مجله مهندسی مکانیک مدرس، بهمن 1395، دوره 16، شماره 11، ص‌ص 113-122

ماهنامه علمی پژوهشی

مهندسی مکانیک مدرس

mme.modares.ac.ir

ارزیابی الگوریتم برخوردی نمونه‌گیری‌های برنولی ساده شده در تحلیل جریان رقیق شده نانو- فوریه

المیرا طاهری[1]، احسان روحی[2*]

1- کارشناس ارشد، مهندسی هوافضا، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

2- دانشیار، مهندسی هوافضا، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

* مشهد، صندوق پستی 1111-91775، e.roohi@um.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 25 مرداد 1395

پذیرش: 30 شهریور 1395

ارائه در سایت: 05 آبان 1395

کلید واژگان:

شبیه سازی مستقیم مونت‌کارلو

الگوریتم نمونه‌گیری‌های برنولی ساده شده

چپمن انسکاگ

خطاهای گسسته‌سازی

چکیده

در مطالعه‌ی حاضر رفتار همگرایی روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو (DSMC) به طور گسترده‌ای مورد بررسی قرار گرفته است. الگوریتم نمونه‌گیری‌های برنولی ساده شده (SBT) برای شبیه‌سازی مساله انتقال حرارت هدایت یک‌بعدی نانو فوریه که شامل گاز رقیق شده‌ی محبوس شده بین دو صفحه‌ی موازی با طول بی‌نهایت و با دماهای نابرابر می‌باشد؛ استفاده شده است. این بررسی با مقایسه‌ی ضرایب چند جمله‌ای سوناین (a_k) که از نتایج DSMC به‌دست آمده‌اند با نتایج تئوری چپمن انسکاگ (CE) دنبال شده است. همچنین رفتار همگرایی پارامترهای شار حرارتی و نسبت رسانایی حرارتی محاسبه شده‌ی از DCMC (K_{DSMC}) به مقدار پیش‌بینی شده از تئوری تقریب نامحدود CE (K)، مطالعه شده است. دقت عددی روش DSMC با پارامترهای گام زمانی، اندازه‌ی سلول و تعداد ذرات درون هر سلول محدود می‌شود. وابستگی روش SBT به این خطاهای گسسته‌سازی با روش برخورد مرسوم شمارنده‌ی غیرزمانی (NTC) مقایسه شده است. نتایج به‌دست آمده نشان می‌دهد که روش SBT می‌تواند با تعداد کمتری از ذرات درون هر سلول نسبت به روش NTC به نتایج تحلیلی چندجمله‌ای سوناین دست یابد. همچنین در روش SBT پارامتر موثر در همگرایی نسبت $\Delta x/\Delta t$ می‌باشد که باید به دقت تعیین شود. با کاهش تعداد ذرات درون هر سلول حتی به 1 ذره، در نسبت ثابت $\Delta x/\Delta t$، روش SBT می‌تواند به نتایجی با دقت بالا برسد درحالی که جواب‌های روش استاندارد NTC از مقدار صحیح منحرف می‌شود.

Evaluation of the Simplified Bernoulli Trial collision algorithm in treating rarefied nano-Fourier flow

Elmira Taheri, Ehsan Roohi*

Department of Mechanical Engineering, Ferdowsi University of Mashhad, Iran
* P.O.B. 91775-1111, Mashhad, Iran, e.roohi@um.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 15 August 2016
Accepted 20 September 2016
Available Online 26 October 2016

Keywords:
Direct simulation Monte Carlo
Simplified Bernoulli Trials
Chapman-Enskog
Discretization errors

ABSTRACT

In the present study, the convergence behavior of the direct simulation Monte Carlo (DSMC) method is extensively explored. The Simplified Bernoulli Trials (SBT) collision algorithm is applied to simulate a one-dimensional nano Fourier heat conduction problem, which consists of rarefied gas confined between two infinite parallel plates with unequal temperatures. The investigations compares the Sonine-polynomial coefficients a_k calculated from the DSMC results with theoretical predictions of the Chapman-Enskog (CE) theory. In addition, the convergence behavior of the wall heat flux and the ratio of the DSMC-calculated bulk thermal conductivity (K_{DSMC}) to the infinite-approximation of CE theoretical value (K) is studied. The numerical accuracy of the DSMC method is found to be restricted with regard to three parameters: time step, cell size, and number of computational particles per cell. The dependency of the SBT collision algorithm on these discretization errors has been investigated in comparison with the standard collision algorithm, i.e., no time counter (NTC). The results indicate that SBT can achieve analytical solutions of the Sonine polynomials using fewer particles per cell than NTC. Moreover, in the SBT algorithm, the effective parameter in the convergence is $\Delta x/\Delta t$ ratio, which should be adjusted accurately. This study shows that by decreasing the number of particles per cell to even one particle in a constant $\Delta x/\Delta t$ setting, the SBT algorithm accurately predicts solutions where the NTC algorithm fails.

1- مقدمه

جریان سیال و انتقال حرارت درون سیستم‌هایی در ابعاد میکرو و نانو به دلیل رشد و توسعه‌ی سریع سیستم‌های مینیاتوری مورد توجه چشمگیری قرار گرفته‌اند. تجزیه و تحلیل رفتار سیالات در این سیستم‌ها که عموما از آن‌ها به‌عنوان میکرو- نانوسیستم‌های الکترومکانیکی[1] نام برده می‌شود، به عنوان

[1] Micro/Nano-Electro-Mechanical-Systems (MEMS/NEMS)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

Please cite this article using:
E. Taheri, E. Roohi, Evaluation of the Simplified Bernoulli Trial collision algorithm in treating rarefied nano-Fourier flow, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 16, No. 11, pp. 113-122, 2016 (in Persian)

Archive of SID

www.SID.ir

یکی از مهم‌ترین زمینه‌ها در علم مکانیک سیالات تحت عنوان ریزسیالات یا میکرو/نانوسیالات[1] دنبال می‌شود. با پیشرفت‌های صورت گرفته طی سال‌های اخیر در زمینه فناوری ریزسیستم‌ها، استفاده‌ی گسترده‌ای از آن‌ها در صنایع مختلف دیده می‌شود. از جمله موارد کاربرد آن‌ها می‌توان به فشارسنج‌ها در سیستم تزریق سوخت و ترمز خودروها، شتاب‌سنج‌ها در کیسه‌ی هوای خودروها، ریزمحرک‌ها در میکروسکوپ‌های الکترونی، ساخت چیپ‌ها با الهام از قواعد زیست شناسی برای کشف عوامل زیستی و شیمیایی خطرناک، ریزمبدل‌ها در خنک‌کاری سیستم‌های الکترونیکی و میکروماهواره‌ها اشاره کرد [1].

برای بررسی جریان‌های گازی در شرایط استاندارد و در ابزارهای متعارف که طول مشخصه‌ی آن‌ها حداقل از مرتبه‌ی 1cm است، می‌توان با اطمینان از فرض جریان پیوسته استفاده نمود؛ زیرا در این جریان‌ها تغییرات خواص فیزیکی و دینامیکی گازها پیوسته و ملایم است و تعداد مولکول‌ها آنقدر زیاد هست که دیگر مقدار متوسط خواص گاز، متاثر از تعداد آن‌ها نیست. اما در حالات خاصی که چگالی گاز به شدت پایین باشد ممکن است شرایطی پیش آید که اثر منفک بودن ذرات آن قابل توجه گردد و تئوری پیوستگی دیگر قادر به مدل‌سازی جریان گاز نباشد. این شرایط به ویژه در دهه‌های 60 و 70 میلادی طی مطالعات حرکت موشک‌ها و سایر وسایل پرنده در لایه‌های فوقانی جو مشاهده شد. از آن‌جا که این جریان‌ها مربوط به چگالی‌های بسیار پایین هستند، آن‌ها را جریان‌های رقیق‌شده نامیده‌اند. تا چند دهه قبل گمان می‌رفت که جریان‌های رقیق گاز تنها در ارتفاعات بالا از سطح زمین دیده می‌شوند ولی با گسترش مرزهای علم مشخص شد که جریان در مقیاس‌های کوچک نیز دچار پدیده رقت گاز می‌شود. با این تفاوت که این شرایط در فشارهای معمولی، اما به واسطه‌ی کوچک شدن طول مشخصه‌ی جریان برقرار شده است. هرچند که میکرو/نانوجریان‌ها نیز در حوزه جریان‌های رقیق شده قرار می‌گیرند اما نسبت به تجربه‌های نخستین از پدیده‌ی رقیق شدگی، ویژگی‌های کاملا متفاوتی را دارا می‌باشند. در لایه‌های فوقانی جو جریان بسیار رقیق و در عین حال دارای سرعت بسیار بالایی است به طوری که عدد ماخ از 5 هم عبور می‌کند. در مقابل جریان درون میکرو/نانوکانال‌ها، عدد رینولدز و عدد ماخ پایینی دارد که باعث می‌شود اثرات سطحی و مکانیزم نفوذ مولکولی در این جریان‌ها نقش مهمی ایفا کنند.

برای دسته‌بندی جریان‌ها از دیدگاه رقیق‌شدگی عدد نودسن[2] معرفی شده است [2]، که به‌صورت نسبت متوسط مسیر پویش آزاد مولکولی به طول مشخصه‌ی هندسه‌ی جریان طبق فرمول (1) تعریف می‌شود:

$$\mathrm{Kn} = \frac{\lambda}{L} \qquad (1)$$

که در آن λ فاصله‌ی پویش آزاد مولکولی و L طول مشخصه جریان می‌باشد. متوسط مسیر پویش آزاد مولکولی، متوسط فاصله‌ای است که مولکول‌های گاز قبل از برخورد با یکدیگر طی می‌کنند. برای رژیم‌های بسیار کوچک نودسن (معمولا کوچک‌تر از 0.001)، فرضیه پیوستگی می‌تواند کماکان صادق باشد. در این شرایط و در صورتی که جریان از شرایط تعادل ترمودینامیکی دور نباشد، مدل‌سازی عددی را می‌توان با استفاده از روش‌های متداول دینامیک سیالات محاسباتی[3] که شامل معادلات اویلر برای جریان غیرلزج و یا معادلات ناویر-استوکس برای جریان لزج می‌باشند، انجام داد. برای اعداد نودسن در محدوده‌ی 0.001 و 0.1 (رژیم لغزشی)، پدیده‌ی رقیق شدگی جریان را در نزدیکی مرز جامد-گاز تحت تأثیر قرار می‌دهد. این به این معنی است که تعداد برخوردهای نزدیک دیواره به اندازه‌ی کافی نیست که جریان توانایی به تعادل رسیدن با دیواره را داشته باشد و شرط عدم لغزش را نقض می‌کند. این پدیده را معمولا با اصلاح شرایط مرزی معادلات ناویر-استوکس به‌صورت اعمال مقدار لغزش روی دیواره و پرش در دما به‌صورت تقریب‌های مرتبه اول و یا بالاتر از عدد نودسن، بیان می‌نمایند. برای جریان با نودسن بین 0.1 و 10 (رژیم گذرا) اثرات مرتبه بالاتر در برهم کنش مولکولی قابل اهمیت می‌شود و رابطه خطی تنش-کرنش که در معادلات ناویر-استوکس استفاده می‌شود اعتبار خود را از دست می‌دهد. در این رژیم برخوردهای بین مولکولی نه آنقدر زیاد است که بتوان از فرض پیوستگی استفاده کرد و نه آنقدر کم است که بتوان از آن صرف‌نظر کرد. به همین دلیل مدلسازی جریان در این رژیم پیچیده بوده و همچنان از چالش‌های پیش‌روی مکانیک سیالات است. رژیم مولکولی آزاد یا رژیم گسسته، اعداد نودسن بزرگ‌تر از 10 را شامل می‌شود. در این رژیم دیگر نمی‌توان از فرضیات محیط پیوسته استفاده کرد. برای تحلیل جریان در این ناحیه از روش‌های مولکولی استفاده می‌شود.

در مدل مولکولی جریان به صورت مجموعه‌ای از مولکول‌ها و یا ذرات (که هرکدام نماینده‌ی تعدادی مولکول هستند) در نظر گرفته می‌شود. حرکت این ذرات براساس قوانین حرکت نیوتن انجام می‌پذیرد و برخورد میان آن‌ها با تئوری‌های بسیار دقیقی شبیه‌سازی می‌شوند. به‌دلیل پر هزینه بودن مدل‌سازی حرکت مولکول‌ها با روش‌های شبیه‌سازی مستقیم، استفاده از روش‌های آماری مورد استقبال بیشتری قرار گرفته‌اند. این روش‌ها که تنها تعدادی ذره را به نمایندگی از کل مولکول‌ها در نظر می‌گیرند و با بهره گرفتن از اصول محاسبات آماری برهم‌کنش میان این ذرات را به برهم‌کنش میان مولکول‌های اصلی نسبت می‌دهند، به‌طور کلی به روش‌های مونت کارلو معروف هستند. روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو (DSMC)[4] که حالت میانه‌ای بین روش آماری و روش مستقیم است، یکی از پرکاربردترین روش‌های مدل‌سازی مولکولی در حوزه‌ی مکانیک سیالات می‌باشد. روش DSMC در سال 1960 توسط برد معرفی شد [3] و اصلی‌ترین مشخصه‌ی آن ساده‌سازی برهم‌کنش بین ذرات با تفکیک حرکت آن‌ها به دو مرحله‌ی متوالی حرکت آزاد مولکولی و برخورد دو به دو بین ذرات درون سلول‌های شبکه در هر گام زمانی است. بعد از ابداع این روش، تحقیقات زیادی برای بهبود دقت روش و توسعه کاربردهای آن در مسائل مختلف ارائه شده است. همچنین فرایند برخورد که اصلی ترین و پیچیده‌ترین بخش DSMC می‌باشد، مورد توجه بسیاری از محققین قرار گرفته و روش‌های مختلفی در این زمینه ارائه شده است. از روش‌های موفق ارائه شده می‌توان به روش برخورد شمارنده غیرزمانی (NTC)[5] اشاره کرد که توسط برد ارائه شد [3]. این روش مدت‌ها مورد استقبال محققین در شبیه‌سازی‌ها بوده است. همچنین بررسی‌های گسترده‌ای در زمینه‌ی رفتار همگرایی این روش انجام شده است. ردر و همکارانش در سال 2006 این رفتار را در جریان حرارتی فوریه با گاز تک اتمی آرگن مورد مطالعه قرار دادند [4]. همچنین در مطالعه‌ای دیگر گلیس و همکارانش رفتار این روش را در برآورده کردن نتایج تئوری چپمن انسکا گ[6] (CE) مورد بررسی قرار دادند [6,5]. اکثر الگوریتم‌های برخورد ارائه شده به نحوی از یک قید برای تخمین تعداد

[1] Micro/Nano-Fluidics
[2] Knudsen number
[3] Computational Fluid Dynamics (CFD)
[4] Direct Simulation Monte Carlo
[5] No Time Counter
[6] Chapman-Enskog

www.SID.ir
Archive of SID

برخوردهای واقعی در هر سلول استفاده می‌کنند. به همین دلیل چنانچه تعداد ذرات در یک سلول کم باشد آنقدر برخوردهای تکراری بین یک ذره و جفت برخوردی آن رخ می‌دهد تا تعداد کل برخوردهای قید مذکور را برآورده کند. در حالت واقعی مولکول‌ها پس از برخورد از یکدیگر فاصله می‌گیرند و دیگر امکان برخورد مجدد آن‌ها وجود ندارد. بنابراین وقوع برخوردهای تکراری غیرفیزیکی بوده و شبیه‌سازی فرآیند برخورد را با خطا همراه می‌کند.

اخیرا استفانف برای حذف برخوردهای تکراری روش برخورد جدید SBT[1] را پیشنهاد کرده است [7]. شبیه‌سازی‌های موفقی نیز به کمک این روش برخورد انجام شده است؛ که از جمله می‌توان به مطالعات امیری و همکارانش در زمینه‌ی جریان میکرو-نانو با عدد نودسن پایین، سعادتی و همکارانش در زمینه‌ی میکرو-نانو نازل‌ها و شجاع وهمکارانش اشاره کرد [8-10]. همچنین گشایشی و همکارانش در بهبود این روش با استفاده از شبکه‌ی زیر سلول تطبیقی گذرا مطالعاتی انجام دادند [11]. تاکنون مطالعه‌ی سازمان یافته‌ای مبنی‌بر رفتار همگرایی این روش براساس پارامترهای گسسته سازی انجام نشده است. براساس مطالعات انجام گرفته توسط نویسندگان مقاله‌ی حاضر، رفتار روش SBT در بازه‌ی گسترده‌ای از این پارامترها در جریان حرارتی فوریه در سیستم نودسن پایین، مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین رفتار SBT با تعداد کم ذرات شبیه‌سازی در مقایسه با روش رایج NTC در تئوری چپمن انسکاگ مورد بررسی قرار گرفته است.

2- توصیف مطالعه

شبیه‌سازی به روش DSMC بدین صورت است که ابتدا فضای محاسباتی به تعدادی سلول (و در صورت نیاز زیر سلول) تقسیم شده و در آغاز محاسبات، ذرات شبیه‌سازی شده (که هر یک شامل گروه های بزرگی از مولکول‌ها می‌باشند) طبق یک توزیع آماری یکنواخت در سلول‌ها توزیع می‌شوند. نسبت تعداد ذرات شبیه سازی شده به مولکول‌های واقعی طبق فرمول (2) به عنوان ضریب تاثیر شناخته می‌شود [3].

$$F_N = \frac{n\,\forall_c}{PPC} \tag{2}$$

که در آن $\forall_c$ حجم سلول، PPC تعداد اولیه ذرات در نظر گرفته شده در هر سلول و n چگالی تعداد ذرات می‌باشد که طبق فرمول (3) به λ و قطر مولکولی (d) ارتباط داده می‌شود [3].

$$n = \frac{1}{\sqrt{2}\pi d^2 \lambda} \tag{3}$$

پس از توزیع ذرات درون سلول‌ها، حل جریان از طریق پیشروی در زمان انجام می‌شود. به این صورت که در هر گام زمانی ذرات مطابق بردار سرعت خود جابجا می‌شوند و موقعیت جدید آن‌ها براساس شماره سلولی که در آن قرار دارند، تعیین شده و در صورت برخورد با دیوارها سرعت و مکان آن‌ها پس از برخورد آن‌ها محاسبه می‌شوند. پس از حرکت دادن تمام ذرات و جانمایی آن‌ها، احتمال برخوردشان با دیگر ذرات درون سلول موردنظر سنجیده شده و در صورت برخورد، اثر آن به صورت تغییر در اندازه حرکت و انرژی جنبشی ذرات منتخب اعمال شده و مکان جدید ذرات با توجه به شماره‌ی سلول آن‌ها تعیین می‌شود. در انتها مشخصه‌های ماکروسکوپیک جریان با نمونه‌گیری از ویژگی‌های مولکولی هر سلول محاسبه می‌شوند. مراحل فوق (حرکت مولکول‌ها، جانمایی، برخورد و میانگین‌گیری از خواص مولکولی) آنقدر تکرار می‌شود تا پراکندگی آماری به قدر کافی کوچک شود و جریان به‌صورت پایا در آمده و خواص ماکروسکوپیک آن تغییر نکند.

[1] Simplified Bernoulli-Trials

2-1- فرایندهای برخوردی SBT و NTC

پس از آن که ذرات به طور مناسب جانمایی شده و سلول و زیرسلولی که در آن قرار دارند مشخص شد، محاسبات برخورد که مبتنی بر احتمال می‌باشد اعمال می‌شود. جفت‌های نامزد برخورد به‌صورت تصادفی از درون یک سلول (در صورت نیاز زیر سلول) انتخاب می‌شوند و در صورت پذیرفته شدن احتمال برخورد، با تغییر سرعت آن‌ها از روابط الاستیک به سرعت پس از برخورد، فرآیند برخورد اعمال می‌شود [12]. برای مدل‌سازی فرآیند برخورد، نیاز به یک مدل مولکولی جهت تعیین نیروی بین مولکولی و محاسبه پارامترهایی از قبیل قطر مولکولی، سرعت نسبی جفت برخوردی و سطح مقطع برخورد و نیز یک الگوریتم مناسب برخورد برای انتخاب جفت‌های برخوردی می‌باشد. مدل‌های مولکولی مختلفی مانند مدل کره سخت[2]، کره سخت متغیر[3] و کره نرم متغیر[4] ارائه شده است [13-15]. روش‌های موفق زیادی نیز به‌عنوان الگوریتم برخورد معرفی شده است. روشی که تا به این‌جا بیشتر مورد استفاده قرار گرفته است روش NTC می‌باشد؛ زیرا در صورت به کارگیری تعداد ذره کافی (حدود 20 ذره در هر سلول) این روش با دقت مناسبی برخورد بین مولکولی را مدل می‌کند. شرح کلی این روش به‌صورت زیر می‌باشد [3]:

1- ابتدا تعداد حداکثر برخوردهای مجاز در هر سلول با N ذره از فرمول (4) محاسبه می‌شود:

$$N_c = \frac{1}{2}\frac{N\bar{N}F_N(\sigma_T c_r)_{\max}\Delta t}{\forall_c} \tag{4}$$

که در آن زیرنویس max حداکثر مقدار کمیت مربوطه در سلول را نشان می‌دهد و σ_T سطح مقطع کلی برخورد و c_r سرعت نسبی جفت برخوردی می‌باشند.

2- یک جفت برخوردی به طور تصادفی از N ذره‌ی موجود در سلول انتخاب و احتمال برخورد آن‌ها از رابطه‌ی (5) و از روش پذیرش-رد، محاسبه می‌شود:

$$P = \frac{\sigma_T c_r}{(\sigma_T c_r)_{\max}} \tag{5}$$

در روش پذیرش-رد اگر مقدار احتمال از یک عدد تصادفی (که بین 0 و 1 می‌باشد) بیشتر باشد، برخورد پذیرفته می‌شود.

3- درصورت پذیرفته شدن برخورد سرعت ذرات از روابط برخورد الاستیک به روز می‌شوند و در غیراین صورت روند تکرار به مرحله قبل باز می‌گردد.

مراحل فوق در هر سلول تا زمانی که تعداد انتخاب‌های آزمون شده به N_c برسد تکرار می‌شوند. در این روش چنانچه تعداد ذرات کافی نباشد، احتمال برخورد تکراری بین ذرات بوجود می‌آید. برخوردهای تکراری منشا خطاهای آماری بوده و از عوامل ضعف روش NTC می‌باشد. روش SBT که برای رفع مشکل وجود برخوردهای تکراری معرفی شده، قادر است با تعداد بسیار کمتری از تعداد ذرات، جریان را شبیه‌سازی کند. مراحل این روش به شرح زیر می‌باشد [7]:

1- در ابتدا ذرات موجود در سلول به‌طور محلی شماره‌گذاری می‌شوند تا به‌صورت متوالی $1,2,\ldots,N$ شمرده شوند.

2- اولین ذره از جفت برخوردی (i,j)، مثلا i، به‌طور متوالی از لیست ذرات انتخاب شده، $i = 1,2,\ldots$ و سپس ذره‌ی دوم از میان

[2] Hard Sphere (HS)
[3] Variable Hard Sphere (VHS)
[4] Variable Soft Sphere (VSS)

Archive of SID
www.SID.ir

$k = N - i$ ذره موجود در لیست که بعد از i قرار گرفته‌اند به‌صورت تصادفی طبق فرمول (6) انتخاب می‌شود:

$$j = (i + 1) + \mathrm{int}(k \times R_f) \tag{6}$$

که در آن R_f یک عدد تصادفی بین صفر و یک می‌باشد.

3- احتمال برخورد از روش پذیرش-رد و با استفاده از فرمول (7) برای تابع احتمال بررسی می‌شود:

$$P = \frac{kF_N \Delta t \sigma_T c_r}{\forall_c} \tag{7}$$

4- گام زمانی برنامه (Δt) بایستی به نحوی تنظیم گردد که تابع احتمال به ندرت از یک بیشتر شود.

5- در صورت پذیرفته شدن برخورد سرعت ذرات از روابط برخورد الاستیک به روز می‌شود و در غیر این صورت به مرحله دوم باید رفت.

6- مراحل قبل تا هنگامی که $i \leq N - 1$ باشد، تکرار می‌شوند.

2-2- جریان فوریه

شاید ساده‌ترین شرایط برای مطالعه‌ی رفتار گاز تحت شرایط رقیق شدگی جریان فوریه باشد. در این جریان گاز بین دو صفحه ی موازی نامحدود که با فاصله‌ی L از یکدیگر قرار گرفته‌اند محبوس شده است. صفحات ثابت هستند، ولی دمای آن‌ها نامساوی است $(T_1 \neq T_2)$. با شروع از یک شرایط اولیه‌ی دلخواه، بعد از یک دوره‌ی گذرا که مولکول‌ها چندین مرتبه بین دو دیوار حرکت کرده‌اند، سیستم به یک حالت دائمی می‌رسد. بعد از دست یافتن به حالت دائمی، یک شار حرارتی ثابت و متناظر با آن یک گرادیان دما در طول میدان وجود دارد. زمانی که جریان در شرایط پیوسته قرار داشته باشد، طبق قانون فوریه که در فرمول (8) آمده است، شار حرارتی (q) متناسب با گرادیان دما در ناحیه‌ی مرکزی دامنه‌ی حل می‌باشد [4].

$$q = -K(T)\frac{dT}{dx} \tag{8}$$

که در آن $K(T)$ ضریب انتقال حرارت رسانایی به‌عنوان تابعی از دما می‌باشد.

"شکل 1" نمای شماتیکی از مساله‌ی فوریه را نشان می‌دهد. مساله فوریه علی رغم سادگی ظاهری، یک آزمون پیچیده برای الگوریتم‌های جدید برخوردی مولکولی به شمار می‌رود؛ زیرا شار حرارتی دیواره و میدان با ممان مرتبه سوم سرعت‌های نوسانی ذرات شبیه‌سازی شده‌ی جریان متناسب می‌باشد و همگرا شدن به مقدار صحیح شار حرارتی در یک جریان با سرعت پایین پدیده‌ی دشواری است. بنابراین این مساله توسط محققین مختلفی برای ارزیابی مدل‌های استاندارد و جدید برخوردی مورد استفاده قرار گرفته است [16,5,4]. فرمول (9) نرخ انتقال حرارت دیواره می‌باشد که با نمونه‌گیری از اختلاف شار انرژی به‌دست می‌آید [3]. در این رابطه c سرعت ذرات و N_s تعداد کل مولکول‌های برخورد کننده با المان سطح ΔA، در طول زمان نمونه‌گیری t_s می‌باشند. بالانویس‌های i و r به‌ترتیب بیانگر مقادیر مربوط به مولکول‌های برخورد کننده و منعکس شونده در برخورد با المان سطح هستند.

$$q_w = \frac{F_N}{t_s \Delta A}\left[\sum_{j=1}^{N_s}\left(\frac{1}{2}mc_j^2\right)^i - \sum_{j=1}^{N_s}\left(\frac{1}{2}mc_j^2\right)^r\right] \tag{9}$$

3-2- تئوری چپمن انسکاگ

اساسی‌ترین شکل معادله‌ی حاکم در زمینه‌ی مکانیک سیالات معادله‌ی بولتزمن است که جریان را در همه‌ی رژیم‌های پیوسته، انتقالی و مولکولی

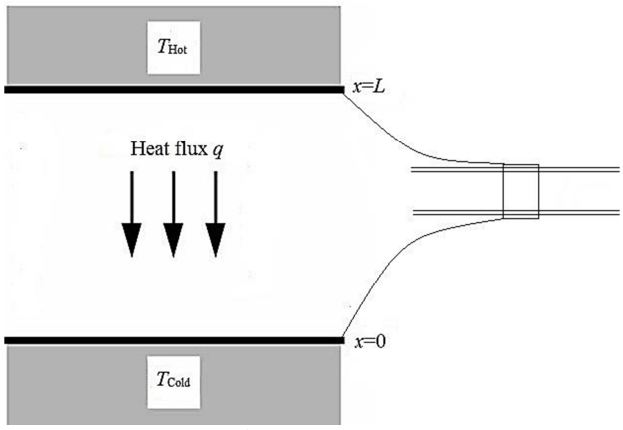

Fig. 1 Schematic diagram of the Fourier problem

شکل 1 نمای طرحی از مساله‌ی فوریه؛ سمت راست: یک کانال با طول بی‌نهایت؛ سمت چپ: نمای بزرگ شده از دیواره و جریان شار حرارتی در مساله فوریه

آزاد توصیف می‌کند. در نوشتن معادله بولتزمن، یک تابع توزیع f برای تعریف موقعیت و سرعت مولکول‌ها فرض شده است و عوامل مختلف، از جمله سرعت جابجایی ذرات و برخورد دوتایی بین مولکول‌ها که می‌توانند بر این توزیع تاثیرگذار باشند، جملات این معادله را تشکیل می‌دهند (فرمول (10)).

$$\frac{\partial}{\partial t}(nf) = -c.\frac{\partial}{\partial r}(nf) + \int_{-\infty}^{\infty}\int_{0}^{4\pi} n^2\,(f_*'f' - f_*f)c_r\sigma d\Omega dc_1 \tag{10}$$

که در آن، nf حاصل ضرب چگالی تعداد (n) و تابع توزیع سرعت (f)، c سرعت مولکول، c_r سرعت نسبی مولکول، σ سطح برخورد، r موقعیت فیزیکی، f و f_* توابع توزیع دو نوع مولکول مختلف از دسته‌ی سرعتی c و c_1، و Ω زاویه فضایی می‌باشد. علامت (') بیانگر مقادیر f و f_* بعد از برخورد می‌باشند [3]. روش‌های مختلفی برای حل این معادله ارائه شده است. تئوری چپمن انسکاگ روشی را فراهم می‌آورد که منتج به حل معادله‌ی بولتزمن از طریق یک بسط در گرادیان مشخصه‌های هیدرودینامیک جریان یا به طور معادل توان‌هایی از عدد نودسن می‌شود. اگر این اعداد نودسن را به مرتبه‌ی اول کاهش دهیم، تئوری CE حالتی از یک گاز ناپایا را در محدوده‌ی هیدرودینامیک برای یک بردار انتقال حرارت کوچک و یک تانسور تنش برشی کوچک (معادلات ناویراستوکس) توصیف می‌کند. در این شرایط تئوری مرتبه اول CE، یک عبارت بسته برای تابع توزیع سرعت برحسب میدان‌های هیدرودینامیک ماکروسکوپی و گرادیان‌های آن تولید می‌کند که به وسیله‌ی چند جمله‌ای‌های سوناین تعریف می‌شود. عبارات a_k و b_k به ترتیب ضرایب شار حرارتی و تنش برشی در این چند جمله‌ای می باشند. نسبت این ضرایب می‌توانند برحسب ممان‌های توابع توزیع سرعت بیان شوند. فرمول‌های (11)، (12) و (13) مربوط به این ممان‌ها برای شار حرارتی می‌باشند [6].

$$\frac{a_k}{a_1} = \left(\frac{15\sqrt{\pi}}{8}\right)\sum_{i=1}^{k}\left(\frac{(-1)^{i-1}k!}{i!\,(k-i)!\left(i+\frac{3}{2}\right)!}\right)\left(\frac{\langle\tilde{c}^{2i}\tilde{c}_z\rangle}{\tilde{c}^2\tilde{c}_z}\right) \tag{11}$$

$$\langle\tilde{c}^{2i}\tilde{c}_z\rangle = \frac{\langle c^{2i}c_z\rangle}{c_m^{2i+1}} \tag{12}$$

$$c_m = \left(\frac{2K_BT}{m}\right)^{1/2} \tag{13}$$

که در آن K_B ثابت بولتزمن، T دما، m جرم مولکولی و c_m محتمل‌ترین سرعت حرارتی می‌باشند.

با استفاده از تئوری CE می‌توان نسبت ضریب رسانایی شار حرارتی به‌دست آمده از روش DSMC با مدل مولکولی کره‌ی سخت را به مقدار تئوری آن طبق فرمول (14) به‌دست آورد [5]:

Archive of SID

www.SID.ir

$$\frac{K_{\mathrm{DSMC}}}{K} = \left(\frac{K_1}{K_\infty}\right)\left(\frac{\mu_\infty}{\mu_1}\right)\left(\frac{4}{15}\right)\left(\frac{m}{K_B}\right)\left(\frac{T_{\mathrm{ref}}^{1/2}}{\mu_{\mathrm{ref}}}\right)\left(\frac{q}{T^{1/2}}\right)\left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)^{-1} \qquad (14)$$

که در آن $K_\infty/K_1 = 1.025218$ و $\mu_\infty/\mu_1 = 1.016034$ می‌باشند. برای شرایط و هندسه‌ی بررسی شده در مطالعه‌ی حاضر در خارج از لایه نودسن (دور از دیواره‌ها) این نسبت برابر 1 می‌باشد. زیرا تئوری CE در رژیم لغزشی بررسی شده‌ی حاضر، در نواحی خارج از لایه نودسن کاملا معتبر می‌باشد [5]. تئوری CE از بسط اغتشاشی[1] معادله‌ی بولتزمن در اعداد نودسن کوچک (رژیم لغزشی) حاصل شده است [3]. در همین محدوده از اعداد نودسن نتایج حلگر DSMC که به‌عنوان حل دقیق معادله بولتزمن شناخته می‌شود، با این تئوری منطبق می‌باشد.

3- نتایج مطالعه

با اعمال روش برخوردی SBT در کد یک بعدی DSMC، جریان فوریه با فشار و دمای اولیه ومرجع $P_{\mathrm{init}} = P_{\mathrm{ref}} = 266.644$ Pa و $T_{\mathrm{init}} = T_{\mathrm{ref}} =$ 273.15 K شبیه‌سازی شده است. گاز با مشخصات جرم مولکولی و لزجت مرجع مربوط به گاز آرگون با مدل مولکولی کره‌ی سخت استفاده شده است ($m = 6.63 \times 10^{-26}$ kg ، $\mu_{\mathrm{ref}} = 2.117 \times 10^{-5}$ Pas). قطر مولکولی مرجع به‌دست آمده از روش برد که توسط گلیس و همکاران اصلاح شده است، $d_{\mathrm{ref}} = 3.658 \times 10^{-10}$ m می‌باشد [5]. طول دامنه‌ی حل $L = 1$ mm می‌باشد که به دو دیوار جامد که مولکول‌ها به صورت پخشی از آن منعکس می شوند، محدود می‌شود. اختلاف دمای ΔT به دو دیواره اعمال می‌شود. به بیان دقیق‌تر دمای دیواره‌ها به‌صورت $T_{\mathrm{hot}} = T_{\mathrm{reff}} + \Delta T/2$،$T_{\mathrm{cold}} = T_{\mathrm{reff}} - \Delta T/2$ می‌باشند. برای اطمینان یافتن از دست‌یابی به مقدار حدی پیش‌بینی شده توسط CE، شبیه‌سازی‌های انجام شده‌ی DSMC در سیستم و عدد نودسن محلی کوچک (0.024~) صورت گرفته‌اند. این عدد نودسن در ابتدای رژیم لغزشی قرار می‌گیرد؛ بنابراین همچنان قانون فوریه به همراه تئوری‌های تحلیلی مبتنی بر تئوری چپمن-انسکاگ برای اصلاح ضریب رسانایی شار حرارتی در این رژیم معتبر است. لذا این مساله به دلیل وجود حل تحلیلی برای ضریب رسانش (مانند رابطه (14)) و همچنین وجود نتایج الگوریتم برخوردی NTC برای آن [4]، به‌عنوان یک آزمون مناسب برای اعتبارسنجی یک روش برخوردی جدید انتخاب شده است. بنابراین برای مقایسه‌ی نتایج رفتار SBT، شرایطی که برای شبیه‌سازی بیان شد مطابق با شرایط گزارش شده در مراجع [4] و [5] می‌باشند.

محاسبات با استفاده از کد یک بعدی DSMC1.For تدوین شده توسط برد [3] که الگوریتم SBT به آن اضافه شده است، انجام شده است. شبکه عددی استفاده شده در حل شبکه غیرتطبیق شونده می‌باشد. برای به‌دست آوردن جواب دقیق، تمام پارامترها و توابع در حلگر مولکولی از نوع مرتبه دقت مضاعف[2] تعریف شده‌اند. قابل ذکر است که خروجی اصلی یک حلگر مولکولی مانند DSMC، سرعت‌های ذرات می‌باشد. تمامی پارامترهای جریانی مانند سرعت، فشار، دما، شار حرارتی و تنش برشی به‌صورت توابعی (یا در اصطلاح تئوری جنبشی به‌صورت ممان[3]) از سرعت مولکولی قابل بیان هستند که با توجه به توان سرعت مولکولی، ممان‌هایی از مرتبه آن توان سرعت نیز نامیده می‌شوند [3]. به‌طور نمونه دما ممان مرتبه دوم سرعت و شار حرارتی ممان مرتبه سوم سرعت می‌باشند.

[1] Perturbation
[2] Double precision
[3] Moments

3-1- ضرایب سوناین

برای بررسی توانایی روش SBT در بدست آوردن ضرایب چند جمله‌ای سوناین فرمول a_k و نیز ممان‌های سرعت آن در کد فوریه با شرایط اولیه‌ی $\Delta T = 40$ K و تعداد 5 ذره در هر سلول اعمال شده است. همان‌طور که در "شکل 2" مشاهده می‌شود تطابق قابل قبولی بین نتایج SBT با مقادیر تحلیلی CE [5]، در ناحیه‌ی مرکزی که خارج از لایه نودسن[4] می‌باشد، وجود دارد. انحراف نتایج در نزدیک دیواره به‌دلیل وجود لایه نودسن به راحتی قابل مشاهده است. لایه نودسن یک لایه‌ی بسیار کوچک در مجاورت دیواره‌ها می‌باشد که اثرات غیرتعادلی جریان در آن ناحیه کاملا مشهود است. نتایج مربوط به روش NTC نیز در شکل آورده شده است که مشاهده می‌شود که روش SBT با وجود بهره بردن از تعداد ذرات کم، قادر است با دقت قابل قبولی نتایج NTC را دنبال کند.

3-2- همگرایی روش SBT

در روش‌های عددی یک نقطه ضعف اساسی برای دست یابی به نتایج با دقت بالا، هزینه‌ی سنگین محاسباتی می‌باشد. بنابراین یک درک واضح برای رسیدن به یک سطح مشخص از دقت با کمترین تلاش محاسباتی ضروری است. در روش DSMC چهار پارامتر شناخته شده‌اند که دقت عددی را محدود می کنند و موجب ایجاد خطا در نتایج می شوند:

اندازه‌ی سلول (Δx)

تعداد ذرات شبیه‌سازی شده در سلول (PPC)

گام زمانی (Δt)

تعداد دفعات نمونه‌گیری مستقل در سلول (Sc)

در روش DSMC، سلول‌های عددی محدوده‌ای برای انتخاب جفت برخوردی ایجاد می‌کنند. بنابراین کوچک بودن سلول‌ها، فاصله‌ی بین جفت برخوردی انتخاب شده را کاهش و دقت برخورد مولکولی را افزایش می‌دهد. به‌طور مشابه، تعداد ذرات شبیه‌سازی شده در داخل میدان که نماینده‌ی مولکول‌های واقعی گاز هستند نیز باید کافی باشند؛ تا پدیده‌های رخ دهنده

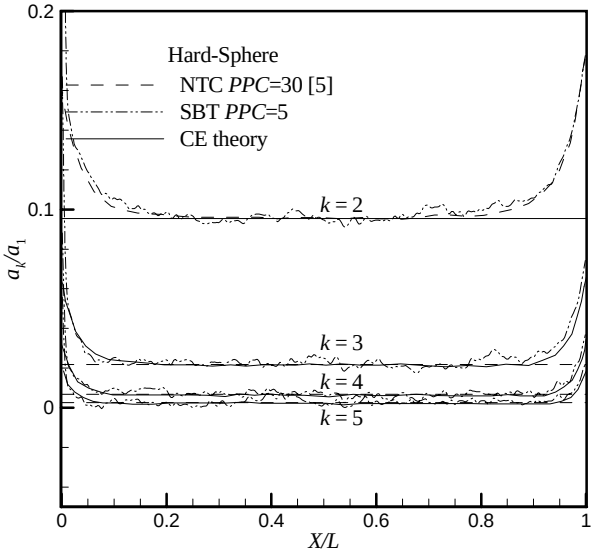

Fig. 2 Comparison of Sonine polynomial coefficients for SBT with NTC results and CE theory

شکل 2 مقایسه‌ی ضرایب چند جمله‌ای سوناین برای SBT با نتایج NTC و تئوری CE

[4] Knudsen layer

www.SID.ir
Archive of SID

در میدان حل، با دقت کافی توسط این ذرات پیش‌بینی شوند. همچنین افزایش تعداد ذرات در هر سلول به طور طبیعی فاصله بین جفت برخوردی انتخاب شده را کاهش می‌دهد. در صورت بزرگ بودن گام زمانی، ذرات به سرعت سلول محاسباتی خود را ترک می‌کنند و همچنین سلول‌های متعددی را در هر مرحله از حل می‌پیمایند. در نتیجه به دلیل عدم انجام برخوردهای کافی در آن سلول، نه تنها پدیده‌های هر سلول را به‌درستی مدل نمی‌کنند بلکه انتشار اطلاعات به سلول‌های همسایه به دقت صورت نمی‌گیرد و اطلاعات بیش از حد پخش می‌شوند. در صورت کم بودن تعداد دفعات نمونه‌گیری نیز پاسخ بدست آمده دارای نوسانات زیاد خواهد بود.

در ادامه به مطالعه و بررسی دقیق همگرایی روش SBT به عنوان تابعی از عوامل محدودکننده‌ی ذکر شده، در جریان حرارتی یک بعدی فوریه پرداخته شده است. در نتایج ارائه شده سعی شده تا با بالا بردن تعداد تکرارهای انجام شده در فرایند حل، خطاهای آماری ناشی از تعداد نمونه گیری به حد ناچیزی کاهش یابد تا در مقایسه با خطاهای مربوط به سه عامل دیگر قابل چشم‌پوشی باشد. خطاهای غیرآماری باقیمانده، به‌عنوان خطاهای گسسته‌سازی بیان می‌شوند.

با انجام یک مطالعه‌ی سازمان یافته در مورد همگرایی رفتار روش SBT، شبیه‌سازی‌های گسترده‌ای برای جریان فوریه با $\Delta T = 100\,\mathrm{K}$ در طیف وسیعی از پارامترهای Δx، Δt و PPC صورت گرفت. برای بررسی پایه‌ای وابستگی نتایج به این پارامترها ابتدا توزیع دما برای یکی از دقیق‌ترین شبیه‌سازی‌ها (400 سلول، 0.625 ns و PPC 60) با یکی از حالت‌ها با دقت پایین (50 سلول، 8 ns و PPC 10) در "شکل 3" مقایسه شده است که در طول دامنه طبق قانون فوریه رفتار خطی وجود دارد و به دلیل کوچک بودن عدد نودسن، پرش دما در نزدیکی دیواره ها قابل مشاهده است. همان‌طورکه مشاهده می‌شود اختلاف نتایج این دو حالت با وجود تفاوت چشمگیر در شبکه گسسته‌سازی، گام زمانی و تعداد ذرات استفاده شده در شبیه‌سازی، بسیار ناچیز می‌باشد. بنابراین توزیع دما گزینه‌ی مناسبی برای بررسی رفتار نتایج این شبیه‌سازی‌ها نمی‌باشد زیرا پارامتری فاقد حساسیت بالا به پارامترهای عددی است.

در قدم بعدی اقدام به مطالعه‌ی رفتار شار حرارتی دیواره به عنوان تابعی از تعداد ذرات شبیه سازی شده برای شبکه‌های مختلف (50، 100، 200 و 400 سلول در میدان حل) در گام زمانی ثابت شده است. همان‌طور که قبلا بیان شد، شار حرارتی ممان مرتبه‌ی سوم سرعت می‌باشد که این مساله باعث حساسیت بالای این پارامتر نسبت به پارامترهای گسسته‌سازی می‌شود [3]. نتایج SBT که در "شکل 4" آورده شده است، همگرایی مرتبه‌ی اول شار حرارتی دیواره نسبت به عکس تعداد ذرات در هر سلول (PPC) در Δt و Δx ثابت را نشان می‌دهد. همچنین در شرایط حدی PPC و Δx ($PPC \to \infty$ و $\Delta x \to 0$) مقدار q_{wall} به مقدار حدی و همگرا شده این مساله فیزیکی یعنی $1512.0\ \mathrm{w/m^2}$ میل می‌کند [4]. همان‌طور که مشاهده می‌شود با درشت شدن شبکه، عرض از مبدا نمودار مربوط به آن شبکه نیز در حال افزایش است. این مطلب بیانگر آن است که با وجود میل کردن PPC به بی‌نهایت، خطاهای گسسته‌سازی ناشی از پارامترهای دیگر در یک ترکیب ثابت از Δx و Δt، همچنان باقی می‌مانند.

برای مقایسه‌ی زمان لازم برای همگرایی، نتایج دو روش SBT و NTC با توجه به تعداد ذرات شبیه‌سازی شده برای دو حالت $PPC = 10, 30$ در شبکه‌ی 400 سلول با گام زمانی 0.625 ns در جدول 1 گزارش شده است. نتایج هر دو روش پس از تعداد یکسانی تکرار (3.2E6) برداشته شده‌اند. مشاهده می‌شود که در شرایط فوق، زمان حل روش NTC کمتر است. معمولا برای تعداد ذرات زیاد (بیش از 10 ذره در هر سلول) هزینه محاسباتی روش NTC کمتر است. زیرا روش SBT تعداد جفت ذرات بیشتری ($(N-1)$ جفت) را برای برخورد بررسی می‌کند در حالی‌که در روش NTC تعداد جفت‌های برخوردی از رابطه (4) به‌دست می‌آید که تابعی از تعداد ذرات، گام زمانی و پارامترهای دیگری می‌باشد. در مساله‌ی مورد بررسی ($PPC = 30$) به‌دلیل کوچک بودن گام زمانی، تعداد متوسط جفت ذرات بررسی شده برای برخورد در روش NTC، از 2 جفت ذره در هر سلول کمتر است؛ در حالی‌که روش SBT در همین شرایط 29 جفت ذره را در هر سلول بررسی می‌کند. از طرف دیگر تابع احتمال برخورد روش SBT وابسته به گام زمانی می‌باشد؛ که با انتخاب گام زمانی کوچک در این مساله، این احتمال در محدوده‌ی 1E-4 تا 1E-3 قرار می‌گیرد که در اکثر مواقع از عدد تصادفی انتخاب شده در روش پذیرش-رد کوچکتر است. بنابراین در روش SBT از 29 برخورد محتمل، تعداد برخوردهای پذیرفته شده در هر گام

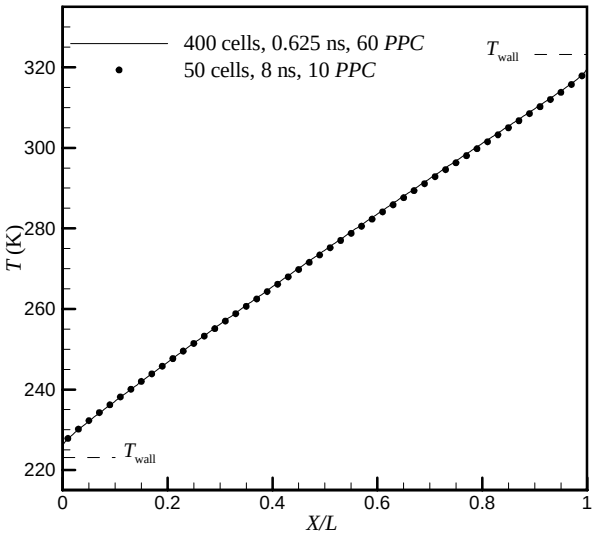

Fig. 3 Temperature independency from discretization parameters

شکل 3 استقلال دما از پارامترهای گسسته سازی

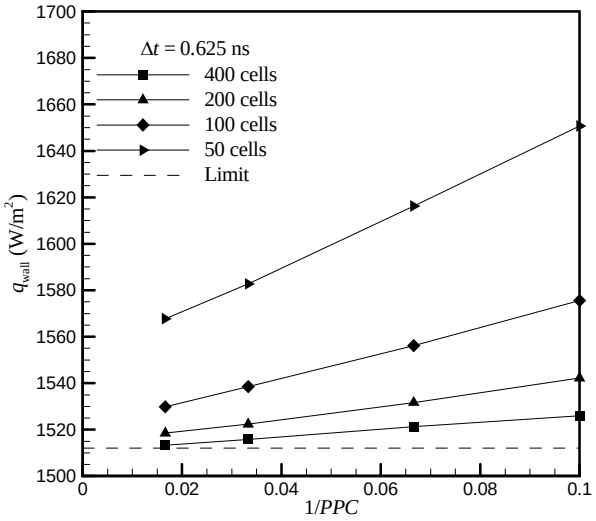

Fig. 4 Wall heat flux versus the inverse of average number of particles per cell for SBT

شکل 4 شار حرارتی دیواره برحسب معکوس تعداد متوسط ذرات درون هر سلول برای روش SBT

Archive of SID

www.SID.ir

زمانی و در هر سلول حداکثر حدود یک برخورد است. در حالی‌که در روش NTC طبق رابطه‌ی (5)، از حداکثر 2 برخورد محتمل نیز معمولا حدود یک برخورد پذیرفته می‌شود. با توجه به این‌که برای رسیدن به جواب صحیح مساله، مقدار مشخصی از برخورد مولکولی باید رخ دهد، مشاهده می‌شود که هر دو روش در زمان یکسانی به جواب نهایی خواهند رسید زیرا برخوردهای پذیرفته شده دو روش در هر گام زمانی تقریبا برابر است. اما هربار فراخوانی الگوریتم برخورد در روش SBT بسیار پر هزینه‌تر است.

همچنین در این شرایط دقت حل NTC تا حدی مناسب‌تر می‌باشد که این به‌دلیل انتخاب تصادفی جفت برخوردی ذرات با احتمال یکسان از یک نمونه‌ی آماری مناسب (مثلا 10 ذره یا 30 ذره) است. در حالی‌که روش SBT به دلیل انتخاب جفت برخوردی فقط از میان ذرات بعد از ذره‌ی انتخاب شده در لیست؛ به‌عبارتی محدود شدن انتخاب؛ به شبکه‌ی ریزتری برای پیش‌بینی جواب صحیح نیاز دارد تا این محدودیت انتخاب را با انتخاب ذرات نزدیک‌تر برطرف کند. این مساله به صورت یک اصل کلی در روش DSMC بیان می‌شود که با کاهش فاصله‌ی بین مولکول‌های برخورد کننده، دقت برخورد افزایش می‌یابد [11]. لازم به ذکر است که در تحقیقات پیشین [7] نیز اشاره شده است که مزیت روش SBT در شرایط استفاده از تعداد ذرات کم قابل حصول است که در ادامه مقاله نیز نشان داده خواهد شد.

برای مطالعه‌ی رفتار SBT به‌عنوان تابعی از اندازه‌ی سلول، پارامتر ضریب انتقال حرارت رسانایی بررسی شده است. "شکل 5" نسبت ضریب انتقال حرارت رسانایی حل DSMC به مقدار تئوری آن (فرمول (14)) را برای دو حالت (400 cells, *PPC*=30) و (200 cells, *PPC*=7) نشان می دهد. مقادیر q، T و dT/dX استفاده شده در فرمول مربوط به آن، از روش DSMC به‌دست می‌آیند. مقدار q استفاده شده مربوط به شار حرارتی دیواره می‌باشد. زیرا در صورت استفاده از ممان شار حرارتی سلولی، خطاهای عددی اضافی در نتایج تولید می‌شوند. این نسبت همان‌طور که مشاهده می‌شود در ناحیه‌ی مرکزی دامنه حل نزدیک به مقدار واحد است و در مجاورت دیواره‌ها تحت تاثیر لایه‌ی نودسن می‌باشد. با انجام یک میانگین‌گیری از مقادیر این نسبت در طول 20 درصد مرکزی دامنه‌ی حل می‌توان به یک مقدار مشخص از این نسبت، برای هر شبیه‌سازی دست یافت. این فرایند نمونه‌گیری، اغتشاشات آماری را کاهش می‌دهد که در ادامه برای به‌دست آوردن ضریب رسانایی حرارتی استفاده شده است. "شکل 6" رفتار همگرایی SBT را برای نسبت ضریب انتقال حرارت رسانایی برحسب تابعی از Δx برای تعداد ذرات 10، 15، 30 و 60 ذره درون هر سلول نشان می‌دهد. این تعداد ذرات برابر تعداد ذراتی است که در مرجع [4] مورد بررسی قرار گرفته است. محور افقی با طول پویش آزاد مولکولی متوسط بی بعد شده است. زمانی که تعداد کافی از ذرات استفاده شود، منحنی‌ها همگرایی مرتبه‌ی دومی را نسبت به اندازه‌ی سلول دارند.

طبق مطالعات پیشینی که در همگرایی روش NTC برای ضریب رسانایی

جدول 1 مقایسه‌ی زمان همگرایی SBT و NTC

Table 1 comparison of SBT and NTC convergence time

تعداد ذرات در هر سلول (روش SBT و NTC)	زمان لازم برای همگرایی (بی‌بعد شده به زمان ردیف دوم (18.79 hr))	مقدار شار حرارتی همگرا شده (W/m^2)
PPC=10 (SBT)	1.80	1525.62
PPC=10 (NTC)	1	1515.22
PPC=30 (SBT)	5.13	1516.04
PPC=30 (NTC)	2.68	1515.34

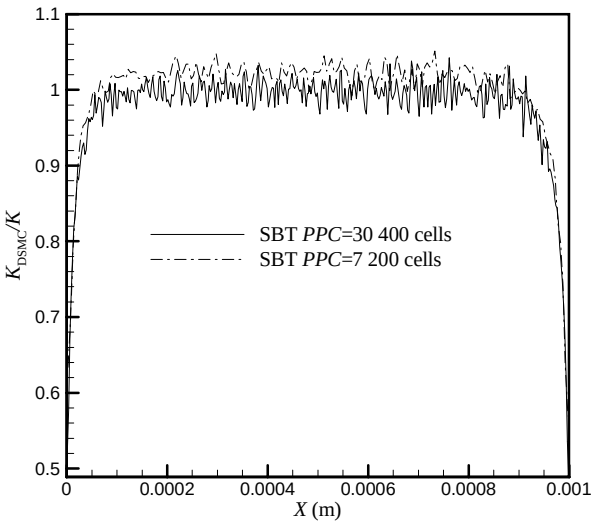

Fig. 5 Spatial profiles of the local thermal conductivity ratio for two simulated cases (SBT)

شکل 5 نسبت ضریب رسانایی حرارتی محلی برای دو حالت شبیه‌سازی (SBT)

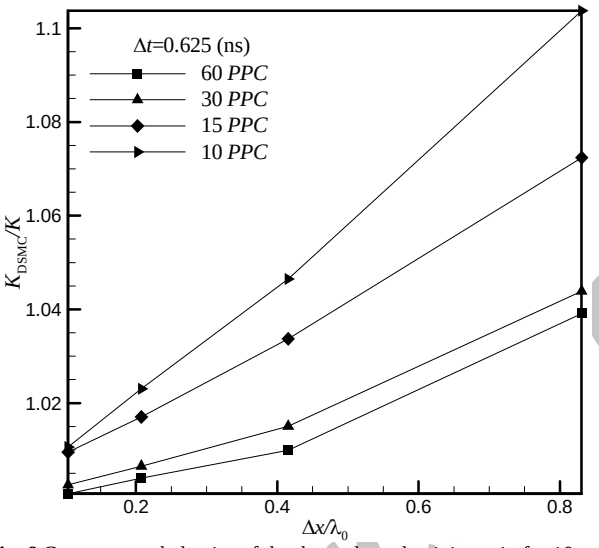

Fig. 6 Convergence behavior of the thermal conductivity ratio for 10, 15, 30 and 60 particles per cell

شکل 6 رفتار همگرایی نسبت ضریب رسانایی حرارتی برای 10، 15، 30 و 60 ذره در هر سلول

حرارتی صورت گرفته است، این روش برای مقادیر حدی هر دو پارمتر گسسته‌سازی Δx و Δt ($\Delta x \to 0$ و $\Delta t \to 0$) به مقدار واحد (که معادل شار حرارتی $1512.0\ W/m^2$ می‌باشد) میل می‌کند [4]. مطالعات انجام شده برای روش SBT رفتار کاملا متفاوتی را برای نتایج این روش در تغییرات گام زمانی نشان داد. "شکل 7" شار حرارتی دیواره را برحسب گام زمانی برای شبکه‌های 50، 100، 200، 400 و 800 با تعداد 30 ذره در هر سلول نمایش می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود با کوچک شدن گام زمانی نمی‌توان انتظار داشت که شار حرارتی حتی در شبکه‌های ریز به مقدار صحیح آن میل کند. در واقع از این شکل می‌توان این چنین برآورد کرد که برای رسیدن به جواب صحیح در روش SBT با وجود تعداد ذرات کافی شبیه‌سازی، نیازمند به استفاده از یک نسبت صحیح از ترکیب گام زمانی و گام مکانی می‌باشد.

"شکل 8" مقایسه‌ی شار حرارتی دیواره برای روش SBT و NTC برحسب تعداد ذرات هر سلول، در نسبت بی‌بعد شده dx/dt ثابت

Archive of SID

www.SID.ir

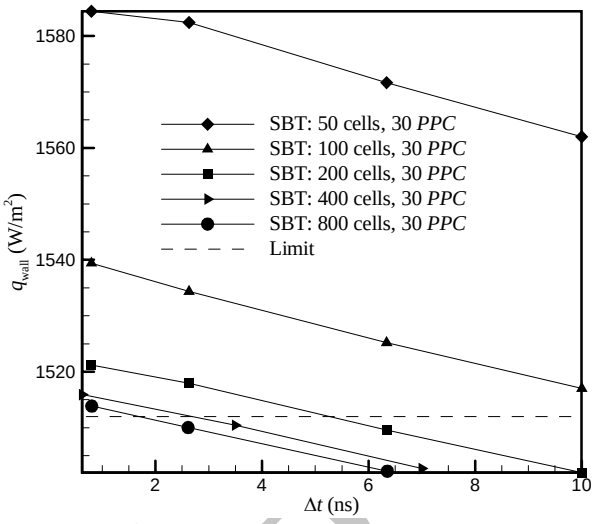

Fig. 7 Wall heat flux versus time step (SBT)

شکل 7 شار حرارتی دیواره برحسب گام زمانی (SBT)

$dx = \Delta x/\lambda_0$) و $dt = \Delta t/t_0$ که $t_0 = \lambda_0/\sqrt{2K_BT_0/m}$ می‌باشد تعریف می‌شود) می‌باشد. در این شکل با ثابت نگه داشتن تعداد کل ذرات (24240 ذره)، تعداد ذرات درون هر سلول از 30 تا 1 ذره؛ که معادل شبکه‌های به ترتیب 800 و 24240 سلول می‌باشد؛ کاهش یافته است. مقدار گام زمانی نیز متناسب با اندازه‌ی شبکه به نحوی کاهش یافته است که نسبت بی‌بعد شده‌ی dx/dt در مقدار 1.469 ثابت باقی بماند. همان‌طور که مشاهده می‌شود نتایج SBT با دقت بسیار بالایی ثابت می‌باشد و حتی برای PPC=1 نیز به جوابی با دقت قابل قبول دست می‌یابد. ولی نتایج NTC با کاهش تعداد ذرات درون سلول، به سرعت از مقدار صحیح خود منحرف می‌شود. این رفتار با توجه به این‌که دو روش SBT و NTC دو الگوریتم برخوردی کاملا متفاوت هستند قابل توجیه است؛ به گونه‌ای که در روش NTC به دلیل تصادفی بودن انتخاب جفت ذرات برخوردی، امکان برخوردهای تکراری وجود دارد. برخوردهای تکراری، باعث ایجاد همبستگی[1] بین سرعت‌های ذرات می‌شوند [7] و فرض آشوب[2] مولکولی که به معنای استقلال و عدم وابستگی سرعت ذرات مولکول‌های گاز در قبل از برخورد نسبت به یکدیگر است را نقض می‌کنند. این در حالیست که معادله بولتزمن و روش برخوردی NTC براساس فرض آشوب مولکولی استخراج شده است. ایجاد همبستگی بین سرعت ذرات دقت نتایج را کاهش می‌دهد، بنابراین تعداد ذرات در روش NTC باید به اندازه‌ی کافی باشد تا احتمال برخوردهای تکراری بسیار کم شود. در فرآیندهای روش SBT امکان برخورد تکراری کاملا حذف شده است. بنابراین اگر شبکه‌ی گسسته‌سازی به اندازه‌ی کافی ریز باشد و گام زمانی نیز مناسب انتخاب شود (به عبارتی نسبت dx/dt مناسب باشد)، روش SBT با یک ذره در هر سلول نیز می‌تواند به پاسخی با دقت بالا دست یابد، زیرا سرعت‌های مولکولی در این روش به دلیل عدم وقوع برخوردهای تکراری دقت خود را حفظ می‌کنند. بنابراین روش SBT در این شرایط دارای مزیت می‌باشد. لازم به ذکر است که مقدار dx/dt برای نتایج ذکر شده در جدول 1 حدود 11.82 می‌باشد، در حالی‌که مقدار مناسب این کمیت برای روش SBT کمتر از 2 می‌باشد.

با توجه به توضیحات روش‌های SBT و NTC که در بخش (2-1) بیان

[1] - Correlations
[2] - Molecular Chaos

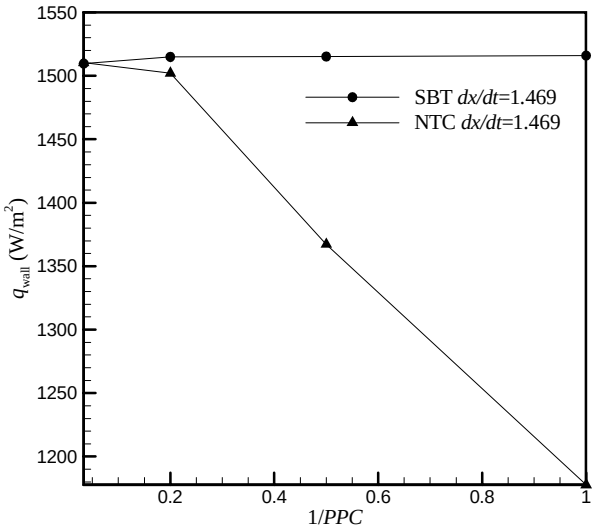

Fig. 8 Comparison of wall heat flux for NTC and SBT with constant dx/dt ratio

شکل 8 مقایسه‌ی شار حرارتی دیواره برای روش‌های SBT و NTC با نسبت ثابت dx/dt

شد و نیز نتایج حاصل از بررسی رفتار SBT نسبت به متغیرهای گسسته سازی و مقایسه‌ی آن با روش NTC، تفاوت‌های اساسی ماهیت این دو روش را می‌توان به‌طور خلاصه در جدول 2 بیان کرد. همچنین توضیحات گسترده‌تری در این زمینه در مقاله مروری روحی و استفانف گزارش شده است [17].

4- نتیجه‌گیری

در مقاله‌ی حاضر به‌منظور تحلیل دقت و قابلیت روش SBT که از طرح‌های برخوردی جدید محسوب می‌شود؛ شبیه‌سازی‌های گسترده‌ای از جریان فوریه در طیف وسیعی از پارامترهای گسسته‌سازی صورت گرفته است. لازم به ذکر است که تلاش برای توسعه‌ی مدل‌های برخوردی از دهه‌های گذشته آغاز شده و همچنان ادامه دارد [19,18,11,7,3]. دستاوردهای نهایی تحقیق حاضر به‌صورت زیر قابل جمع‌بندی می‌باشند:

- همگرایی روش SBT برای شار حرارتی دیواره نسبت به معکوس

جدول 2 تفاوت ماهیت روش‌های برخوردی SBT و NTC

Table 2 The difference of SBT and NTC collision schemes

توضیحات	روش NTC	روش SBT
معادله‌ی پایه	بولتزمن [3]	کنس [7]
تعداد جفت ذرات آزمون شده برای برخورد در سلول با N ذره	N_c (فرمول (4))	$\frac{N(N-1)}{2}$
نحوه‌ی انتخاب جفت ذرات برخوردی	به صورت تصادفی از روش پذیرش-رد	ذره اول به ترتیب لیست ذرات، ذره دوم تصادفی (فرمول (6))
اثر گام زمانی	در محاسبه تعداد جفت ذرات انتخابی (فرمول(4))	در تابع احتمال برخورد (فرمول (7))
احتمال برخورد تکراری در سلول	بله	خیر
عملکرد در PPC کم	از جواب صحیح منحرف می‌شود	دارای دقت مناسب

Archive of SID

www.SID.ir

تعداد ذرات درون هر سلول به‌صورت خطی می‌باشد و درصورت استفاده از شبکه‌ی مناسب می‌توان با افزایش تعداد ذرات به مقدار جواب صحیح دست یافت.

- همگرایی روش SBT برای نسبت ضریب رسانایی حرارتی برحسب اندازه‌ی سلول، زمانی که از تعداد کافی ذره در هر سلول استفاده شود، از مرتبه‌ی دو می‌باشد. این رفتار همگرایی نسبت به PPC و Δx، بر خلاف روش NTC برای هر گام زمانی دلخواه صادق نمی‌باشد. در روش SBT تابع احتمال برخورد متناسب با Δt می‌باشد که باعث می‌شود گام زمانی برای این روش اثری بیش از یک پارامتر گسسته‌سازی داشته باشد. برای دست یافتن به یک رفتار صحیح از همگرایی نسبت به پارامترهای اندازه و تعداد ذرات سلول، نیاز به یک گام زمانی بهینه می باشد. اگر Δt استفاده شده بیش از این مقدار بهینه باشد نتایج SBT برای مقادیر حدی دو پارامتر دیگر (PPC و Δx)، به مقادیر کمتر از مقدار صحیح شار حرارتی میل می‌کند.
- در روش SBT با تغییر گام زمانی به تنهایی و ثابت نگه داشتن پارامترهای دیگر، نتایج رفتار صحیحی را دنبال نمی‌کنند. پارامتری که در این روش اهمیت پیدا می‌کند نسبت بی‌بعد گام مکانی به گام زمانی می‌باشد. در شبیه سازی‌ها با ثابت نگه داشتن این نسبت می‌توان با ریز کردن شبکه (که متناسب با آن نیاز به کوچک کردن گام زمانی می‌باشد به گونه‌ای که نسبت بی بعد dx/dt ثابت بماند) از تعداد بسیار اندکی ذره در هر سلول (حتی یک ذره) استفاده کرد و همچنان به نتایجی با دقت بالا دست یافت. این درحالی است که با کاهش تعداد ذرات هر سلول، نتایج روش NTC با وجود ثابت بودن نسبت گام مکانی به زمانی و نیز تعداد کل ذرات شبیه سازی شده در میدان، به دلیل وقوع برخوردهای تکراری و ایجاد همبستگی در سرعت مولکول‌ها، از مقدار صحیح منحرف می‌شوند.
- روش SBT برخلاف NTC که جفت ذره‌ی برخوردی را به طور تصادفی انتخاب می‌کند، در انتخاب ذره‌ی دوم محدود به ذره‌ی بعد از ذرات انتخاب شده می‌باشد. بنابراین SBT با وجود این حساسیت در انتخاب جفت‌های برخوردی، از برخورد تکراری جلوگیری می‌کند و قادر است در شبکه و گام زمانی مناسب، حتی با یک ذره در سلول نیز به جواب صحیح دست یابد. بنابراین با استفاده از این روش، بخصوص در شبیه‌سازی‌های سه بعدی می‌توان با کاهش حافظه‌ی مورد نیاز سیستم‌های محاسباتی، به کاهش هزینه‌های محاسباتی دست پیدا کرد. برای نمونه می‌توان به شبیه‌سازی سه بعدی جریان روی فضاپیماها اشاره کرد که توسط گلیس و همکارانش نیز بررسی شده است [20] و گام بعدی تحقیق حاضر در ارزیابی طرح برخوردی SBT می‌باشد. از سوی دیگر، روش NTC برای شرایطی که تعداد ذرات در سلول‌ها نسبتا زیاد است (بیش از 10 ذره) دارای مزیت محاسباتی می‌باشد.

5- فهرست علایم

A	مساحت (m^2)
a_k	ضرایب چند جمله‌ای سوناین
c	سرعت حرارتی (ms^{-1})
c_m	محتمل‌ترین سرعت حرارتی (ms^{-1})
c_r	سرعت نسبی (ms^{-1})
d	قطر (m)
dt	مقدار بی بعد شده‌ی Δt
dx	مقدار بی بعد شده‌ی Δx
f	تابع توزیع سرعت
F_N	ضریب تاثیر
K	ضریب انتقال حرارت رسانایی ($Wm^{-1}K^{-1}$)
K_B	ثابت بولتزمن (JK^{-1})
Kn	عدد نودسن
L	طول مشخصه‌ی جریان (m)
m	جرم مولکولی (kg)
n	چگالی عددی (m^{-3})
N	تعداد ذره در هر سلول
$\bar{N}$	تعداد متوسط ذره در هر سلول
N_s	تعداد کل مولکول‌های برخورد کننده با المان سطح
P	احتمال برخورد
PPC	تعداد ذرات اولیه منظور شده در هر سلول
q	شار حرارتی (Wm^{-2})
r	موقعیت فیزیکی
R_f	عدد تصادفی
t_s	زمان نمونه گیری (s)
T	دما (K)
Δt	گام زمانی (s)
Δx	گام مکانی (m)

علایم یونانی

λ	طول پویش آزاد مولکولی (m)
σ	سطح مقطع برخورد
σ_T	سطح مقطع کلی برخورد (m^2)
Ω	زاویه‌ی فضایی
μ	ضریب لزجت (Pas)

زیرنویس‌ها، بالانویس‌ها

init	مقدار اولیه
i	مقادیر مربوط به مولکول برخورد کننده
max	مقدار حداکثر
ref	مرجع
r	مقادیر مربوط به مولکول منعکس شونده
*	مقادیر بعد از برخورد

6- مراجع

[1] G. Karniadakis, A. Beskok, N. Aluru. *Microflows and nanoflows: fundamentals and simulation*. pp. 1-37, New York: Springer Science & Business Media, 2005.

[2] H. S. Tsien, Super-aerodynamics, mechanics of rarefied gases, *Journal of Aeronautical Sciences*, Vol. 13, No. 12, pp. 653-664, 1946.

[3] G. A. Bird, *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas Flows*, pp. 1-150, New York: Oxford University Press, 1994.

[4] D. J. Rader, M. A. Gallis, J. R. Torczynski, W. Wagner, Direct simulation Monte Carlo convergence behavior of the hard-sphere-gas thermal conductivity for Fourier heat flow, *Physics of Fluid*, Vol. 18, No. 7, pp. 07710211-077102117, 2006.

[5] M. A. Gallis, J. R. Torczynski, D. J. Rader, Molecular gas dynamics observations of Chapman-Enskog behavior and departures therefrom in nonequilibrium gases, *Physical Review*, Vol. 69, No. 4, pp. 0422011-0422014, 2004.

Archive of SID

www.SID.ir

[6] M. A. Gallis, J. R. Torczynski, D. J. Rader, M. Tij, A. Santos, Normal solutions of the Boltzmann equation for highly nonequlibrium Fourier flow and Couette flow, *Physics of Fluids*, Vol. 18, No. 1, pp. 0171041-01710416 , 2006.
[7] S. K. Stefanov, On DSMC calculations of rarefied gas flows with small number of particles in cells, *Society for Industrial and Applied Mathematics Journal of Scientific Computing*, Vol. 33, No. 2, pp. 677-702, 2011.
[8] A. Amiri, E. Roohi, H. Niazmand, S. Stefanov, DSMC Simulation of Low Knudsen Micro/Nano Flows using Small Number of Particles per Cells, *Journal of Heat Transfer*, Vol. 135, No. 10, pp. 1010081-1010088, 2013.
[9] A. Saadati, E. Roohi, Detailed investigation of flow and thermal field in micro/nano nozzle using simplified Bernouli Trial (SBT) collision scheme in DSMC, *Aerospace Science and Technology*, Vol. 46, No. 1, pp. 236-255, 2015.
[10] A. Shoja-Sani, E. Roohi, M. Kahrom, S. Stefanov, Investigation of rarefied gas flow around NACA 0012 airfoils using DSMC and NS solvers, *Europiean Journal of Mechanics, Part B:Fluids*, Vol. 48, No. 1, pp. 59-74, 2014.
[11] B. Goshayeshi, E. Roohi, S. Stefanov, DSMC simulation of hypersonic flows using an improved SBT-TAS technique, *Journal of Computational Physics*, Vol. 303, No. 3, pp. 28-44, 2015.
[12] W. W. Liou, Y. Fang, *Microfluid Mechanics: Principles And Modeling*, New York: McGraw-Hill, pp. 10-85, 2006.
[13] G. A. Bird, Monte-Carlo simulation in an engineering context *proceeding of the 12th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, New York: American Institute of Aeronautics and Astronautics, pp. 239-255, 1981.
[14] K. Koura, H. Matsumoto, Variable soft sphere molecular model for inverse-power-law or Lennard-Jones potential, *Physics of Fluids*, A: Fluid Dynamics, Vol. 3, No. 10, pp. 2459-2465, 1991.
[15] H. A. Hassan, D. B. Hash, A generalized hard-sphere model for Monte Carlo simulation, *Physics of Fluids: A: Fluid Dynamics*, Vol. 5, No. 3, pp. 738-744, 1992.
[16] M. A. Gallis, J. R. Torczynski, D. J. Rader, G. A. Bird, Convergence behavior of a new DSMC algorithm, *Journal of Computational Physics*, Vol. 228, No. 12, pp. 4532-4548, 2009.
[17] E. Roohi, S, Stefanov, Collision partener selection schemes DSMC: from micro/nano flows to hypersonic flows, *Physics Reports*, Vol. 656, No. 3, pp. 1-38, 2016.
[18] B. Goshayeshi, E. Roohi, S. Stefanov, A novel Simplified Bernoulli Trials collision scheme in the DSMC with intelligence over particle distances, *Physics of Fluids*, Vol. 27, No. 10, pp. 1071041-10710417, 2015.
[19] M. N. Macrossan, Restrited Collision List method for faster Direct Simulation Monte-Carlo (DSMC) Collisions, *Journal of Computational Physics*, Vol. 319, No. 1, pp. 1-8, 2016.
[20] M. A. Gallis, J. R. Torczynski, S. J. Plimpton, D. J. Rader, T. Koehler, Direct simulation Monte Carlo: The quest for speed, *Proceedins of the 29th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, Xi'an, China, 2014

Archive of SID

www.SID.ir