



ارائه یک الگوریتم جدید ترکیبی DSMC-Fokker Planck برای مدلسازی جریان گاز رقیق در نازل همگرا-واگرا همراه با پلوم

امیرمهران مهدوی^۱ و احسان روحی^{۲*}

^۱ محقق پسا-دکتر، مهندسی هوافضا، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

^۲ دانشیار، مهندسی هوافضا، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

مقاله مستقل، تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۰۴/۰۱، تاریخ بازنگری: ۱۳۹۹/۰۷/۲۰، تاریخ پذیرش: ۱۳۹۹/۰۹/۱۵

چکیده

در این مقاله به معرفی یک روش جدید ترکیبی برای مدلسازی جریان گاز رقیق در هندسه نازل همگرا-واگرا همراه با پلوم پرداخته می‌شود. روش فوکرپلانک (FP) به عنوان یک روش کارا برای مدلسازی جریان‌های رقیق مورد استفاده قرار گرفته است. این روش که بر مبنای تفریبی از معادله بولتزمن است، دارای هزینه محاسباتی پایینی نسبت به سایر روش‌های مشابه خود است. با این وجود روش FP در پیش بینی موقعیت موج ضربه‌ای دچار خطا می‌شود. روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو (DSMC) که یکی از شناخته شده‌ترین روش‌های مولکولی برای مدلسازی جریان است، دارای دقت بسیار بالایی است، اما این روش دارای هزینه محاسباتی نسبتاً بالایی است که این هزینه در اعداد نودسن‌های کم تشدید می‌شود. هدف از این تحقیق، پیدا کردن یک روش ترکیبی بهینه برای استفاده همزمان از سرعت حل مناسب محاسباتی روش FP و دقت بالای روش DSMC است. نتایج نشان داد که با استفاده از الگوریتم DSMC در نواحی مانند، گلوگاه و ناحیه موج ضربه‌ای و استفاده از الگوریتم FP در سایر نقاط، می‌توان الگوریتمی ترکیبی بدست آورد که هزینه محاسباتی پایینی داشته و دقتی مشابه DSMC داشته باشد.

کلمات کلیدی: نازل همگرا واگرا؛ الگوریتم DSMC؛ نودسن طول گرا دیانی؛ الگوریتم فوکرپلانک؛ الگوریتم ترکیبی؛ گاز رقیق.

A New Hybrid Fokker-Planck-DSMC Approach for Modeling Rarefied Gas in Convergent-Divergent Nozzle with Plume

A. Mahdavi¹, E. Roohi^{2,*}

¹ Post-Doctoral Fellow, Aerospace Eng., Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad, Iran

² Assoc. Prof., Aerospace Eng., Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad, Iran

Abstract

In this paper, we propose a new hybrid algorithm for modeling gas flow in convergent divergent nozzle with plume. For many years, the Fokker Planck (FP) approach has been well known for modeling gas flows. This method is an approximation of the Boltzmann equation. According to other molecular approaches, it has less computational cost. However, there are some errors in modeling shocks for FP. The DSMC approach is accurate enough to be known as one of the best approaches for modeling gas flows. However, this approach has high computational cost, Especially at low Knudsen numbers. The purpose of this article is to find an optimized hybrid algorithm to use high-speed modeling and sufficient accuracy simultaneously. The results showed that by using DSMC in throat and near the shock zone, we could obtain an efficient hybrid algorithm such as FP and an accurate algorithm such as the direct simulation Monte Carlo (DSMC) method.

Keywords: Convergent-Divergent Nozzle; DSMC Algorithm; Gradient Length Knudsen Number; Fokker-Planck Algorithm; Hybrid Algorithm; Rarefied Gas.

۱- مقدمه

در تحلیل جریان‌های رقیق شده، میزان رقیق‌شدگی جریان برحسب عدد نودسن^۱ بیان می‌شود که به صورت رابطه (۱) تعریف می‌شود:

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

که در آن λ و L به ترتیب متوسط فاصله آزاد مولکولی و طول مشخصه جریان هستند.

اسکاف و چیمبر^۲ [۱] عدد نودسن را برای مشخص کردن مرز رژیم‌های مختلف رقیق‌شدگی جریان به عنوان معیار درجه رقیق‌شدگی پیشنهاد دادند. بر این اساس، رژیم پیوسته (عدم لغزش) در محدوده عدد نودسن $Kn < 0.001$ ، رژیم گذار $0.001 < Kn < 0.1$ و رژیم آزاد مولکولی در محدوده عدد نودسن $0.1 < Kn < 10$ قرار دارند.

روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو^۳ (DSMC) در اوایل دهه ۶۰ میلادی توسط پرد^۴ [۲] جهت شبیه‌سازی جریان‌های گازی رقیق شده ارائه شد. در این روش، تحلیل جریان از طریق شبیه‌سازی حرکت مولکول‌های گاز ممکن می‌شود؛ اما از آنجا که بررسی حرکت تک‌تک مولکول‌ها بسیار وقت‌گیر و پرهزینه است، در این روش تعدادی مولکول شبیه‌سازی شده (ذره) به نمایندگی از کلیه مولکول‌ها مورد مطالعه قرار می‌گیرند. این روش هرچند در اعداد نودسن بالا راندمان مناسبی دارد، با این حال در اعداد نودسن پایین از نظر زمانی بسیار هزینه‌بر است؛ زیرا همچنان تعداد مولکول‌ها قابل ملاحظه است. شبیه‌سازی روش DSMC بدین صورت است که ابتدا با ایجاد شبکه محاسباتی مناسب، در هر سلول تعدادی ذره به صورت اتفاقی قرار گرفته و پس از آن حل جریان از طریق پیشروی در زمان انجام می‌شود. در هر گام زمانی، موقعیت جدید مولکول‌ها با توجه به بردار سرعت آنها تعیین شده و در صورت برخورد با دیوارها سرعت و مکان آنها پس از برخورد آنها محاسبه می‌شود.

از سوی دیگر، روش فوکرپلانک^۵ برای اولین بار توسط کرکود^۶ برای مایعات بررسی شد [۳]. بعدها این روش برای گازهای غلیظ نیز گسترش یافت [۴]. جنی و همکاران [۵] در سال ۲۰۱۰ این روش را برای گازهای رقیق شده توسعه دادند و یک الگوریتم آماری بر مبنای تقریب فوکرپلانک برای مدل‌سازی گازهای رقیق ارائه کردند. هرچند روش آن‌ها یک الگوریتم آماری بر مبنای تقریب فوکرپلانک برای مدل‌سازی گازهای رقیق بود که تنش‌های مولکولی و سرعت متوسط در محاسبات آن‌ها تطابق بسیار خوبی با DSMC، معادله بولتزمن خطی شده و داده‌های آزمایشگاهی داشت، اما تقریب این روش از مقدار انتقال حرارت و دما اشتباه بود. گرچی و همکاران [۶]، الگوریتم مذکور را توسعه دادند تا مشکل مربوط به پیش‌بینی انتقال حرارت را حل کنند. آن‌ها این کار را با معرفی یک جمله راندگی^۷ غیرخطی مرتبه چهار بر مبنای سرعت‌ها انجام دادند. الگوریتم ارائه شده توسط آن‌ها، برای گازهای چنداتی نیز گسترش پیدا کرد [۷]. آن‌ها این الگوریتم را برای گازهای تک‌اتمی نیز بهبود بخشیدند [۸]. سپس الگوریتم‌های ترکیبی فوکرپلانک-DSMC، به منظور بالا بردن سرعت روش DSMC به کار معرفی شدند [۹]. این الگوریتم‌ها بر اساس تعداد ذره‌های یک سلول، برای حل آن سلول با DSMC و یا FP تصمیم می‌گیرند. بر این اساس، در نودسن‌های پایین، حل به روش FP و در نودسن‌های بالا از روش DSMC استفاده می‌شود. این روش برای هندسه‌های مختلف بررسی شده [۱۰] و برای گازهای دو اتمی، توسعه یافته است. [۱۱] هرچند در کارهای انجام شده، تحقیقات خوبی روی روش فوکرپلانک صورت گرفته، اما برای برطرف کردن خطاهای این روش، تحقیقات زیادی صورت نپذیرفته است. اخیراً رضاپور و همکاران [۱۲ و ۱۳]، روش فوکرپلانک را برای گستره وسیعی از اعداد نودسن در هندسه‌های مختلف مورد مطالعه قرار دادند. آن‌ها نشان دادند، خطای روش فوکرپلانک در بخش‌هایی از جریان بیشتر می‌شود که گرادیان‌های شدید وجود دارد؛ بنابراین وجود یک روش ترکیبی که بر اساس خطای موجود در روش FP عمل کند، مهم به نظر می‌رسد.

¹ Knudsen number

² Schaaf & Chambre

³ Direct Simulation of Monte Carlo

⁴ Bird

⁵ Fokker Planck

⁶ Kirkwood

⁷ Drift

$$P_{ij} = \int_{R^3} v'_i v'_j S^{Boltz} d^3V \quad (۴)$$

$$P_i = \frac{1}{2} \int_{R^3} v'_i v'_j v'_j S^{Boltz} d^3V \quad (۵)$$

که در آن $v' = V - U$ ، S^{Boltz} سمت چپ معادله بولتزمن و U سرعت میانگین سلولی است. با فرض مدل مولکولی ماکسول می‌توان نوشت [۵، ۱۴ و ۱۵]:

$$P_{ij} = \frac{\delta \pi_{ij}}{\delta t} = -\frac{P}{\mu} \pi_{ij} \quad (۶)$$

$$P_i = \frac{\delta q_i}{\delta t} = -\frac{2P}{3\mu} q_i \quad (۷)$$

در اینجا μ ضریب لزجت دینامیکی، P فشار گاز، π_{ij} تانسور تنش و q_i شار حرارتی است؛ در نتیجه نسبت بین تنش و شار حرارتی که بیانگر عدد پرناتل است به $\frac{2}{3}$ می‌رسد، که مقدار صحیح عدد پرناتل برای گازهای تک اتمی است. با به کارگیری همین روش برای عملگر S^{FP} و فرض ضریب نفوذ اسکالر و اینکه رابطه انتگرالی

$$\int_{R^3} (A_i v'_j + A_j v'_i + D^2 \delta_{ij}) F d^3V \quad \text{به صورت بدون رد}^۲$$

است، می‌توان نوشت:

$$P_{ij} = \int_{R^3} (A_i v'_j + A_j v'_i + D^2 \delta_{ij}) F d^3V \quad (۸)$$

$$P_i = \int_{R^3} (A_i v'_j v'_j + 2A_j v'_i v'_j) F d^3V \quad (۹)$$

که در آن δ_{ij} دلتای دیراک است.

۳- طرح کلی الگوریتم

برای شروع یک تعداد مشخص n_p ذره با وزن w_i بر اساس تابع توزیع در نظر گرفته شده $F(V, x, t)$ تولید می‌شوند. باید توجه داشت که در اینجا، شبکه براساس میزان تغییرات متغیرهای ماکروسکوپی جریان تعیین می‌شود و اندازه گام زمانی بر اساس معیار کورانت معین می‌شود. الگوریتم فوکریلانک در شکل ۱ بیان شده است. این الگوریتم از مرحله ۱ تا ۳ در اولین گام زمانی انجام شده و مراحل ۴ تا ۷ در همه گام‌های زمانی تکرار می‌شوند. این الگوریتم دقیقاً مشابه الگوریتم روش DSMC است، با این تفاوت که قسمت برخورد

در این تحقیق به معرفی یک روش ترکیبی FP-DSMC می‌پردازیم که خطای موجود در روش فوکریلانک را معیار تغییر بین دو الگوریتم DSMC و FP قرار می‌دهد. بدین منظور، یک کد عددی ترکیبی مبتنی بر روش فوکریلانک و DSMC تدوین شده است. بر این اساس، در بخش‌هایی از جریان که گرادیان‌های شدید همچون، موج ضربه‌ای وجود دارد، الگوریتم از روش DSMC برای مدلسازی استفاده کرده تا خطای روش FP پوشش داده شود و در سایر بخش‌های جریان، از الگوریتم فوکریلانک استفاده می‌شود. این موضوع سبب می‌شود تا از دو ویژگی سرعت بالای الگوریتم فوکریلانک و دقت بالای روش DSMC به طور همزمان استفاده شده و یک الگوریتم کارا برای مدلسازی جریان رقیق بدست آید.

۲- تقریب فوکریلانک از معادله بولتزمن

انتگرال برخورد در معادله بولتزمن به صورت رابطه (۲) در نظر گرفته می‌شود:

$$\left(\frac{\delta F}{\delta t}\right)_{\text{coll}} = \frac{1}{m} \int_{R^3} \int_0^{4\pi} (F(V^*)F(V_1^*) - F(V)F(V_1)) g \sigma(\Omega, g) d\Omega d^3V_1 \quad (۲)$$

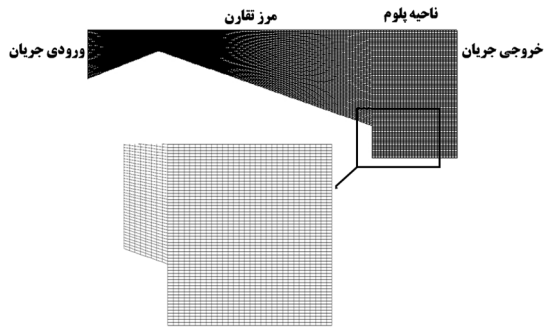
که در آن F تابع توزیع جرمی سرعت ذرات، سرعت‌های $(V^*$ و $V_1^*)$ سرعت‌های جفت ذرات بعد برخورد، سرعت‌های $(V$ و $V_1)$ سرعت‌های جفت ذرات قبل برخورد، σ سطح مقطع برخورد، Ω زاویه بین سرعت‌های قبل و بعد برخورد و $g = V - V_1$ سرعت نسبی است. اگر عدد نودسن بیش از حد بزرگ نباشد، مشتق زمانی F با معادله فوکریلانک تقریب زده می‌شود [۵، ۱۴ و ۱۵].

$$\left(\frac{\delta F}{\delta t}\right)_{\text{coll}} \approx -\frac{\delta}{\delta V_i} (A_i F) + \frac{1}{2} \frac{\delta^2}{\delta V_i \delta V_j} (D^2 F) = S^{FP} \quad (۳)$$

در اینجا A و D نشان دهنده ضریب راندگی و پخش^۱ هستند. ممان‌های مرتبه‌های دو و سه که مربوط به تانسور تنش و بردار شار حرارتی هستند، از معادله بولتزمن به صورت زیر به دست می‌آید.

^۲ Trace Free

^۱ Diffusion



شکل ۲- شماتیک نازل همراه با پلوم و شبکه استفاده شده

از گام زمانی متوسط برخورد کوچکتر است)، فشار ورودی ۱۰۰ Kpa و فشار خروجی ۱۵ Kpa در نظر گرفته شده است. تمامی دیواره‌های این هندسه، دمایی برابر ۳۰۰K داشته و دمای مرجع نیز $T_{ref} = 273/15K$ است؛ همچنین گاز ورودی به نازل نیز، دمایی ۳۰۰K دارد. نودسن جریان بر اساس مقطع ورودی برابر ۰/۰۰۰۵ بوده که در طول نازل و تا قبل از موج ضربه‌ای تا ۰/۰۰۵ نیز بالا می‌رود. طول میکروکانال نیز برابر ۰/۰۰۲۵۵۶ متر است.

میکروجرین‌ها معمولاً تحت یک گرادیان فشار فعالیت می‌کنند. از دیدگاه میکروسکوپی، مولکول‌های گازی علاوه بر سرعت متوسط مولکولی، به وسیله سرعت حرارتی (سرعت اتفاقی) نیز جابجا می‌شوند. در جریان‌های با سرعت بالا مانند جریان‌های ماورای صوت، سرعت حرارتی کوچکتر از سرعت متوسط است. در شبیه‌سازی DSMC جریان‌های با سرعت بالا، یک روش متداول اعمال شرط مرزی خلا در مرز خروجی است؛ به عبارتی هیچ مولکولی از ناحیه خارجی وارد میدان حل نمی‌شود. در جریان‌های کم سرعت، سرعت حرارتی از همان مرتبه سرعت متوسط است و صرف‌نظر کردن از شار جرمی ورودی ناشی از جریان حرارتی در مرز خروجی صحیح نمی‌باشد [۱۶].

۴-۲- الگوریتم DSMC و نحوه اعمال شرایط مرزی

ورودی و خروجی

برای الگوریتم DSMC از یک کد با الگوریتم برخورد NTC و مبتنی بر روش کره سخت متغیر استفاده شده است. این کد برای هندسه‌های مختلف مورد ارزیابی قرار گرفته است [۱۶-۱۸].



شکل ۱- الگوریتم روش فوکرپلانک

مولکولی که در روش DSMC به صورت صریح محاسبه می‌شود، در اینجا به کمک ممان‌های فوکرپلانک جایگزین شده است. [۵]

۴ - شرح مساله

در این قسمت به بررسی جریان نازل با پلوم پرداخته می‌شود.

۴-۱- جریان نازل همگرا واگرا همراه با پلوم

جریان در هندسه نازل، به دلیل اینکه گستره وسیعی از اعداد نودسن را تجربه می‌کند، همواره مورد علاقه پژوهشگران بوده است؛ همچنین وجود محفظه پلوم در انتهای نازل سبب می‌شود که تغییرات عدد نودسن در این مساله بسیار گسترده باشد. برای شبکه‌بندی این هندسه از شبکه منظم 100×60 برای نازل و 30×80 برای ناحیه پلوم استفاده شده است. شکل ۲ نمای کلی از این هندسه، شبکه استفاده شده در آن و شرایط مرزی اعمال شده را نشان می‌دهد.

به منظور مدلسازی جریان از گاز آرگون استفاده شده است. باتوجه به متقارن بودن نازل، نیمی از این نازل مدل شده و روی خط وسط، شرط تقارن اعمال شده است. گام زمانی برای این مدلسازی 2×10^{-11} در نظر گرفته شده (که

محاسباتی، $\langle N_C \rangle$ تعداد متوسط ذرات در هر سلول، σ_T سطح مقطع کل و C_r سرعت نسبی بین جفت ذره برخوردی است. انتخاب روش مورد نظر بین DSMC و فوکرپلانک به صورت زیر توسط گرجی و همکاران پیشنهاد شده است [۹]:

$$\begin{aligned} \text{DSMC} \quad N_C^{sel} &\leq N_C \\ \text{FP} \quad N_C &< N_C^{sel} \end{aligned} \quad (11)$$

اساس روش پیشنهاد شده توسط گرجی و همکاران بر مبنای بالابردن سرعت محاسباتی است. به عبارت دیگر، اگر تعداد برخوردها در یک سلول، بیشتر از تعداد ذرات باشد، الگوریتم ترکیبی، روش DSMC را استفاده خواهد کرد. در غیر این صورت، روش فوکرپلانک استفاده خواهد شد. این موضوع سبب شده است که هرچند روش ترکیبی پیشنهاد شده توسط آنها، سرعت محاسباتی بالاتری نسبت به DSMC دارد، اما همچنان از نظر دقت، به صورت کامل بررسی نشده است. در صورتی که اساس کار تحقیق حاضر بر مبنای بالا بردن دقت روش ترکیبی بوده و همین موضوع مزیت کار حاضر نسبت به سایر کارهای مشابه است. بر این اساس، در الگوریتم ترکیبی تحقیق حاضر، در جاهایی که دقت روش فوکرپلانک کم باشد، روش DSMC جایگزین می‌شود. این موضوع سبب می‌شود تا از مزایای سرعت بالای روش فوکرپلانک استفاده شده و در جاهایی که دقت این روش پایین باشد، روش DSMC جایگزین شود. شکل ۴ مقایسه‌ای را بین روش ترکیبی تحقیق حاضر و روش گرجی و همکاران برای جریان کوئت نشان می‌دهد.

شکل ۴-الف توزیع سرعت جریان کوئت را نشان می‌دهد. همانگونه که دیده می‌شود، حلگر ترکیبی حاضر و حلگر ترکیبی پیشنهاد شده توسط گرجی و همکاران [۹] برای پروفیل سرعت، مطابقت خوبی بر نتایج DSMC دارند. شکل ۴-ب نشان می‌دهد که برای توزیع تنش، الگوریتم ترکیبی گرجی و همکاران [۹] دقت کمی دارد، در حالی که الگوریتم تحقیق حاضر، به خوبی توانسته بر نتایج DSMC منطبق شود. دلیل خطای روش گرجی و همکاران در پیشبینی تنش برشی به این موضوع برمی‌گردد که تنش، ممان مرتبه سوم است؛ حال آنکه سرعت ممان مرتبه اول است و خطاهای عددی معمولاً در ممان‌های مراتب بالاتر خود را نشان می‌دهند. شکل ۴-ب به خوبی نشان می‌دهد که الگوریتم

۳-۴- الگوریتم Fokker Planck

الگوریتم فوکرپلانک استفاده شده در این کد، بر مبنای فوکرپلانک مکعبی^۱ مورد استفاده قرار گرفته است. این الگوریتم تابحال در شرایط و هندسه‌های مختلفی مورد ارزیابی دقیق قرار گرفته است [۱۲ و ۱۳]، ولی تاکنون برای مساله موج ضربه ای مورد استفاده قرار نگرفته است.

۴-۴- اعتبارسنجی نتایج

به منظور اعتبارسنجی نتایج و مقایسه الگوریتم حاضر با الگوریتم ترکیبی سایر مطالعات، الگوریتم ترکیبی حاضر برای جریان کوئت بررسی شده است. شکل ۳، شماتیک جریان کوئت را نشان می‌دهد. در این تحقیق، عدد نودسن جریان برابر ۰/۰۰۱ و دمای دیواره‌ها برابر ۳۰۰K است. سرعت دو صفحه برابر ۱۵۰ m/s و -۱۵۰ m/s است. چگالی گاز نیز برابر ۰/۰۰۱ kg/m³ در نظر گرفته شده است.

شکل ۴ سرعت و تنش جریان کوئت را روی محور افقی نشان می‌دهد. همانگونه که دیده می‌شود، مطابقت خوبی بین جریان حل شده توسط الگوریتم ترکیبی حاضر که در بخش ۵-۲ شرح داده شده و الگوریتم DSMC وجود دارد.

۵-۴- نوآوری تحقیق حاضر

روش ترکیبی FP-DSMC قبلاً نیز به عنوان یک روش ترکیبی، توسط گرجی و همکاران [۹] مورد استفاده قرار گرفته است. آن‌ها برای معیار سوئیچ بین دو الگوریتم فوکرپلانک و DSMC پیشنهاد دادند که از نسبت $\frac{N_C}{N_C^{coll}}$ استفاده کرد. اگر تعداد برخوردها در سلول N_C^{coll} ، بیشتر از تعداد ذرات در سلول N_C باشد، می‌توان به جای DSMC از فوکرپلانک استفاده کرد و در غیر این صورت روش فوکرپلانک ارجحیت دارد. تعداد برخوردها در یک گام زمانی در روش NTC در DSMC با رابطه زیر تخمین زده شود [۹]:

$$N_C^{sel} = \frac{1}{2} \frac{N_C \langle N_C \rangle F_N (\sigma_T C_r)_{\max} \Delta t}{V_C} \quad (10)$$

که در آن F_N تعداد مولکول‌هایی است که در الگوریتم عددی با یک ذره معادل نشان داده می‌شوند. V_C حجم سلول

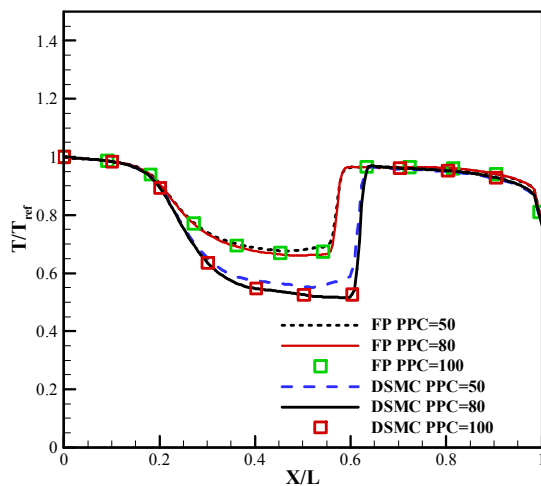
^۱ Cubic Fokker Planck

حاضر، نسبت به الگوریتم گرجی و همکاران [۹] دقیق تر بوده که این موضوع نوآوری و مزیت اصلی کار حاضر است.

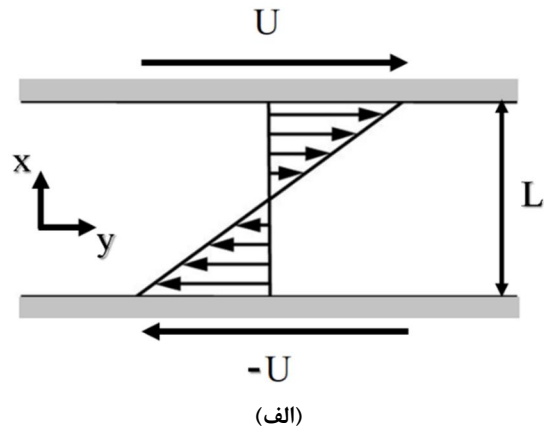
۵- نتایج تحقیق برای هندسه نازل همراه با پلوم

شکل ۵ نسبت دمای گاز به دمای مرجع (۲۷۳/۱۵K) را روی خط مرکزی نازل نشان می‌دهد. این شکل به خوبی نشان می‌دهد که الگوریتم FP در فاصله $0.7 < X/L < 0.2$ نسبت به الگوریتم DSMC خطا داشته که این خطا در $X/L=0.65$ بیشترین مقدار را دارد. این در حالی است که در سایر قسمت‌های نازل و پلوم، انطباق خوبی بین نتایج DSMC و FP وجود دارد.

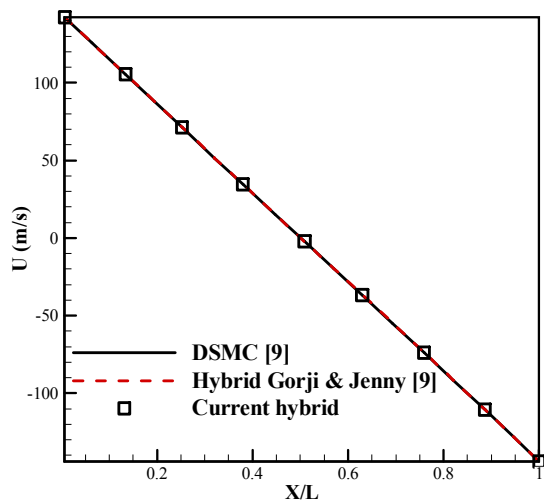
بنابراین می‌توان گفت که در ناحیه همگرا و پلوم، دقت روش فوکرپلانک مطلوب بوده، در حالی که در قسمت واگرای نازل، خطا بیشتر می‌شود. این موضوع به دلیل وجود موج ضربه‌ای در ناحیه واگرای نازل است. همانگونه که نشان داده شده است، موج ضربه‌ای در این نازل برای نسبت فشار اعمال شده در $X/L=0.65$ رخ می‌دهد. عملکرد ضعیف الگوریتم FP در موج ضربه‌ای در مطالعه دیگری نیز برای جریان روی صفحه گزارش شده است [۱۹]. وجود موج ضربه‌ای در قسمت واگرای نازل سبب می‌شود که خطای روش فوکرپلانک از محل موج ضربه‌ای تا گلوگاه و بعد از موج ضربه‌ای تا ناحیه پلوم ادامه داشته باشد. باوجود این خطا، باید به سرعت بالای محاسباتی روش فوکرپلانک اشاره کرد که نسبت به روش DSMC یک مزیت به حساب می‌آید.



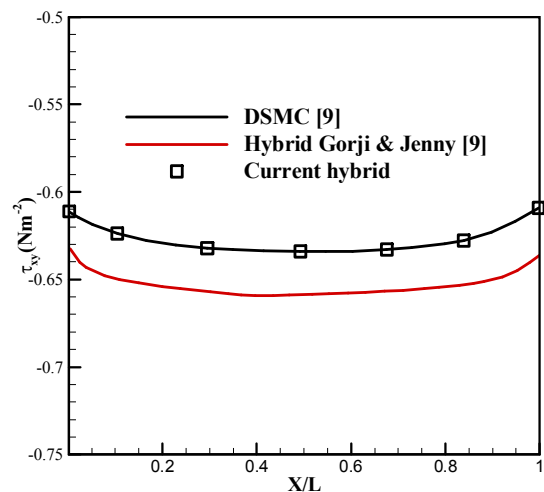
شکل ۵- نسبت دمای گاز به دمای مرجع روی خط مرکزی



(الف)

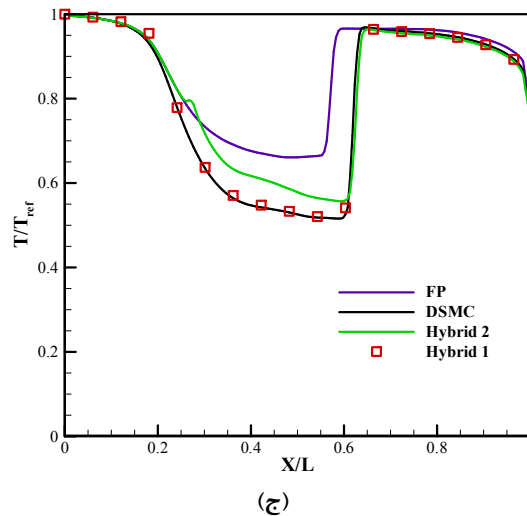
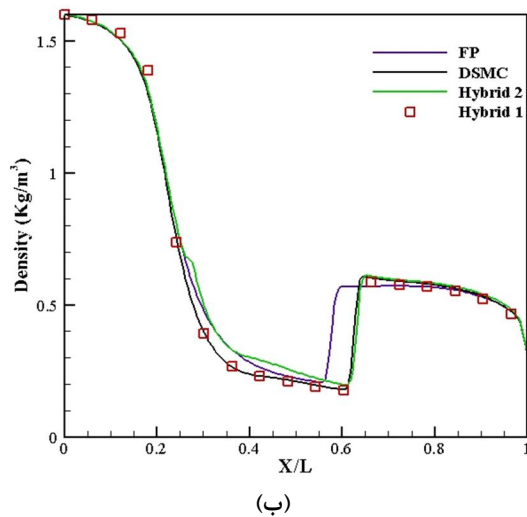
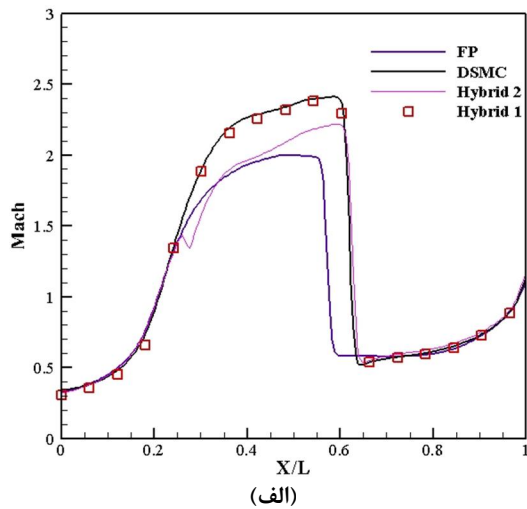


(ب)



(ج)

شکل ۴- مشخصات جریان یک بعدی کوئت: الف) شمایک جریان کوئت، ب) سرعت و ج) تنش در میدان

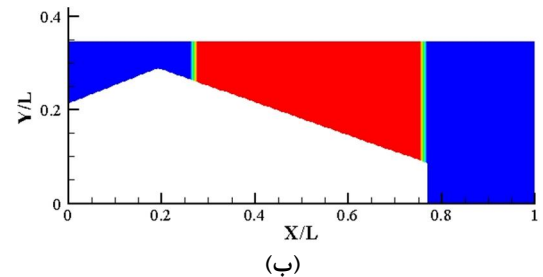
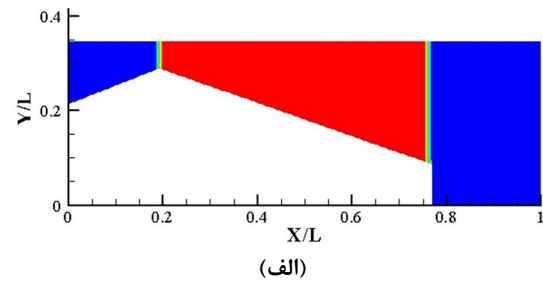


شکل ۷- نمودار مشخصات گاز آرگون روی خط مرکزی: (الف) توزیع عدد ماخ، (ب) توزیع چگالی و (ج) توزیع دما

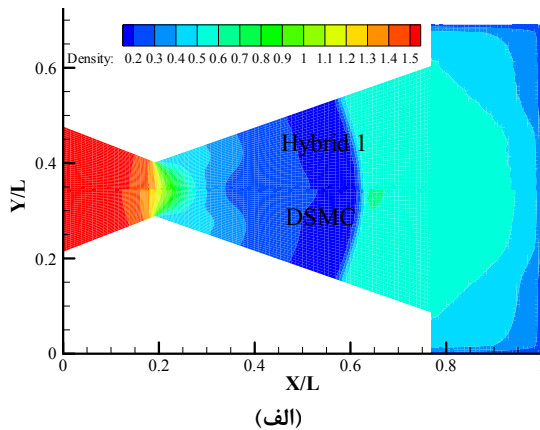
شکل ۵ استقلال از ذره برای دو روش استفاده شده را نیز نمایش می‌دهد. این شکل نشان می‌دهد که تعداد ۸۰ ذره در هر سلول، می‌تواند برای مدلسازی در هر دو روش استفاده شود. در ادامه، به معرفی دو راهبرد ترکیبی برای استفاده همزمان از مزیت سرعت بالای روش فوکریلانک و دقت بالای DSMC می‌پردازیم.

۵-۱- الگوریتم ترکیبی با استفاده از حلگر DSMC در قسمت همگرای نازل

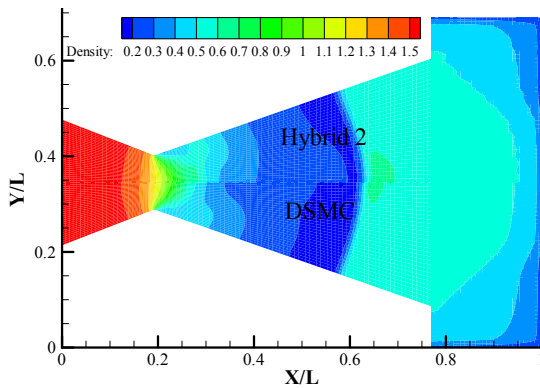
یک روش پیشنهادی برای تحلیل جریان در نازل همگرا واگرا که در آن موج ضربه‌ای رخ می‌دهد، استفاده از حلگر FP در بخش همگرا و ناحیه پلوم و استفاده از روش DSMC در ناحیه واگرای نازل (در بخشی که موج ضربه‌ای رخ می‌دهد) است. بدین منظور دو راهبرد مورد بررسی قرار گرفت. در راهبرد اول که با نام Hybrid1 مورد بررسی قرار گرفت، حل DSMC در کل قسمت واگرای نازل در نظر گرفته شد. این ناحیه در راهبرد دوم (Hybrid2)، بخشی از ناحیه واگرای نازل ($0.27 < X/L < 0.77$) است. شکل ۶ این دو الگوریتم را نشان می‌دهد. قسمت‌های آبی‌رنگ نشان‌دهنده بخش حل شده با روش FP و قسمت‌های قرمز رنگ نشان‌دهنده بخش تحلیل شده با روش DSMC هستند.



شکل ۶- الگوریتم ترکیبی FP-DSMC
رنگ قرمز: DSMC رنگ آبی: FP



(الف)



(ب)

شکل ۸- مقایسه کانتور چگالی روش DSMC با:

Hybrid 1 (ب) و Hybrid 2 (الف)

عدد نودسن طول گرادیانی به یکباره بالا می‌رود، خطای روش فوکرپلانک نیز بیشتر می‌شود و این موضوع به دلیل استفاده از تقریب‌های به کار رفته در روش FP است. آنها نودسن طول گرادیانی مورد سنجش را به صورت زیر تعریف کردند:

$$\text{Kn}_{\text{GL}} = \text{Max}(\text{Kn}_{\text{GLU}}, \text{Kn}_{\text{GLT}}, \text{Kn}_{\text{GLP}}) \quad (13)$$

یعنی نودسن طول گرادیانی را بیشترین مقدار نودسن سرعت، دما و فشار تعریف کرده‌اند. شکل ۹ نمودار تغییرات نودسن طول گرادیانی روی خط تقارن نازل را با استفاده از روش DSMC نشان می‌دهد. همانگونه که دیده می‌شود، مقدار نودسن طول گرادیانی در $X/L=0.65$ تغییرات شدیدی دارد. این موضوع به خاطر وجود موج ضربه‌ای در این نقطه از نازل است؛ همچنین در ناحیه $0.4 < X/L < 0.15$ نیز مقدار نودسن طول گرادیانی افزایش نسبی داشته است که این موضوع به دلیل وجود گلوگاه نازل است.

شکل ۷-الف نمودار عدد ماخ، شکل ۷-ب نمودار چگالی و شکل ۷-ج نمودار دما به دمای مرجع را روی خط مرکزی نازل نشان می‌دهد. همانگونه که دیده می‌شود، بر خلاف روش FP که نمی‌تواند موقعیت موج ضربه‌ای را درست پیدا کند، هر دو روش ترکیبی معرفی شده توانسته‌اند، محل دقیق موج ضربه‌ای را پیدا کنند. هرچند، الگوریتم Hybrid 2 در $X/L = 0.27$ دچار خطا در نتایج شده و این خطا تا بخش موج ضربه‌ای در قسمت همگرایی نازل ادامه پیدا کرده است، اما الگوریتم Hybrid 1 توانسته با دقت خوبی بر نتایج DSMC منطبق شود. در الگوریتم Hybrid 1 سهم حلگر DSMC از مدلسازی، ۵۷ درصد بوده و این سهم در الگوریتم Hybrid 2 برابر ۵۰ درصد است.

شکل ۸ کانتور چگالی الگوریتم‌های Hybrid 1 و Hybrid 2 در مقایسه با DSMC نشان داده شده است. در این شکل‌ها، نیمه پایینی نازل به کمک روش DSMC حل شده و نیمه بالایی آن در شکل ۸-الف به کمک الگوریتم Hybrid 1 و در شکل ۸-ب به کمک الگوریتم Hybrid 2 حل شده است. همانگونه که دیده می‌شود، در هر دو الگوریتم، ناحیه بعد از موج ضربه‌ای به درستی پیش‌بینی شده است. هرچند در ناحیه قبل از موج ضربه‌ای روش Hybrid 1 موثرتر عمل کرده است.

۵-۲- الگوریتم ترکیبی با استفاده از معیار تشخیصی

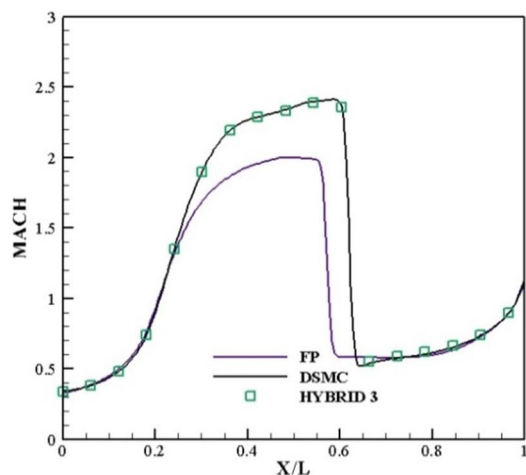
Kn_{GL}

در کنار عدد نودسن که میزان رقیق‌شدگی جریان را نشان می‌دهد، پارامتر دیگری نیز وجود دارد که میزان انحراف از شرایط تعادلی گاز را به صورت دقیق‌تر نشان می‌دهد. این پارامتر نودسن طول گرادیانی نامیده شده و به صورت زیر تعریف می‌شود: [۱۳]

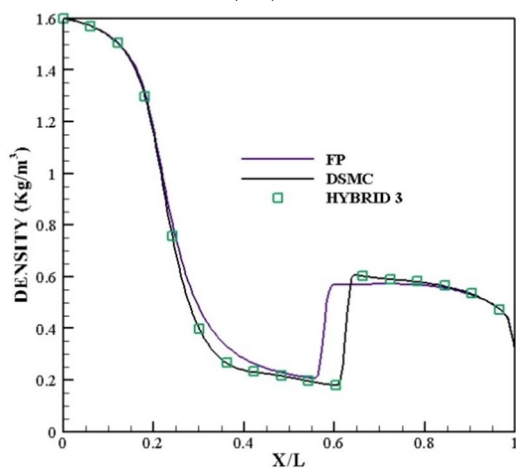
$$\text{Kn}_{\text{GL}\phi} = \frac{\lambda}{\phi} |\nabla\phi| \quad (12)$$

که ϕ می‌تواند هریک از ویژگی‌های گاز از قبیل دما، چگالی و غیره باشد. هرچقدر عدد نودسن طول گرادیانی در یک نقطه از جریان، بیشتر باشد، جریان فاصله زیادتری از شرایط تعادلی گرفته است.

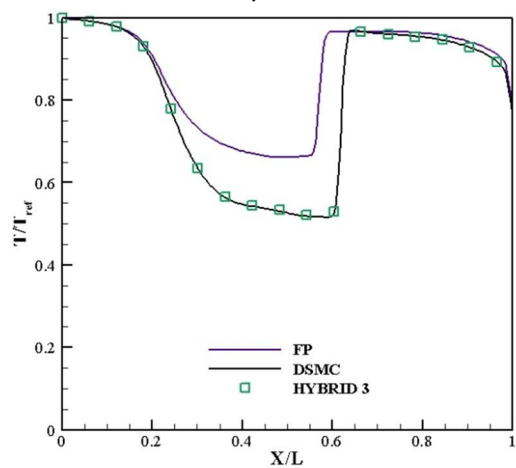
رضایور و دیگران نشان دادند که ملاک خطای روش FP، بالا بودن عدد نودسن طول گرادیانی (Kn_{GL}) در یک جریان است [۱۳]. آن‌ها نشان دادند که در بخش‌هایی از جریان که



(الف)



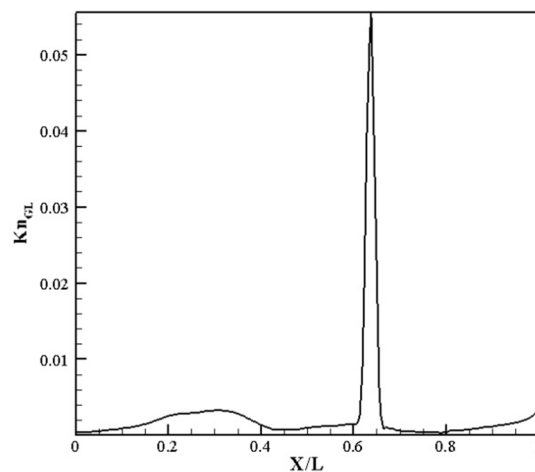
(ب)



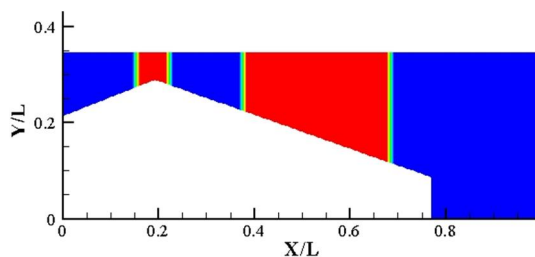
(ج)

شکل ۱۱- نمودار مشخصات گاز آرگون روی خط مرکزی: (الف) توزیع عدد ماخ، (ب) توزیع چگالی و (ج) توزیع دما

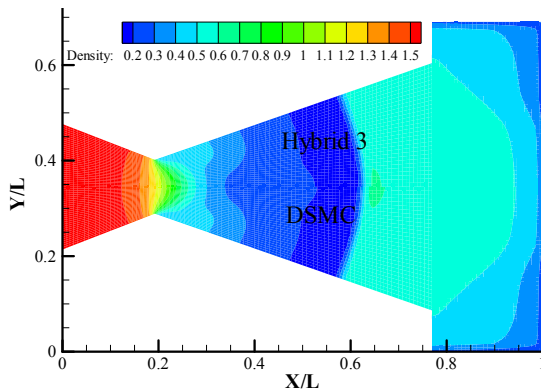
می‌توان از نودسن طول گرادیانی خط تقارن (بدست آمده از یک حل اولیه DSMC) به عنوان معیار تصمیم‌گیری برای انتخاب بین حل DSMC و FP نیز استفاده کرد. در این بخش یک الگوریتم ترکیبی جدید معرفی شده که اساس کار آن به این ترتیب بوده که در بخش‌هایی از نازل که مقدار نودسن طول گرادیانی خط تقارن به صورت نسبی بالا بوده (ناحیه گلوگاه و ناحیه نزدیک به موج ضربه‌ای)، از الگوریتم DSMC استفاده کرده و در سایر نواحی، از الگوریتم FP استفاده می‌کند. این مدل را با نام Hybrid 3 نامگذاری می‌کنیم. در این مدل، در فاصله $0.16 < X/L < 0.24$ و همچنین ناحیه $0.38 < X/L < 0.48$ از الگوریتم DSMC استفاده کرده و در سایر نواحی از الگوریتم FP استفاده شده است. ناحیه قرمز رنگ، با روش DSMC و ناحیه آبی‌رنگ با روش FP مدل‌سازی شده



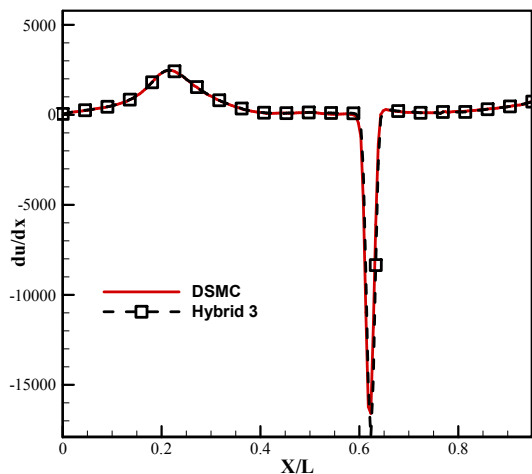
شکل ۹- نمودار تغییرات نودسن طول گرادیانی روی خط مرکزی



شکل ۱۰- نواحی الگوریتم ترکیبی FP-DSMC بر اساس نودسن طول گرادیانی رنگ قرمز: DSMC رنگ آبی: FP



شکل ۱۲- مقایسه کانتور چگالی روش DSMC با Hybrid 3



شکل ۱۳- توزیع مشتق سرعت روی خط مرکزی نازل

از DSMC به FP تغییر پیدا کرده، هیچگونه نوسانی در توزیع گردابه مشاهده نمی‌شود. البته باتوجه به اینکه مشتق مولفه اول سرعت، u نسبت به y و در روی خط تقارن باید صفر باشد و همچنین مولفه دوم سرعت v نیز روی خط تقارن صفر است، انتظار داریم که مقدار گردابه روی خط مرکزی صفر باشد. با این وجود، این مقدار کمی با صفر فاصله دارد که دلیل این موضوع به خطاهای روش محاسباتی برمی‌گردد.

۵-۳- مقایسه هزینه محاسباتی

یکی از مزایای استفاده از مدل فوکریلانک، هزینه محاسباتی پایین آن نسبت به روش DSMC است [۹]. جدول ۱ هزینه محاسبات زمانی هر الگوریتم نسبت به روش DSMC را با هم

است. در این حالت ۳۸ درصد جریان با الگوریتم DSMC و ۶۰ درصد به روش FP مدل شده است.

برای بررسی دقت این روش، نمودار عدد ماخ، چگالی و دما روی خط مرکزی کانال برای سه روش DSMC، FP و Hybrid 3 در شکل ۱۱ مقایسه شده است. همانگونه که دیده می‌شود، الگوریتم Hybrid 3 علاوه بر اینکه محل موج ضربه‌ای را به درستی پیش‌بینی کرده، مدلسازی جریان، قبل و بعد موج ضربه‌ای را نیز به درستی و با دقت انجام داده است. شکل ۱۱ نشان می‌دهد، این الگوریتم، علاوه بر اینکه از سرعت بالای محاسباتی روش FP برخوردار بوده، در بخش‌هایی که روش FP خطا دارد، با جایگزین کردن روش DSMC، دقت حل را نیز بالاتر می‌برد.

شکل ۱۲ مقایسه کانتور چگالی به روش DSMC (بخش پایین نازل) را با کانتور چگالی حل شده به روش Hybrid 3 (بخش بالایی نازل) را نشان می‌دهد. همانگونه که دیده می‌شود، بین دو روش DSMC و Hybrid 3 در همه نواحی نازل، شامل ناحیه واگرا، قبل از شوک، بعد از شوک و ناحیه پلوم تطابق خوبی وجود دارد. این موضوع نشان می‌دهد که اگر منابع ایجاد خطا در الگوریتم FP، شامل ناحیه موج ضربه‌ای و گلوگاه توسط روش DSMC پوشش داده شود، الگوریتم حاصل در همه نواحی از دقت بالایی برخوردار خواهد بود.

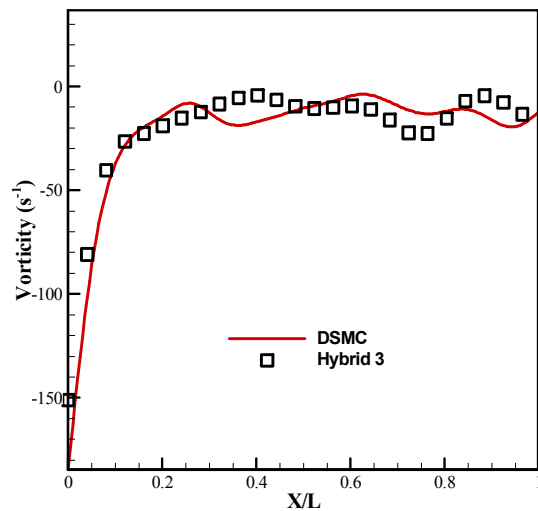
همچنین برای اطمینان از صحت نتایج در متغیرهایی که با مشتق در ارتباط هستند، مشتق مرتبه اول سرعت برای دو روش DSMC و Hybrid 3 در شکل ۱۳ باهم مقایسه شده‌اند. همانگونه که دیده می‌شود، انطباق خوبی بین دو روش DSMC و FP در تخمین مقدار مشتق وجود دارد. افت ناگهانی مشتق در $X/L=0.56$ بدلیل وجود موج ضربه‌ای در این ناحیه و افزایش نسبی مشتق سرعت در فاصله $0.24 < X/L < 0.16$ بدلیل وجود گلوگاه در این ناحیه است.

به منظور اطمینان از صحت نتایج الگوریتم و عدم وجود نوسان در مرز سلول‌هایی که در دو سمت آن، روش FP و DSMC استفاده شده است، توزیع گردابه روی خط مرکزی برای دو حلگر DSMC و Hybrid 3 در شکل ۱۴ مورد مقایسه قرار گرفتند. همانگونه که دیده می‌شود، روش Hybrid 3 نوسان زیادی نداشته و بخصوص در نواحی در فاصله $0.24 < X/L < 0.16$ و همچنین ناحیه $0.68 < X/L < 0.38$ که حلگر

بالاتر و روش FP از سایر روش‌ها پایین‌تر است. الگوریتم‌های ترکیبی که از هر دو روش DSMC و FP استفاده می‌کنند، زمانی مابین این دو روش را نشان می‌دهند.

۶- نتیجه گیری

در این مقاله به معرفی روش جدید ترکیبی دو الگوریتم FP و DSMC پرداخته شد. استفاده از این دو الگوریتم ترکیبی، سبب می‌شود که همزمان بتوان از سرعت بالای روش FP و دقت بالای روش DSMC استفاده کرد. در الگوریتم‌های معرفی شده در این مقاله، ابتدا نواحی از هندسه که دقت روش FP در آن کم می‌شود، معرفی شد و سپس در آن نقاط از روش DSMC استفاده شد. این نواحی شامل، قسمت واگرایی نازل بود که در آن موج ضربه‌ای رخ می‌داد. بنا بر یک الگوریتم ترکیبی، به کمک نودسن طول گرادیانی خط تقارن، می‌توان نقاطی از جریان که در آن، گرادیان شدید در عدد نودسن طول گرادیانی خط تقارن وجود دارد (مثل گلوگاه و موج ضربه‌ای) را به عنوان نقاط با بیشترین خطای ممکن بین دو روش DSMC و FP پیدا کرد و با استفاده از الگوریتم DSMC در این نواحی و الگوریتم FP در سایر نواحی، همزمان از سرعت بالای FP و دقت بالای DSMC در مدلسازی جریان استفاده کرد. نتایج نشان داد که طبق الگوریتم جدید مبتنی بر نودسن طول گرادیانی خط تقارن، زمان برابر ۰/۶۵ مدلسازی جریان با روش DSMC مورد نیاز است که این به معنای ۳۵ درصد کاهش هزینه‌های محاسباتی برای مساله مورد بررسی است.



شکل ۱۴- توزیع گردابه روی خط مرکزی نازل

مقایسه کرده است. همانگونه که دیده می‌شود، هزینه محاسباتی الگوریتم فوکریلانک، برابر نصف روش DSMC است؛ همچنین الگوریتم‌های ترکیبی پیشنهاد شده نیز از نظر هزینه محاسباتی، کارتر از روش DSMC هستند. با بررسی شکل ۶ و جدول ۱ می‌توان نتیجه گرفت که الگوریتم Hybrid 3 که بر مبنای نودسن طول گرادیانی خط تقارن کار می‌کند، از نظر دقت مطلوب بوده و از نظر هزینه محاسباتی نیز به اندازه ۰/۶۵ روش DSMC نیاز به زمان محاسباتی دارد.

همچنین جدول ۲ زمان محاسباتی مورد نیاز برای هر یک از روش‌ها را بر اساس زمان نشان می‌دهد. همانگونه که دیده می‌شود، زمان محاسباتی روش DSMC از همه روش‌ها

جدول ۱- نسبت هزینه روش‌های مختلف به روش DSMC

Hybrid 3	Hybrid 2	Hybrid 1	FP	هزینه محاسباتی DSMC
۰/۶۵	۰/۷	۰/۸	۰/۵	

جدول ۲- زمان مورد نیاز (CPU time) برای روش‌های مختلف

Hybrid 3	Hybrid 2	Hybrid 1	FP	DSMC	زمان مورد نیاز $\times 10^2 (s)$
۳۰۹	۳۲۹	۳۸۶	۲۳۸	۴۷۲	

لزجت دینامیکی (kg/(ms))	μ		۷- فهرست علائم
تانسور تنش	π	ضریب راندگی	A
چگالی (kg/m ³)	ρ	ضریب پخش	D
ثابت زمانی	τ	انرژی داخلی، (kJ/kg)	e
	بالانویس‌ها	تابع توزیع جرمی	F
بولتزمن	Boltz	نیروی خارجی	G
فوکر پلانک	FP	ثابت بولتزمن، (K ⁻¹)	k
	زیرنویس‌ها	عدد نودسن	Kn
برخورد	coll	طول مشخصه جریان، (m)	L
اولیه	initial	سرعت معادل ذره، (m/s)	M
مربوط به شرایط مرجع	ref	عدد ماخ	Ma
		تعداد مولکول‌ها	N
		فشار (kg/(ms ²))	P
		تعداد ذرات در هر سلول	PPC
		عدد پراتل	Pr
		شار حرارتی، (w/m ²)	q
		زمان، (s)	t
		دما، (K)	T
		سرعت در راستای x، (m/s)	u_j
		سرعت سلولی، (m/s)	U
		سرعت در راستای y، (m/s)	v_j
		موقعیت مکانی ذره، (m)	$x(t)$
			علائم یونانی
		فاصله متوسط مولکول‌ها، (m)	δ
		گام زمانی، (s)	Δt
		گام مکانی، (m)	Δx
		متوسط فاصله‌ی آزاد مولکولی، (m)	λ

۷- مراجع

[1] Chambre P, Schaaf S (2017) Flow of rarefied gases. Princeton University Press.

[2] Bird G (1963) Approach to translational equilibrium in a rigid sphere gas. Phys Fluids 6(10): 1518-1519.

[3] Kirkwood J (1946) The statistical mechanical theory of transport processes I. General theory. J Chem Phys 14(3): 180-201.

[4] Cercignani C (1988) The boltzmann equation, (Eds.), The Boltzmann Equation and Its Applications, 40-103, Springer.

[5] Jenny P, Torrilhon M, Heinz S (2010) A solution algorithm for the fluid dynamic equations based on a stochastic model for molecular motion. J COMPUT PHYS 229(4): 1077-1098.

[6] Gorji M, Torrilhon M, Jenny P (2011) Fokker-Planck model for computational studies of monatomic rarefied gas flows. JFM 680: 574-601.

[7] Gorji M, Jenny P (2013) A Fokker-Planck based kinetic model for diatomic rarefied gas flows. Phys Fluids 25(6): 62002.

[8] Gorji M, Jenny P (2014) An efficient particle Fokker-Planck algorithm for rarefied gas flows. J Comput Phys 262: 325-343.

[9] Gorji M, Jenny P (2015) Fokker-Planck-DSMC algorithm for simulations of rarefied gas flows. JCP 287: 110-129

[10] Jun E, Gorji M, Grabe M, Hannemann K (2018) Assessment of the cubic Fokker-Planck-DSMC

- Knudsen numbers. *Math Models Comput Simul* 1(6): 739.
- [16] Darbandi M, Roohi E (2011) Study of subsonic-supersonic gas flow through micro/nanoscale nozzles using unstructured DSMC solver. *Microfluid Nanofluidics* 10(2): 321-335.
- [17] Mahdavi A, Roohi E (2015) Investigation of cold-to-hot transfer and thermal separation zone through Nano step geometries. *POF* 27(7): 051507.
- [18] Mahdavi A, Le N, Roohi E, White C (2014) Thermal rarefied gas flow investigations through micro/nano backward-facing step: Comparison of DSMC and CFD subject to hybrid slip and jump boundary conditions. *Numer Heat Tr A-Appl* 66(7): 733-755.
- [19] Gorji M, Torrilhon M (2019) Entropic Fokker-Planck Kinetic model. *Proceedings A*.
- hybrid method for hypersonic rarefied flows past a cylinder. *Comput Fluids* 168:1-13.
- [11] Jun E (2019) Cubic Fokker-Planck-DSMC hybrid method for diatomic rarefied gas flow through a slit and an orifice. *Vacuum* 159: 125-133.
- [12] Rezapour V, Mahdavi AM, Roohi E (2019) Evaluation of rarefied shear flow in micro/nano geometries using Fokker-Planck technique. *Modares Mechanical Engineering* 19(7): 1721-1732.
- [13] Rezapour V, Mahdavi A, Roohi E (2020) Fokker Planck simulation of shear-driven micro/Nano flows: Investigating accuracy and efficiency. *Vacuum* 172C: 109065.
- [14] Pawula R (1967) Approximation of the linear Boltzmann equation by the Fokker-Planck equation. *Phys Rev* 162(1): 186.
- [15] Bogomolov S (2009) On Fokker-Planck model for the Boltzmann collision integral at the moderate