

روش شبکه‌ی بولتسمان و کاربردهای آن در شبیه‌سازی‌های CFD

سیدمحسن میراحمدی، سیدحسن هاشم‌آبادی*

تهران، دانشگاه علم و صنعت ایران، دانشکده مهندسی شیمی، آزمایشگاه تحقیقاتی CFD

پیام‌نگار: hashemabadi@iust.ac.ir

چکیده

دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) بعنوان ابزاری توانمند جهت شبیه‌سازی رفتار جریانهای مختلف به منظور طراحی یا رفع مشکلات فرایندی در سالهای اخیر مورد توجه محققین و صنعتگران قرار گرفته است. در کنار مزایای گسترده‌ای که شبیه‌سازی‌های CFD دارد، وقتگیر بودن محاسبات و تولید هندسه محاسباتی مخصوصاً در ساختارهای هندسی پیچیده، مانند محیط‌های متخلخل، از مشکلات آن است. از اینرو تعدادی از کارهای جدید تحقیقاتی برای توسعه دیگر روش‌های محاسباتی به منظور رفع این مشکل، اختصاص داده شده است. شبکه بولتسمان (LBM) یکی از این روش‌ها است. در کار حاضر، روش شبکه‌ی محاسباتی بولتسمان به عنوان رویکرد جدید معرفی شده و محدودیت‌ها، مزایا و تفاوت‌های آن با روش‌های محاسباتی مرسوم در CFD به طور خلاصه بررسی شده است. در پایان به تعدادی از کاربردهای این دیدگاه محاسباتی، به ویژه در محیط‌های متخلخل اشاره شده است.

کلمات کلیدی: دینامیک سیالات محاسباتی (CFD)، رویکرد میان مقیاس، شبکه‌ی بولتسمان

۱- مقدمه

یک انجام داده است. با بررسی کلی این تلاش‌ها می‌توان سه دیدگاه کلی در دینامیک سیالات محاسباتی مشخص کرد: (این تقسیم‌بندی در دینامیک سیالات تحلیلی نیز معتبر است).

مطالعه‌ی حرکت سیال و قوانین حاکم بر آن از دیر باز مورد توجه دانشمندان بوده و در این مسیر تلاش‌های زیادی انجام شده است. این مطالعات به سه روش انجام می‌شود:

۱-۱ دیدگاه درشت مقیاس

در این دیدگاه برای توصیف دینامیک سیال از کمیت‌های توده‌ای سیال، مانند فشار و سرعت استفاده می‌شود. در این دیدگاه برای توصیف رفتار سیال با استفاده از روش‌های عددی باید ابتدا با برقراری موازنه‌ی جرم، مومنتوم و [در صورت نیاز] انرژی، معادلات حاکم بر سیستم مشخص شوند. خروجی این مرحله یک دستگاه معادلات دیفرانسیل پاره‌ای است که در مرحله‌ی بعد باید به روش عددی حل شود. حل عددی معمولاً نیاز به گسسته‌سازی مکانی و

۱. روش تحلیلی
۲. روش تجربی
۳. روش محاسباتی (عددی)
طبیعت پیچیده‌ی حرکت سیال باعث شده است که مطالعات تحلیلی و تجربی برای فهم کامل این پیچیدگی‌ها کافی نباشد؛ از این رو نیاز به استفاده از روش‌های عددی (دیدگاه محاسباتی) هر روز بیش از پیش نمایان می‌شود. پاتانکار [۱] مقایسه‌ی جامعی در مورد روش‌های مختلف مطالعه‌ی سیال و مزایا و محدودیت‌های هر

در صورت نیاز] زمانی مسأله دارد. این مرحله عموماً به نام ایجاد شبکه‌ی محاسباتی^۱ شناخته می‌شود. در استفاده از این دیدگاه باید به نکات زیر توجه شود:

۱- «پیوستگی سیال» فرض اساسی در استفاده از این دیدگاه است. قبول این فرض به این معناست که فاصله‌ی پویش آزاد مولکولی^۲ در مقایسه با کوچک‌ترین طول مشخصه‌ی جریان، قابل صرف‌نظر کردن است. در صورت درستی این فرض می‌توان از پیوستگی توابع خواص فیزیکی سیال مطمئن شد و معادلات پیوستگی و (ناویر-استوکس) را به دست آورد. درستی این فرض با توجه به عدد بدون بعد نادسن^۳ بررسی می‌شود:

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

مقدار عدد نادسن معیاری از امکان اعمال این دیدگاه در توصیف دینامیک سیال است. اگر مقدار عدد نادسن کمتر از ۰/۰۰۱ باشد رژیم جریانی سیال را می‌توان پیوسته در نظر گرفت. با افزایش عدد نادسن تا ۰/۱، رژیم جریان لغزنده^۴ حاکم می‌شود؛ در این صورت می‌توان با استفاده از شرط جریان لغزان در مرزها از معادلات ناویر استوکس استفاده کرد. اگر مقدار عدد نادسن بزرگتر از ۱۰ شود، جریان آزاد مولکولی^۵ در سیستم برقرار است [۳ و ۴].

محاسبات نشان می‌دهند که در برخی کاربردهای مهندسی مانند سامانه‌های الکترومکانیکی بسیار ریز^۶ فرض پیوستگی سیال نادرست است و برای استفاده از این معادلات باید تغییراتی در آنها به وجود آورد [۴].

۲- حل عددی دستگاه معادلات پاره‌ای سختی‌های خاص خود را دارد که در کتاب‌های آنالیز عددی و دینامیک سیالات محاسباتی به تفصیل بررسی شده است. روش‌های عددی مرسوم، بیشتر اوقات، دستگاه معادلات پاره‌ای را به یک دستگاه معادلات جبری تبدیل می‌کنند که هرچند حل آن بسیار ساده‌تر

شده اما باز هم از نظر محاسباتی سنگین و وقت‌گیر است. ۳- سه مرحله‌ی حل عددی یعنی تعریف مسأله و نوشتن معادلات حاکم، ایجاد شبکه‌ی محاسباتی و حل دستگاه معادلات ایجاد شده کاملاً از هم مجزا هستند. به این معنا که معادلات برای یک محیط پیوسته (تمام دامنه‌ی حل) نوشته می‌شوند اما از آن‌جایی که امکان محاسبه‌ی مقادیر در همه‌ی نقاط دامنه‌ی محاسباتی وجود ندارد، باید دامنه‌ی حل گسسته شود (ایجاد شبکه‌ی محاسباتی) و در نهایت با محاسبه‌ی مقادیر تک‌تک گره‌ها سعی در بازه‌ی تولید دامنه‌ی پیوسته‌ی اولیه داشت. گسسته‌سازی معادلات و دامنه (مکانی و زمانی) حل یکی از مهم‌ترین منابع خطا است.

۴- ایجاد شبکه‌ی محاسباتی یکی از سخت‌ترین و وقتگیرترین مراحل حل عددی است و هرچند با وجود نرم‌افزارهای تجاری ایجاد شبکه و تسهیل ارتباط آنها با نرم‌افزارهای CAD^۷ ایجاد شبکه بسیار راحت‌تر شده است، اما باز هم از دید متخصصان دینامیک سیالات محاسباتی، ایجاد شبکه‌ی محاسباتی یکی از مراحل وقت‌گیر حل عددی است، تا جایی که از دید برخی متخصصان، حدود ۵۰٪ زمان یک پروژه، صرف تعریف هندسه و ایجاد شبکه‌ی محاسباتی می‌شود [۵].

از طرف دیگر نرم‌افزارهای موجود ایجاد شبکه‌ی محاسباتی در تعریف هندسه‌های پیچیده مانند محیط‌های متخلخل، خصوصاً در شکل سه بعدی، بسیار ضعیف هستند و از همین رو در بسیاری از شبیه‌سازی‌های عددی عموماً از هندسه‌ی محیط متخلخل صرف‌نظر می‌شود و یا قسمت کوچکی از دامنه‌ی حل به سختی مدل شده، از شرط مرزی تناوبی^۸ استفاده می‌شود تا همه‌ی هندسه شبیه‌سازی شود.

۱-۲ دیدگاه ریز مقیاس^۹

این دیدگاه بر این اساس استوار است که سیال از ذراتی تشکیل شده که مطالعه‌ی رفتار این ذرات می‌تواند ما را به توصیف کاملی از حرکت سیال رهنمون سازد. در واقع با کنار هم گذاشتن تکه‌های کوچک (مولکول)، یک ساختمان بزرگ (سیال) ساخته می‌شود؛ به

1. Mesh Generation
2. Mean Free Path
3. Knudsen No.
4. Slip Flow
5. Free Molecule Flow
6. Micro Electromechanical System (MEMS)

7. Computer Aided Design
8. Periodic B.C.
9. Microscopic

رهنمون گردید که به روش شبکه‌ی بولتسمان^۳ مشهور شده است.

۲- روش شبکه‌ی بولتسمان

در سال ۱۸۷۲ لودویگ بولتسمان فیزیک‌دان مشهور اتریشی توانست معادله‌ای به دست آورد که تغییرات تابع توزیع را بر اثر برخوردهای ذرات توصیف می‌کند. این معادله که به افتخار او معادله‌ی بولتسمان نامیده می‌شود، یکی از بزرگترین دستاوردهای فیزیک نظری در قرن ۱۹ میلادی است.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_x f + F \nabla_v f = \Omega(f) \quad (2)$$

از دید این رابطه ذرات دو نوع حرکت دارند: جابجایی (انتشار)^۴ و برخورد^۵ و رابطه نوعی موازنه روی تابع توزیع قبل و بعد از برخورد بین ذرات است [۷]. مقدار $f(x, v, t) d^3x d^3v$ بیان‌گر احتمال یافتن ذره‌ای در اطراف نقطه‌ای به مختصات x است که سرعتی بین v و $v + dv$ دارد. بنابراین می‌توان روابط زیر را برای کمیت‌های توده‌ای^۶ سیال به دست آورد:

$$\rho = m \int f d^3v \quad (3)$$

$$\rho u = m \int v f d^3v \quad (4)$$

۲-۱ ساده‌سازی معادله‌ی بولتسمان

معادله‌ی بولتسمان برای تمام اعداد ناسن معتبر است و حل شکل پیوسته‌ی آن بدون ساده‌سازی، جز در رژیم جریان آزاد مولکولی، بسیار دشوار است و دست‌کمی از دشواری حل معادلات (ناویر-استوکس) ندارد، پس برای حل آن باید فرض‌های ساده‌کننده‌ای اعمال شود. برای ساده‌تر شدن بحث از جمله‌ی شامل نیروهای خارجی صرف‌نظر می‌شود، هر چند حضور این جمله را نیز می‌توان بررسی کرد.

این دلیل این رویکرد به روش «پایین به بالا» یا دینامیک مولکولی معروف است.

در این دیدگاه قانون دوم نیوتن بر تک‌تک ذرات اعمال می‌شود و در نتیجه توصیف دقیقی از حرکت ذرات خواهیم داشت. ایراد اصلی این روش نیز همین «دقت فراوان» آن است. در حقیقت، در توصیف حرکت ذرات نیاز به این مقدار دقت نیست و این دقت فراوان تنها باعث افزایش شدید مدت محاسباتی این روش می‌شود. این روش تنها برای حداکثر چند میلیون ذره و در بازه‌های زمانی بسیار اندک قابل اجرا است [۶]. در مقابل، مزیت اصلی روش، درک فیزیکی آسان و در نتیجه سادگی برنامه‌نویسی رایانه‌ای آن است.

۳-۱ رویکرد میان مقیاس^۱

ایده‌ی اصلی این رویکرد همان ایده‌ی رویکرد قبلی است. با این تفاوت که در این روش‌ها به جای بررسی تک‌تک ذرات منفرد از نگاه آماری استفاده می‌شود. این نگاه، راه‌حل نهایی حل مسائلی است که در بازه‌های زمانی نه چندان کوچک با جامعه‌های آماری بزرگ سروکار دارند و هدف شناسایی خواص تک‌تک اجزاء نیست، بلکه شناخت خواص متوسط و چگونگی توزیع و پراکندگی آن‌ها مدنظر است. در یک جمله می‌توان گفت که این روش‌ها «به قدر کافی» دقیق‌اند، نه مانند روش‌های دینامیک مولکولی به رفتار تک‌تک ذرات توجه بیش از حد شده و نه مانند روش‌های درشت مقیاس از رفتار ذرات ماده صرف نظر شده است.

این دیدگاه از علم مکانیک آماری گرفته شده که در آن تلاش می‌شود رابطه‌ای بین کمیت‌های ریز مقیاس و درشت مقیاس برقرار شود. در این علم نشان داده می‌شود که دستیابی به این هدف متناظر با یافتن پاسخ این سوال است: «احتمال یافتن یک ذره در مختصات مکانی x و زمانی t با تکانه p چقدر است؟» در پاسخ به این سوال در مکانیک آماری تابعی به نام تابع توزیع معرفی می‌شود که به تابع توزیع احتمال ذره^۲ موسوم است. مطالعات بعدی توانست معادله‌ای به دست دهد که تغییرات این تابع را توصیف می‌کند. این معادله ما را به روش جدیدی در مطالعه‌ی جریان سیال

3. Lattice Boltzmann Method
4. Streaming
5. Collision
6. Macroscopic

1. Mesoscopic
2. Probability Particle Distribution Function (PPDF)

تکانه) نامتقارن است و نمی‌توان انتظار داشت که رفتار این شبکه‌ی محاسباتی در اعداد نادسن کوچک به رفتار توصیف شده توسط مکانیک نیوتنی برای سیالات میل کند [۹].

این کار مشابه تولید شبکه‌ی محاسباتی است که به جای یک مرحله‌ی مجزا در شکل پایه‌ای معادلات اعمال می‌شود. از طرفی دامنه‌ی زمانی حل نیز گسسته شده و محاسبات در بازه‌های زمانی خاصی انجام می‌شوند. بازه‌های زمانی و مکانی مشخص باعث می‌شود اعضای مجموعه‌ی مقادیر ممکن برای سرعت ذرات محدود شود. حالت هر ذره در هر گام زمانی به حالت ذرات اطراف آن در گام زمانی قبلی بستگی دارد. این ایده از روش شبکه‌ی محاسباتی خودکار^۴ گرفته شده و باعث شده است که روزآمد شدن خواص در روش شبکه‌ی بولتسمان کاملاً محلی باشد و صرفه‌جویی زیادی از جنبه‌ی محاسباتی به دست آید و روش بسیار سریع باشد. رابطه‌ی میان متغیرهای این سیال مجازی (جرم، طول شبکه، گام زمانی و دیگر متغیرها) با خواص فیزیکی سیال و سیستم مورد نظر در قسمت‌های بعد بررسی خواهد شد. در اثر این ساده‌سازی‌ها معادلات انتگرالی (۳) و (۴) ساده می‌شوند و هزینه‌های محاسباتی تا حد زیادی کمتر می‌شود:

$$\rho = \sum_i f_i \quad (7)$$

$$\rho u = \sum_i e_i f_i \quad (8)$$

از طرفی نیز معادله‌ی پیوسته‌ی بولتسمان به چنین شکلی ساده خواهد شد:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_i \cdot \nabla f_i = -\frac{1}{\tau} (f_i - f_i^{eq}) \quad (9)$$

در این رابطه τ زمان بازآرایی بدون بعد است که از تقسیم زمان بازآرایی « τ » بر بازه‌ی زمانی به دست می‌آید و \vec{i} به اعضای مجموعه‌ی سرعت‌های ممکنه برای ذرات اشاره دارد. تعداد اعضای این مجموعه (مقدار i) به نوع شبکه‌ی مورد استفاده بستگی دارد.

مشکل اصلی در حل معادله‌ی بولتسمان عملگر برخورد است که تابعی پیچیده و ناخطی از تابع توزیع ذره است و باید ساده شود. معروف‌ترین ساده‌سازی توسط باتناگار، گروس و کروک^۱ ارائه شده که فرض می‌کند سیستم، نزدیک حالت تعادل است و تابع توزیع به سمت تابع توزیع تعادلی میل می‌کند [۸]. بر این اساس چنین تابعیتی برای عملگر برخورد پیشنهاد می‌شود:

$$\Omega_i = -\frac{f_i - f_i^{eq}}{\omega} \quad (5)$$

در این رابطه ω کمیتی است که به زمان بازآرایی^۲ موسوم است و نشانه‌ی مقدار میل کردن تابع توزیع به سمت توزیع تعادلی بعد از هر برخورد است^۳.

f_i^{eq} نیز تابع توزیع تعادلی ماکسول است که از رابطه‌ی (۶) محاسبه می‌شود.

$$f^{eq} = \frac{\rho}{\sqrt{\pi R \theta}} \exp\left(-\frac{(e-u)^2}{2R\theta}\right) \quad (6)$$

ساده‌سازی دیگری که در معادله اعمال می‌شود این است که معادلات حاکم به شکل گسسته نوشته شوند، یعنی به جای در نظر گرفتن سیال به عنوان یک محیط پیوسته، فرض می‌شود که هر حجم کنترل سیال را بتوان با یک جرم مجازی نمایش داد که سرعت آن از محاسبه‌ی تابع توزیع در آن حجم کنترل به دست می‌آید. در حقیقت از یک مجموعه تبدیل‌ها استفاده شده و سیال حقیقی به سیالی مجازی با جرم واحد و گرانشی مشخص تبدیل می‌شود. این ذرات مجازی، ساختاری ایجاد می‌کنند که به شبکه‌ی بولتسمان موسوم است. معادله‌ی بولتسمان برای این شبکه‌ی گسسته نوشته و حل می‌شود. وجه غالب این شبکه در تقارن آن است که بتواند در معادلات (ناویر - استوکس) صدق کند. در صورت عدم تقارن شبکه، تانسور تنش به دست آمده (در معادلات بقای

1. Bhatnagar- Gross- Krook

2. Relaxation Time

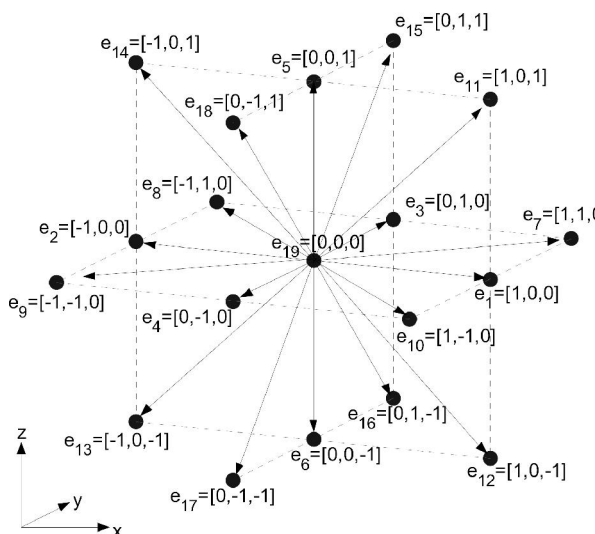
3. Recreation یکی از معانی Relaxation است که به نظر می‌رسد در این‌جا به بازآرایی ذرات بعد از برخورد اشاره دارد.

که معادلات بقای جرم و تکانه (روابط (۳) و (۴)) و در نتیجه در حالت حدی و میل کردن عدد نادسن به سمت صفر، معادلات (ناویر - استوکس) صدق کنند.

$$f_i^{eq} = \rho w_i \left[1 + \frac{e_i \cdot u}{c_s^2} + \frac{(e_i \cdot u)^2}{2c_s^4} - \frac{u \cdot u}{2c_s^2} \right] \quad (11)$$

در این رابطه w_i به ضریب وزنی جهت i موسوم است که در مرجع [۱۰] برای هر شبکه و هر دسته از جهات، داده شده است. c_s نیز مقداری است که اصطلاحاً سرعت مجازی صوت در شبکه نامیده می‌شود و برای شبکه‌های مرسوم D2Q9، D3Q15 و D3Q19 برابر $c_s = c/\sqrt{3}$ است که در این رابطه هم c سرعت ذرات در شبکه است ($c = \Delta x / \Delta t$) که معمولاً برابر واحد در نظر گرفته می‌شود تا روابط ساده‌تر شوند.

c_s بیشینه سرعت در شبکه‌ی محاسباتی را به دست می‌دهد و بنابراین سرعت سیال در شبیه‌سازی از این حد بیشینه نمی‌تواند بیشتر باشد. اثر این عوامل را در عدد ماخ شبکه می‌توان دید که حاصل تقسیم سرعت توده‌ی سیال به سرعت مجازی صوت در شبکه است.



شکل ۱- شبکه‌ی D3Q19 و مؤلفه‌های سرعت گسسته در آن

رابطه‌ی زمان بازآرایی و خواص فیزیکی سیال و ویژگی‌های شبکه در ادامه بررسی خواهد شد.

شبکه‌های مورد استفاده در این روش به صورت $DxQy$ نشان داده می‌شود که x نشان‌دهنده‌ی ابعاد شبکه‌ی مورد استفاده و y تعداد بردارهای سرعت ریز مقیاس مورد استفاده است. مثلاً D2Q9 شبکه‌ای دو بعدی است که مجموعه‌ی بردارهای سرعت ذرات در آن، نه مؤلفه دارد و به اختصار شبکه‌ی دو بعدی نه جهت نامیده می‌شود. در شکل (۱) شبکه‌ی D3Q19 و مؤلفه‌های سرعت در آن نشان داده شده است.

مرحله‌ی آخر ساده‌سازی معادله‌ی حاکم، استفاده از تقریب اختلاف محدود صریح در محاسبه‌ی مشتق‌های مکانی و زمانی در معادله‌ی (۹) است. با این کار به معادله‌ی (۱۰) می‌توان رسید که به معادله‌ی گسسته‌ی شبکه‌ی بولتسمان با تقریب BGK، یا به اختصار LBGK، موسوم است.

$$f_i(x + e_i \delta x, t + \delta t) - f_i(x, t) = - \frac{f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)}{\tau} \quad (10)$$

این رابطه به دو بخش تقسیم شده است، سمت راست شامل جملاتی است که تغییر مقدار تابع توزیع بر اثر برخورد و مقدار تمایل آن به تابع توزیع تعادلی، و سمت چپ نیز تغییرات تابع توزیع را در اثر جابه‌جایی نشان می‌دهد. در هر گام زمانی ذرات با توجه به مقدار مؤلفه‌های سرعت خود حرکت کرده با هم برخورد می‌کنند. رابطه‌ی بولتسمان، همان‌گونه که اشاره شد، موازنه‌ای روی تابع توزیع قبل و بعد از برخورد است.

ساده‌سازی دیگری که در محاسبات اعمال می‌شود به چگونگی محاسبه‌ی تابع توزیع تعادلی برمی‌گردد. می‌توان بخش نمایی تابع توزیع تعادلی را بر حسب سرعت ذره بسط داد. از آنجایی که در معادلات (ناویر - استوکس) عبارت شامل سرعت از مرتبه‌ی دو است به نظر می‌رسد بتوان از جملات درجه‌ی دو به بعد صرف‌نظر کرد و ثابت‌های رابطه را با توجه به نوع شبکه طوری یافت

گرانروی و جرم سیال شبیه‌سازی شده در الگوریتم محاسباتی را به متغیرهای فیزیکی سیال و هندسه‌ی موردنظر تبدیل کند. این نگاشت باعث می‌شود که مثلاً سرعت از طول شبکه به ازای گام زمانی به متر بر ثانیه تبدیل شود. از آنجایی که گرانروی به گام زمانی بستگی دارد از نگاشت زمانی به جای نگاشت گرانروی استفاده می‌شود. نگاشت‌های یاد شده به شکل زیر در نظر گرفته می‌شوند:

$$\begin{aligned} \hat{x}L &\rightarrow x \\ \hat{m}M &\rightarrow m \\ \hat{t}T &\rightarrow t \end{aligned} \quad (14)$$

ثابت مکانی نگاشت با انتخاب مقدار دقت شبیه‌سازی و ثابت جرمی نگاشت \hat{M} بر اساس جرم حجمی سیال تنظیم می‌شود. ثابت زمانی نگاشت (T) هم از مقدار گرانروی سینماتیکی سیال به دست می‌آید. براساس بُعد گرانروی سینماتیکی می‌توان رابطه‌ی گرانروی سینماتیکی با دیگر ثابت‌ها را به صورت $\nu = \hat{\nu} \frac{L^2}{T}$ در نظر گرفت. معمولاً مقدار زمان بازآرایی مساوی واحد در نظر گرفته می‌شود و گرانروی ذرات مجازی از رابطه‌ی (۱۲) مساوی $\frac{1}{\epsilon}$ به دست می‌آید. بعد از یافتن مقدار کمیت‌ها باید عکس این تبدیلات در دامنه‌ی حل انجام شود تا میدان جریان سیال حقیقی مشخص گردد.

۴-۲ الگوریتم محاسباتی روش شبکه‌ی بولتسمان

الگوریتم محاسباتی این روش را می‌توان در سه مرحله‌ی اساسی در نظر گرفت [۱۲]:

۱. اعمال یک مقدار اولیه برای جرم حجمی و سرعت در گره‌ها
۲. پخش (انتشار) ذرات سیال به طرف گره‌های همسایه و محاسبه‌ی تابع توزیع تعادلی در مکان و زمان جدید و به روز رسانی مقادیر سرعت و جرم حجمی.
۳. آزمودن همگرایی سرعت‌ها و در صورت عدم همگرایی، محاسبه‌ی تابع توزیع تعادلی جدید براساس خواص محاسبه شده در مرحله‌ی قبل و تکرار مرحله‌ی دوم.

با معرفی سرعت مجازی صوت در شبکه می‌توان رابطه‌ی زمان بازآرایی با متغیرهای فیزیکی و خواص شبکه‌ی محاسباتی را مشخص کرد:

$$\hat{\nu} = \left(\tau - \frac{1}{4}\right) c_s^2 \hat{\Delta}t \quad (12)$$

در این رابطه $\hat{\Delta}t$ گام زمانی شبکه است که معمولاً برابر واحد در نظر گرفته می‌شود و $\hat{\nu}$ هم گرانروی ذرات مجازی است.

۲-۲ روش (چاپمن - انسکاگ)

چگونگی رسیدن از معادلات بولتسمان به معادلات (ناویر- استوکس) توسط چاپمن و انسکاگ بین سال‌های ۱۹۱۰ تا ۱۹۲۰ ارائه شده است. جزئیات تفصیلی این روش این‌جا بررسی نمی‌شود. در این روش، مقدار تابع توزیع به صورت دو بخش تعادلی و غیر تعادلی در نظر گرفته شده و قسمت غیر تعادلی به صورت دنباله‌ای از عدد نادسن بسط داده می‌شود:

$$f = f^{eq} + Knf^{neq} \quad (13)$$

عبارت نخست، تابع توزیع تعادلی ماکسول است و اگر این عبارت در معادلات بقای جرم و تکانه شبکه‌ای (معادلات (۷) و (۸)) صدق می‌کند تنها به کمک آن و در حالت حدی میل کردن عدد نادسن به سمت صفر؛ معادله‌ی اوپلر صدق می‌کند. اگر از عبارت تابع توزیع غیر تعادلی نیز یک جمله در نظر گرفته شود معادلات (ناویر- استوکس) در حالت حدی صدق خواهند کرد. در مرجع [۱۱] توضیح ساده‌ای از روش رسیدن از معادله‌ی بولتسمان به معادله‌ی بقای جرم و تکانه در مقیاس درشت آمده است.

۳-۲ نگاشت متغیرهای فیزیکی به فضای محاسباتی

در بیشتر موارد، خواص سیال و هندسه‌ی محاسباتی مورد نظر با خواص سیال مجازی و شبکه‌ی در نظر گرفته شده در روش شبکه‌ی بولتسمان یکسان نیست. شبیه‌سازی این جریان‌ها نیازمند یک نگاشت بین فضای فیزیکی و محاسباتی است. این نگاشت باید مکان،

۲-۵ محدودیت‌های روش

یکبار دیگر محدودیت‌های روش مرور می‌شود:

۱. فرض هم دما بودن جریان که از نظریه‌ی سینتیکی به ارث رسیده است.

۲. اعداد ماخ کوچک ($u \ll c_s$) که از تقطیع بسط سرعتی تابع

توزیع تعادلی برای جملات درجه‌ی دو به بعد ناشی شده است.

ذکر این نکته لازم است که در ویرایش‌های جدید این روش، این مشکلات تا حد زیادی رفع شده است. برای مثال در مورد جریان‌های ناهم‌دما روش‌های مختلف به دو دسته‌ی کلی تقسیم می‌شوند: مدل‌های چند سرعتی^۱ [۱۳] و مدل‌هایی با دو تابع توزیع [۱۴ و ۱۵]. از این بین، روش دوم کاربرد گسترده‌تری پیدا کرده است. در این روش، تابع توزیع دیگری برای یافتن تغییرات دما در دامنه‌ی حل معرفی می‌شود. براساس رابطه‌ی (۱۲) مقدار گام زمانی فیزیکی به دقت شبیه‌سازی و مدت بازآرایی تابع توزیع تعادلی بستگی دارد. برای جریان‌های ناپایا و متغیر با زمان، لازم است مقدار گام فیزیکی زمانی کمتر از اندازه‌ی زمانی تغییرات جریان^۲ باشد.

عدد ماخ شبکه هم باید کوچک بماند. خطای ناشی از تقطیع بسط تابع توزیع تعادلی، از مرتبه‌ی Ma^3 است [۱۶]. بنابراین با توجه به تعریف عدد ماخ، برای نگه‌داشتن خطا زیر ۱٪ باید در شبکه‌ی محاسباتی $u_{max} \ll c_s/5$ ، یا این‌که برحسب متغیرهای فیزیکی $u_{max} \ll \Delta x / 10 \Delta t$ باشد. با استفاده از رابطه‌ی (۱۲) و با توجه به رابطه‌ی $\Delta x / \Delta t = L/T$ و فرض زمان بازآرایی برابر واحد، رابطه‌ی (۱۵) بین متغیرهای فیزیکی سیستم باید صدق کند:

$$L \ll \frac{3v}{5|u_{max}|} \quad (15)$$

می‌توان رابطه‌ی (۱۵) را بر حسب عدد رینولدز بیان کرد.

$$Re \ll \frac{3n}{5} \quad (16)$$

از این رابطه پیداست که شبیه‌سازی جریان‌های آشفتنه در این روش

نیازمند شبکه‌ای بسیار ریز است. استفاده از این شبکه‌ی بسیار ریز هزینه‌ی محاسباتی را بسیار افزایش خواهد داد، خصوصاً اگر طول مشخصه‌ی سیستم در مقایسه با دامنه‌ی شبیه‌سازی، کوچک باشد.

۲-۶ شرایط مرزی

یکی از ویژگی‌های مهم روش شبکه‌ی بولتسمان سادگی اعمال شرایط مرزی است. در این‌جا شرط مرزی عدم لغزش به دلیل کاربرد فراوان بررسی می‌شود. شروط مرزی دیگر (شروط مرزی تکراری، تقارن، دیواره‌های لرزان و دیگر شرایط مرزی) در مرجع [۱۰] به تفصیل بررسی شده‌اند. اعمال شرایط مرزی در مرزهای متحرک در مرجع [۱۷] بررسی شده است.

شرط مرزی عدم لغزش به معنای صفر بودن سرعت سیال در دیواره‌هاست و از پرکاربردترین شروط مرزی مورد استفاده است و زمانی برقرار است که سطوح مورد نظر زبر باشند. ایده‌ای که در روش شبکه‌ی بولتسمان استفاده می‌شود به نام شرط مرزی «کمانه‌کردن»^۳ موسوم است و به این معناست که مقدار تابع توزیع در برخورد به دیواره تغییری ندارد و تنها جهت آن عوض می‌شود. اگر مقادیر اولیه‌ی f_1^{eq} و f_4^{eq} در مرزها صفر در نظر گرفته شوند، عدم تغییر مقدار تابع توزیع در این برخورد باعث می‌شود که سرعت سیال روی دیواره، صفر منظور شود. اگر این روش برای مدل دوبعدی^۴ جهت (D2Q9) در نظر گرفته شود، می‌توان این مدل را در شکل ماتریسی به صورت زیر نمایش داد:

$$\begin{bmatrix} f_4(x, y) \\ f_1(x, y) \\ f_2(x, y) \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} f_4(x, y) \\ f_1(x, y) \\ f_2(x, y) \end{bmatrix} \quad (17)$$

بسته به مکان دیواره ممکن است حالت‌های متفاوتی رخ دهد. اگر دیواره در مرز جامد قرار گیرد روش را کمانه‌کردن کامل^۵ و اگر دیواره وسط گره‌های جامد و سیال قرار گیرد؛ روش را کمانه‌کردن نیم‌راهه^۶ می‌نامند. روش نخست، دارای دقت مرتبه‌ی یک و دومی، دقت مرتبه‌ی دو دارد [۱۸]. بنابراین در شبیه‌سازی‌ها بیشتر از

3. Bounce-Back
4. Full Bounce-Back
5. Half-way Bounce-Back

1. Multi-Speed Models
2. Flow Timescale

روش کمانه کردن نیم‌راهه استفاده می‌شود.

همکارانش انجام شده است [۱۹].

آنها از جریان سیال در یک مجرا و روی دسته‌ای از موانع را به عنوان مسأله‌ی معیار^۴ استفاده کرده و مقادیر سرعت و افت فشار را محاسبه نموده‌اند. هندسه‌ی شبیه‌سازی در شکل (۳) نشان داده شده است. نتایج شبیه‌سازی بیانگر آن است که با افزایش پیچیدگی هندسه، استفاده از روش شبکه‌ی بولتسمان از نظر محاسباتی با صرفه‌تر است و زمان محاسباتی^۵ کم‌تر خواهد شد. از جایی به بعد روش شبکه‌ی بولتسمان نسبت به پیچیدگی هندسه و افزایش تعداد موانع مستقل می‌شود.

در مقابل روش حجم محدود در هندسه‌های ساده سریع‌تر است و با افزایش تعداد موانع و پیچیدگی هندسه، سرعت و صرفه‌ی محاسباتی آن کمتر می‌شود.

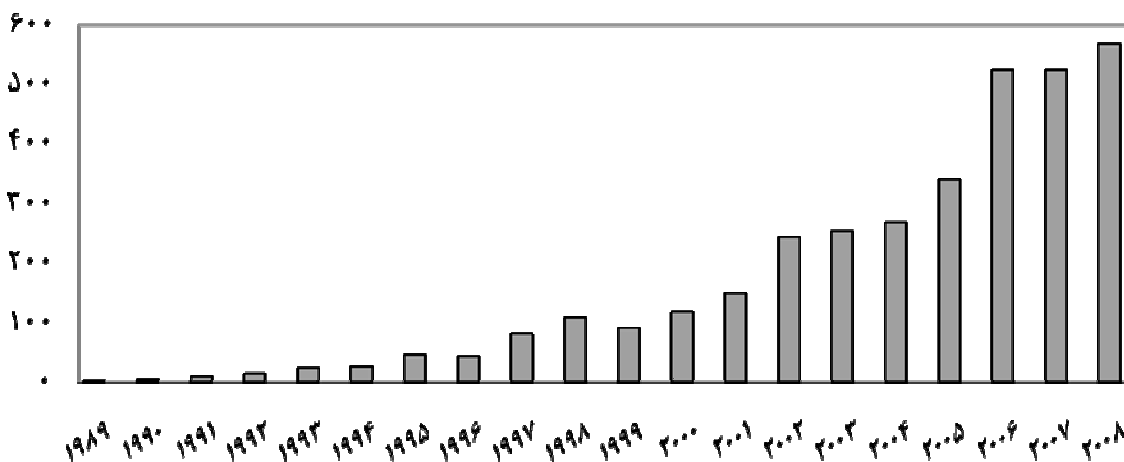
شکل (۴) نشان می‌دهد که روش شبکه‌ی بولتسمان در هندسه‌هایی با بیش از شانزده مانع از روش حجم محدود تک‌شبکه‌ای سریع‌تر است. روش حجم محدود چند شبکه‌ای بهره‌ی محاسباتی بیشتری دارد و در مقابل افزایش تعداد موانع و پیچیده‌تر شدن هندسه مقاومت‌تر است و تا ۶۴ مانع کمترین زمان محاسباتی را دارد، هر چند با افزایش تعداد موانع روش شبکه‌ی بولتسمان با صرفه‌تر می‌شود.

۳- روند تحقیقات انجام شده در این حوزه

با توجه به رشد فراوان پژوهش‌های انجام شده در حوزه‌ی کاربردها و توسعه‌ی روش شبکه‌ی بولتسمان به نظر می‌رسد نگاهی آماری به این پژوهش‌ها در آغاز بررسی آن‌ها مفید باشد. این بررسی با استفاده از پایگاه اطلاعاتی ISI Web of Knowledge انجام شد و از جستجو بر اساس موضوع^۱ استفاده گردید. مزیت این پایگاه جستجو در تمام مجلات فهرست شده و معتبر و محدود نبودن به پایگاه علمی خاصی است. نتایج در شکل (۲) نشان داده شده و مشخص است که روند رو به رشد و توسعه‌ی این روش در آینده نیز ادامه خواهد یافت و این حوزه‌ی تحقیقاتی علاقه‌مندان بیشتری را در آینده‌ی نزدیک به خود جلب خواهد کرد.

۴- مقایسه‌ی روش شبکه‌ی بولتسمان با روش‌های مرسوم CFD

مقایسه‌ای بین روش شبکه‌ی بولتسمان و روش حجم محدود (با استفاده از الگوریتم تصحیح فشار SIMPLE و روش‌های ایجاد شبکه‌ی تک‌شبکه‌ای^۲ و چندشبکه‌ای^۳) توسط برنسدورف و



شکل ۱- رشد تعداد مقالات منتشر شده در حوزه‌ی روش شبکه‌ی بولتسمان

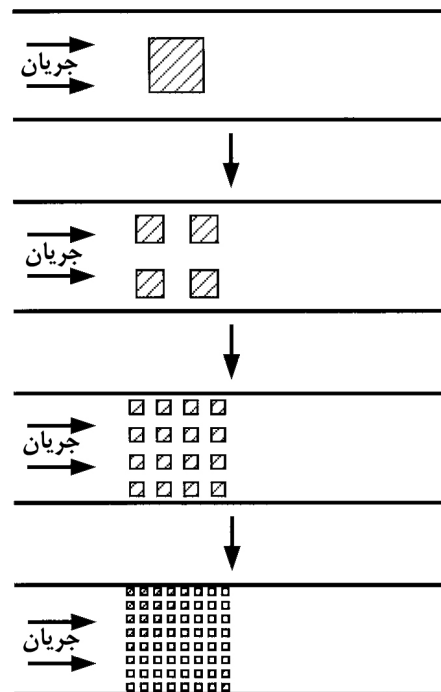
1. Topic
2. Single-Grid
3. Multi-Grid
4. Benchmark Problem
5. CPU-Time

حل مسأله با روش حجم محدود به کمک فلونت حدود دو برابر سریع‌تر از روش شبکه‌ی بولتسمان است.

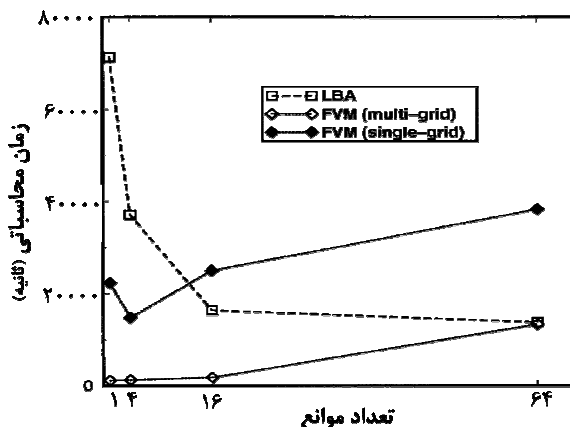
دلیل این امر آن است که فلونت می‌تواند محاسبات را برای جریان پایا انجام دهد و بنابراین از شبکه‌ی درشتتری استفاده می‌کند؛ اما در شبکه‌ی بولتسمان حل پایا از حل ناپایا به دست می‌آید. با افزایش عدد رینولدز و پیدایش گردابه‌ها جریان ناپایا می‌شود و باید از شبکه‌ی محاسباتی ریزتری استفاده کرد تا بتوان جواب درستی گرفت. در این شرایط، روش شبکه‌ی بولتسمان زمان محاسباتی کمتری دارد. در $Re = 500$ زمان محاسباتی فلونت بیش از پنج برابر شبکه‌ی بولتسمان است. نتایج مورد نظر در شکل (۴) نشان داده شده‌اند. نتایج شبیه‌سازی‌ها با اندازه‌گیری‌های انجام شده توسط لیزر مقایسه شده و همبستگی خوبی بین نتایج مشاهده شده است.

عملکرد بهتر شبکه‌ی بولتسمان در حل مسائل ناپایا در کار گلی^۱ و همکاری‌هایش نیز تأیید شده است [۲۱]. در این کار جریان سیال از روی دسته موانعی بررسی شده و مقایسه‌ای بین روشهای شبکه‌ی بولتسمان، حجم محدود (با استفاده از نرم‌افزار CFX) و المان محدود (با استفاده از یک کد تحقیقاتی) انجام شده است. مقایسه بر اساس مقادیر ضرایب دراگ (کشش) و لیفت و افت فشار بوده است. مقایسه‌ای بین روش ADI^۲ و روش شبه بولتسمان در حل معادله‌ی برگرد ناپایای دوبعدی توسط بریدن^۳ و همکاری‌هایش انجام شده است [۲۲]. اساس مقایسه، افزایش سرعت در اثر محاسبات موازی^۴، زمان محاسباتی و دقت حل، در مقایسه با حل تحلیلی، بوده است. حل در یک دامنه‌ی مربعی شکل و با شبکه‌ی مستطیلی تک‌فاصله انجام شده است. از آنجایی که در روش شبکه‌ی بولتسمان مقدار تابع توزیع در یک گره صرفاً بستگی به همسایه‌های اطراف آن دارد، بهینه‌سازی استفاده از حافظه‌ی داخلی پردازشگر^۵ با استفاده از روش تقسیم محدوده‌ی محاسباتی به چند محدوده انجام شده است. نتایج کار آن‌ها نشان داده است که شبکه‌ی بولتسمان زمان محاسباتی بسیار کمتری (حدود یک هشتم) دارد. افزایش سرعت در اثر محاسبات موازی هم در شبکه‌ی بولتسمان تابعیتی ابرخطی^۶ دارد و حال آنکه در روش ADI افزایش آن در بهترین

1. Sebastian Geller
2. Alternating Direction Implicit
3. Bryden
4. Parallel Speed up
5. Cache
6. Super Linear



شکل ۳- هندسه‌ی مسأله‌ی معیار در مقایسه‌ی شبکه‌ی بولتسمان و حجم محدود [۱۹]



شکل ۴- زمان محاسباتی روش‌های مختلف در هندسه‌ی شکل (۳) بر حسب تعداد موانع در مجرا [۱۹]

جریان سیال در یک همزن ثابت توسط ویجینگن و همکاری‌هایش بررسی شده است [۲۰]. برای شبیه‌سازی، حجم محدودی از نرم افزار فلونت استفاده شده است. نتایج شبیه‌سازی آنها نشان داد که در اعداد رینولدز کوچک روش حجم محدود، زمان محاسباتی کمتری دارد؛ زیرا می‌توان مسأله را به صورت پایا حل کرد. در $Re = 200$

حالت، خطی است. حافظه‌ی مورد نیاز شبکه‌ی بولتسمان بیشتر است، زیرا در این روش در هر نقطه‌ی محاسباتی نیازمند ذخیره‌ی نُه مولفه‌ی تابع توزیع به جای سه مولفه (دو مولفه‌ی سرعت و فشار) است.

جابه‌جایی طبیعی در یک گودال مربعی بدون تغییر فاز توسط سما^۱ و همکارانش بررسی شده است [۲۳]. عدد پرانتل برابر $0/71$ ثابت نگه‌داشته شده، تغییرات عدد رایلی بین 10^3 تا 10^6 بررسی شده و از مدل دو بعدی نُه جهت (D2Q9) با شبکه‌بندی یکنواخت دکارتی 150×150 برای شبیه‌سازی استفاده شده است. نتایج به دست آمده انطباق بسیار خوبی با نتایج تجربی داشته است. بخشی از نتایج در جدول (۱) خلاصه شده است.

در همین مقاله، سما و همکارانش مسأله‌ی انجماد و ذوب را بعد از بررسی کد خود با روش یاد شده بررسی کرده‌اند. این مسأله به دلیل وجود پدیده‌های جریان‌های چند فازی، انتقال گرمای جابه‌جایی و هدایتی، تغییر فاز و وجود سطح مشترک، بسیار پیچیده است و هنوز یکی از مسائل چالش‌برانگیز در روش‌های دینامیک سیالات محاسباتی است [۲۴].

سطح مشترک (جامد-مایع) با استفاده از روش‌های شبکه‌ی بولتسمان و حجم محدود، محاسبه گردیده و با داده‌های تجربی مقایسه شده است. نتایج، حاکی از عملکرد رضایت‌بخش روش

شبکه‌ی بولتسمان است. مقایسه‌ای بین روش شبکه‌ی بولتسمان و روش المان محدود در مدل‌سازی جریان همرفتی در محیط‌های متخلخل نیز توسط سِتا و همکارانش صورت گرفته است [۲۵]. شبیه‌سازی در اعداد رایلی و دارسی مختلف و مقادیر مختلف تخلخل انجام گرفته و برای روش المان محدود از نتایج کار نیتیاراسو و همکارانش [۲۶] استفاده شده است. نتایج به دست آمده از روش شبکه‌ی بولتسمان در مقایسه با روش المان محدود، تطابق رضایت‌بخش و در مواردی بهتری به دست داده است. از طرفی روش شبکه‌ی بولتسمان زمان محاسباتی کمتری تا حدود 40% دارد زیرا در این روش نیازی به حل معادله‌ی پواسون برای توزیع فشار نیست.

مقایسه بین نتایج شبیه‌سازی LBM و حل تحلیلی، به عنوان یک شاخص، برای جریان سیال گذرنده از لوله توسط هاشم آبادی و امیری انجام شده است [۲۷]. البته باید این نکته نیز ذکر شود که کارهای انجام شده تاکنون، با استفاده از ویرایش‌های نسبتاً اولیه‌ی شبکه‌ی بولتسمان انجام شده و از آن‌جایی که این روش در حال توسعه است، نسخه‌های آن روز به روز جدیدتر شده و بهبود می‌یابد. یکی از مهم‌ترین این توسعه‌ها روش زمان بازآرایی چندگانه^۲ است که دقت و پایداری حل عددی در آن بیشتر شده است. اطلاعات بیشتر در مورد این روش در مرجع [۲۸] آمده است.

جدول ۱- نتایج عددی حاصل از LBM و نتایج تجربی جریان در کاویتی مربعی ($Pr = 0/71$)

عدد ناسلت		مؤلفه‌ی x سرعت		عدد رایلی
تجربی	محاسباتی	تجربی	محاسباتی	
۱/۱۱۸	۱/۱۱۶	۳/۶۹۷	۳/۶۹۹	10^3
۲/۲۴۳	۲/۲۴۵	۱۹/۶۱۷	۱۹/۶۲۰	10^4
۴/۵۱۹	۴/۵۲۱	۶۸/۵۹	۶۸/۶۸	10^5
۸/۸۰۰	۸/۸۱۴	۲۱۹/۳۶	۲۲۰/۴۱۸	10^6

1. Semma
2. Multiple-Relaxation-Time

۵- کاربرد شبکه‌ی بولتسمان در شبیه‌سازی محیط‌های متخلخل

در بسیاری از فرایندهای مهندسی شیمی، سیال در محیط‌های متخلخل جریان دارد. فرایندهایی مانند صاف کردن، جداسازی غشایی، خشک کردن و استخراج نفت از مخزن از این دسته‌اند. از طرفی راکتورهای پرشده از مهمترین ادوات فرایندی در صنایع شیمیایی هستند که می‌توانند به عنوان محیط متخلخل در نظر گرفته شوند. معمولاً رینولدز جریان در این محیط‌ها چندان زیاد نیست و نیازی به استفاده از شبکه‌ی بسیار ریز برای محاسبات وجود ندارد.

درک درست از هیدرودینامیک جریان سیال در این محیط‌ها می‌تواند کمک شایانی به بهبود عملکرد و رفع مشکلات کاری در این دستگاه‌ها بکند. همان‌طور که قبلاً اشاره شد مهمترین مشکل استفاده از روش‌های مرسوم دینامیک سیالات محاسباتی در مواجهه با محیط‌های متخلخل در ایجاد هندسه خصوصاً هندسه‌های نامنظم است. در روش‌های شبکه‌ی بولتسمان هندسه‌ی محیط متخلخل را می‌توان مستقیماً از روش‌های رایانه‌ای به دست آورد. روش کلی کار، استفاده از پویس‌های توموگرافی^۱ است. تصویر به دست آمده توسط رایانه پردازش شده و هندسه‌ی محاسباتی با مشخص شدن شبکه‌ی محاسباتی تولید می‌شود. امکان خواندن مستقیم فایل‌های رایانه‌ای در برنامه‌ی محاسباتی، امکان استفاده از هندسه‌های تصادفی ایجاد شده با روش‌های مونت کارلو را نیز فراهم کرده و نتایج مناسبی از امکان اعمال این دیدگاه در شبیه‌سازی بسترهای پرشده‌ی نامنظم سنتز شده به دست آمده است [۲۹-۳۱].

از این دیدگاه در شبیه‌سازی جریان نفت در مخازن نفتی نیز استفاده شده است. یکی از کارهای انجام شده در این زمینه شبیه‌سازی توسط باکلس^۲ و همکارانش می‌باشد. در این کار، جریان آب و نفت را در محیط متخلخل به صورت سه بعدی شبیه‌سازی شده و نتایج بسیار موافقی با آزمایش‌ها به دست آمده است [۳۲].

سولیوان^۳ و همکارانش نیز شبیه‌سازی هیدرودینامیکی و انتقال جرم را در راکتورهای پرشده‌ی نامنظم بررسی و شبیه‌سازی خود را با نتایج به دست آمده از اندازه‌گیری‌های MRI مقایسه کرده‌اند. نتایج

1. Tomographic Scan
2. Buckles
3. Sullivan

به دست آمده حاکی از توانایی روش شبکه‌ی بولتسمان در شبیه‌سازی هیدرودینامیکی و انتقال جرم در محیط‌های متخلخل است [۳۴ و ۳۳]. آن‌ها همچنین جریان سیال غیر نیوتنی را داخل یک محیط متخلخل شبیه‌سازی کرده‌اند که از قانون گرانروی توانی (با توان کمتر از ۱) پیروی می‌کند. شبیه‌سازی‌ها به صورت دو و سه بعدی و برای مقادیر مختلف توان (در رابطه‌ی گرانروی) انجام شده است و توزیع سرعت به دست آمده تطابق بسیار مناسبی با حل نظری داشته است [۳۵].

جریان سیال و انتقال گرما در یک میکروراکتور متخلخل توسط کائو و همکارانش شبیه‌سازی شده و اثرات تغییر عدد رینولدز، مکان منبع گرمایی و نسبت اندازه‌ی قرص واکنشگر بر توزیع دما و سرعت بررسی شده است. نتایج آن‌ها منجر به مدل ساده‌ای برای تغییرات بازدهی واکنش با توزیع دمای تعادلی راکتور شده است [۳۶].

بیتسترا و همکارانش جریان سیال روی دسته‌کره‌ها را شبیه‌سازی و نیروی کشش روی کره‌ها را محاسبه کرده‌اند. نتایج شبیه‌سازی با رابطه‌ی تجربی ترانکونگ و همکارانش مقایسه شده و نتایج شبیه‌سازی، تطبیق مناسبی با تجربه داشته است و روش شبکه‌ی بولتسمان به خوبی توانسته است ضریب شکل دسته‌کره‌ها را پیش‌بینی کند [۳۷].

فراکتال‌ها اجسامی هستند که از به هم پیوستن ذرات کوچک‌تر ایجاد می‌شوند و مطالعه‌ی تجربی و عددی آن‌ها به دلیل شکل پیچیده به سختی انجام می‌شود. ضریب دراگ اجسام فراکتالی سه بعدی توسط شوپارد و همکارانش با استفاده از روش شبکه‌ی بولتسمان محاسبه شده است [۳۸]. در ادامه، قطر هیدرولیکی معادل به خوبی پیش‌بینی و رابطه‌ای برای بیان ارتباط بین قطر فراکتال و قطر هیدرولیکی آن ارائه شده است. در این کار، ذرات فراکتالی بررسی شده‌اند که از به هم پیوستن ۱۰۰ تا ۲۰۰۰۰ کره‌ی کوچک تشکیل شده‌اند.

۶- نتیجه‌گیری

در این مقاله روش شبکه‌ی بولتسمان به عنوان رویکردی نوین در دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) معرفی و مزایا و محدودیت‌های آن در مقایسه با روش‌های دیگر، خصوصاً در شبیه‌سازی جریان سیال در محیط‌های متخلخل، بررسی شده است. نتیجه این بررسی‌ها نشان می‌دهد که این نگاه جدید محاسباتی می‌تواند بر

گرانروی ذرات مجازی ($\text{kgm}^{-1}\text{s}^{-1}$)	\hat{v}	مشکل بالا بودن مدت محاسبات در ساختارهای هندسی پیچیده
گرانروی سیال حقیقی ($\text{kgm}^{-1}\text{s}^{-1}$)	v	مخصوصاً محیط‌های متخلخل فائق آید؛ ولی توجه به این نکته نیز
دمای مطلق (K)	θ	مهم است که این روش هنوز به اندازه کافی برای کاربردهای
جرم حجمی سیال (kgm^{-3})	ρ	مهندسی، توسعه لازم را پیدا نکرده و هنوز مراحل رشد خود را
عملگر (تابع) برخورد بین ذرات	Ω	می‌گذراند.

طول پویش آزاد مولکولی	λ
عملگر (تابع) برخورد بین ذرات	Ω
جرم حجمی سیال	ρ

فهرست نمادها

c	سرعت ذرات در شبکه‌ی بولتسمان (ms^{-1})
c_s	سرعت صوت در شبکه‌ی بولتسمان (ms^{-1})
e_i	سرعت ریز مقیاس در روش شبکه‌ی بولتسمان در جهت i
$f_i(x,t)$	تابع توزیع سرعت ذره در جهت i (kgm^{-3})
F	نیروی حجمی وارده به ذره به ازای واحد جرم (Nm^{-3})
Kn	عدد نادسن (بدون بعد)
L	کوچکترین طول مشخصه‌ی جریان (m)
m	جرم ذرات (kg)
\hat{m}	جرم ذرات مجازی (kg)
R	ثابت جهانی گازها ($\text{kgm}^2\text{mol}^{-1}\text{K}^{-1}\text{s}^{-2}$)
t	زمان (s)
\hat{v}	زمان در شبکه‌ی بولتسمان (m)
T	ثابت زمانی نگاشت (s)
Δt	گام زمانی شبکه (s)
Re	عدد رینولدز (بدون بعد)
u	سرعت توده‌ی سیال (درشت مقیاس) (ms^{-1})
u_{\max}	سرعت بیشینه‌ی سیال شبکه‌ی بولتسمان (ms^{-1})
v	سرعت محلی سیال (ms^{-1})
x	طول (m)
\hat{x}	طول در مقیاس شبکه‌ی بولتسمان (m)
Δx	طول گام مکانی شبکه‌ی محاسباتی (m)
w_i	ضریب وزنی شبکه‌ی بولتسمان در جهت i

حروف یونانی

λ	طول پویش آزاد مولکولی (m)
-----------	---------------------------

مراجع

- [1] S.V. Patankar, "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Taylor & Francis Group, New York, (1980).
- [2] Y. Zhou, R. Zhang, I. Staroselsky, H. Chen, W.T. Kim, M.S. Jhon, "Simulation of micro- and nano-scale flows via the lattice Boltzmann method", Physica A, Vol. 362, 68–77, (2006).
- [3] C.Y. Lim, C. Shu, X.D. Niu, Y.T. Chew, "Application of lattice Boltzmann method to simulate micro channel flows", Phys. Fluids Vol. 14 No. 7, 2299–2308, (2002).
- [4] X. Nie, G.D. Doolen, S. Chen, "Lattice-Boltzmann simulations of fluid flows in MEMS", J. Stat. Phys. Vol. 107 Nos.1–2, 279–289, (2002).
- [5] H.K. Versteeg, W. Malalasekera, "An Introduction to Computational Fluid Dynamics, The finite volume method", Longman, England, (1995).
- [6] M.M. Dupin, T.J. Spencer, I. Halliday, C. M. Care, "A Many-Component Lattice Boltzmann Equation Simulation for Transport of Deformable Particles", Phil. Trans. R. Soc. Lond. A Vol. 362, 1885-1914, (2004).
- [7] M. C. Sukop, D. T. Thorne, "Lattice Boltzmann Modeling: An Introduction to Geoscientists and Engineers", Springer, (2007).
- [8] PL Bhatnagar, EP Gross, M. Krook, "A model for collision processes in gases. I: small amplitude processes in charged and neutral one-component system". Phys. Rev. Vol. 94, 511–525, (1954).
- [9] Frisch U, Hasslacher B, Pomeau Y. "Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equations". Phys. Rev. Lett. Vol. 56, 505–508, (1986).
- [10] Succi S. "The Lattice Boltzmann Equation: for Fluid Dynamics and Beyond", Series Numerical Mathematics and Scientific Computation, Oxford University Press, Oxford-New York, (2001).

- [11] S. Chen and G. D. Doolen, "Lattice Boltzmann method for fluid flows", *Annu. Rev. Fluid Mech.* Vol. 30, 29-364, (1998).
- [12] M. E. Kutay, A. H. Aydilek, E. Masad, "Laboratory validation of lattice Boltzmann method for modeling pore-scale flow in granular materials", *Comp. Geotech.*, Vol. 33, 381-395, (2006).
- [13] F.J. Alexander, S. Chen, J.D. Sterling, "Lattice Boltzmann thermohydrodynamics", *Phys. Rev. E*, Vol.47, 2249-2252, (1993).
- [14] X. He, S. Chen, G.D. Doolen, "A novel thermal model for the lattice Boltzmann method incompressible limit", *J. Comput. Phys.*, Vol. 146, 282-300, (1998).
- [15] S. Succi, E. Foti, F. Higuera, "Three-dimensional flows in complex geometries with the lattice Boltzmann method", *Europhys. Lett.* Vol.10, 433-438, (1989).
- [16] J. Sterling, S. Chen, "Stability analysis of Lattice Boltzmann methods", *J. Comp. Phys.*, Vol.123, 196-206.
- [17] P. Lallemand, L. Luo, "Lattice Boltzmann method for moving boundaries", *J. Comp. Phys.*, Vol. 184, 406-421, (2003).
- [18] Q. Zou, X. He, "On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model" *Phys. Fluids*, Vol. 9, No 6, 1591-1598, (1997).
- [19] J. Bernsdorf, F. Durst, M. Schäfer, "Comparison of cellular automata and finite volume techniques for simulation of incompressible flows in complex geometries", *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol. 29, 251-264, (1999).
- [20] W. F. C. van Wageningen, D. Kandhai, R. F. Mudde, and H. E. A. van den Akker, "Dynamic Flow in a Kenics Static Mixer: An Assessment of Various CFD Methods", *AIChE J.* Vol. 50, 1684-1696, (2004).
- [21] S.Geller, M. Krafczyk, J. Tolke, S. Turek, J. Hron "Benchmark computations based on lattice-Boltzmann, finite element and finite volume methods for laminar flows", *Comp. Fluids*, Vol. 35, 888-897, (2006).
- [22] A. C. Velivelli, K.M. Bryden, "Parallel performance and accuracy of lattice Boltzmann and traditional finite difference methods for solving the unsteady two-dimensional Burger's equation", *Physica A*, Vol. 362, 139-145, (2006).
- [23] E. Semma, M. El Ganaoui, R. Bennacer, A.A. Mohamad, "Investigation of flows in solidification by using the lattice Boltzmann method", *Int. J. Thermal Sci.*, Vol. 47, 201-208, (2008).
- [24] Luo L S, "The lattice-gas and lattice boltzmann methods: Past, Present, and Future", *Selectecd papars in the Proceedings of the "International Conference on Applied Computational Fluid Dynamics," Beijing, China, October 17-20, edited by J.H. Wu, Z.J. Zhu, 52-83, (2000).*
- [25] Takeshi Seta, Eishun Takegoshi, Kenichi Okui "Lattice Boltzmann simulation of natural convection in porous media", *Math. Comp. Sim.*, Vol. 72, 195-200, (2006).
- [26] P. Nithiarasu, K.N. Seetharamu, T. Sundararajan, "Natural convective heat transfer in a fluid saturated variable porosity medium", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 40, 3955-3967, (1997).
- [27] S.H. Hashemabadi, A. Amiri, "2D lattice Boltzmann model benchmarking for low reynolds poiseuille flow through Channel", *5th International Chemical Engineering Congress (IChEC), Kish Island, (2008).*
- [28] d'Humie`res D, Ginzburg I, Krafczyk M, Lallemand P, Luo L S, "Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three-dimensions", *Philo. Trans. R. Soc. Lond. A*, Vol. 360, 437-51, (2006).
- [29] H. Freunda, Th.Zeiserb, F. Hubera, E. Klemma, G. Brennerb, F. Durstb, G. Emiga, "Numerical simulations of single phase reacting flows in randomly packed fixed-bed reactors and experimental validation", *Chem. Eng. Sci.* Vol.58, 903-910, (2003).
- [30] T. Zeiser, M. Steven, H. Freund, P. Lammers, G. Brenner, F Durst, J. Bernsdorf, "Analysis of the Flow Field and Pressure Drop in Fixed-Bed Reactors with the Help of Lattice Boltzmann Simulations", *Philo. Trans: Math, Phys. and Eng. Sci.*, Vol. 360, No. 1792, *Discrete Modelling and Simulation of Fluid Dynamics.* 507-520, Mar. 15, (2002).
- [31] J. Bernsdorf, G. Brenner, F. Durst "Numerical analysis of the pressure drop in porous media flow with lattice Boltzmann (BGK) automata", *Comp. Phys. Comm.*, Vol. 129, 247-255, (2000).
- [32] J. J. Buckles, R. D. Hazlett, S. Chen, K. G. Eggert, D. W. Grunau, and Wendy E. Soll, "Toward improved prediction of reservoir flow performance simulating oil and water flows at the pore scale", *Los Alamos Science*, No. 22, 112-121, (1994).
- [33] S. P. Sullivan, F.M. Sani, M.L. Johns, L.F. Gladden, "Simulation of packed bed reactors using lattice Boltzmann methods", *Chem. Eng. Sci.* Vol.60, 3405-3418, (2005).
- [34] Simon P. Sullivan, Lynn F. Gladden, Michael L. Johns, "3D chemical reactor LB simulations", *Math. & Comp. in Sim.*, Vol. 72, 206-211, (2006).
- [35] S. P. Sullivan, L. F. Gladden, M. L. Johns, "Simulation of power-law fluid flow through porous media using lattice Boltzmann techniques", *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, Vol. 133, 91-98, (2006).
- [36] P. H. Kao, T.-F. Ren, R.-J. Yang, "An investigation into fixed-bed microreactors using lattice Boltzmann method simulations", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol.50, 4243-4255, (2007).
- [37] R. Beetstra, M.A. van derHoef, J.A.M. Kuipers, "A lattice-Boltzmann simulation study of the drag coefficient of clusters of spheres", *Computers & Fluids*, Vol. 35, 966-970, (2006).
- [38] B. Chopard, H. Nguyen, S. Stoll "A lattice Boltzmann study of the hydrodynamic properties of 3D fractal aggregates", *Math. Comp. Sim.*, Vol. 72, 103-107, (2006).