

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه فردوسی مشهد

انتشارات
۸۱۱

دینامیک گاز رقیق شده و روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو

دکتر احسان روحی گل خطمی
استاد دانشگاه فردوسی مشهد

سرشناسه:	روحی گل خطمی، احسان، ۱۳۶۱-
عنوان و نام پدیدآور:	دینامیک گاز رقیق شده و روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو/ احسان روحی گل خطمی؛ ویراستار علمی محمدرضا مدرس رضوی.
مشخصات نشر:	مشهد: دانشگاه فردوسی مشهد، انتشارات، ۱۴۰۰.
مشخصات ظاهری:	۱۷۶ ص؛ جدول، نمودار.
فروست:	انتشارات دانشگاه فردوسی مشهد؛ ۸۱۱.
شابک:	ISBN: 978-964-386-504-7
وضعیت فهرست‌نویسی:	فیبا.
یادداشت:	کتابنامه. نمایه.
موضوع:	گازها -- دینامیک
موضوع:	دینامیک مولکولی
موضوع:	روش مونت کارلو
شناسه افزوده:	مدرس رضوی، محمدرضا، ۱۳۲۶ -، ویراستار
شناسه افزوده:	دانشگاه فردوسی مشهد، انتشارات.
رده‌بندی کنگره:	QC۱۶۸
رده‌بندی دیویی:	۵۳۳/۲
شماره کتابشناسی ملی:	۸۵۲۰۲۳۵

Gas dynamics
Molecular dynamics
Monte Carlo method

دینامیک گاز رقیق شده و روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو

پدیدآورنده: دکتر احسان روحی گل خطمی
ویراستار علمی: دکتر محمدرضا مدرس رضوی
ویراستار ادبی: هانیه اسدیور فعال مشهد
مشخصات: وزیری، ۲۰۰ نسخه، چاپ اول، پاییز ۱۴۰۰
چاپ و صحافی: چاپخانه دقت
بها: ۴۹۰/۰۰۰ ریال
حق چاپ برای انتشارات دانشگاه فردوسی مشهد محفوظ است.



۸۱۱

مراکز پخش:

فروشگاه و نمایشگاه کتاب پردیس: مشهد، میدان آزادی، دانشگاه فردوسی مشهد، جنب سلف یاس
تلفن: ۳۸۸۰۲۶۶۶ - ۳۸۸۳۳۷۲۷ (۰۵۱)
مؤسسه کتابیران: تهران، خیابان کارگر جنوبی، خیابان لبافی‌نژاد، بین خیابان فروردین و اردیبهشت،
شماره ۲۳۸، تلفن: ۶۶۴۹۴۴۰۹ - ۶۶۴۸۴۷۱۵ (۰۲۱)
مؤسسه دانشیران: تهران، خیابان انقلاب، خیابان منیری جاوید (اردیبهشت) نبش خیابان نظری، شماره ۱۴۲
تلفکس: ۶۶۴۰۰۲۲۰ - ۶۶۴۰۰۱۴۴ (۰۲۱)

<http://press.um.ac.ir>

Email: press@um.ac.ir

تقدیم به همسر،

تقدیم به پدر و مادر

press.um.ac.ir

press.um.ac.ir

فهرست مطالب

پیشگفتار.....	۹
فهرست علائم.....	۱۱
فصل ۱. مفاهیم مقدماتی دینامیک گاز مولکولی.....	۱۵
۱-۱ مقدمه.....	۱۵
۲-۱ تئوری‌های اولیه ماده و گاز.....	۱۵
۱-۲-۱ مکانیک آماری و تئوری جنبشی.....	۱۷
۲-۲-۱ تئوری جنبشی گازها.....	۱۸
۳-۲-۱ ماهیت آماری تئوری جنبشی گازها.....	۱۹
۴-۲-۱ رژیم‌های جریان.....	۲۰
۵-۲-۱ محاسبه فشار گاز در سیال ساکن.....	۲۳
۶-۲-۱ سرعت مولکولی.....	۲۷
۷-۲-۱ انرژی مولکول‌های تک‌اتمی، دواتمی و چنداتمی.....	۲۸
۸-۲-۱ تابع توزیع پواسون.....	۳۰
۹-۲-۱ تعاریف گاز رقیق و جریان گاز رقیق شده.....	۳۳
۱۰-۲-۱ نیروی بین‌مولکولی.....	۳۵
۱۱-۲-۱ پتانسیل بین‌مولکولی.....	۳۵
۱۲-۲-۱ مدل لنارد جونز.....	۳۶
۱۳-۲-۱ مدل کره سخت.....	۳۸
۱۴-۲-۱ مدل توانی معکوس.....	۳۸
۱۵-۲-۱ مدل کره سخت متغیر.....	۳۹
۱۶-۲-۱ متوسط فاصله بین‌مولکولی (δ).....	۴۱
۱۷-۲-۱ مقدمات برخورد دوتایی.....	۴۱
۱۸-۲-۱ سطح مقطع پراکندگی.....	۴۲
۱۹-۲-۱ چشمه‌های نقطه‌ای نور.....	۴۳
۳-۱ برخورد دوتایی.....	۴۵
۱-۳-۱ محاسبه سرعت بعد از برخورد.....	۴۷

۵۴	۴-۱	استوانه برخورد
۵۵	۱-۴-۱	فرکانس برخورد
۵۷	۲-۴-۱	محاسبه احتمال برخورد
۵۸	۵-۱	لزجت
۵۸	۱-۵-۱	لزجت دینامیکی
۶۴	۲-۵-۱	ضریب لزجت از دیدگاه مولکولی [۲]
۶۵		تمرین‌ها

فصل ۲. استخراج معادله بولتزمن و معادلات ممان

۷۱	۱-۲	مقدمه
۷۱	۲-۲	تابع توزیع سرعت مولکولی
۷۴	۳-۲	متوسط‌گیری
۷۵	۴-۲	معادله بولتزمن
۸۲	۵-۲	ممان‌گیری از معادله بولتزمن
۸۵	۱-۵-۲	محاسبه تنش
۸۶	۲-۵-۲	محاسبه انتقال حرارت
۸۷	۶-۲	بسط چاپمن‌انسکوگ
۹۱	۷-۲	استخراج ضریب لزجت با استفاده از بسط چاپمن‌انسکوگ
۹۳		ضمیمه «أ»
۹۳		تمرین‌ها

فصل ۳. روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو (DSMC)

۹۵	۱-۳	مقدمه
۹۶	۲-۳	الگوریتم DSMC
۹۶	۱-۲-۳	مراحل شبیه‌سازی DSMC
۱۰۶	۳-۳	انواع طرح‌های برخوردی [۴]
۱۰۷	۴-۳	طرح‌های مبتنی بر معادله بولتزمن
۱۱۰	۱-۴-۳	مدل برخورد شمارنده زمانی (TC)
۱۱۱	۲-۴-۳	مدل برخورد شمارنده غیرزمانی (NTC)
۱۱۲	۳-۴-۳	مدل برخورد نزدیک‌ترین همسایه (NN)
۱۱۴	۵-۳	طرح‌های مبتنی بر معادله احتمالی کتس
۱۱۷	۱-۵-۳	فرایند شبه‌پواسانی (روش فراوانی برخورد)

فهرست مطالب ۷

۱۱۹.....	طرح برخورد فرکانس غالب (MFS)	۲-۵-۳
۱۱۹.....	آزمون‌های برنولی (BT)	۳-۵-۳
۱۲۳.....	طرح صندوق‌های رأی	۴-۵-۳
۱۲۴.....	طرح انتخاب‌های برنولی ساده‌شده (SBT)	۵-۵-۳
۱۲۶.....	طرح انتخاب‌های برنولی تعمیم‌یافته (GBT)	۶-۵-۳
۱۳۲.....	بررسی مسئله انتقال حرارت فوریه	۶-۳
۱۳۷.....	رفتار همگرایی طرح GBT در مسئله فوریه [۷]	۱-۶-۳
۱۳۹.....	ضمائم	
۱۶۵.....	تمرین‌ها	
۱۷۱.....	منابع	
۱۷۲.....	نمایه	

press.um.ac.ir

پیشگفتار

هدف از نگارش کتاب حاضر، مروری بر رفتار گازهای رقیق شده از دیدگاه مولکولی و تدوین تئوری‌های تحلیل عددی گازهای رقیق است. در دینامیک گازهای کلاسیک، گاز به صورت یک توده محیط پیوسته در نظر گرفته می‌شود که خواص ماکروسکوپی آن به صورت تابعی از مکان و زمان قابل تعریف است و معادلات پیوسته‌ای بر آن حاکم است. ولی اگر همین گاز را در محیط رقیق شده مانند ارتفاعات بالای جو و یا در یک مجرای بسیار کوچک مانند میکروکانال در نظر بگیریم، فرضیه پیوسته بودن سیال از نظر فیزیکی نتایج نادرستی به دست می‌دهد. به عبارتی در این شرایط رفتارهای مولکولی گاز بر پارامترهای ماکروسکوپی که بر اساس فرض محیط پیوسته تعریف می‌شوند، حاکم است و پدیده‌هایی که در شرایط متداول می‌بینیم الزاماً مشاهده نمی‌شوند. درک دقیق رفتارهایی مانند لغزش سرعت روی دیواره یک میکروکانال نیازمند داشتن آگاهی کاملی از دینامیک گاز مولکولی است.

در سطح بین‌المللی، کتاب‌های متعددی در زمینه دینامیک گاز مولکولی منتشر شده‌اند که از معروف‌ترین آن‌ها کتاب *دینامیک گاز مولکولی و روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو* تألیف گرام برد^۱ و کتاب *دینامیک گاز مولکولی* تألیف یوشیو سونه^۲ است. اغلب کتاب‌های مذکور و از جمله کتاب برد نسبتاً طولانی و با ریاضیات پیچیده تألیف شده‌اند و استخراج نکات کلیدی دینامیک گاز رقیق از آن‌ها نیازمند صرف زمان و بررسی دقیق و نسبتاً طولانی می‌باشد. متأسفانه تاکنون هیچ کتابی در این شاخه به زبان فارسی منتشر نشده است و خلأ وجود یک مرجع خلاصه و روان در این زمینه برای محققان فارسی‌زبان احساس می‌شود. بنابراین کتاب حاضر به‌عنوان اولین کتاب به زبان فارسی در مبحث دینامیک گاز مولکولی راهگشای محققان و دانشجویانی است که در این زمینه تحقیقاتی ورود پیدا کرده‌اند. این کتاب به‌طور خلاصه و مفهومی به بررسی اصول و ملاحظات دینامیک گاز مولکولی و مهم‌ترین روش تحلیل آن، یعنی روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو (DSMC)، می‌پردازد. کتاب حاضر در سه فصل تدوین شده است و سعی شده تا مباحث بنیادین موضوع در آن لحاظ شود. فصل اول کتاب به بررسی مفاهیم پایه، تعاریف، مدل‌های نیروهای بین‌مولکولی، تئوری جنبشی، برخورد دوتایی ذرات صلب، فرکانس برخورد و در نهایت استخراج لزجت گاز از دیدگاه مولکولی می‌پردازد. فصل دوم کتاب بر استخراج معادله بولتزمن تمرکز دارد. پس از استخراج این معادله، با ممان‌گیری از آن تنش و انتقال

1. Graeme Bird
2. Yoshio Sone

حرارت از مرتبه‌های دقت مختلف برحسب عدد نودسن قابل استخراج است. فصل سوم کتاب یک فصل کاربردی است که به توصیف کامل روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو (DSMC) و طرح‌های نوین برخوردی آن می‌پردازد. این فصل شامل الگوریتم‌ها و کدهای مرجع برای این طرح‌های نوین نیز می‌باشد. به صورت خلاصه کتاب حاضر برای تدریس در دروس دینامیک گاز ۲، دینامیک گاز رقیق شده و حتی بخش‌هایی از آن برای تدریس در درس مکانیک سیالات در ابعاد میکرو و نانو قابل استفاده است. تمرین‌های مناسبی نیز در انتهای هر فصل آورده شده است که در تعمیق یادگیری دانشجویان مؤثر است. در پایان، نویسنده از تمامی دانشجویان درس دینامیک گازهای مولکولی و دینامیک گازهای ۲ که در تهیه این کتاب، اعم از تایپ و تدوین فصول تا اشکال‌یابی، تهیه شکل‌ها و روان کردن متن در طی چند سال گذشته زحمات بسیاری را متحمل شدند، سپاسگزاری می‌کند. به صورت خاص از آقایان مهندس علی لطفیان، سپهر رفیعی‌نسب، سید علی علوی، وحید شهابی و رضا عرب‌پور به خاطر سهم شایسته‌ای که در تدوین این کتاب برعهده داشتند، تقدیر و سپاسگزاری می‌شود. بدون شک، تدوین این کتاب بدون زحمات این عزیزان و دیگر دانشجویان این جانب میسر نبود. نویسنده همچنین مراتب سپاس فراوان خود را به جناب آقای دکتر محمدرضا مدرس رضوی، استاد پیشکسوت گروه مکانیک دانشگاه فردوسی مشهد، تقدیم می‌کند که ویراستاری علمی کتاب را برعهده گرفتند و با صرف وقت فراوان و دقت شایسته، پیش‌نویس کتاب را مطالعه کردند و در بهبود متن نهایی کتاب، سهم قابل توجهی داشتند. در نهایت از تمامی خوانندگان عزیز درخواست می‌کنم هرگونه اشکال یا پیشنهاد برای بهبود کار را از طریق ایمیل e.roohi@um.ac.ir به نویسنده اطلاع دهند.

احسان روحی گل‌خطمی

استاد گروه مهندسی مکانیک دانشگاه فردوسی مشهد

پاییز ۱۴۰۰

فهرست علائم

نماد	نام فارسی	نام انگلیسی	واحد
A	مساحت	Area	m^2
b	پارامتر برخورد	Collision Parameter	m
c	سرعت مطلق	Absolute velocity	m/s
c_r	سرعت نسبی ذرات	Relative velocity of molecules	m/s
c_{mp}	محتمل ترین سرعت مولکولی	Most Probable Velocity	m/s
C	بار ذره باردار	Electric charge of particle	C
c_p	ظرفیت گرمایی ویژه در فشار ثابت	Specific heat capacity in the constant pressure	$J/(mol.K)$
c_v	ظرفیت گرمایی ویژه در حجم ثابت	Specific heat capacity in the constant volume	$J/(mol.K)$
d	میانگین قطر مولکولی	Mean molecular diameter	m
e_{tr}	انرژی جنبشی انتقالی ویژه	Specific translational kinetic energy	m^2/s^2
f	تابع توزیع سرعت	Velocity distribution function	
$f^M(f_0)$	تابع توزیع ماکسول (تعادلی)	Maxwell distribution function	
f	نیرو بر واحد سطح	Force	N/m^2
F	نیروی خارجی	External Force	N
F_x, F_y	مولفه‌های نیرو بر واحد طول	Force components	N/m
\mathcal{F}	شار	Flux	
h	ثابت پلانک	Plank Constant	Js
j	شار جرمی	Mass flux	$kg/(m.s)$
k	ثابت	Constant	
k	ثابت بولتزمن	Boltzmann constant	J/K
k_e	ثابت کولن	Coulomb constant	Nm^2/C^2
Kn	عدد نودسن	Knudsen Number	
L	طول مشخصه هندسه جریان	Characteristic length of the flow	m
m	جرم مولکولی	Molecular Mass	kg
M	جرم مولی ماده	Molar Mass	kg/mol
Ma	عدد ماخ	Mach number	
N	تعداد مولکول‌ها	Number of molecules	
p	فشار	Pressure	Pa
p_{ij}	تانسور تنش	Stress tensor	N
P	احتمال	Probability	
Po	توان حرارتی	Power	$N.m/s$
Pr	عدد پранتل	Prandtl number	
q	شار حرارتی	Heat flux	
R	ثابت گاز	Gas Constant	$J/K.mol$

r	فاصله بین دو ذره باردار	Electric charge particle distance	m
Re	عدد رینولدز	Reynolds Number	
R_f	عدد تصادفی	Random Number	
S	بردار سطحی	Surface vector	
$S_D^{\delta t}$	عملگر حرکت آزاد ذرات	Streaming operator	
$S_Q^{\delta t, h}$	عملگر برخورد	Collision operator	
t_s	زمان مشخصه	Characteristic Time	s
T	دما	Temperature	K
U	پتانسیل بین مولکولی	Potential between molecules	J
x, y, z	مؤلفه‌های مختصات دکارتی	Cartesian Coordinates	m
u, v, w	مؤلفه‌های ماکروسکوپی سرعت	Velocity components	m/s
V	حجم	Volume	m^3
نمادهای یونانی			
نماد	نام فارسی	نام انگلیسی	واحد
α	ضریب تبادل انرژی	Energy Accommodation Coefficient	
η	بازده حرارتی	Thermal efficiency	
ε	زاویه برخورد فضایی	Solid angle	$(deg)^0$
ε	مشخصه انرژی (حداقل سطح انرژی)	Energy Characteristic	
ν	فرکانس برخورد	Collision Frequency	
∇	حجم	Volume	m^3
γ	نسبت گرماهای ویژه	Specific Heat Ratio	
δ	میانگین فاصله مولکولی	Mean molecular distance	m
δt	گام زمانی	Time step	s
δt_{coll}	زمان میانگین برخورد	Mean collision time	s
δt_{tr}	حداقل زمان گذار	Transitional time step	s
θ	زاویه واگرایی	Divergent angle	$(deg)^0$
λ	طول پویش آزاد مولکولی	Molecular Mean Free Path	m
μ	لزجت دینامیکی	Dynamic Viscosity	$Pa.s$
ξ	درجه آزادی	Degree of Freedom	
ω	نمایه لزجت-دما	Viscosity-Temperature index	
π	عدد پی	Pi	
ρ	چگالی	Density	kg/m^3
σ_v	ضریب تبادل مماسی	Tangential Momentum Accommodation Coefficient	
σ_T	سطح مقطع برخورد	Collision cross section	
τ	زمان رهاش	time Relaxation	s
τ_{12}	تنش برشی	Shear Stress	Pa
ξ_x, ξ_y, ξ_z	مؤلفه‌های سرعت	Velocity components	m/s
ξ_x, ξ_y, ξ_z	مؤلفه‌های سرعت بی‌بعد	Normalized velocity components	
ξ_r	سرعت نسبی	Relative velocity	m/s
ξ	سرعت	Mean square root of the square of the velocity	m/s

χ	زاویه خیز	Scattering angle	deg°
χ_m	نسبت مولی	Mole Fraction	
Ω	زاویه فضایی	Spatial angle	(deg)°
زیر نویس ها			
نماد	نام فارسی	نام انگلیسی	
<i>avg</i>	میانگین	Average	
<i>cell</i>	سلول	Cell	
<i>C</i>	سرد	Cold	
<i>coll</i>	برخورد	Collision	
<i>eq</i>	تبادل	Equilibrium	
<i>H</i>	گرم	Hot	
<i>inint</i>	مقدار اولیه	Initialise	
<i>max</i>	بیشینه	Maximum	
<i>mp</i>	محتمل ترین	Most Probable	
<i>n</i>	عمودی	Normal	
<i>r</i>	کاهیده، نسبی	Reduced, Relative	
<i>ref</i>	مرجع	Reference	
<i>rms</i>	ریشه میانگین مربع	Root Mean Square	
<i>tr</i>	گذار	Transitional	
<i>v, t</i>	مماسی	Tangential	
<i>w</i>	دیواره	Wall	
بالا نویس ها			
نماد	نام فارسی	نام انگلیسی	
<i>i</i>	قبل از برخورد به دیواره	Before-collision	
<i>M</i>	ماکسول	Maxwell	
<i>r</i>	بعد از برخورد به دیواره	After-collision	
علائم اختصاری			
نماد	نام فارسی	نام انگلیسی	
BT	آزمون های برنولی	Bernoulli Trials	
CFL	کورانت لوی فردريک	Courant-Levy-Friedrich	
DSMC	شبیه سازی مستقیم مونت کارلو	Direct Simulation Monte-Carlo	
GBT	برنولی تعمیم یافته	Generalized Bernoulli Trial	
GHS	کره سخت عمومی	Generalized Hard Sphere	
GSS	کره نرم عمومی	Generalized Soft Sphere	
HS	کره سخت	Hard Sphere	
LB	لارسن برگناک	Larsen-Borgnakke	
MD	دینامیک مولکولی	Molecular dynamics	
MEMS	سیستم های میکروالکترومکانیکی	Micro-Electro-Mechanical Systems	

MF	فرکانس غالب	Major Frequency
NEMS	سیستم‌های نانو‌الکترومکانیکی	Nano-Electro-Mechanical Systems
NN	روش نزدیک‌ترین همسایه	Nearest Neighbor
NSC	تعداد زیرسلول	Number of Subcell
NTC	شمارنده غیر زمانی	No Time Counter
PPC	تعداد ذره در سلول	Particle per Cell
PPSC	تعداد ذره در زیرسلول	Particle per Sub-cell
SBT	برنولی ساده شده	Simplified Bernoulli Trial
TAS	زیرسلول تطبیقی گذرا	Transient Adaptive Sub-celling
TC	شمارنده زمانی	Time Counter
TSS	لغزشی تنش حرارتی	Thermal stress slip flow
VHS	کره سخت متغیر	Variable Hard Sphere
VSC	زیرسلول مجازی	Virtual Sub Cell
VSS	کره نرم متغیر	Variable Soft Sphere