

بهبود عملکرد روش شبکه‌ی بولتزمن به منظور مطالعه

عددی جریان گاز در محیط‌های متخلخل نانو مقیاس

روش شبکه بولتزمن متداول (استاندارد) صرفاً قادر است نتایج جریان در مقیاس میکرو را - که معمولاً منطبق بر رژیم جریان لغزشی است - بخوبی پیش‌بینی نماید اما برای جریان در مقیاس نانو - که معمولاً منطبق بر رژیم گذرا است - از دقت کافی برخوردار نیست. در این مقاله با انجام اصلاحاتی در روش شبکه بولتزمن، جریان در نانو کانال حاوی محیط متخلخل در بازه وسیعی از رژیم‌های جریان، شامل رژیم لغزشی و گذرا، به کمک روش مذکور مدلسازی شده است. همچنین برای اولین مرتبه پدیده مینیمم نادنس در میکرو و نانوکنال‌های حاوی محیط متخلخل مشاهده شده و مورد ارزیابی قرار گرفته است.

امیرهمایون مقدادی

اصفهانی^۱

استادیار

واژه های راهنما: شبکه بولتزمن، محیط متخلخل، رژیم گذرا، نانو

۱- مقدمه

امروزه روش‌های محاسباتی یکی از ابزارهای مفید در جهت مدلسازی سیستم‌هایی است که ساخت تجهیزات آزمایشگاهی برای بررسی خواص آنها، مقرون به صرفه نیست اما نکته حائز اهمیت در این زمینه آن است که رفتار جریان در مقیاس نانو با رفتار جریان در مقیاس ماکرو متفاوت است، به گونه‌ای که فرض پیوستگی و عدم لغزش روی مرزهای صلب ممکن است برقرار نباشد. عدد نادنس، Kn ، که عبارت است از نسبت فاصله پویس آزاد مولکولی به طول مشخصه مسأله، معین کننده میزان برقراری فرض پیوستار برای سیال است. رژیم‌های مختلف سیال برحسب عدد نادنس به صورت تجربی مشخص شده‌اند. محدوده رژیم‌های جریان برحسب عدد نادنس به صورت زیر خلاصه می‌شود [۱]:

$$Kn \leq 0.001 \text{ معادلات ناویر- استوکس با شرط مرزی عدم لغزش}$$
$$0.001 \leq Kn \leq 0.1 \text{ معادلات ناویر- استوکس با شرط مرزی لغزش}$$
$$0.1 \leq Kn \leq 10 \text{ رژیم گذار}$$
$$Kn > 10 \text{ رژیم آزاد مولکولی}$$

^۱ استادیار، گروه مهندسی مکانیک، واحد نجف آباد، دانشگاه آزاد اسلامی، نجف آباد، ایران amir_meghdadi@pmc.iaun.ac.ir

روش شبکه بولتزمن متداول از توانایی مناسبی جهت مدلسازی جریان در هندسه‌های پیچیده و محیط‌های متخلخل برخوردار است [۲]. همچنین روش مذکور قادر است جریان در رژیم لغزشی را نیز مدل نماید [۳-۶] اما این روش در مورد جریان در رژیم گذرا، نتایج مناسبی را در بر ندارد. صرفاً تعداد بسیار اندکی از مقالات را می‌توان ذکر نمود که از روش شبکه بولتزمن برای شبیه‌سازی جریان در رژیم گذرا استفاده کرده باشند. برخی از این مقالات بر مبنای استفاده از مدل‌های شبکه بولتزمن مرتبه بالاتر سعی نموده‌اند جریان در رژیم گذرا را مدل نمایند [۷-۱۰]. در مرجع [۹] بیان شده است که مدل شبکه بولتزمن D2Q9 قادر نیست لایه نادرین را مدل نماید و برای غلبه بر این مشکل در $Kn > 0.1$ باید تعداد جهت‌هایی که ذرات قابلیت حرکت دارند را بیشتر نمود. اما در مرجع [۱۱] نشان داده شده است که این کار صرفاً در محدوده اعداد نادرین حدود $0/1$ دقت روش را بهبود می‌بخشد و در اعداد نادرین بزرگتر، نمی‌تواند توزیع سرعت و دبی را بخوبی پیش بینی کند. علاوه بر این، قادر نیست پدیده مینیمم نادرین را در $Kn=1$ پیش بینی نماید. همانگونه که در ادامه نشان داده خواهد شد، یکی از اهداف این مقاله آن است که ثابت کند مدل D2Q9 به شرط اصلاح پارامتر زمان آرامش قادر است لایه نادرین را مدل نماید. لایه نادرین، لایه‌ای است نزدیک دیواره به ضخامت λ که در این لایه خواص پیوستگی جریان برقرار نیست و از معادلات ناویر استوکس نمی‌توان استفاده نمود. برای $Kn > 1$ این لایه تمام عرض کانال را در بر می‌گیرد. روش دیگری که برای استفاده از روش شبکه بولتزمن در رژیم گذرا استفاده می‌شود، بر مبنای تصحیح فاصله پویش آزاد مولکولی عمل می‌نمایند. بر مبنای همین ایده در مراجع [۱۲ و ۱۳] روابط پیچیده‌ای بر مبنای فاصله از دیوار ارائه شده است. روش‌هایی که توسط همین تعداد اندک از مقالات ارائه شده عموماً توانایی شبیه‌سازی تمام رژیم‌های جریان را ندارند و به علاوه دارای پیچیدگی‌هایی هستند که استفاده از آنها برای محیط‌های متخلخل را غیر ممکن می‌سازد. همچنین همایون و همکاران [۱۴] به منظور مدل کردن جریان رژیم گذرا در نانو کانال تهی، زمان آرامش را به صورت تابعی از چگالی سیال در نانو کانال ارائه داده‌اند. هدف از این مقاله در درجه اول، ارائه رابطه‌ای ساده و کاربردی، برای زمان آرامش (صرفاً تابعی از نادرین) است به گونه‌ای که این روش قادر باشد جریان در رژیم‌های لغزشی و گذرا را بخوبی مدل نماید و هدف دوم، استفاده از LBM بهبود یافته برای شبیه‌سازی جریان گاز در هندسه‌های متخلخل دوبعدی در مقیاس‌های میکرو و نانو به منظور بررسی تاثیر پارامترهای مختلف مانند تخلخل و عدد نادرین بر روی نرخ جریان-حجمی، نفوذپذیری و افت فشار می‌باشد.

۲- روش شبکه بولتزمن

در روش شبکه بولتزمن تابع توزیع چگالی احتمال حضور ذرات در مکان x در زمان t با حل معادله جبری شده زیر بدست می‌آید [۱۵]:

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t) = -\frac{1}{\tau_f + 0.5} [f_i(\vec{x}, t) - f_i^{eq}(\vec{x}, t)] \quad (1)$$

که f تابع چگالی احتمال بوده و τ_f نیز پارامتر زمان آرامش است که با رابطه $\nu = \tau_f / 3$ با ویسکوزیته سینماتیک مرتبط می‌شود. f_i^{eq} تابع توزیع تعادلی نامیده می‌شود که از رابطه ۲ محاسبه می‌شود:

$$f_i^{eq}(\vec{x}, t) = \rho \cdot w_i \left(1 + \frac{\vec{u} \cdot \vec{c}_i}{RT} + \frac{(\vec{u} \cdot \vec{c}_i)^2}{2(RT)^2} - \frac{\vec{u} \cdot \vec{u}}{2RT} \right)$$

$$w_0 = \frac{4}{9}, w_{i=1,2,3,4} = \frac{1}{9}, w_{i=5,6,7,8} = \frac{1}{36} \quad (2)$$

در مدل D2Q9 بردارهای سرعت به صورت رابطه ۳ بیان می‌شوند:

$$\vec{c}_{i=} \begin{cases} (0,0), i = 0 \\ \left(\cos\left(\frac{i-1}{2}\pi\right), \sin\left(\frac{i-1}{2}\pi\right) \right) c, i = 1,2,3,4 \\ \sqrt{2} \left(\cos\left(\frac{2i-9}{4}\pi\right), \sin\left(\frac{2i-9}{4}\pi\right) \right) c, i = 5,6,7,8 \end{cases} \quad (3)$$

که $c = \Delta x / \Delta t$ نسبت گام مکانی به گام زمانی می‌باشد.

پس از محاسبه توابع چگالی احتمال هیدرودینامیکی، چگالی و سرعت سیال از روابط ۴ محاسبه می‌شوند:

$$\rho = \sum_i f_i \quad \rho \vec{u} = \sum_i c_i f_i \quad (4)$$

مراحل حل در روش شبکه بولتزمن در شکل (۱) نشان داده شده است. ابتدا ورودی‌های کد شامل شکل کانال و موانع و عدد نادسن جریان به عنوان ورودی به کد داده می‌شود. سپس مقادیر سرعت و چگالی اولیه به کد وارد می‌شود. این مقادیر صرفاً به عنوان یک حدس اولیه است. در ادامه معادلات برخورد و پخش مولکولی ارضا می‌شوند و شروط مرزی برقراری گردند و مقادیر ماکروسکوپیک جریان شامل سرعت و چگالی محاسبه می‌شوند. این مراحل تکرار می‌شود تا اینکه حل همگرا شود. به منظور مدل کردن سرعت لغزشی روی دیوارها از ترکیب شرط مرزی آینه‌ای و کمانه کردن [۱۶] استفاده می‌شود. به عنوان مثال روی مرزهای پایین، توابع توزیع مجهول به صورت رابطه ۵ محاسبه می‌شوند:

$$\begin{bmatrix} f_5 \\ f_2 \\ f_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s & 0 & 1-s \\ 0 & 1 & 0 \\ 1-s & 0 & s \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_7 \\ f_4 \\ f_8 \end{bmatrix} \quad (5)$$

که s ضریب لغزش نام دارد. $s=1$ بیانگر شرط مرزی کمانه کردن خالص و $s=0$ بیانگر شرط مرزی آینه‌ای است.

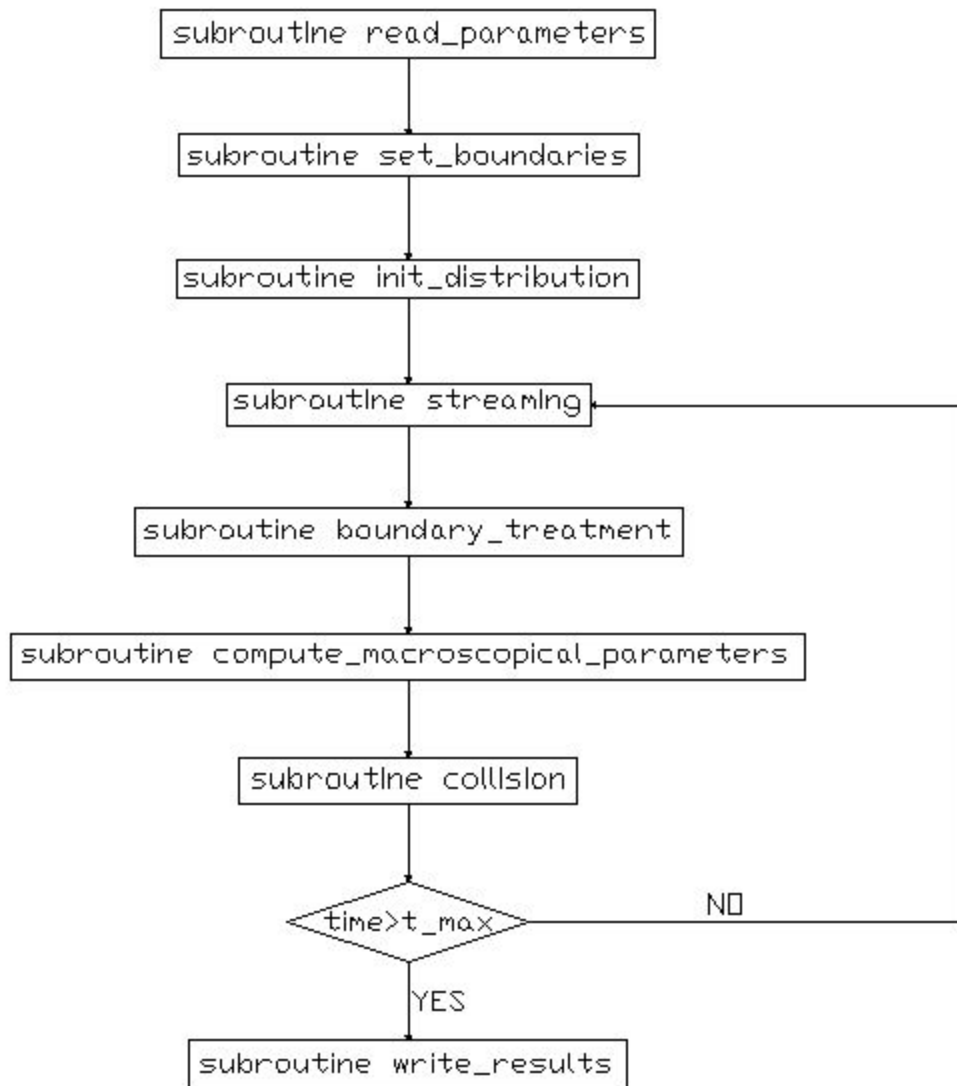
۳- توسعه روش شبکه بولتزمن به منظور شبیه‌سازی جریان در مقیاس نانو

همانگونه که بیان شد یکی از اهداف این مقاله افزایش توانایی روش شبکه بولتزمن به منظور مدل کردن جریان در رژیم گذرا می‌باشد. روشی که به این منظور پیشنهاد می‌شود بر این مبنا استوار است که زمان آرامش مورد استفاده در روش شبکه بولتزمن متداول، صرفاً برخورد مولکول‌ها با یکدیگر را در نظر می‌گیرد

اما در رژیم‌های لغزشی و گذرا برخورد مولکول‌ها با دیواره نیز حایز اهمیت است. در تئوری جنبشی گازها ویسکوزیته دینامیک به صورت رابطه ۶ بیان می‌شود [۱]:

$$\mu_0 = a_0 \lambda \bar{v} \rho \quad (۶)$$

که \bar{v} سرعت میانگین حرارتی و λ فاصله پویش آزاد مولکولی می‌باشند. در ترمودینامیک، دمای گاز تابعی از انرژی جنبشی ذرات گاز می‌باشد که آن نیز تابع سرعت ذرات می‌باشد. در این حالت سرعت متوسط ذرات گاز را سرعت میانگین حرارتی می‌نامند که از رابطه $\bar{v} = 1.1284 \sqrt{(2K_b T/m)}$ بدست می‌آید که K_b ثابت بولتزمن، T دما و m جرم ذرات گاز می‌باشد. استفاده از λ در رابطه بالا تا موقعی معتبر است که برخوردهای بین مولکولی پدیده غالب در انتقال ممنتوم سیال باشد (یعنی $Kn \ll 1$). اما با افزایش رقیق‌شدگی برخوردهای بین مولکولی به شدت کاهش می‌یابد و در عوض برخورد مولکولها با دیواره، پدیده غالب می‌شود تا حدی که در رژیم آزاد مولکولی صرفاً برخورد مولکولها با دیواره باید لحاظ شود.



شکل ۱- مراحل حل در روش شبکه بولتزمن

بنابراین در رژیم آزاد مولکولی ضریب دیفیوژن باید براساس طول مشخصه یعنی عرض کانال h محاسبه شود:

$$\mu_{\infty} = a_{\infty} h \bar{v} \rho \quad (7)$$

با ترکیب دو رابطه اخیر می‌توان یک رابطه مرکب برای μ بدست آورد [۱]:

$$\mu_{eff} = \frac{\mu_0}{1 + \alpha Kn} \quad (8)$$

که در رابطه ۸، μ_0 ویسکوزیته دینامیک و μ_{eff} ویسکوزیته مؤثر می‌باشند. لازم به توضیح است که ضریب $\alpha = a_0/a_{\infty}$ در این عبارت به منظور حذف دو ضریب a_0 و a_{∞} و تبدیل آن به یک ضریب به کار گرفته شده است. مقدار α ثابت نیست بلکه به Kn بستگی دارد. اما در رژیم گذرا این وابستگی ضعیف است و می‌توان مقدار ثابت $\alpha = 2.2$ را با مقایسه با نتایج DSMC [۱۷] پیشنهاد نمود. با تصحیح ویسکوزیته، پارامتر زمان آرامش نیز که تابعی از ویسکوزیته می‌باشد، به صورت رابطه ۹ اصلاح می‌گردد:

$$\tau_{eff} = \sqrt{\frac{6}{\pi} \frac{Kn}{1 + 2.2Kn}} N \quad (9)$$

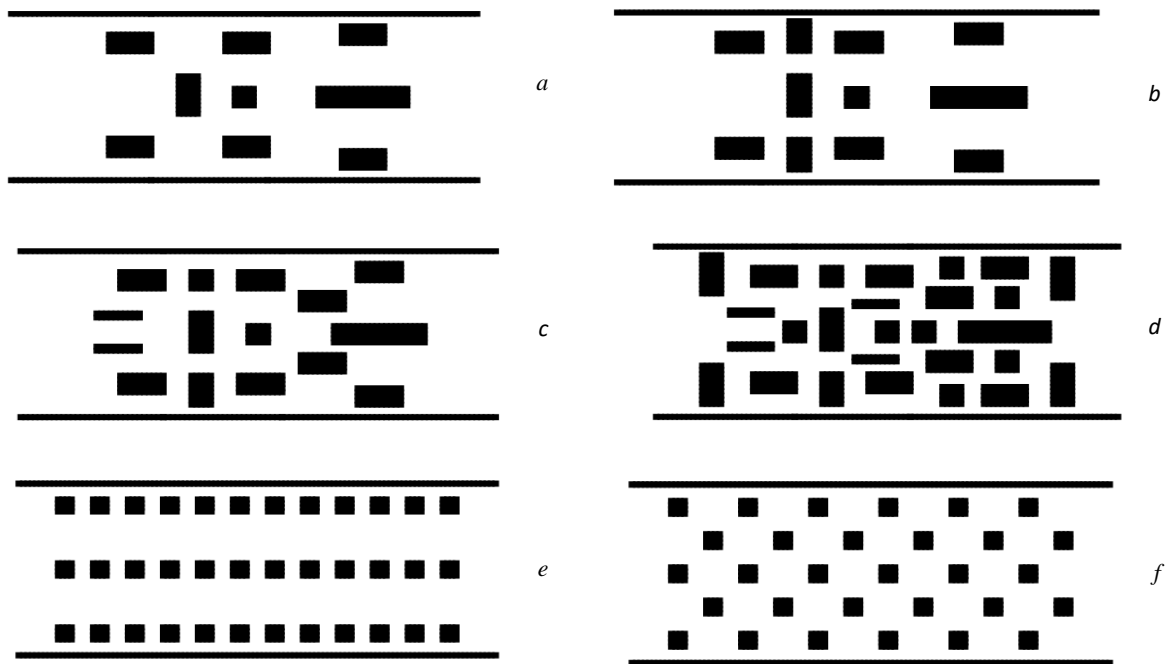
که N تعداد نقاط شبکه در راستای عرض کانال می‌باشد. لازم به ذکر است که در روش شبکه بولتزمن متداول که در این مقاله روش شبکه بولتزمن استاندارد نامیده می‌شود، زمان آرامش به صورت $\tau = \sqrt{6/\pi} Kn N$ در نظر گرفته می‌شود که تا اعداد نادسن کمتر از ۰/۱ نتایج مناسبی دارد.

۴- نتایج

در این قسمت با استفاده از مدل جدید شبکه بولتزمن که در قسمت قبل ارائه شد، جریان پوازی دما ثابت درون میکرو/نانو کانال حاوی محیط متخلخل مورد مطالعه قرار می‌گیرد. اثر تغییر طول مشخصه به صورت تغییر در عدد نادسن لحاظ شده است که از ۰/۰۲۳۶ تا ۱۰ تغییر می‌کند. محیط‌های متخلخل در نظر گرفته شده در شکل (۲) به صورت تعدادی موانع صلب است که بین دو صفحه موازی پراکنده شده‌اند.

ضریب تخلخل ε بیانگر نسبت سطح خالی به سطح کل در ساختار کانال متخلخل است و به صورت $\varepsilon = \frac{(V - V_s)}{V}$ تعریف می‌شود که V حجم کل و V_s حجم بلوک‌های جامد است. کمترین تخلخلی که در نظر گرفته شده است $\varepsilon = 0.732$ می‌باشد زیرا تخلخل‌های کمتر، منجر به واگرا شدن حل می‌شوند.

برای مدل کردن لغزش روی مرزهای جامد (دیواره کانال و مرز موانع صلب) از شرط مرزی ترکیب کمانه کردن و آینه‌ای با ضریب لغزش $s=0.7$ استفاده شده است. لازم به توضیح است که استفاده از این شرط مرزی برای مدل D_2Q_9 دارای مقداری خطا می‌باشد که این خطا با افزایش نادسن زیادتر می‌شود اما در مرجع [۱۴] نشان داده شده است که استفاده از مدل بهبود یافته این خطا را نیز کاهش می‌دهد.

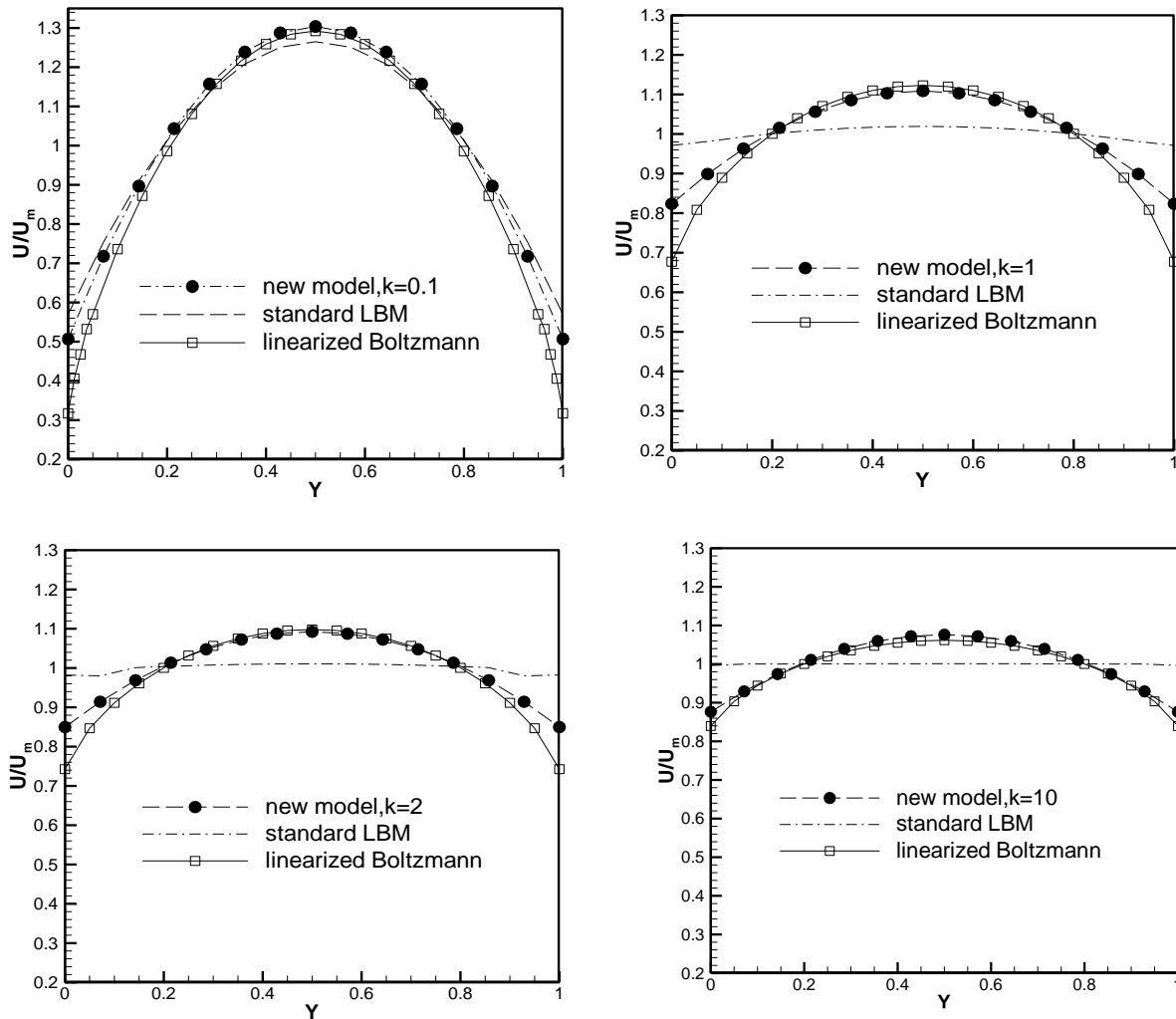


شکل ۲- ساختارهای متخلخل مورد استفاده (a) $\epsilon=0.881$ (b) $\epsilon=0.861$ (c) $\epsilon=0.825$ (d) $\epsilon=0.732$ (e) خطی $\epsilon=0.877$ (f) شطرنجی $\epsilon=0.897$

برای اعمال فشار در ورودی و خروجی کانال از شرط مرزی پیشنهاد شده توسط لیم و همکاران [۱۸] استفاده شده است تا توزیع فشار غیر خطی درون کانال را مدل نماید. در روش وی توابع توزیع نامعلوم به وسیله توابع توزیع تعادلی جایگزین می‌شوند. برای محاسبه توابع توزیع تعادلی نیازمند خواص ماکروسکوپیک هستیم. در مسئله حاضر مقادیر چگالی در ورود و خروج مشخص است و مقادیر u و v با استفاده از برون یابی مرتبه دوم از داخل دامنه حل حاصل می‌شوند.

مقدار چگالی نسبی در خروجی کانال ثابت و برابر ۱ در نظر گرفته شده است. چگالی نسبی در ورودی کانال برابر $1/1$ ، $1/5$ ، 2 ، $2/5$ و 3 در نظر گرفته شده است. از آنجا که در روش شبکه بولتزمن طبق رابطه $p = \rho RT$ فشار و چگالی با یکدیگر مرتبط هستند، بنابراین تغییر در چگالی در واقع بیانگر تغییر در فشار ورودی کانال می‌باشد. در شکل (۳) نمودار توزیع سرعت در نانوکانال خالی برای رژیم جریان گذرا رسم شده است.

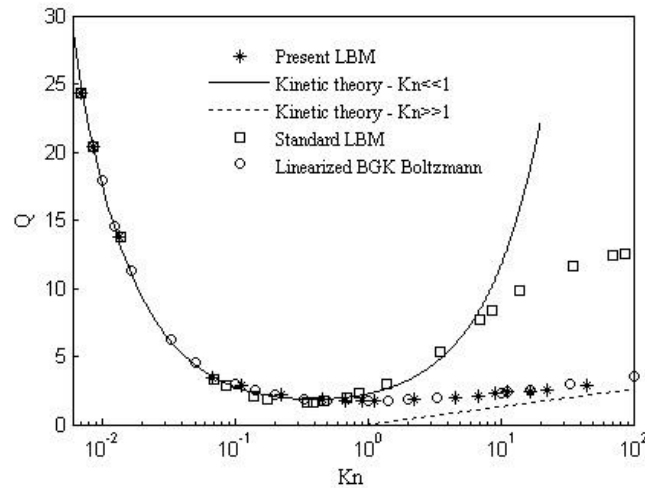
از آنجا که در بسیاری از مراجع، اعتبارسنجی نتایج جریان در میکرو و نانو کانال‌ها با مرجع [۲۰] انجام می‌گیرد، در این مقاله نتایج با نتایج همین مرجع مقایسه شده‌اند. نتایج حل معادله بولتزمن خطی شده و روش شبکه بولتزمن استاندارد نیز برای مقایسه ارائه شده‌اند. می‌توان مشاهده کرد که برخلاف روش شبکه بولتزمن استاندارد، نتایج مدل ارائه شده از تطابق خوبی با نتایج بولتزمن خطی شده برخوردار است.



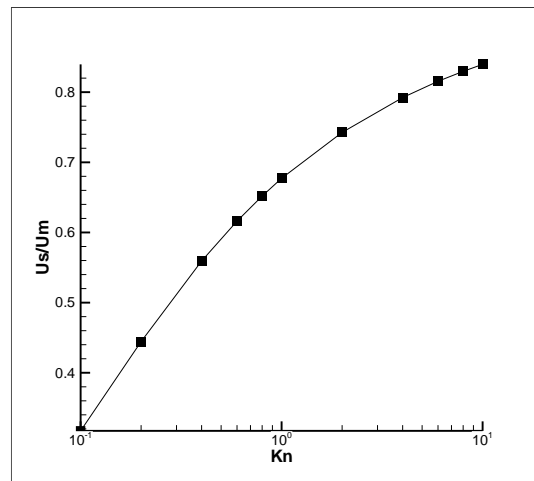
شکل ۳- توزیع سرعت در نانو کانال خالی برای رژیم گذرا

شکل (۴) دبی حجمی عبوری از کانال خالی ($\varepsilon = 1$) را نشان می‌دهد که با $\Delta p h^2 / L(\bar{p}\sqrt{RT})$ بی‌بعد شده است. همچنین نتایج حاصل از تئوری جنبشی گازها [۱۹]، بولتزمن خطی شده [۲۰] و LBM استاندارد نیز ارائه شده‌اند. در شکل می‌توان دید که برخلاف LBM استاندارد، نتایج حاصل از مدل شبکه بولتزمن ارائه شده در محدوده وسیعی از اعداد نادسن با نتایج حاصل از تئوری جنبشی گازها و معادله بولتزمن خطی شده تطابق دارد که این امر صحت عملکرد مدل ارائه شده را تصدیق می‌نماید. همچنین در مقایسه با نتایج کار قبلی [۱۴] مشخص می‌شود که علی‌رغم اینکه زمان آرامش ارائه شده در این مقاله صرفاً تابعی از عدد نادسن است، نتایج از تطابق خوبی برخوردار می‌باشند.

همانگونه که از نتایج تئوری جنبشی گازها و نتایج مدل ارائه شده در این مقاله مشاهده می‌شود با افزایش نادسن، دبی کاهش می‌یابد و در $Kn=1$ به کمترین مقدار خود رسیده و سپس افزایش می‌یابد. این پدیده به مینیمم نادسن معروف است. برخلاف روش شبکه بولتزمن استاندارد که مینیمم نادسن را در $Kn=0.4$ تخمین می‌زند، مدل جدید توانسته است این پدیده را بخوبی در $Kn=1$ پیش بینی نماید.



شکل ۴- دبی حجمی بر حسب نادسن برای کانال خالی



شکل ۵- سرعت لغزشی روی دیواره‌های کانال بر حسب عدد نادسن

در شکل (۵) نمودار سرعت لغزشی بی بعد شده با سرعت متوسط، رسم شده است. با افزایش نادسن سرعت لغزشی نیز افزایش یافته است اما شیب افزایش سرعت لغزشی با افزایش نادسن کاهش می‌یابد. برای جریان‌های خزشی با رینولدزهای کم ($Re \leq 1$) در محیط‌های متخلخل قانون دارسی بیانگر رابطه بین دبی حجمی و گرادیان فشار می‌باشد:

$$q = -\frac{k dp}{\mu dx} \quad (10)$$

که در رابطه فوق k نفوذپذیری محیط متخلخل می‌باشد. برای جریان‌های تراکم پذیر با توجه به اینکه گرادیان فشار ثابت نیست نفوذپذیری متوسط را می‌توان از رابطه ۱۱ محاسبه نمود [۲۱]:

$$k = \frac{2\mu L q p_0}{p_i^2 - p_o^2} \quad (11)$$

که p_o و p_i به ترتیب بیانگر فشار ورودی و خروجی می‌باشند.

جدول ۱- بررسی استقلال نتایج از شبکه حل

شبکه	$K(m^2)$
40×100	4.74×10^{-15}
120×300	3.66×10^{-15}
240×600	3.19×10^{-15}
480×1200	3.22×10^{-15}

در جدول (۱) نفوذپذیری محاسبه شده برای کانال حاوی محیط متخلخل با تخلخل $\varepsilon = 0.825$ در حالت $Kn = 0.0236$ و فشار متوسط $\bar{p} = 1.05 \times 10^5 Pa$ (چگالی ورودی ۱ و چگالی خروجی ۱/۱) به ازای تعداد مش‌های مختلف نشان داده شده است. مشخص می‌شود که نتایج برای شبکه 240×600 همگرا می‌شوند. لازم به ذکر است که برای هر هندسه مورد نظر، عدد نادسن و چگالی ورودی و خروجی به کد محاسباتی داده شده و به کمک کد، سرعت متوسط خروجی از کانال محاسبه می‌شود. سپس به کمک رابطه ۱۱ نفوذپذیری محاسبه می‌شود.

جدول (۲) و (۳) به ترتیب نفوذپذیری نانو کانال خالی، $\varepsilon = 1$ ، و نانو کانال متخلخل با $\varepsilon = 0.825$ را در فشار متوسط $p = 1.05 \times 10^5 pa$ ارائه می‌کنند. در این جداول، نتایج حاصل از مدل ارائه شده در این مقاله با نتایج حاصل از روش شبکه بولتزن استاندارد [۲۲] مقایسه شده‌اند. برای اعداد نادسن کمتر از ۰/۱، نتایج از تطابق خوبی برخوردار هستند که بیانگر صحت عملکرد مدل ارائه شده می‌باشد اما با افزایش Kn ، انحراف بین نتایج بدست آمده از LBM استاندارد و LBM اصلاح شده افزایش می‌یابد که این امر به خاطر آن است که مدل شبکه بولتزن استاندارد صرفاً در محدوده رژیم لغزشی ($Kn < 0.1$) معتبر است.

جدول ۲- نفوذپذیری ساختار متخلخل با $\varepsilon = 1$

نادسن خروجی	LBM استاندارد (m^2)	کار حاضر (m^2)
$kn_o = 0.0236$	1.21×10^{-13}	1.202×10^{-13}
$kn_o = 0.055$	1.48×10^{-13}	1.46×10^{-13}
$kn_o = 0.1$	1.8×10^{-13}	1.69×10^{-13}

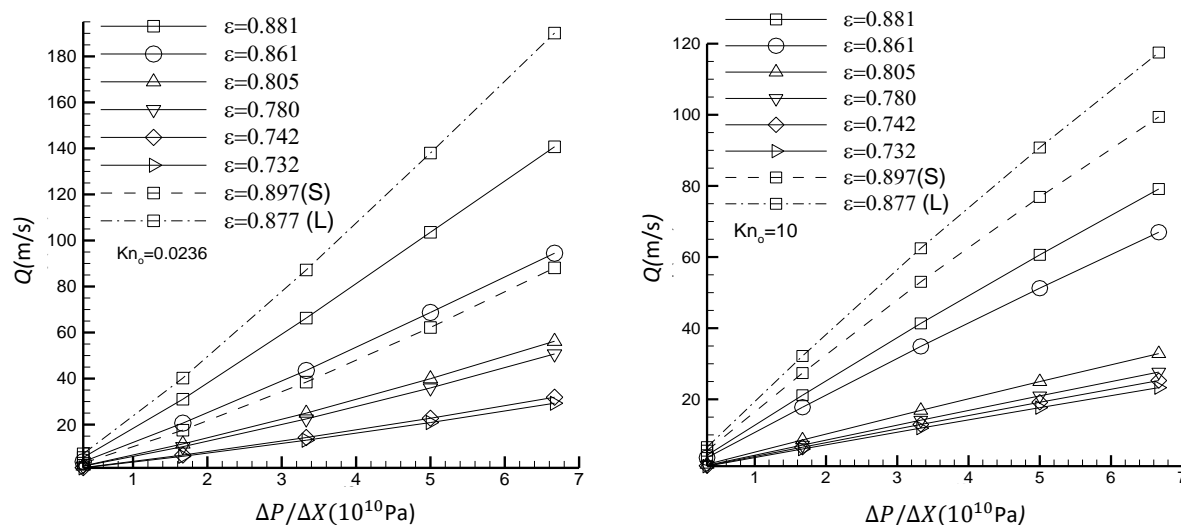
جدول ۳- نفوذپذیری ساختار متخلخل با $\varepsilon = 0.825$

کار حاضر (m^2)	LBM استاندارد (m^2)	نادسن خروجی
3.19×10^{-15}	3.26×10^{-15}	$kn_o = 0.0236$
5.72×10^{-15}	6.52×10^{-15}	$kn_o = 0.055$
9.42×10^{-15}	10.97×10^{-15}	$kn_o = 0.1$

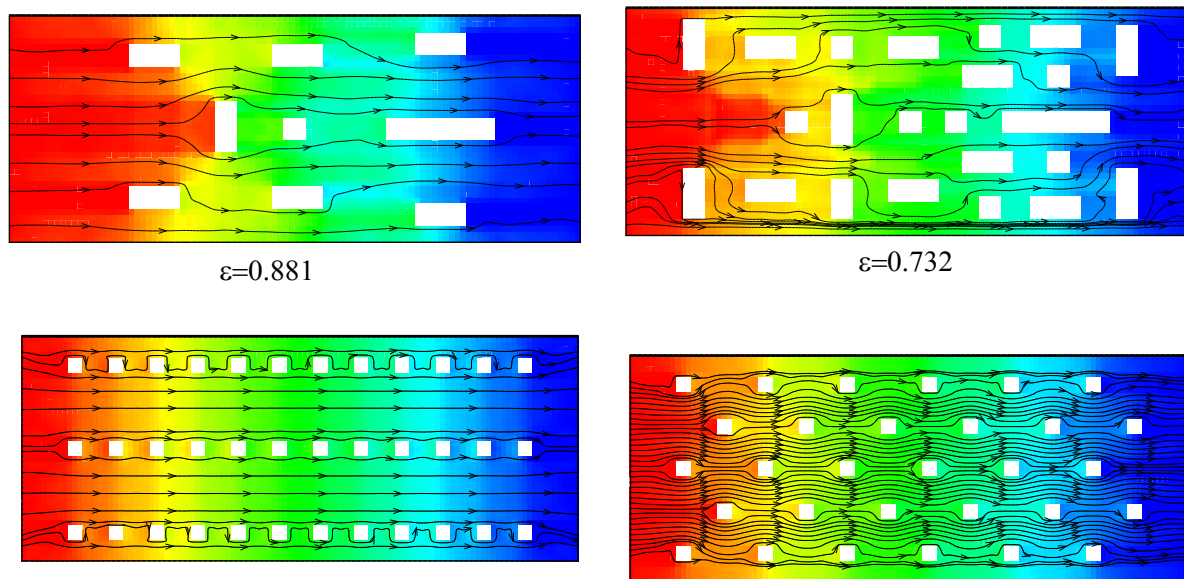
در شکل (۶) نمودار دبی بر حسب اختلاف فشار برای تخلخل‌های مختلف نشان داده شده است. چگالی نسبی خروجی کانال برابر ۱ است و تغییر در فشار به کمک تغییر در چگالی ورودی کانال مدل می‌شود. چگالی نسبی ورودی کانال برابر ۱/۱، ۱/۵، ۲، ۲/۵ و ۳ در نظر گرفته شده است. نتایج مربوط به دو محیط متخلخل همراستا و شطرنجی نیز در شکل به ترتیب با حروف L و S نشان داده شده‌اند. همان گونه که مشاهده می‌شود نتایج از حالت خطی تبعیت می‌نمایند که این امر نشان می‌دهد که مدل ارائه شده توانسته است بخوبی جریان داری را مدل نماید. با افزایش تخلخل موانع موجود در مسیر جریان کمتر می‌شود و دبی حجمی افزایش می‌یابد اما در تخلخل‌های کمتر این افزایش کمتر اتفاق می‌افتد.

همچنین مشاهده می‌شود که علی‌رغم اینکه محیط متخلخل همراستا از تخلخل کمتری نسبت به حالت شطرنجی ($\varepsilon=0.897$) و حالت $\varepsilon=0.881$ برخوردار است ولی دبی حجمی آن بیشتر است. این امر بدان علت است که در این حالت انحنای خطوط جریان کمتر است. با کاهش انحنای خطوط جریان، افت انرژی کمتری اتفاق افتاده و دبی بیشتر می‌گردد.

در شکل (۷) کانتور فشار و خطوط جریان برای چهار محیط متخلخل نشان داده شده است. رنگ قرمز نشان دهنده فشار بیشتر و رنگ آبی معرف فشارهای کمتر می‌باشد. با حرکت از چپ به راست فشار کاهش می‌یابد. در سمت چپ موانع نقطه سکون ایجاد شده و سرعت کاهش یافته و فشار افزایش می‌یابد. وجود این موانع باعث افزایش شدید افت فشار نسبت به کانال خالی می‌شود. همچنین خزشی بودن جریان کاملاً قابل مشاهده است زیرا خطوط جریان به صورت مماس بر دیواره موانع حرکت می‌کنند و هیچ گردابه‌ای تشکیل نمی‌شود. خزشی بودن جریان نشان می‌دهد که رژیم جریان در محیط متخلخل از نوع رژیم داری می‌باشد. در رژیم فورشیمر، به علت تشکیل گردابه پشت موانع، نمودار دبی بر حسب گرادیان فشار از حالت خطی خارج می‌شود.



شکل ۶- نمودار دبی بر حسب اختلاف فشار برای تخلخل‌های مختلف



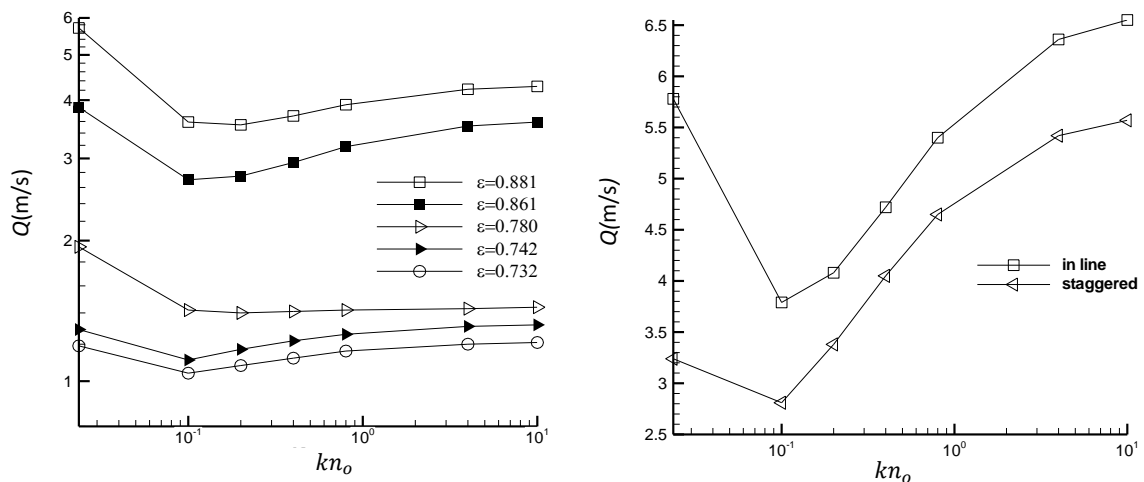
شکل ۷- کانتور فشار و خطوط جریان

اثر عدد نادسن بر دبی حجمی در فشار متوسط $\bar{P} = 1.05 \times 10^5 \text{ pa}$ در شکل (۸) نشان داده شده است. افزایش Kn موجب افزایش لغزش شده که به افزایش دبی منجر می‌شود. از طرف دیگر طبق رابطه ۹ افزایش Kn موجب افزایش ویسکوزیته موثر افزایش می‌یابد که به کاهش دبی منجر می‌شود. نتیجه نهایی این است که با افزایش عدد نادسن، دبی ابتدا کاهش می‌یابد و در نادسن ۰/۱ به حداقل خود می‌رسد و سپس افزایش می‌یابد. این پدیده مینیمم نادسن نامیده می‌شود. برای جریان در کانال‌های خالی ($\epsilon = 1$) این پدیده در $Kn = 1$ اتفاق می‌افتد اما همانطور که در این شکل قابل مشاهده است، در ساختارهای متخلخل برخوردهای

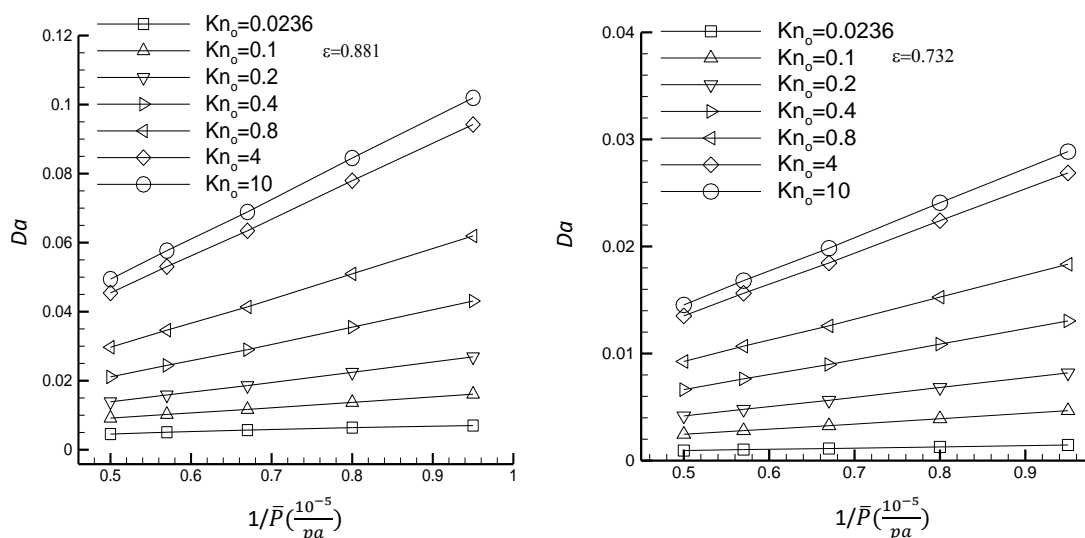
مولکولی با دیواره‌ها از اهمیت بیشتری برخوردار است. بنابراین افزایش ویسکوزیته موثر بیشتر است و اثر مینیمم نادسن در اعداد نادسن کمتر اتفاق می‌افتد. در نتیجه اثر مینیمم نادسن به تخلخل و ساختار مواد متخلخل بستگی دارد.

عدد دارسی، Da ، بیانگر نفوذپذیری بدون بعد است که از رابطه $Da = k/h^2$ محاسبه می‌شود که h عرض کانال می‌باشد. کلینکنبرگ [۲۳] بیان می‌کند که برای جریان در محیط‌های متخلخل در مقیاس میکرو و نانو عدد دارسی با معکوس فشار نسبت خطی دارد. نمودار Da بر حسب معکوس فشار متوسط در شکل (۹) نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می‌شود Da بر حسب $1/\bar{p}$ به صورت خطی تغییر می‌کند که بخوبی بیانگر پدیده کلینکنبرگ می‌باشد.

با مشاهده نمودارهای شکل (۹) متوجه می‌شویم که در اختلاف فشار ثابت Da با افزایش Kn افزایش می‌یابد. علت این موضوع آن است که با افزایش Kn لغزش روی مرزهای صلب و همچنین رقیق‌شدگی افزایش می‌یابد و درگ اصطکاکی کاهش می‌یابد و دبی حجمی بیشتر می‌شود. بنابراین نفوذپذیری محیط متخلخل و به تبع آن Da افزایش می‌یابد. همچنین با توجه به شکل متوجه می‌شویم که نفوذپذیری محیط متخلخل با افزایش فشار متوسط، کاهش می‌یابد و این امر در مورد نادسن‌های بزرگتر، شدیدتر است. علت آن است که طبق رابطه $Kn = Kn_0 p_0 / p$ با کاهش فشار از ورودی کانال تا خروجی کانال، Kn افزایش می‌یابد تا اینکه در خروجی کانال به مقدار ماکزیمم خود می‌رسد. بنابراین با افزایش فشار متوسط در کانال رقیق‌شدگی کاهش یافته و به عبارت دیگر مقاومت در برابر جریان افزایش یافته و نفوذپذیری کمتر می‌شود. از طرف دیگر هر چه که Kn_0 بیشتر باشد کاهش Kn از خروجی کانال به سمت ورودی کانال بیشتر بوده و نفوذپذیری بیشتر دچار کاهش می‌شود. نکته مهم دیگری که با توجه به نمودارها مشخص می‌شود آن است که با کاهش تخلخل، تأثیر Kn روی نفوذپذیری گاز بیشتر می‌گردد. به عنوان مثال برای محیط متخلخل با $\epsilon = 0.881$ در فشار متوسط $\bar{p} = 1.05 \times 10^5 \text{ Pa}$ نسبت Da دو حالت $Kn_0 = 10$ و $Kn_0 = 0.023$ برابر $14/54$ می‌باشد در صورتی که برای $\epsilon = 0.732$ این نسبت برابر $19/77$ است.



شکل ۸- اثر مینیمم نادسن در محیط‌های متخلخل



شکل ۹- نمودار Da بر حسب معکوس فشار متوسط

این ویژگی را به این صورت می‌توان توجیه نمود که وقتی تخلخل کاهش می‌یابد، مساحت سطح موانع صلب افزایش می‌یابد و تأثیر لغزش روی سطوح جامد بیشتر می‌گردد که این امر باعث کاهش مقاومت در برابر جریان می‌گردد. بنابراین در نظر نگرفتن پدیده رقیق‌شدگی بخصوص در تخلخل‌های کم باعث ایجاد خطای فاحشی در محاسبات می‌گردد.

مهم‌ترین روابط برای محاسبه افت فشار سیال در محیط متخلخل، روابط ارگان (معادله ۱۲) [۲۴] و کارمن-کوزنی (معادله ۱۳) [۲۵] هستند.

$$\frac{\Delta p}{L} \frac{D_p}{\rho_i u_i^2} \frac{\varepsilon^3}{(1-\varepsilon)} = 150 \frac{\mu(1-\varepsilon)}{\rho_i u_i D_p} + 1.75 \quad (12)$$

$$\frac{\Delta p}{L} \frac{D_p}{\rho_i u_i^2} \frac{\varepsilon^3}{(1-\varepsilon)} = 180 \frac{\mu(1-\varepsilon)}{\rho_i u_i D_p} \quad (13)$$

در این روابط، ρ_i و u_i به ترتیب بیانگر چگالی و سرعت متوسط ورودی می‌باشند و D_p قطر معادل ذرات می‌باشد. ابتدا بایستی مقدار قطر معادل جسم، D_p محاسبه گردد.

بایستی تذکر داد که روابط ۱۲ و ۱۳ قادر به محاسبه افت فشار جریان‌های پیوسته و تراکم ناپذیر با $Kn \leq 0.001$ می‌باشند. بنابراین برای محاسبه D_p ، از روشی که در مرجع [۲۲] ارائه شده است، استفاده می‌نماییم. یک جریان غیر قابل تراکم کانتینیوم با $Kn = 0.001$ و $\Delta P = 0.1 \times 10^5 pa$ در نظر گرفته شود و u_i با استفاده از روش LBM محاسبه گردید.

جدول (۴) مقادیر قطر معادل را نمایش می‌دهد، که از مقایسه نتایج محاسبه شده با معادله ۱۳ محاسبه گردیده است. شکل (۱۰) افت فشار بی‌بعد شده را برحسب عدد رینولدز برای تخلخل‌های مختلف نشان می‌دهد. نتایج افت فشار محاسبه شده توسط روابط ۱۲ و ۱۳ نیز جهت مقایسه ارائه شده‌اند.

نتایج نشان می‌دهند که در رینولدز یکسان، با افزایش ناسن، افت فشار درون نانو کانال متخلخل کاهش می‌یابد زیرا لغزش سرعت روی مرزهای صلب افزایش یافته و در نتیجه ضریب اصطکاک کاهش می‌یابد که این موضوع افت فشار درون نانو کانال را کاهش می‌دهد. این موضوع در تطابق با نتایج بدست آمده در مرجع [۲۶] می‌باشد. در رینولدزهای پایین به علت وجود لغزش و پدیده رقیق‌شدگی، افت فشار کمتر از مقداری است که توسط روابط ارگان و کارمن-کوزنی پیش‌بینی می‌شود اما با افزایش رینولدز اختلاف بین افت فشارهای بی‌بعد کاهش یافته و به مقادیر پیش‌بینی شده توسط این روابط نزدیک می‌شوند.

افزایش عدد رینولدز بوسیله افزایش فشار در ورودی کانال ایجاد می‌شود که باعث کاهش Kn متوسط در طول کانال می‌شود. به عبارت دیگر افزایش رینولدز باعث می‌شود که اعداد ناسن متوسط به هم نزدیکتر شوند و لذا افت فشارهای مربوطه نیز به هم نزدیک می‌شوند. این روند ادامه دارد تا اینکه در رینولدزهای بالاتر، افت فشار از مقادیر پیش‌بینی شده توسط روابط ارگان و کارمن-کوزنی بیشتر می‌شود. این امر به آن علت است که روابط ارگان و کارمن-کوزنی متعلق به محدوده جریان تراکم‌ناپذیر هستند. بنابراین با در نظر گرفتن تأثیرات تراکم‌پذیری، بی‌بعد سازی افت فشار را می‌توان مطابق شکل (۱۱) انجام داد.

لازم به ذکر است که در جریان‌های میکرو و نانو توزیع فشار درون کانال از حالت خطی خارج شده و به نوعی اثرات تراکم‌پذیری در آنها ظاهر می‌شود. بنابراین با مقایسه روابط ۱۱ و ۱۲ می‌توان محور عرض‌ها را مطابق شکل (۱۱) بازنویسی نمود. با توجه به شکل مشاهده می‌شود که افت فشارها همواره کمتر از مقادیر پیش‌بینی شده توسط روابط ۱۲ و ۱۳ بدست می‌آیند.

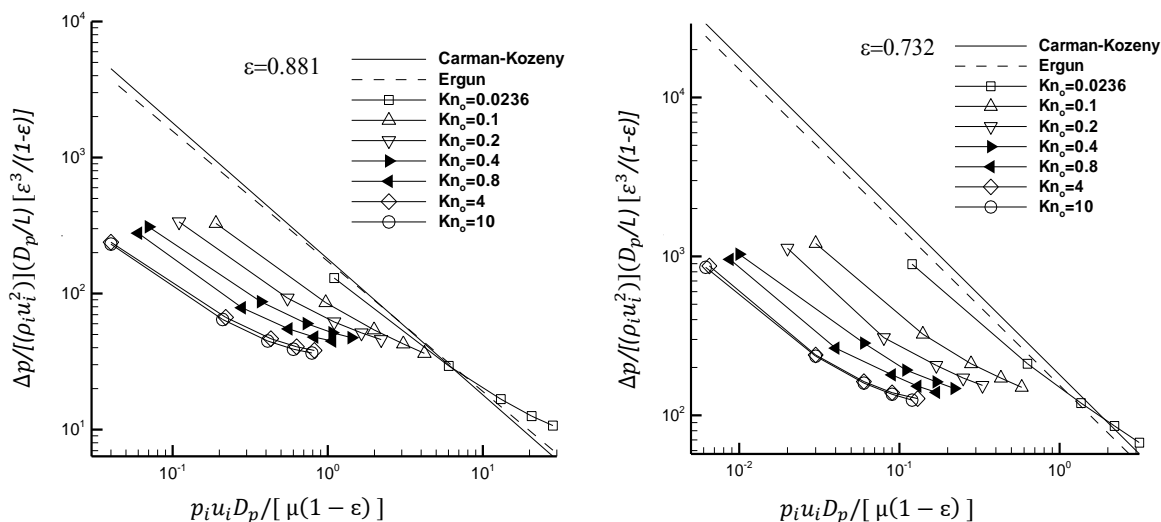
۵- نتیجه‌گیری

در این مقاله مدل جدیدی از روش شبکه بولتزمن برای مطالعه جریان در میکرو و نانو کانال‌های حاوی محیط متخلخل ارائه شده است که قادر است اثرات پدیده رقیق‌شدگی را در بازه وسیعی از اعداد ناسن (منطبق با رژیم لغزشی و گذرا) مورد بررسی قرار دهد. در این مقاله با استفاده از مدل شبکه بولتزمن ارائه شده، اثر پارامترهای مختلف نظیر عدد ناسن و تخلخل بر نفوذپذیری و توزیع فشار جریان در نانو کانال‌ها در رژیم لغزشی و گذرا مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج بدست آمده نشان می‌دهند که:

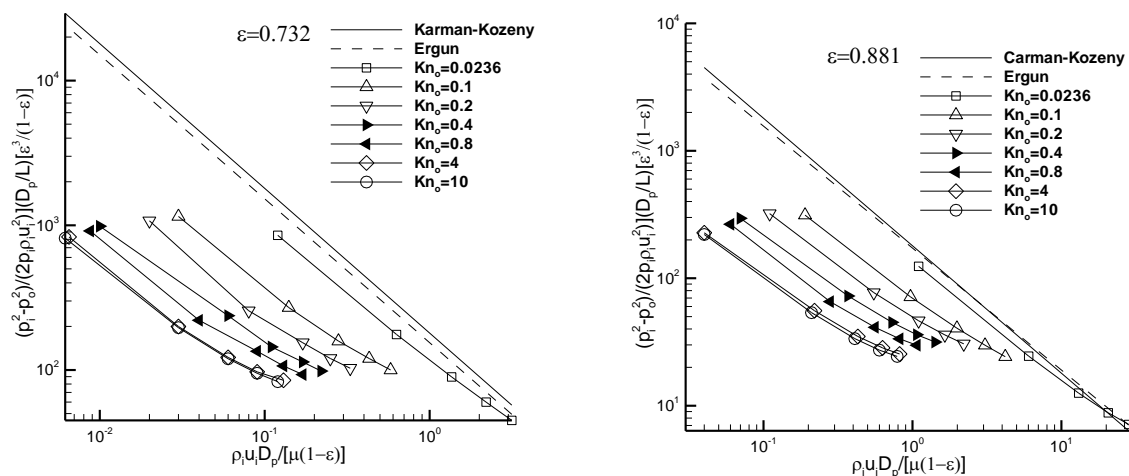
- ۱- اثر مینیمم ناسن تابع تخلخل و نحوه قرار گرفتن موانع در جریان می‌باشد به گونه‌ای که برای نانوکانال حاوی محیط متخلخل، بجای ناسن ۱ در ناسن 0.1 اتفاق می‌افتد.
- ۲- برای محیط‌های متخلخل مشابه، عدد داری با افزایش عدد ناسن افزایش می‌یابد.
- ۳- در تمام رژیم‌های جریان Da بر حسب $1/\bar{p}$ به صورت خطی تغییر می‌کند که بخوبی بیانگر پدیده کلینکنبرگ می‌باشد.
- ۴- با کاهش تخلخل، تأثیر Kn روی نفوذپذیری گاز بیشتر می‌گردد.
- ۵- به دلیل سرعت لغزشی بر روی مرزهای صلب، افت فشار کمتر از مقادیری است که توسط معادلات ارگان و کارمن-کوزنی محاسبه می‌شود.

جدول ۴- قطر معادل ساختارهای متخلخل

ε	0.881	0.861	0.805	0.780	0.742	0.732	In Line	staggered
D_p (μm)	0.17	0.16	0.18	0.19	0.19	0.20	1.2	7.6



شکل ۱۰- افت فشار بی بعد بر حسب عدد رینولدز



شکل ۱۱- افت فشارها با در نظر گرفتن تراکم پذیری بر حسب عدد رینولدز

مراجع

- [1] Karniadakis, G., Beskok, A., and Aluru, N., “*Microflows and Nanoflows Fundamentals and Simulation*”, Springer Inc., USA, (2005).
- [2] Nazari, M., Kayhani, M. H., and Anaraki Haji Bagheri, A., “Comparison of Heat Transfer in a Cavity between Vertical and Horizontal Porous Layers using LBM”, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 13, No. 8, pp. 93-107, (2013).
- [3] Liu, X., and Guo, Z., “Lattice Boltzmann Study of Gas Flows in a Long Micro-channel”, *Computers & Mathematics with Applications*, Vol. 65, No. 2, pp. 186–193, (2013).
- [4] Zhang, J., “Lattice Boltzmann Method for Microfluidics: Models and Applications”, *Microfluidics and Nanofluidics*, Vol. 10, pp. 1-28, (2011).
- [5] Guo, Z., Shi, B., and Zheng, C., “Velocity Inversion of Micro Cylindrical Couette Flow: A Lattice Boltzmann Study”, *Computers & Mathematics with Applications*, Vol. 61, No. 12, pp. 3519–3527, (2011).
- [6] Meng, J., and Zhang, Y., “Accuracy Analysis of High-order Lattice Boltzmann Models for Rarefied Gas Flows”, *J. Computational Physics*, Vol. 230, No. 3, pp. 835–849, (2011).
- [7] Shan, X., Yuan, X. F., and Chen, H., “Kinetic Theory Representation of Hydrodynamics: a Way Beyond Navier-Stokes Equation”, *J. Fluid Mechanics*, Vol. 550, pp. 413-441, (2006).
- [8] Chikatamarla, S. S., and Karlin, I. V., “Entropy and Galilean Invariance of Lattice Boltzmann Theories”, *Physical Review Letters*, Vol. 97, No. 19, (2006).
- [9] Ansumali, S., Karlin, I. V., Arcidiacono, S., Abbas, A., and Prasianakis, N. I., “Hydrodynamics Beyond Navier-Stokes: Exact Solution to the Lattice Boltzmann Hierarchy”, *Physical Review Letters*, Vol. 98, 124502, (2007).
- [10] Zhang, Y. H., Gu, X. J., Barber, R. W., and Emerson, D. R., “Capturing Knudsen Layer Phenomena using a Lattice Boltzmann Model”, *Physical Review E*, Vol. 74, 046704, (2006).
- [11] Kim, S. H., Pitsch, H. P., and Boyd, I. D., “Accuracy of Higher-order Lattice Boltzmann Methods for Microscale Flows with Finite Knudsen Numbers”, *J. Computational Physics*, Vol. 227, pp. 8655-8671, (2008)
- [12] Tang, G. H., Zhang, Y. H., and Emerson, D. R., “Lattice Boltzmann Models for Nonequilibrium Gas Flows”, *Physical Review E*, Vol. 77, 046701, (2008).
- [13] Tang, G. H., Zhang, Y. H., Gu, X. J., and Emerson, D. R., “Lattice Boltzmann Modeling Knudsen Layer Effect in Non-Equilibrium Flows”, *EPL*, Vol. 83, 40008, (2008).

- [14] Homayoon, A., Meghdadi Isfahani, A. H., Shirani, E., and Ashrafizadeh, M., "A Novel Modified Lattice Boltzmann Method for Simulation of Gas Flows in Wide Range of Knudsen Numbers", *International Communications in Heat and Mass Transfer*, Vol. 38, pp. 827–832, (2011).
- [15] He, X. Y., Chen, S. Y., and Doolen, G. D., "A Novel Thermal Model for the Lattice Boltzmann Method in Incompressible Limit", *J. Computational Physics*, Vol. 146, pp. 282-300, (1998).
- [16] Succi, S., "Mesoscopic Modeling of Slip Motion at Fluid-solid Interfaces with Heterogeneous Catalysis", *Physical Review Letters*, Vol. 89, 064502, (2002).
- [17] Polard, W. G., and Present, R. D., "On Gaseous Self-diffusion in Long Capillary Tubes", *Physical Review*, Vol. 73, No. 7, pp. 762-774, (1948).
- [18] Lim, C. Y., Shu, C., Niu, X. D., and Chew Y. T., "Application of Lattice Boltzmann Method to Simulate Micro Channel Flows", *J. Physics of Fluids*, Vol. 14, pp. 2299-2308, (2002).
- [19] Cercignani, C., "*The Boltzmann Equations and its Applications*", Springer-Verlag, New York, (1988).
- [20] Ohwada, T., Sone, Y., and Aoki, K., "Numerical Analysis of the Poiseuille and Thermal Transpiration Flows between Two Parallel Plates on the Basis of the Boltzmann Equation for Hard Sphere Molecules", *J. Physics of Fluids A*, Vol. 1, No. 12, pp. 2042-2049, (1989).
- [21] Scheidegger, A. E., "*The Physics of Flow Through Porous Media*", Third ed. University of Toronto Press, (1972).
- [22] Tang, G. H., Tao, W. Q., and He, Y. L., "Gas Slippage Effect on Microscale Porous Flow using the Lattice Boltzmann Method", *Physical Review E*, Vol. 72, 056301, (2005).
- [23] Klinkenberg, L. J., "The Permeability of Porous Media to Liquids and Gases", *American Petroleum Inst., Drilling and Productions Practices*, New York, (1941).
- [24] Ergun, S., "Fluid Flow Through Packed Columns", *Chemical Engineering Progress*, Vol. 48, No. 89, pp. 89-94, (1952).
- [25] Bear, J., "*Dynamic of Fluids in Porous Media*", Elsevier Publishing Company, Amsterdam, (1972).
- [26] Shokouhmand, H., Meghdadi Isfahani, A. H., and Shirani, E., "Friction and Heat Transfer Coefficient in Micro and Nano Channels Filled with Porous Media for Wide Range of Knudsen Number", *International Communications in Heat and Mass Transfer*, Vol. 37, pp. 890–894, (2010).

فهرست نمادهای انگلیسی

c	سرعت در سیستم ابعاد شبکه بولتزمن
C_s	سرعت صوت
Da	ضریب دارسی
D_p	متوسط قطر موانع صلب
e_α	بردار یکه جهت‌های شبکه بولتزمن
f	تابع احتمال حضور ذره
g	تابع توزیع احتمال انرژی داخلی
H	عرض
k	نفوذپذیری m^2
Kn	عدد نادسن
L	طول
\dot{M}	دبی جرمی
M	عدد ماخ
N	تعداد نقاط شبکه در راستای طول مشخصه
p	فشار
Q	دبی حجمی
R	ثابت گاز
Re	عدد رینولدز
S	نسبت سطح جانبی موانع صلب به حجم کل
u	سرعت افقی
\bar{u}	میانگین سرعت افقی
V	حجم
\bar{v}_m	سرعت میانگین مولکولی

Abstract

The standard Lattice Boltzmann Method, LBM, is usually able to predict the results of micro scale flows which are corresponding to the slip flow regime, while it has not sufficient accuracy for nano scale flows which are corresponding to the transition flow regime. In this paper, by improving the lattice Boltzmann method, pressure driven flow through non-porous nano channels and nano channels filled with porous media has been modeled for wide range of Knudsen numbers, Kn, covering the slip and transition regimes. The results show that the presented lattice Boltzmann model is able to predict the flow features in micro and nano scales for wide range of Knudsen numbers by modifying the relaxation time. In the presented research, the effects of the Knudsen number and porosity on the flow rate, Darcy number and pressure drop are reported. Also, for the first time, the Knudsen's minimum effect for micro/nano channels filled with porous media is observed and evaluated.

For the pressure driven flows in non-porous channels this effect occurs at $Kn=1$, while the results show that for the nano channels filled with porous media this effect occurs at $Kn=0.1$ because of the tortuosity effects.