H طول مشخصه سیستم می باشد. از آنجا که در جریان های در ابعاد میکرو/نانو H و λ تقریبا از مرتبه برابر می باشند، اثر عدد نادسن معمولا غیر قابل چشم پوشی می باشد. براساس عدد نادسن، رژیم جریان به چهار گروه تقسیم بندی می گردد که عبارتند از: جریان پیوسته[۶] (Kn<0.001)، جریان لغزشی[۷] (0.001<Kn<0.1)، جریان انتقالی[۸] (0.1<Kn<10) و جریان آزاد آزاد مولکولی[۹] (Kn>10) [۱]. ثابت گردیده است که معادلات ناویر استوکس همراه با شرط مرزی لغزش قادر به تحلیل جریان در رژیم لغزشی می باشند. در حالیکه برای رژیم انتقالی می بایست از روش های ذره محور نظیر شبیه سازی مستقیم مونت کارلو[۱۰] و یا روش شبکه بولتزمن[۱۱] استفاده نمود. در این میان با توجه به ویژگی های منحصر به فرد روش شبکه بولتزمن، این روش تبدیل به یکی از پرطرفدارترین

[1] Fluent
[2] CFX
[3] STAR-CD
[4] COMSOL
[5] Knudsen
[6] Continuum flow
[7] Slip flow
[8] Transition flow
[9] Free molecular flow
[10] Direct simulation Monte Carlo (DSMC)
[11] Lattice Boltzmannn method

موضوعات در کنفرانس ها و مقالات دینامیک سیالات گردیده است. در ادامه معرفی و تاریخچه مختصری از این روش ارائه می گردد.

۱-۲ تاریخچه روش شبکه بولتزمن

روش شبکه بولتزمن برای اولین بار توسط مک نامارا و زانتی[1] [۲] به منظور غلبه بر نواقص روش شبکه گاز[2] ارائه شد. پس از آن، روش توسعه پیدا نموده و بطور گسترده در پژوهش های صنعتی و آموزشی مورد استفاده قرار گرفت [۳]. مبدا روش شبکه بولتزمن را می توان روش شبکه گاز دانست که تنها قادر به بررسی اثرات هیدرودینامیکی می باشد [۴]. با این حال، در سال های اخیر روش شبکه بولتزمن تبدیل به یک روش عددی قدرتمند با توانایی شبیه سازی میدان جریان و دما [۵]، جریان های در ابعاد میکرو و نانو [۶, ۷]، جریان های چند فازی [۸] و همچنین جریان های آشفته گردیده است [۹]. این در حالیست که در حضور پیچیدگی هایی نظیر جریان در محیط های متخلخل[3]، جریان های رقیق گازی، جریان با مرزهای هندسی پیچیده و یا جریان خون با تغییر شکل و جابجایی ذرات معلق درون آن، معادلات ناویر استوکس دقت و کارایی خود را از دست می دهند. در مقابل، روش شبکه بولتزمن که قادر به تحلیل جریان های در مقیاس ماکروسکوپیک و میکروسکوپیک می باشد، می تواند بهترین انتخاب در تحلیل چنین جریان های پیچیده ای محسوب گردد.

این روش با استفاده از توابع توزیع[4]، احتمال حضور یک ذره در زمان و مکانی مشخص را به کار می گیرد. گیرد. در نتیجه، بر خلاف روش دینامیک مولکولی[5]، رفتار و موقعیت تک تک مولکول ها مورد بررسی قرار قرار نمی گیرد. به عبارت دیگر، اثر کلی حضور مولکول ها در توابع توزیع ذرات در نظر گرفته می شوند. بر این اساس، می توان روش شبکه بولتزمن را پلی میان روش های ماکروسکوپیک نظیر روش حجم

[1] McNamara and Zanetti
[2] Lattice gas cellular automata
[3] Porous media
[4] Distribution functions
[5] Molecular dynamics

محدود به منظور حل عددی معادلات ناویر-استوکس و روش های ذره محور سنتی نظیر روش دینامیک مولکولی دانست.

به طور کلی الگوریتم روش شبکه بولتزمن دارای ویژگی هایی است که آن را از روش های عددی سنتی برای حل میدان جریان متمایز می نماید که برخی از آن ها به شرح زیر می باشند:

۱- جمله جابجایی[1] در روش شبکه بولتزمن خطی می باشد که این موضوع متفاوت با معادلات ناویر استوکس است.

۲- فشار در روش شبکه بولتزمن توسط معادله حالت بدست می اید در حالی که در حل معادلات ناویر استوکس فشار با تبدیل معادله پیوستگی به رابطه ای برای تصحیح فشار استخراج می گردد که این امر مستلزم استفاده از الگوریتم های تکرار و اعمال ضرایب زیر تخفیف می باشد.

۳- در مقایسه با روش هایی نظیر DSMC، روش شبکه بولتزمن ازجهت های حرکت محدودتری استفاده می نماید. این ویژگی باعث می گردد که انتقال از فضای توابع توزیع به کمیت های ماکروسکوپیک با سادگی و سرعت بیشتری صورت پذیرد.

با وجود مزایای زیاد، روش دارای نقاط ضعفی نیز می باشد که از جمله می توان به موارد زیر اشاره نمود:

ضعف در مدل سازی جریان های چند فازی گاز-مایع با اختلاف چگالی و یا اختلاف گرانروی زیاد بین فازها.

ضعف در شبیه سازی جریان های با اعداد ماخ بالا.

ضعف در مدل نمودن هندسه با مرزهای منحنی.

وابستگی روابط ارائه شده به نوع شبکه انتخابی در اعمال شرایط مرزی.

با وجود این، در سال های اخیر گام های ارزشمندی به منظور رفع نواقص فوق انجام گرفته که دستاوردهای چشم گیری نیز به همراه داشته است.

[1] Advection