دریافت مقاله: ۱۳۹۶/۰۲/۲۵
پذیرش مقاله: ۱۳۹۶/۰۳/۳۰

اصول و مفاهیم دینامیک سیالات محاسباتی مدرن (LBM)

شهرام قربانی‌فر[۱]*، مربی (دانشجوی دکتری)، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد آستارا

*نویسنده مخاطب، آدرس آستارا، کد پستی: ۴۳۹۱۸۵۳۹۷۸

sh.ghorbanifar @ iau-astara.ac.ir

عدم وجود حل تحلیلی کامل برای معادلات ناویر–استوکس باعث شده است که روش‌های عددی نقش مهمی در تحلیل مسائل در علوم و مهندسی ایفا نماید. همچنین، هر یک از روش‌ها بسته به فرضیات صورت گرفته در مراحل تدوین، دارای نقاط ضعفی هستندکه محققین برای جبران آن یا روش‌های قبلی را توسعه و بهبود می‌دهند یا روش‌های مدرن ابداع می‌کنند. فرض پیوستگی سیال در استخراج معادلات ناویر–استوکس این معادلات را در رده‌بندی روش‌های ماکرو قرار می‌دهد. در نتیجه روش‌های سنتی دینامیک سیالات محاسباتی محدود به این فرض شده و نمی‌توانند مسائل فراتر را تحلیل نمایند. هدف این مقاله، معرفی نقاط قوت روشی جدید در دینامیک سیالات محاسباتی است که میدان عمل آن در مقیاس مزو است و پیوستگی سیال محدودیت تلقی نمی‌شود. بنابراین، می‌تواند بسیاری از نقاط ضعف روش‌ها در مقیاس ماکرو را پوشش دهد و طیف وسیعی از مسائل را با راندمان رضایت‌بخش تحلیل نماید.

واژه‌های کلیدی: دینامیک سیالات محاسباتی، مقیاس مزو، LBM

Basics and Concepts Modern CFD (LBM)

Sh. Ghorbanifar [1*], PhD student, Islamic Azad University, Astara Branch

*Corresponding Author, Postal Code: 4391853978, Astara, IRAN

sh.ghorbanifar @ iau-astara.ac.ir

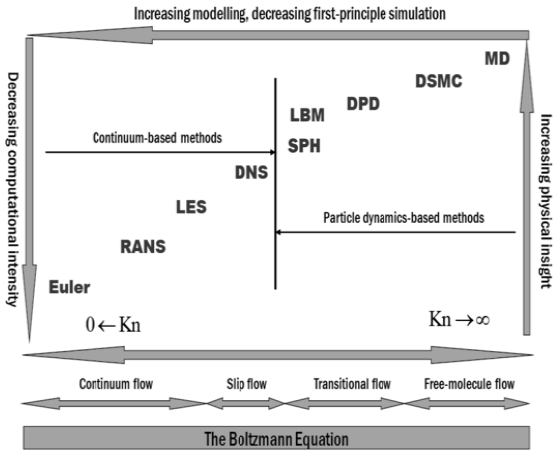
Due to the complex nonlinear nature of Navier Stokes equations, theyhave not yet been fully solved ad hencethe role of classical CFD methods have become more highlighted. Using numerical methods, we can discretise nonlinear partial differential equations and change them into linear algebraic equations thatcan be solved via classical methods in a very straight forward manner. In these approaches, also each method suffers some limitations which areimposed on it during its derivation, so inorder to cover the weaknesses and shortcomings of these methods, many scientists and researchers try to improvethem or invent new methods. Continuum assumption,being created during NavierStokes equations derivation, is an extreme limitation for classical CFD methods which puts them in the macro-scale category. The goal of this paper is to introduce the strengths of a modern CFD method which is a mesoscale method that can easily cover most shortcomingsof the macroscale approachesand can handle a wide range of problems satisfactorily.

Keywords: CFD, Meso-scale, LBM

مقدمه

معادلات ناویر–استوکس[1](NSE)، با اعمال قانون دوم نیوتن و قانون لزجت نیوتن به سیال در حال حرکت به‌دست می‌آیند. این معادلات به‌دلیل کاربرد فوق‌العاده زیاد آن در علوم و مهندسی از اهمیت بالایی برخوردارند. فارغ از مقیاس مسئلهٔ موردنظر، پیوستگی سیال فرض اساسی به‌کار رفته در استخراج این معادلات است. در یک تقسیم‌بندی، این معادلات از نوع معادلات دیفرانسیل غیرخطی با مشتقات جزئی هستند. غیرخطی بودن، باعث شده است که حل کامل آنها در بسیاری از حالات مانند مسائل چند فازی ، توربولانس و ... غیرممکن باشد. لذا برای اعمال این معادلات به مسائل موردنظر اغلب لازم است از روش‌های عددی استفاده شود. در طول چند دههٔ گذشته استفاده از CFD[2] سنتی در علوم و مهندسی برای شبیه‌سازی رفتار سیالات نتایج ارزشمندی به بار آورده است. با این وجود، به‌دلیل فرض پیوستگی و فرض دور بودن سرعت سیال از دامنهٔ سرعت‌های نسبیتی[3] در استخراج NSE، این معادلات در مقیاس ماکرو مطرح می‌باشند. در مقیاس‌های کوچک‌تر با گرادیان‌های تند، به‌دلیل اینکه سیالات واقعی که در اصل از ذرات منفرد تشکیل شده‌اند، نتایجی تولید می‌کنند که با سیالات پیوسته مدل شده توسط NSE مغایرت دارند. به‌عنوان مثال، می‌توان به آثار موئینگی و کشش سطحی در سیالات چند فازی اشاره کرد که در مرز مشترک دوفاز گرادیان شدید خواص سیال ایجاد می‌کنند. لذا، در جریان‌های با اعداد نادسن[4] بزرگ که جریان سیال در مقیاس مزو مطرح می‌شود، شبیه‌سازی جریان سیال توسط معادلهٔ بولتزمن پاسخ‌های منطبق بر واقعیت ارائه می‌دهد. برای جریان‌های با اعداد نادسن خیلی بزرگ می‌توان شبیه‌سازی را در مقیاس میکرو انجام داد. شکل (۱) روش‌های عددی در مقیاس‌های مختلف را نمایش می‌دهد [۱].

CFD سنتی در دههٔ ۷۰ میلادی توسط اسپالدینگ[5] براساس RANS[6] توسعه داده شد. سپس، با پیشرفت کامپیوترها در دههٔ ۹۰ محاسبات دقیق‌تر توسط روش‌های LES[7] و بعد از آن DNS[8] انجام پذیرفت. ولی تمام این روش‌ها در مقیاس ماکرو مطرح هستند. لازمهٔ این روش‌ها برقراری فرض پیوستگی سیال است که اعمال آن به مسائل در مقیاس مزو و میکرو را دشوار و حتی غیر ممکن می‌سازد. در CFD مدرن از نگرش‌های بنیادی‌تر استفاده می‌شود که بر مبنای ذرات استوار است و استفاده از آن نیازی به برقراری شرط پیوستگی سیال ندارد. در این میان می‌توان در مقیاس میکرو به دینامیک مولکولی MD[9]، شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو DSMC[10] و دینامیک اتلافی ذره DPD[11] اشاره کرد که به دلیل نیاز به حجم حافظهٔ خیلی زیاد، هزینهٔ محاسباتی بالایی دارند و استفاده از این روش‌ها عملی نیست و لذا درحال حاضر چندان مورد توجه محققان نیستند. مابین مقیاس ماکرو و میکرو یک ناحیهٔ میانی به نام مقیاس مزو قرار دارد که روش‌های SPH[12] و LBM[13] در این ناحیه قرار می‌گیرند که از نظر هزینهٔ محاسباتی معقول و استفاده از آن عملی است. در این میان روش LBM به دلیل قابلیت ذاتی‌اش در پردازش موازی، اقبال بیشتری میان محققان دارد. به‌طوری‌که، روش LBM در طول یک و نیم دههٔ گذشته پیشرفت‌های چشمگیری را در دینامیک سیالات مدرن باعث شده است.



شکل ۱- نگرش‌های مدل‌سازی و شبیه‌سازی

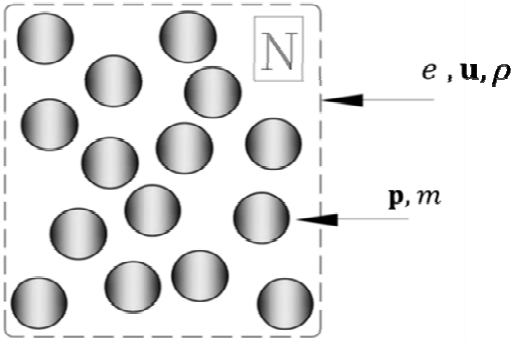
معادلهٔ انتقال بولتزمن

روش شبکهٔ بولتزمن بر مبنای معادلهٔ انتقال بولتزمن BTE[14] قرار دارد. این معادله بیانگر رفتار آماری یک سیستم ترمودینامیکی است که در حالت تعادل قرار ندارد. در ادامه به روند استخراج و فرض‌های به‌کار رفته در روش شبکهٔ بولتزمن پرداخته می‌شود.

1. Navier-Stokes Equations
2. Computational Fluid Dynamics
3. Relativistic Velocities
4. Knudsen
5. Spalding
6. Reynolds Averaged Navier–Stokes Equations
7. Large Eddy Simulation
8. Direct Numerical Simulation
9. Molecular Dynamics
10. Direct Simulation Monte Carlo
11. Dissipative Molecular Dynamics
12. Smoothed Particle Hydrodynamics
13. Lattice Boltzmann Method
14. Boltzmann Transport Equation

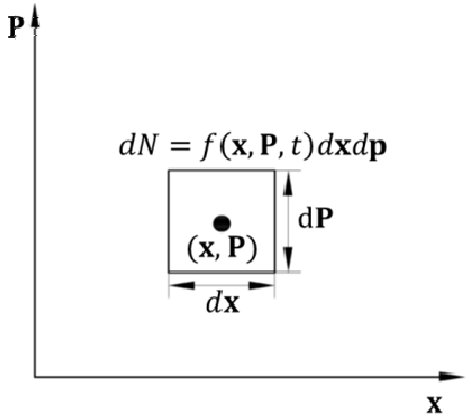
تئوری جنبشی گازها

لودویگ بولتزمن بیان می‌کند که گازها از ذراتی (مولکول‌ها) تشکیل شده‌اند که با یکدیگر شبیه به توپ‌های بیلیارد برخورد می‌کنند. در شکل (۲) یک ناحیهٔ کوچک در مکان x از فضای یک گاز به‌همراه ذرات تشکیل‌دهندهٔ آن نشان داده شده است. در آن N، m و p به‌ترتیب تعداد ذرات، جرم و مومنتوم هر ذره هستند. همچنین، ρ، u و e به‌ترتیب چگالی، سرعت و انرژی در مکان x است [۲].



شکل ۲- ناحیهٔ کوچک در مکان x از فضای یک گاز به‌همراه ذرات تشکیل‌دهندهٔ آن

به‌دلیل اینکه تعداد ذرات تشکیل‌دهندهٔ گاز بسیار زیاد است، امکان دنبال کردن هر ذره به‌صورت جداگانه وجود ندارد. به‌همین دلیل از یک سری توابع توزیع، f استفاده می‌شود. این توابع توزیع، بیانگر احتمال حضور ذرات در یک مکان مشخص و با یک سرعت مشخص است. در واقع، استفاده از توابع توزیع یک دیدگاه اویلری به مسئله می‌دهد. بدین معنا که حضور مطلق یک ذره در یک مکان اهمیت ندارد، بلکه چگالی احتمال حضور ذره در یک مکان دارای اهمیت است. بنابراین، استفاده از دیدگاه آماری بسیار مناسب‌تر از یک دیدگاه کلاسیک برای بیان حالت سیستم در هر لحظه است. به‌عنوان مثال، یک گاز رقیق را درنظر بگیرید، فرض می‌شود که این گاز از ذرات (مولکول‌ها) کروی شکل محکمی تشکیل شده باشد، به‌طوری‌که این ذرات با سرعت زیاد (۳۰۰ m/s) در حرکت هستند و با یکدیگر برخوردهای الاستیک انجام می‌دهند. به لحاظ نظری امکان دانستن مکان و مومنتوم هر یک از ذرات به‌طور جداگانه وجود دارد، اما در عمل این کار غیر ممکن است. به‌عنوان مثال، در یک فضای ۲۰ لیتری از یک گاز در دما و فشار اتمسفریک تعداد 10^{23} (عدد آووگادرو) ذره وجود دارد. درنتیجه، برای اینکه حالت سیستم در هر لحظه مشخص شود به جای دنبال کردن هر ذره به‌طور جداگانه از توابع توزیع برای بیان احتمال حضور ذرات استفاده می‌شود [۲]. احتمال حضور ذرات در مختصات $(\mathbf{x},\mathbf{p})$ از فضای فازی (فضایی است که یکی از محورهای آن، مکان ذرات و محور دیگر آن مومنتوم ذرات است) برابر با $f(\mathbf{x},\mathbf{p},t)d\mathbf{x}d\mathbf{p}$ است (شکل۳).



شکل ۳- فضای فازی در حالت یک بعدی

چنانچه، نیروهای خارجی در مقایسه با نیروهای بین مولکولی F کوچک باشد و با فرض اینکه هیچ برخوردی بین ذرات صورت نگیرد، بعد از گذر زمان dt، ذراتی که ابتدا در مکان x و p و در زمان t هستند، به مختصات جدید:

$$x + \frac{p}{m}dt = x + dx$$
$$p = p + Fdt = p + dp \qquad (۱)$$

منتقل می‌شوند. بنابراین، مقدار تابع توزیع f را می‌توان در زمان t+dt بعد از مرحله انتشار به‌دست آورد (رابطهٔ ۲). در این حالت تعداد ذرات هر دو ناحیه با هم برابر هستند.

$$f(x + dx, p + dp, t + dt) = f(x, p, t)dxdp \qquad (۲)$$

چیزی که در واقعیت اتفاق می‌افتد این است که طی گذر زمان dt به‌دلیل برخوردهای بین ذرات، تمامی ذراتی که از مختصات $(\mathbf{x},\mathbf{p})$ شروع به حرکت کرده به مختصات پیش‌بینی شده نمی‌رسند. ازطرف‌دیگر، تعدادی ذره وجود دارند که با وجود اینکه از مکان $(\mathbf{x},\mathbf{p})$ شروع به حرکت نکرده‌اند، اما ناشی از برخوردهای بین ذرات به مکان:

$$\left(x + \frac{p}{m}dt, p + Fdt\right) = (x + dx), p + dp) \qquad (۳)$$

می‌رسند. در نتیجه برای اصلاح فرایند انتشار، تعداد ذراتی که به نقطه $(\mathbf{x}+d\mathbf{x},\mathbf{p}+d\mathbf{p})$ می‌رسند، اما از مکانی به غیر از مکان $(\mathbf{x},\mathbf{p})$ شروع به حرکت کرده‌اند را با تعداد ذرات در زمان t+dt جمع می‌کنیم. تعداد ذراتی که از مکان $(\mathbf{x},\mathbf{p})$ شروع به حرکت کرده‌اند اما به مکان $(\mathbf{x}+d\mathbf{x},\mathbf{p}+d\mathbf{p})$ نرسیده‌اند را کم می‌کنیم. در نتیجه، معادلهٔ انتشار به‌صورت زیر نوشته خواهد شد:

$$f(x+dx, p+dp, t+dt) = f(x,p,t)dxdp + \Omega dxdpdt \quad (۴)$$

ازطرف دیگر، $f(\mathbf{x}+d\mathbf{x}, \mathbf{p}+d\mathbf{p}, t+dt) = f(\mathbf{x},\mathbf{p},t)$ را می‌توان با استفاده از سری تیلور تا مرتبه اول به‌صورت زیر بسط داد:

$$f(x+dx, p+dp, t+dt) = f(x,p,t) + dx.\nabla_x f + dp.\nabla_p f + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)dt + \cdots \quad (۵)$$

و با جایگزینی عبارت سمت چپ معادلهٔ انتشار اصلاح شده به کمک بسط سری تیلور به معادلهٔ بولتزمن خواهیم رسید:

$$\left[f + dx.\nabla_x f + dp.\nabla_p f + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)dt + \ldots dxdp = fdxdp + \Omega dxdpdt \right. \quad (۶)$$

و یا به‌عبارت‌دیگر:

$$v\nabla_x f + F\cdot\nabla_p f + \frac{\partial f}{\partial t} = \Omega \quad (۷)$$

در معادلهٔ بالا، جملات سمت چپ بیانگر تغییرات f ناشی از حرکت و نیروهای خارجی یا داخلی F است و جملات سمت راست، بیانگر تغییرات f ناشی از برخوردهای بین ذرات است که **Ω** اپراتور برخورد نامیده می‌شود. همان‌طورکه مشاهده شد، برای به‌دست آوردن معادلهٔ بولتزمن از تئوری جنبشی مولکولی استفاده شد و با اصلاح عبارت انتشار تابع توزیع، معادلهٔ بولتزمن به‌دست خواهد آمد. اگر چنانچه اپراتور برخورد به‌صورت صریح‌تر نوشته شود، معادلهٔ بولتزمن، یک معادلهٔ انتگرالی دیفرانسیلی غیرخطی است که در برخی مواقع می‌تواند بسیار پیچیده باشد [۲].

روش شبکه‌ای گاز اوتوماتا

روش شبکهٔ گاز اوتوماتا[15] و روش شبکهٔ بولتزمن،روش‌های عددی نسبتاً جدیدی هستند که با استفاده از مدل‌های میکروسکوپیک[16] ساده، رفتارهای ماکروسکوپیک[17] جریان‌های سیال را شبیه‌سازی می‌کنند. روش شبکهٔ بولتزمن همانند روش شبکهٔ گاز اوتوماتا نه تنها رفتار گازها را مدل می‌کند، بلکه قادر به مدل کردن رفتار سیالات نیز می‌باشد. محققان نشان داده‌اند که معادلهٔ شبکهٔ بولتزمن را می‌توان از معادله پیوسته بولتزمن به‌دست آورد. امّا، از لحاظ تاریخی معادلهٔ شبکهٔ بولتزمن از معادلهٔ شبکهٔ گاز اوتوماتا استخراج شده است. در اینجا به توضیح مختصر و کلی این روش اکتفا می‌شود و در ادامه به توضیح روش شبکهٔ بولتزمن می‌پردازیم. روش شبکهٔ گاز اوتوماتادر سال ۱۹۸۶ ارائه شد. در روش شبکهٔ گاز اوتوماتا به‌جای استفاده از تابع توزیع (چگالی احتمال حضور یک ذره در یک مکان مشخص و در یک زمان مشخص) از یک سری اعداد بولین[18] استفاده می‌شود. به این معنا که به‌جای استفاده از اعداد اعشاری برای بیان احتمال حضور ذرات در یک مکان مشخص و در یک زمان مشخص از اعداد صحیح ۰ و ۱ استفاده می‌شود. به‌گونه‌ای که مقدار صفر بیانگر عدم حضور ذره و مقدار ۱ بیانگر حضور ذره است [۳]. این روش از شبکه‌های مربعی چهار سرعته استفاده می‌کند و ذرات مجاز هستند در هر گام زمانی فقط به شبکه‌های همسایهٔ خود انتقال پیدا کنند. به‌دلیل ماهیت بولین کمیت‌های به‌کار رفته در روش شبکهٔ گاز اوتوماتا، این روش از یک سری نوسانات ناخواسته در ابعاد ماکروسکوپیک رنج می‌برد و گردابه‌های تشکیل شده در روش شبکهٔ گاز اوتوماتا، مربعی شکل هستند [۳]. روش شبکهٔ گاز اوتوماتا بر مبنای یک سری قوانین به نام قوانین برخورد بنا شده است. این قوانین، قوانین حاکم بر برخورد بین ذرات هستند. چنانچه دو ذره با یکدیگر برخورد کنند (به‌عنوان مثال یک ذره که به سمت راست حرکت می‌کند با ذره‌ای که به سمت چپ حرکت می‌کند برخورد کند)، نتیجهٔ این برخورد دو ذره خواهد بود که از همان محل با ۹۰ درجه انحراف نسبت به جهت ورودی خارج می‌شود. همان‌طورکه در تئوری جنبشی گازها گفته شد، در روش شبکهٔ گاز اوتوماتا نیز انتشار ذرات یا همراه با برخورد و یا بدون برخورد هستند [۳].

معادلهٔ شبکهٔ بولتزمن

در سال‌های اخیر روش شبکهٔ بولتزمن به‌عنوان یک روش مناسب در شبیه‌سازی جریان سیالات مطرح شده و استفاده از آن گسترش یافته است [۴]. برخلاف روش‌های مرسوم عددی که بر پایهٔ جداسازی معادلات پیوستهٔ ماکروسکوپیک می‌باشند، روش شبکهٔ بولتزمن بر پایه مدل‌های میکروسکوپیک و معادلات جنبشی مزوسکوپیک قرار دارد. ایدهٔ اصلی در روش شبکهٔ بولتزمن این است که مدل‌های جنبشی ساده شده‌ای ایجاد کند که این روش‌ها، به‌گونه‌ای اصول اساسی فیزیک واکنش‌های مزوسکوپیک را به‌کار برند. به‌نحوی‌که خصوصیات ماکروسکوپیک به‌دست آمده از این روش‌ها، معادلات مربوط به متغیرهای ماکروسکوپیک را ارضا نمایند. روش شبکهٔ بولتزمن بر پایهٔ معادلهٔ بولتزمن و روش شبکهٔ گاز اوتوماتا بنا شده است.

15.Automata
16. Microscopic
17. Macroscopic

18. Boolean Number

به‌منظور رفع مشکلات روش شبکهٔ گاز اوتوماتا، روش شبکهٔ بولتزمن جایگزین مناسبی می‌باشد. در این روش به‌جای مشخص نمودن آرایش ذرات مجازی، احتمال حضور این ذرات در مسیرهای مختلف مورد بررسی و استفاده قرار می‌گیرد. این امر علاوه‌بر حفظ کلیهٔ محاسن روش شبکهٔ گاز، معایب آن را ندارد. در روش شبکهٔ بولتزمن متغیرهای بولین موجود در روش شبکهٔ گاز اوتوماتا جای خود را به متغییرهای حقیقی ξ ,$\mathbf{x}$,t یعنی بردار مکان، بردار سرعت و زمان می‌دهند که $f(\mathbf{x}, t, \xi)$ تابع توزیع ذره است. ۵۰ سال بعد از اینکه بولتزمن(۱۸۷۲) معادلهٔ بولتزمن را استخراج کرد، هارریس[19] توانست یک جواب تقریبی برای این معادله پیدا کند. در سال ۱۹۵۴، بتناگار، گروس و کروک[20]توانستند یک تقریب ساده به نام تقریب BGK برای عبارت برخورد به‌صورت زیر پیدا کنند [۴]:

$$\Omega = -\frac{1}{\lambda}(f - f^{eq}) \qquad (۸)$$

این تقریب بیانگر این است که تابع توزیع به‌صورت نمایی با ثابت زمانیλبه‌سمت یک تابع توزیع تعادلی میل می‌کند. با جایگزینی این تساوی در معادلهٔ بولتزمن، در غیاب نیروهای خارجی و داخلی، معادلهٔ زیر به‌دست می‌آید:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c.\nabla f = -\frac{1}{\lambda}(f - f^{eq}) \qquad (۹)$$

که در آن، $f(\mathbf{x}, c, t)$ تابع توزیع ذرهٔ مجرد در فضای پیوسته فازی ($\mathbf{x}$, $\mathbf{c}$)، $\mathbf{c}$ سرعت ذره، ∇ اپراتور گرادیان، λ زمان آرامش منفرد SRT[21] است و f^{eq} تابع توزیع تعادلی ماکسول-بولتزمن[22] که به‌صورت رابطهٔ(۱۰) معرفی می‌شود:

$$f^{eq} = \frac{\rho}{(\frac{2\pi}{3})^{D/2}} \exp\left[-\frac{3}{2}(c-u)^2\right] \qquad (۱۰)$$

که در آن عدد مربوط به D بعد مکانی است. چنانچه، سرعت سیال $\mathbf{u}$، در مقایسه با سرعت صوت کوچک باشد، تابع توزیع تعادلی را می‌توان تا دقت مرتبهٔ دوم به شکل رابطهٔ (۱۱) بسط داد:

$$f^{eq} = \frac{\rho}{\left(\frac{2\pi}{3}\right)^{\frac{D}{2}}} \exp\left(-\frac{3}{2}\mathbf{c}^2\right)\left[1 + 3(\mathbf{c}.\mathbf{u}) + 92\mathbf{c}.\mathbf{u}2 - 32\mathbf{u}.\mathbf{u}\right. \qquad (۱۱)$$

19. Harris (1971)
20. Bhatangar, Gross and Krook
21. Maxwell-Boltzmann
22. Single Relaxation Time

در سال ۱۹۸۸ مک نامارا و زانتی[23]، روش شبکهٔ بولتزمن را ارائه کردند که برخلاف روش شبکهٔ گاز، حرکت تک تک ذرات را مدل نمی‌کند. در عوض مجموعه‌ای از ذرات نزدیک به هم را به‌عنوان یک ذره بزرگتر درنظر می‌گیرد و حرکت آن را مدل می‌کند. در روش شبکهٔ بولتزمن، توابع توزیع به‌صورت گسسته نوشته می‌شود و با انتخاب یک ساختار شبکهٔ متقارن، فضای پیوستهٔ مومنتوم ذرات به یک فضای گسسته به‌صورت رابطهٔ (۱۲) تبدیل می‌شود [۲]:

$$f_i(x,t) = f(x, c_i, t)$$
$$f_i^{eq} = f^{eq}(x, c_i, t) \qquad (۱۲)$$

دقت شود که توابع توزیع گسسته، رابطهٔ (۹) را به‌صورت زیر ارضا می‌کنند:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + c_i.\nabla f_i = -\frac{1}{\lambda}\left(f_i - f_i^{eq}\right) \qquad (۱۳)$$

گسسته‌سازی فضای مومنتوم ذرات به این مفهوم است که ذرات مجاز هستند مومنتوم خود را فقط از یک سری بردارهای مشخص شده، انتخاب کنند. این معادله، در واقع معادلهٔ انتقال مربوط به تابع توزیع است که از یک گرهٔ شبکه در راستای سرعت مربوطه، به گرهٔ شبکه همسایه منتقل می‌شود. عبارت سمت چپ رابطهٔ (۱۳)، مشتق مادی تابع توزیع است که می‌توان آن را به صورت رابطهٔ (۱۴) نوشت:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + c_i.\nabla f_i = \frac{Df_i}{Dt} \qquad (۱۴)$$

این مشتق مادی را می‌توان به فرم گسسته رابطهٔ (۱۵) نوشت:

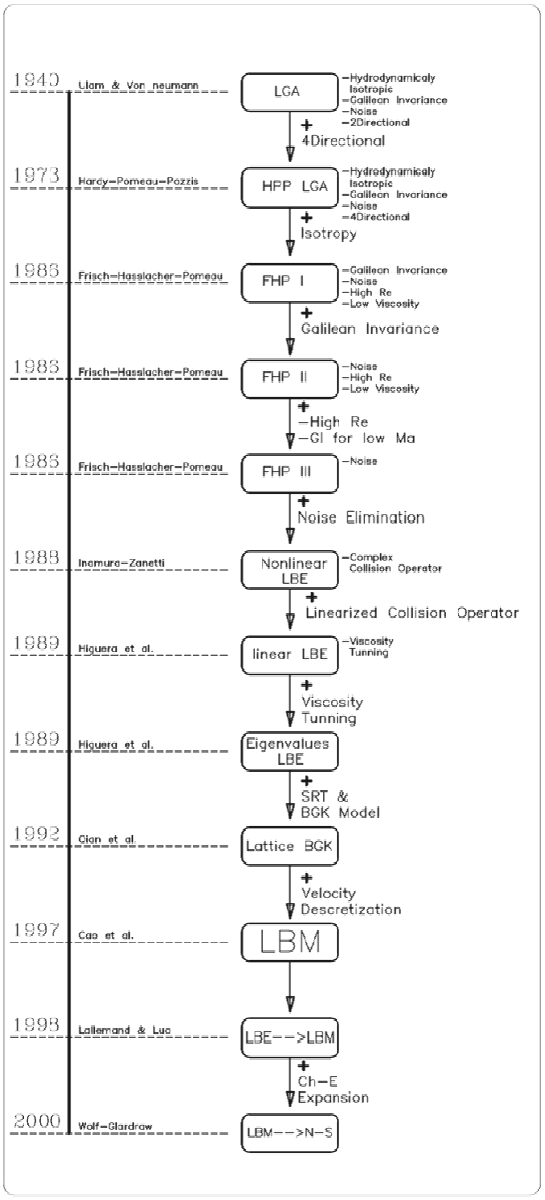
$$\frac{Df_i}{Dt} = \frac{f_i(x, c_i\Delta t, t+\Delta t) - f_i(x,t)}{\Delta t} \qquad (۱۵)$$

با جایگزینی رابطهٔ بالا در معادلهٔ(۱۳) معادلهٔ شبکهٔ بولتزمن استاندارد به‌دست می‌آید:

$$f_i(x, c_i\Delta t, t+\Delta t) - f_i(x,t) = -\frac{1}{\tau}\left(f_i - f_i^{eq}\right) \qquad (۱۶)$$

که در آن، $\tau = \Delta t/\lambda$ و τ زمان آرامش بی‌بعد است. سیرتحولی تولد LBM در شکل (۴) به تصویر کشیده شده است.

23. Mcnamara and Zanetti



شکل ۴- سیر تحولی تولد LBM [۳]

ساده‌سازیی که در روش شبکهٔ بولتزمن انجام می‌شود خطی‌سازی اپراتور برخورد است. یکی از روش‌های سادهٔ خطی‌سازی، استفاده از زمان آسایش منفرد است که در آن، تابع توزیع به‌سمت یک مقدار تعادلی با یک ثابت زمانی مشخص میل می‌کند. این اوپراتور برخورد به نام اوپراتور برخورد بی-جی-کی شناخته می‌شود و مؤلفین مختلفی هر کدام به‌طور جداگانه آن را ارائه کرده‌اند. استفاده از این اپراتور برخورد، محاسبات را بسیار سریع‌تر می‌کند و ضرایب انتقال سیال، دیگر محدود به مقادیر کوچک نیست و می‌تواند سیالات با ضرایب انتقال بزرگ را به‌خوبی مدل کند [۵]. روش شبکهٔ بولتزمن یک روش صریح است، به این مفهوم که در مراحل انتشار و برخورد با استفاده از مقادیر معلوم گام زمانی قبلی، مقادیر مجهول توابع توزیع در گام زمانی بعدی بدست می‌آید. دیدگاه میکروسکوپیک در روش شبکهٔ بولتزمن، باعث می‌شود که گام زمانی و ابعاد شبکه تعبیر فیزیکی پیدا کنند. به این مفهوم که گام زمانی، زمان بین برخوردهای ذرات است و ابعاد شبکه، فاصله‌ای است که ذرات بین هر دو برخورد متوالی طی می‌کنند یا به‌عبارت‌دیگر فاصله‌ای است که ذرات در یک گام زمانی طی می‌کنند. متداول‌ترین کاربرد روش شبکهٔ بولتزمن برای جریان سیال‌هایی است که در آنها، فقط بقای جرم و مومنتوم برقرار است. حل معادلهٔ انرژی با استفاده از روش شبکهٔ بولتزمن، هنوز یکی از مسائل چالش برانگیز است. در روش شبکهٔ بولتزمن، ذرات سیال در انتهای یک گام زمانی بایستی در محل گره‌های شبکه، حضور داشته باشند و این امر زمانی محقق می‌شود که دمای سیال در تمام نقاط شبکه یکسان باشد، زیرا سرعت ذرات سیال وابسته به دمای موضعی است [۵].

در جریان‌های همدما با اعداد ماخ پایین، گسسته‌سازی فضای ممنتوم مستقل از متغیرهای ماکروسکوپیکی موضعی از جمله دما و سرعت موضعی می‌باشد. در نتیجه می‌توان از یک شبکه‌بندی یکنواخت برای کل میدان استفاده کرد. زیرا به‌دلیل همدما بودن سیال، ذرات سیال در تمام نقاط میدان سرعت‌های یکسانی دارند و در انتهای گام زمانی حضور ذرات سیال در محل گره‌های شبکه یکنواخت تضمین شده است. امّا برای جریان‌هایی که در آنها، تغییرات دمایی مطرح می‌شود یا به‌عبارت دیگر دمای سیال در یک نقطه از شبکه، متفاوت از نقاط دیگر است، نمی‌توان از گسسته‌سازی یکنواخت برای همهٔ نقاط شبکه استفاده کرد. از این‌رو، گسسته‌سازی فضای مومنتوم، وابسته به دمای موضعی خواهد بود. همچنین، برای جریان‌های با اعداد ماخ بالا گسسته‌سازی فضای مومنتوم وابسته به سرعت ماکروسکوپیک موضعی می‌باشد. زیرا، در این نوع مسائل ذرات سیال در انتهای یک گام زمانی لزوماً در محل گره‌های شبکه قرار ندارند و علاوه‌بر مراحل انتشار و برخورد به یک مرحله دیگر برای درون‌یابی مقادیر عددی توابع توزیع در محل گره‌های شبکه نیاز است [۵]. می‌توان نشان داد که با استفاده از بسط Ch-E[۲۴]، روش شبکهٔ بولتزمن می‌تواند معادلات اویلر را بدون هیچ قید و شرطی و معادلات ناویر استوکس را تنها در حالت تراکم ناپذیر مدل نماید. به‌عبارت‌دیگر، برای معادلات ناویر استوکس، خطای گسسته‌سازی از مرتبه $O(M^3)$ است و در صورتی می‌توان از آن صرف‌نظر کرد که عدد ماخ، مقدار عددی کوچکی داشته باشد. روند ساده‌سازی‌ها و تقریب‌های به‌کار رفته در LBM را می‌توان در شکل (۵) مشاهده کرد.

24. Chapman-Enskog Expansion

الگوریتم محاسباتی در LBM

معادله گسسته شده (۱۶) در عمل طی دو مرحله مورد محاسبه قرار می‌گیرد، که عبارتند از: مرحلهٔ برخورد[25] و مرحلهٔ انتشار[26] در مرحلهٔ برخورد عبارت زیر محاسبه می‌شود:

$$f_i^*(x,t) = f_i(x,t) - \frac{\Delta t}{\tau}\left(f_i - f_i^{eq}\right), \qquad (۱۷)$$

و در مرحلهٔ انتشار یا جاری شدن عبارت (رابطهٔ ۱۸) محاسبه می‌شود:

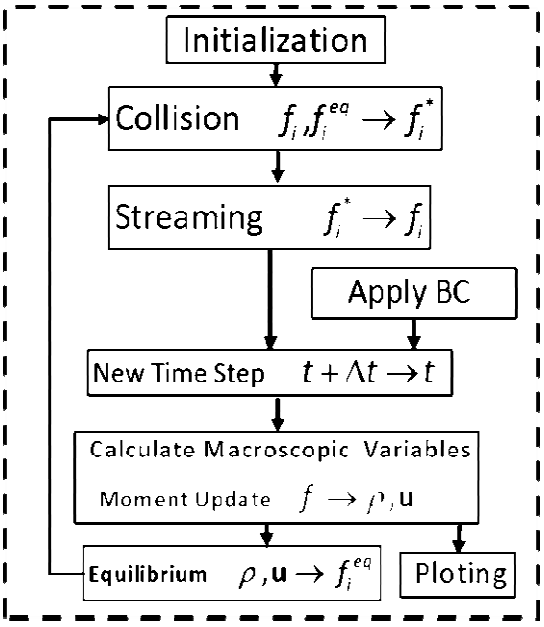
$$f_i(x, c_i\Delta t, t+\Delta t) = f_i^*(x,t), \qquad (۱۸)$$

چگالی و ممنتوم از روابط (۱۹ و ۲۰) محاسبه می‌شود:

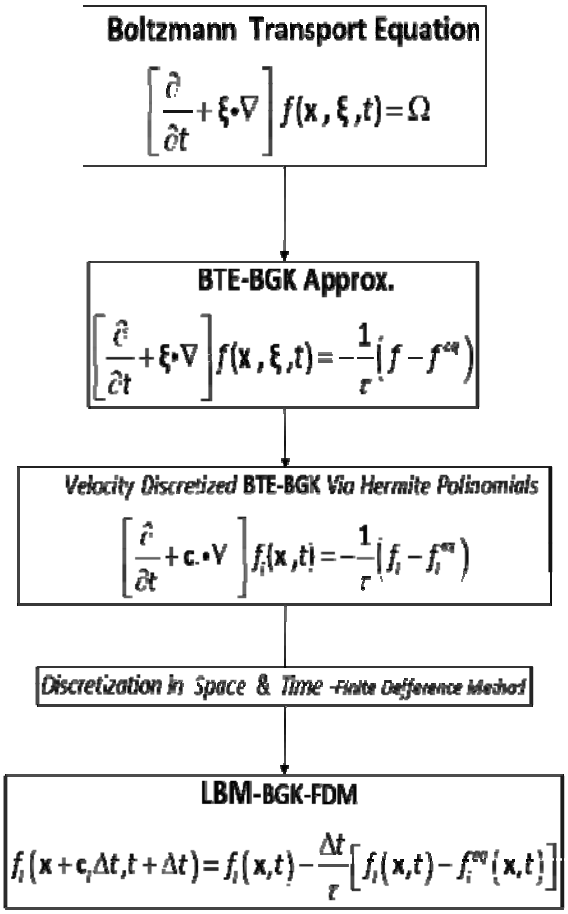
$$\rho = \sum f_i(x,t), \qquad (۱۹)$$

$$\rho u = \sum c_i f_i(x,t), \qquad (۲۰)$$

با عنایت به معادلات (۱۷ و ۱۸) می‌توان الگوریتم شکل (۶) را ارائه کرد.



شکل ۶- الگوریتم LBM [۴]



شکل ۵- روند ساده‌سازی‌ها و تقریب‌ها در LBM [۴]

مزایای LBM

مزایای روش شبکهٔ بولتزمن عبارتند از:

۱- معادلات ناویر-استوکس، معادلات دیفرانسیل جزئی مرتبه دوم هستند، در صورتی‌که معادلهٔ بولتزمن (۱۳) که معادلهٔ شبکهٔ بولتزمن از آن مشتق می‌شود یک معادلهٔ دیفرانسیل جزئی مرتبه اول است. این تفاوت در ماهیت معادلات و در گسسته‌سازی معادلات برای حل عددی بسیار حائز اهمیت است. یادآوری می‌شود که معادلهٔ ناویر-استوکس کامل دارای خاصیت ترکیبی است، به این معنا که به‌طور همزمان هم دارای خاصیت بیضوی، هم خاصیت هذلولوی و هم خاصیت سهموی است. به‌همین دلیل حل عددی معادله ناویر-استوکس کامل بسیار مشکل است. زیرا، هر رفتار متفاوت تدابیر و گسسته‌سازی‌های خاص و منحصر به فردی را می‌طلبد به‌ویژه برای اعمال شرایط مرزی. برای حل این مشکل ساده‌سازی‌های زیادی انجام شده است. یکی از این ساده‌سازی‌ها بدین‌گونه است که در شرایط خاصی تنها یکی از خاصیت‌های معادلهٔ ناویر-استوکس غالب است و با توجه به همان خاصیت غالب به تفکیک معادلهٔ ناویر-استوکس می‌پردازیم. به‌عنوان مثال، معادلهٔ اویلر دائم به‌طور همزمان دارای خاصیت ترکیبی سهموی، هذلولوی است. یکی از رهیافت‌های ممکن برای حل معادلهٔ اویلر دائم استفاده از معادلهٔ اویلر غیردائم است. زیرا که معادلهٔ اویلر غیردائم تنها دارای خاصیت هذلولوی است و برای رسیدن به حالت دائم، زمان را به سمت بی‌نهایت میل

25. Collision
26. Streaming

می‌دهیم. امّا، چنانچه از معادلهٔ بولتزمن برای حل مسائل استفاده شود، تنها نیاز به حل عددی یک معادلهٔ دیفرانسیل مرتبهٔ اول است که می‌توان با روش‌های عددی استاندارد برای حل معادله دیفرنسیل مرتبهٔ اول به حل معادلهٔ بولتزمن پرداخت.

۲- معادلهٔ ناویر-استوکس دارای جملات جابه‌جایی غیرخطی به شکل $\mathbf{u}\cdot\nabla\mathbf{u}$ است. درحالی‌که در روش شبکهٔ بولتزمن چنین جملاتی وجود ندارد و عملاً به‌جای جملات جابجایی غیرخطی، جملات ادوکشن خطی وجود دارند.

۳- در محاسبات مبتنی بر ناویر-استوکس، باید معادلهٔ پواسون را برای محاسبه فشار در میدان سیال حل کرد که لازمهٔ آن استفاده از تمامی اطلاعات سیال درون میدان و تبادل آنها در کل میدان سیال است. درحالی‌که، در روش شبکهٔ بولتزمن تبادل اطلاعات به‌صورت موضعی است و فشار عملاً با استفاده از معادلهٔ حالت ساده محاسبه می‌شود.

۴- از آنجاکه روش شبکهٔ بولتزمن مبنای ذره‌ای دارد، با فیزیک مسائلی که در سطح مولکولی با برخورد ذرات و مولکول‌های درون سیال در ارتباط هستند، به‌راحتی سازگاری دارد. لذا به‌راحتی می‌توان از این روش برای شبیه‌سازی جریان‌های سیال در مقیاس‌های میکرو و نانو استفاده نمود.

۵- فقط یک کمیت تابع توزیع میکروسکوپیک مجهول است که باید مقدار عددی آن حساب شود و با استفاده از همان یک کمیت تمام خواص ماکروسکوپیک سیال محاسبه می‌شود.

۶- محاسبات به‌صورت صریح انجام می‌شود. به این معنا که برای محاسبه مقدار عددی متغیر مورد نظر، تابع توزیع، در یک مرحله زمانی فقط به مقادیر توابع توزیع در یک مرحله زمانی قبل از آن نیاز است. در نتیجه محاسبات را می‌توان به‌راحتی به‌صورت پردازش موازی انجام داد.

۷- پیاده‌سازی شرایط مرزی، بسیار ساده است. در نتیجه برای شبیه‌سازی جریان‌های دارای هندسه‌های پیچیده بسیار مفید است.

۸- جریان‌های پیچیده مانند جریانات چندفازی و جریان‌هایی که در آن، شرایط مرزی متغیر است را به‌راحتی شبیه‌سازی می‌کند.

جمع‌بندی

با توجه به موارد فوق و تحقیقات انجام شده در یک و نیم دههٔ اخیر، روش LBM به سرعت در حال تکوین و توسعه بوده و با توجه به ویژگی‌های منحصر به فرد خود توجه محققان را به خود جلب نموده است. علی‌الخصوص قابلیت ذاتی این روش در تهیه الگوریتم‌های با پردازش موازی، از نظر هزینهٔ محاسباتی ارجحیت آن را نسبت به CFD سنتی تضمین می‌کند.

مراجع

[1] Luo, KH., Xia, J. and Monaco, E. "Multiscale Modeling of Multiphase Flow with Complex Interactions," *Journal of Multiscale Modeling*, Vol. 1, No. 1, 2009, pp. 125–156.

[2] Mohammad, A.A., *Lattice Boltzmann Method: Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes*, Springer Science & Business Media, New York, 2011.

[3] Wolf-Gladrow and Dieter, A., *Lattice Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Method, an Introduction*, Springer, Berlin, 2000

[4] Guo, Zh. and Shu, Ch., *Lattice Boltzmann Method and its Applications in Engineering*, World Scientific Publishing Company, 2013.

[5] KrRuger, T. et al. *The Lattice Boltzmann Method, Principles and Practice*, Springer, New York, 2017.