



## روش بولتزمن شبکه‌ای حرارتی سه‌بعدی در ابعاد نانو برای مرزهای منحنی در رژیم گذار

جعفر غضنفریان<sup>۱</sup>، دورنا جمشید اصلی<sup>۲</sup>، عباس عباسی<sup>۳\*</sup>

<sup>۱</sup>دانشکده مهندسی، گروه مکانیک، دانشگاه زنجان، زنجان، ایران  
<sup>۲</sup>دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، ایران

### تاریخچه داوری:

دریافت: ۵ مهر ۱۳۹۴  
بازنگری: ۷ بهمن ۱۳۹۴  
پذیرش: ۲۳ فروردین ۱۳۹۵  
ارائه آنلاین: ۲۴ مرداد ۱۳۹۵

### کلمات کلیدی:

روش بولتزمن شبکه‌ای  
شبیه‌سازی حرارتی  
جریان سه‌بعدی  
مرز منحنی  
ابعاد نانو

**چکیده:** روش بولتزمن شبکه‌ای حرارتی برای هندسه سه‌بعدی برای شبیه‌سازی جریان گاز رقیق با عامل حرکت فشاری درون کانال دایروی طولانی در محدوده اعداد نادسن  $0.2$  تا  $1$  بسط داده شده است. جمله برخورد به کمک مدل بی-جی-کی جایگزین شده و گسسته‌سازی سرعت توسط مدل دی-۳ - کیو-۱۵ انجام شده است. رفتار غیرخطی گاز درون لایه نادسن با ضخامتی در حدود چند برابر طول میانگین آزاد مولکول‌ها، توسط تابع تصحیح اعمال شده است. همچنین در فرمولاسیون جدید ارائه‌شده برای دو زمان استراحت، تابعیت خواص سیال با دما و چگالی لحاظ شده است. همچنین، شرط مرزی مرتبه بالا برای مرزهای مستقیم با حالت تعمیم‌یافته شروط مرزی برای مرزهای منحنی در دوبعد ترکیب شده تا شرط مرزی منحنی دقیق در حالت سه‌بعدی برای ابعاد نانو ارائه شود. لغزش سرعت و پرش دمایی به عنوان مهمترین پدیده‌های جریان در ابعاد نانو در نتایج گزارش شده‌اند. با توجه به عدم برقراری اصل محیط پیوسته در اعداد نادسن بزرگ، نتایج نشان داد که روش بولتزمن شبکه‌ای حرارتی به علت سادگی در اعمال شرط مرزی منحنی و زمان محاسباتی پائینتر در قیاس با سایر روشهای اتمی همچون دی-اس-ام-سی، یک روش کارآمد به منظور بررسی جریان‌های گازی سرعت پایین در ابعاد نانو با اعداد نادسن بالا می‌باشد.

### ۱- مقدمه

ابعاد وسایل با ابعاد میکرو و نانو در سالیان اخیر سبب رشد چشمگیر علوم در شاخه‌های متفاوت شده است. یکی از مهمترین شاخه‌های نانو تکنولوژی، مربوط به بررسی جریان گاز و اثرات انتقال حرارت در سازه‌های کوچک می‌باشد. از طرفی اثرات رقت گاز درون لایه نادسن در جریان‌های با اعداد نادسن بزرگ قابل‌توجه نبوده و اهمیتی دو چندان پیدا می‌کند. نحوه بررسی و توصیف صحیح رفتار سیال درون لایه نادسن توسط ژانگ و همکاران [۱] به تفصیل ارائه شده است.

با توجه به اینکه مسائل مهندسی متعددی در عمل درگیر با مرزهای منحنی هستند، مقالات بسیاری در حال بررسی فیزیک حاکم بر این نوع مسائل هستند [۲، ۳]. ولی با این وجود هیچ یک از این مطالعات اهداف موردنظر در این مقاله را برآورده نمی‌کنند.

با توجه به شکل هفت‌بعدی معادله بولتزمن، حل مستقیم آن در هندسه‌های پیچیده، به خصوص همراه با مرز منحنی بسیار دشوار و هزینه‌بر است. از اینرو روش بولتزمن شبکه‌ای حرارتی برای گسسته‌سازی معادله بولتزمن در فضای سرعت و مکان و نیز روی زمان استفاده می‌شود. در مقاله حاضر از روش بولتزمن شبکه‌ای حرارتی به عنوان یک روش کارآمد برای شبیه‌سازی جریان‌های همراه با تغییر دما استفاده شده است. مهمترین مزیت

این روش به عنوان شکل تعمیم‌یافته روش بولتزمن شبکه‌ای که تنها جریان سیال را شبیه‌سازی می‌کند، هزینه محاسباتی ارزانتر و پایداری بیشتر در قیاس با سایر روشهای اتمی است.

مطالعات پیشین [۴، ۵] اثبات کرده‌اند که روش بولتزمن شبکه‌ای توانایی شبیه‌سازی جریان‌های با اعداد نادسن بزرگ را با دقت بالا در هندسه‌های پیچیده دارد. همچنین چند روش مختلف برای اعمال شروط مرزی روی مرزهای منحنی شکل، در خزائلی و همکاران [۵]، بوزیدی و همکاران [۶]، گو و همکاران [۷]، هانگ و همکاران [۸] معرفی شده که در بخش‌های بعدی بیشتر به آنها پرداخته خواهد شد.

با توجه به دانسته‌های نویسندگان، ارائه یک الگوریتم مناسب عددی برای روش بولتزمن شبکه‌ای حرارتی که شروط مرزی منحنی سه‌بعدی را نیز دربرگیرد برای اعداد نادسن بالا ضروری است. از طرفی روش‌های معمول اتمی در بسیاری از موارد توانایی پیشبینی رفتار سیال تا اعداد نادسن محدودی را دارا هستند. در این مقاله سعی شده الگوریتمی جامع و کامل برای روش بولتزمن شبکه‌ای حرارتی که تا عدد نادسن برابر با ۱ معتبر بوده و توانای پیشبینی کلیه پدیده‌های ابعاد نانو را نیز داراست، بسط و گسترش داده شود.

جدول ۱: بردارها و ضرایب وزنی مدل سرعت گسسته شده مربوط به مدل دی-۳-کیو-۱۵ [۱۰].

Table 1. Discretized velocity vectors and weight coefficients for D2Q9 model

جهت	بردارهای یکه	ضرایب وزنی
۰	(۰,۰,۰)	۰/۲۲۲۲۲۲
۱ تا ۶	(۰,۰,±۱), (±۱,۰,۰), (۰,±۱,۰)	۰/۱۱۱۱۱۱
۷ تا ۱۴	(±۱,±۱,۰), (±۱,۰,±۱), (۰,±۱,±۱)	۰/۱۳۸۸۸۹

$$g_0^{eq} = -\frac{\rho \varepsilon \bar{V}^2}{3c^2}$$

$$g_{1-6}^{eq} = \frac{\rho \varepsilon}{9} \left[ 1 + \frac{c_i \bar{V}}{c^2} + \frac{9(c_i \bar{V})^2}{2c^4} - \frac{3\bar{V}^2}{2c^2} \right] \quad (4)$$

$$g_{7-14}^{eq} = \frac{\rho \varepsilon}{72} \left[ 3 + 7 \frac{c_i \bar{V}}{c^2} + \frac{9(c_i \bar{V})^2}{2c^4} - \frac{3\bar{V}^2}{2c^2} \right]$$

روش بولتزمن شبکه‌ای در اصل یک روش با طبیعت مزو است. بدین معنا که از توابع توزیع چگالی و انرژی درونی به عنوان واسطی برای ایجاد ارتباط بین طبیعت میکروسکوپی و ماکروسکوپی جریان استفاده می‌کند. از اینرو به کمک روابط (۵) میتوان چگالی، مؤلفه‌های سرعت و انرژی درونی را پس از محاسبه توابع توزیع چگالی و انرژی درونی در جهات مختلف، محاسبه نمود.

$$\rho = \sum_i f_i, \bar{V} = \sum_i c_i, \rho \varepsilon = \sum_i g_i \quad (5)$$

پس از محاسبه دما و چگالی، فشار به کمک رابطه گاز کامل به سادگی محاسبه می‌شود. ضریب لزجت سینماتیک و نفوذپذیری حرارتی جزو پارامترهای ماکروسکوپی هستند که باید تعیین شوند. برای جریان سه‌بعدی ضرایب نفوذ اندازه حرکت و حرارت به کمک روابط (۶) محاسبه می‌شوند.

$$\nu = \frac{1}{3}(\delta_v - 0.5)c^2 \delta t, k = \frac{5}{9}(\tau_c - 0.5)c^2 \delta t \quad (6)$$

که در این روابط  $\nu$  و  $k$  به ترتیب ضریب لزجت سینماتیک و نفوذپذیری حرارتی هستند.

مهمترین پارامتر بی‌بعد در سیستم‌های همراه با گاز رقیق، عدد نادسن است. رابطه بین عدد نادسن و زمان استراحت برای تابع توزیع چگالی توسط رابطه (۷) محاسبه می‌شود.

$$Kn = \sqrt{\frac{8}{3\pi}} \frac{(\tau_v - 0.5)}{N_H} \quad (7)$$

که در این رابطه نماینده تعداد گره‌های شبکه محاسباتی در عرض کانال است. با توجه به این نکته که رقت سیال در مجاورت دیوار متفاوت از توده سیال است، طول میانگین آزاد ذرات در مجاورت دیوار نیاز به اصلاح دارد. رابطه (۸) طول میانگین آزاد موثر را در نقاط مختلف درون کانال نمایش می‌دهد.

## ۲- روش بولتزمن شبکه‌ای حرارتی

در این بخش نحوه گسسته‌سازی معادله بولتزمن به عنوان معادله مادر در مکانیک سیالات به کمک روش بولتزمن شبکه‌ای حرارتی ارائه می‌شود. در این روش از دو تابع توزیع مجزا برای چگالی و دما استفاده می‌شود. از این رو، این روش به روش تابع دوگانه معروف است. پس از عملیات ریاضی، شکل گسسته‌سازی شده معادله بولتزمن به صورت معادلات (۱) و (۲) نوشته می‌شود [۹].

$$f_i(\bar{x} + c_i \delta t, t + \delta t) - f_i(\bar{x}, t) = -\frac{1}{\tau_v} [f_i(\bar{x}, t) - f_i^{eq}(\bar{x}, t)] + F \quad (1)$$

$$g_i(\bar{x} + c_i \delta t, t + \delta t) - g_i(\bar{x}, t) = -\frac{1}{\tau_c} [g_i(\bar{x}, t) - g_i^{eq}(\bar{x}, t)] \quad (2)$$

$f$  و  $g$  در این معادلات به ترتیب توابع توزیع چگالی و انرژی درونی،  $c_i$  مؤلفه‌های سرعت گسسته‌شده درجهت  $i$  و  $\tau_v$  و  $\tau_c$  به ترتیب زمان‌های استراحت برای توابع توزیع چگالی و انرژی درونی هستند. سمت دوم تساوی مربوط به جمله برخورد است که توسط مدل معروف بی-جی-کی جایگزین شده است. لازم به ذکر است که در معادله (۲) از اثر گرمایش ناشی از اصطکاک صرف‌نظر شده است.

برخی از محققان به منظور دوری از اعمال شروط مرزی فشار در ورودی و خروجی، طول کانال را کوتاه در نظر گرفته و از شرط مرزی تناوبی استفاده می‌کنند. در این حالت برای ایجاد شرایط جریان پواری، به ناچار از جمله نیروی حجمی ( $F$ ) در معادله مربوط به تابع توزیع چگالی استفاده می‌کنند. اما نکته اینجاست که جریان پواری با عامل حرکت اختلاف فشار با جریان تناوبی تحت نیروی حجمی، به لحاظ فیزیکی دارای تفاوت هستند. از اینرو برای ایجاد شرایط واقعی، باید طول کانال به اندازه کافی بزرگ در نظر گرفته شود (در این مقاله ۵۵ برابر قطر) تا شرایط توسعه‌یافتگی به شکل خودکار ایجاد شود. در نتیجه جمله مربوط به نیروی حجمی حذف شده، در عوض شروط مرزی واقعیت‌فشار-مشخص در ورودی و خروجی اعمال می‌شود.

به منظور گسسته‌سازی سرعت روی جهات فضایی از مدل دی-۳-کیو-۱۵ استفاده شده است. این مدل که برای جریان سه‌بعدی توسعه داده شده اجازه حرکت ذرات در ۱۵ جهت فضایی را فراهم مینماید. جزئیات مربوط به مدل دی-۳-کیو-۱۵ شامل بردارهای یکه فضایی و ضرایب وزنی هر جهت، در جدول ۱ لیست شده است.

شکل ساده شده تابع توزیع تعادلی ماکسول-بولتزمن برای چگالی و انرژی درونی متعلق به مدل دی-۳-کیو-۱۵ در امتداد جهات ۰ تا ۱۴ به ترتیب در معادلات (۳) و (۴) نشان داده شده‌اند [۹].

$$f_i^{eq} = \omega_i \rho \left[ 1 + \frac{3c_i \bar{V}}{c^2} + \frac{9(c_i \bar{V})^2}{2c^4} - \frac{3\bar{V}^2}{2c^2} \right] \quad (3)$$

$$i = 0-14$$

مطابق با شکل ۱ برای یک گره از شبکه که درون سیال واقع شده و با  $z$  مشخص شده است، پس از اتمام مرحله شارش و برخورد، توابع توزیع در جهات (۴۶) و (۱۴،۹) تعیین نشده‌اند. روش مورد استفاده در این مقاله شکل تعمیم یافته روش پیشنهاد شده توسط بوزیدی و همکاران [۶] به حالت سه بعدی است که در آن، برای هر گره دلخواه روی مرز با یک مقدار  $q$  منحصر به فرد، به شکلی متفاوت برخورد می‌شود.

در روش بونس-بک فرض می‌شود که ذرات منعکس شده از دیوار با مقدار تابع توزیع تعادلی برابر با تابع توزیع ذره برخوردی منعکس می‌شوند. این فرضیه در شکل ۱ با فلش خمیده نشان داده شده است. این ایده را می‌توان برای گره‌های میانی در فواصل مختلف تعمیم داد. دایره‌ها و مربع‌های توخالی به ترتیب نماینده گره‌های دیوار و گره‌های درون سیال هستند. دایره‌های توپر نماینده گره‌های روی مرز فیزیکی هستند که با گره‌های سیال و دیواره در مجاورت خود در ارتباط می‌باشند.

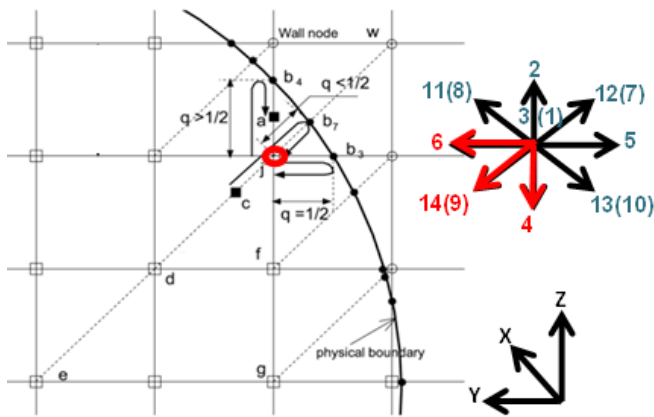


Fig. 1. A sample curved boundary treatment and unknown directions for a numerical node adjacent to the boundary

شکل ۱: یک گره شبکه نمونه در مجاورت مرز منحنی همراه با جهات مجهول تابع توزیع

برای مثال در حالتی که  $q$  برای  $a/5$  باشد، تداخل مرز منحنی با شبکه محاسباتی کارترین در  $b_3$  رخ میدهد که به اندازه نصف ابعاد شبکه با گره مجاورش در سیال (گره  $j$ ) فاصله دارد. مقدار تابع توزیع چگالی برای نمونه در جهت مجهول ۶ از رابطه  $f_6(x_j, y_j, z_j, t+I) = f_5^+(x_j, y_j, z_j, t)$  محاسبه می‌شود. این رابطه بیان می‌کند که ذره‌های که با سرعت  $c_3$  در حرکت است در امتداد یک شبکه محاسباتی در طول یک گام زمانی رو به عقب جهش کرده و در موقعیت جدید قرار گرفته است.

برای سایر حالات، به کمک دو نقطه کمکی  $a$  و  $c$  که جزو گره‌های شبکه محاسباتی نمی‌باشند، درونیابی مربعی اجرا شده و مقادیر توابع توزیع مجهول محاسبه می‌شوند. بر این اساس، مدل بوزیدی [۶] به کمک روابط مربعی که در زیر توضیح داده می‌شود تعمیم می‌یابند.

تابع توزیع  $f_{14}$  برای حالتی که  $q$  از  $0/5$  کوچکتر باشد یا مرز منحنی درون نیمه اول بازه قرار گیرد، از رابطه (۱۱) محاسبه می‌شود.

$$\lambda_e = \frac{\lambda}{1 + 0.7 \left( e^{-cy/\lambda} + e^{-c(D-y)/\lambda} + e^{-cz/\lambda} + e^{-c(D-z)/\lambda} \right)} \quad (8)$$

که ثابت  $C$  در این رابطه برابر با ۱ می‌باشد [۴]. بر این اساس زمان استراحت اصلاح شده توسط رابطه (۹) تخمین زده می‌شود.

$$\tau_v' = (\tau_v - 0.5) / \left[ 1 + \psi \left( \frac{y}{\lambda} \right) + \psi \left( \frac{D-y}{\lambda} \right) + \psi \left( \frac{z}{\lambda} \right) + \psi \left( \frac{D-z}{\lambda} \right) \right] \times \frac{\rho_{ref}}{\rho} \left( \frac{\varepsilon}{\varepsilon_{ref}} \right)^{\omega-0.5} + 0.5 \quad (9)$$

که در این رابطه،  $\omega$  برای تقابل از نوع ماکسولی برابر با ۱ می‌باشد. در این رابطه، زمان استراحت برای تابع توزیع چگالی با دمای گاز (انرژی درونی) مرتبط شده است. از این رو ضریب لزجت گاز توسط رابطه‌های (۶) و (۹) به عنوان تابعی از دما در نظر گرفته شده و حل معادله بقای اندازه حرکت و بقای انرژی با یکدیگر کوپل می‌شود.

یکی از مزایای روش بولتزمان حرارتی بیان شده در این مقاله این نکته است که میتوان عدد پراتل را برای سیال به عنوان ورودی تعیین نمود. رابطه (۱۰) دو زمان استراحت مربوط به تابع توزیع چگالی و انرژی درونی را به واسطه عدد پراتل به هم مرتبط می‌کند [۴].

$$\tau_c = \frac{\tau_v - 0.5}{Pr} + 0.5 \quad (10)$$

مراحل مربوط به الگوریتم روش بولتزمان شبکه‌ای حرارتی را می‌توان به صورت زیر خلاصه نمود:

۱. شرایط اولیه مسئله تعیین شوند.
۲. براساس شرایط اولیه، پارامترهای ماکروسکوپی محاسبه می‌شوند.
۳. توابع توزیع در حالت تعادلی به دست می‌آیند.
۴. مرحله شارش ذرات اجرا می‌شود.
۵. مرحله برخورد به کمک مدل بی-جی-کی انجام می‌شود.
۶. به کمک توابع توزیع پس‌برخورد شروط مرزی اعمال می‌شوند.
۷. بازگشت به مرحله ۲ و تکرار مرحله‌های ۲ تا ۶ تا زمانی که همگرایی تا میزان خطای مورد نظر حاصل شود.

### ۳- شروط مرزی برای مرز منحنی

در این بخش روش به کار برده شده برای اعمال شرط مرزی منحنی در روش بولتزمان شبکه‌ای حرارتی توضیح داده می‌شود. برای اعمال شرط مرزی، پس از اتمام مرحله برخورد و شارش ذرات، توابع توزیع در بعضی از جهات همچنان مجهول باقی می‌مانند. این مقادیر نامعلوم بر اساس شرط مرزی تعیین می‌شوند. اما مشکل اصلی برای اعمال شرط مرزی منحنی این نکته است که شبکه محاسباتی برای اکثر گره‌ها با شبکه کارترین تطابق ندارد. علاوه بر این، فاصله گره‌های اطراف مرز از دیوار و تعداد جهات مجهول برای گره‌های مختلف، تفاوت است.

$$e_\phi = \frac{\sum_{i,j} |\phi^n - \phi^{n-1}|}{\sum_{i,j} \phi^n} < 10^{-10} \quad (13)$$

#### ۴- نتایج

در این مقاله، مقادیر فشار در ورودی و خروجی میکرو/نانو کانال به گونهای تعیین شده که در کلیه حالات نسبت فشاری معادل با ۲ به دو سر کانال اعمال شود. در برخی از مقالاتی که جریان پوازی را در ریزکانالها بررسی می‌کنند، برای سادگی حل، نسبت فشار دو سر کانال برابر با مقدار کوچکی مثل ۱/۰۱ در نظر گرفته می‌شود. باید دقت داشت که برای این چنین مقادیر کوچکی از نسبت فشار، پدیده تراکمپذیری گاز درون کانال را نمی‌توان پیشبینی نمود. اما وقتی نسبت فشار بزرگی مانند ۲ به دو سر کانال اعمال شود، پدیده مهم انحراف توزیع فشار در طول کانال از پروفیل خطی، در نتایج مشاهده خواهد شد.

انرژی درونی گاز ورودی و دیوارها به ترتیب برابر با ۱ ژول بر کیلوگرم و ۳ ژول بر کیلوگرم فرض شده است. همچنین انرژی درونی دیوار به عنوان انرژی درونی مرجع در معادله (۹) استفاده شده و چگالی مرجع برابر با ۱ کیلوگرم بر مترمکعب است. همچنین عدد پرانتل برابر با ۰/۷۱ می‌باشد. لازم به ذکر است که پس از اعمال آزمایش استقلال از شبکه که نتایج آن در جدول ۲ ارائه شده است، ابعاد شبکه‌ای که نتایج حل عددی بدان وابسته نباشد برابر با ۱۱۰×۲۱ برای کلیه حالات، تعیین شد.

به منظور صحت‌سنجی کد محاسباتی، نتایج شبیه‌سازی روش بولتزمن شبکه‌ای در حالت سه‌بعدی برای یک نانوکanal مستطیلی با نتایج محدود موجود در مقالات پیشین مقایسه می‌شود. در شکل ۲(الف)، توزیع فشار غیرخطی ناشی از اثرات تراکمپذیری در طول نانوکanal در عدد نادسن برابر با ۰/۱ با نتایج جانگ و ورلی [۱۴] و آرکیلیک و همکاران [۱۵] مقایسه شده است. محور عمودی در شکل ۲(الف) نسبت فشار به فشار خروجی است که بنا به آنچه در مراجع [۱۴ و ۱۵] برای رژیم گذار گزارش شده از رابطه زیر محاسبه می‌شود.

$$\frac{P}{P_2} = -6Kn + \left\{ \left( 6Kn + \frac{P_1}{P_2} \right)^2 - \left( \left( \frac{P_1}{P_2} \right)^2 - 1 + 12Kn \left[ \frac{P_1}{P_2} - 1 \right] \right) \frac{x}{L} \right\}^{0.5} \quad (14)$$

نتایج ناشی از این معادله و داده‌های ناشی از روش ارائه شده در مطالعه حاضر در شکل ۲(الف) رسم شده است که نشان از تطابق قابل قبول این دو دارد. همچنین ابرت و اسپرو [۱۶] نتایج حل تحلیلی جریان گاز رقیق در کانال مستطیلی را استخراج کرده‌اند. پس از انتقال دستگاه مختصات مورد استفاده در مقاله مذکور به مختصات استفاده شده در این مقاله، نتایج حل تحلیلی با نتایج این مقاله در شکل ۲(ب) مقایسه شده است. اختلاف محدود مشاهده شده در پروفیل سرعت نشان داده شده در این شکل، ناشی از عدم در نظر گرفتن اثرات تراکم‌پذیری در حل تحلیلی ارائه شده توسط ابرت و اسپرو [۱۶] می‌باشد.

$$f_{14}(x_j, y_j, z_j, t+1) = q(1+2q)f_7^+(x_j, y_j, z_j, t) + (1-4q^2)f_7^+(x_d, y_d, z_d, t) - q(1-2q)f_7^+(x_e, y_e, z_e, t) \quad (11)$$

به شکل مشابه، برای حالتی که مرز منحنی در نیمه دوم بازه با شبکه حل تقاطع نماید یا  $q$  بزرگتر از ۰/۵ باشد، داریم:

$$f_4(x_j, y_j, z_j, t+1) = \frac{1}{q(1+2q)}f_2^+(x_j, y_j, z_j, t) + \frac{(2q-1)}{q}f_4(x_f, y_f, z_f, t+1) - \frac{(2q-1)}{(2q+1)}f_4(x_g, y_g, z_g, t+1) \quad (12)$$

در یک نوع دیگر از برخورد با مرزهای منحنی [۷، ۸]، توابع توزیع در جهات مجهول برای چگالی و انرژی درونی در مرحله پس‌ابرخورد (که با بالانویس + مشخص شده‌اند)، به کمک توابع توزیع تعادلی (روابط ۳ و ۴) و غیرتعادلی (محاسبه شده از مرحله قبل از شارش) به دست می‌آیند. مقادیر توابع توزیع چگالی و انرژی درونی در حالت غیرتعادلی، توسط روش برونابی مرتبه یک از گرهای داخلی میدان جریان متناسب با اینکه مقدار  $q$  چقدر باشد، محاسبه می‌شوند.

در این مقاله، شرط مرزی برای دو دسته از گرهای مرزی اعمال می‌شود. دسته اول شامل گرهای است که دارای بیش از یک گر جامد در همسایگی خود هستند و دسته دوم گرهایی می‌باشند که تنها یک گر جامد در مجاورتشان یافت می‌شود. در ورودی کانال که روی  $x=0$  واقع شده است، مقدار چگالی (یا فشار) همراه با دو مؤلفه سرعت  $U_x$  و  $U_y$  مشخص می‌شوند. در نتیجه پنج تابع توزیع چگالی نامعلوم در جهات ۱، ۷، ۸، ۹، ۱۰ همراه با سومین مؤلفه سرعت در جهت جریان ( $U_x$ ) به کمک مقدار مفروض چگالی روی مرز، توسط روش پیشنهاد شده توسط زو و هی [۱۱] محاسبه می‌شوند. مشابه با تابع توزیع چگالی، مقادیر مجهول تابع توزیع انرژی درونی در ورودی در پنج جهت ۱، ۷، ۸، ۹، ۱۰، به منظور اعمال شرط مرزی دما-ثابت توسط شکل تمم‌یافته‌ای از مدل ارائه شده توسط دی-اورازو و ساکی [۱۲] محاسبه شده‌اند. مقادیر مجهول توابع توزیع انرژی درونی و چگالی روی خروجی کانال، توسط برونابی از دو نقطه همسایه داخل میدان محاسبه می‌شوند [۱۳].

همانگونه که بیان شد، دسته دوم از گرهای شبکه شامل گرهایی است که یک گر جامد در مجاورت خود دارند. برای این دسته از گرها، روش تطبیقی پیشنهاد شده توسط بوزیدی و همکاران [۶] و هانگ و همکاران [۸] به ترتیب برای میدان جریان و میدان دما استفاده شده است. همچنین برای اینگونه از گرها که روی ورودی و خروجی قرار دارند، روش برونابی برای توابع توزیع چگالی و انرژی درونی بیان شده به ترتیب در مطالعه گو و همکاران [۷] و هانگ و همکاران [۸] استفاده شده است.

شرایط اولیه به صورت سیال ساکن با دمای محیط در کل میدان حل، فرض شده است. به منظور ایجاد همگرایی، شرط (۱۳) با معیار نسبی همگرایی  $10^{-10}$  روی کلیه گرهای محاسباتی اعمال می‌شود.

شکل ۳ نمودار سرعت توسعه یافته را در عرض کانال برای اعداد نادسن ۰/۲ تا ۱ نمایش می دهد. مشاهده می شود که با افزایش عدد نادسن و تقویت اثرات رقت گاز در مجاورت دیوار، سرعت حداکثر در نزدیکی میانه کانال کاهش یافته و در عوض مقدار لغزش سرعت روی دیواره تقویت می شود. این نکته مطابق قانون بقای جرم نیز می باشد. رفتار مشابهی برای لغزش سرعت روی دیوار در محدوده رژیم لغزش در مراجع [۳، ۲] نیز گزارش شده است. اما نتایج نشان داد که در قیاس با محدوده رژیم لغزش، برای رژیم گذار با اعداد نادسن بزرگتر از ۰/۲، عدد نادسن روی مقدار لغزش سرعت دیوار تاثیر ضعیف تری دارد.

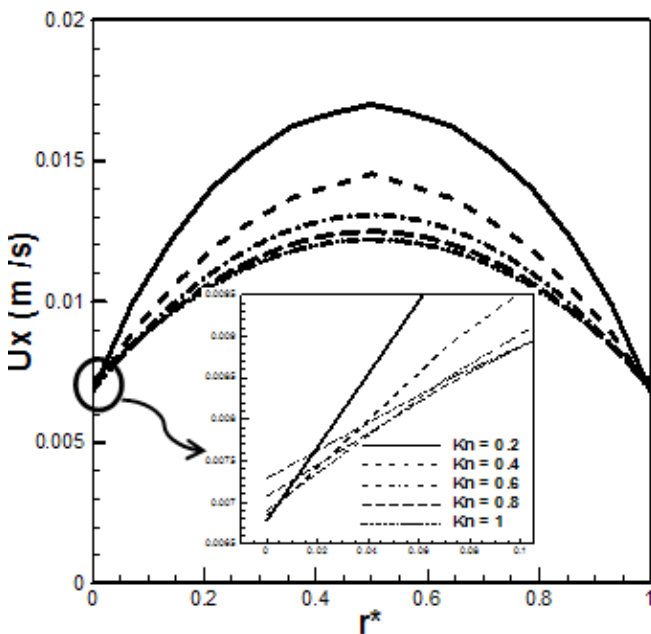
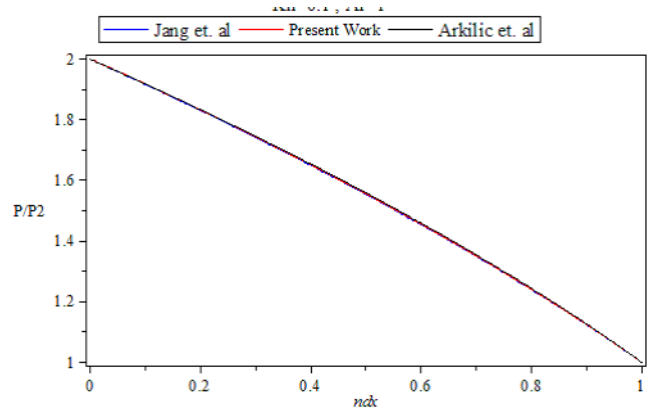


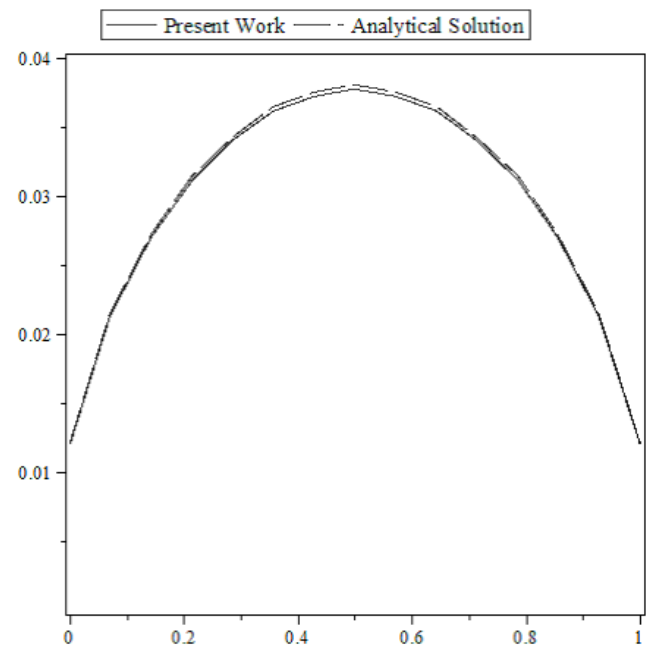
Fig. 3. Rarefaction effect near wall on velocity profile at  $x/L=0.9$ .

شکل ۳: اثر رقت گاز نزدیک دیوار بر روی پروفیل سرعت در امتداد عمود بر محور در  $x/L$  برابر با ۰/۹

شکل ۴ تغییرات انرژی درونی در راستای محور مرکزی در طول کانال را برای اعداد نادسن مختلف نمایش می دهد. این منحنی نمایشگر طول توسعه یافتگی در جریان های داخلی است. از این منحنی مشاهده می شود که با کاهش عدد نادسن مقدار جهش اولیه در ناحیه در حال توسعه تقویت شده و برای نادسن های بزرگتر، توزیع انرژی درونی در طول کانال کاهش می یابد. از نقطه نظر فیزیکی، با افزایش عدد نادسن به علت لغزش سرعت روی دیوار، عدد رینولدز و در نتیجه عدد پکلت جریان افزایش می یابند. از طرفی برای جریان های با عدد پکلت کوچک پس از طی مسافت کوتاهی در طول ورودی لوله، جریان سریعاً به توسعه یافتگی حرارتی می رسد. همان گونه که شکل ۴ نشان می دهد، با افزایش عدد نادسن طول توسعه یافتگی افزایش یافته و در عدد نادسن برابر با ۱، پس از طی مسافت بی بعد به طور تقریبی برابر با ۰/۲، شرایط جریان توسعه یافته ایجاد می شود.



(الف)



(ب)

Fig. 2. Comparison of 3D numerical results with previous studies, a) nonlinear pressure distribution with [14, 15] at  $Kn=0.2$ , b) velocity profile at  $Kn=0.06$  with analytical solution of [16].

شکل ۲: مقایسه نتایج حل عددی سه بعدی با نتایج مطالعات پیشین، الف: مقایسه توزیع فشار غیرخطی با نتایج مطالعات [۱۵ و ۱۴] در عدد نادسن ۰/۲، ب: مقایسه پروفیل سرعت در عدد نادسن ۰/۰۶ با حل تحلیلی ارائه شده در پژوهش ابرت و اسپرو [۱۶]

جدول ۲: نتایج آزمون استقلال از شبکه برای جریان درون نانولوله در عدد نادسن برابر با ۱

Table 2. Results of lattice-independence test for flow in nano-tube at  $Kn=1$ .

ابعاد شبکه در راستای شعاعی	سرعت بی بعد حداکثر	انرژی درونی بی بعد حداقل
۱۱	۰/۰۱۰۱	۱/۵۹۳
۲۱	۰/۰۱۲۲	۱/۷۵۲
۳۱	۰/۰۱۲۴	۱/۷۶۱



شکل ۶ تغییرات حاصل ضرب ضریب اصطکاک قشری در عدد رینولدز و عدد نوسلت را برای اعداد نادسن مختلف نشان می‌دهد. این دو عدد بی‌بعد، جزو مهم‌ترین نتایج در بررسی جریان‌های داخلی هستند. با توجه به شکل دیده می‌شود که اثر رقیق‌شدن گاز به خصوص در مجاورت مرز جامد، به صورت کاهش ضریب اصطکاک قشری و عدد نوسلت ظاهر می‌شود. اما با افزایش عدد نادسن به علت شدت گرفتن پرش دما و لغزش سرعت، شیب کاهش این دو عدد بی‌بعد ملایم‌تر می‌شود.

دلیل کاهش ضریب اصطکاک و عدد نوسلت به ترتیب افزایش طول لغزشی و افزایش مقاومت تماس در اثر ایجاد پرش دمایی است. مطابق با آنچه برای رژیم لغزش تعریف می‌شود، طول لغزشی به صورت فاصله دیوار از نقطه‌ایست که سرعت حاصل از برون‌یابی برابر با صفر شود.

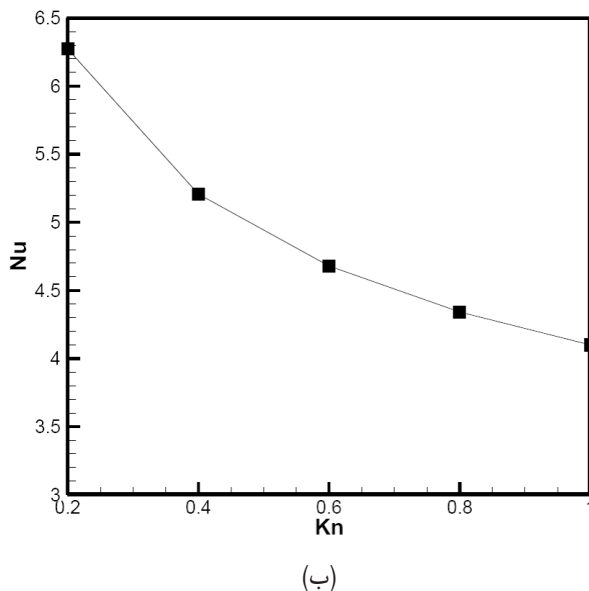
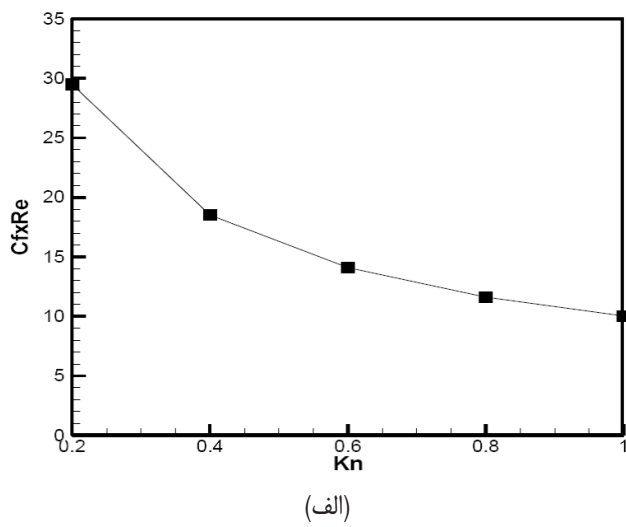


Fig. 6. Variation of a)  $C_f Re$ , b) Nusselt number, for nano-tubes at different Knudsen numbers

شکل ۶: تغییرات الف) حاصل‌ضرب ضریب اصطکاک در رینولدز و ب) عدد نوسلت، درون نانولوله برای اعداد نادسن متفاوت

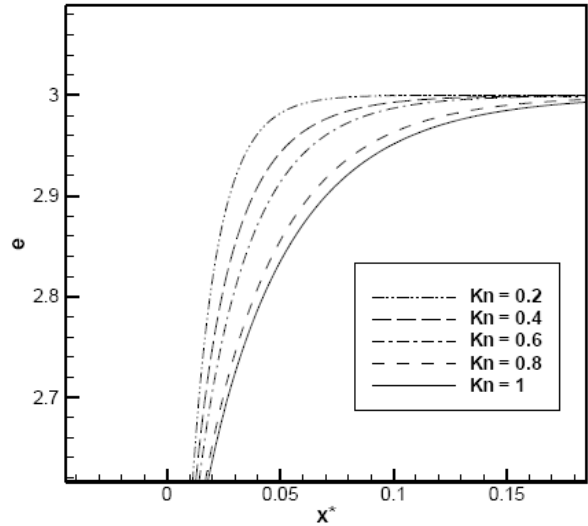


Fig. 4. Internal Energy distribution along the channel in the developing region versus  $Kn$ .

شکل ۴: توزیع انرژی درونی در طول کانال در ناحیه در حال توسعه برای اعداد نادسن مختلف

در شکل ۵ توزیع انرژی درونی در عرض نانولوله برای اعداد نادسن مختلف در موقعیت مکانی  $x/l=0/01$  مقایسه شده است. در این شکل پرش دمایی روی مرز جامد نیز قابل رؤیت است. مشاهده می‌شود که مشابه با آنچه برای سرعت گزارش شد، با افزایش عدد نادسن پرش دمایی روی مرز قوت گرفته و اثری مشابه با آنچه در مقاوت حرارتی تماسی مابین دو جامد ایجاد می‌شود، رخ می‌دهد. در نتیجه با رقیق‌تر شدن گاز در مجاورت دیوار به علت تشکیل لایه نادسن و ضخیم‌تر شدن آن، شیب پروفیل سرعت روی دیوار و در نتیجه شار حرارتی و شدت حرارت مبادله شده با دیوار کاهش می‌یابند. همچنین همانگونه که انتظار می‌رود شکل ۵ نشان می‌دهد که مقدار حداقل انرژی درونی روی محور مرکزی کانال ایجاد شده است.

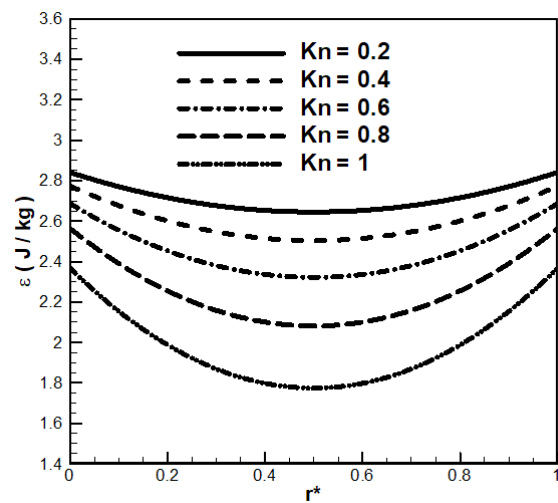


Fig. 5. Internal energy distribution in radial direction for various Knudsen numbers in axial position of 0.01

شکل ۵: پروفیل انرژی درونی در راستای عمود بر محور کانال در اعداد نادسن مختلف در موقعیت محوری برابر با  $0/01$

## ۵- نتیجه گیری

مقاله حاضر شکلی سه بعدی از روش بولتزمن شبکه‌ای حرارتی با مدل بی-جی-کی ارائه می‌دهد که توانایی مدل‌سازی کلیه پدیده‌های در ابعاد نانو شامل تشکیل لایه نادنس، تابعیت طول میانگین آزاد با دما و مکان، پرفشار دمایی روی دیوار، لغزش سرعت روی مرز جامد و اثرات تراکم‌پذیری و توزیع فشار غیرخطی را تا اعداد نادنس بالا در محدوده رژیم گذار داشته باشد. مدل گسسته‌سازی سرعت، دی-۳-کیو-۹ بوده و شرط مرزی روی دیواره نانولوله دما-ثابت است. تاکنون هیچ مطالعه‌ای توسط روش بولتزمن شبکه‌ای حرارتی روی خصوصیات جریان و انتقال حرارت در رژیم گذار تا عدد نادنس برابر با ۱، در کانال با سطح مقطع دایروی ارائه نشده است.

## فهرست علائم

$b_i$	پارامتر مرزی، m
$C$	ثابت
$c_i$	سرعت‌های مولکولی در جهات مختلف، m/s
$C_f$	ضریب اصطکاک پوسته‌ای
$D$	طول مشخصه، m
$e$	تلورانس همگرایی
$f_i$	تابع توزیع چگالی
$g_i$	تابع توزیع انرژی درونی
$k$	نفوذپذیری حرارتی، $m^2/s$
$Kn$	عدد نادنس
$N_H$	تعداد گره‌های محاسباتی
$Nu$	عدد نوسلت
$P$	فشار، Pa
$Pr$	عدد پراتل
$q$	پارامتر مرزی
$Re$	عدد رینولدز
$r$	مختص شعاعی، m
$T$	زمان، s
$V$	سرعت، m/s
$X$	مکان، m

## علائم یونانی

$\varepsilon$	انرژی درونی، J/kg
$\lambda$	طول میانگین آزاد ذرات، m
$\nu$	ضریب لزجت سینماتیک، $m^2/s$
$\rho$	چگالی، $kg/m^3$

$\tau_c$	زمان استراحت برای تابع توزیع چگالی، s
$\tau_v$	زمان استراحت برای تابع توزیع انرژی درونی، s
$\Psi$	تابع تصحیح لایه نادنس
$\omega$	ثابت
$\omega_i$	ضرایب وزنی
زیرنویس	
$e$	مؤثر
$i$	شمارنده جهات فضا
ref	حالت مرجع
بالانویس	
*	حالت بی‌بعد
eq	حالت تعادل

## تشکر و قدردانی

نویسندگان از آزمایشگاه محاسبات سریع در دانشگاه صنعتی امیرکبیر برای در اختیار قرار دادن کامپیوترهای پر سرعت کمال تشکر را دارند.

## منابع

- [1] W.M. Zhang, G. Meng, X. Wei, A review on slip models for gas microflows, *Microfluidics and Nanofluidics*, 13 (2012) 845-882.
- [2] S. Palle, S. Aliabadi, Slip flow and heat transfer in rectangular and circular microchannels using hybrid FE/FV method, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 89 (2012) 53-70.
- [3] Sh. Chen, Lattice Boltzmann method for slip flow heat transfer in circular microtubes: Extended Graetz problem, *Applied Mathematics and Computation*, 217 (7) (2010) 3314-3320.
- [4] J. Ghazanfarian, A. Abbassi, Heat transfer and fluid flow in microchannels and nanochannels at high Knudsen number using thermal lattice-Boltzmann method, *Physical Review E*, 82(2) (2010) 026307.
- [5] R. Khazaeli, S. Mortazavi, M. Ashrafizaadeh, Application of a ghost fluid approach for a thermal lattice Boltzmann method, *Journal of Computational Physics* 250(0) (2013) 126-140.
- [6] M. Bouzidi, M. Firdaouss, P. Lallemand, Momentum transfer of a Boltzmann-lattice fluid with boundaries, *Physics of Fluids*, 13(11) (2001) 3452-9.
- [7] Z. Guo, C. Zheng, B. Shi, An extrapolation method for boundary conditions in lattice Boltzmann method, *Physics of Fluids*, 14(6) (2002) 2007-2010.

- thermal channel flows by means of a lattice Boltzmann method with new boundary conditions, *Future Generation Computer Systems*, 20(6) (2004) 935-944.
- [13] S. Chen, D. Martínez, R. Mei, On boundary conditions in lattice Boltzmann methods, *Physics of Fluids* 8(9) (1996) 2527-2536.
- [14] J. Jang, S.T. Wereley, Pressure distributions of gaseous slip flow in straight and uniform rectangular microchannels, *Microfluidics and Nanofluidics*, 1(1) (2004) 41-51.
- [15] E.B. Arkilic, M.A. Schmidt, K.S. Breuer, Gaseous slip flow in long microchannels, *Journal of Microelectromechanical Systems*, 6(2) (1997) 167-178.
- [16] W.A. Ebert, E.M. Sparrow, Slip flow in rectangular and annular ducts, *Journal of Basic Engineering-ASME*, 87(4) (1965) 1018-1024.
- [8] H. Haung, T.S. Lee, C. Shu, Lattice-BGK simulation of steady flow through vascular tubes with double constrictions, *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, 16(2) (2006) 186-203.
- [9] Y. Peng, C. Shu, Y.T. Chew, A 3D incompressible thermal lattice Boltzmann model and its application to simulate natural convection in a cubic cavity, *Journal of Computational Physics*, 193(1) (2004) 260-274.
- [10] K. Suga, Lattice Boltzmann methods for complex micro-flows: applicability and limitations for practical applications, *Fluid Dynamics Research*, 45 (2013) 034501.
- [11] Q. Zou, X. He, On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model, *Physics of Fluids*, 9(6) (1997) 1591-1598.
- [12] A. D’Orazio, S. Succi, Simulating two-dimensional

برای ارجاع به این مقاله از عبارت زیر استفاده کنید:

Please cite this article using:

J. Ghazanfarian, D. Jamshideasli, A. Abbassi, "Thermal Lattice Boltzmann Method for Curved Boundaries in the Transition Regime" *Amirkabir J. Mech. Eng.*, 49(3) (2017) 617-624.  
DOI: 10.22060/mej.2016.734

