



بررسی جریان داخلی مخلوط گاز دوتایی درون یک استوانه دوار به روش شبیه سازی مستقیم مونت کارلو

جواد خادم^{۱*}، علی ابوطالبی^۲ و سلمان نورآذر^۳

^۱ استادیار، دانشکده مهندسی، دانشگاه بیرجند

^۲ کارشناس ارشد، دانشکده مهندسی، دانشگاه بیرجند

^۳ دانشیار، دانشکده مهندسی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر

تاریخ دریافت: ۱۳۹۲/۰۱۲/۱۷؛ تاریخ بازنگری: ۱۳۹۳/۱۱/۲۶؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۴/۰۱/۳۰

چکیده

در مقاله حاضر، جریان داخلی مخلوط حاوی گازهای آرگون و هلیوم درون یک استوانه دوار با سرعت زاویه‌ای و دمای دیواره ثابت به روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو مورد بررسی قرار گرفته است. به منظور بررسی وابستگی حل به تعداد مولکول مدل، از دو تعداد مولکول مختلف استفاده شده است. نتایج نشان می‌دهد که افزایش تعداد مولکول‌های مدل، منجر به نتایج با دقت بیشتری می‌شود، اما منجر به افزایش زمان شبیه‌سازی می‌گردد. در مدل‌های برخورد مولکولی از دو مدل کره سخت با قطر متغیر و مدل کره نرم با قطر متغیر استفاده شده و نتایج آنها با یکدیگر مقایسه گردیده است. نتایج نشان می‌دهد که شبیه‌سازی با استفاده از مدل کره نرم نسبت به مدل کره سخت برای دمای مخلوط در نزدیکی دیواره سیلندر از دقت بالاتری برخوردار است. حل تحلیلی مربوطه نیز ارائه شده و با نتایج شبیه‌سازی عددی کار حاضر مقایسه گردیده است.

کلمات کلیدی: استوانه دوار؛ مدل کره سخت با قطر متغیر؛ مدل کره نرم با قطر متغیر؛ شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو.

Investigation of internal flow of binary gas in a rotating cylinder using direct simulation Monte-Carlo(DSMC)

J. Khadem^{1*}, A. Abotalebi² and S. Nourazar³

¹ Assist. Prof., Mech. Eng., University of Birjand, Birjand, Iran

² M.Sc. Student, Mech. Eng., University of Birjand, Birjand, Iran

³ Assoc. Prof., Mech. Eng., Amirkabir University of Technology, Tehran, Iran

Abstract

In this paper a rarefied binary gas mixture flow of Argon and Helium inside a rotating cylinder with constant angular velocity and constant wall temperature is investigated using the direct simulation of Monte - Carlo (DSMC) method. The number of different molecules were used, to study the dependence of the solution to number molecule model. The results show that increasing the number of molecules model is more accurate, On the other hand increase the simulation time. Also for modeling the intermolecular collision, the variable soft sphere (VSS) and the variable hard sphere (VHS) were investigated in present work and the results were compared with each other. The results show that the variable soft sphere model (VSS) compared to the variable hard sphere model (VHS) for the temperature of the mixture near the cylinder walls more carefully. The analytical solution is also presented and compared with the current simulation results.

Keywords: Rotating cylinder; Variable hard sphere (VHS) model; Variable soft sphere (VSS) model; Direct simulation of Monte-carlo(DSMC).

۱- مقدمه

روش شبیه سازی مستقیم مونت کارلو^۱ که شاید بتوان آن را از جمله قدیمی ترین روش های حل معادله بولتزمن^۲ دانست، یکی از روش های حل، براساس دیدگاه لاگرانژی است که برای شبیه سازی جریان های گازی رقیق با عدد نادسن^۳ بین ۰/۱ تا ۱۰، مورد استفاده قرار می گیرد. البته این روش به علت نیاز به رایانه با سرعت بالا، در زمان ارائه آن پیشرفت چشمگیری نداشته، اما در حال حاضر بسیار مورد توجه قرار گرفته و دارای کاربردهای فراوانی شده است. برد^۴ در سال ۱۹۹۴، به بررسی دینامیک مولکولی گاز و شبیه سازی مستقیم جریان گاز پرداخت [۱]. یانگ^۵ و هانگ^۶، در سال ۱۹۹۵ با استفاده از روش اختلاف محدود، معادله بولتزمن را حل کردند. آنها یک برنامه کامپیوتری برای حل معادله بولتزمن، برای جریان خارجی روی یک استوانه ارائه کردند.

رژاسانو^۷ و واگنر^۸ [۳] در سال ۱۹۹۸، یک مکانیزم عمومیت یافته را برای روش های ذره اتفاقی جهت تقریب معادله بولتزمن توسعه دادند. این مکانیزم، بر پایه ایده علت انتقال وزن اتفاقی از سرعت گسسته اتفاقی، بنا نهاده شده است. نتایج بدست آمده از این مکانیزم، با نتایج آزمایشگاهی از تطابق خوبی برخوردار بود. بابلیف^۹ و رژاسانو [۴] در سال ۱۹۹۹، برای بهبود زمان محاسبات در روش شبیه سازی مستقیم مونت کارلو در قسمت محاسبه برخورد مولکول ها و با استفاده از تبدیل سریع فوریه، روشی را ابداع کردند که سبب شد زمان محاسبات در این روش نسبت به روش شبیه سازی مستقیم مونت کارلو، به طور تقریبی تا نصف کاهش یابد.

لوک میسن^{۱۰} [۵-۶] در سال ۲۰۰۰، برای حل معادله بولتزمن روش اویلری را ابداع کرد. در این روش، ابتدا تابع توزیع در دستگاه مختصات سرعت گسسته شده، سپس با یک روش حجم محدود، تابع توزیع در دستگاه مختصات مکان

گسسته می شود. با حل معادلات بدست آمده، تابع توزیع و از تابع توزیع، خواص ماکروسکوپی محاسبه می شود.

مونتانو^{۱۱} و گارزو^{۱۲} [۷] در سال ۲۰۰۲، به کمک روش شبیه سازی مستقیم مونت کارلو، خواص جریان گاز مخلوط با چگالی پایین را مورد بررسی قرار دادند. مولکول ها در مخلوط، کره های سخت غیر الاستیک در نظر گرفته شده بودند. رینز^{۱۳} [۸] در سال ۲۰۰۲، ساختار موج شوک در مخلوط گازی را برپایه معادله بولتزمن، مورد بررسی قرار داد. او ساختار موج شوک را در گاز دو جزئی بر پایه حل عددی معادله بولتزمن کامل برای مدل کره سخت، مورد مطالعه قرار داد. نورآذر و همکاران [۹] در سال ۲۰۰۵، روش شبیه سازی مستقیم مونت کارلو را برای جریان گاز رقیق در محیط متقارن محوری و برای حالتی به کار گرفتند که جریان از روی یک استوانه که محور آن به موازات راستای جریان بود. در کار مزبور، نتایج حاصل از برنامه عددی با داده های موجود مقایسه گردید که هم خوانی و تطابق مناسبی را دارا بود. لان^{۱۴} و همکاران [۱۰] در سال ۲۰۰۵، تشابه بین جریان گاز میکرو و جریان گاز رقیق را به کمک روش شبیه سازی مستقیم مونت-کارلو، مورد تحقیق و بررسی قرار دادند. نتایج عددی، نشان داد که برای مقیاس های متفاوت، جریان گاز میکرو به جریان گاز رقیق شباهت دارد.

پراسانت^{۱۵} و همکاران [۱۱] در سال ۲۰۰۸، مدل های مولکولی مختلفی را برای شبیه سازی جریان گاز رقیق با استفاده از روش شبیه سازی مستقیم مونت کارلو ارائه کردند و نشان دادند که هر یک از این مدل ها، با درجات مختلفی از موفقیت همراه است. گنجایی و همکاران [۱۲] در سال ۲۰۰۹، روشی به نام روش اصلاح شده شبیه سازی مستقیم مونت-کارلو را برای حل جریان کوئنت-تیلور (جریان بین دو استوانه هم مرکز) ارائه دادند. آنها با استفاده از بسط سری تیلور، معادله مربوط به قسمت برخورد را که در روش شبیه سازی مستقیم مونت کارلو تا دقت مرتبه یک بود، تا دقت مرتبه دو توسعه دادند. آنها با اعمال الگوریتم مرتبه دوم مذکور در

¹ Direct Simulation Monte-Carlo Method

² Boltzman

³ Knudsen Number

⁴ Bird

⁵ Yang

⁶ Huang

⁷ Rjasanow

⁸ Wagner

⁹ Bobylev

¹⁰ Mieussens

¹¹ Montanero

¹² Garzo

¹³ Raines

¹⁴ Lan

¹⁵ Prasant

که معادله (۳)، حرکت ذره‌ها و معادله (۴)، برخورد ذره‌ها را در گام زمانی توصیف می‌کند. باید توجه کرد که دو معادله بالا در یک گام زمانی، سیال را توصیف می‌کنند به طوری که که زمان بررسی تغییر تابع توزیع، ذره‌ها را آنقدر کوچک انتخاب کرده که بتوان بین پدیده حرکت ذره‌ها و برخورد آنها تأخیر قایل شد. به این ترتیب که در زمان مشخص، ابتدا حرکت ذره‌ها و سپس برخورد آن‌ها مورد بررسی قرار می‌گیرد. البته باید توجه کرد که احتمال برخورد ذره‌ها هنگام حرکت نیز وجود دارد، بنابراین حرکت با برخورد ارتباط بسیار نزدیکی دارد. ترم برخورد در معادله (۲) را می‌توان به صورت رابطه (۵) بازنویسی کرد:

$$Q(f, f) = \int_V \int_A \xi(v_r, \Omega) f' f'_* d\Omega dv_* - \int_V \int_A \xi(v_r, \Omega) f f_* d\Omega dv_* \quad (5)$$

در انتگرال دوم، مقدار f نسبت به متغیرهای انتگرال‌گیری ثابت بوده، می‌تواند از انتگرال خارج شود. حال انتگرال باقیمانده، معرف متوسط فرکانس برخورد مولکول‌هایی بوده که دارای سرعت v هستند و با $\mu(v)$ نمایش داده می‌شود:

$$Q(f, f) = \int_V \int_A \xi(v_r, \Omega) f' f'_* d\Omega dv_* - \mu(v)f \quad (6)$$

همچنین در معادلات (۲)، (۵) و (۶)، تابع مرکزی ξ در مدل برخورد کره‌ها به صورت رابطه (۷) تعریف می‌شود:

$$\xi(v_r, \Omega) = \frac{\sigma}{\varepsilon} v_r^\alpha \quad (7)$$

در معادله (۷)، α ثابتی است که مقدار آن با توجه به مدل برخورد، تعیین می‌شود و ε عدد بدون بعد نادسن است که برابر با نسبت متوسط پویش آزاد مولکولی^۲ λ^2 به طول مشخصه میدان حل L . با جایگذاری معادله (۷) در (۶) داریم:

برنامه کامپیوتری و مقایسه پاسخ‌های دو الگوریتم با آزمایش‌های انجام شده در این زمینه، نشان دادند که الگوریتم مرتبه دوم ارائه شده در جریان‌های داخلی و خارجی نسبت به الگوریتم مرتبه اول، دارای تطابق بهتری با نتایج آزمایشی است. همچنین آنان نشان دادند که جمله اضافه جدید در قسمت برخورد در سرعت شکل‌گیری و نمایش ناپایداری‌های حاصل از ورتکس جریان تأثیر می‌گذارد.

در تحقیق حاضر، شبیه‌سازی عددی خواص جریان داخلی مخلوط حاوی گازهای آرگون و هلیوم درون یک استوانه دوار با سرعت زاویه‌ای ثابت و دیواره دما ثابت به روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو با به‌کارگیری از دو مدل برخورد کره سخت با قطر متغیر و کره نرم با قطر متغیر، مورد بررسی قرار گرفته است [۱۳].

۲- معادله بولتزمن

معادله بولتزمن توسط سرسیگنانی^۱ [۱۴]، به شکل رابطه (۱) نوشته شده است:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial f}{\partial r} = Q(f, f) \quad (1)$$

که در آن f تابع توزیع سرعت ذرات به ازای سرعت v و ترم سمت راست معادله (۱) را ترم برخورد می‌نامند که بصورت رابطه (۲) نوشته می‌شود.

$$Q(f, f) = \int_V \int_A \xi(v_r, \Omega) (f' f'_* - f f_*) d\Omega dv_* \quad (2)$$

در معادله (۲)، f' ، f'_* و f ، f_* به ترتیب، تابع توزیع سرعت به ازای سرعت‌های v' و v'_* هستند. برای حل معادله بولتزمن می‌توان در راستای محور زمان، معادله را به دو معادله (۴ و ۳) تقسیم کرد:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -v \cdot \frac{\partial f}{\partial r} \quad (3)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = Q(f, f) \quad (4)$$

² Mean Free Path

¹ Cercignani

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} = \frac{1}{\varepsilon} [p(f^n, f^n) - \mu f^n] \quad (15)$$

با کمی ساده سازی می‌توان مقدار f^{n+1} را به دست آورد:

$$f^{n+1} = \frac{\mu \Delta t p(f^n, f^n)}{\varepsilon} + \left(1 - \frac{\mu \Delta t}{\varepsilon}\right) f^n \quad (16)$$

به منظور انتخاب یک ذره از f^{n+1} می‌بایست با احتمال $\frac{\mu \Delta t}{\varepsilon}$ ذره‌ای از $\frac{p(f^n, f^n)}{\mu}$ انتخاب شده، با احتمال $\left(1 - \frac{\mu \Delta t}{\varepsilon}\right)$ ذره‌ای از f^n انتخاب شود. این توزیع احتمالی، به این مفهوم است که برخورد بین دو ذره با احتمال $\frac{\mu \Delta t}{\varepsilon}$ انجام می‌گیرد و با احتمال $\left(1 - \frac{\mu \Delta t}{\varepsilon}\right)$ برخوردی با هم نخواهند داشت، لذا مجموع ضرایب f^n و f^{n+1} در معادله (۱۶) برابر یک است.

۲-۱- گسسته سازی ناحیه حل

گام اول در این روش، ایجاد شبکه محاسباتی است. برای پیاده‌سازی الگوریتم حل جریان، باید میدان حل را به شبکه‌های محاسباتی تقسیم کرد. مهم‌ترین علت استفاده از سلول‌های محاسباتی در روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو، محدود کردن برخورد بین مولکول‌ها است. به عبارتی دیگر، در میدان محاسباتی بزرگ، انتخاب جفت مولکولی که به هم برخورد می‌کنند، باید محدود به سلول‌های محاسباتی باشد. اهمیت این امر، به حدی است که حتی برای بالا بردن دقت محاسبات، هر سلول به تعدادی زیر سلول تقسیم می‌شود و انتخاب جفت مولکول برخوردی در زیر سلول‌های مجاور انجام می‌شود. در واقع محاسبه نرخ برخورد بین مولکولی در هر سلول انجام می‌شود، در حالی که انتخاب جفت مولکول برخوردی در هر زیر سلول انجام می‌شود. دلیل دوم برای ایجاد شبکه محاسباتی، این است که مقادیر کمیت‌های میکروسکوپی در هر سلول در طی حل، متوسط‌گیری شده تا به کمک آن بتوان کمیت‌های میکروسکوپی را در هر سلول محاسبه کرد. به بیانی دیگر، می‌توان توزیع کمیت‌های میکروسکوپی را در هر سلول مشاهده کرد. ایجاد شبکه محاسباتی، حجم و مساحت هندسی را برای محاسبه خواص جریان میکروسکوپی فراهم می‌کند.

برای جلوگیری از بروز خطا باید ابعاد سلول‌ها در حدود مسافت آزاد میانگین باشد که این منطبق با فرضیه گاز رقیق است. اگر مولکول‌ها در فواصل بسیار بزرگتر از فاصله

$$\mu(v) = \int_V \int_A \frac{\sigma v_r^\alpha}{\varepsilon} f_* d \Omega dv_* \quad (8)$$

مقدار $\frac{\sigma v_r^\alpha}{\varepsilon}$ به v_* بستگی ندارد، لذا می‌توان معادله (۸) را به شکل رابطه (۹) نوشت:

$$\mu(v) = \frac{1}{\varepsilon} \int_V f_* dv_* \int_A \sigma v_r^\alpha d \Omega \quad (9)$$

مقدار انتگرال اول، معرف κ و انتگرال بعدی، معرف $\frac{\rho}{m}$ است، با جایگذاری این مقادیر در معادله (۹) داریم:

$$\mu(v) = \frac{1}{\varepsilon} \frac{\kappa \rho}{m} = \frac{\mu}{\varepsilon} \quad (10)$$

در معادله (۱۰)، μ بیانگر فرکانس برخورد است؛ حال در معادله (۶) به جای تابع مرکزی ξ و $\mu(v)$ مقادیرشان را از معادلات (۷) و (۱۰) جایگزین می‌کنیم:

$$Q(f, f) = \int_V \int_A \frac{\sigma}{\varepsilon} v_r^\alpha f' f_*' d \Omega dv_* - \frac{\mu f}{\varepsilon} \quad (11)$$

از آنجا که عدد نادسن به سرعت‌های پس از برخورد وابسته نیست، لذا می‌توان آن را از انتگرال بیرون آورد:

$$Q(f, f) = \frac{1}{\varepsilon} \int_V \int_A \sigma v_r^\alpha f' f_*' d \Omega dv_* - \frac{\mu f}{\varepsilon} \quad (12)$$

در معادله (۱۲) به جای انتگرال، عبارت $p(f, f)$ جایگزین می‌شود و به صورت رابطه (۱۳) بازنویسی می‌شود:

$$Q(f, f) = \frac{1}{\varepsilon} [p(f, f) - \mu f] \quad (13)$$

حال ترم برخورد را در معادله (۴) قرار می‌دهیم:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} [p(f, f) - \mu f] \quad (14)$$

در روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو، معادله (۱۴) که بیانگر برخورد بین مولکول‌ها است با استفاده از گسسته سازی مرتبه اول در امتداد زمان به شکل رابطه (۱۵) گسسته می‌شود:

که در آن فاکتور نرمال سازی A از معادله (۲۰) به دست می‌آید:

$$A = \frac{Nm\omega^2}{2\pi kT} \left[\exp\left(\frac{mR^2\omega^2}{2kT}\right) - 1 \right]^{-1} \quad (20)$$

با به دست آمدن A اکنون می‌توان چگالی عددی را از معادله (۲۱) محاسبه کرد:

$$n(r) = \frac{Nm\omega^2}{2\pi kTL} \frac{\exp\left(\frac{mr^2\omega^2}{2kT}\right)}{\exp\left(\frac{mR^2\omega^2}{2kT}\right) - 1} \quad (21)$$

در رابطه اخیر، N تعداد کل مولکول‌ها، m جرم مولکولی گاز، ω سرعت زاویه ای، k ثابت بولتزمن، T دمای مطلق، L طول استوانه، R شعاع استوانه و r مسیر شعاعی است.

۴- نتایج

۴-۱- شرایط مسئله

استوانه مورد بررسی، به طول ۰/۱ متر و قطر ۲ متر است که با سرعت زاویه‌ای ثابت ۱۰۰۰ دور بر دقیقه در حال چرخش است. سیال درون استوانه، حاوی ۵۰٪ مولی هلیوم و ۵۰٪ مولی آرگون است. دیواره استوانه دارای دمای ثابت ۲۰۰ کلوین بوده، جریان مخلوط سیال نیز در ابتدا در دمای ۲۰۰ کلوین است. سمت بالا و پایین استوانه، دارای شرط مرزی صفحه تقارن بوده، انعکاس مولکول‌ها در این مرزها به صورت آینه‌ای است. در محور استوانه نیز انعکاس مولکول‌ها به صورت آینه‌ای است، اما در جداره استوانه، انعکاس مولکول‌ها به صورت پخشی در نظر گرفته شده است.

به منظور حل جریان سیال، معادلات بولتزمن را با استفاده از برنامه عددی شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو تا ۱۰۰۰۰۰ تکرار اجرا شده است که معادل ۵ ثانیه است. تعداد مولکول‌های شبیه‌سازی شده در این تحقیق، ۳۲۰۰۰ و ۵۴۰۰۰ مولکول مدل است و تعداد کل مولکول‌ها در واحد حجم، برابر $5/49735 \times 10^{15}$ است.

همچنین از شبکه سلولی 5×10^5 ، به منظور محاسبه برخوردها و نمونه برداری از خواص میکروسکوپی استفاده شده است. به دلیل اینکه جریان مورد بررسی دارای تقارن محوری است، سلول‌هایی که از محور استوانه دورتر هستند، حجم بیشتری می‌یابند، لذا به منظور دست‌یابی به نتایج با

مولکولی متوسط از هم مجزا شوند، به آنها اجازه برخورد داده می‌شود که این امر، منجر به انتقال غیر فیزیکی جرم، مومنتم و انرژی می‌شود.

شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو با یک سری شرایط اولیه معین آغاز می‌شود و شرایط مرزی، موقعیت ذره، سرعت ذره، سطح مقطع برخورد و دمای مولکول‌ها، مسیر تکاملی سیستم را تعیین می‌کنند. برای یک مسئله ساکن متعادل، شرط اولیه روی حل نهایی روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو اثر نمی‌گذارد؛ اما روی زمان محاسبه اثر خواهد داشت.

برای حداقل شدن خطای آماری، تعداد ذرات شبیه‌سازی باید به اندازه کافی زیاد باشد، اما نباید از ظرفیت محاسبات تجاوز کند. همچنین به دلیل اینکه فرض می‌شود همه مولکول‌های واقعی در هر ذره دارای خواص مشابه هستند، تعداد این مولکول‌ها در هر ذره نمی‌تواند خیلی زیاد باشد. در غیر این صورت، منجر به نتایج غیرعملی می‌شود. با شروع حل، جریان از این حالت اولیه در یک رفتار واقعی فیزیکی با زمان توسعه می‌یابد. مولکول‌ها به طور دایم وارد حوزه محاسباتی شده و یا از آن خارج می‌شوند. خواص مولکول‌های وارد شده از طریق شرایط مرزی معلوم، مشخص می‌شوند. در محاسبات مربوط به خواص گازها، باید از وزن‌ها و اندازه صحیح استفاده شود [۱۳].

۳- حل تحلیلی

انرژی یک ذره در جریان متقارن محوری مخلوط گاز در یک استوانه دوار از معادله (۱۷) به دست می‌آید:

$$E(r) = \frac{1}{2}I\omega^2 = \frac{1}{2}mr^2\omega^2 \quad (17)$$

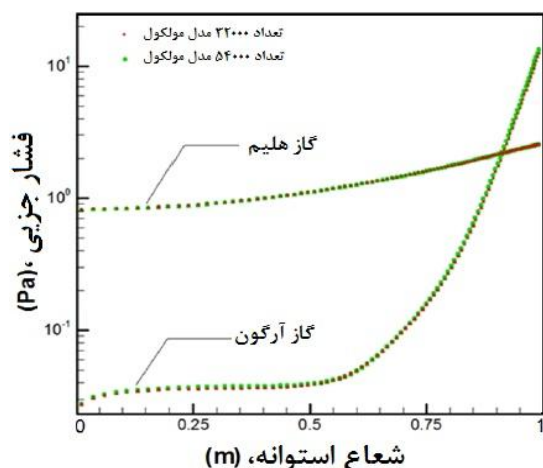
اثرات چرخش نیز مشابه اثرات اضافی میدان، روی سیستم است و به صورت رابطه (۱۸) لحاظ می‌شود:

$$U(r) = -\frac{1}{2}mr^2\omega^2 \quad (18)$$

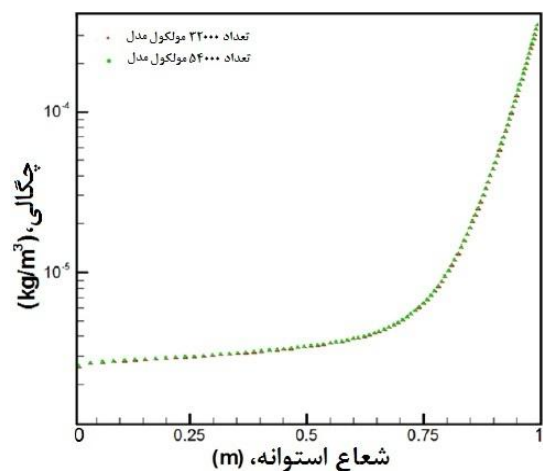
با بکارگیری تابع توزیع بولتزمن برای چگالی عددی یک ذره و جایگزینی معادله (۱۸) در آن، چگالی عددی به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$n(r) = A \exp\left(-\frac{U(r)}{kT}\right) = A \exp\left(\frac{mr^2\omega^2}{2kT}\right) \quad (19)$$

مولکول مدل برخورددار است. بدیهی است که برای رسیدن به جواب‌های با دقت بیشتر، نیازمند افزایش تعداد مولکول‌های مدل بوده که این نیز به نوبه خود افزایش صرف زمان کامپیوتری را به دنبال دارد. در ادامه، سایر نتایج براساس حالت ۵۴۰۰۰ مولکول مدل اجرا شده است.



شکل ۲- وابستگی فشار جزئی گازها به تعداد مولکول مدل



شکل ۳- وابستگی چگالی مخلوط به تعداد مولکول مدل

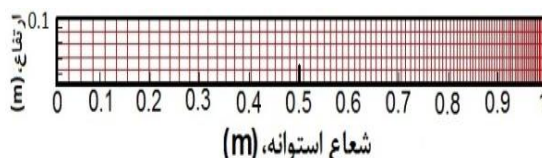
دقت مطلوب، از شبکه بندی غیریکنواخت مطابق شکل ۱ استفاده شده است تا سلول‌های نزدیک دیواره اندازه مناسب داشته باشند. در جدول‌های ۱ و ۲، پارامترهای مدل کره سخت با قطر متغیر و مدل کره نرم با قطر متغیر برای دو گاز هلیوم و آرگون ارائه شده است.

جدول ۱- پارامترهای مدل برخورد کره سخت با قطر متغیر

نوع گاز	A	ω
هلیوم	۱	۰/۶۶
آرگون	۱	۰/۸۸

جدول ۲- پارامترهای مدل برخورد کره نرم با قطر متغیر

نوع گاز	A	ω
هلیوم	۱/۶۴	۰/۷۲۵
آرگون	۱/۶۴	۰/۷۲۵



شکل ۱- نمایی از شبکه برای سیلندر به شعاع ۱ m و ارتفاع ۰/۱ m

۴-۲- اثر تعداد مولکول‌های مدل در حل عددی

نتایج کار حاضر برای شبیه سازی مشخصات جریان برای دو حالت ۳۲۰۰۰ مولکول مدل و ۵۴۰۰۰ مولکول مدل در شبکه سلولی ۵×۱۰۰ با ۱۰۰۰۰۰ تکرار ارائه و مقایسه شده است. شکل‌های ۲ تا ۵ وابستگی فشار جزئی گازها، چگالی مخلوط، سرعت چرخشی و دمای مخلوط را با تعداد مولکول مدل در شرایط مدل برخورد کره سخت با قطر متغیر نشان می‌دهند.

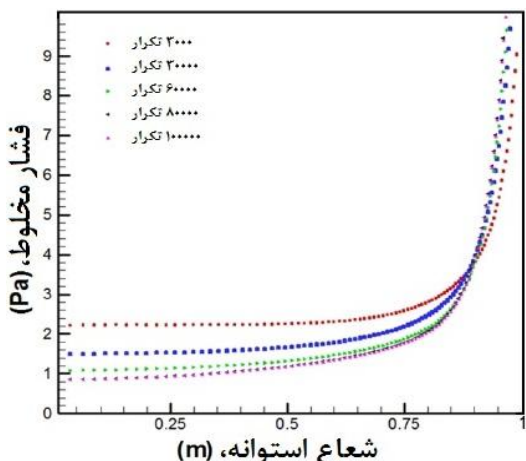
بیشترین اختلاف بین دو حالت مذکور برای فشار جزئی گازها، چگالی مخلوط و سرعت چرخشی (شکل ۲ تا ۴)، کمتر از ۰/۵ درصد است. بیشترین اختلاف بین نتایج شبیه سازی برای دمای مخلوط (شکل ۵)، حدود ۳ درصد است. همچنین شکل‌های ۴ و ۵ نشان می‌دهد که حالت ۵۴۰۰۰ مولکول مدل از دقت بیشتری نسبت به حالت ۳۲۰۰۰

می‌بایست زمان بسیار بیشتری صرف کرد که منجر به گران شدن حل می‌شود.

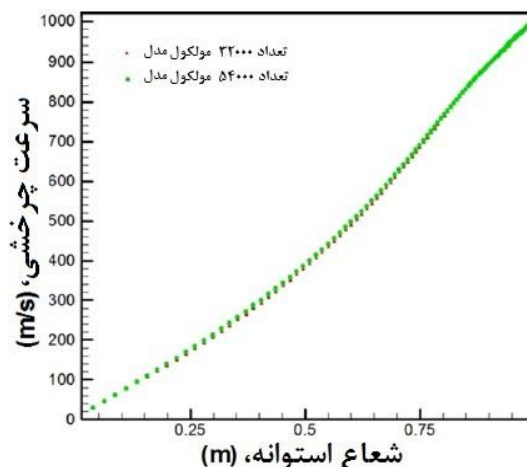
همچنین با توجه به شکل های ۶ و ۷ مشاهده می‌شود که با افزایش شعاع، فشار و چگالی مخلوط ابتدا به آرامی و بعد از شعاع ۰/۸۷ متر به شدت افزایش می‌یابد که علت آن تمرکز بسیار زیاد مولکول‌ها بویژه آرگون (بدلیل وزن بیشتر نسبت به هلیوم) در نزدیکی دیواره سیلندر در اثر چرخش استوانه است.

همان‌طور که در شکل ۸ ملاحظه می‌شود، با افزایش شعاع، سرعت چرخشی براساس رابطه خطی $V = R \times \omega$ افزایش می‌یابد. بدیهی است که به منظور رسیدن به منحنی خطی ایده ال، که بیانگر مفهوم چرخش جسم صلب در مکانیک سیالات است، زمان بسیار زیادی لازم است که بدلیل محدودیت زمان و تجهیزات، نتایج بعدی برای ۱۰۰۰۰۰ تکرار اجرا شده است.

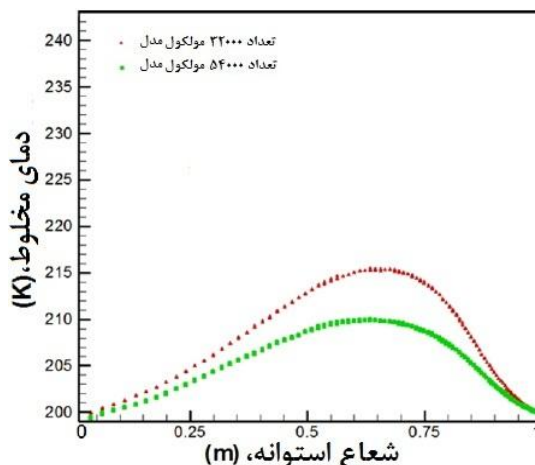
در شکل ۹، کاهش منحنی دمای مخلوط در اثر افزایش تکرار حل نمایان است. با افزایش شعاع دوران، انرژی منتقل شده از محور دوران به ذرات زیاد می‌شود و همین امر سبب می‌شود که دمای ذرات با افزایش شعاع دوران زیاد شود تا اینکه به حداکثر خود برسد، پس از این ناحیه با افزایش شعاع، ذرات مخلوط تحت تاثیر اثرات دیواره قرار گرفته، چون دمای دیواره در ۲۰۰ کلوین ثابت است، سبب می‌شود که دمای مخلوط کاهش یابد تا اینکه به دمای دیواره برسد.



شکل ۶- وابستگی فشار مخلوط به تعداد تکرار



شکل ۴- وابستگی سرعت چرخشی به تعداد مولکول مدل



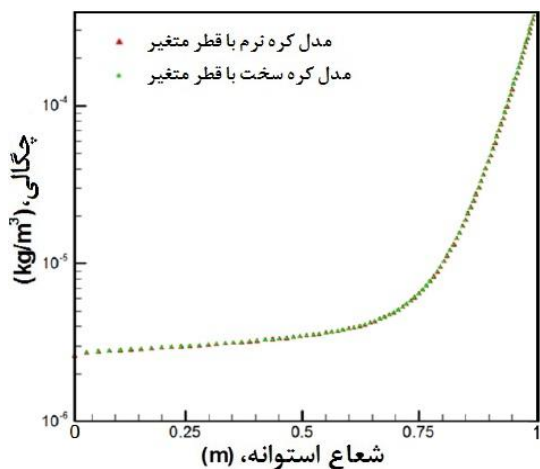
شکل ۵- وابستگی دمای مخلوط به تعداد مولکول مدل

۴-۳- اثر تعداد تکرار در حل عددی

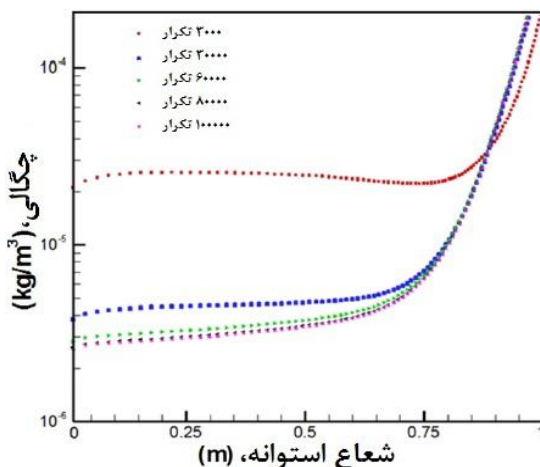
شکل های ۶ تا ۹، تغییرات فشار مخلوط، چگالی مخلوط، سرعت چرخشی و دمای مخلوط را برای تعداد ۵۴۰۰۰ مولکول مدل در شرایط مدل برخورد کره سخت با قطر متغیر در تکرارهای مختلف نشان می‌دهند. با توجه به نتایج، افزایش تعداد تکرار سبب بالا رفتن دقت حل و از طرفی افزایش زمان اجرای برنامه خواهد شد. ملاحظه می‌شود که با افزایش تعداد تکرار، تفاوت منحنی‌های مربوطه کم شده، منحنی‌های مربوط به تکرارهای ۸۰۰۰۰ و ۱۰۰۰۰۰ بسیار به یکدیگر نزدیک هستند و تقریباً برهم منطبق شده‌اند و برای رسیدن به جواب‌های اندکی دقیق تر از جواب‌های تکرار ۱۰۰۰۰۰

۴-۴- مقایسه مدل‌های برخورد

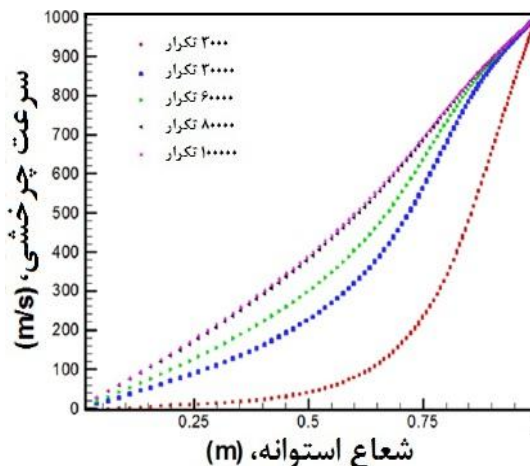
در شکل‌های ۱۰ تا ۱۲، نتایج شبیه‌سازی براساس مدل برخورد کره سخت با قطر متغیر با مدل برخورد کره نرم با قطر متغیر برای حالت ۵۴۰۰۰ مولکول مدل و ۱۰۰۰۰۰ تکرار مقایسه شده است. همان‌طور که در شکل ۱۲ مشاهده می‌شود، دقت مدل برخورد کره نرم با قطر متغیر، اندکی (حداکثر یک درجه کلونین) بهتر از نتایج مدل کره سخت با قطر متغیر است. تفاوت بین منحنی‌های رسم شده در این دو حالت کم است که دلیل آن پایین بودن دمای مخلوط و نیز دیواره استوانه است. در دماهای پایین، مولکول‌ها انعطاف پذیری کمی دارند، اما در دماهای بالاتر، مولکول‌ها هنگام برخورد بیشتر در هم فرو رفته، لذا مقطع برخورد مولکول‌ها به طور واقعی‌تری در نظر گرفته می‌شود و فرض سخت بودن مولکول‌ها منطقی نبوده، نتایج مدل برخورد کره نرم با قطر متغیر دقیق‌تر خواهد بود.



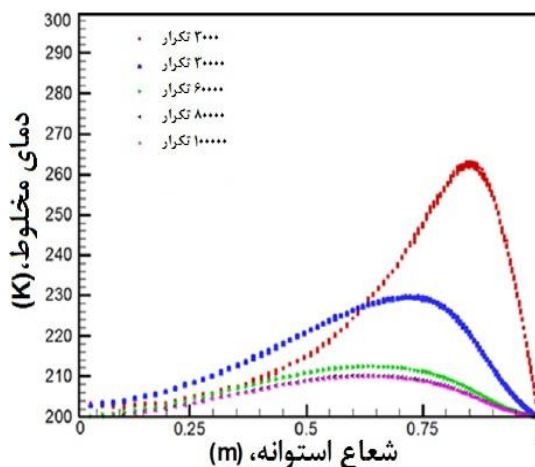
شکل ۱۰- مقایسه نتایج دو مدل برای منحنی چگالی مخلوط



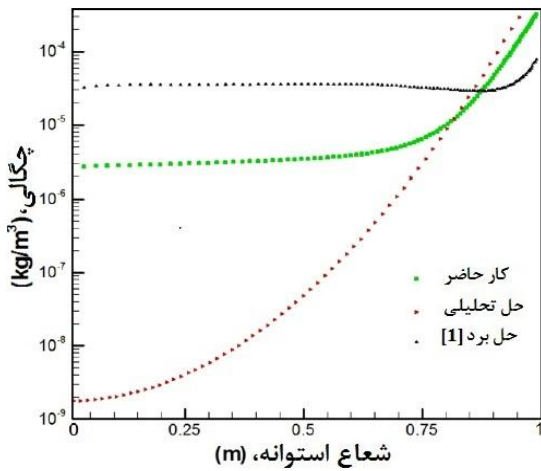
شکل ۷- وابستگی چگالی مخلوط به تعداد تکرار



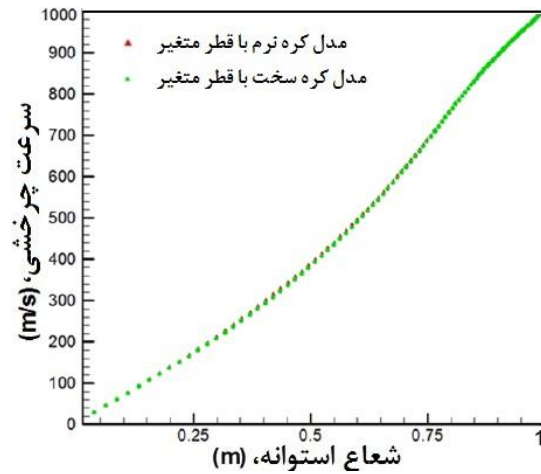
شکل ۸- وابستگی سرعت چرخشی به تعداد تکرار



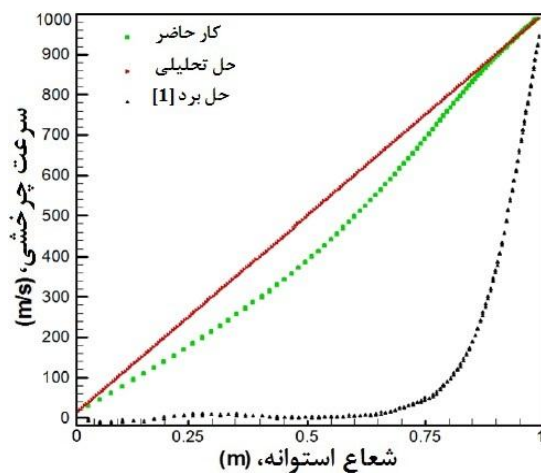
شکل ۹- وابستگی دمای مخلوط به تعداد تکرار



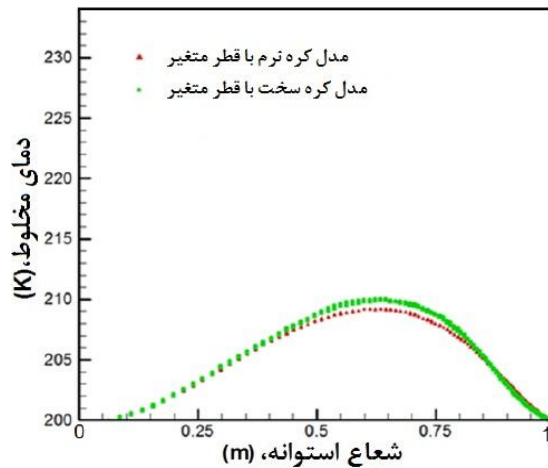
شکل ۱۳- مقایسه حل تحلیلی و حل برد [۱] با کار حاضر برای چگالی مخلوط



شکل ۱۱- مقایسه نتایج دو مدل برای منحنی سرعت چرخشی



شکل ۱۴- مقایسه حل تحلیلی و حل برد [۱] با کار حاضر برای سرعت چرخشی



شکل ۱۲- مقایسه نتایج دو مدل برای منحنی دمای مخلوط

۴-۵- مقایسه حل عددی با حل تحلیلی و نتایج برد [۱]

شکل های ۱۳ تا ۱۵، نتایج حاصل از حل عددی برای شرایط تعداد ۵۴۰۰۰ مولکول مدل و مدل برخورد کره سخت با قطر متغیر با نتایج تحلیلی و نتایج برد [۱] نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، نتایج کار حاضر دقت قابل قبولی را دارا است. جدول ۳، حداکثر درصد خطای کار حاضر و حل برد با نتایج تحلیلی را نیز نشان می‌دهد.

جدول ۳- حداکثر درصد خطای دمای مخلوط و سرعت

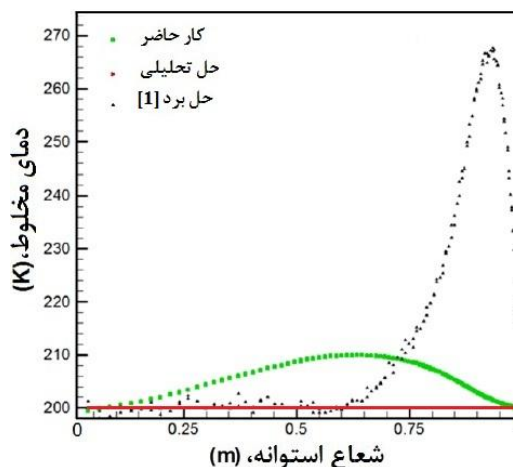
چرخشی کار حاضر و حل برد با نتایج تحلیلی

کار حاضر	حل برد	
۵۱/۰٪	۳۴/۵٪	دمای مخلوط
۱۹/۲٪	۹۹٪	سرعت چرخشی

- [2] Yang JY, Huang JC (1995) Rarefied Flow Computations Using Nonlinear Model Boltzmann Equations, *Journal of Computational Physics*. 120: 323-339.
- [3] Rjasanow S, Wagner WA (1998) Generalized Collision Mechanism for Stochastic Particle Schemes Approximating Boltzmann-Type Equations, *Computers Math. Applic.* 35(1-2):165-178.
- [4] Bobylev AV, Rjasanow S (1999) Fast Deterministic Method of Solving Boltzmann Equation for Hard Spheres, *Mech. B-Fluids*. 18: 869-887.
- [5] Mieussens L (2000) Discrete velocity Model and Implicit Scheme for the BGK Equation of Rarefied Gas Dynamics, *Math, Models and Meth. in Applied Sci.* 10(8):1121-1149.
- [6] Mieussens L (2000) Discrete velocity Models and Numerical Schemes for the Boltzmann BGK Equation in Plane and Axisymmetric Geometries, *Journal of Computational Physics*. 162: 429-466.
- [7] Montanero JM, Garzo V (2002) Rheological Properties in a Low-Density Granular Mixture, *Physica A*. 310:17-38.
- [8] Raines A (2002) Study of a shock Wave Structure in Gas Mixtures on the Basis of the Boltzmann Equation, *European Journal of Mechanics B/Fluids*. 21: 599-610.
- [9] Nourazar SS, Hosseini SM, Ramezani A, Dehghanpour HR (2005) Comparison between the Navier-Stokes and the Boltzmann equations for the simulation of an axially symmetric compressible flow with shock wave using the Monte-Carlo method, *Computational Methods and Experimental Measurements XII, WIT Transaction on Modeling and Simulation*. 41: 41-69.
- [10] Lan X, Li ZX, Wang M (2005) Similarity of Microscale and Rarefied Gas Flows, *ASME 3rd International Conference on Microchannels and Minichannels ICMM2005 June 13-15, Toronto, Ontario, Canada*.
- [11] Prasant, PS, Kakkassery J K (2008) Molecular models for simulation of rarefied gas flows using direct simulation Monte Carlo method, *Fluid Dynamics Research*, 40(4): 233-252.
- [12] Ganjaei AA and Nourazar S (2009) A new algorithm for the simulation of the Boltzmann equation using the direct simulation Monte-Carlo method, *Journal of Mechanical Science and Technology*, 23:2861-2870.

[۱۳] ابوطالبی علی (۱۳۸۹) بررسی اثرات چرخش استوانه در جریان داخلی مخلوط گازهای آرگون و هلیوم به روش شبیه سازی مسقیم مونت کارلو، کارشناسی ارشد، بیرجند، دانشگاه بیرجند.

- [14] Cercignani C (1988) *The Boltzmann equation and its applications*, Lectures series in mathematics. 68, Berlin, New York, Springer-Verlag.



شکل ۱۵- مقایسه حل تحلیلی و حل برد [۱] با کار حاضر برای منحنی دمای مخلوط

۵- نتیجه گیری

در این تحقیق، به تحلیل و بررسی جریان داخلی مخلوط گاز-های آرگون و هلیوم با استفاده از شبیه سازی مستقیم مونت کارلو درون یک استوانه دوار پرداخته شد. به منظور آزمایش حساسیت، نتایج مختلف در تکرارهای متفاوت، مورد بررسی قرار گرفتند و ملاحظه شد که از تکرار ۸۰۰۰۰ به بعد تفاوت منحنی‌ها با یکدیگر بسیار کم بوده، رسیدن به جواب‌های با اندکی دقت بیشتر، منجر به گران شدن حل و صرف وقت زیاد کامپیوتر خواهد شد. همچنین از دو تعداد مولکول مدل ۳۲۰۰۰ و ۵۴۰۰۰ نیز به منظور آزمایش عدم وابستگی به تعداد مولکول مدل استفاده شد و ملاحظه گردید که زیاد کردن تعداد مولکول مدل، منجر به افزایش زمان محاسبات می‌شود. به منظور بررسی برخورد بین مولکول‌های گازها از مدل برخورد کره سخت با قطر متغیر و مدل برخورد کره نرم با قطر متغیر استفاده شد و نتایج با یکدیگر مقایسه گردید که در مجموع، مدل برخورد کره نرم با قطر متغیر (بویژه برای شرایط دما بالا)، نتایج بهتری نسبت به مدل برخورد کره سخت با قطر متغیر داشت. همچنین به حل تحلیلی جریان مخلوط گاز درون استوانه در حال چرخش با سرعت زاویه‌ای ثابت پرداخته شد و نتایج شبیه‌سازی عددی با حل ارائه شده توسط برد [۱] و حل تحلیلی مورد مقایسه قرار گرفت.

مراجع

- [1] Bird GA (1994) *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, Oxford University Press.