



Stability and Thermodynamic Consistency in the Coexistence Curve Of Liquid-Vapor in A Modified Pseudo-Potential Model

M. Taghilou*, S. Zarei

Department of Mechanical Engineering, University of Zanjan, Zanjan, Iran

ABSTRACT: In this paper, the conditions of convergence and thermodynamic consistency of the Kupershtokh model for simulating a 2D droplet are investigated. Hence, the coexistence curve of liquid and vapor phases is divided into four levels according to the constant of the potential function, k and the weight coefficient of the intermolecular forces, A . Accordingly, a range is reported for k at each level. This range for level 1 with the lowest density ratio is $k_{\min} = 0.05$ to $k_{\max} = 0.22$ and for the fourth level with the highest density ratio is $k_{\min} = 0.002$ to $k_{\max} = 0.01$. Also, the appropriate weight coefficient for intermolecular forces, A_{fit} is obtained for yielding the thermodynamic consistency at levels 1 to 4 equal with 0.25, 0.025, -0.082 and -0.125, respectively. Results show that the choice of $A=0.5$ produces symmetric and $A=0$ causes asymmetric forces in the interface. Finally, the problem of mass conservation in four levels is investigated. Results show that Kupeshtokh model has a better behavior in controlling the mass of the droplet in the high density ratios. So, the change in the mass of the droplet at level 1 is more than 20% and at the level of 4 is less than 1%.

Review History:

Received: 2019/02/28

Revised: 2019/04/24

Accepted: 2019/05/05

Available Online: 2019/05/15

Keywords:

Lattice Boltzmann method

Pseudo-potential model

Coexistence curve

Intermolecular forces

1- Introduction

The most common model for simulating two-phase flows in the lattice Boltzmann framework is the pseudopotential model [1]. The emergence of spurious velocities, thermodynamic inconsistency, the low viscosity, and density ratios and the relation between the equation of state and surface tension are among the limitations of this model [2].

Kupershtokh model [3] succeeds to reduce spurious velocities and achieve a high-density ratio by first, using the Exact Difference Method (EDM) in force insertion and second, the combination of symmetric and non-symmetric methods in the calculation of the potential function at the interface of the two phases. However, the results of this model are highly dependent on the behavior of the potential function, which is controlled by the constant of potential function, k , and the weighting factor of the force equation, A . In this paper, in addition to providing a pattern for selecting the constant of the potential function and the weight factor of the force, the force distribution conditions at the interface of the two phases are studied.

2- Methodology

2- 1- Lattice Boltzmann method

In order to apply the external forces to the Boltzmann equation, one can write [4]:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t) - \frac{\Delta t}{\tau} [f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t)] + \Delta f_i \quad (1)$$

In Eq. (1), Δf_i is due to the external forces. In this paper, the exact difference method for the application of external forces is used. In this method, the difference in the equilibrium distribution function before and after force application in a time step is defined as follows [3]:

$$\Delta f_i(\mathbf{x}, t) = f_i^{eq}(\rho(\mathbf{x}, t), \mathbf{u} + \Delta \mathbf{u}) - f_i^{eq}(\rho(\mathbf{x}, t), \mathbf{u}) \quad (2)$$

where, $\Delta \mathbf{u} = \mathbf{F} \Delta t / \rho$.

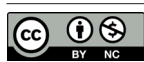
2- 2- Pseudopotential model

In order to calculate the intermolecular forces, the gradient of the potential function \tilde{U} must be taken according to $\mathbf{F} = -\nabla \tilde{U}$. For this purpose, two solutions are proposed. In the first solution, the gradient is computed proportional to the directions of the D2Q9.

$$\mathbf{F} = \frac{1}{2\alpha \Delta x} \sum_{k=1}^N \frac{G_k}{G_1} \tilde{U}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k) \mathbf{c}_k \quad (3)$$

In Eq. (3), G_k / G_1 is a coefficient that shows the contribution of adjacent points in the calculation of $\nabla \tilde{U}$. The G_k

*Corresponding author's email: taghilou@znu.ac.ir



coefficient for the main directions is equal to G1 and in the minor directions is 0.25 G1. In the second solution, with the definition of the special function, one can consider the potential function as follows [5-7]:

$$\phi(\rho_r, T_r) = \sqrt{-\tilde{U}(\rho_r, T_r)} \tag{4}$$

Substituting Eq. (4) in $\mathbf{F} = -\nabla\tilde{U}$ the following equation is obtained [3]:

$$\mathbf{F} = 2\phi\nabla\phi \tag{5}$$

Using numerical approximation, Eq. (5) can be written as [5, 7]:

$$\mathbf{F} = \frac{1}{\alpha\Delta x} \phi(\mathbf{x}) \sum_{k=1}^N \frac{G_k}{G_1} \phi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k) \mathbf{c}_k \tag{6}$$

The following equation can be obtained by combining Eqs. (3) and (6) with different weights [3]:

$$\mathbf{F} = \frac{1}{\alpha\Delta x} \left[\begin{array}{l} A \sum_{k=1}^N \frac{G_k}{G_1} \phi^2(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k) \mathbf{c}_k + \\ (1-2A)\phi(\mathbf{x}) \sum_{k=1}^N \frac{G_k}{G_1} \phi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k) \mathbf{c}_k \end{array} \right] \tag{7}$$

In Eq. (7), parameter A acts as a weighting factor. Eq. (7) for the value of A=0 leads to Eq. (6), and for A=0.5 leads to Eq. (3).

3- Results and Discussion

To check the accuracy and obtain the surface tension the Laplace test is carried out. According to Laplace's law, the difference in pressure inside and outside of a two-dimensional droplet is obtained by [8]:

$$\Delta p = p_{in} - p_{out} = \frac{\sigma}{R} \tag{8}$$

The results of Eq. (8) in a 200x200 computational domain are obtained from two equations of states of van der Waals and modified Kaplun-Meshalkin and are shown in Figs. 1 and 2..., show the coexistence curve which is obtained by Maxwell equal area using van der Waals equation of state. According to this figure, it is seen that by increasing the density ratio access to a pattern will be necessary to select the simulation parameters of the flow. Accordingly, the temperature range of 0.92-0.99 is named as level 1, the range of 0.7-0.9 named as level 2, the range of 0.5-0.65 refers to level 3 and a temperature range of 0.3-0.45 is known as level 4.

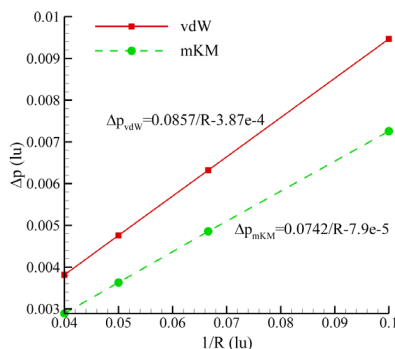


Fig. 1. Laplace test to calculate the surface tension of the droplet.

3- 1- Effect of k on the coexistence curve

Changing the parameter k shows that for each T_r , there is a range of k, that the convergence of the solution cannot be reached outside it. The lower limit of this domain is k_{min} and its upper limit is k_{max} . As shown in Fig. 2, the k_{min} and k_{max} values are different for each level. By increasing the density ratio these values decreased from 0.05 to 0.002 for k_{min} and from 0.22 to 0.01 for k_{max} , respectively.

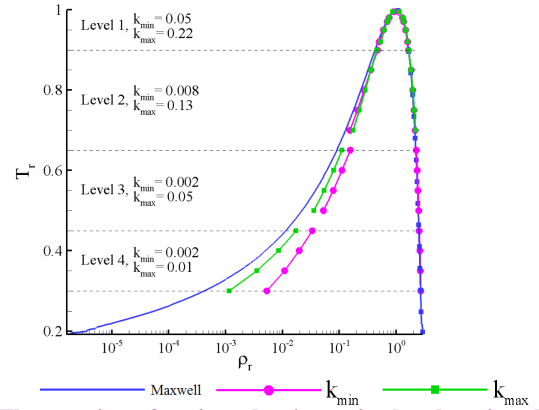


Fig. 2. The creation of various density ratios by changing the parameter of k.

4- 4.2. Effect of A on the coexistence curve

In this section, the value of k is equal to k_{max} at each level. Fig. 3 shows the variations in the density of the liquid and vapor phases in terms of the T_r at four levels of 1 to 4. On this basis, it is seen that by changing the value of A, the conditions for convergence of simulations are provided in $A_{min} < A < A_{max}$. In this range, A_{min} represents the lower limit of A for the lowest density ratio, and A_{max} represents the upper limit of A for the highest density ratio. The important point in this section is the introduction of conditions in which the numerical density ratio is equal to the theory of Maxwell's equal area. In other words, by choosing the proper amount of A_{fit} , one can achieve the thermodynamic consistency in simulating a two-dimensional droplet.

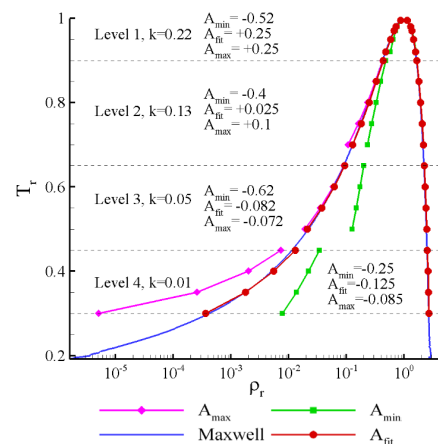


Fig. 3. Matching the numerical density ratio with the Maxwell theory by changing the weighting factor of A.

5- Conclusion

• By increasing the density ratio, the stability domain of the solution is transmitted to smaller values of k. So that, the

$k_{\min}=0.05$ at level 1 is reduced to 0.002 in the fourth level and the value of k_{\max} reduces from 0.22 in level 1 to 0.01 in level 4.

• Changing the weight factor of A causes a change in the density ratio of the two phases. These changes are such that by choosing the appropriate value for A_{fit} , one can obtain the density ratio corresponding to the base of the Maxwell equal area.

6- References

- [1] X. Shan, H. Chen, Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components, *Physical Review E*, 47(3) (1993) 1815.
- [2] L. Chen, Q. Kang, Y. Mu, Y.-L. He, W.-Q. Tao, A critical review of the pseudopotential multiphase lattice Boltzmann model: Methods and applications, *International journal of heat and mass transfer*, 76 (2014) 210-236.
- [3] A. Kupershtokh, D. Medvedev, D. Karpov, On equations of state in a lattice Boltzmann method, *Computers & Mathematics with Applications*, 58(5) (2009) 965-974.
- [4] K. Timm, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin, *The lattice Boltzmann method: principles and practice*, in, Springer: Berlin, Germany, 2016.
- [5] A. Kupershtokh, C. Stamatelatos, D. Agoris, Stochastic model of partial discharge activity in liquid and solid dielectrics, in: *IEEE International Conference on Dielectric Liquids, 2005. ICDL 2005.*, IEEE, 2005, pp. 135-138.
- [6] A.L. Kupershtokh, Simulation of flows with vapor-liquid interfaces using lattice Boltzmann equation method, *Siberian Journal of Pure and Applied Mathematics*, 5(3) (2005) 29-42.
- [7] A. Kupershtokh, D. Karpov, D. Medvedev, C. Stamatelatos, V. Charalambakos, E. Pyrgioti, D. Agoris, Stochastic models of partial discharge activity in solid and liquid dielectrics, *IET Science, Measurement & Technology*, 1(6) (2007) 303-311.
- [8] H. Deng, K. Jiao, Y. Hou, J.W. Park, Q. Du, A lattice Boltzmann model for multi-component two-phase gas-liquid flow with realistic fluid properties, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 128 (2019) 536-549.



بررسی شرایط پایداری و همسازی ترمودینامیکی در منحنی همزیستی فازهای مایع و بخار در مدل اصلاح شده پتانسیل ساختگی

محمد تقیلو^{*}، سجاد زارعی

دانشکده مهندسی، دانشگاه زنجان، زنجان، ایران

تاریخچه داوری:

دریافت: ۱۳۹۷-۱۲-۰۹
بازنگری: ۱۳۹۸-۰۲-۰۴
پذیرش: ۱۳۹۸-۰۲-۱۵
ارائه آنلاین: ۱۳۹۸-۰۲-۲۵

کلمات کلیدی:

روش بولترمن شبکه‌ای
مدل پتانسیل ساختگی
منحنی همزیستی دو فاز
نیروهای بین مولکولی

خلاصه: در این مقاله، شرایط همگرایی و همسازی ترمودینامیکی مدل کوپراشتاخ به منظور شبیه‌سازی یک قطره‌ی دو بعدی، بررسی شده است. برای انجام این کار، منحنی همزیستی دو فاز مایع و گاز با توجه به پارامترهای مربوط به تابع پتانسیل و ضریب وزنی نیروهای بین مولکولی، به چهار سطح تقسیم گردید. بر این اساس، محدوده‌ای برای ثابت تابع پتانسیل، k در هر سطح گزارش شد. این محدوده برای سطح یک با کمترین نسبت چگالی، در بازه‌ی $k_{min} = 0.05$ تا $k_{max} = 0.22$ و برای سطح چهار با بیشترین نسبت چگالی، در بازه‌ی $k_{min} = 0.02$ تا $k_{max} = 0.1$ قرار می‌گیرد. همچنین ضریب وزنی مناسب برای نیروهای بین مولکولی، A_{fit} به منظور ایجاد همسازی ترمودینامیکی در سطوح یک تا چهار به ترتیب به صورت $0.25, 0.25, 0.82, 0.125$ به دست آمد. نتایج نشان می‌دهد که انتخاب مقدار $A = 0.5$ سبب ایجاد نیروی متقارن و $A = 0.1$ سبب ایجاد نیروی نامتقارن در فصل مشترک می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که مدل کوپراشتاخ در کنترل جرم قطره در نسبت چگالی‌های بزرگ رفتار مناسب‌تری دارد. به طوریکه تغییر جرم قطره در سطح یک بیش از ۲۰ درصد و در سطح چهار کمتر از یک درصد است.

۱- مقدمه

جریان‌های چند فازی در کاربردهای علمی و صنعتی از اهمیت بالایی برخوردار هستند. شبیه‌سازی این جریان‌ها به دلیل اختلاف چگالی، اختلاف لزجت، حضور کشش سطحی و به وجود آمدن نیرو در سطح تماس بین دو فاز، به یک کار چالش برانگیز تبدیل شده است [۱ و ۲]. روش بولترمن شبکه‌ای^۱ از مقیاس مزوسکوپی برای شبیه‌سازی حرکت سیال استفاده می‌کند. از مزایای روش بولترمن شبکه‌ای می‌توان به قابل استفاده بودن برای شکل‌های پیچیده، تعریف خواص ترموفیزیکی، حل نکردن معادله‌ی لاپلاس در هر گام زمانی و شبیه‌سازی جریان‌های چند جزئی و جریان‌های چند فاز بدون نیاز به دنبال کردن سطح مشترک فازهای مختلف، اشاره کرد [۱ و ۳]. روش بولترمن شبکه‌ای کشش سطحی بین دو سطح را نتیجه‌ی اعمال نیروهای بین مولکولی بین دو فاز مختلف در نظر گرفته است. بنابراین، برای اعمال نیرو در بین دو فاز از مدل‌هایی که منشأ میکروسکوپی

دارند، استفاده می‌کند. مدل‌های مختلفی در چارچوب روش بولترمن شبکه‌ای در طول سه دهه‌ی گذشته ارائه شده است. سکاچ و تورن [۴] به بررسی روش بولترمن شبکه‌ای و چگونگی اعمال نیرو در جریان‌های دو فازی پرداخته‌اند. هازی و همکاران [۵] مدل‌های جریان‌های دو فاز در بولترمن شبکه‌ای را معرفی و این مدل‌ها را به سه دسته‌ی مدل گرادیان رنگی^۲، مدل پتانسیل ساختگی^۳ و مدل انرژی آزاد^۴ تقسیم‌بندی کرده‌اند. رایج‌ترین مدل شبیه‌سازی جریان‌های دو فاز، مدل ارائه شده توسط شان و چن [۶] است؛ که به اصطلاح مدل پتانسیل ساختگی اصلی و یا تعاملات بین ذره‌ای صریح^۵ نام گرفته است. این مدل برای جدایش فازها از نیروهای دافعه و جاذبه‌ی بین ذرات استفاده می‌کند. بررسی‌های انجام گرفته بر روی این مدل نشان می‌دهد که نیروی پیشنهاد شده منجر به معادله‌ی حالت غیرفیزیکی می‌گردد. به عبارت دیگر، با وجود توانایی مدل پتانسیل ساختگی

- 2 Color-gradient model
- 3 Pseudopotential model
- 4 Free-energy model
- 5 Explicit interparticle interactions

1 Lattice Boltzmann Method (LBM)

* نویسنده‌دار مکاتبات: taghilou@znu.ac.ir



سرعت صوت در فاز بخار باید هم مرتبه با سرعت صوت شبکه باشد. لی و لو [۱۳] در مقاله‌ای دیگر، با اضافه کردن جمله نیرو به معادله بولتزمن امکان تنظیم کشش سطحی در مدل پتانسیل ساختگی را فراهم کردند. در روش ارائه شده شرایط پایداری مکانیکی و نسبت چگالی دوفاز تحت تأثیر نیروی معرفی شده قرار نمی‌گیرد.

همان‌طور که اشاره شد، یکی از مشکلات مدل پتانسیل ساختگی اصلی ارتباط برخی خواص به یکدیگر بوده است. از طریق تغییر نحوه محاسبه نیرو علاوه بر کاهش سرعت‌های مجازی می‌توان مشکل وابستگی خواص به یکدیگر را تا حدودی برطرف کرد. همچنین چگونگی اعمال نیرو در معادله بولتزمن برای پایداری عددی و دقت مدل پتانسیل ساختگی اهمیت دارد. طرح‌های مختلفی برای اعمال نیرو وجود دارد که از جمله‌ی این طرح‌ها می‌توان به طرح نیرویی شان و چن [۶]، روش اختلاف دقیق^۳ [۱۴] و همچنین طرح‌های نیرویی هی و گائو، واگنر و روش ضریب رهاسازی چندگانه^۴ [۱۵] چند گانه اشاره نمود. نشان داده شده است که برای کاهش سرعت‌های مجازی روش اختلاف دقیق کارایی بهتری دارد [۱۶].

مدل کوپراشتاخ [۱۴] با بهره‌گیری از روش اختلاف دقیق در اعمال نیرو و ترکیب روش‌های متقارن و غیرمتقارن در محاسبه‌ی گرادیان تابع پتانسیل در فصل مشترک دو فاز، موفق به کاهش سرعت‌های مجازی و دستیابی به نسبت چگالی‌های بالا شده است. با این حال نتایج این مدل به رفتار تابع پتانسیل که توسط ثابت تابع پتانسیل، k کنترل می‌شود و نیز ضریب وزنی معادله‌ی نیرو، A که سهم نیروهای متقارن و نامتقارن در فصل مشترک را تعیین می‌کند، وابستگی زیادی دارد. به طوری که در هر دمای کاهیده‌ی مشخص (نسبت چگالی)، مقادیر k و A به منظور دستیابی به شرایط پایدار عددی و همسازی ترمودینامیکی متفاوت است. با توجه به گستره‌ی وسیع نسبت چگالی‌ها، دسترسی به مقادیری از k و A که در آن پایداری و همسازی ترمودینامیکی نتایج تضمین شده باشد، دارای اهمیت است. در این مقاله علاوه بر ارائه یک الگو جهت انتخاب پارامترهای ثابت تابع پتانسیل و ضریب وزنی نیرو، شرایط توزیع نیرو در فصل مشترک دو فاز و بقاء جرم قطره ایجاد شده، مورد مطالعه قرار می‌گیرد.

اصلی در تفکیک و ایجاد اختلاف چگالی و فشار بین دو فاز، ماهیت غیرفیزیکی تابع پتانسیل نیرو، سبب ایجاد نتایج غیرفیزیکی شده است. در شبیه‌سازی به وسیله‌ی این مدل، محدودیت‌هایی وجود دارد. به وجود آمدن سرعت‌های مجازی، ناهمسازی ترمودینامیکی، نسبت لزجت و نسبت چگالی کم، ارتباط بین معادله حالت با کشش سطحی و وابستگی کشش سطحی و نسبت چگالی به لزجت (یا زمان رهاسازی یگانه^۱) از محدودیت‌های موجود در این مدل است [۷].

علت مشکلات و محدودیت‌های ذکر شده به دلیل نامناسب وارد کردن معادله‌ی حالت، نحوه‌ی محاسبه‌ی نیرو و نوع اعمال آن به معادله‌ی بولتزمن گزارش شده است [۸]. روش‌های مختلفی برای اعمال معادله‌ی حالت به مدل پتانسیل ساختگی وجود دارد. یوان و شافر [۹] دریافتند که یک معادله حالت مناسب می‌تواند با کاهش سرعت‌های مجازی، نسبت چگالی را تا مرتبه‌ی ۱۰۰۰ افزایش دهد. این کار باعث شد، مدل پتانسیل ساختگی برای اکثر جریان‌های دو فازی واقعی از جمله بخار آب مایع که در آن‌ها نسبت چگالی در حدود ۱۰۰۰ است، مورد استفاده قرار گیرد. با وجود سادگی وارد کردن معادله‌ی حالت به مدل پتانسیل ساختگی در روش یوان و شافر؛ اثرات جرمی برای چگالی‌های مختلف در آن یکسان خواهد بود؛ که این مشکل در بعضی مواقع منجر به واگرایی می‌شود. نعمتی و همکاران [۱۰] به بررسی اثرات معادله حالت بر روی نسبت چگالی و سرعت‌های مجازی در روش پتانسیل ساختگی پرداختند. بدین منظور معادلات حالت درجه سوم مورد استفاده قرار گرفت. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که علاوه بر نوع معادله حالت، چگونگی محاسبه و اعمال نیرو در ایجاد شرایط پایداری و کاهش سرعت‌های مجازی تأثیر چشم‌گیری دارند. خواجه‌پور و همکاران [۱۱] مشکل همسازی ترمودینامیکی روش پتانسیل ساختگی را با استفاده از روش پتانسیل ساختگی چندگانه‌ی تعامل ذرات^۲ برطرف نمودند. آن‌ها با در نظر گرفتن معادلات حالت واندروالس و کارناهان استرلینگ، کاربرد روش خود را در تطابق نتایج عددی با معادلات حالت و کاهش سرعت‌های مجازی نشان دادند. لی و لو [۱۲] تأثیر معادله حالت را بر همسازی ترمودینامیکی و ضخامت فصل مشترک دو فاز بررسی کردند. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که برای رسیدن به شرایط همسازی ترمودینامیکی

3 Exact difference Method (EDM)

4 Multi Relaxation Time (MRT)

1 Single relaxation time

2 MultipseudoPotential Interparticle Interaction (MPI)

۲- روش بولتزمن شبکه‌ای

شکل گسسته معادله بولتزمن [۱۷] برای یک سیستم بدون نیروی خارجی، و با در نظر گرفتن همزمان فرآیندهای جاری شدن^۱ و برخورد^۲ به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] \quad (1)$$

در معادله (۱)، f تابع توزیع ذرات، i جهت گسسته شده، \mathbf{x} موقعیت مرکز شبکه، \mathbf{c} سرعت ذرات در شبکه، Δt گام زمانی، τ زمان رهاسازی یگانه^۳ و t بیانگر زمان است. همچنین عبارت f_i^{eq} به مقدار تابع توزیع در حالت تعادلی اشاره دارد. حل عددی معادله (۱)، در دو گام جاری شدن و برخورد که به ترتیب در معادلات (۲) و (۳) آورده شده است، صورت می‌پذیرد:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t) = f_i(\mathbf{x}, t) \quad (2)$$

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t) - \frac{\Delta t}{\tau} [f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t)] \quad (3)$$

در معادله (۲)، مقادیر تابع توزیع به صورت مکانی و در معادله (۳)، به صورت زمانی به‌روز رسانی می‌شوند. به منظور محاسبه مقدار تابع توزیع تعادلی از رابطه (۴) که شکل گسسته تابع توزیع ماکسول است، استفاده می‌شود [۱۷].

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left[1 + \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u})}{2c_s^2} \right] \quad (4)$$

در معادله (۴) ρ و \mathbf{u} به ترتیب چگالی و سرعت ماکروسکوپی سیستم و w_i ضرایب وزنی در جهات مختلف، می‌باشند. تعداد جهات‌ها و ارتباط آن‌ها با یکدیگر به آرایش شبکه بستگی دارد. در این مقاله از شبکه دو بعدی و نه سرعتی D2Q9 استفاده شده است. برای شبکه D2Q9، w_i و \mathbf{c}_i به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\mathbf{c}_i = \begin{cases} 0, & i = 0 \\ (\cos([i-1]\frac{\pi}{4}), \sin([i-1]\frac{\pi}{4}))c, & i = 1,2,3,4 \\ \sqrt{2}(\cos([i-1]\frac{\pi}{4}), \sin([i-1]\frac{\pi}{4}))c, & i = 5,6,7,8 \end{cases} \quad (5)$$

- 1 Streaming
- 2 Collision
- 3 Single Relaxation Time

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

در رابطه (۵)، $c = \Delta x / \Delta t$ می‌باشد؛ که در آن $\Delta x = \Delta t = 1$ فرض شده است. رابطه‌ی بین مقادیر توابع توزیع و پارامترهای ماکروسکوپی مانند چگالی و بردار سرعت سیال به شکل زیر نوشته می‌شوند:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=0}^8 f_i(\mathbf{x}, t) \quad (7)$$

$$\rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{u} = \sum_{i=0}^8 f_i(\mathbf{x}, t) \mathbf{c}_i \quad (8)$$

همچنین لزجت سینماتیکی ν توسط رابطه زیر به ضریب زمان رهاسازی یگانه مرتبط می‌شود:

$$\nu = \frac{1}{3}(\tau - 0.5) \quad (9)$$

به منظور اعمال نیروهای خارجی به معادله بولتزمن، رابطه (۳)، به صورت زیر بازنویسی می‌شود [۱۷]:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t) - \frac{\Delta t}{\tau} [f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t)] + \Delta f_i \quad (10)$$

در رابطه (۱۰) Δf_i تغییرات تابع توزیع در اثر اعمال نیروهای خارجی است. در این مقاله از روش اختلاف دقیق برای اعمال نیروهای خارجی استفاده شده است. در این روش، اختلاف تابع توزیع تعادلی بعد و قبل از اعمال نیرو در یک گام زمانی به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۴].

$$\Delta f_i(\mathbf{x}, t) = f_i^{eq}(\rho(\mathbf{x}, t), \mathbf{u} + \Delta \mathbf{u}) - f_i^{eq}(\rho(\mathbf{x}, t), \mathbf{u}) \quad (11)$$

تغییرات سرعت در طی یک گام زمانی بر اساس قانون دوم نیوتن به صورت $\Delta \mathbf{u} = \mathbf{F} \Delta t / \rho$ محاسبه شده است.

۳- معادلات حالت

معادلات حالت متعددی در یک سیال، شرایط دو فاز مایع و گاز را توصیف می‌کنند. با تعریف پارامترهای بی‌بعد $p_r = p / p_c$ ، $\rho_r = \rho / \rho_c$ و $T_r = T / T_c$ که به ترتیب فشار کاهیده، چگالی کاهیده و دمای کاهیده نامیده می‌شوند، شکل بی‌بعد معادلات حالت

به صورت رابطه (۱۵)، منجر به معادله حالت زیر برای فشار p می‌شود
[۲۰]:

$$p = \rho\theta - \alpha G_1 \psi^2 \quad (16)$$

ضریب α برای آرایش D2Q9 برابر 0.5 و مقدار $\theta = \frac{1}{3}$ است. معادله (۱۶) نشان می‌دهد که در روش شان و چن، معادله حالت به دست آمده به تابع $\psi(x)$ بستگی دارد. به عبارت دیگر، استفاده از معادله نیروی (۱۵)، به یک معادله حالت غیر فیزیکی منجر شده است. ژانگ و چنگ [۲۱] برای محاسبه نیروهای بین مولکولی، از گرادیان تابع پتانسیل U استفاده کرده‌اند. با استفاده از معادله‌ی حالت، تابع پتانسیل U به صورت زیر تعریف می‌شود [۱]:

$$U = p(\rho, T) - \rho\theta \quad (17)$$

به منظور استفاده از مقادیر کاهیده برای شبیه‌سازی از رابطه زیر استفاده می‌شود:

$$\tilde{U} = k p_r(\rho_r, T_r) - \rho_r \theta_r \quad (18)$$

که در آن $\theta_r = \theta \left(\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)^2 = \frac{1}{3}$ است. همچنین پارامتر k به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$k = \frac{p_c}{\rho_c} \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} \quad (19)$$

پارامتر k که در مقاله حاضر ثابت تابع پتانسیل نامیده می‌شود، تأثیر مهمی در کنترل نیروهای بین مولکولی دارد. در یک دمای مشخص و مطابق با قاعده مساحت‌های یکسان ماکسول، تنها باید یک نسبت چگالی بین دو فاز ایجاد شود، اما با توجه به معادله (۱۸)، تغییر k سبب تغییر در تابع پتانسیل و در نتیجه تغییر در نیروهای بین مولکولی خواهد شد. یعنی به ازای یک دمای مشخص، و مقادیر متفاوت k ، و برخلاف تعادل ترمودینامیکی، نسبت چگالی‌های مختلفی ایجاد می‌شود. این موضوع در قسمت ۳-۵ مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

به منظور محاسبه نیروهای بین مولکولی، باید مطابق رابطه $\mathbf{F} = -\nabla \tilde{U}$ از رابطه \tilde{U} گرادیان گرفته شود. بدین منظور از دو راهکار استفاده می‌شود. در راهکار اول و مطابق با معادله (۲۰) به طور مستقیم و متناسب با جهات شبکه D2Q9 از پارامتر \tilde{U} گرادیان

به دست می‌آید. در تعریف پارامترهای مورد اشاره زیر نویس c اشاره به مقدار کمیت در نقطه بحرانی است. در مقاله حاضر از معادله حالت واندروالس^۱ به منظور استخراج منحنی همزیستی با استفاده از قاعده مساحت‌های برابر ماکسول^۲ و از معادله کاپلن-مشلکین اصلاح شده^۳، به منظور اجرای آزمون لاپلاس استفاده شده است. شکل بی‌بعد معادله حالت واندروالس به صورت زیر قابل استخراج است [۱۳]:

$$p_r = \frac{8\rho_r T_r}{3 - \rho_r} - 3\rho_r^2 \quad (12)$$

همچنین شکل بی‌بعد معادله حالت کاپلن-مشلکین اصلاح شده به صورت رابطه‌ی زیر بیان می‌شود [۱۸]:

$$p_r = c \rho_r T_r \left(1 + \frac{d}{\frac{1}{\rho_r} - b} \right) - a \rho_r^2 \quad (13)$$

مقادیر a ، b و d را در معادله‌ی (۱۳) به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$a = \frac{1}{3-c}, \quad b = 3-c, \quad d = \frac{12c - 6c^2 + c^3 - 8}{c(3-c)} \quad (14)$$

که در آن c پارامتر آزادی است که جهت تطابق حداکثر با نتایج تجربی مقدار آن برابر با $2/78$ قرار داده شده است.

۴- مدل پتانسیل ساختگی اصلاح شده

برای محاسبه نیروهای بین مولکولی در جریان‌های دو فازی تک جزئی^۴ به روش شان و چن، نیروهای بین مولکولی سیال-سیال مطابق رابطه‌ی زیر پیشنهاد می‌شوند [۱۹]:

$$\mathbf{F} = \psi(x) \sum_{i=0}^8 G_i \psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) \mathbf{c}_i \quad (15)$$

که در آن $\psi(x)$ تابع اثرات جرم و G_i پارامتر آزاد است که قدرت تعاملات بین مولکولی را نشان می‌دهد. اعمال نیروهای بین مولکولی

- 1 van derWaals (vdW)
- 2 Maxwell equal area
- 3 modified Kaplun Meshalkin
- 4 Single component

مولکولی، معروف است. در این رابطه پارامتر A به صورت یک ضریب وزنی عمل می‌کند که به آن ضریب وزنی معادله نیرو گفته می‌شود. معادله (۲۴) به ازای مقدار $A=0$ به معادله (۲۳) و به ازای $A=0.5$ به رابطه (۲۰) منجر می‌شود. در قسمت ۵-۶ تأثیر استفاده از مقادیر مختلف A بر رفتار و مقادیر نیرو در فصل مشترک دو فاز مطالعه خواهد شد.

۵- بحث و نتایج

در تمام محاسبات صورت گرفته در این قسمت از فرض میدان دوبعدی و کوچک بودن میدان سرعت ($||u|| < 0.2$) استفاده شده است. همچنین به منظور ایجاد قطره و تفکیک دوفاز، مقدار تغییرات سرعت را به کمک نیروی بدست آمده از رابطه (۲۴) محاسبه و با استفاده از رابطه (۱۱) تغییرات تابع توزیع وارد معادله (۱۰) می‌شوند. مقادیر اولیه چگالی برای دو فاز مایع و بخار بعد از به تعادل رسیدن توزیع میدان چگالی تصادفی که در قسمت ۵-۲-۱ توضیح داده شده، بدست می‌آید.

۵-۱ همگرایی حل

شکل ۱ تغییرات منحنی فشار و چگالی کاهیده را با گذشت زمان برای شبکه‌ای به ابعاد 250×250 نشان می‌دهد. به همین منظور، با استفاده از معادله حالت و اندروالس، نسبت چگالی مایع به بخار $\eta = \frac{\rho_l}{\rho_v} = \frac{2/5}{0.15} = 16/67$ و مقادیر A ، T_r ، k و τ به ترتیب برابر 0.3 ،

گرفته می‌شود.

$$\mathbf{F} = \frac{1}{2\alpha\Delta x} \sum_{k=1}^N \frac{G_k}{G_1} \tilde{U}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k) \mathbf{c}_k \quad (20)$$

در رابطه (۲۰) عبارت G_k / G_1 ضریبی است که سهم نقاط مجاور را در محاسبه $\nabla \tilde{U}$ نشان می‌دهد. ضریب G_k برای جهت‌های اصلی برابر G و در جهت‌های فرعی $G/25$ است. در راهکار دوم با تعریف تابع ویژه ϕ می‌توان تابع پتانسیل را به صورت زیر در نظر گرفت [۲۲-۲۴]:

$$\phi(\rho_r, T_r) = \sqrt{-\tilde{U}(\rho_r, T_r)} \quad (21)$$

با جاگذاری معادله (۲۱) در رابطه $\mathbf{F} = -\nabla \tilde{U}$ رابطه‌ی زیر برای محاسبه‌ی نیروهای بین مولکولی به دست می‌آید [۱۴]:

$$\mathbf{F} = 2\phi \nabla \phi \quad (22)$$

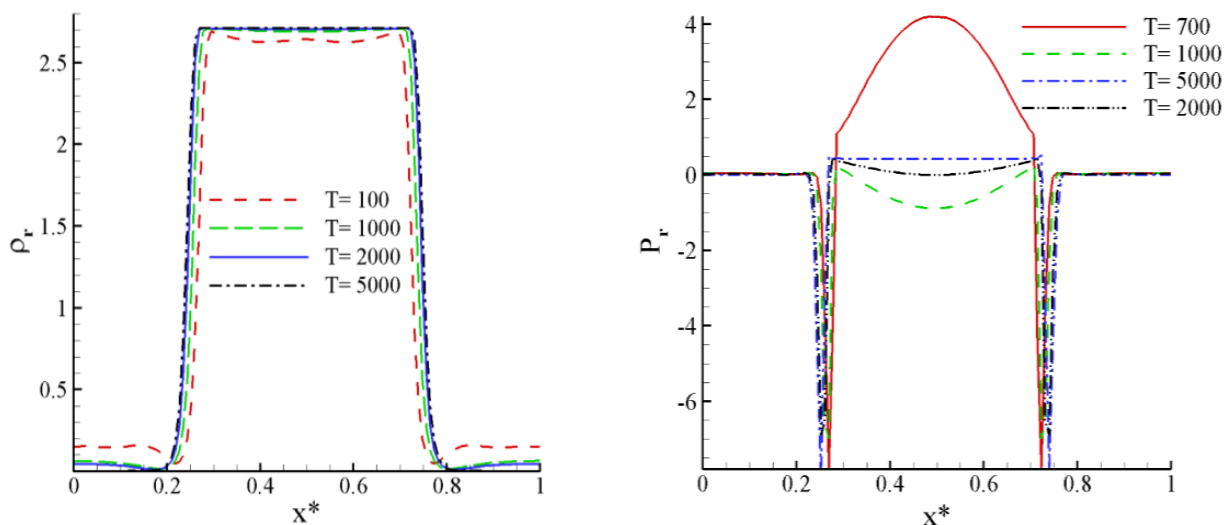
با استفاده از تقریب عددی، معادله (۲۲) را می‌توان به صورت زیر نوشت [۲۲ و ۲۴]:

$$\mathbf{F} = \frac{1}{\alpha\Delta x} \phi(\mathbf{x}) \sum_{k=1}^N \frac{G_k}{G_1} \phi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k) \mathbf{c}_k \quad (23)$$

با ترکیب معادلات (۲۰) و (۲۳) با وزن‌های مختلف می‌توان به معادله‌ی زیر رسید [۱۴].

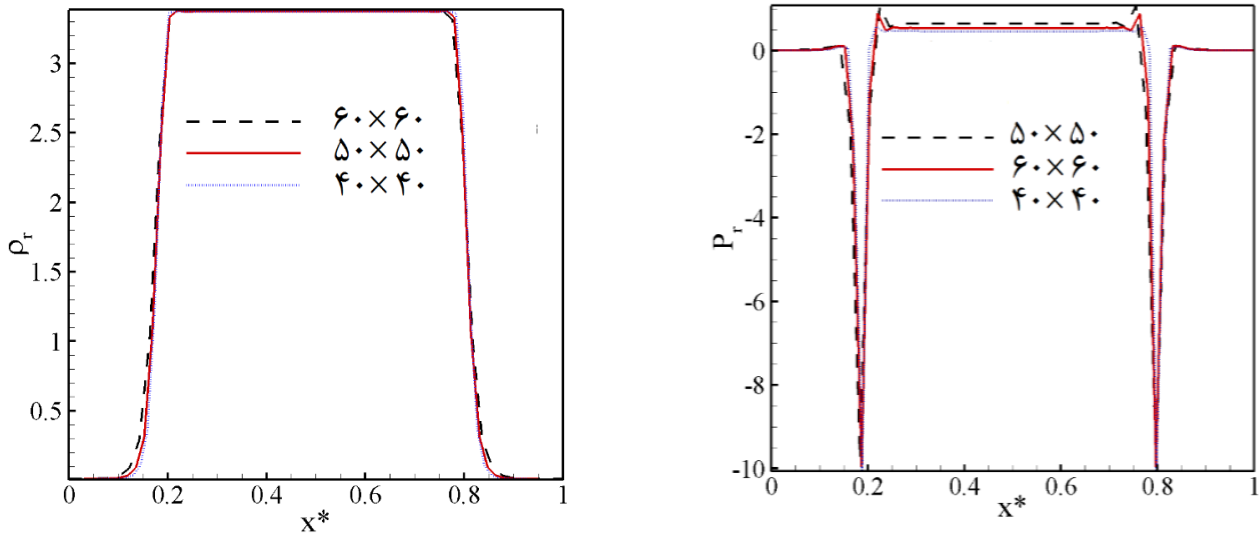
$$\mathbf{F} = \frac{1}{\alpha\Delta x} \left[A \sum_{k=1}^N \frac{G_k}{G_1} \phi^2(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k) \mathbf{c}_k + (1-2A) \phi(\mathbf{x}) \sum_{k=1}^N \frac{G_k}{G_1} \phi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k) \mathbf{c}_k \right] \quad (24)$$

معادله (۲۴) به رابطه‌ی کوپراشتاخ در محاسبه نیروهای بین



شکل ۱: نمایش همگرایی حل با افزایش تکرار. الف) همگرایی میدان فشار، ب) همگرایی میدان چگالی.

Fig. 1. Convergence of the solution over repetition. Convergence of a) pressure field, b) density field.



شکل ۲: نمایش منحنی‌های الف) فشار و ب) چگالی در شبکه‌های مختلف.
Fig. 2. Curves of a) pressure and b) Density in different grids.

از شبکه‌ی حل، تغییرات چگالی کاهیده بر حسب مکان بی‌بعد در شکل ۲-ب آورده شده است. همان طور که در شکل ۲-ب ملاحظه می‌گردد، نتایج هر سه منحنی مشابه هم بوده؛ به طوری که این سه منحنی در قسمت‌هایی از شبکه با یکدیگر هم‌پوشانی دارند.

۲-۵- اعتبارسنجی کد

در این قسمت، به منظور ارزیابی دقیق‌تر و اطمینان از صحت نتایج به دست آمده با توجه به کد نوشته شده، به بررسی آزمایش‌های مرسوم موجود در جریان‌های دو فاز پرده می‌شود.

۲-۵-۱- ایجاد قطره در یک محیط تصادفی

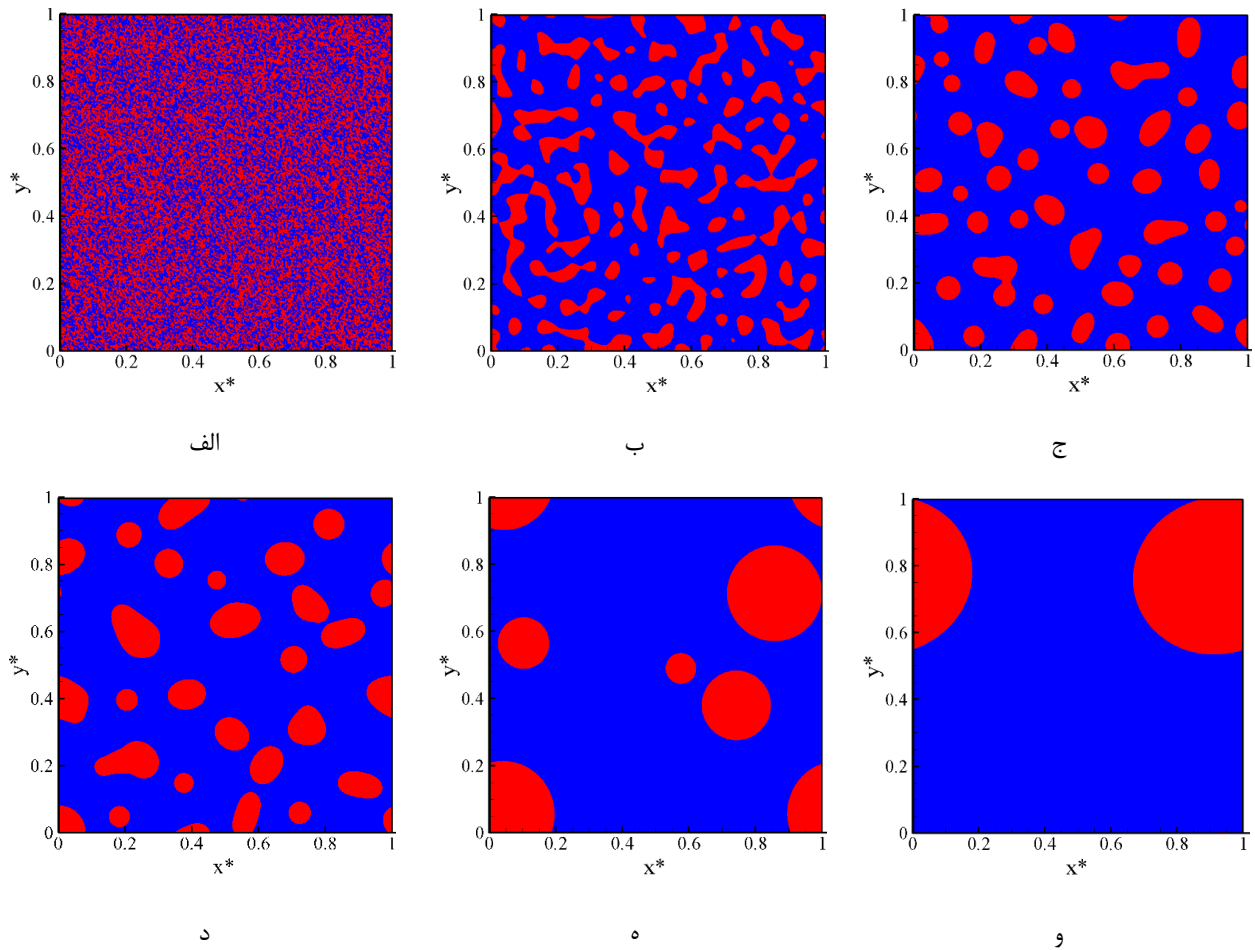
چگالی هر فاز یکی از پارامترهای اساسی در تشکیل قطره در محیط دو فاز است. شبیه‌سازی قطره با استفاده از توزیع تصادفی چگالی، مقادیر دقیق چگالی‌های دو فاز را می‌دهد. برای انجام این کار، توزیع تصادفی از چگالی با مقادیر بین صفر و یک، مطابق با شکل ۳-الف در میدان محاسباتی به ابعاد 300×300 در نظر گرفته شده است. همان طور که در این شکل گزارش شده است، با گذشت زمان دو فاز از یکدیگر جدا شده و به مقادیر نهایی از چگالی در شرایط تعادلی می‌رسند. این موضوع علاوه بر تأیید کد نوشته شده در تفکیک دو فاز، مقادیر نهایی چگالی دو فاز در شرایط مورد نظر را به دست می‌دهد.

۱۵۲/۰، ۰/۰۰۷ و ۰/۸ در نظر گرفته شده‌اند. محورهای افقی و قائم به ترتیب نسبت به طول شبکه و فشار بی‌بعد شده‌اند. همان طور که مشاهده می‌شود؛ پس از تشکیل قطره در مرکز میدان محاسباتی، و در زمان‌های اولیه، فشار و چگالی داخل قطره یکسان و یکنواخت نشده است. همان‌طور که در شکل نشان داده شده است، با افزایش تکرار به بیش از ۵۰۰۰ مرتبه، فشار و چگالی داخل قطره یکنواخت و پایا شده است. در این مقاله برای اطمینان از درستی نتایج، ابتدا همگرایی حل بررسی شده است.

در ادامه و برای اطمینان از مستقل بودن نتایج از شبکه‌ی حل، به شبیه‌سازی یک قطره با استفاده از معادله‌ی حالت و اندروالس پرداخته می‌شود. در این شرایط محیط حل دارای شرط مرزی تناوبی است و چگالی مایع به گاز $\eta = \frac{3/377}{0.12} = 28/14$ و مقادیر A ، T_r و k به ترتیب برابر ۰/۵، ۱۵۲/۰، ۰/۰۲ و ۰/۸ در نظر گرفته شده است. با قرار دادن یک قطره در مرکز شبکه‌هایی به ابعاد 40×40 ، 50×50 و 60×60 و بعد از گذشت بیش از ۵۰۰۰ تکرار، نمودار فشارکاهیده برای سه شبکه مورد اشاره در شکل ۲-الف، آورده شده است.

نتایج نشان می‌دهد که این سه منحنی تطابق مناسبی با یکدیگر دارند. براساس این شکل، در سطح مشترک دو فاز نوسان شدید فشار دیده می‌شود؛ که این موضوع به دلیل حضور سرعت‌های مجازی در سطح مشترک دو فاز بوده است.

در ادامه برای بررسی مستقل بودن چگالی‌های به دست آمده



شکل ۳: تفکیک دو فاز با گذشت زمان در یک میدان محاسباتی، الف) $T=1$ ، ب) $T=100$ ، ج) $T=1000$ ، د) $T=2000$ ، ه) $T=5000$ ، و) $T=100000$.

Fig. 3. The separation of two phases over time in a computational field, a) $T=1$, b) $T=100$, c) $T=1000$, d) $T=2000$, e) $T=5000$, and) $T=100000$.

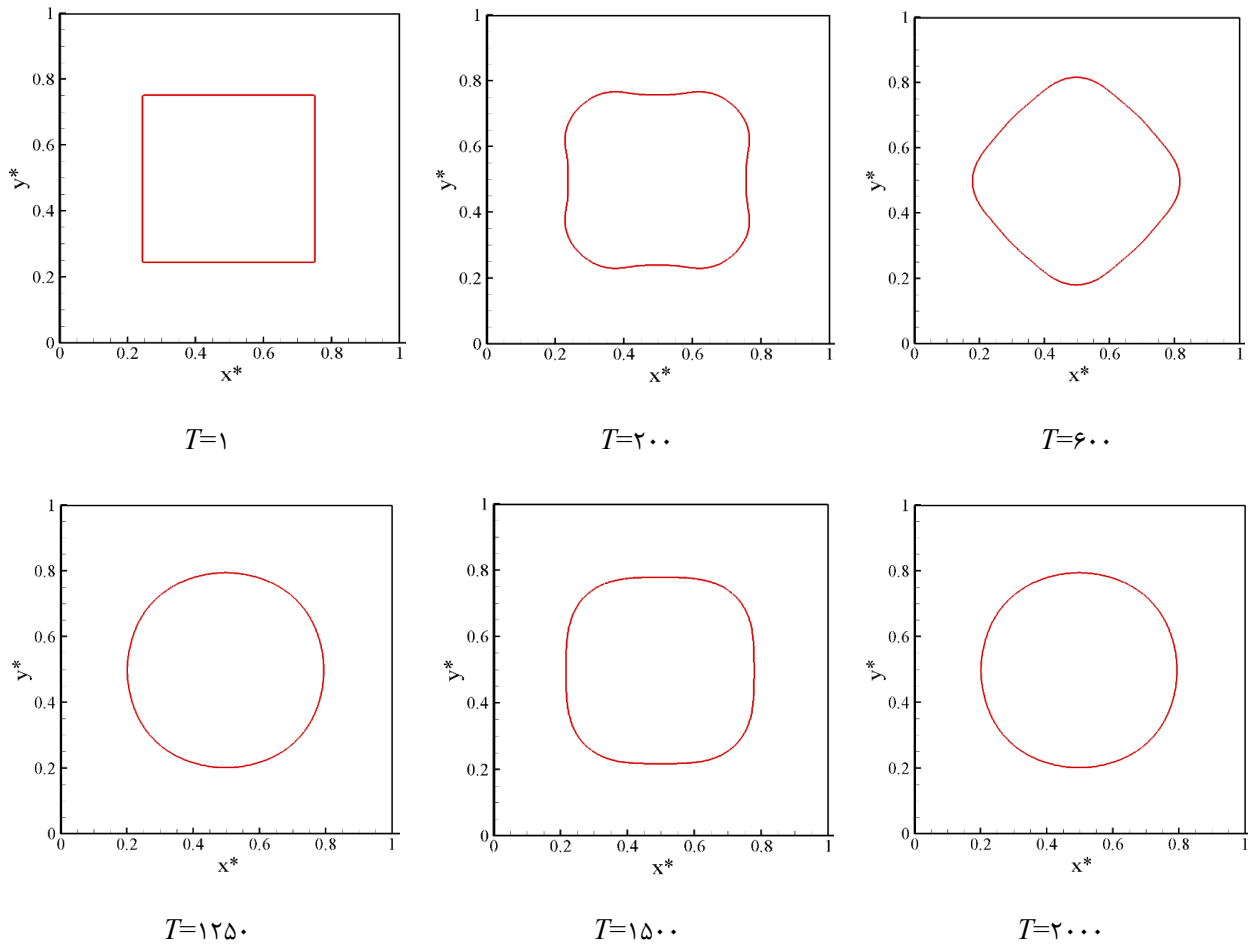
۵-۲-۲-آزمون رهاسازی قطره
 به منظور افزایش اطمینان از کد نوشته شده، از آزمون رهاسازی یک قطره‌ی مربعی شکل به اضلاع ۱۰۰ واحد شبکه در یک میدان محاسباتی به ابعاد 200×200 شبکه استفاده شده است. برای این کار، در این شبیه‌سازی نسبت چگالی مایع به گاز $\eta = \frac{3/377}{.12} = 28/14$ و مقادیر A ، T_r ، k و τ به ترتیب برابر $0/5$ ، $0/152$ ، $0/02$ و $0/8$ به همراه معادله حالت واندروالس در نظر گرفته شده‌اند. نتایج مربوط به آزادسازی قطره مربعی به همراه شرایط مرزی تناوبی در شکل ۴ نشان داده شده است.

همان طور که ملاحظه می‌گردد، قطره‌ی اولیه پس از تعدادی نوسان در ۲۰۰۰ تکرار به حالت پایای خود که به شکل دایره است، می‌رسد. نوسانات ایجاد شده در شکل قطره در بازه $T=1$ تا $T=2000$ به دلیل نسبت لزجت دینامیکی بالای فاز بخار به فاز مایع

۵-۲-۳-آزمون لاپلاس
 یکی دیگر از آزمون‌های رایج برای بررسی صحت شبیه‌سازی ایجاد قطره، آزمون لاپلاس برای به دست آوردن کشش سطحی است. طبق قانون لاپلاس، اختلاف فشار داخل و خارج یک قطره‌ی دو بعدی از طریق رابطه‌ی زیر، از تقسیم کشش سطحی σ بر شعاع قطره به دست می‌آید [۲]:

$$\Delta p = p_{in} - p_{out} = \frac{\sigma}{R} \quad (25)$$

نتایج مرتبط با رابطه (۲۵) در یک میدان محاسباتی به ابعاد 200×200 و به دست آمده از دو معادله‌ی حالت واندروالس و کاپلن-



شکل ۴: آزمون رهاسازی قطره در تکرارهای مختلف.

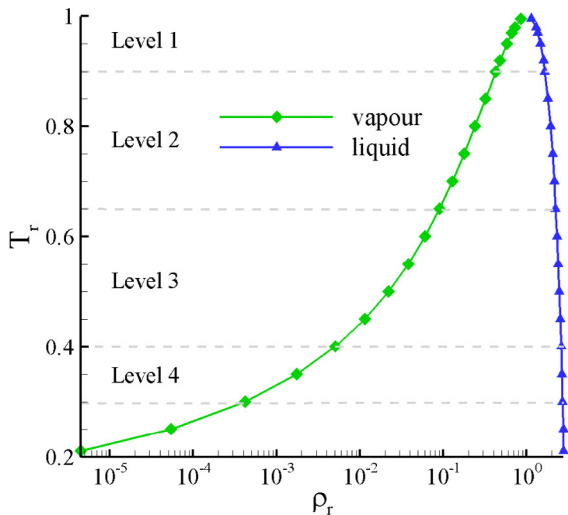
Fig. 4. Test of the droplet release in the different repetitions.

می‌آید. با انجام این کار برای دماهای کاهیده مختلف، نمودار شکل ۶ ایجاد می‌شود. شکل ۶ که به منحنی همزیستی دو فاز یا مساحت‌های برابر ماکسول شهرت دارد، تغییرات چگالی دو فاز بر حسب دمای سیستم را نشان می‌دهد. از آنجا که مقادیر چگالی فاز بخار بسیار کوچک و نزدیک به هم هستند، از مقیاس لگاریتمی در محور افقی این شکل استفاده شده است. با توجه به این شکل، مشاهده می‌شود که کاهش دمای کاهیده سبب افزایش نسبت چگالی دو فاز η می‌شود. نکته مهم آن است که دستیابی به پارامترهای شبیه‌سازی جریان از قبیل ثابت تابع پتانسیل و ضریب وزنی نیرو، بستگی به نسبت چگالی ایجاد شده دارند. به عبارت دیگر، با افزایش نسبت چگالی و افزایش نیروهای بین مولکولی دسترسی به یک الگو جهت انتخاب پارامترهای شبیه‌سازی جریان ضرورت خواهد داشت. بدین منظور و مطابق با شکل ۶، منحنی همزیستی دو فاز مایع و بخار به چهار سطح،

مشکلین اصلاح شده، در شکل ۵ نشان داده شده‌اند. همان طور که در این شکل ملاحظه می‌گردد، کشش سطحی، از شیب نمودار تشکیل شده توسط نقاط به دست می‌آید. با برازش منحنی‌های بدست آمده در شکل (۵) برای دو معادله حالت واندروالس و کاپلن-مشکلین اصلاح شده، شیب خطوط که با مقدار کشش سطحی برابر است به ترتیب مقادیر 0.0857 و 0.0742 بدست می‌آیند.

۳-۵- تئوری مساحت‌های برابر ماکسول

بر اساس قانون بقاء انرژی، در اثر تغییر فاز مایع به بخار، گرما به مقدار $\int p dv$ در فشار ثابت p از فاز مایع به بخار انتقال می‌یابد. این میزان گرما باید با مقدار $\int p(v) dv$ که در آن $p(v)$ فشار بدست آمده از معادله حالت است، برابر باشد. با برابر قرار دادن این دو مقدار، فشار سیستم و حجم مخصوص (چگالی) دو فاز در دمای مشخص، بدست



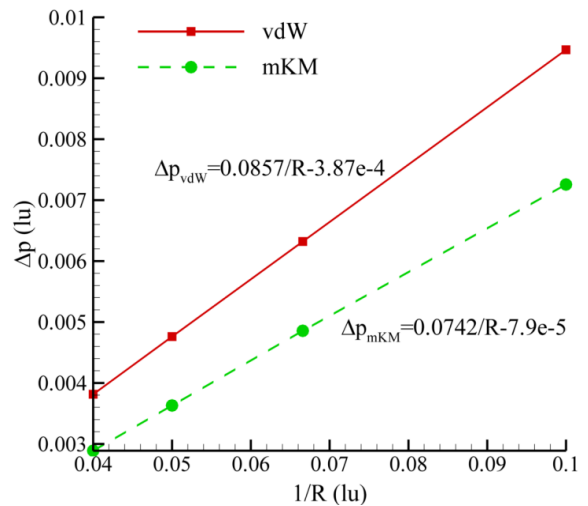
شکل ۶: تئوری مساحت‌های برابر ماکسول.
Fig. 6. Theory of Maxwell equal area.

از حد مقدار k_{min} شرایط برای تفکیک دو فاز به دلیل کاهش نیروهای بین مولکولی از بین خواهد رفت. از این رو برای تشکیل قطره، به مقدار حداقلی از k_{min} نیاز خواهد بود. همچنین وجود مقادیر k_{max} در هر سطح را می‌توان به بروز ناپایداری در اثر افزایش نیروهای بین مولکولی در فصل مشترک دو فاز ارتباط داد.

ارتباط میان نیروهای بین مولکولی و پارامتر k در قسمت ۵-۷ مورد ارزیابی قرار خواهد گرفت. همچنین کاهش مقادیر k_{min} و k_{max} با افزایش نسبت چگالی را نیز می‌توان در همین راستا توجیه کرد. چرا که با افزایش نسبت چگالی و افزایش نیروهای بین مولکولی، کاهش مقادیر k به جهت ایجاد شرایط لازم برای پایداری عددی ضروری خواهد شد.

۵-۵- تأثیر ضریب وزنی نیرو A در سطوح مختلف

این قسمت به بررسی تأثیرات پارامتر A بر تشکیل قطره و نسبت چگالی‌های ایجاد شده می‌پردازد. مشابه قسمت پیشین، با ثابت فرض کردن مقادیر k اقدام به شبیه‌سازی یک قطره با قطر $D=25$ در مرکز میدان محاسباتی به ابعاد 200×200 می‌شود. مقدار k مورد استفاده در این قسمت با k_{max} در هر سطح برابر است. شکل ۸ تغییرات چگالی دو فاز مایع و بخار را برحسب دمای کاهیده در چهار سطح ۱ تا ۴ نمایش می‌دهد. بر این اساس مشاهده می‌شود که با تغییر مقدار A شرایط برای همگرایی شبیه‌سازی در بازه $A_{min} < A < A_{max}$ فراهم می‌شود. در این بازه، A_{min} بیانگر حد پایین A برای ایجاد کمترین

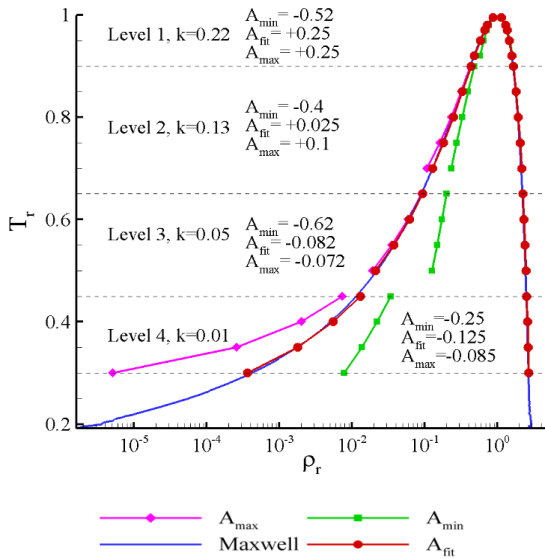


شکل ۵: آزمون لاپلاس جهت محاسبه کشش سطحی قطره.
Fig. 5. Laplace test to calculate the surface tension of the droplet.

متناسب با چهار سطح از دمای کاهیده طبقه بندی شده است. بر این اساس، محدوده‌ی دمایی $0/99-0/92$ سطح یک، محدوده‌ی $0/9-0/7$ سطح دو، محدوده‌ی $0/65-0/5$ سطح سه و محدوده‌ی دمایی $0/45-0/3$ سطح چهارم در نظر گرفته شده‌اند. در ادامه، تأثیر هر کدام از پارامترهای k و A در استخراج نمودارهای همزیستی دو فاز بررسی می‌شوند.

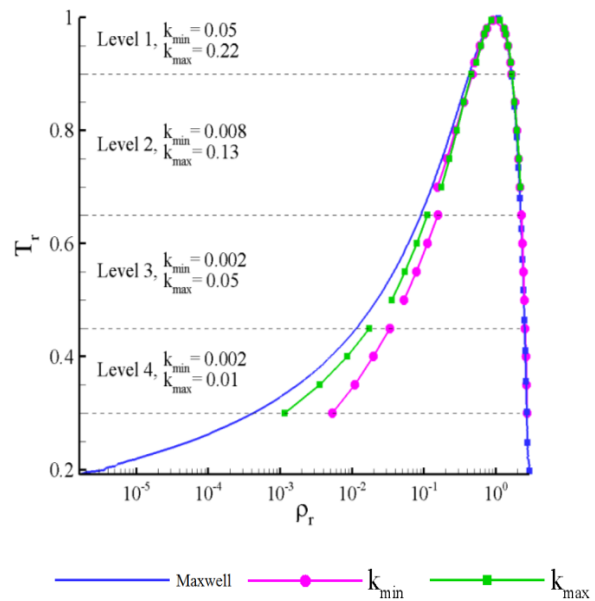
۵-۴- تأثیر پارامتر k در سطوح مختلف نمودار همزیستی

در این قسمت تأثیرات پارامتر k در تشکیل قطره و ایجاد نسبت چگالی‌های مختلف، بررسی شده است. برای انجام این کار، قطره‌ای با قطر $D=25$ در مرکز میدان محاسباتی به ابعاد 200×200 در نظر گرفته شده است. مقادیر A و τ نیز به ترتیب برابر $0/125-$ و $0/7$ قرار داده شده‌اند. همچنین چگالی اولیه قطره و محیط اطراف آن به کمک مقادیر پیش‌بینی شده توسط شکل ۶ بدست آمده‌اند. با تغییر پارامتر k مشاهده می‌شود که برای هر دمای کاهیده مشخص، دامنه‌ای از k وجود دارد که به ازای مقادیر خارج از آن، همگرایی حل میسر نیست. حد پایین این دامنه با k_{min} و حد بالای آن با k_{max} نشان داده شده است. همان طور که در شکل ۷ ملاحظه می‌گردد، مقادیر k_{min} و k_{max} برای هر سطح متفاوت است. به گونه‌ای که با افزایش نسبت چگالی (کاهش دمای کاهیده) این مقادیر به ترتیب از $0/05$ به $0/02$ برای k_{min} و از مقدار $0/22$ به $0/01$ برای k_{max} کاهش یافته است. وجود مقدار k_{min} در هر سطح را می‌توان به این موضوع نسبت داد که با کاهش بیش



شکل ۸: تطبیق نسبت چگالی عددی با نتایج تئوری ماکسول با تغییر ضریب وزنی A .

Fig. 8. Matching the numerical density ratio with the Maxwell theory by changing the weighting factor of A .



شکل ۷: ایجاد نسبت چگالی‌های مختلف با تغییر پارامتر k .

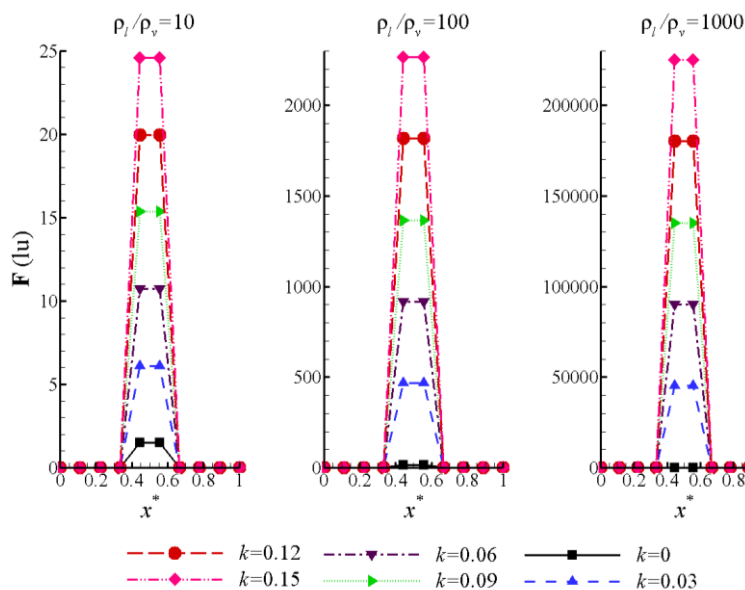
Fig.7. The creation of various density ratios by changing the parameter of k .

از آنجا که مقدار نیرو به گرادین تابع پتانسیل وابسته است، لذا تنها دو نقطه از فصل مشترک تحت تأثیر نیرو قرار می‌گیرند. شکل ۹ به روشنی افزایش نیرو در فصل مشترک دو فاز را در اثر افزایش نسبت چگالی و افزایش ثابت k نشان می‌دهد. همچنین مشاهده می‌شود که در نسبت چگالی‌های کم، کاهش مقدار k سبب کاهش بیش از اندازه مقدار نیرو می‌شود. این موضوع می‌تواند سبب عدم تفکیک دو فاز از یکدیگر شود. همچنین با افزایش همزمان نسبت چگالی و ثابت k مقدار نیرو در فصل مشترک دو فاز افزایش مضاعفی را تجربه می‌کند. این مسئله نیز مطابق رابطه $\Delta u = F \Delta t / \rho$ سبب افزایش سرعت‌های مجازی و واگرایی حل می‌گردد. به عبارت دیگر، با افزایش نسبت چگالی، مقادیر k به جهت کاهش نیروهای بین مولکولی در فصل مشترک دو فاز باید کاهش پیدا کنند. این موضوع در تطابق کامل با نتایج شکل ۷ می‌باشد. شکل ۱۰ توزیع نیرو در دو نقطه از فصل مشترک را به ازای ضرایب وزنی مختلف A و برای حالت $\eta=10$ نشان می‌دهد. بر اساس این شکل مشاهده می‌شود که با تغییر مقدار A علاوه بر تغییر مقدار نیرو، جهت نیرو نیز دچار تغییر می‌شود. به عنوان مثال، به ازای $A=-1/2$ مقدار نیرو در نقطه $x^*=0/45$ دارای مقداری منفی و در $x^*=0/55$ دارای مقداری مثبت است. این رفتار با تغییر A تغییر می‌کند؛ به طوری که به ازای $A=0/4$ مقدار نیرو در هر دو نقطه مثبت است. این موضوع به لحاظ ایجاد سرعت‌های مجازی در

نسبت چگالی و A_{max} بیانگر حد بالای A به منظور ایجاد بیشترین نسبت چگالی است. نکته مهم در این قسمت معرفی شرایطی است که در آن نسبت چگالی ایجاد شده با نسبت چگالی پیش‌بینی شده توسط مساحت‌های برابر ماکسول، همخوانی دارد. به بیان دیگر با انتخاب مقدار مناسبی از A تحت عنوان A_{fit} می‌توان به همسازی ترمودینامیکی در شبیه‌سازی یک قطره دوبعدی دست یافت. مطابق شکل ۸، مقدار A_{fit} بدست آمده در هر سطح متفاوت با سطح دیگر است. به بیان بهتر، در کار حاضر با سطح بندی منحنی همزیستی دو فاز، امکان معرفی پارامترهای k و A به منظور ایجاد شرایط همگرایی و همسازی ترمودینامیکی فراهم شده است.

۵-۶- تأثیر مقادیر k و A در مقدار نیروی فصل مشترک

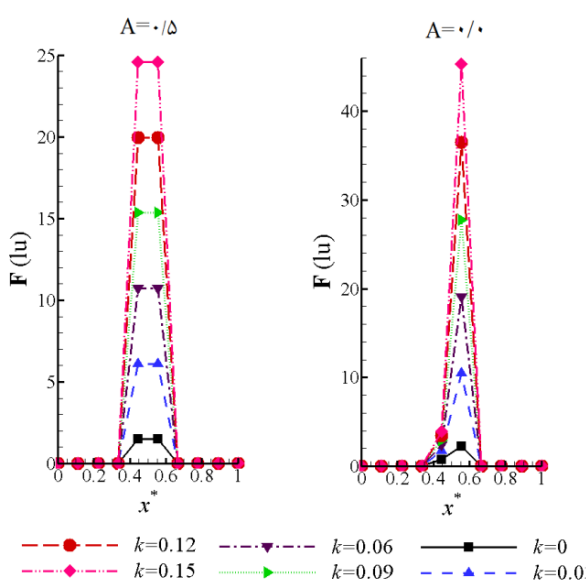
در قسمت‌های ۵-۵ و ۶-۵ به بررسی اثرات پارامترهای k و A در همگرایی و همسازی ترمودینامیکی نتایج عددی پرداخته شد. در این قسمت اثرات این پارامترها در مقدار نیروی ایجاد شده در فصل مشترک دو فاز بررسی می‌شود. بدین منظور، یک قطره یک بعدی با سه نسبت چگالی مختلف $\eta=10$ ، $\eta=100$ و $\eta=1000$ در نظر گرفته شده است؛ که در آن مقدار A و T_r به ترتیب برابر $0/125$ و $0/8$ هستند. مقدار نیروی ایجاد شده توسط معادله (۲۴) و با فرض معادله حالت واندروالس در شکل ۹ آورده شده است.



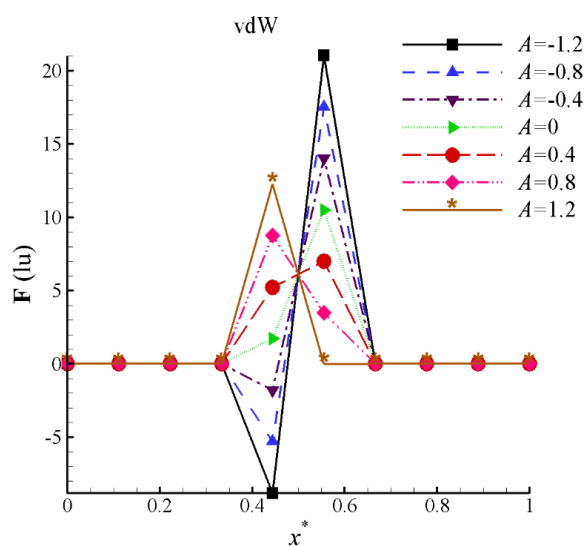
شکل ۹: نمایش مقدار نیروهای بین مولکولی در نسبت چگالی‌های مختلف.
 Fig. 9. The amount of intermolecular forces in the different density ratios.

شکل ۱۰ نشان می‌دهد که مقدار نیروی محاسبه شده از طریق رابطه‌ی (۲۴) نسبت به فصل مشترک دو فاز دارای تقارن نیست. این موضوع با توجه به معادله (۲۴) که ترکیبی از معادلات (۲۰) و (۲۳) است، بررسی می‌شود. همانطور که مشاهده می‌شود، اگر مقدار A در رابطه‌ی (۲۴) برابر $0/5$ باشد، معادله‌ی (۲۰) و اگر برابر صفر باشد معادله‌ی (۲۳) به دست می‌آید. شکل ۱۱ رفتار معادلات (۲۰) و (۲۳) را در شرایط $\eta=10$ و به ازای مقادیر مختلف k نمایش می‌دهد. شکل

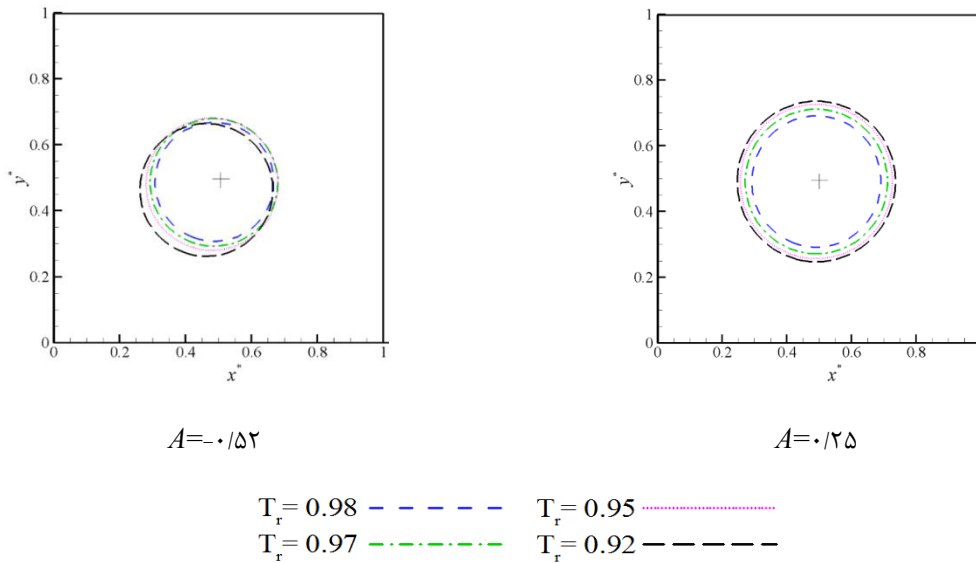
فصل مشترک دو فاز حائز اهمیت است. چرا که حضور دو نیروی هم علامت در دو نقطه از فصل مشترک سبب افزایش سرعت‌های مجازی می‌شود. این در حالی است که حضور دو نیرو با علامت مختلف در دو نقطه از فصل مشترک سبب تضعیف سرعت‌های مجازی در فصل مشترک دو فاز می‌گردد. این موضوع اهمیت انتخاب مقداری مناسب برای ضریب A را جهت دسترسی به همگرایی عددی و همسازی ترمودینامیکی نشان می‌دهد.



شکل ۱۱: نمایش مقدار نیروی محاسبه شده با استفاده از رابطه‌ی (۲۴).
 Fig. 11. The amount of force calculated by Eq. (24).



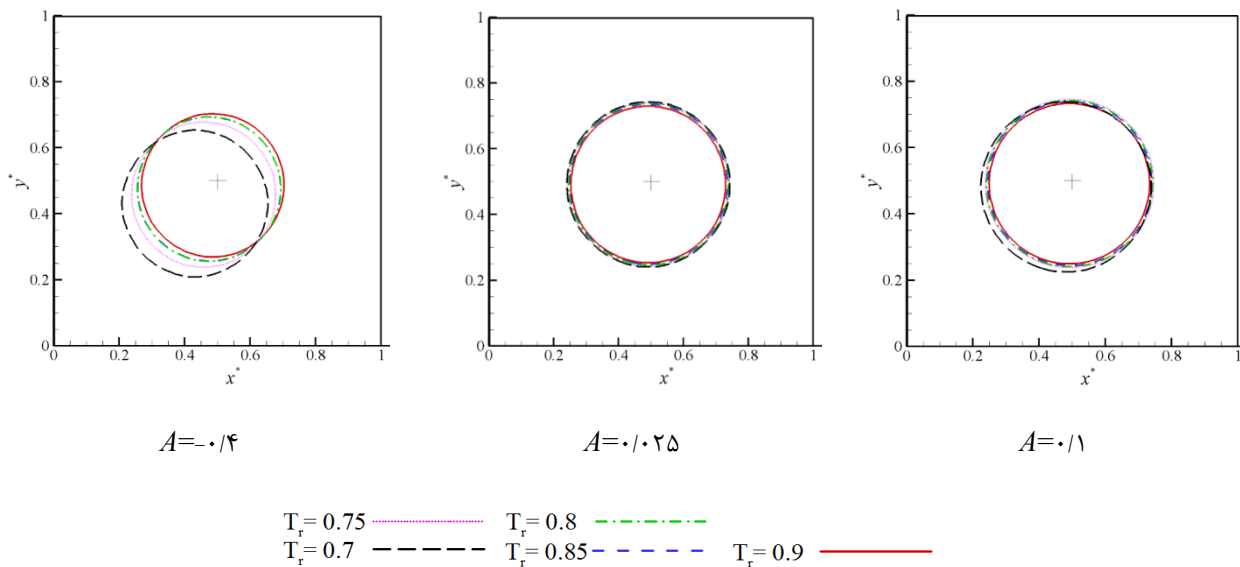
شکل ۱۰: نمایش مقدار نیروهای بین مولکولی با تغییر پارامتر A .
 Fig. 10. The amount of intermolecular forces by changing the parameter of A .



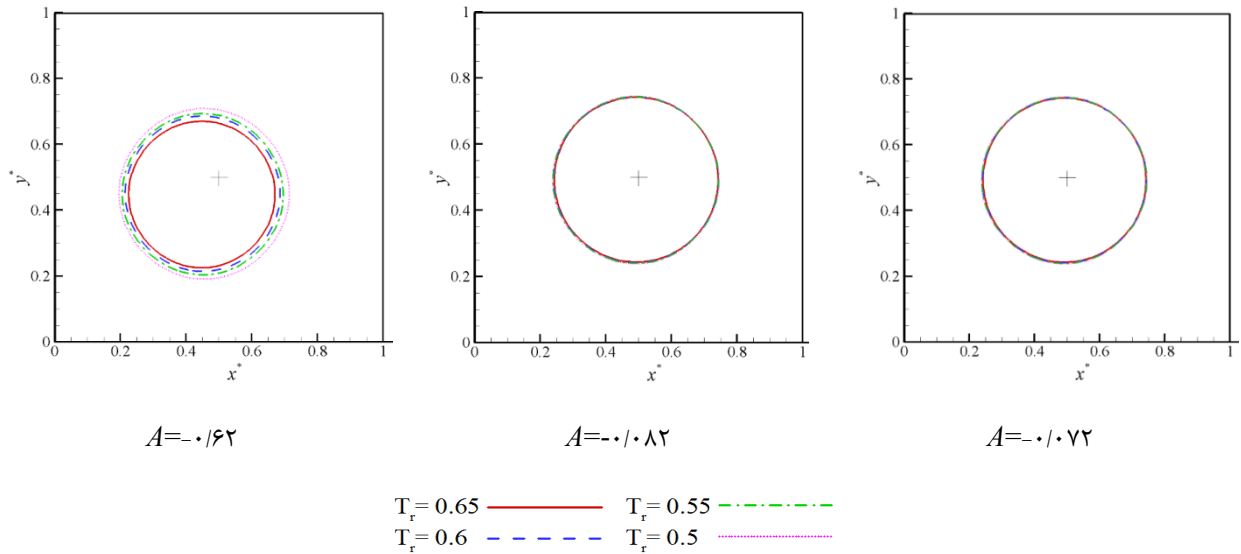
شکل ۱۲: شبیه‌سازی قطره در سطح یک به ازای مقادیر مختلف پارامتر A.
Fig. 12. Simulation of a droplet at level 1 for different values of parameter A.

۵-۷- بررسی بقاء جرم در سطوح مختلف منحنی همزیستی به عنوان آخرین موضوع، مسئله بقاء جرم در فرآیند شبیه‌سازی یک قطره دوبعدی در سطوح یک تا چهار منحنی همزیستی بررسی می‌شود. در قسمت‌های پیشین به اهمیت انتخاب مقادیر k و A در پایداری عددی و همسازی ترمودینامیکی و تأثیر آن‌ها بر مقادیر نیرو در فصل مشترک دو فاز پرداخته شد. نتایج عددی بدست آمده از شبیه‌سازی قطره در سطوح یک تا چهار به ازای مقادیر k_{max} متناظر

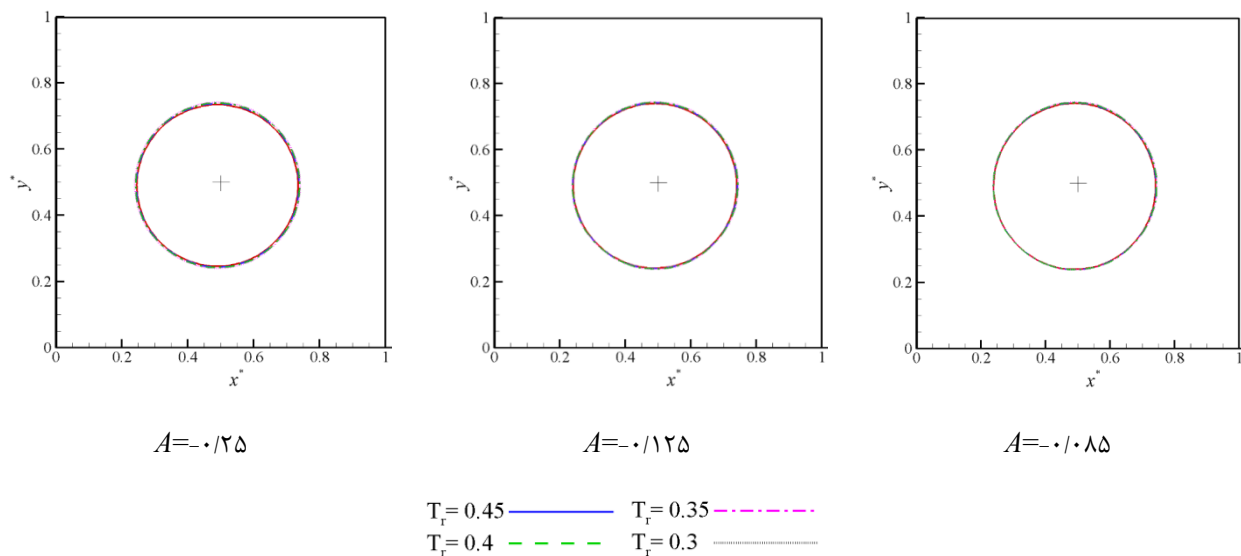
۱۱ به وضوح تقارن معادله (۲۰) و عدم تقارن معادله (۲۳) را نسبت فصل مشترک دو فاز نشان داده است. بر این اساس می‌توان نتیجه گرفت که نامتقارن بودن مقدار نیرو در شکل (۱۰) به دلیل جمله‌ی دوم معادله‌ی (۲۴) است. نتیجه مهم دیگری که از تحلیل شرایط نیرو در فصل مشترک دو فاز بدست می‌آید آن است که افزودن جمله نامتقارن به معادله نیرو به دلیل تضعیف میدان سرعت مجازی سبب افزایش پایداری روش کوپراشتاخ گردیده است.



شکل ۱۳: شبیه‌سازی قطره در سطح دو به ازای مقادیر مختلف پارامتر A.
Fig. 13. Simulation of a droplet at level 2 for different values of parameter A.



شکل ۱۴: شبیه‌سازی قطره در سطح سه به ازای مقادیر مختلف پارامتر A.
Fig. 14. Simulation of a droplet at level 3 for different values of parameter A.



شکل ۱۵: شبیه‌سازی قطره در سطح چهار به ازای مقادیر مختلف پارامتر A.
Fig. 15. Simulation of a droplet at level 4 for different values of parameter A.

اولیه خود، در شرایط $A = A_{fit}$ در سایر سطوح نیز قابل رویت است. از سوی دیگر، در شرایط $A = A_{fit}$ افزایش جرم قطره با افزایش نسبت چگالی (کاهش دمای کاهیده)، گزارش شده است. این افزایش برای $T_r = 0.92$ در حدود ۲۲ درصد است. مشابه این نتایج در شکل ۱۳ که مربوط به سطح دو منحنی همزیستی دو فاز است، گزارش شده است. با این تفاوت که جرم اولیه قطره در شرایط $A = A_{fit}$ تغییر کمتری کرده است (کمتر از ۷ درصد). این مسئله نیز با توجه به افزایش نیروهای بین مولکولی و افزایش قابلیت تفکیک دو فاز قابل توجیه است.

و مقادیر A_{min} ، A_{fit} و A_{max} مستخرج از شکل ۸ به ترتیب در شکل‌های ۱۲ تا ۱۵ آورده شده است. در شکل ۱۲ که مربوط به سطح یک از منحنی همزیستی دو فاز است، دو پدیده قابل مشاهده است. نخست آنکه به ازای مقدار $A = A_{min}$ قطره از مکان اولیه خود جابجا شده است. این جابجایی که بدون اعمال نیروی خارجی رخ داده را می‌توان نتیجه اعمال نیروی نامتقارن در فصل مشترک دو فاز دانست. اما این جابجایی در شرایط $A = A_{fit}$ که در آن شرایط همسازی ترمودینامیکی ارضا شده است، دیده نمی‌شود. این موضوع، یعنی عدم جابجایی قطره از موقعیت

شکل‌های ۱۴ و ۱۵ نیز به وضوح عدم جابجایی قطره از موقعیت اولیه به جز شرایط $A=A_{min}$ در سطح سوم را نشان می‌دهند. همچنین در این شرایط جرم اولیه قطره تغییر چندانی نمی‌کند (کمتر از یک درصد). از این رو می‌توان به این نتیجه رسید که مدل کوپر اشتاخ در کنترل جرم قطره در نسبت چگالی‌های بالا رفتار مناسب‌تری نسبت به نسبت چگالی‌های پایین دارد.

۶- نتیجه گیری

در مقاله حاضر مدل کوپر اشتاخ به منظور ایجاد منحنی همزیستی دو فاز مورد بررسی قرار گرفت. بر اساس مدل کوپر اشتاخ، دو پارامتر ثابت تابع پتانسیل k و ضریب وزنی نیرو A در همگرایی و ایجاد نسبت چگالی مختلف میان دو فاز نقش کلیدی دارند. به منظور بررسی اثرات این دو پارامتر، منحنی همزیستی دو فاز به کمک معادله حالت و اندروالس استخراج گردید. از آنجا که معرفی شرایط پایداری و همسازی ترمودینامیکی وابسته به نسبت چگالی یا دمای کاهیده است، منحنی همزیستی دو فاز به چهار سطح یک تا چهار طبقه‌بندی شد. با فرض مقادیر ثابت برای A محدوده پایداری برای ثابت تابع پتانسیل k بدست آمد. همچنین با فرض مقدار ثابت $k=k_{max}$ در هر سطح، محدوده پایداری برای ضریب وزنی A گزارش گردید. در کنار این موضوع، مقادیری از $A=A_{fit}$ که در آن شرایط برای ایجاد همسازی ترمودینامیکی که نسبت چگالی ایجاد شده منطبق بر منحنی مساحت‌های برابر ماکسول است، بدست آمده‌اند. بر اساس نتایج بدست آمده، نکات زیر قابل بیان هستند:

• با افزایش نسبت چگالی، دامنه پایداری حل به مقادیر کوچکتری از ثابت تابع پتانسیل k انتقال می‌یابد. به طوریکه با افزایش نسبت چگالی مقدار k_{min} از 0.05 در سطح یک به مقدار 0.02 در سطح چهار و مقدار k_{max} از 0.22 در سطح یک به 0.01 در سطح چهار کاهش یافته است.

• تغییر مقادیر k و A در چگالی فاز مایع تغییری ایجاد نمی‌کند؛ به طوری که تغییر نسبت چگالی دو فاز به دلیل تغییر در چگالی فاز مایع رخ می‌دهد. همچنین، تغییر نسبت چگالی به دلیل تغییر مقادیر k در سطوح یک و دو چندان قابل توجه نیست.

• تغییر ضریب وزنی نیرو A ، سبب تغییر در نسبت چگالی دو فاز می‌شود. این تغییرات به نحوی است که با انتخاب مقدار مناسبی

از این مقدار می‌توان به نسبت چگالی متناظر با قاعده مساحت‌های برابر ماکسول دست یافت.

• افزایش نسبت چگالی و ثابت تابع پتانسیل سبب افزایش مقدار نیرو در فصل مشترک دو فاز می‌شود. این افزایش در نسبت چگالی‌های بزرگ سبب محدود شدن k به مقادیر کوچکتر جهت پرهیز از ناپایداری، می‌گردد. از طرف دیگر، کاهش نسبت چگالی و ثابت تابع پتانسیل سبب کاهش نیرو در فصل مشترک دو فاز خواهد شد، که این موضوع سبب انتخاب مقادیر بزرگتر k در نسبت چگالی‌های کوچک به منظور تفکیک دو فاز می‌شود.

• تغییر مقدار ضریب وزنی نیرو، سبب ایجاد نیروهای نامساوی و نامتقارن در فصل مشترک دو فاز می‌گردد. این عدم تقارن در نیروها سبب تضعیف سرعت‌های مجازی در فصل مشترک دو فاز خواهد شد. این موضوع توانایی مدل برای ایجاد نسبت چگالی‌های بالا را افزایش داده است.

• بر اساس نتایج عددی مشاهده می‌شود که در نسبت چگالی‌های پایین، بقاء جرم در مدل کوپر اشتاخ دارای دقت کمتری است. این درحالی است که با افزایش نسبت چگالی، مسئله بقاء جرم در این مدل از دقت بالایی برخوردار است.

فهرست علائم

علائم انگلیسی

A	ضریب وزنی نیرو، در واحد شبکه بولتزمن
a	ثابت معادله حالت کاپلن-مشلکین اصلاح شده
b	ثابت معادله حالت کاپلن-مشلکین اصلاح شده
c	ثابت معادله حالت کاپلن-مشلکین اصلاح شده
c	بردار سرعت ریزمقیاس، در واحد شبکه
D	قطر قطره در واحد شبکه بولتزمن
f	تابع توزیع چگالی، در واحد شبکه بولتزمن
F	نیروی‌های بین مولکولی در فصل مشترک دو فاز، در واحد شبکه بولتزمن
G	پارامتر آزاد در نیروی شان و چن
k	ثابت تابع پتانسیل، بی‌بعد
p	فشار، در واحد شبکه بولتزمن
R	شعاع قطر، در واحد شبکه بولتزمن
t	زمان، در واحد شبکه بولتزمن
T	دما، کلوین

مراجع

- [1] H. Huang, M. Sukop, X. Lu, Multiphase lattice Boltzmann methods: Theory and application, John Wiley & Sons, 2015.
- [2] H. Deng, K. Jiao, Y. Hou, J.W. Park, Q. Du, A lattice Boltzmann model for multi-component two-phase gas-liquid flow with realistic fluid properties, International Journal of Heat and Mass Transfer, 128 (2019) 536-549.
- [3] A.A. Mohamad, Lattice Boltzmann method: fundamentals and engineering applications with computer codes, Springer Science & Business Media, 2011.
- [4] M. Sukop, DT Thorne, Jr. Lattice Boltzmann Modeling Lattice Boltzmann Modeling, (2006).
- [5] G. HÁzi, A.R. Imre, G. Mayer, I. Farkas, Lattice Boltzmann methods for two-phase flow modeling, Annals of Nuclear Energy, 29(12) (2002) 1421-1453.
- [6] X. Shan, H. Chen, Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components, Physical Review E, 47(3) (1993) 1815.
- [7] L. Chen, Q. Kang, Y. Mu, Y.-L. He, W.-Q. Tao, A critical review of the pseudopotential multiphase lattice Boltzmann model: Methods and applications, International journal of heat and mass transfer, 76 (2014) 210-236.
- [8] A.L. Kupershtokh, D.A. Medvedev, I.I. Griбанov, Thermal lattice Boltzmann method for multiphase flows, Physical Review E, 98(2) (2018) 023308.
- [9] P. Yuan, L. Schaefer, Equations of state in a lattice Boltzmann model, Physics of Fluids, 18(4) (2006) 042101.
- [10] M. Nemati, A.R.S.N. Abady, D. Toghraie, A. Karimipour, Numerical investigation of the pseudopotential lattice Boltzmann modeling of liquid-vapor for multi-phase flows, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 489 (2018) 65-77.
- [11] S. Khajepour, J. Wen, B. Chen, Multipseudopotential interaction: a solution for thermodynamic inconsistency in pseudopotential lattice Boltzmann models, Physical Review E, 91(2) (2015) 023301.

u	بردار سرعت ماکروسکوپی، در واحد شبکه بولتزمن
U	تابع پتانسیل نیرو
\tilde{U}	تابع بی بعد پتانسیل نیرو
w	ضرایب وزنی
x	بردار مکان

علائم یونانی

α	ضریب اصلاح معادله حالت
Δ	مقدار گام
η	نسبت چگالی، بی بعد
θ	ثابت معادله حالت گاز ایده آل
λ	نسبت لزجت دینامیکی
ν	لزجت سینماتیک، در واحد شبکه بولتزمن
ρ	چگالی، در واحد شبکه بولتزمن
σ	کشش سطحی، در واحد شبکه بولتزمن
τ	زمان رهاسازی یگانه، در واحد شبکه بولتزمن
ϕ	تابع پتانسیل ویژه
ψ	تابع اثرات جرم

زیرنویس

c	نقطه بحرانی
fit	مقدار مناسب
i	جهات گسسته شبکه
in	داخل قطره
l	فاز مایع
max	مقدار بیشینه
min	مقدار کمینه
out	خارج قطره
r	مقادیر کاهیده
s	سرعت صوت
v	فاز بخار

بالانویس

eq	مقادیر تعادلی
*	مقدار بی بعد

مخفف‌ها

Lattice Boltzmann Method	LBM
modified Kaplun Meshalkin	mKM
van derWaals	vdW

- the two-phase region of a thermodynamic system, in: *Doklady Physics*, Springer, 2005, pp. 434-437.
- [19] X. He, X. Shan, G.D. Doolen, Discrete Boltzmann equation model for nonideal gases, *Physical Review E*, 57(1) (1998) R13.
- [20] Z. Qin, W. Zhao, Y. Chen, C. Zhang, B. Wen, A pseudopotential multiphase lattice Boltzmann model based on high-order difference, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 127 (2018) 234-243.
- [21] R. Zhang, H. Chen, Lattice Boltzmann method for simulations of liquid-vapor thermal flows, *Physical Review E*, 67(6) (2003) 066711.
- [22] A.L. Kupershtokh, Simulation of flows with vapor-liquid interfaces using lattice Boltzmann equation method, *Siberian Journal of Pure and Applied Mathematics*, 5(3) (2005) 29-42.
- [23] A. Kupershtokh, C. Stamatelatos, D. Agoris, Stochastic model of partial discharge activity in liquid and solid dielectrics, in: *IEEE International Conference on Dielectric Liquids, 2005. ICDL 2005.*, IEEE, 2005, pp. 135-138.
- [24] A. Kupershtokh, D. Karpov, D. Medvedev, C. Stamatelatos, V. Charalambakos, E. Pyrgioti, D. Agoris, Stochastic models of partial discharge activity in solid and liquid dielectrics, *IET Science, Measurement & Technology*, 1(6) (2007) 303-311.
- [12] Q. Li, K. Luo, Thermodynamic consistency of the pseudopotential lattice Boltzmann model for simulating liquid-vapor flows, *Applied Thermal Engineering*, 72(1) (2014) 56-61.
- [13] Q. Li, K. Luo, Achieving tunable surface tension in the pseudopotential lattice Boltzmann modeling of multiphase flows, *Physical Review E*, 88(5) (2013) 053307.
- [14] A. Kupershtokh, D. Medvedev, D. Karpov, On equations of state in a lattice Boltzmann method, *Computers & Mathematics with Applications*, 58(5) (2009) 965-974.
- [15] Q. Li, K.H. Luo, Q. Kang, Y. He, Q. Chen, Q. Liu, Lattice Boltzmann methods for multiphase flow and phase-change heat transfer, *Progress in Energy and Combustion Science*, 52 (2016) 62-105.
- [16] S. Son, L. Chen, D. Derome, J. Carmeliet, Numerical study of gravity-driven droplet displacement on a surface using the pseudopotential multiphase lattice Boltzmann model with high density ratio, *Computers & Fluids*, 117 (2015) 42-53.
- [17] K. Timm, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin, *The lattice Boltzmann method: principles and practice*, in, Springer: Berlin, Germany, 2016.
- [18] A. Kaplun, A. Meshalkin, Behavior of the heat capacity C_V at the liquid-vapor critical point and in