AKIŞ PROBLEMLERİ İÇİN LATTİCE BOLTZMANN YÖNTEMİ VE UYGULAMALARI

THE LATTICE BOLTZMANN METHOD FOR FLUID FLOWS AND ITS APPLICATIONS

ZEKERİYA ÖZCAN

YRD. DOÇ. DR. ÖZGÜR EKİCİ

Tez Danışmanı

Hacettepe Üniversitesi

Lisansüstü Eğitim-Öğretim ve Sınav Yönetmeliğinin

Makina Mühendisliği Anabilim Dalı İçin Öngördüğü

YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak hazırlanmıştır.

ZEKERİYA ÖZCAN'ın hazırladığı "Akış Problemleri İçin Lattice Boltzmann Yöntemi ve Uygulamaları" adlı bu çalışma aşağıdaki jüri tarafından MAKİNA MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI'nda YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

| Doç. Dr. Murat KÖKSAL Başkan | |
|---|--|
| Yrd. Doç. Dr. Özgür EKİCİ Danışman | |
| Doç. Dr. Selin Aradağ ÇELEBİOĞLU Üye | |
| Yrd. Doç. Dr. Benat KOÇKAR Üye | |
| Yrd. Doç. Dr. Bilsay SÜMER Üye | |

Bu tez Hacettepe Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tarafından **YÜKSEK LİSANS TEZİ** olarak onaylanmıştır.

> Prof.Dr. Fatma SEVİN DÜZ Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

Hacettepe Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, tez yazım kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmasında,

- tez içindeki bütün bilgi ve belgeleri akademik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- görsel, işitsel ve yazılı tüm bilgi ve sonuçları bilimsel ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu
- başkalarının eserlerinden yararlanılması durumunda ilgili eserlere bilimsel normlara uygun olarak atıfta bulunduğumu,
- atıfta bulunduğum eserlerin tümünü kaynak olarak gösterdiğimi,
- kullanılan verilerde herhangi bir tahrifat yapmadığımı,
- ve bu tezin herhangi bir bölümünü bu üniversitede veya başka bir üniversitede başka bir tez çalışması olarak sunmadığımı

beyan ederim.

../../....

ZEKERİYA ÖZCAN

ÖZET

AKIŞ PROBLEMLERİ İÇİN LATTİCE BOLTZMANN YÖNTEMİ VE UYGULAMALARI

Zekeriya ÖZCAN

Yüksek Lisans, Makina Mühendisliği Bölümü

Tez Danışmanı: Yrd. Doç. Dr. Özgür EKİCİ

Şubat 2015, 88 Sayfa

Analitik olarak çözüm elde edebilmenin mümkün olduğu doğrusal (lineer) akış problemleri, Akışkanlar Mekaniği'ne dair problemlerin oldukça küçük ve genellikle teorik bir bölümünü oluşturur. Oysa gerçek hayatta karşılaşılan akış durumlarının tamamına yakını lineer olmayıp kompleks sınır şartlarını da içerir. İşte bu gibi durumların çözümü için modern mühendisliğin geliştirdiği en temel yaklaşımlardan birisi olan sayısal yöntemler kullanılır.

Sayısal yöntemlerin Akışkanlar Mekaniği'ndeki yansıması da Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği (HAD), (Computational Fluid Dynamics-CFD) alanıdır. HAD, akışkanlar dinamiği problemlerinin tarihiyle karşılaştırıldığında nispeten yeni bir yöntemler bütünüdür. Ana prensibi tüm sayısal yöntemlerde olduğu gibi teorikanalitik sonuçlara bazı sayısal tekniklerle mümkün olduğunca yakınsayabilmektir. HAD içerisinde de farklı yaklaşımlar söz konusudur. Lattice Boltzmann yöntemi de HAD içerisinde görece yeni bir teknik olarak dikkat çekmektedir.

Lattice Boltzmann yönteminin temel farklılığı, bir akış probleminde gerçekleşen fiziksel olayları hangi düzeyde incelediğiyle ilgilidir. Detaylandırmak gerekirse, örneğin klasik HAD yöntemleri (süreklilik yaklaşımıyla korunum denklemlerinin çözümüne dayanan) olayları makroskobik düzeyde inceler, molekül dinamiğine dayanan HAD çözücüleri ise mikroskobik düzeyde inceleme yapar. Lattice Boltzmann yöntemi ise bu iki yöntemin arasında olarak nitelendirilebilecek bir düzeyde (mezoskobik ölçekte) çözümü gerçekleştirmektedir.

i

Lattice Boltzmann yönteminde akış problemleri, istatistiksel mekanik teknikleri kullanılmak suretiyle aslında fiziksel olarak bir arada bulunmayan akışkana ait partiküllerin topluluklar halinde hareket ettiği ve bu hayali partikül topluluklarının akış süreci boyunca birbirini takip eden "serbest akış" ve "çarpışma" evrelerinden geçtiği varsayımına göre modellenir. Yöntem özellikle karmaşık sınır şartları ve çok fazlı akışlar söz konusuyken kullanışlı olabilmektedir.

Bu tez çalışmasında Lattice Boltzmann yöntemi kullanılarak bazı temel akış problemlerinin modellemeleri ve çözümleri gerçekleştirilmiş, elde edilen sonuçlar yerine göre deneysel ya da sayısal olmak üzere diğer yöntemlerden alınan sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Bu çalışma ile HAD alanında klasik yöntemlerden ayrı bir kategoride ele alınabilecek ve görece yeni bir yöntem olan Lattice Boltzmann yönteminin teorik altyapısı, uygulanabilirliği ve Lattice Boltzmann uygulamalarının verdiği sonuçlar hakkında bilgi sahibi olunması hedeflenmiştir.

Elde edilen sonuçlara bakıldığında, Lattice Boltzmann yönteminin düşük Mach sayısı yaklaşımıyla sıkıştırılamaz akışları laminer bölgede yeterli bir hassasiyetle simüle edebildiği görülmüştür. Ayrıca teorik olarak ikinci dereceden yakınsaklığa sahip Lattice Boltzmann yönteminin çözümlerdeki genel yakınsaklık derecesinin uygulanan sınır koşullarından direkt olarak etkilendiği anlaşılmıştır. Yöntem partikül mekaniğine yatkın doğası sebebiyle hem süreklilik yaklaşımının geçerli olduğu problemlerde hem de bu yaklaşımın uygulanamadığı ölçeklerde kullanılabilmektedir.

ABSTRACT

THE LATTICE BOLTZMANN METHOD FOR FLUID FLOWS AND ITS APPLICATIONS

Zekeriya ÖZCAN

Master of Science, Department of Mechanical Engineering Supervisor: Asst. Prof. Dr. Özgür EKİCİ

February 2015, 88 Pages

Linear flow problems, which have straightforward analytical solutions, occupy a quite restricted and theoretical place in Fluid Mechanics. Majority of real-life problems are usually non-linear and they contain complex boundary conditions too. In order to solve these kind of problems, one of the most fundamental approaches of the modern engineering is widely implemented: The Numerical Methods.

A reflection of numerical methods in Fluid Mechanics is named as "Computational Fluid Dynamics (CFD)". CFD is a relative new method in comparison to the history of Fluid Mechanics. Main objective of this method -like all other numerical methods- is to approximate the analytical results of problems as close as possible. There are different approaches in CFD as well. Lattice Boltzmann Method (LBM) is pointed out as a relative new method in CFD.

Main difference of LBM is about scaling the flow problems. For example, in classical CFD methods (Continuum approach – solutions of the conservation equations) flow is investigated at a macroscopic scale. On the other hand, molecular dynamics (MD) approach handles the problem at a microscopic level. Scale of the Lattice Boltzmann Method can be described as a midway between these two approaches (i.e. meso-scale).

iii

In Lattice Boltzmann method, flow problems are simulated by using the statistical mechanic techniques to form fictive particle groups, which don't exist in fact. Then these particle groups are considered to be moving (free streaming) and colliding (collision) along the flow domain. It is assumed that these consecutive behaviors of particle groups represent the fluid flow. This method is quite useful when it comes to complex boundary conditions and multiphase flows.

In this thesis, some benchmark problems of CFD are modelled and solved by the utilization of LBM. Results of LBM are compared with the other conventional CFD outputs. The aims of this study were to elaborate theoretical background of LBM and to get informed about the applicability and possible results of LBM applications.

Consequently, it is observed that the Lattice Boltzmann solvers can simulate incompressible fluid flows accurately by taking the "Low Mach Number Approximation" into consideration. Furthermore, it is shown that the theoretical order of convergence of Lattice Boltzmann Method is directly effected by the applied boundary conditions. LBM is applicable to both continuum and non-continuum flows due to it's nature which is eligible for particle mechanics.

TEŞEKKÜR

Tez çalışmamın başlangıcından itibaren verdiği büyük destek ve gösterdiği sonsuz sabırla bu çalışmanın var olmasını sağlayan danışmanım Dr. Özgür Ekici'ye minnettarlığımı ve teşekkürlerimi sunmayı bir borç bilirim. Çalışmalarım boyunca kendisinin rehberliği, ilham verici fikirleri ve çok değerli katkıları sayesinde pek çok şey öğrendim. Yanı sıra Akışkanlar Mekaniği konusunda kendilerinden aldığım derslerle vizyonumu genişleten çok değerli hocalarım Dr. Murat Köksal ve Prof. Dr.-Ing. Peter Wulf'a teşekkürlerimi arz ederim.

Ayrıca çalışmalarım ve araştırmalarım sırasında beni her zaman destekleyen arkadaşlarım Gökhan Erian, Fatih Eğilmez, M. Görkem Gültekin ve Erdem Aktaş'a, manevi destekleri için çalışma arkadaşım ve ağabeyim Doğan Yıldız'a, çalışmalarımı sürdürebilmem için sağladığı imkanlar dolayısıyla Dr. Recep Ayvalık'a ve son olarak benden hiçbir zaman maddi ve manevi desteğini esirgemeyip bugünlere gelmemi sağlayan aileme sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

İÇİNDEKİLER

<u>Sayfa</u>

| ÖZE | ΞΤ | i |
|-------|---|-------|
| ABS | STRACT | iii |
| TEŞ | EKKÜR | v |
| İÇİN | IDEKİLER | vi |
| ÇİZI | ELGELER | ix |
| ŞEK | ÍLLER | х |
| SİM | GELER VE KISALTMALAR | . xii |
| 1. | GIRIŞ | 1 |
| 2. | LATTİCE BOLTZMANN YÖNTEMİNİN HESAPLAMALI AKIŞKANLAR | |
| DİN | AMİĞİNDEKİ KONUMU | 2 |
| 2.1 | Genel Yaklaşımlar | 2 |
| 2.2 | Makroskobik Yaklaşım | 2 |
| 2.2.7 | 1 Sonlu Farklar Yöntemi | 3 |
| 2.2.2 | 2 Sonlu Hacimler Yöntemi | 4 |
| 2.2.3 | 3 Sonlu Elemanlar Yöntemi | 5 |
| 2.3 | Mikroskobik Yaklaşım | 5 |
| 2.4 | Lattice-Boltzmann Yöntemi -Mikro ile Makro Arasındaki Köprü | 7 |
| 3. | LATTİCE BOLTZMANN YÖNTEMİNİN TEORİK ALTYAPISI | 9 |
| 3.1 | Partikül Mekaniği | 9 |
| 3.1. | 1 Basınç-Sıcaklık-Kinetik Enerji | . 10 |
| 3.2 | Maxwell Dağılım Fonksiyonu -Mezoskobik Ölçeğin Anahtarı | .12 |
| 3.3 | Maxwell-Boltzmann Dağılımı -Boltzmann'ın Maxwell Denklemine Katkısı | .16 |
| 3.4 | Boltzmann Taşınım Denklemi | .18 |
| 3.4. | 1 Bhatnagar-Gross-Krook Çarpışma Operatörü Modeli | .21 |
| 3.4. | 1.1 BGK Boltzmann Denkleminin Özellikleri | .22 |
| 3.5 | Kafes Yerleşimleri | .23 |
| 3.6 | Denge Dağılım Denklemi | .24 |
| 3.7 | Chapman-Enskog Açılımı | .26 |
| 3.8 | Lattice Boltzmann Yönteminde Mach ve Reynolds Sayıları | .30 |
| 3.9 | Lattice Boltzmann Yönteminde Kütle ve Momentum'un Korunumu | .31 |
| 3.10 |) Sıkıştırılamaz İzotermal Akışlar İçin Çözüm Yöntemleri | .32 |

| 3.10.1 Navier-Stokes Süreklilik Yaklaşımı | 32 |
|---|----|
| 3.10.2 Alternatif Yaklaşım -Lattice Boltzmann Yöntemi | 33 |
| 3.10.2.1 Lattice Boltzmann Yöntemiyle Sıkıştırılamaz Akışın Modellenmesi | 33 |
| 3.10.3 Lattice Boltzmann ile Navier-Stokes Yöntemleri Arasındaki İki Fark | 35 |
| 3.10.3.1 Doğrusal Olmayan Taşınım Terimi | 35 |
| 3.10.3.2 Basınç Terimi | 35 |
| 3.11 Lattice Boltzmann Yöntemi'nde Sınır Koşulları | 36 |
| 3.11.1 Sabit Sınırlar | 36 |
| 3.11.2 Bilinen Bir Hızla Hareket Eden Sınırlar | 38 |
| 4. YÖNTEMİN BİLGİSAYAR UYGULAMASI | 41 |
| 4.1 Giriş | 41 |
| 4.2 Algoritma | 41 |
| 4.2.1 Çarpışma | 42 |
| 4.2.2 Serbest Akış | 43 |
| 4.2.3 Sınır Koşulları | 45 |
| 4.2.4 Yoğunluk ve Hız Bileşenlerinin Hesaplanması | 45 |
| 4.2.5 Ana Döngünün Sonu | 46 |
| 5. SAYISAL ÇÖZÜMLER | 48 |
| 5.1 Kapak Tarafından Hareketlendirilen Oyuk Akışı | 48 |
| 5.1.1 Sınır Koşulları | 50 |
| 5.1.2 Girdi Parametrelerinin Belirlenmesi | 50 |
| 5.1.3 Çözümün Zaman Adımı ve Ağ Yapısından Bağımsızlığı | 52 |
| 5.1.3.1 Re=100 | 52 |
| 5.1.3.2 Re=400 | 54 |
| 5.1.3.3 Re=1000 | 56 |
| 5.1.3.4 Re=3200 | 57 |
| 5.1.3.5 Re=5000 | 58 |
| 5.1.3.6 Re=7500 | 59 |
| 5.1.4 Oyuk Akışı Problemine Dair Elde Edilen Diğer Sonuçlar | 60 |
| 5.1.4.1 Hız Profilleri | 60 |
| 5.1.5 Lattice Boltzmann Uygulamalarında Mach Sayısı | 64 |
| 5.1.6 Reynolds 100 ve 1000 İçin Çözümün Yakınsaklığı | 65 |
| 5.2 Kanal Akışı | 68 |

| 5.2.1 Analitik Çözüm | 68 |
|---|----|
| 5.2.2 Sınır Koşulları | 69 |
| 5.2.3 Girdi Parametrelerinin Belirlenmesi | 69 |
| 5.2.3.1 Zaman Adımı | 69 |
| 5.2.3.2 Ağ Yapısı ve Çözümün Yakınsaklığı | 75 |
| 5.3 Basamak Üzerinden Kanal Akışı | 76 |
| 5.3.1 Sonuçlar | 78 |
| 5.3.1.1 Re=200 | 78 |
| 5.3.1.2 Re=600 | 80 |
| 6. SONUÇ VE ÖNERİLER | 83 |
| 7. KAYNAKLAR | 85 |
| 8. ÖZGEÇMİŞ | 88 |
| | |

ÇİZELGELER

| Say | <u>yfa</u> |
|---|------------|
| Çizelge 5.1: Re=100 Farklı zaman adımı değerleri için merkezi vorteks'in | |
| koordinatları | 52 |
| Çizelge 5.2: Re=100 Farklı hücre sayısı değerleri için merkezi vorteks'in | |
| koordinatları | 53 |
| Çizelge 5.3: Re=400 Farklı zaman adımı değerleri için merkezi vorteks'in | |
| koordinatları | 54 |
| Çizelge 5.4: Re=400 Farklı hücre sayısı değerleri için merkezi vorteks'in | |
| koordinatları | 55 |
| Çizelge 5.5: Re=400 125x125 hücre yapısı için artan zaman adımlarına göre | |
| merkezi vorteks'in koordinatları | 55 |
| Çizelge 5.6: Re=1000 Farklı zaman adımı değerleri için merkezi vorteks'in | |
| koordinatları | 56 |
| Çizelge 5.7: Re=1000 Farklı hücre sayısı değerleri için merkezi vorteks'in | |
| koordinatları | 57 |
| Çizelge 5.8: Farklı kinematik viskozite değerleri için mutlak hata miktarları | 61 |
| Çizelge 5.9: Re=100 için farklı ağ yapılarıyla gerçekleştirilen çözümler | 65 |
| Çizelge 5.10: Re=1000 için farklı ağ yapılarıyla gerçekleştirilen çözümler | .66 |
| Çizelge 5.11: Tüm Reynolds sayıları için çözüm parametreleri | .66 |
| Çizelge 5.12: Re=400 zaman adımı çalışması parametreleri | 70 |
| Çizelge 5.13: Re=400 artan zaman adımlarına karşılık hata miktarlarının değişim | ni |
| | 70 |
| Çizelge 5.14: Re=400 artan zaman adımlarına karşılık RMS hataların değişimi | 72 |
| Çizelge 5.15: Re=800 zaman adımı çalışması parametreleri | 73 |
| Çizelge 5.16: Re=800 artan zaman adımlarına karşılık hataların değişimi | 73 |
| Çizelge 5.17: Re=800 artan zaman adımlarına karşılık RMS hataların değişimi | 74 |
| Çizelge 5.18: Re=100 artan hücre sayılarına karşı değişen hata miktarları | 75 |
| Çizelge 5.19: Artan hücre sayılarına göre eksenel hızların değişimi | 75 |
| Çizelge 5.20: Re=200 basamak üzerinden kanal akışı için çözüm parametreleri | 78 |
| Çizelge 5.21: Re=200 ana sirkülasyon bölgesinin genişliği | .78 |

ŞEKİLLER

| | <u>Sayfa</u> |
|---|--------------|
| Şekil 2.1: Sonlu farklar yönteminde alt alanlara ayrılmış bir bölgenin şematik | |
| gösterimi | 6 |
| Şekil 2.2 : Sonlu hacimler uygulamasının şematik gösterimi | 7 |
| Şekil 2.3: Sonlu elemanlar yöntemiyle mekanik analizi yapılan bir makine par | rçası.8 |
| Şekil 2.4: Makro, mezo ve mikro ölçekler | 9 |
| Şekil 3.1: Konum ve hız vektörleri | 11 |
| Şekil 3.2: L uzunluğundaki bir kap içerisinde hareket eden partikül | 12 |
| Şekil 3.3: Sırasıyla c ve c+dc yarıçaplı iç içe küreler | 16 |
| Şekil 3.4: Helyum atomlarının farklı sıcaklıklar için örnek bir Maxwell dağılım | |
| grafiği | 17 |
| Şekil 3.5: Bir partikülün kuvvet uygulanmadan önceki ve sonraki konum ve h | IZ |
| vektörü | 21 |
| Şekil 3.6: D2Q9 Modelinin şematik gösterimi | 25 |
| Şekil 3.7: D2Q9 Modelinde serbest akış evresi | 36 |
| Şekil 3.8: D2Q9 Modelinde çarpışma evresi | 37 |
| Şekil 3.9: Yansıma sınır koşulu | 39 |
| Şekil 3.10: Serbest akış evresinden sonra sınırlardaki bilinmeyen dağılım | |
| fonksiyonları | 40 |
| Şekil 4.1: D2Q9 Modeli | 46 |
| Şekil 5.1: Kapak tarafından hareketlendirilmiş oyuk akışı | 51 |
| Şekil 5.2: Oyuk akışı için sınır koşulları | 52 |
| Şekil 5.3: Re = 100 için akış çizgileri ve vorteksler | 54 |
| Şekil 5.4: Re=400 için akış çizgileri ve vorteksler | 56 |
| Şekil 5.5: Re=1000 için akış çizgileri ve vorteksler | 58 |
| Şekil 5.6: Re=3200 için akış çizgileri ve vorteksler | 59 |
| Şekil 5.7: Re=5000 için akış çizgileri ve vorteksler | 60 |
| Şekil 5.8: Re=7500 için akış çizgileri ve vorteksler | 61 |
| Şekil 5.9: Tüm Reynolds sayıları için ana vorteksin merkez koordinatları | 61 |
| Şekil 5.10: Re=100,400 ve 1000 için geometrik merkezde v hız profilleri | 62 |
| Şekil 5.11: Re=100, 400 ve 1000 için geometrik merkezde u hız profilleri | 64 |
| Şekil 5.12: Re=3200, 5000 ve 7500 için geometrik merkezde v hız profilleri | 65 |

| Şekil 5.13: Re=3200, 5000 ve 7500 için geometrik merkezde u hız profilleri | 65 |
|---|-----|
| Şekil 5.14: Reynolds 100 ve 1000 için artan hücre sayılarına karşı mutlak hatar | าเท |
| azalışı | 68 |
| Şekil 5.15: Sabit hızlı kanal akışının şematik gelişimi | 70 |
| Şekil 5.16: Re=400 için artan zaman adımlarına karşı eksenel hızda yüzdesel | |
| hatanın değişimi | 73 |
| Şekil 5.17: Re=400 Kanal çıkışındaki hız profilleri | 73 |
| Şekil 5.18: Re=400 için kanalın farklı noktalarında akışın gelişimi | 74 |
| Şekil 5.19: Re=800 için artan zaman adımlarına karşı eksenel hızda yüzdesel | |
| hatanın değişimi | 75 |
| Şekil 5.20: Re=800 Kanal çıkışındaki hız profilleri | 76 |
| Şekil 5.21: Basamak üzerinden kanal akışı şematik gösterimi | 79 |
| Şekil 5.22: Basamak üzerinden kanal akışının gelişimi | 79 |
| Şekil 5.23: Re=200 için kanal içerisindeki akış çizgileri | 81 |
| Şekil 5.24: Re=600 için kanal içerisindeki akış çizgileri | 83 |
| Şekil 5.25: Re=600 için u-hızı görünütüsü | 84 |

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

| F | Kuvvet |
|-----------------|------------------------------|
| т | Kütle |
| t | Zaman |
| С | Partikül hız vektörü |
| r | Konum vektörü |
| а | İvme vektörü |
| A | Alan |
| V | Hacim |
| Ρ | Basınç |
| n | Mol sayısı |
| R | Üniversal gaz sabiti |
| Т | Sıcaklık |
| k | Boltzmann sabiti |
| E | Enerji |
| S | Entropi |
| Ω | Çarpışma operatörü |
| ρ | Yoğunluk |
| τ | Gevşeme faktörü/süresi |
| ω | Gevşeme parametresi/frekansı |
| f | Dağılım fonksiyonu |
| f ^{eq} | Denge dağılım fonksiyonu |
| W | Ağırlık faktörü |
| C _k | Kafes hızı |
| Cs | Kafes ses hızı |
| Г | Difüzyon katsayısı |
| Kn | Knudsen sayısı |
| Ма | Mach sayısı |
| Re | Reynolds sayısı |
| μ | Dinamik viskozite |
| ν | Kinematik viskozite |

Kısaltmalar

| HAD | Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği |
|-----|---------------------------------|
| LBM | Lattice Boltzmann Yöntemi |
| NS | Navier-Stokes Çözücüler |
| MD | Moleküler Dinamik |
| BGK | Bhatnagar-Gross-Krook |
| MRT | Multiple Relaxation Time |
| RMS | Root Mean Square |
| BB | Bounce Back |
| | |

1. Giriş

Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği (HAD), (İng. *Computational Fluid Dynamics*) akışkanlar mekaniğine dair problemlerin çözümünde kullanılan bir sayısal yöntemler bütününün genel adıdır. Yöntemin temel amacı analitik yöntemlerle çözülemeyen akışkanlar mekaniği problemlerinin sayısal yöntemlerle yaklaşık olarak çözülmesidir.

Akışkanlar mekaniği problemleri, doğaları gereği çoğunlukla doğrusal değildirler. Bu sebeple böylesine problemlerde analitik çözüm ancak belirli kabuller/basitlestirmeler ve sınır koşulları altında (Örn: Navier-Stokes Denklemlerinin tüm analitik çözümleri: Couette Akışı, Pouiseulle Akışı gibi) mümkün olabilmektedir. Çözümde en çok kullanılan denklem modelleri Navier-Stokes Denklemleri, Euler Denklemleri ve Potansiyel Akış denklemleridir. Problemin fiziğini anlamaya yönelik diğer bir yol ise deneysel yöntemlerle ampirik sonuçlar elde etmektir.

Analitik yöntemlerin çözüm alanının kısıtlı olması, deneysel yöntemlerin maliyeti göz önüne alındığında sayısal yöntemlerinin kullanılmasına yönelik bir motivasyon ortaya çıkmaktadır. Akışkanlar mekaniğinde sayısal yöntemlerin (HAD) kullanımındaki ana motivasyon, örneğin "sürtünme katsayısının tam olarak hesaplanması" gibi sadece özel durumlarda çözümü yapılabilen ve kolaylıkla doğrusal olmayan (non-lineer) durumlara yol açabilen önemli problemlerin çözülebilmesi imkanıdır. Bu sayede Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği, örneğin rüzgar tüneli gibi yöntemlere karşı uygun maliyetli bir alternatif oluşturabilmektedir.

Bu tez kapsamında Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği'nde görece yeni ve bu alanda en çok kullanılan konvansiyonel yöntem olan Navier-Stokes denklemleriyle yapılan makro çözümlere farklı bir alternatif oluşturan Lattice Boltzmann Yöntemi'nin (Kısaca LBM olarak anılacaktır) tanıtılması ve sıkıştırılamaz akışlar için bazı uygulamalarının yapılması hedeflenmiştir.

llerleyen bölümlerde sırasıyla klasik HAD çözüm modelleri ve LBM karşılaştırılacak, LBM'nin teorik altyapısı anlatılacak, bu teorik altyapının sayısal çözüme yönelik bilgisayar uygulamalarına değinilecek, elde edilen sonuçlar sunulacak, bulgular ve gelecek çalışmalar için öneriler kısmıyla tez tamamlanacaktır.

2. LATTICE BOLTZMANN YÖNTEMİNİN HESAPLAMALI AKIŞKANLAR DİNAMİĞİNDEKİ KONUMU

2.1 Genel Yaklaşımlar

Akışkanlar mekaniğinin transfer denklemlerinin (ısı, kütle ve momentum) sayısal olarak çözümlenebilmesi için genel kabul görmüş iki yol vardır. Bunlar süreklilik (İng. *Continuum*) yani makroskobik yaklaşım ve partikül mekaniği veya mikroskobik yaklaşım olarak adlandırılabilirler.

Süreklilik prensibini esas alan makro yöntemler sonlu farklar, sonlu hacimler ve sonlu elemanlar olmak üzere 3 alt başlıkta toplanabilir.

2.2 Makroskobik Yaklaşım

Makro düzeydeki en geniş kapsamlı modellere Navier-Stokes denklemlerinin çözümleri örnek verilebilir. Navier-Stokes denklem sistemi, ikinci dereceden doğrusal olmayan (İng. *Non-Linear*) kısmi diferansiyel denklemlerden oluşan bir sistemdir ve makro düzeydeki çoğu akış durumunu, süreklilik ve korunum kanunları – Kütle, Momentum ve Enerjinin korunumu (İng. *Conservation Laws*) - çerçevesinde matematiksel olarak modellemek için yeterlidir. Türbülans ve sınır tabaka problemleri de Navier-Stokes denklemleriyle bu kapsamda ele alınabilir ancak bunların çözümü üst düzeyde işlemci gücü, geniş bir hafıza alanı ve ileri sayısal yöntemler gerektirir.

Daha basit bir modele Euler Denklemleri örnek verilebilir, bu yöntemde sınır tabaka sürtünmesinin sonuçları ihmal edilir, ayrıca türbülans da ele alınmaz, dolayısıyla da "Akım Ayrılması (İng. *Flow Separation*)" gibi konular bu yöntemle simüle edilemez. Bunun için böyle durumlarda, Euler Denklemleri'ne uyum sağlayacak yapıdaki daha kaba ağ (İng. *Mesh/Grid*) yapılarıyla çözüm yapmak anlamlı olacaktır. Sınır tabaka'nın önemli bir rol oynamadığı böylesi akış parçalarında Euler Denklemleri oldukça uygun olabilmektedir.

Potansiyel Akış denklemleri ise hızlıca ve kaba bir şekilde bazı tahminlerin yapılmasının gerekli olduğu durumlarda kullanışlıdırlar. Bu denklemlerde sabit yoğunluk kabulüyle yapılacak sadeleştirmeler sonucunda Laplace Denklemi elde edilir.

Çok fazlı akışlarda (İng. *Multiphase Flow*) ise fazlar arasındaki etkileşimler çözümde önemli rol oynamaktadır, bunun yanı sıra buradaki denklemlerde de uygun sadeleştirmeler yapılabilir [1].

Süreklilik yaklaşımında enerji, kütle ve momentumun korunumu kanunlarını sonsuz küçüklükte bir kontrol hacmine uygulayarak adi veya kısmi diferansiyel denklemler elde edebilmek mümkündür. Pek çok farklı faktör dolayısıyla (nonlineerlik, karmaşık sınır koşulları, girift geometriler gibi) temel diferansiyel denklemleri çözmek zor olduğundan sonlu farklar, sonlu hacimler, sonlu elemanlar gibi sayısal yöntemler kullanılarak bu denklemlerin verilen başlangıç ve sınır koşullarında bir cebirsel denklemler sistemine dönüştürülmesi sağlanmaktadır. Elde edilen cebirsel denklemler yeterli yakınsama kriteri (İng. *Convergence Criteria*) sağlanana dek iteratif olarak çözülebilmektedir.

Daha detaylı anlatmak gerekirse, öncelikle çözülmesi gereken temel denklemler belirlenir (genelde kısmı diferansiyel denklemlerdir). Daha sonra söz konusu alan uygulanacak yöntemin şekline göre hacimlere, hücresel ağlara veya sonlu elemanlara bölünür. Bu aşamada her hacmin, ağ noktasının veya elemanın bir parçacıklar topluluğunu içerdiği görülebilir. Ölçek makro düzeydedir. Tüm bu parçacıkların hızları, basınçları, sıcaklıkları kullanılan yönteme göre bir noktasal değer, sonlu bir hacme göre alınmış bir ortalama değer veya basitçe bir noktadan diğerine lineer veya bilineer olarak değişen değerler şeklinde ifade edilmektedir. Viskozite, termal iletkenlik, ısı kapasitesi vb. gibi termofiziksel özellikler ise genelde bilinen parametrelerdir yani girdi parametresi olarak kullanılırlar (tersine problemler hariç, tersine problemlerde bir veya birden fazla termofiziksel özellik bilinmiyor olabilir) [1]. Süreklilik yaklaşımında kullanılan sayısal yöntemler bir sonraki bölümde detaylı olarak ele alınmaktadır.

2.2.1 Sonlu Farklar Yöntemi

Sonlu farklar yöntemi adi ve kısmi diferansiyel denklemlerin çözümü için kullanılan bir sayısal yöntem sınıfıdır. Bu yöntemde ilk olarak denklemlerin uygulanacağı alan sonlu sayıdaki hücresel noktalarla küçük parçalara ayrılır. 1 boyutlu aralıklar eş uzunluktaki daha alt aralıklara, çok boyutlu olanlar ise dikdörtgensel hücresel ağ (İng. *Grid*) alanlarına ayrıştırılır.

Daha sonra aranan fonksiyonun hücresel ağ noktalarındaki türevleri diferansiyel katsayıları yoluyla (Bkz. sayısal türevleme) yaklaşık olarak hesaplanır. Aranan fonksiyonun yaklaşık çözümü, diferansiyel denklem takımlarının sayısal olarak bu şekilde çözülmesiyle elde edilir.

Aslında bir bakış açısıyla yöntem temel olarak Taylor serisi açılımına dayanmaktadır. Ağ yapısından kaynaklanan sınırlamalar sebebiyle kompleks geometrilerin çözümünde bu yöntemin uygulanabilirliği oldukça azdır.





2.2.2 Sonlu Hacimler Yöntemi

Sonlu hacimler yöntemi, korunum (İng. *Conservation*) denklemlerinin çözümü için kullanılan bir sayısal yöntemdir. Bu yöntemle bir korunum kanununa dayalı olarak ortaya çıkmış kısmi diferansiyel denklemler çözülmektedir.

Sonlu Hacimler Yöntemi, Hesaplamalı Akışkanlar Mekaniği'nde en fazla sıkıştırılabilir akış problemlerinde Euler ve Navier-Stokes (NS) Denklemlerinin standart bir çözüm yöntemi olarak görülmektedir. Bu yöntem, türetildiği şekliyle korunum denklemlerinin integral formu olarak kullanılır.

Bu yöntem, HAD'de en yaygın olarak kullanılan yöntemdir. Bunun sebebi konsept olarak basit olması ve herhangi bir ağ yapısı için uygulanabilirliğinin oldukça kolay olmasıdır. Sonlu hacimler yöntemi sayesinde korunum kanunlarının integral formu direkt olarak fiziksel alanda sonlu elemanlara ayrılabilir. Sonlu hacimler yöntemi esasen korunum kanunlarındaki en temel nicelikler olan -hücrelerdeki ortalama değerlerin- alınması prensibine dayanmaktadır. Sonuç olarak sonlu hacimler yöntemi, korunum denklemlerinin integral formunun sonlu elemanlara ayrılmasını direkt olarak gerçekleştirdiği için diğer yöntemlere göre büyük bir avantaja sahiptir.



Şekil 2.2 : Sonlu hacimler uygulamasının şematik gösterimi

2.2.3 Sonlu Elemanlar Yöntemi

Sonlu elemanlar yöntemi de kısmi diferansiyel denklemlerin çözümü için kullanılan sayısal bir yöntemdir. Günümüz mühendislik hesaplarında modern bir yöntem olarak yaygın bir biçimde kullanılmaktadır ve özellikle katı cisim analizlerinde standart bir araç haline gelmiştir.

Yöntemin esası diferansiyel denklemin gerçek çözümüne bir yardımcı yaklaşım denklemi aracılığıyla yakınsamaktır. Elde edilen sonucun gerçek çözüme göre hassasiyeti, serbestlik derecesi (İng. *Degree of Freedom*) denilen parametreyi yükseltmek ve dolayısıyla hesaplama sayısını çoğaltmak yoluyla artırılabilmektedir.



Şekil 2.3: Sonlu elemanlar yöntemiyle mekanik analizi yapılan bir makine parçası

2.3 Mikroskobik Yaklaşım

Makroskobik yaklaşıma göre diğer bir uç nokta olan yaklaşımda ise, söz konusu maddenin birbiriyle çarpışma halinde olan küçük partiküllerden (atom, molekül gibi) oluştuğu kabulüyle hareket edilir. Tabii olarak böyle bir yöntemde ölçek mikro düzeydedir.

Dolayısıyla burada, öncelikle partiküller arası oluşan kuvvetler belirlenmeli ve daha sonra Newton'un ikinci kanunundan gelen adi diferansiyel denklem çözülmelidir (momentumun korunumu). Her bir zaman adımı (İng. *Time Step*) için her bir partikülün konumu ve hızı, yani yörüngesi belirlenmelidir.

Bu aşamada sıcaklık, basınç ve termofiziksel büyüklükler olan viskozite, termal iletkenlik, ısı kapasitesi vb. tanımlanmasına gerek yoktur. Örneğin basınç ve sıcaklık sırasıyla, partiküllerin kinetik enerjileriyle (kütle ve hız) ve parçacıkların çeperlere çarpma sıklığıyla ilişkilidir. Bu yöntem Moleküler Dinamik (MD) simülasyonu olarak adlandırılmaktadır.

Bir moleküler dinamik problemini çözebilmek için kaç denklem çözmek gerektiğini anlatabilmek adına bir örnek vermek gerekirse; bir mol su $6x10^{23}$ 'ten fazla molekül içermektedir. Bu rakamı gözümüzde canlandırabilmek adına şöyle söyleyebiliriz, örneğin bu moleküllerin her birinin çapı 1 mm olsa ve bu moleküller yan yana dizilse, bu moleküllerle kaplanabilecek toplam alan $6x10^{11}$ km^2 civarındadır. Dünyanın toplam yüzey alanı $5.1x10^9$ km^2 'dir. Buna göre her bir molekül çapı 1 mm olsa, tüm dünyanın yüzey alanı bu moleküllerle kaplanabilir durumdadır. İşin diğer bir ilginç yanı, böyle bir projenin tamamlanması için geçebilecek muhtemel süredir. 1 mm, bir kalemin ucuyla bırakılan iz büyüklüğü olarak kabul edilirse, örneğin çok hızlı çalışan bir kişi saniyede 6 kalem izi (1mm'lik) bıraksa dahi en azından $3x10^{15}$ yıllık bir sürede bu işi ancak tamamlayabilecektir [3].

Burada şu soru ön plana çıkmaktadır: Gerçekten her bir atom veya molekülün davranışını izlememiz gerekiyor mu?

Söz konusu yöntemde her bir partikülün konumunu (x,y,z) ve hızlarını (c_x , c_y , c_z) tanımlamamız gerekmektedir. Ayrıca simülasyon için gereken zaman adımı da partiküllerin çarpışma sürelerinden kısa olmalıdır (Fero-saniyeler düzeyi; 10^{-12} s gibi).

Dolayısıyla cm düzeyindeki problemleri dahi MD yöntemiyle çözebilmek imkansız hale gelmektedir. Bu ölçekte viskozite, termal iletkenlik, sıcaklık, basınç gibi büyüklükler de tanımlanmış değildir [2;3].

MD yöntemleri aslında faz değişimi, kompleks geometriler gibi durumların kolaylıkla çözülebileceği yöntemlerdir fakat en büyük dezavantajı ölçek problemidir ve bu ölçekte gerçek hayatta karşılaşılan problemleri modelleyebilecek büyüklükte bilgisayarlar maalesef mevcut değildir ve yakın gelecekte de olası görünmemektedir.

2.4 Lattice Boltzmann Yöntemi - Mikro ile Makro Arasındaki Köprü -

Moleküler/mikro düzey ile makro düzey arasında geçişin sağlanabilmesi için "İstatistiksel Mekanik" yöntemlerinin kullanılması bu noktada makul bir seçenek oluşturmaktadır. Çünkü makro düzeyde, tekil partiküllerin davranışlarının bir önemi yoktur, önemli olan sonuçta ortaya çıkan etkilerdir. Dolayısıyla her bir partikülün konum ve hızlarının bilinmesine gerek yoktur.

İşte bu tezde yukarıda sözü edilen iki yöntemin tam da arasında yer alan Lattice Boltzmann Yöntemi ele alınacaktır. Söz konusu yöntemin temel amacı, mikro ölçek ile makro ölçek arasında, her bir partikülün davranışını değil bir partiküller topluluğunun davranışını ele almak suretiyle bir bağ oluşturabilmektir (Şekil 2.4). Makro ile mikro ölçek arasındaki bu ölçeğe de "Mezo Ölçek (İng. *Meso-scale*)" adı verilmektedir. Bunu sağlayan da "Dağılım Fonksiyonu (İng. *Distribution Function*)"'dur. Dağılım fonksiyonu bu partiküller topluluğunun davranışlarını tanımlayan bir fonksiyondur [2;3].



Şekil 2.4: Makro, mezo ve mikro ölçekler (alıntıdır [3])

Lattice Boltzmann yöntemi hem mikro hem makro yöntemlerin bazı avantajlarına sahiptir ve MD'ye kıyasla çok daha makul bir kaynak gereksinimi vardır.

Lattice Boltzmann Yöntemi (LBM)'nin avantajları arasında algoritmasının basitliği, kompleks alanlara uygulanabilirliği, farklı fazlar arasındaki ara-fazların (İng. *İnterphase*) izlenmesine gerek duyulmaksızın çok fazlı ve çok bileşenli akışların modellenebilmesi ve paralel işlemlere olanak sağlayabilmesi sıralanabilir.

Diğer yandan Navier-Stokes çözücüsüne göre bir dezavantajı, NS çözücüye göre daha fazla bilgisayar hafızası gerektirmesidir.

LBM istatistiksel mekanik prensipleri uyarınca partikül topluluklarının hareketini izlediğinden, akışı sadece makro düzeyde bir bütün olarak ele alan NS çözücüye göre bir miktar daha fazla hafıza alanı gerektiriyor olması doğal bir sonuçtur. Ancak bu durumun büyük bir dezavantaj oluşturmadığı, gerekli durumlarda paralelizasyon ile üstesinden gelinebilen bir durum olduğu bilinmektedir [18]. Ayrıca LBM hem mikro hem de makro düzeydeki problemleri güvenilir bir hassasiyet derecesinde çözebilmektedir [2;3].

3. LATTICE BOLTZMANN YÖNTEMININ TEORIK ALTYAPISI

3.1 Partikül Mekaniği

Tüm maddelerin molekül ve molekül altı partiküllerden meydana geldiği bilinen bir gerçektir. Söz konusu moleküller uzay boşluğunda rastgele hareket eden kürecikler olarak düşünülebilir. Bu hareket elbette kütle, momentum ve enerji'nin korunumu kanunlarına uygun olarak gerçekleşmektedir. Dolayısıyla Newton'un ikinci kanunu olan momentumun korunumu ifadesi burada uygulanırsa (Newton'un İkinci Kanunu: Lineer momentumdaki değişim oranı uygulanan net kuvvete eşittir):

$$F = \frac{d(mc)}{dt} \quad (3.1)$$

Burada *F* moleküller arasındaki ve olası diğer dış kuvvetleri, *m* partikülün kütlesini, *c* partikülün hız vektörünü ve *t* de zamanı ifade etmektedir. Kütle sabit kabul edilirse bu ifade:

$$F = \frac{d(mc)}{dt} = m \frac{dc}{dt} = ma \quad (3.2)$$

Şeklini alır ki burada *a* ivme vektörüdür. Partikülün konumu ise hız teriminin tanımından çıkarılabilir:

$$c = \frac{dr}{dt} \quad (3.3)$$

Eşitlik 3.3'te yer alan *r* partikülün orijine göre konumudur. MD yönteminde, yukarıda verilen denklemler *F*'in bilinen bir fonksiyon olması şartıyla çözülebilmektedir [3].



Şekil 3.1: Konum ve hız vektörleri (alıntıdır [3])

m kütleli bir partiküle bir *F* kuvveti uygulandığında, Şekil 3.1'de görüldüğü üzere partikülün hızı *c*'den *c*+*Fdt/m*'ye, konumu ise *r*'den *r*+*cdt*'ye gelecektir.

F kuvveti mevcut olmazsa, partiküller yön ve hız değişimine uğramaksızın serbestçe bir konumdan diğer bir konuma hareket edecektir (çarpışmanın olmadığı kabul ediliyor).

Eğer sistemin iç enerjisinde bir artış meydana gelirse (örneğin sistemin ısıtılması), partikül hızları yükselecek ve partiküller arası etkileşimler artacaktır.

Mikroskobik düzeydeki moleküllerin kinetik enerjilerinin artması olayı, makro seviyede *sıcaklık artışı* olarak yorumlanmaktadır. Yine mikroskobik seviyede partiküllerin sistem sınırlarına çarpma sonucu birim alan başına uyguladıkları kuvvetler, makro seviyede *basınç* olarak yorumlanmaktadır. Buradan basınç ve sıcaklık arasındaki ilişki incelenecek olunursa, sıcaklığın artması sonucu moleküllerin kinetik enerjilerinin artacağı ve sonuçta sistem sınırlarında gerçekleşen çarpma olaylarının artacağı, dolayısıyla basıncın yükseleceği rahatlıkla öngörülebilir.

3.1.1 Basınç-Sıcaklık-Kinetik Enerji

Herhangi bir partikülün pozitif *x*-yönünde c_x hızıyla *L* uzunluğunda bir kap içerisinde hareket ettiğini ve kabın her iki tarafına sürekli olarak çarpıp geri dönmekte olduğunu varsayalım (Şekil 3.2):





Duvardaki çarpışmanın tam elastik olduğu varsayılırsa, partikül tarafından kabın bir tarafına çarpma sonucu uygulanan kuvvet, partikülün momentumundaki değişime eşit olacaktır. Buna göre:

$$F\Delta t = mc_x - (-mc_x) = 2mc_x \quad (3.4)$$

Burada Δt çarpışmalar arasında geçen süredir. Eşitlik 3.4 aslında Newton'un 2. Kanunu olan Denklem 3.2'nin ilgili sınır koşulları kullanılarak integrali alınmış halidir. Çarpışmalar arasında geçen süre ise $2L/c_x$ olup, bu süre partikülün kabın bir tarafından diğer tarafına gitmesi ve geri eski konumuna dönmesi için gerekli süredir. Dolayısıyla;

$$F\Delta t = \frac{2LF}{c_x} = 2mc_x$$
$$F = mc_x^2/L \quad (3.5)$$

denklemi kuvveti hesaplamak amacıyla elde edilebilir. Burada tek partikül için elde edilen sonuç, *N* sayıda partikül için genelleştirilebilir. *N* sayıda partikülün uyguladığı kuvvet Nmc_x^2/L ile orantılıdır. Hız vektörü *c* ile c_x , c_y , c_z hız bileşenleri arasında $c^2 = c_x^2 + c_y^2 + c_z^2$ ilişkisinin olduğu bilinmektedir. İfadeyi basitleştirmek için tüm hız bileşenleri eşit kabul edilirse $c^2=3c_x^2$ olacaktır. Böylece toplam kuvvet:

$$F = Nmc^2/3L$$
 (3.6)

şeklinde yazılabilir. Basınç, tanımı gereği birim alana dik olarak uygulanan kuvvet olduğundan, *N* partikül tarafından kabın iki tarafına uygulanan basınç:

$$P = \frac{Nmc^2}{3LA} = \frac{Nmc^2}{3V} \quad (3.7)$$

Burada V = LA hacimdir.

Moleküllerin kinetik enerjilerinin makroskobik düzeyde basınçla ilişkilendirilmesi matematiksel bir manipülasyon sonucunda şu şekilde yapılabilir:

$$P = \frac{Nmc^2}{3V} = \left(\frac{mc^2}{2}\right) (\frac{2}{3}) N/V \quad (3.8)$$
$$P = (\frac{2}{3}) n KE \quad (3.9)$$

Burada "KE" kinetik enerjiyi ifade etmektedir.

Yukarıdaki denklemler türetilirken moleküller arası etkileşimler ve molekül boyutlarının etkileri göz ardı edilmiştir. Ancak yine de bu sonuçlar, oda sıcaklığındaki bir gaz için şaşırtıcı bir biçimde doğrudur. Gerçek bir sistemde partiküllerin hacimleri söz konusudur ve partiküller arası çarpışmalar gerçekleşmektedir [3].

İdeal gaz denklemi:

$$PV = nRT$$
 (3.10)

n burada mol sayısını göstermektedir (N/N_A ve N_A : *Avogadro Sayısı*), *R* ise universal gaz sabitidir. Eşitlik 3.8, 3.10'da yerine yazılırsa:

$$\frac{N}{N_{A}RT} = \left(\frac{mc^2}{2}\right)(\frac{2}{3})N$$
 (3.11)

Boltzmann sabiti ($k = \frac{R}{N_A} = 1.38 x 10^{-23} J/K$) de eklenirse buradan (ideal) bir gazın kinetik enerjisini gösterir ifade çıkarılabilir:

$$KE = \frac{mc^2}{2} = (3/2) kT$$
 (3.12)

Burada yapılan matematiksel manipülasyonların özeti olarak aslında makro düzeyde tanımlanan sıcaklık ve basınç parametrelerinin, mikro düzeydeki moleküllerin kinetik enerjilerinin (makro) bir ölçeğinden başka bir şey olmadıkları söylenebilir [3].

3.2 Maxwell Dağılım Fonksiyonu - Mezoskobik Ölçeğin Anahtarı –

Önceki bölümde de belirtildiği üzere Moleküler Dinamik(MD) yöntemleriyle her bir partikülün izlenmesi suretiyle çözümün elde edilmesi, makro bir sistem için olanak dışıdır. Dolayısıyla ortalama değerler gündeme gelmektedir. Maxwell'in burada ileri sürdüğü tez, her bir partikülün her bir zaman aralığındaki konum ve hızlarının bilinmesinin gerekli olmadığı üzerinedir [4].

Dağılım fonksiyonu partiküllerin hareketlerinin anlaşılması, yani bir diğer deyişle; verilen bir zaman aralığında, bir sistemdeki partiküllerin belli konumlardaki hızlarının hangi aralıklarda olduğunun anlaşılması için çok önemli bir parametredir. Bir kapalı sistemde örneğin gaz molekülleri geniş bir hız skalasında çok farklı hızlara sahip olup birbiriyle çarpışma halindedirler ve hızlı moleküller, yavaş olanlara çarpışma yoluyla momentum transferinde bulunurlar. Bu çarpışmalar sonucunda momentum korunmaktadır. Isıl denge halindeki bir gaz için, söz konusu gaz kap içerisinde üniform bir şekilde dağılmış ise dağılım fonksiyonu zamana bağlı değildir, ve sonuç olarak buradaki tek bilinmeyen hız dağılımı fonksiyonudur [4;5].

N sayıda partikülden oluşan bir gaz için, *x*- yönünde c_x ile $c_x + dc_x$ hız aralığında hızlara sahip olan partikül sayısı $Nf(c_x)dc_x$ 'tir. $f(c_x)$ fonksiyonu x-yönünde c_x ile $c_x + dc_x$ aralığında hızlara sahip olan partiküllerin bir kısmıdır. Benzer şekilde diğer yönler için de dağılım fonksiyonları belirlenebilir.

Sonuç olarak $c_x + dc_x$, $c_y + dc_y$ ve $c_z + dc_z$ hız aralığında yer alabilme ihtimali olan partiküllerin sayısı $Nf(c_x)f(c_y)f(c_z)dc_xdc_ydc_z$ olacaktır [3].

Eğer yukarıda verilen denklemin tüm muhtemel hız değerleri için integrali alınırsa olursa, toplam partikül sayısı olan N'e ulaşılacaktır. Yani;

$$\iiint f(c_x)f(c_y)f(c_z)dc_xdc_ydc_z = 1 \quad (3.13)$$

x,y,z hangi yön olursa olsun dağılım fonksiyonu burada yönlere değil yalnızca partikül hızlarına bağlı olacaktır. Dolayısıyla:

$$f(c_x)f(c_y)f(c_z) = \phi(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2) \quad (3.14)$$

olup, ϕ henüz bilinmeyen ve tanımlanması gereken bir fonksiyondur. Dağılım fonksiyonu tanımı gereği pozitif değer almalıdır (0 ile 1 arasında). Dolayısıyla 3.14 eşitliğinde hızların kareleri alınmıştır. Söz konusu fonksiyon eşitlik 3.14'e göre logaritmik veya üstel özelliktedir yani:

$$log A + log B = log(AB) \quad (3.15)$$

veya

$$e^{A}e^{B} = e^{(A+B)}$$
 (3.16)

Dağılım olasılık fonksiyonu için uygun genel denklem formunun aşağıdaki gibi olduğu söylenebilir:

$$f(c_x) = Ae^{-Bc_x^2}$$
 (3.17)

Denklemde *A* ve *B* sabitlerdir. Üstel fonksiyonlarda, matematiksel kurala göre çarpımda üsler toplam şeklinde yazılabilir. Örneğin $F(x) = e^{Bx}$, $F(y) = e^{Cy}$ ise $F(x)F(y) = e^{Bx}e^{Cy} = e^{(Bx+Cy)}$ olacaktır. Ancak örneğin F(x) = Bx ve F(y) = Cyolsun. Bu durumda F(x)F(y) = BxCy olacaktır, yani fonksiyonların çarpımı doğal olarak toplam şeklinde yazılamayacaktır.

Dolayısıyla 3.17 fonksiyonu aşağıdaki şekilde yazılabilir:

$$f(c) = Ae^{-Bc_{x}^{2}}Ae^{-Bc_{y}^{2}}Ae^{-Bc_{z}^{2}} = A^{3}e^{-Bc^{2}}$$
(3.18)

Yukarıdaki eşitlikte (3.18) x,y,z yönleri için dağılım olasılık fonksiyonlarının çarpımı, dağılım fonksiyonunu "*c*" partikül hızı cinsinden vermektedir. Diğer bir ifadeyle dağılım fonksiyonu, belirli bir zaman aralığında *c* ile *c*+*dc* arasındaki hızlara sahip olan partikül sayısını veren fonksiyondur [2;3;5].

Burada yapılan önemli kabullerden birisi, partiküllerin 3 boyutlu uzayda (yönlere göre hızları sırasıyla c_x, c_y, c_z), her bir partikülün bulunduğu noktaların koordinatlarının partiküllerin hızına karşılık geleceği bir şekilde dağılmış olmalarıdır [5].



Şekil 3.3: Sırasıyla c ve c+dc yarıçaplı iç içe küreler (alıntıdır [3])

Bu açıklamaya göre, örneğin Şekil 3.3'teki eş merkezli iç içe küreleri düşünürsek, içteki kürenin yüzeyinde bulunan tüm noktaların hızları birbirine eşit (c kadar)olacaktır. Dıştaki küre için de aynı şey geçerlidir. Dolayısıyla hızları c ve c+dc aralığında yer alan partiküllerin sayısı, c ve c+dc yarıçaplı kürelerin arasında yer alan nokta sayısına eşittir.

İki küre arasındaki bölgenin, yani küre kabuğunun hacmi $4\pi c^2 dc$ dir. Buna göre dağılım olasılık fonksiyonu, *c* partikül hızına bağlı olarak aşağıdaki şekilde elde edilir:

$$f(c)dc = 4\pi c^2 A^3 e^{-Bc^2} dc \quad (3.19)$$

A ve *B* sabitleri, dağılım olasılık fonksiyonunun, toplam partikül sayısı *N* ve onları toplam enerjileri *E*'nin bulunması için tüm olası hızlar boyunca integrasyonu ile elde edilebilir.

c hızıyla hareket eden bir partikülün kinetik enerjisinin $E = \frac{1}{2}mc^2$ olduğu bilinmektedir. Buradan hareketle olasılık dağılım fonksiyonu kullanılarak her bir partikülün ortalama kinetik enerjisi hesaplanabilir:

$$\overline{\frac{1}{2}mc^2} = \frac{\int_0^{\infty} \frac{1}{2}mc^2 f(c)dc}{\int_0^{\infty} f(c)dc} \quad (3.20)$$

Eşitliğin payı toplam enerjiyi, paydası ise toplam partikül sayısını ifade etmektedir. Matematiksel olarak anlaşılacağı üzere bilinmeyen sabitlerden A, f(c) fonksiyonu integralde yerine konulduğunda sadeleştirmeler sonucu yok olacak ve eşitlik şu hale gelecektir:

$$\overline{\frac{1}{2}mc^2} = \frac{3m}{4B}$$
 (3.21)

Ortalama kinetik enerji değeri yerine 3.12 eşitliğindeki kinetik enerji ifadesi yazılırsa, buradan B = m/2kT elde edilir. Bu *B* değeri 3.18 eşitliğinde yerine konulursa, *f*(*c*) fonksiyonun aşağıdaki ifadeyle orantılı olduğu anlaşılır:

$$f(c) \propto c^2 e^{-\frac{mc^2}{2kT}}$$
 (3.22)

f(c) eşitliğinin diğer bilinmeyeni ve orantı sabiti olan *A* ise tüm olası hızlar için integrasyon yapılıp, sonucun 1'e eşitlenmesiyle bulunur (çünkü başlangıçta f(c) fonksiyonunun tanımı yapılırken, partikül sayısı *N* göz ardı edilmiştir). Sonuç olarak Maxwell veya Maxwell-Boltzmann dağılım denklemi aşağıdaki şekilde elde edilir:

$$f(c) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} c^2 e^{\frac{-mc^2}{2kT}} \quad (3.23)$$

Şekil 3.4'te farklı sıcaklık değerleri için gösterildiği üzere bu fonksiyonun sıfırdan belli bir hıza kadar parabolik olarak arttığı, bir maksimum değere ulaştığı ve daha sonra üstel olarak azaldığı anlaşılmaktadır [3;5].



Şekil 3.4: Helyum atomlarının farklı sıcaklıklar için örnek bir Maxwell dağılım grafiği

Sıcaklık değeri arttıkça, maksimum noktanın bulunduğu yer sağa doğru kayacaktır. Eğrinin altında kalan alan ise tanım gereği her zaman 1 olacaktır.

Böyle bir dağılımda, bir partikülün anlık spesifik bir hızını tespit etmek imkansızdır, çünkü partikül hızları geniş bir aralıkta sürekli olarak değişim göstermektedirler. Burada daha anlamlı olacak şey, anlık bir hızdan ziyade belli bir hız aralığındaki parçacıkların tespit edilmesidir. Dolayısıyla eşitlik 3.23'te verilen Maxwell dağılım denkleminin belli bir hız aralığında integrasyonu gereklidir [3;5].

3.3 Maxwell-Boltzmann Dağılımı -Boltzmann'ın Maxwell Denklemine Katkısı-

Boltzmann'ın Maxwell'in dağılım denklemine yaptığı en önemli katkı, bu denklemi rastgele seçilmiş büyük sistemlerde de geçerli olacak şekilde genelleştirmesidir. Ludwig Boltzmann (1844-1906), büyük bir sistemdeki tüm olası durumların istatistiki analizi ile termodinamiğin en önemli kavramlarından birisi olan Entropi arasındaki güçlü bağlantıyı ilk anlayan kişi olmuştur. Bu durum şöyle açıklanabilir; aslında bir sistemde zamanla gerçekleşen Entropi artışı, mikroskobik düzeydeki yerleşimlerin/dağılımların olası en büyük sayısına karşılık gelen makroskobik parametrelerdeki değişimlerle alakalıdır. Boltzmann, belirli bir enerji için gerçekleşmesi mümkün olan mikroskobik durumların sayısının, termal dengeye karşılık gelen makroskobik değerlerden çok daha büyük olduğunu ortaya koymuştur [6].

Örneğin belirli bir enerji için tüm gaz moleküllerinin kap içerisinde üniform olarak dağılım gösterdiği bir durumda gaz moleküllerinin yerleşimi konusunda, yine aynı kapta tüm gaz moleküllerinin mesela kabın sağ tarafında toplandığı duruma göre çok daha fazla olasılık mevcuttur. Söz konusu kap içinde bir litre gaz olsa, bu gaz belli bir zaman boyunca kap içerisinde bütün olası yerleşimleri deneyecektir ve elbette ihmal edilebilir kadar küçük bir olasılık da olsa uzun bir zaman içerisinde (belki evrenin yaşı kadar bir zaman sonra) tüm moleküller kabın sağ tarafına toplanabilir. Yani sözgelimi biz belli bir basınç yardımıyla (Örn. Piston) tüm gaz moleküllerini kabın sağ tarafına toplasak, basınç kaldırıldığında bu moleküller çok çabuk bir biçimde kap içerisinde üniform olarak dağılma eğilimi göstereceklerdir[3].

Boltzmann, E enerjili bir sistemin termodinamik entropisi "S" nin olası mikroskobik durumları tanımlayan bir *"W*" sayısıyla ilişkili olduğunu kanıtlamış ve bunu aşağıdaki denklemle ortaya koymuştur:

$$S = k \log (W) \quad (3.24)$$

Burada *k* Boltzmann sabitidir. Söz konusu teoriyle ilgili bazı muğlak noktalar mevcuttur. Örneğin kap içerisindeki bir parçacık kaç farklı hız değeri alabilir? Bu soruların cevabı kuantum mekaniği sayesinde ortaya konmuştur [3].

Daha sonra Boltzmann, *T* sıcaklığında ısıl denge halindeki büyük veya küçük herhangi bir sistem için belli bir *E* enerjili durumda bulunma olasılığının $e^{\frac{-E}{kT}}$ ile orantılı olduğunu saptamıştır. Yani matematiksel olarak:

$$f(E) = Ae^{-\frac{E}{kT}}$$
 (3.25)

Bu ifade Boltzmann dağılım fonksiyonu olarak adlandırılır.

Örneğin x-yönündeki moleküllerin kinetik enerjisini ele alırsak:

$$E = \frac{1}{2}mc_x^2$$
 (3.26)

Bir dağılım olasılık fonksiyonunda, olası tüm hızlar için fonksiyonun integrali alındığında sonucun (diğer bir ifadeyle eğrinin altında kalan alanın) 1'e eşit olması gerektiği önceki bölümde belirtilmişti.

Buna göre:

$$\int_{-\infty}^{\infty} A e^{-\frac{mc^2}{2kT}} dc = 1 \quad (3.27)$$

Buradan:

$$A = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} \quad (3.28)$$

Elde edilir. Dolayısıyla örneğin c_x hızının bulunma olasılığı:

$$f(c_x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} e^{-\frac{mc^2}{2kT}}$$
 (3.29)

Esasen elde edilmek istenen 3 boyutlu c hızıdır, ve c hızı aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$c^2 = c_x^2 + c_y^2 + c_z^2 \quad (3.30)$$

c hızının bulunabilme olasılığı ise 3 yöndeki hızların bulunabilme olasılıklarının çarpımıdır:

$$f(c) = f(c_x)f(c_y)f(c_z) \quad (3.31)$$

Sonuç olarak f(c):

$$f(c) = (\sqrt{\frac{m}{2\pi kT}})^3 e^{-\frac{m}{2kT}(c_\chi^2 + c_y^2 + c_z^2)}$$
(3.32)

Toparlarsak genel ifade:

$$f(c) = (\frac{m}{2\pi kT})^{3/2} e^{-\frac{mc^2}{2kT}}$$
 (3.33)

olacaktır [3].

Burada belirtilmesi gereken şey 3.33 eşitliğinin, partiküllerin daha yüksek hızlara çıkabilmesi için mümkün olan diğer yolları göz önüne almadığıdır. Boltzmann denkleminden Maxwell dağılım denklemine geçiş yapılabilmesi için 3.33 ifadesini $4\pi c^2$ (bir kürenin yüzey alanı) ifadesiyle çarpmak ve böylece partiküller için mümkün olan hız durumlarının yoğunluğunu (İng. *Density of velocity states*) dikkate almış olmak gerekir. Aslında diğer bir ifadeyle Maxwell dağılım denkleminin söz konusu kürenin yüzey alanı boyunca integrali alındığında elde edilen ifade yine 3.32 eşitliği olmaktadır.

Maxwell ideal bir gazın denge halinde özel bir dağılım fonksiyonuna sahip olduğunu ortaya koymuştur (Maxwell Dağılım Fonksiyonu). Ancak denge durumuna nasıl ulaşıldığı konusunu açıklamamıştır. İşte bu konunun açıklanması, Ludwig Boltzmann'ın söz konusu teoriye verdiği en önemli katkılardan birisidir ve bu tezin de ana konusu olan Lattice Boltzmann yönteminin temelini oluşturmaktadır.

3.4 Boltzmann Taşınım Denklemi

Lattice Boltzmann ana denklemi temel olarak iki farklı yoldan türetilebilir. Lattice-Gas Automata (LGA) adı verilen görece daha eski bir modelden veya Boltzmann'ın kinetik denkleminden [7] bu derivasyonu yapmak mümkündür. Bu çalışma kapsamında Boltzmann denklemi üzerinden Lattice-Boltzmann denkleminin elde edilişi üzerinde durulacaktır.

Dağılım fonksiyonunun ne olduğundan ve neyi ifade ettiğinden bir önceki bölümde bir miktar bahsedilmişti. Özetlemek gerekirse dağılım fonksiyonu, akışkan partiküllerinin belirli bir zamanda (*t*) belirli bir hızla (*c*) belirli bir yönde hareket edebilme olasılıklarını temsil eder. Yani; f(r, c, t) dağılım fonksiyonu olmak üzere söz konusu fonksiyon bir t zamanında, *r* ile *r*+*dr* konum aralığında *c* ile *c*+*dc* aralığındaki hızlarla bulunma ihtimali olan partiküllerin sayısını ifade etmektedir. Eğer sisteme dışarıdan bir *F* kuvveti uygulanırsa, birim kütleli gaz molekülünün hızı *c*'den *c*+ *Fdt*'ye, konumu ise *r*'den *r*+ *cdt*'ye ulaşacaktır (Şekil 3.5).



Şekil 3.5: Bir partikülün kuvvet uygulanmadan önceki ve sonraki konum ve hız vektörü (alıntıdır [3])

Eğer gaz molekülleri arasında herhangi bir çarpışma olmazsa, dışarıdan kuvvet uygulanmadan önceki gaz moleküllerinin sayısı ile kuvvet uygulandıktan sonraki gaz molekülleri sayısı eşit olacaktır. Dolayısıyla da:

$$f(r + cdt, c + Fdt, t + dt) - f(r, c, t)drdc = 0$$
 (3.34)

Burada f(r, c, t) kuvvet uygulanmadan önceki partikül sayısını, f(r + cdt, c + Fdt, t + dt) terimi ise kuvvetten sonraki partikül sayısını ifade etmektedir. Denklemin bu haline akışın "Serbest Akış (İng. Free Streaming)" evresi adı verilmektedir [7].

Bu evrede partiküller arasında herhangi bir çarpışmanın vuku bulmadığı varsayılmaktadır.

Eğer moleküller arasında çarpışma da gerçekleşirse drdc aralığında partikül sayıları bakımından bir fark oluşacaktır. Dağılım fonksiyonunun başlangıç ve bitiş durumu arasındaki değişim oranına "Çarpışma Operatörü (İng. Collision Operator)" adı verilir ve Ω simgesi ile gösterilir. Sonuç olarak partikül sayısının hesaplanmasında kullanılan genel denklem aşağıdaki şekilde yazılabilir [3;7]:

 $f(r + cdt, c + Fdt, t + dt) - f(r, c, t)drdc = \Omega(f)drdcdt$ (3.35) Limit dt-sıfıra giderken 3.35 eşitliği *dtdrdc*'ye bölünürse;

$$\frac{df}{dt} = \Omega(f) \quad (3.36)$$

elde edilir.

Bu eşitlik, fiziksel olarak şöyle yorumlanabilir: Dağılım fonksiyonundaki toplam değişim miktarı, moleküllerin çarpışma oranlarına eşittir. *f; r, c* ve *t*'nin bir fonksiyonu olduğundan, dağılım fonksiyonundaki toplam değişim miktarı açık olarak aşağıdaki biçimde yazılabilir:

$$df = \frac{\partial f}{\partial r}dr + \frac{\partial f}{\partial c}dc + \frac{df}{dt}dt \quad (3.37)$$

Her taraf dt ile bölünürse:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial r}\frac{dr}{dt} + \frac{\partial f}{\partial c}\frac{dc}{dt} + \frac{\partial f}{\partial t} \quad (3.38)$$

r vektörü 3 boyutlu Kartezyen koordinat sisteminde *i,j* ve *k*, sırasıyla *x-y-z* yönlerindeki birim vektörler olmak üzere r = xi + yj + zk şeklinde ifade edilebilir.

3.38 eşitliği biraz daha düzenlenirse:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial r}c + \frac{\partial f}{\partial c}a + \frac{\partial f}{\partial t} \quad (3.39)$$

a ivme vektörü olmak üzere, *dc/dt*'ye eşittir ve Newton'un ikinci kanunu uyarınca kuvvet (*F*) ile arasında a = F/m şeklinde bir ilişki söz konusudur. Dolayısıyla Boltzmann taşınım denklemi son olarak aşağıdaki şekli alır:

$$\Omega = \frac{\partial f}{\partial r}c + \frac{\partial f}{\partial c}\frac{F}{m} + \frac{\partial f}{\partial t} \quad (3.40)$$

 Ω (çarpışma) terimi, *f* in bir fonksiyonu olup, açıkça görüleceği üzere Boltzmann denkleminin çözülebilmesi için bu terimin belirlenmiş olması gerekmektedir.

Dışarıdan kuvvet etkisinin olmadığı bir sistem için Boltzmann denklemi:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c \,.\,\nabla f = \Omega \quad (3.41)$$

şeklinde basitleştirilebilir. Burada c ve ∇f birer vektördür.

Buradaki problem, denklemden de anlaşılabileceği üzere Ω 'nın *f*'in bir fonksiyonu olması, dolayısıyla 3.41 denkleminin çözülmesi oldukça zor olan integrodiferansiyel denklem haline gelmesidir [3].

Dağılım fonksiyonu ile yoğunluk(ρ), hız vektörü(u) ve iç enerji(e) gibi makroskobik büyüklükler arasındaki ilişkiler ise aşağıdaki gibidir [7]:

$$\rho(r,t) = \int mf(r,c,t) \, dc \quad (3.42)$$

$$\rho(r,t) \, u(r,t) = \int mcf(r,c,t) \, dc \quad (3.43)$$

$$\rho(r,t) \, e(r,t) = \frac{1}{2} \int mu_a{}^2 f(r,c,t) \, dc \quad (3.44)$$
Burada m-moleküler kütle, u_a ise akışkan hızına göre bağıl parçacık hızıdır $(u_a = c - u)$.

Ayrıca 3.42, 3.43 ve 3.44 eşitlikleri sırasıyla kütlenin, momentumun ve enerjinin korunumu ifadeleridirler [7]. Partikül mekaniği bölümünde daha önce tartışıldığı üzere iç enerji "e" aşağıdaki şekilde gösterilebilir:

$$e = \frac{3}{2m}k_BT \quad (3.45)$$

3.4.1 Bhatnagar-Gross-Krook Çarpışma Operatörü Modeli

Boltzmann denklemini çarpışma operatörü (Ω) teriminin oldukça karmaşık bir yapıda olması dolayısıyla çözmenin çok zor olduğundan söz edilmişti. İki hacmin çarpışmasından elde edilen çıktıların, ölçülmüş pek çok büyüklüğe önemli oranda etkisinin olmadığı [9] Cercignani tarafından ortaya konmuştur. Dolayısıyla çözümde büyük sapmalara yol açmaksızın çarpışma operatörü (Ω) terimine basit bir modelle yaklaşmak söz konusu olabilir. İşte çarpışma operatörü için böyle bir model ilk defa Bhatnagar-Gross ve Krook (BGK) tarafından 1954 yılında ortaya konulmuştur [11]. Bu modele göre çarpışma operatörü Ω :

$$\Omega = \omega(f^{eq} - f) = \frac{1}{\tau}(f^{eq} - f) \quad (3.46)$$

şeklinde tanımlanır. Burada ω çarpışma frekansı veya sıklığı, τ ise gevşeme (İng. *Relaxation*) süresi/faktörüdür. Yerel denge dağılım fonksiyonu (İng. *Equilibrium distribution function*) f^{eq} olarak gösterilmiştir ki bu konu (denge dağılım fonksiyonu) bir sonraki bölümde ele alınacaktır. f^{eq} aslen Maxwell-Boltzmann dağılım fonksiyonudur [11].

Ω çarpışma operatörü BGK Modeli ile yeniden ele alınırsa, harici kuvvetlerin olmadığı Boltzmann denklemi (3.41) aşağıdaki hali alır:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c \,.\,\nabla f = \frac{1}{\tau}(f^{eq} - f) \quad (3.47)$$

Lattice Boltzmann Yöntemi'nde 3.47 denklemi süreksiz hale getirilir (İng. *Discretization*) ve söz konusu denklem, belirli bir kafes (İng. *Lattice*) modeli üzerinde tanımlanmış yönlerde geçerli kabul edilir. Süreksizleştirilmiş Boltzmann denklemi bu yönleri tanımlayan yön indisiyle aşağıdaki şekilde yazılabilir [11]:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + c_i \cdot \nabla f_i = \frac{1}{\tau} (f^{eq} - f) \quad (3.48)$$

İşte 3.48 eşitliği Lattice-Boltzmann yönteminin temel denklemidir ve söz konusu yöntemle yapılan HAD çözümlerinde Navier-Stokes denklemleri yerine kullanılır. Boltzmann denkleminden çoklu ölçek açılımları (İng. *Multi-scale expansion*) denilen sayısal yöntemler sayesinde (Örn. Chapman-Enskog açılımı) süreklilik yaklaşımını yani Navier-Stokes denklemlerini türetmek de mümkündür.

Burada şunu da belirtmek gerekir ki, aslında parçacık gruplarının çarpışması modellenmesi oldukça zor bir fiziksel durum olup, bu olayı modellemek için BGK modelinin yanı sıra ileri sürülmüş farklı modeller de vardır. Örneğin d'Humieres ve diğerleri tarafından çoklu gevşeme zamanı (İng. *Multiple Relaxation Time*) içeren bir model geliştirilmiş ve o çalışmada çarpışma olayı şöyle tanımlanmıştır:

$$\Omega_i(f) = A_{ij}(f_j^{eq} - f_j)$$
 (3.49)

Burada *A_{ij}* çarpışma matrisi adı verilen ve parçacık topluluğunun i ve j yönlerindeki saçılım oranına bağlı olarak değişen bir matrisi ifade etmektedir. Bu matrisin özdeğerleri (İng. *Eigenvalue*), denge durumuna ulaşmak için geçmesi gereken gevşeme sürelerinin tersini (ters matris) temsil etmekte ve bu gevşeme süresi değerleri çoklu gevşeme zamanı içeren modelin temelini oluşturmaktadırlar [12]. d'Huimeres ve diğerleri daha sonraki çalışmalarında oluşturdukları modelin tekil gevşeme zamanlı BGK modeline göre daha kararlı olduğunu ve uygulama sahasının genişliğini ortaya koymuşlarsa da, bu bölümde ele alınan tekil gevşeme zamanlı BGK modeli, uygulama kolaylığı ve verimliliği dolayısıyla halen en yaygın kullanılan çarpışma modellerinden biri olma özelliğini sürdürmektedir.

3.4.1.1 BGK Boltzmann Denkleminin Özellikleri

- Bu denklem doğrusal bir kısmi diferansiyel denklemdir.
- Eşitliğin sol tarafı serbest akış olayını ifade etmektedir.
- Eşitliğin sağı ise çarpışma olayını ifade etmektedir.

3.48 eşitliği de açılırsa Lattice-Boltzmann denkleminin açık hali elde edilir:

$$f_i(r + c_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(r, t) = \frac{\Delta t}{\tau} [f_i^{eq}(r, t) - f_i(r, t)]$$
 (3.50)

 τ gevşeme zamanlı bir yerel denge dağılım fonksiyonu (f_i^{eq}), çözülmesi gereken problemin tipini belirlemektedir. Bu fonksiyonun avantajı, basitliği ve pek çok farklı fiziksel durumda sadece bir denge dağılım fonksiyonu ve kaynak terimi tanımlama

yoluyla uygulanabilir olmasıdır. Gerekli durumlarda 3.49 denklemine bir kaynak veya dış kuvvet terimi eklemek oldukça basittir [2;3].

Lattice Boltzmann yönteminde çözüm alanının "Lattice" adı verilen hücresel kafes/ağ yapılarına bölünmesi gerekmektedir. Her bir kafes noktasında bir arada oldukları varsayılan hayali parçacık toplulukları (yani dağılım fonksiyonları) yerleşik durumdadır.

Bu parçacıkların bazıları komşu kafes noktalarına belirlenen yönler üzerinden hareket ederler. Bu kafes noktalarının sayısı, birbirine bağlanma biçimleri gibi faktörler kafes yerleşimlerine bağlıdır [2;3].

3.5 Kafes Yerleşimleri

Lattice Boltzmann Yönteminde problemin kaç boyutlu olarak ele alındığını ve modeldeki hızların sayısını göstermekte kullanılan terminoloji $D_n Q_m$ şeklindedir. Burada "*n*" boyut sayısını (1-D, 2-D, 3-D gibi) *m* ise kullanılan hız modelini ve bağlantı sayısını(3 bağlantı, 5 bağlantı, 9 bağlantı gibi), ortaya koyar. Önceki bölümlerde belirli bir c_i hızıyla bağlantı noktaları arasında hareket ettiğinden söz edilen parçacıklar, simülasyonlarda kullanılan bu kafes yerleşimlerine bağlı olarak $C = \{c_0, c_1, ..., c_m\}$ sayıda hızla bu hareketleri gerçekleştirirler.

Lattice Boltzmann simülasyonlarında genelde iki boyutlu D2Q5 ve D2Q9 ile üç boyutlu D3Q19 ve D3Q27 gibi modeller kullanılmaktadır. Mevcut tez kapsamında yapılacak sayısal uygulamalarda kullanılacak olması ve en yaygın modellerden birisi olması dolayısıyla D2Q9 (İki boyutlu, 9 hızlı) modeli kısaca ele alınacaktır.

Merkezinde bir hareketsiz nokta ihtiva eden bu modelde ek olarak 8 hız vektörü bulunmaktadır. D2Q9 modeli ikinci dereceden yakınsaklığa sahip bir model olup, eğer modeldeki hız vektörü sayısı artırılabilirse yakınsaklık derecesi daha da yükseltilebilir. Şekil 3.6'da D2Q9 modelinin şematik gösterimi yer almaktadır:



Şekil 3.6: D2Q9 Modelinin şematik gösterimi (alıntıdır [3])

Şekil incelendiğinde, modelin orijin (0,0) noktası olarak 0 numaralı parçacık alınırsa, her bir hız vektörünün x ve y koordinatları aşağıdaki şekilde olacaktır:

$$c_i(x) = \{0,1,0,-1,0,1,-1,-1,1\}$$

$$c_i(y) = \{0,0,1,0,-1,1,1,-1,-1\} \quad (3.51)$$

Yani örneğin 1 numaralı vektör $c_1(1,0)$ şeklinde, 4 numaralı vektör $c_4(0,-1)$ şeklinde hız vektörleri olarak tanımlanmıştır. Bu vektörler ağırlık faktörü (İng. *Weight Factor*) adı verilen katsayılarla ağırlıklandırılırlar. Dağılım fonksiyonu son tahlilde bir olasılık fonksiyonu olduğundan, bu ağırlık faktörleri aslında belirli çalışmalar sonucunda belirlenmiş ve parçacık gruplarının modeldeki 9 farklı noktaya hareket etme ihtimallerine göre tespit edilmişlerdir.

Ağırlık faktörleri her bir hız modeli için farklı olmakla beraber, D2Q9 için partikül grubunun merkezde kalabilmesi ihtimalinin ağırlık faktörü $w_0 = 4/9$, doğu-batı-kuzey ve güney yönlere hareketi ihtimali $w_{1-4} = 1/9$ faktörüyle ağırlıklandırılmış, kuzeydoğu-kuzeybatı-güneydoğu-güneybatı yönlerine hareket ihtimaline ise $w_{5-8} = 1/36$ şeklinde bir ağırlık faktörü belirlenmiştir [13].

Söz konusu hız vektörü tanımları (c_i) ve ağırlık faktörleri (w) denge dağılım denkleminin hesabında kullanılan önemli parametreler olup, sayısal uygulamalarda da kullanılan hız modeline göre denge dağılım denkleminin hesabı için kullanılan girdi parametrelerindendirler.

3.6 Denge Dağılım Denklemi

Lattice-Boltzmann yöntemini farklı problemler için uygulayabilmenin yolu *f*^{eq} denge dağılım denkleminden geçmektedir. Lattice-Boltzmann yöntemiyle difüzyon, yatay yayılım (adveksiyon), momentum ve enerji denklemlerinin çözümünde temelde her zaman önceki bölümlerde değinilen genel Lattice Boltzmann denklemi geçerlidir. Farklı problemlerin çözümünü sağlayan şey, kullanılan denge dağılım fonksiyonlarının farklı olmasıdır.

Denge dağılım denkleminin nasıl türetildiğine döndüğümüzde, Maxwell-Boltzmann dağılımını bir kez daha hatırlamamız gerekir. Bir ortam içerisinde makroskobik "u" hızıyla hareket eden parçacıklar olduğunu düşünelim. Bu durumda eşitlik 3.33'te verilen Maxwell-Boltzmann dağılım denklemi aşağıdaki hali alır:

$$f = \frac{\rho}{2\pi/3} e^{-\frac{3}{2}(c-u)^2} \quad (3.52)$$

Bazı matematiksel manipülasyonlarla bu eşitlik aşağıdaki hale getirilebilir:

$$f = \frac{\rho}{2\pi/3} e^{-\frac{3}{2}(c)^2} e^{3(c.u-u^2)/2} \quad (3.53)$$

Burada $c^2 = c.c$ ve $u^2 = u.u$ olduğu bilinen bir durumdur. e^{-x} terimi için Taylor açılımını hatırlarsak:

$$e^{-x} = 1 - x + \frac{x^2}{2!} - \frac{x^3}{3!} + \cdots$$
 (3.54)

Buna göre 3.54 eşitliği aşağıdaki gibi açılabilir:

$$f = \frac{\rho}{2\pi/3} e^{-\frac{3}{2}(c)^2} [1 + 3(c.u) - \frac{3}{2}u^2 + \cdots] \quad (3.55)$$

Sonuç olarak denge dağılım fonksiyonunun genel formu aşağıdaki hali alır:

$$f_i^{eq} = \Phi \omega_i [A + Bc_i \cdot u + C(c_i \cdot u)^2 + Du^2] \quad (3.56)$$

Burada *u* makroskobik akış hızı vektörü olup, *A*,*B*,*C*,*D* ise kütle, momentum ve enerjinin korunumu denklemleri uyarınca belirlenmesi gereken sabitlerdir.

$$\Phi = \sum_{i=0}^{i=n} f_i^{eq}$$
 (3.57)

Burada ise n kullanılan modeldeki kafes bağlantılarının sayısını gösterir [2;3].

Yapılan çalışmalar sonucunda D2Q9 modeli için de bir denge dağılım fonksiyonu türetilmiştir [13] :

$$f_k^{eq} = w_k \rho(x,t) \left[1 + \frac{c_k \cdot u}{c_s^2} + \frac{1}{2} \frac{(c_k \cdot u)^2}{c_s^4} - \frac{1}{2} \frac{u^2}{c_s^2} \right]$$
(3.58)

Burada $\rho(x, t)$ kütlenin korunması prensibi uyarınca elde edilmiş yoğunluk fonksiyonunu, c_k kafes hızını:

$$c_k = \frac{\Delta x}{\Delta t}i + \frac{\Delta y}{\Delta t}j \quad (3.59)$$

c_s mezo ölçekteki kafes ses hızı'nı:

$$c_s^2 = \frac{\Delta x^2}{3\Delta t^2} \quad (3.60)$$

temsil etmektedir. *u* ise makroskobik hız vektörüdür:

$$u = ui + vj \quad (3.61)$$

Bu hız terimlerinin birbirleriyle olan ilişkilerine ve akışkanlar mekaniğinin temel korunum prensiplerinin Lattice Boltzmann yöntemindeki yerine ileride değinilecektir.

Eşitlik 3.58 ile verilen denge dağılım fonksiyonunun ancak Mach sayısı düşük tutulduğunda geçerli olduğunu belirtmek gerekir. Lattice Boltzmann yöntemine ilişkin literatürde buna düşük Mach sayısı yaklaşımı (İng. *Low Mach Number Approximation*) adı verilmektedir. Bu durumun sebebini anlayabilmek adına Lattice Boltzmann ölçeğinden Navier-Stokes ölçeğine geçişi sağlayan ve Chapman-Enskog açılımı adı verilen matematiksel yöntemi uygulayarak süreklilik yaklaşımının mezo ölçekte nasıl temsil edildiğini irdelemek gerekir.

Bu bölümde yapılacak açılımı basitleştirmek adına 1 boyutlu makro difüzyon denklemi ele alınacaktır.

3.7 Chapman-Enskog Açılımı - LBM'den Navier Stokes Denklemlerine Geçiş -

1 boyutlu difüzyon denklemi Kartezyen koordinatlarda aşağıdaki biçimde yazılabilir:

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \Gamma \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} \quad (3.62)$$

Eşitlikte T(x, t) bağlı değişkendir (ısı difüzyon denklemi için sıcaklık, momentum difüzyon denklemi için hız, kütle difüzyonu için parçacık konsantrasyonu gibi). Γ difüzyon katsayısı ise sabit kabul edilmektedir.

Difüzyon denklemi konumsal olarak x yerine x/ϵ (ϵ burada küçük bir sayıdır – Knudsen Sayısı-) yazılmak suretiyle ölçeklendirilebilir [3]. İşlem yapıldığında difüzyon denklemi:

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \Gamma \frac{\epsilon^2 \partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} \quad (3.63)$$

şeklini alır.

Denklemin her iki tarafını da aynı büyüklük mertebelerinde tutabilmek adına t zaman terimi de $1/\epsilon^2$ ile ölçeklendirilmelidir. Yani t yerine t/ϵ^2 yazılmalıdır. İki hız bileşenine sahip bir boyutlu problem için (c_i , i = 1,2), sıcaklık aşağıdaki biçimde ifade edilebilir:

$$T(x,t) = \sum_{i=1}^{i=2} f_i(x,t) = f_1(x,t) + f_2(x,t) \quad (3.64)$$

İfadeleri basitleştirmek için $f_i(x, t)$ yerine f_i yazılabilir. Difüzyon denklemi doğrusal (lineer) olduğundan denge dağılım denklemiyle sıcaklık terimini aşağıdaki şekilde ilişkilendirmek yanlış olmaz:

$$f_i^{eq} = w_i T(x, t) \quad (3.65)$$

Eşitliğin her iki tarafının da toplamları alınırsa:

$$\sum_{i} f_{i}^{eq} = T = w_{1}T + w_{2}T \quad (3.66)$$

 $w_1 + w_2 = 1$ ve $w_1 = w_2$ olduğundan, $w_1 = w_2 = 1/2$ 'dir.

$$f_1^{eq} = w_1 T(x,t) \text{ ve } f_2^{eq} = w_2 T(x,t)$$
 (3.67)

Ve ağırlık faktörleri aşağıdaki ilişkiyi sağlamalıdır:

$$\sum_{i=1}^{i=2} w_i = 1$$
 (3.68)

Dağılım fonksiyonu, küçük bir parametre olan ϵ cinsinden yazılarak açılabilir:

$$f_i(x,t) = f_i^0 + \epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^2 + \cdots$$
 (3.69)

Burada f_i^0 denge şartlarındaki dağılım fonksiyonunu ifade etmektedir, yani f_i^{eq} ile eşittir. Yukarıdaki eşitliğin terimleri toplanırsa:

$$\sum_{i=1}^{i=2} f_i(x,t) = \sum_{i=1}^{i=2} [f_i^0 + \epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^2 + \cdots] \quad (3.70)$$

 $f_1 + f_2 = T(x, t)$ ve $f_1^0 + f_2^0 = T(x, t)$ olduğundan, 3.27 açık denklemindeki diğer terim sıfır olmalıdır. Yani:

$$\sum_{i=1}^{i=2} f_i^1 = 0 \quad (3.71)$$

$$\sum_{i=1}^{i=2} f_i^2 = 0 \quad (3.72)$$

Güncellenmiş (bir zaman adımı sonraki) dağılım fonksiyonu $f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t)$, Taylor serisi ile açılırsa aşağıdaki eşitlik elde edilir:

$$f_i(x+c_i\Delta t,t+\Delta t) = f_i(x,t) + \frac{\partial f_i}{\partial t}\Delta t + \frac{\partial f_i}{\partial x}c_i\Delta t + \frac{1}{2}\Delta t^2 \left(\frac{\partial^2 f_i}{\partial t^2} + 2\frac{\partial^2 f_i}{\partial t\partial x}c_i + \frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2}c_ic_i\right) + O(\Delta t)^3 \quad (3.73)$$

Bu denkleme ölçeklendirme uygulanırsa, yani $\frac{1}{\partial t}$ yerine $\frac{\epsilon^2}{\partial t}$ ve $\frac{1}{\partial x}$ yerine $\frac{\epsilon}{\partial x}$ yazılacak olursa:

$$f_i(x+c_i\Delta t,t+\Delta t) = f_i(x,t) + \epsilon^2 \frac{\partial f_i}{\partial t}\Delta t + \epsilon \frac{\partial f_i}{\partial x}c_i\Delta t + \frac{1}{2}\Delta t^2 \left(\frac{\epsilon^4\partial^2 f_i}{\partial t^2} + 2\frac{\epsilon^3\partial^2 f_i}{\partial t\partial x}c_i + \frac{\epsilon^2\partial^2 f_i}{\partial x^2}c_ic_i\right) + O(\Delta t)^3 \quad (3.74)$$

Lattice Boltzmann denklemi aşağıdaki şekilde yazılabilir:

$$f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(x, t) + \frac{\Delta t}{\tau} [f_i^0(x, t) - f_i(x, t)] \quad (3.75)$$

Eşitlik 3.73, yukarıdaki denklemin içerisine yerleştirilir ve ϵ^2 mertebesi üzerindeki terimler ihmal edilirse (ikinci derece Taylor açılımı):

$$\frac{1}{\tau} \left[f_i^{\ 0}(x,t) - f_i(x,t) \right] = \epsilon^2 \frac{\partial f_i}{\partial t} + \epsilon \frac{\partial f_i}{\partial x} c_i + \frac{1}{2} \epsilon^2 \Delta t \left(\frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2} c_i c_i \right) + O(\Delta t^2) + O(\epsilon^3)$$
(3.76)

Burada f_i^0 terimi aslında f^{eq} 'dur. f_i fonksiyonu, $f_i = f_i^0 + \epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^2 + \cdots$ şeklinde açılır ve yukarıdaki denkleme yerleştirilirse:

$$-\frac{1}{\tau}\left(\epsilon f_{i}^{1}+\epsilon^{2} f_{i}^{2}+\cdots\right)=\epsilon^{2} \frac{\partial f_{i}^{0}}{\partial t}+\epsilon \frac{\partial f_{i}^{0}}{\partial x}c_{i}+\epsilon^{2} \left(\frac{\partial f_{i}^{1}}{\partial x}c_{i}\right)+\frac{\Delta t}{2} \epsilon^{2} \frac{\partial f_{i}^{0}}{\partial x}c_{i}c_{i}+O(\Delta t^{2})+O(\epsilon^{3})$$
(3.77)

Yukarıdaki denklemin her iki tarafı da ϵ mertebesinde eşitlenirse, ϵ mertebesindeki terimler:

$$-\frac{1}{\tau}f_i^{\ 1} = \frac{\partial f_i^{\ 0}}{\partial x}c_i \quad (3.78)$$

Daha sonra f_i^{1} 'in x'e göre türevini almamız gerekebilir, dolayısıyla 3.35 denklemi x'e göre türevlenirse:

$$-\frac{1}{\tau}\frac{f_i^{\ 1}}{\partial x} = \frac{\partial^2 f_i^{\ 0}}{\partial x^2}c_i \quad (3.79)$$

 ϵ^2 mertebesindeki terimler:

$$-\frac{1}{\tau}f_i^2 = \frac{\partial f_i^0}{\partial t} + \frac{\partial f_i^1}{\partial x}c_i + \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^2 f_i^0}{\partial x^2}c_ic_i \quad (3.80)$$

bu denklemde(3.37) f_i^1 teriminin x'e göre türevi alınırsa:

$$-\frac{1}{\tau}f_i^2 = \frac{\partial f_i^0}{\partial t} - \tau \frac{\partial^2 f_i^0}{\partial x^2}c_ic_i + \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^2 f_i^0}{\partial x^2}c_ic_i \quad (3.81)$$

Difüzyon denkleminin (süreklilik anlamında) sağlanması için yukarıdaki denklem tüm durumlar için (*i*=1 ve 2) toplanması gerekir:

$$\sum_{i} \left[-\frac{1}{\tau} f_{i}^{2}\right] = \sum_{i} \left[\frac{\partial f_{i}^{0}}{\partial t} - \tau \frac{\partial^{2} f_{i}^{0}}{\partial x^{2}} c_{i} c_{i} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^{2} f_{i}^{0}}{\partial x^{2}} c_{i} c_{i}\right] \quad (3.82)$$

Denklemin sol tarafındaki ilk terim sıfırdır. Denklemin sağ tarafındaki ilk terim ise:

$$\sum_{i} \frac{\partial f_{i}}{\partial t} = \frac{\partial \sum_{i} f_{i}}{\partial t} = \frac{\partial \Theta}{\partial t} \quad (3.83)$$

Diğer terim ise:

$$\sum_{i} \left[\frac{\partial^2 f_i^{\ 0}}{\partial x^2} c_i c_i \right] = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\left[\sum_{i} f_i^{\ 0} c_i c_i \right] \right) = \frac{\partial^2 \Theta}{\partial t^2} \quad (3.84)$$

olur. Dolayısıyla 3.39 numaralı denklem aşağıdaki gibi sadeleştirilebilir:

$$0 = \frac{\partial \Theta}{\partial t} - \left(\tau - \frac{\Delta t}{2}\right) \frac{\partial^2 \Theta}{\partial t^2} \quad (3.85)$$

Elde edilen en son denklemi makro düzeydeki difüzyon denklemiyle karşılaştırdığımızda, τ gevşeme süresi, difüzyon denkleminin difüzyon katsayısıyla aşağıdaki gibi ilişkilendirilebilir:

$$\Gamma = \tau - \frac{\Delta t}{2} \quad (3.86)$$

Böylece süreklilik (Navier-Stokes) ve mezo ölçek (Lattice-Boltzmann) arasındaki bağlantı kurulur [3].

Bu bölümde açılımı basitleştirmek adına uygulaması en kolay denklemlerden olan 1 boyutlu difüzyon denklemi ele alınmıştır ancak Chapman-Enskog analizi diğer akış türleri için yapılabilir. Bu tezin uygulamaları kapsamında izotermal sıkıştırılamaz akış konusu ele alındığından, akış karakteristiği için çok önemli bir parametre Mach sayısı ile bu açılımda kullanılan Knudsen sayısı (ϵ) arasındaki ilişkiden söz etmek gerekir.

Mach sayısı ile Knudsen sayısı arasında aşağıdaki gibi bir ilişki söz konusudur [14]:

$$Kn = \frac{Ma}{Re} \sqrt{\frac{k\Pi}{2}} \quad (3.87)$$

Burada "*k*" ısıl kapasite oranı olup, bir maddenin sabit basınçtaki ısıl kapasitesinin sabit hacimdeki ısıl kapasitesine oranını ifade etmektedir. *Re* ise Reynolds sayısıdır. Sonuç olarak *Re* sayısı ve kök içindeki terimler birer sabit sayıyı vereceğinden, Knudsen sayısı ile Mach sayısının aynı mertebeden olduğu açıkça görülmektedir.

Chapman-Enskog analizi sıkıştırılamaz akışlar için yapılırken bu defa Knudsen sayısı yerine aynı mertebeden olan Mach sayısı kullanılmakta ve ikinci dereceden Taylor açılımı yapıldığından, (Ma^2) mertebesinin üzerindeki hata terimleri ihmal edilmektedir.

Dolayısıyla Lattice Boltzmann yönteminde hata miktarı Ma^2 terimiyle ilişkilendirilmektedir. Bu durumun doğal bir sonucu olarak da önceki bölümde belirtildiği üzere Mach sayısının düşük tutulmasına yönelik olarak yaklaşımlar (Low Mach Number Approximation) gündeme gelmektedir.

29

3.8 Lattice Boltzmann Yönteminde Mach ve Reynolds Sayıları

LBM için hata analizi yapmak, önceki bölümde görüldüğü üzere kapsamlı ve çok boyutlu bir açılımı (Chapman-Enskog gibi) gerektirir. Ancak hata analizinin nasıl yapıldığından daha çok pratik sonuçları önem taşıdığı için bu bölümde daha ziyade bu sonuçlar ele alınacaktır.

Yapılan analizler sonucunda LBM'nin sıkıştırılamaz akışlar söz konusu olduğunda yani düşük Mach sayıları için, Navier-Stokes denklemlerini iyi temsil ettiği ortaya konmuştur. LBM'de hataların Ma^2 terimi ile ilintili olduğundan önceki bölümde söz edilmişti. Düşük Mach sayıları için Navier-Stokes denklemlerinin iyi karşılanmasını bu bağlamda ele almak gerekir.

Lattice Boltzmann Yöntemi'nde makroskobik akışkan viskozitesi, gevşeme sıklığı (İng. *Relaxation Frequency*) parametresine bağlı olarak aşağıdaki gibi tanımlanır [2;3]:

$$\nu = \frac{\Delta x^2}{3\Delta t} (\omega - 0.5) \quad (3.88)$$

Burada Δx hücreler veya kafes noktaları arası uzaklık, Δt ise iki zaman adımı arasında geçen süredir. Pratikteki uygulamalarda Δx ve Δt birim büyüklük kabul edilmektedir.

Reynolds sayisi:

$$Re = UL/\nu$$
 (3.89)

olarak hesaplanırken, *U* ve *L*'nin makro ölçekte sırasıyla karakteristik hız ve karakteristik uzunluk olduğu bilinmektedir.

Eşitlik 3.88'de her iki taraf da "*UL*" ile bölünerek matematiksel bir manipülasyon yapılırsa Mach sayısı veya "Lattice Mach sayısı":

$$Ma = \frac{\Delta x}{L\sqrt{3}}(\omega - 0.5) Re$$
 (3.90)

şeklinde elde edilir [2;3].

 $L/\Delta x$ değeri, karakteristik uzunluk yönündeki "*N*" kafes noktası sayısını ortaya koyar. Δx birim uzunluk olduğu için LBM uygulamalarında genellikle *L*=*N* alınarak işlem yapılır, dolayısıyla Re = U. N/v olmaktadır. Sonuç olarak bu *Re* sayısı makro *Re* sayısından ayırmak için "Lattice Reynolds Sayısı" olarak da adlandırılabilir.

Yeterli hassasiyette bir çözüm için Mach sayısının düşük tutulması gerekmektedir, dolayısıyla ω veya *N* değerleri düşük bir Mach sayısını temin edecek şekilde seçilmelidir. Genel olarak *U*'nun, LBM konusunda yapılan kararlılık çalışmalarına dayalı olarak 0.2 birimi aşmayacak şekilde seçilmesi istenmektedir.

Bu tezin doğruluğu "sayısal sonuçlar" bölümünde irdelenecektir. Pratik uygulamalarda makroskobik Reynolds sayısının Lattice Reynolds sayısına eşit olması gerekir. Daha sonra U ve v değerleri çözümün kararlılığını sağlayacak bir aralıkta olmak kaydıyla rahatlıkla seçilebilir.

3.9 Lattice Boltzmann Yönteminde Kütle ve Momentum'un Korunumu

Makroskobik akışkan yoğunluğu, her bir kafes noktasındaki dağılım fonksiyonlarının toplamına eşittir. D2Q9 modeli için makroskobik yoğunluk [2;3;7]:

$$\rho = \sum_{k=0}^{8} f_k \quad (3.91)$$

olacaktır. Makroskobik momentum ise c_k kafes hızlarının dağılım fonksiyonlarıyla ağırlıklandırılmış ortalamaları olarak düşünülebilir [2;3;7]:

$$\rho u = \sum_{k=0}^{8} f_k c_k$$
 (3.92)

Buradan makroskobik hız:

$$u = \frac{1}{\rho} \sum_{k=0}^{8} f_k c_k \quad (3.93)$$

şeklinde elde edilir.

 $c_s^2 = \frac{\Delta x^2}{3\Delta t^2}$ olduğunu hatırlarsak Δx ve Δt birim kabul edildiğinde $c_s^2 = \frac{1}{3}$ olacaktır. LBM'de Δx ve Δt 'nin birim değer alması durumunda mezo ölçekteki veya kafes birimlerindeki "*kafes ses hızı*" nın sabit bir değer olduğu buradan görülebilir:

$$c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}$$
 (3.94)

Kafes hızlarının da aslında birim hızlar olduğu düşünülürse, mezo ölçekteki ses hızı ve kafes hızı arasında aşağıdaki ilişki kurulabilir [2;3;7]:

$$c_s = \frac{c_k}{\sqrt{3}} \quad (3.95)$$

Kinematik viskozitesi belli bir akışkan için ω gevşeme sıklığı ise 3.88 ifadesinden kolayca hesaplanabilir.

3.10 Sıkıştırılamaz İzotermal Akışlar İçin Çözüm Yöntemleri

3.10.1 Navier-Stokes Süreklilik Yaklaşımı

Bilindiği üzere, süreklilik yaklaşımı söz konusu olduğunda makro düzeyde akışkanlar mekaniği problemleri en genel haliyle Navier-Stokes denklemleri ile ele alınabilir.

İki boyutlu sıkıştırılamaz bir akış için Kartezyen koordinatlarda x ve y yönlerinde Navier-Stokes momentum denklemleri aşağıdaki gibi yazılır:

x momentum denklemi:

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u u)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho v u)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right)$$
(3.96)

y momentum denklemi:

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u v)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho v v)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) \quad (3.97)$$

Denklemlerin sol tarafları yatay yayılımı veya diğer bir deyişle akışkan partiküllerinin toplam ivmelenmelerini temsil etmektedir. Denklemin sağındaki ilk terim basınç farkını, son iki terim ise viskoz etkiler dolayısıyla ortaya çıkan kayma kuvvetlerini temsil etmektedir.

Bu iki momentum denkleminde u, v ve ρ olmak üzere 3 bilinmeyen söz konusu gibi görünse de;

$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = 0 \quad (3.98)$$

Süreklilik denkleminin de (3.98) sağlanması gerektiğinden 3 denklem ve 3 bilinmeyenden oluşan bir sistem bulunmaktadır. Dolayısıyla bu sistem verilebilecek başlangıç ve sınır koşulları için çözülebilir durumdadır. Ancak bu denklemde basınç terimi için açık bir ifade yer almamaktadır. Bu sebeple sıkıştırılamaz akış problemlerinin Navier-Stokes denklemleriyle çözümlerinde sonuç elde etmek için iteratif yöntemler gibi çözüm teknikleri kullanılmaktadır.

Çözüm için (ilk bölümde de söz edilen) sonlu farklar, sonlu hacimler ve sonlu elemanlar gibi değişik sayısal yöntemler kullanılmaktadır. Navier-Stokes ile çözüm yapılırken karşılaşılan temel iki güçlük vardır; birincisi denklemin sol tarafı doğrusal olmayan (non-lineer) bir karakterdedir, dolayısıyla sayısal kararlılığı sağlamak ve sayısal difüzyon denilen olayı engellemek için bazı önlemler almak gereklidir.

32

Denklemin solundaki yatay yayılım terimlerine yakınsamak için iki veya daha yüksek dereceli sonlu farklar (İng. *Upwind*) şemaları kullanılmak suretiyle ilk güçlük giderilebilir. Yüksek dereceli şemalar sayısal difüzyon sorunlarını bir nebze giderirler fakat öte yandan kararlılık limitini daraltabilir veya saçılım (İng. *Dispersion*) etkisi getirebilirler. Tüm bu sorunları gidermek üzere uygulamalarda birden fazla tedbir alma yoluna gidilmektedir [3].

Karşılaşılan ikinci bir güçlük ise daha önceden bahsedildiği üzere sıkıştırılamaz akış denklemlerinde basınç için açık bir ifadenin bulunmamasıdır. Dolayısıyla çözüm yapılırken her bir zaman adımı sonunda süreklilik denkleminin sağlandığı görülmelidir.

Bu aşamada Laplace denkleminin çözülmesi gerekir. Laplace denkleminin her seferinde çözülmesi ise önemli bir zaman almaktadır. Gerçekten de Navier-Stokes denklemlerinin çözülmesi için gerekli zamanın büyük bir bölümü Laplace denkleminin çözümünde harcanmaktadır [3;7].

3.10.2 Alternatif Yaklaşım -Lattice Boltzmann Yöntemi-

Lattice Boltzmann denklemi doğrusal bir yapıdadır, aslına bakılırsa akış mekaniğinin doğasından kaynaklanan ve doğrusal olmayan terimler denklemin çarpışmayı temsil eden tarafına kapalı (İng. *İmplicit*) olarak yerleştirilmiştir. Makroskobik yöntemdeki doğrusal olmayan yatay yayılım terimleri LBM'de doğrusal "serbest akış" aşamasıyla yer değiştirir. Navier-Stokes çözücülerinde olduğu gibi her bir zaman adımı için Laplace denklemini çözmeye gerek yoktur, dolayısıyla çözüm için gerekli süre çok daha düşüktür [2;3]. Lattice-Boltzmann yönteminde denklemin serbest akışı temsil eden sol tarafı açık (İng. *Explicit*) bir ifadedir, çünkü her bir zaman adımı için bir denklem takımının çözümünü yapmaya gerek yoktur. Denklemin sağında yer alan çarpışma terimi ise kullanılan modele göre kapalı veya açık olabilmektedir.

3.10.2.1 Lattice Boltzmann Yöntemiyle Sıkıştırılamaz Akışın Modellenmesi

Lattice Boltzmann yönteminde hangi model kullanılırsa kullanılsın temel denklemden de anlaşılacağı üzere akışın iki temel evreden geçerek devam ettiği varsayılır.

Bu evreler birbirini izleyen serbest akış (free streaming) ve çarpışma (collision) evreleridir. Merkezde bulunduğu kabul edilen parçacık topluluğunun çevre düğüm noktalarına (varsayılan) hareketleri bu eksende ele alınır.

Serbest Yayılma

Bu evrede hayali olarak tek bir parçacık gibi kabul edilen partikül topluluğunun denge halinde bulunduğu varsayılan merkez noktasından dağılım vektörlerinin yönleri doğrultusunda herhangi bir engelle karşılaşmaksızın yayılmaya başladıkları kabul edilir. Partiküllerin hareketlerini temsil eden dağılım fonksiyonları önceki bölümlerde değinilen Maxwell-Boltzmann dağılım fonksiyonundan elde edilmektedir. Şekilde D2Q9 modeli için serbest akış evresi şematik olarak gösterilmiştir.



Şekil 3.7: D2Q9 Modelinde serbest akış evresi

Parçacıklar herhangi bir çarpışma yaşamadıkları için bir önceki kafes noktasındaki dağılım fonksiyonu ile bir sonraki kafes noktasındaki dağılım fonksiyonunun büyüklüğü arasında bir fark olmayacaktır. Matematiksel olarak göstermek gerekirse:

$$f_i(r + c_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(r, t) = 0$$
 (3.99)

<u>Çarpışma</u>

Çarpışma evresi ise aynı noktaya hareketlenmiş iki parçacık topluluğunun yani bir diğer deyişle onları temsil eden iki dağılım fonksiyonunun o noktada buluşması olarak kabul edilir. Çarpışmanın gerçekleştiği noktada bir yerel denge dağılım fonksiyonu (İng. *Local Equilibrium Distribution Function*) tanımlanır ve bir araya gelip yeni bir hayali parçacık oluşturmuş iki parçacık topluluğunun bu denge noktasından başlayarak dağılım vektörlerinin yönlerinde yeniden serbest akışa geçmesiyle sona erer.



Şekil 3.8: D2Q9 Modelinde çarpışma evresi

Çarpışmanın matematiksel ifadesi:

$$f_i(r + c_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(r, t) = \Omega \quad (3.100)$$

Olacaktır. Ω çarpışma operatörü teriminin nasıl modellendiğinden (BGK) ve özelliklerinden önceki bölümlerde söz edilmiştir.

BGK ile modellenmiş çarpışma operatörü ve dolayısıyla çarpışma evresi de eklendiğinde serbest akış-çarpışma evrelerini takip ederek gelişen akışın genel denklemi bir defa daha hatırlanacağı gibi aşağıdaki biçimde elde edilir:

$$f_i(r + c_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(r, t) = \frac{1}{\tau} (f_i^{eq}(r, t) - f_i(r, t)) \quad (3.101)$$

3.10.3 Lattice Boltzmann ile Navier-Stokes Yöntemleri Arasındaki İki Fark

Lattice Boltzmann ile Navier-Stokes yöntemleri arasındaki en önemli farklar iki başlık altında ele alınabilir:

3.10.3.1 Doğrusal Olmayan Taşınım Terimi

Navier-Stokes denklemleri türetilirken kaçınılmaz olarak ortaya çıkan u. ∇u nonlineer taşınım teriminin Lattice Boltzmann denkleminde bulunmaması en temel farklardan birisidir. Bu terim Lattice Boltzmann denklemine aslında doğrusal bir serbest akış (denklemin sol tarafı) olarak yerleştirilmiştir ve doğrusal olmayan kısmı çarpışma teriminin (denklemin sağ tarafı) içerisine gizlenmiş durumdadır.

3.10.3.2 Basınç Terimi

Navier-Stokes yönteminde basınç teriminin Laplace denkleminin çözülmesi yoluyla elde edildiğinden söz edilmişti. Lattice Boltzmann yönteminde ise böyle bir zorunluluk yoktur (ilgili literatürde basınç teriminin maddenin gaz hal denklemlerinden türetilişi yer almaktadır [7]).

3.11 Lattice Boltzmann Yöntemi'nde Sınır Koşulları

Akışkanlar mekaniği problemlerinin sayısal çözümlerinin başarılı olabilmesi için gerekli en kritik şartlardan birisi de sınır koşullarının doğru bir biçimde uygulanmasıdır. Lattice Boltzmann yönteminin Navier-Stokes tabanlı çözücülere göre dezavantajlarından birisi, sınır koşullarının Navier-Stokes çözümlerindeki gibi kolayca uygulanamamasıdır. Lattice Boltzmann yönteminde sınır noktalarındaki dahili/iç dağılım fonksiyonlarının doğru bir biçimde belirlenmesi gerekmektedir. Bir diğer deyişle Lattice-Boltzmann yöntemiyle çözüm yaparken, örneğin her bir "serbest akış" evresinden sonra sınır bölgelerinin hemen yanındaki noktalar için dahili yoğunluk dağılımları bilinememektedir. Dolayısıyla verilen sınır koşullarında bu dağılım fonksiyonlarının hesaplanabilmesi için uygun denklemlerin belirlenmesi gerekmektedir.

Bu bilinmeyen dağılım fonksiyonlarının aynı zamanda akışkanın makroskobik özelliklerini karşılayacak biçimde belirlenmesi şarttır. Lattice Boltzmann yönteminin ilk kullanılmaya başlandığı günlerden itibaren pek çok çalışmada yeterli hassasiyette ve mümkün olabildiğince esnek sınır koşulları geliştirilmeye çalışılmıştır. Literatürde de tekrar tekrar tartışılmış ve dokümante edilmiş bir çok sınır koşulu bulunmaktadır. Bu konuda bu tez çalışmasının da temel kaynaklarından olan [2;3;8] kitapları kaynak gösterilebilir. Bu bölümde bahsi geçen kaynaklardan derlenen sınır koşulları anlatılmaya çalışılacaktır.

3.11.1 Sabit Sınırlar

Kaymazlık koşulu, en basit sınır koşullarından biri olup, en genel ifadesiyle katı yüzey üzerinde akışkan hızının sıfır olduğunu belirtir. LBM'de dilimizde "yansıma" olarak ifade edilebilecek olan "Bounce-Back" prensibi, kaymazlık koşulunun geçerli olduğu yüzeylerde akışı modellemek için rahatlıkla uygulanabilir.

Yansıma denilen prensip, belirli bir konumdan sınır noktasına hareketlenen bir parçacığın sınır olan duvara çarptıktan sonra aynı konumuna sahip olduğu kafes/örgü noktası hızının büyüklüğü aynı kalmak kaydıyla sadece hız yönü 180° ters biçimde geri döneceği varsayımına dayanır. Yansıma prensibi, LBM simülasyonlarında kullanılan birçok farklı sınır koşulunun aslında özünü oluşturur. Yansıma prensibini başarılı bir biçimde uygulamanın en basit yolu söz konusu

geometrinin fiziksel sınırları ile kafes/örgü/ağ yapısının sınırlarını örtüştürmekten geçer [2;3].

Örneğin Şekil 3.9 incelenirse, sınır koşulları olmadığında akışkan partikülünün duvara çarptıktan sonra f_8 , f_4 ve f_7 dağılım fonksiyonlarının ne olacağı bilinememektedir.



Şekil 3.9: Yansıma sınır koşulu (alıntıdır [8])

Burada yansıma prensibi uygulanırsa, bu dağılım fonksiyonları $f_6 = f_8, f_4 = f_2, f_7 = f_5$ olarak tespit edilecektir.

Yapılan çalışmalarda yansıma sınır koşulunun birinci dereceden yakınsaklığa sahip olduğu tespit edilmiştir [2;3;8].

Sınırlardaki bu durum teorik olarak ikinci dereceden yakınsaklığa sahip olduğu önceki bölümlerde gösterilen Lattice-Boltzmann yönteminin toplam yakınsaklık derecesini, yansıma uygulandığında 2'nin altına düşürmektedir.

Yansımayla ilgili bu sayısal hassasiyet sorununu giderebilmek için bu sınır koşulunda bazı değişiklikler önerilmiştir. Örneğin Ziegler 1993 tarihli çalışmasında fiziksel sınırları akış alanı içerisine yarım ağ birimi ölçüsünde kaydırmayı önermiş ve bu öneri literatürde "Yarı-yol yansıma (*İng. Halfway Bounce-Back*)" olarak yer almıştır. Bir başka deyişle bu sınır koşulunda duvar-akışkan arayüzünün akışkan ve duvar arasındaki hücresel mesafenin yarısında konuşlandırılması düşünülmüştür. Detaylı bilgi için C.Sukop-D.Thorne tarafından yazılan "Lattice Boltzmann Modeling- An Introduction for Geoscientists and Engineers" adlı kitap [8] incelenebilir.

Fiziksel olarak sabit duvarları tanımlamak için kullanılan yansıma sınır koşulunun avantajları ve dezavantajlarından söz etmek gerekirse; avantajları arasında uygulamasının oldukça basit olması ve kütlenin korunumu prensibini sağlaması,

37

dezavantajları arasında ise birinci dereceden yakınsaklığa sahip olması ve hareketli duvarların modellenmesinde yetersiz kalması sıralanabilir.

3.11.2 Bilinen Bir Hızla Hareket Eden Sınırlar

Sayısal uygulamalarda bazen bir alanın sınırları belirli bir hızla hareket halinde olabilir. Sınırların bu hareketli hali akışkana da belirli bir momentum kazandıracaktır ki bu durumu yansımanın durağan yapısıyla açıklamak mümkün değildir. Dolayısıyla yansıma denilen sınır koşulunda bu momentum etkisini de içerecek şekilde bazı değişiklikler yapılması gerekmiştir. Zou ve He 1997 yılında yansıma koşulunu sınırların normali yönünde genişletecek bir öneride bulunmuşlardır [15].

Bu çalışmada Zou ve He, sırasıyla makroskobik yoğunluk ve momentumu temsil eden 3.91 ve 3.92 denklemlerini dört bilinmeyen ve dört denklem elde etmek amacıyla sınıra normal denge koşullarıyla birlikte uygulamışlardır. Burada, Şekil 3.10'da gösterildiği üzere her bir serbest akış evresinden sonraki iç dağılım fonksiyonları bilinmeyen durumunda olacaktır.



Şekil 3.10: Serbest akış evresinden sonra sınırlardaki bilinmeyen dağılım fonksiyonları (kesikli çizgiler) (alıntıdır [3])

Örneğin kuzey (North) sınırı $U = \begin{bmatrix} u_n \\ v_n \end{bmatrix}$ şeklinde hareketli olarak tanımlanırsa, yukarıda sözü edilen dörtlü denklem sistemi aşağıdaki şekilde yazılarak bilinmeyen dağılım fonksiyonları elde edilebilir:

$$\rho_n = f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8 \quad (3.102)$$

$$\rho_n u_n = f_1 + f_5 + f_8 - f_6 - f_3 - f_7 \quad (3.103)$$

$$\rho_n v_n = f_2 + f_5 + f_6 - f_7 - f_4 - f_8 \quad (3.104)$$

$$f_4 - f_4^{eq} = f_2 - f_2^{eq} \quad (3.105)$$

Burada denge dağılım denklemleri yerine Maxwell-Boltzmann genel dağılım denklemi yazılıp biraz cebirsel manipülasyonlar yapıldığında kuzeydeki hareketli sınırın bilinmeyenleri aşağıdaki şekilde hesaplanmıştır [15]:

Kuzey sınırı için :

$$\rho_n = \frac{1}{1+\nu_n} [f_0 + f_1 + f_3 + 2(f_2 + f_6 + f_5)] \quad (3.106)$$

$$f_4 = f_2 - \frac{2}{3}\rho_n \nu_n \quad (3.107)$$

$$f_7 = f_5 + \frac{1}{2}(f_1 - f_3) - \frac{1}{6}\rho_n \nu_n - \frac{1}{2}\rho_n u_n \quad (3.108)$$

$$f_8 = f_6 - \frac{1}{2}(f_1 - f_3) - \frac{1}{6}\rho_n \nu_n + \frac{1}{2}\rho_n u_n \quad (3.109)$$

Benzer şekilde bilinen bir hıza sahip olan diğer hareketli sınırlara dair bilinmeyenler de aşağıdaki şekilde hesaplanır:

Güney sınırı için:

$$\rho_s = \frac{1}{1 - \nu_s} [f_0 + f_1 + f_3 + 2(f_4 + f_7 + f_8)] \quad (3.110)$$

$$f_{2} = f_{4} + \frac{2}{3}\rho_{s}v_{s} \quad (3.111)$$

$$f_{5} = f_{7} + \frac{1}{2}(f_{3} - f_{1}) + \frac{1}{6}\rho_{s}v_{s} + \frac{1}{2}\rho_{s}u_{s} \quad (3.112)$$

$$f_{6} = f_{8} - \frac{1}{2}(f_{3} - f_{1}) + \frac{1}{6}\rho_{s}v_{s} - \frac{1}{2}\rho_{s}u_{s} \quad (3.113)$$

Doğu sınırı için:

$$\rho_{e} = \frac{1}{1+u_{e}} [f_{0} + f_{2} + f_{4} + 2(f_{1} + f_{5} + f_{8})] \quad (3.114)$$

$$f_{3} = f_{1} - \frac{2}{3}\rho_{e}u_{e} \quad (3.115)$$

$$f_{7} = f_{5} + \frac{1}{2}(f_{2} - f_{4}) - \frac{1}{6}\rho_{e}u_{e} - \frac{1}{2}\rho_{e}v_{e} \quad (3.116)$$

$$f_{6} = f_{8} - \frac{1}{2}(f_{2} - f_{4}) - \frac{1}{6}\rho_{e}u_{e} + \frac{1}{2}\rho_{e}v_{e} \quad (3.117)$$

Batı sınırı için:

$$\rho_{w} = \frac{1}{1 - u_{w}} [f_{0} + f_{2} + f_{4} + 2(f_{3} + f_{6} + f_{7})] \quad (3.118)$$

$$f_{1} = f_{3} + \frac{2}{3}\rho_{w}u_{w} \quad (3.119)$$

$$f_{5} = f_{7} - \frac{1}{2}(f_{2} - f_{4}) + \frac{1}{6}\rho_{w}u_{w} + \frac{1}{2}\rho_{w}v_{w} \quad (3.120)$$

$$f_{8} = f_{6} + \frac{1}{2}(f_{2} - f_{4}) + \frac{1}{6}\rho_{w}u_{w} - \frac{1}{2}\rho_{w}v_{w} \quad (3.121)$$

Denklemler dikkatle incelendiğinde, aslında yansıma denilen statik sınır koşulunun, hareketli sınır koşulunun hız terimleri sıfır iken aldığı özel bir hal olduğu görülebilir.

4. YÖNTEMİN BİLGİSAYAR UYGULAMASI

4.1 Giriş

Bu bölümde Lattice Boltzmann yönteminin bir hesaplamalı akışkanlar mekaniği uygulaması olarak nasıl kullanıldığı üzerinde durulacaktır. Bu tez kapsamında yapılan çalışmalarda çözücü modeli olarak tek gevşeme zamanlı Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) modeli kullanılmıştır. BGK çarpışma operatörü modeline göre Lattice Boltzmann denkleminin nasıl yazıldığını hatırlayacak olursak:

$$f_i(r + c_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(r, t) = \frac{1}{\tau} (f_i^{eq}(r, t) - f_i(r, t)) \quad (4.1)$$

Bu denklemde τ gevşeme zamanı, f^{eq} ise denge dağılım denklemidir. Önceki bölümde de bahsedildiği üzere bu denklemi "serbest akış" ve "çarpışma" evrelerine ayırmak mümkündür. Buna göre:

Serbest Akış:
$$f_i(r + c_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(r, t)$$
 (4.2)
Çarpışma: $f_i(r, t + \Delta t)^* = f_i(r, t) + \frac{1}{\tau} (f_i^{eq}(r, t) - f_i(r, t))$ (4.3)

 $f_i(r, t + \Delta t)^*$ terimi çarpışma sonrası yeni denge dağılım fonksiyonunu ifade etmektedir. Kullanılan bütün kodların yapıları gereği serbest akış ve çarpışma evreleri ayrı alt programlar içerisinde tanımlanmıştır. Dolayısıyla her bir hesaplama basamağı için hem $f_i(r,t)$ serbest akış denge dağılım denklemini, hem de $f_i(r,t + \Delta t)^*$ çarpışma sonrası yeni denge dağılım denklemini kayıt altına almak gerekmektedir.

4.2 Algoritma

Bir sonraki bölüm olan sayısal sonuçlar bölümünde 3 farklı problemin çözümü MATLAB programı kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Bunlardan kapak tarafından hareketlendirilmiş oyuk akışı (İng. *Lid Driven Cavity Flow*) için A.Mohamad Lattice Boltzmann Method [5] isimli kitabından FORTRAN dilinde yazılmış jenerik bir kod MATLAB diline tercüme edilmiş ve bazı düzenlemeler yapılarak kullanılmıştır. Kanal akışı ve basamak üzerinden kanal akışı için ise olan silindir üzerinden kanal akışı için halihazırda var olan ve kamuya açık biçimde yayımlanmış bir kod [16] referans alınmış ve mevcut problemlere göre yeniden kodlama yapılarak kullanılmıştır. Çözümü gerçekleştirilen üç problemin kodları için de benzer algoritmalar söz konusudur. Lattice Boltzmann yönteminde kodlama, diğer yöntemlere göre daha basittir. Genel olarak tüm kodların algoritması aşağıdaki biçimdedir:

-Çözüm parametreleri(Girdiler)

-Ana döngü

-Denge dağılım fonksiyonunun hesaplanması

-Çarpışma

-Serbest akış

-Sınır koşulları (sınırlardaki dağılım fonksiyonlarının hesaplanması)

-Yoğunluk ve hız bileşenlerinin hesaplanması

-Ana döngünün sonu

-Çıktılar

4.2.1 Çarpışma

Çarpışma aşamasının BGK çarpışma operatörüne göre modellenebilmesi için öncelikle denge dağılım fonksiyonunun bilinmesi gerekmektedir. Denge dağılım fonksiyonu başlangıç koşulu olarak aşağıdaki şekilde tanımlanmıştır:

f = zeros(9,n+1,m+1);
feq = zeros(9,n+1,m+1);

Çarpışma fonksiyonu ise MATLAB yazılımında aşağıdaki şekilde tanımlanmıştır:

```
function [feq,f] = collision(u,v,f,feq,rho,omega,w,cx,cy,n,m)
```

Buna göre çarpışmadan bir zaman adımı sonraki yeni " f_{eq} " denge dağılım fonksiyonları ve "f" yerel dağılım fonksiyonları, "collision" çarpışma fonksiyonu tarafından yukarıda parantez içinde verilen parametreleri kullanarak hesaplanacaktır. Verilen parametrelerin hepsi çözüm başlatılmadan önce kullanılacak başlangıç parametreleri olarak uygulama sayfasına girilmektedir.

Çarpışma aşamasının algoritmasını anlatabilmek adına teoriye geri dönüş yapmak gerekmektedir. Bhatnagar-Gross-Krook(BGK) çarpışma modeline göre 4.1 denkleminde verilen Lattice Boltzmann ifadesi, matematiksel manipülasyonla aşağıdaki şekilde yazılabilir:

 $f_k(x + \Delta x, t + \Delta t) = f_k(x, t)[1 - \omega] + \omega f_k^{eq}(x, t) \quad (4.4)$

D2Q9 modeli için ise tek fark denge dağılım denklemine eklenen bazı terimler olmaktadır:

$$f_k^{eq} = w_k \rho(x,t) \left[1 + \frac{ck \, u}{c_s^2} + \frac{1}{2} \frac{(ck \, u)^2}{c_s^4} - \frac{1}{2} \frac{u^2}{c_s^2}\right] \quad (4.5)$$

Burada w_k ağırlık fonksiyonlarını, c_k terimi her bir kafes noktasındaki akışkan hızlarını c_s terimi ise kafes ses hızını temsil etmektedir.

Teorik bölümde daha detaylı incelenen D2Q9'un çarpışma modeli MATLAB algoritmasına aşağıdaki şekilde aktarılmıştır:

```
feq(k,i,j)=rho(i,j)*w(k)*(1+3*t2+4.5*t2*t2-1.5*t1);
f(k,i,j)=omega*feq(k,i,j)+(1-omega)*f(k,i,j);
```

Yukarıdaki kod içerisindeki ilk satır D2Q9 modeline göre 4.5 denkleminde matematiksel olarak verilen denge dağılım fonksiyonunu ifade etmektedir. Denklemde t2 ve t1 olarak tanımlanan terimler, çevirinin yapıldığı fortran kodunda "c" hız terimleri yerine kullanılmış olup aynı tanımlarla MATLAB'a tercüme edilmiştir. İkinci satır ise BGK çarpışma operatörüne göre 4.4 denkleminde matematiksel ifadesi verilen Lattice-Boltzmann yerel dağılım denklemini temsil etmektedir.

Bu algoritmaya göre çözüm başladığında, denge dağılım ve yerel dağılım fonksiyonları için tanımlanan başlangıç değerleri kullanılarak zaman adımları ilerledikçe verilen D2Q9 algoritmasına göre çarpışma sonrası yeni denge dağılım ve yerel dağılım fonksiyonları hesaplanmaktadır. Hesaplanan yeni değerler bir sonraki zaman adımında çarpışma evresi için girdi parametresi olarak kullanılmaktadır.

4.2.2 Serbest Akış

Serbest akışta denge dağılım fonksiyonunda herhangi bir değişim öngörülmediğinden algoritma oldukça basittir. Yapılan şey sadece bir adım sonraki yerel dağılım fonksiyonuyla bir adım önceki yerel dağılım fonksiyonunun birbirine eşit olduğunu, bir diğer deyişle lokasyonlar değiştiğinde dağılım fonksiyonları arasında bir fark oluşmadığını ifade etmekten ibarettir. D2Q9 modelini bir kez daha hatırlarsak:

43



Şekil 4.1: D2Q9 Modeli (alıntıdır [8])

Burada MATLAB ile FORTRAN arasındaki indeks farklılığından da bahsetmek gerekir. MATLAB'da indeksler sıfır ile başlayamadığından, D2Q9 modelinin "0" olarak tanımlanan merkez parçacığı MATLAB'da "1" noktası olarak gösterilmiş, buna bağlı olarak tüm diğer noktaların indeksleri de birer artırılmıştır. Yani örneğin şekildeki 3 numaralı vektör aslında MATLAB algoritmasında 4 numaralı vektördür.

D2Q9 modeline göre serbest akışın MATLAB'da nasıl tanımlandığını koddan alınmış bazı satırlar yardımıyla açıklamak gerekirse:

```
for i=1:n
    f(4,i,j)=f(4,i+1,j);
end
```

Burada basitçe D2Q9 modelinde merkezde bulunan parçacığın 4 numaralı vektör (şekilde 3 numaralı) yönünde serbest akış hareketinde bir sonraki lokasyonuyla ilk lokasyonu arasında denge dağılım fonksiyonu açısından bir fark olmadığı gösterilmiştir.

```
for i=1:n
    f(7,i,j)=f(7,i+1,j-1);
end
```

Burada da serbest akışta 7 numaralı vektör için (şekilde 6 numara) parçacığın merkez lokasyonu (i,j) ve bir sonraki hareket noktası (i+1, j-1) arasında denge dağılım fonksiyonlarının aynı olduğu ifade edilmiştir.

Tüm geometri için soldan sağa, sağdan sola, yukarıdan aşağıya ve aşağıdan yukarıya serbest akış bu suretle tanımlanmış ve zaman adımları boyunca bu algoritma sürdürülmüştür.

4.2.3 Sınır Koşulları

Çözümü yapılan problemler için uygulanan sınır koşulları iki türdür. Statik sınırlar için yansıma, hareketli sınırlar için ise Zou-He tarafından geliştirilmiş bilinen hız (İng. *Known Velocity Boundary Condition*) sınır koşulları uygulanmıştır.

Statik sınır koşulları uygulama yönünden oldukça basittir. Örneğin oyuk akışında kapak haricindeki statik üç duvar için yansıma sınır koşulu uygulanmış, kapak için ise bilinen hız veya Zou-He sınır koşulu uygulanmıştır.

Yansımaya örnek vermek gerekirse:

```
% sol duvar için yansıma
f(2,1,j)=f(4,1,j);
f(6,1,j)=f(8,1,j);
f(9,1,j)=f(7,1,j);
```

Yansıma, duvara çarpan parçacığın eşit hız büyüklüğüyle yönünü 180 ° ters çevireceği varsayımına dayanan bir sınır koşuludur. Diğer statik duvarlar için de D2Q9 modelinin yansıma sınır koşulu uygulanmıştır.

Hareketli kapak için ise önceki bölümde detayları açıklanan bilinen hız sınır koşulu uygulanmıştır. Buna göre kapak için MATLAB'da aşağıdaki kısımlar eklenmiştir:

```
for i=3:n+1
rhon=f(1,i,m+1)+f(2,i,m+1)+f(4,i,m+1)+2*(f(3,i,m+1)+f(7,i,m+1)+f(6,i,m+1));
    f(5,i,m+1)=f(3,i,m+1);
    f(9,i,m+1)=f(7,i,m+1)+rhon*uo/6;
    f(8,i,m+1)=f(6,i,m+1)-rhon*uo/6;
end
```

Burada döngünün ikinci satırı, dağılım fonksiyonlarının toplamının yoğunluğu vereceğini, 3,4 ve 5. satırlar ise bilinen hız sınır koşulunu ifade etmektedir. Bu sınır koşuluna ilişkin detaylar teorik bölümde ele alınmıştır.

4.2.4 Yoğunluk ve Hız Bileşenlerinin Hesaplanması

Çözümlerin sıkıştırılamaz bir modelde gerçekleştirilecektir. Ve teorik bölümdeki kütle ve momentumun korunumu bahsinde değinildiği üzere aslında Lattice-Boltzmann yönteminde dağılım fonksiyonu denilen parametrelerin toplamı makro düzeyde yoğunluğa karşılık gelmektedir. Bu durum MATLAB'da aşağıdaki şekilde anlatılmıştır:

```
function [rho,u,v]=rhouvv1(f,rho,u,v,cx,cy,n,m)
for j=1:m+1
    for i=1:n+1
        ssum=0;
        for k=1:9
            ssum=ssum+f(k,i,j);
        end
        rho(i,j)=ssum;
    end
end
for i=2:n+1
rho(i,m+1)=f(1,i,m+1)+f(2,i,m+1)+f(4,i,m+1)+2*(f(3,i,m+1)+f(7,i,m+1)+f(6,i,m+1));
end
```

u ve v hız bileşenlerinin hesaplanması ise D2Q9 modelinde başlangıçta merkez parçacığın hızının sıfır olduğu ve 9 noktaya dağılan -veya dağılma olasılığı olanparçacıkların toplam vektörel hızlarının da sıfır olacağı varsayımıyla şöyle gerçekleştirilmiştir:

```
for i=2:n+1
    for j=2:m
        usum=0;
        vsum=0;
        for k=1:9
            usum=usum+f(k,i,j)*cx(k);
            vsum=vsum+f(k,i,j)*cy(k);
        end
        u(i,j)=usum/rho(i,j);
        v(i,j)=vsum/rho(i,j);
    end
end
end
```

4.2.5 Ana Döngünün Sonu

Ana algoritma ise kullanılan bütün kodlar için prensipte aynıdır. Belirli bir zaman adımı sayısı belirlenir ve bu girdi parametresi olarak verilir. Daha sonra sırasıyla çarpışma, serbest akış, sınır koşulları ve yoğunluk-hız için yazılan alt programlar çağırılarak bu zaman adımı tamamlanana kadar bir döngü içerisinde çözüm gerçekleştirilir. Çözümün gerçekleştirildiği ana algoritma aşağıda verilmiştir:

```
for kk = 1:mstep %Ana döngü
    [feq,f] =
collesionv1(u,v,f,feq,rho,omega,w,cx,cy,n,m);
    f = streamingv1(f,n,m);
    f = sfboundv1(f,n,m,uo);
    [rho,u,v]=rhouvv1(f,rho,u,v,cx,cy,n,m);
end
```

Ana döngü tamamlandıktan sonra istenilen sonuç çıktılarının alınabilmesi için ayrıca MATLAB programı içerisinde belirli düzenlemeler yapılmıştır. Döngü sonucunda akış fonksiyonunun (*İng. Stream Function*) hesaplanması için ayrı bir kod yazılmıştır. Ayrıca görüntülemeye ilişkin bazı ayarlamalar da gerçekleştirilmiştir.

5. SAYISAL ÇÖZÜMLER

Bu bölümde Lattice Boltzmann Metodu kullanılarak yapılan çözümlerden alınan sayısal sonuçlar sunulmaktadır. Elde edilen sayısal sonuçlar kanal akışı için analitik sonuçlarla, diğer problemler için ise literatürde konvansiyonel yöntemler (sonlu hacimler, sonlu farklar gibi) kullanılarak alınan sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Alınan sonuçlardan, sıkıştırılamaz akışlarda Lattice Boltzmann yönteminin çözümün yapıldığı Reynolds sayıları için yeterli hassasiyette çıktılar verdiği anlaşılmıştır. Yapılan çalışmada Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği'nin iki boyutlu 3 temel problemi üzerinde durulmuştur:

i- Kapak tarafından hareketlendirilen oyuk akışı (İng. *Lid Driven Cavity Flow*) - metin içerisinde bundan sonra kısaca oyuk akışı olarak anılacaktır-,

ii- Kanal Akışı (İng. Channel Flow),

iii- Basamak Üzerinden Kanal Akışı (İng. Backward Facing Step Flow).

Bunlardan oyuk akışı problemi ayrı bir konu olarak ele alınmıştır. Kanal akışı ile basamak üzerinden kanal akışının girdi parametreleri ve fizikleri benzer olduğundan, öncelikle kanal akışı üzerinde gevşeme parametresi, sayısal ağ/kafes yapısı (İng. *Mesh/Grid/Lattice*), zaman adımlarının (İng. *Time Step*) sayısı gibi parametrelerin etkisi incelenmiş, daha sonra elde edilen sonuçlara göre basamaklı kanal akışı için çözüm ayarları yapılmıştır.

5.1 Kapak Tarafından Hareketlendirilen Oyuk Akışı

Oyuk akışı problemi aslen iki boyutlu kare bir oyuk içerisinde gerçekleşen viskoz bir akıştır. Söz konusu kare oyuk içerisinde yer alan sıkıştırılamaz akışkan karenin üst kenarı konumunda olan ve sabit bir hızla bir yöne hareket eden kapak vasıtasıyla hareketlendirilmektedir. Problemin şematik görüntüsü Şekil 5.1'de yer almaktadır.



Şekil 5.1: Kapak tarafından hareketlendirilmiş oyuk akışı

Oyuk akışı problemi Hesaplamalı Akışkanlar Mekaniği'nin en temel problemlerinden biridir. Bu probleminin teorik önemi, oyuk içerisinde gerçekleşen hareketler sayesinde kendi içerisinde kapalı ve kararlı ayrı akış bölgelerinin (İng. *Vortex*) oluşmasından ileri gelmektedir.

Problemin sayısal çözümünde geleneksel olarak en çok kullanılan yöntemler arasında, sıkıştırılamaz Navier-Stokes denkleminin multi-grid, sonlu elemanlar ve sonlu hacimler gibi teknikler kullanılarak alt parçalara ayrılıp çözülmesi sıralanabilir. LBM kullanılarak gerçekleştirilen mevcut çalışmada yer alan çözümden elde edilen sonuçlar, bu konuda yapılmış en önemli ve temel çalışmalar arasında yer alan Ghia ve diğerlerinin 1982 tarihli [17] multi-grid şema kullanılan çalışmasının sonuçlarıyla karşılaştırılmıştır.

Ghia ve diğerlerinin çalışmasında olduğu gibi mevcut çalışmada da Re=100, 400, 1000, 3200, 5000 ve 7500 gibi görece geniş bir aralıkta yer alan farklı Reynolds sayıları için sonuçlar alınmıştır. Elde edilen sonuçlardan merkezi vorteksin konumu, hız profilleri ve akış fonksiyonlarının görüntüleri bu bölümde sunulacaktır.

5.1.1 Sınır Koşulları

Oyuk akışı için kullanılan sınır koşulları karmaşık değildir. Kare boşluğun üzerinde sabit hızla hareket eden bir kapak ve bu kapakta kaymazlık (İng. *No Slip*) koşulu söz konusudur. Diğer duvarlar da statik olup x ve y yönlerinde hızları sıfırdır. Ayrıca sınır bölgeleri olan duvarlar ve kapakta sırasıyla önceki bölümlerde detaylıca ele alınan yansıma (statik) ve hareketli sınır koşulları uygulanmıştır.



Şekil 5.2: Oyuk akışı için sınır koşulları

5.1.2 Girdi Parametrelerinin Belirlenmesi

Önceki bölümlerde Lattice Boltzmann Yöntemi'nin yapısı gereği (düşük Mach sayısı yaklaşımı dolayısıyla) görece düşük Reynolds sayılarında ve sıkıştırılamaz akışlarda Navier-Stokes denklemlerini iyi temsil ettiğinden söz edilmişti.

Mach sayısının düşük tutulmasına ilişkin kısıtlama dolayısıyla (bu durum literatürde sıkıştırlabilirlik etkisi - *Compressibility Effect* – olarak adlandırılmaktadır) LBM ile yapılan çözümlerde elde edilecek sonuçların hassasiyeti (İng. *Accuracy*) için u=0.2 birim'den fazla bir başlangıç hızı kullanılmamaktadır [2;3].

Aynı şekilde ω gevşeme parametresi üzerine yapılan çalışmalarda da [2] 0,6< ω <1,9 aralığı kararlı bir çözüm için uygun aralık olarak tespit edilmiştir. Yöntemin teorisinde gevşeme parametresi değerinin direkt olarak kinematik viskoziteyle ilişkilendirildiği düşünülürse, ilgili kararlılık aralığında (0,6< ω <1,9) kalabilmek için viskozite değerinin de belirli bir aralıkta tutulması gerekliliği doğmaktadır. Mevcut çalışmada da söz konusu aralığın dışında çözümler denenmiş ancak, geçerli sonuçlar elde edilememiş ve çözümler tamamlanamamıştır.

Sözü edilen kısıtlamalardan dolayı Lattice Boltzmann yönteminin uygulamalarında girdi hızı ve kinematik viskozite için bir optimizasyon yapma imkanı ancak sınırlı biçimde mümkündür.

Re sayısının oyuk problemi için:

$$Re = \frac{uo L}{v}$$
 (5.1)

Şeklinde hesaplandığı düşünülürse, belirli bir Reynolds sayısından (örneğin Re=100) nispeten daha yüksek Re sayılarına çıkılabilmesi için kapak hızı ve kinematik viskozite için mümkün olan optimizasyon yapıldıktan sonra geriye kapak boyutunu, dolayısıyla da kafes noktası sayısını artırmaktan başka seçenek kalmamaktadır. Mevcut durumda kare geometriyi korumak adına boşluk derinliği yönündeki nokta sayısı da artırılmalıdır. Bu da daha fazla hesaplama süresi anlamına gelmektedir. Yüksek Re sayıları için artan kafes noktası sayısına bağlı olarak karşılaşılan bu hesaplama süresi problemini aşmanın yolu olarak literatürde işlemci paralelizasyonunu öneren bazı çalışmalar mevcuttur [18].

Zaten Lattice Boltzmann yönteminin en önemli avantajları arasında - *Parallel Computing* - denilen işlemci paralelizasyonuna diğer sayısal yöntemlere kıyasla kolaylıkla olanak sağlaması ilk sıralarda yer almaktadır. Böylece çok daha hızlı çözümün mümkün olabildiğinden ve işlem sürelerinin hayli kısaldığından ilgili çalışmalarda örnekleriyle bahsedilmektedir [18].

Mevcut çalışmada elde edilen sonuçların sayısal ağ(kafes) yapısından bağımsız olup olmadığının ve referans alınan deneysel ve teorik çalışmalara en yakın sonuç veren hücre sayısının tespiti amacıyla Re=100,400 ve 1000 sayıları için yönelik bir çalışma gerçekleştirilmiştir. Ek olarak yine aynı Reynolds sayıları için zaman adımı sayısının etkileri de incelenmiştir.

51

5.1.3 Çözümün Zaman Adımı ve Ağ Yapısından Bağımsızlığı

5.1.3.1. Re=100

Kapak boyu aynı zamanda x yönündeki kafes noktası sayısına eşit olduğundan (L=N), hücresel Reynolds sayısı (İng. *Lattice Reynolds Number*) [3] :

$$Re = \frac{u_0 N}{v} \quad (5.2)$$

şeklinde hesaplanmaktadır. Re = 100'de öncelikle kafes noktası/hücre sayısı N=100 sabit olmak üzere kapak hızı $u_0 = 0,2$ birim ve kinematik viskozite v = 0,2 birim için farklı zaman adımı değerleri ile zaman adımı çalışması yapılmıştır. Referans çıktı olarak merkezde yer alan vorteksin x ve y koordinatları incelenmiştir. Re = 100 için akış çizgilerine dair alınan sonuçlar Şekil 5.3'te ve referans çıktı olarak incelenen zaman adımına bağlı koordinatları Çizelge 5.1'de yer almaktadır:



Şekil 5.3: Re = 100 için akış çizgileri ve vorteksler

Zaman Adımı Çalışması

Çizelge 5.1: Re=100 Farklı zaman adımı değerleri için merkezi vorteks'in koordinatları

| Re 100/ Ağ 100x100 | x Koor. | y Koor. | x % Hata | y % Hata |
|-----------------------|---------|---------|----------|----------|
| Adım 40000 | 0,63 | 0,76 | % 2,07 | % 3,49 |
| Adım 60000 | 0,62 | 0,75 | % 0,45 | % 2,12 |
| Adım 80000 | 0,62 | 0,74 | % 0,45 | %0,76 |
| Adım 100000 | 0,62 | 0,74 | % 0,45 | %0,76 |
| Adım 120000 | 0,62 | 0,74 | % 0,45 | %0,76 |

Ghia ve diğerlerinin 1982 tarihli çalışmada merkezi vorteksin koordinatları (x=0,6172 y=0,7344) olarak verildiğinden, hata oranları bakımından son üç sonucun da kabul edilebilir seviyede olduğu değerlendirilebilir. Re=100 için harcanan işlem süresi nispeten kısa olduğundan, 100000 adım sayısı yeterli kabul edilmiş hücre(kafes noktası) sayısı çalışması için kullanılmıştır.

Hücre Sayısı Çalışması

Bu bölümde bir önceki sonuçlar doğrultusunda 100000 zaman adımı kullanılarak çeşitli ağ yapılarıyla çözümler gerçekleştirilmiştir.

Reynolds ve Mach sayılarının sabit tutulabilmesi amacıyla kapak hızı aynen korunurken, her ağ yapısı için Re=100'ü sağlayacak şekilde kinematik viskozite değiştirilmiştir. x ve y yönlerindeki kafes noktası sayıları hariç tüm girdi parametreleri sabit tutulmuştur. Sonuçlar aşağıda yer almaktadır:

Çizelge 5.2: Re=100 Farklı hücre sayısı değerleri için merkezi vorteks'in koordinatları

| Re 100/ Adım 100000 | x Koor. | y Koor. | x % Hata | y % Hata |
|------------------------|---------|---------|----------|----------|
| 10x10 | 0,7 | 0,8 | % 13,4 | % 8,90 |
| 25x25 | 0,64 | 0,76 | % 3,69 | % 3,49 |
| 50x50 | 0,64 | 0,76 | % 3,69 | % 3,49 |
| 125x125 | 0,616 | 0,744 | % 0,19 | % 1,31 |

Tüm sayısal yöntemlerde genel bir doğru olarak ağ/kafes yapısı kabadan inceye doğru gittiğinde yani birim alandaki hücre sayısı arttığında - yuvarlama hataları (İng. *Round-off Errors*) sonuçları etkileyecek bir düzeye ulaşmadığı müddetçe - elde edilen sonuçların daha iyiye gitmesi beklenir. Yapılan çalışmanın sonuçlarına bakıldığında da bu beklentinin karşılandığı görülmektedir.

Ghia ve diğerlerinin çalışmasında merkezi vorteksin koordinatları için (x=0,6172 y=0,7344) değerleri verilmiştir. Mevcut çalışmada ise referans sonuçlara en yakın değerlerin toplam 15625 (125x125) hücre sayısı için (x=0,616 y=0,744) şeklinde elde edildiği görülmektedir.

Yukarıda sözü edilen genel prensip gereği daha fazla hücre sayısı ve buna bağlı olarak daha fazla adım sayılarının kullanılmasıyla sonuçların belirli bir noktaya

kadar daha iyiye götürülebileceği varsayımı yapılabilir, ancak elde edilen sonuçların da %1 civarında hata düzeylerinde (x koordinatı için %0,19, y koordinatı için %1,31) olduğu görüldüğünden 125x125 ağ yapısı ve 100000 adım sayısıyla elde edilen çözüm yeterli kabul edilmiştir.

5.1.3.2 Re=400

Reynolds sayısını 4 katına çıkarabilmek için x ve y yönündeki kafes noktası/hücre sayısını 4 katına çıkarmak çözüm süresini çok uzatacağından Re=100 için kullanılan v=0,2 kinematik viskozite değeri dörtte birine indirilip farklı adım sayıları kullanılarak bu durumun sonuçları etkileyip etkilemediği sorgulanmıştır. Re=400 için akış çizgilerine dair alınan sonuçlar Şekil 5.4'te ve farklı zaman adımlarına göre merkezi vorteksin koordinatları Çizelge 5.3'te yer almaktadır:



Şekil 5.4: Re=400 için akış çizgileri ve vorteksler

Zaman Adımı Çalışması

Çizelge 5.3: Re=400 Farklı zaman adımı değerleri için merkezi vorteks'in koordinatları

| Re 100/ Ağ 100x100 | x Koor. | y Koor. | x % Hata | y % Hata |
|-----------------------|---------|---------|----------|----------|
| Adım 5000 | 0,59 | 0,64 | % 6,36 | % 5,70 |
| Adım 10000 | 0,56 | 0,62 | % 0,96 | % 2,39 |
| Adım 40000 | 0,56 | 0,61 | % 0,96 | % 0,74 |
| Adım 60000 | 0,56 | 0,61 | % 0,96 | % 0,74 |
| Adım 80000 | 0,56 | 0,61 | % 0,96 | % 0,74 |
| Adım 100000 | 0,56 | 0,61 | % 0,96 | % 0,74 |

Ghia ve diğerlerinin 1982 tarihli çalışmasında Re = 400 için (x=0.5547 y=0,6055) şeklinde verilen merkezi vorteks koordinatlarına kıyasla hata oranı bakımından 40000 adım ve sonrasında en yakın sonuçların elde edildiği ve bu adım sayısından sonra sonuçların değişmediği anlaşılmaktadır.

Hücre Sayısı Çalışması

Önceki bölümde olduğu gibi burada da belli bir adım sayısı (100000) için farklı hücre sayıları ve dolayısıyla kapak boyutları için çözümler yapılmıştır. Re=400'ün sağlanması için her durumda farklı kinematik viskoziteyle çözümler gerçekleştirilmiştir.

Çizelge 5.4: Re=400 Farklı hücre sayısı değerleri için merkezi vorteks'in koordinatları

| Re 100/ Adım 100000 | x Koor. | y Koor. | x % Hata | y % Hata |
|------------------------|---------|---------|----------|----------|
| 25x25 | 0,56 | 0,64 | % 0,96 | % 5,70 |
| 50x50 | 0,56 | 0,62 | % 0,96 | % 2,39 |
| 100x100 | 0,56 | 0,61 | % 0,96 | %0,74 |
| 125x125 | 0,56 | 0,608 | % 0,96 | %0,41 |

Söz konusu çözümler arasında Ghia ve diğerlerinin 1982 tarihli çalışmasında Re=400 için yer alan (x=0.5547 y=0,6055) datasına en yakın sonuçlar 125x125 hücre yapısı kullanılarak elde edilmiştir. Hata oranları Çizelge 5.4'de görüldüğü üzere sırasıyla %0,96 ve %0,41 şeklindedir. Bu sonuçların zaman adımları daha da artırıldığında değişip değişmediği de sorgulanmıştır ve sonuçların değişmediği anlaşılmıştır:

Çizelge 5.5: Re=400 125x125 hücre yapısı için artan zaman adımlarına göre merkezi vorteks'in koordinatları

| Re=400 / Ağ 125x125 | x Koor. | y Koor. |
|---------------------|---------|---------|
| 120000 | 0,56 | 0,608 |
| 200000 | 0,56 | 0,608 |
| 300000 | 0,56 | 0,608 |

5.1.3.3 Re=1000

Re=1000 için kapak hızı sabit olmak üzere v = 0,02 kinematik viskozite değeri ile çözüm yapılmış Şekil 5.5 ve Çizelge 5.6'da görülen sonuçlar elde edilmiştir:



Şekil 5.5: Re=1000 için akış çizgileri ve vorteksler

Zaman Adımı Çalışması

Çizelge 5.6: Re=1000 Farklı zaman adımı değerleri için merkezi vorteks'in koordinatları

| Re 100/ Ağ 100x100 | x Koor. | y Koor. | x % Hata | y % Hata |
|-----------------------|---------|---------|----------|----------|
| Adım 5000 | 0,59 | 0,64 | % 11,05 | % 13,78 |
| Adım 10000 | 0,56 | 0,62 | % 5,40 | % 10,22 |
| Adım 40000 | 0,54 | 0,57 | % 1,64 | % 1,33 |
| Adım 60000 | 0,54 | 0,57 | % 1,64 | % 1,33 |
| Adım 80000 | 0,54 | 0,57 | % 1,64 | % 1,33 |
| Adım 100000 | 0,54 | 0,57 | % 1,64 | % 1,33 |

Referans çalışmada Re=1000 için verilen koordinatlar (x=0.5313 y=0,5625) şeklindedir. 40000 adım sayısından itibaren referansa en yakın sonuçlar elde edilmiş ve bu sonuçlar artırılan zaman adımlarıyla değişmemiştir.
Hücre Sayısı Çalışması

| Re 100/ Adım Sayısı 100000* | x Koor. | y Koor. | x % Hata | y % Hata |
|--------------------------------|---------|---------|----------|----------|
| 50x50 | 0,54 | 0,58 | % 1,64 | % 3,11 |
| 100x100 | 0,54 | 0,57 | % 1,64 | % 1,33 |
| 125x125 / Adım | | | | |
| Sayısı 400000* | 0,532 | 0,567 | % 0,13 | % 0,8 |

Çizelge 5.7: Re=1000 Farklı hücre sayısı değerleri için merkezi vorteks'in koordinatları

100000 zaman adımı kullanılıp ağ yapısı veya bir başka deyişle *çözünürlük* (İng. *Resolution*) sıkılaştırılarak hücre sayısı artırıldığında Ghia ve diğerlerinin 1982 tarihli çalışmasında Re=1000 için yer alan (x=0.5313 y=0,5625) datasına en yakın sonuçlar 200x200'lük ağ yapısı kullanılarak elde edilebilmiştir. Ancak bu noktada hücre sayısı bir önceki ağ yapısı olan 100x100'lük duruma göre 4 kat artırıldığından, adım sayısı da 4 kat artırılmıştır. Aksi halde oluşacak yeni durumda kullanılan hücre miktarına göre adım sayısı yetersiz kalacağından sonuçların bu hassasiyet düzeyinde alınması geçmiş çalışmalardan da anlaşıldığı üzere mümkün olmayacak idi. Çizelge 5.7'de görüldüğü üzere hata oranları x koordinatı için %0,13 y koordinatı için ise %0,8 düzeylerindedir.

5.1.3.4 Re=3200

Re=3200 için 160x160 nümerik ağ yapısı, kapak hızı $u_0 = 0,2$ birim ve kinematik viskozite v = 0.01 birim ve adım sayısı 200000 olmak üzere bir çözüm gerçekleştirilmiştir. Elde edilen sonuç aşağıda yer almaktadır:



Şekil-5.6: Re=3200 için akış çizgileri ve vorteksler

Sonuç olarak ana vorteksin merkez koordinatları (X=0,522 Y=0,547) şeklinde elde edilmiştir. Ghia ve diğerlerinin 1982 tarihli çalışmasında bu Reynolds sayısı için merkez vorteksin koordinatları (X=0,5165 Y=0,5469) olarak verilmiştir. Elde edilen sonuç X ve Y koordinatları için Ghia'ya göre sırasıyla %1,06 ve %0,02 hata oranları içermektedir. Ayrıca Re=3200 için akış çizgileri ve vorteksler incelendiğinde, Re=100'den itibaren görülen ana vorteks ve kare biçimindeki oyuğun sol ve sağ alt köşelerinde yer alan ikincil ve üçüncül vortekslere ek olarak dördüncül bir vorteksin gelişmeye başladığı açıkça görülebilmektedir.

Önceki bölümlerde görüldüğü üzere kafes/hücre yapısı daha da sıkılaştırıp zaman adımı sayısı artırılırsa sonuçların iyileştirilebilme olasılığı vardır. Ancak 1000'den sonraki görece yüksek Reynolds sayıları için bu işlemler çok daha fazla çözüm süresi ve işlem anlamına geleceğinden 3200,5000 ve 7500 için kullanılan ağ yapıları ve zaman adımı sayıları kabul edilebilir çıktılar verdiği sürece sonuçlar yeterli görülüp kayıt altına alınmıştır.

5.1.3.5 Re=5000

Re=5000 için 250x250 kafes/hücre yapısı, kapak hızı $u_o = 0,2$ birim ve kinematik viskozite v = 0.01 birim ve adım sayısı 300000 olmak üzere bir çözüm gerçekleştirilmiştir. Elde edilen sonuç Şekil 5.7'de görülmektedir:



Şekil 5.7: Re=5000 için akış çizgileri ve vorteksler

Merkezi vorteks'in koordinatları (x=0,5179 y=0,5378) şeklinde elde edilmiş olup, Ghia ve diğerlerinin 1982 tarihli sonuçlarıyla (x=0,5117 y=0,5352) x koordinatı için %1,2 y koordinatı için %0,49'luk hata yüzdeleriyle uyum içerisinde olduğu görülebilmektedir. Ayrıca artan Reynolds sayısıyla diğer vortekslerin ilerleyişine paralel olarak dördüncül vorteksin de gelişimini sürdürdüğü gözlenmektedir.

5.1.3.6 Re=7500

Oyuk akışı için son çalışma Re=7500 seviyesinde gerçekleştirilmiştir. 375x375 hücrelik ağ yapısı, kapak hızı uo=0,2 birim ve kinematik viskozite v = 0,01 birim olmak üzere 675000 adım sayısıyla elde edilen sonuç Şekil 5.8'de yer almaktadır:



Şekil 5.8: Re=7500 için akış çizgileri ve vorteksler

Sonuçlar incelendiğinde merkezi veya ana vorteksin koordinatlarının (x=0,5133 y=0,5319) şeklinde elde edildiği, bu sonuçların da Ghia ve diğerleri (x=0,5117 y=0,5322) ile sırasıyla %0,3 ve %0,06 yüzde hatalar ile uyum içerisinde olduğu görülmektedir. Akış çizgileri ve vortekslerin durumuna bakıldığında da sonucun Re=7500 için literatürdeki çalışmalarla paralellik arz ettiği ve üçüncül vorteksin altında yeni bir vorteksin daha oluştuğu anlaşılmaktadır. Merkezi vorteksin konumuna ilişkin elde edilen - literatüre en yakın - sonuçlar toplu olarak tek bir grafik halinde Şekil 5.9'da sunulmuştur:





5.1.4 Oyuk Akışı Problemine Dair Elde Edilen Diğer Sonuçlar

5.1.4.1 Hız Profilleri

Oyuk akışı problemi için literatürde yer alan bir diğer karakteristik sonuç çıktısı ise, boşluğun geometrik merkez noktasında farklı Reynolds sayıları için hız bileşenlerinin (*u* ve *v* hızları) sırasıyla dikey ve yatay yönlerdeki profilleridir. Çalışmanın yapıldığı Re=100, 400, 1000, 3200, 5000 ve 7500 sayıları için boşluğun geometrik merkezinde dikey ve yatay yönlerdeki normalize edilmiş hız profilleri (v/u_0 vs *x* ve u/u_0 vs *y*) çıkarılmış ve Ghia ve diğerlerinin 1982 tarihli sonuçlarıyla karşılaştırılmıştır.



Re 1000'e kadar geometrik merkezde v-hız profili

Şekil 5.10: Re=100,400 ve 1000 için geometrik merkezde v hız profilleri

Şekil 5.10'da da görüldüğü üzere nispeten düşük Reynolds sayıları olarak nitelendirebileceğimiz Re=100, 400 ve 1000 için geometrik merkezdeki *v* hız profilleri, Ghia ve diğerlerinin 1982 tarihli çalışmasındaki hız profilleriyle yakın bir uyum göstermektedir. Bu, LBM'nin düşük Reynolds sayılarında Navier-Stokes denklemlerini iyi temsil ettiği tezini destekleyen bir bulgudur.

Reynolds sayısı yükseltilirken Mach sayısının sabit tutulması amacıyla kapak hızının hep sabit tutulup yalnızca kinematik viskozitenin düşürüldüğünden daha önceki bölümde söz edilmişti. Re=1000 üzerindeki tüm Reynolds sayılarında (3200,5000 ve 7500) kinematik viskozite, gevşeme parametresinin kararlılığa ilişkin literatürde yer alan $0,6<\omega<1,9$ aralığının üst sınırı olan 1.9 civarında kalınabilmesi adına $\nu = 0,01$ birim olarak sabit tutulmuş, ancak her bir Reynolds sayısı için farklı sayısal ağ/hücre yapıları uygulanmıştır.

Daha önce de sözü edilen genel bir doğru olarak sıkı ağ yapısında sonuçların referansa daha yakın olması beklenilebilir, ancak burada Reynolds sayısı yükseldikçe literatür sonuçları ile LBM sonuçları arasındaki farkın açılmaya başladığı görülmektedir.

LBM için bu durumun sebebi olarak, kinematik viskozite sıfıra doğru gittiğinde nonlineer kararsızlığın (İng. *Non-Linear İnstability*) artması gösterilebilir [2;3]. Reynolds sayısı 1000 ve altında iken nispeten daha yüksek kinematik viskozite değerleri (100 için v = 0,2,400 için v = 0,05, 1000 için v = 0,02) kullanılmıştır. Re 1000 sonrasında ise v = 0,01 olarak sabit tutulmuştur.

Bu görüşü destekleyici deneysel gözlem olarak, Re=100 ve 1000 için kinematik viskozite hariç tüm parametreler sabit tutularak çözümler gerçekleştirilmiş ve elde edilen sonuçlardan kinematik viskozite azaldıkça elde edilen sonuçlarla literatür sonuçları arasındaki farkın açılmakta olduğu görülmüştür. Bu gelişmeye ilişkin tablo çizelge 5.8'de yer almaktadır:

| Re Sayısı | Merkezdeki U hızı | Mutlak Hata | Mach Sayısı | Hücre Sayısı | Adım Sayısı | Kinematik Viskozite |
|--------------|----------------------|----------------|----------------|-----------------|----------------|------------------------|
| 100 | -0,20891 | 0,00310 | 0,3464 | 15625 | 100000 | 0,25 |
| 1000 | -0,06884 | 0,00804 | 0,3464 | 15625 | 100000 | 0,025 |

Çizelge 5.8: Farklı kinematik viskozite değerleri için mutlak hata miktarları

Buradan hareketle kinematik viskozite azalmasının non-lineer/doğrusal olmayan kararsızlığı artırdığı öne sürülebilir. Ancak değişen bir diğer fiziksel parametre de Reynolds sayısı olmaktadır. Reynolds sayısı yükseldiğinde problemin fiziğinde değişimler olacağından yani kare biçimli oyuğun içerisinde gerçekleşen hareketler de farklılaşacağından mevcut hücresel ağ yapısının Reynolds sayısı yükseldikçe fiziksel olaylarla eşleşmede yetersiz kaldığı da düşünülebilir.





Şekil 5.11: Re=100, 400 ve 1000 için geometrik merkezde u hız profilleri

Şekil 5.11'de de düşük Reynolds sayıları diyebileceğimiz 100, 400 ve 1000 için geometrik merkezdeki *u* hız profillerinin Ghia ve diğerlerinin çalışmasında verilen sonuçlarla yakın uyum içerisinde oldukları görülmektedir.

Re 1000 sonrası geometrik merkezde v-hız profili

Reynolds sayısı 3200 ve üzerine ulaştığında, problemin fiziği gereği Reynolds sayısındaki büyük artışlara rağmen, bu Reynolds sayılarında hız profilleri birbirine çok yakın oluşmaktadır. Aynı şekilde önceki bölümlerde de yüksek Reynolds sayılarında merkezi vorteksin konumları arasındaki farklar incelenirse, değişim miktarlarının Reynolds sayıları arttıkça azaldığı görülebilecektir.



Şekil 5.12: Re=3200, 5000 ve 7500 için geometrik merkezde v hız profilleri

Şekil 5.12'de Re=3200, 5000 ve 7500 için sonuçların birbirine yakın olması ve grafiklerin üst üste binmesi dolayısıyla net olarak anlaşılamasa da veriler incelendiğinde Ghia 1982 tarihli sonuçlarla aradaki farkın düşük Reynolds sayılarına kıyasla daha fazla olduğu anlaşılmaktadır. Bu durumun olası sebeplerine bir önceki bölümde değinilmiştir.

Re 1000 sonrası geometrik merkezde u-hız profili

Aynı durum *u* hızının farklı Reynolds sayıları için dikey yöndeki (y-yönü) değişim profilleri incelendiğinde Şekil 5.13'de görülmektedir:





5.1.5 Lattice Boltzmann Uygulamalarında Mach Sayısı

Akışkanlar Mekaniği'nde Mach sayısı en genel haliyle *"bir akışkan içerisinden geçen hareket halindeki bir cismin hızının, cismin bulunduğu ortamdaki yerel ses hızına oranı"* [19] olarak tanımlanabilir. Lattice Boltzmann denkleminin teorik altyapısı anlatılırken mezoskobik ölçeğin makroskobik Navier-Stokes ölçeği ile ilişkilendirilme sürecinden bahsedilmiş ve bu ilişkinin makroskobik kinematik viskozite parametresinin Lattice Boltzmann ölçeğinde gevşeme zamanı (τ) denilen ve mezoskobik ölçekte denge dağılımının (İng. *Equilibrium Distribution*) gerçekleşmesi için geçen süreye tekabül eden parametreyle ilişkisi üzerinden kurulduğundan söz edilmişti. Bu ilişkinin matematiksel ifadesini tekrar hatırlamak gerekirse [3]:

$$v = \frac{\Delta x^2}{3\Delta t} (\tau - 0.5)$$
 (5.3)

Yönteme ilişkin Literatürde buradan Mach sayısına geçiş ise " ν " kinematik viskozite teriminin manipülasyonuyla aşağıdaki şekilde sağlanmaktadır:

$$Re = \frac{UL}{v}$$
 (5.4)

 ν kinematik viskozite, Reynolds sayısı cinsinden yazılıp her iki taraf "*UL*" terimine bölünmek suretiyle 5.3 denklemi düzenlenirse:

$$Ma = \frac{\Delta x}{L\sqrt{3}}(\omega - 0.5)Re \quad (5.5)$$

Mach sayısı, veya daha doğru bir ifadeyle "Lattice Mach Sayısı" bu şekilde elde edilir. Burada $L/\Delta x$ terimi, karakteristik uzunluk (*N*) yönündeki kafes noktası sayısını verir. Lattice Boltzmann Yönteminde iki kafes noktası arasındaki uzaklığı temsil eden Δx terimi birim uzunluk kabul edildiğinden, *L*=*N* olacaktır. Δx =1 olduğundan *N* aynı zamanda karakteristik uzunluk yönündeki kafes noktası sayısı anlamına gelmektedir. Re sayısı da 5.4 ifadesine uygun olarak açık şekilde yazılırsa, bu durumda Mach Sayısı [3]:

$$Ma = \frac{1}{\sqrt{3}}(\omega - 0.5)\frac{U}{v} \quad (5.6)$$

Olacaktır. Bu matematiksel dönüşümden, kullanılan kafes noktası sayısının Mach sayısını etkilemediği görülmektedir. Bu ifadede yer alan " τ " terimi de açık yazılırsa Mach sayısının en yalın ifadesi ortaya çıkacaktır:

$$Ma = \left(\sqrt{3}\right)U \quad (5.7)$$

Buradan da Mach sayısının yalnızca karakteristik hızdan etkilendiği açıkça görülmektedir.

Bu çalışmanın kapsamında Mach sayısının sonuçlara etkilerini tartışmak yer almadığından, tüm Reynolds sayıları için Mach sayısı, yani kapak hızı sabit tutulmuş ve kinematik viskozite değerinin değiştirilmesi suretiyle Reynolds sayıları yükseltilebilmiştir.

5.1.6 Reynolds 100 ve 1000 İçin Çözümün Yakınsaklığı

Ağ yapısının sonuçlar üzerine etkisinden ilk bölümde söz edilmişti. Bu bölümde farklı bir veri seti daha kullanılarak Reynolds 100 ve 1000 sayıları için artan kafes noktası/hücre sayısıyla hata oranlarının azalışı ortaya konmuştur. Re=100 için elde edilen sonuçlar çizelge 5.9'da yer almaktadır:

| Re=100 | Merkez Noktadaki U Hızı | Mutlak Hata | Mach Sayısı | Hücre Sayısı | Adım Sayısı | Gevşeme Parametresi |
|---------|-------------------------------|-------------|----------------|-----------------|----------------|------------------------|
| 10x10 | -0,25963 | 0,05382 | 0,3464 | 100 | 100000 | 1,79 |
| 25x25 | -0,22224 | 0,01643 | 0,3464 | 625 | 100000 | 1,54 |
| 50x50 | -0,21238 | 0,00657 | 0,3464 | 2500 | 100000 | 1,25 |
| 125x125 | -0,20891 | 0,00310 | 0,3464 | 15625 | 100000 | 0,8 |

Çizelge 5.9: Re=100 için farklı ağ yapılarıyla gerçekleştirilen çözümler

Bu veri setinde, boşluğun tam merkez noktasındaki u hızları incelenmiş, Ghia ve diğerlerinin 1982 tarihli sonuçları ile karşılaştırılmıştır.

Tablo incelendiğinde artan kafes noktası/hücre sayıları ile birlikte hata oranlarının düşmekte olduğu açıkça görülmektedir. Bu çalışmada sayısal ağ yapısının etkisi incelenmek istendiğinden yalnızca hücre/kafes noktası sayısı - ve buna bağlı olarak Reynolds sayısının sabit tutulabilmesi amacıyla – kinematik viskozite değerleri değiştirilmiştir. Buna bağlı olarak gevşeme parametreleri de belirli bir aralıkta değişmiştir. Gevşeme parametreleri incelenirse, tüm çözümlerin $0,6<\omega<1,9$ aralığında yapıldığı görülebilir.

Re=1000 için değişen ağ yapısıyla elde edilen sonuçlar çizelge 5.10'da yer almaktadır:

65

| Re=1000 | Merkez Noktadaki U Hızı | Mutlak Hata | Mach Sayısı | Hücre Sayısı | Adım Sayısı | Gevşeme Parametresi |
|---------|-------------------------------|----------------|----------------|-----------------|----------------|------------------------|
| 50x50 | -0,07351 | 0,01271 | 0,3464 | 2500 | 100000 | 1,89 |
| 100x100 | -0,06605 | 0,00525 | 0,3464 | 10000 | 100000 | 1,79 |
| 200x200 | -0,06390 | 0,00310 | 0,3464 | 40000 | 100000 | 1,61 |

Çizelge 5.10: Re=1000 için farklı ağ yapılarıyla gerçekleştirilen çözümler

Şekil 5.14'te yer alan grafikte de Mach sayısı sabit ve gevşeme parametresi $0,6 < \omega < 1,9$ olmak üzere Re 100 ve Re 1000 için artan hücre sayılarıyla azalan mutlak hata miktarları görülebilmektedir:





Tüm Reynolds sayıları için mutlak hata miktarları ve tüm çözüm parametreleri tek bir tablo halinde çizelge 5.11'de yer almaktadır:

| Reynolds Sayısı | Merkez Noktadaki U Hızı | Mutlak Hata | Mach Sayısı | Hücre Sayısı | Adım Sayısı | Gevşeme Parametresi |
|--------------------|-------------------------------|-------------|----------------|-----------------|----------------|------------------------|
| 100 | -0,20891 | 0,00310 | 0,3464 | 15625 | 100000 | 0,8 |
| 400 | -0,11662 | 0,00185 | 0,3464 | 10000 | 100000 | 1,54 |
| 1000 | -0,06390 | 0,00310 | 0,3464 | 40000 | 100000 | 1,61 |
| 3200 | -0,04238 | 0,00034 | 0,3464 | 25600 | 200000 | 1,89 |
| 5000 | -0,03465 | 0,00426 | 0,3464 | 62500 | 300000 | 1,89 |
| 7500 | -0,03155 | 0,00645 | 0,3464 | 140625 | 675000 | 1,89 |

Çizelge 5.11: Tüm Reynolds sayıları için çözüm parametreleri

Lattice Boltzmann yönteminde çözümün yakınsaklık derecesini (İng. *Order of Convergence*) belirlemek için literatürde önerilmiş bir formülasyon kullanılmıştır [24]. İlgili formülasyon aşağıda yer almaktadır:

$$n \sim \frac{\log\left[(\sum |\phi_{4h} - \phi_{2h}|/N)/(\sum |\phi_{2h} - \phi_{h}|/N)\right]}{\log(2)} \quad (5.8)$$

Bu denklemde Φ hesaplamada kullanılan değişkeni, *N* ise hesaplama yapılan nokta sayısını ifade etmektedir.

Bu formülasyonun kullanılabilmesi için her bir çözümde hücre sayılarının 2 kat artırılmış olması gerekmektedir. Dolayısıyla h, 2h ve 4h indisi sırasıyla en kabadan en inceye hücresel ağ yapılarını temsil etmektedir. Örneğin Φ_{4h} dediğimizde ilk çözümün yapıldığı hücre sayısına göre 4 kat daha fazla hücre içeren ağ/kafes yapısından alınmış bir değişken kastedilmektedir.

Oyuk akışı için yakınsaklık derecesi hesaplanırken oyuğun geometrik merkez noktasındaki u hızı kullanıldığından, yani tek bir nokta kullanıldığından N = 1 olacaktır. Buna göre Re=1000 için farklı ağ yapılarında geometrik merkezdeki u hızları kullanılarak yakınsaklık derecesi hesaplanırsa:

$$n \sim \frac{\log\left[(\sum |\phi_{4h} - \phi_{2h}|/N)/(\sum |\phi_{2h} - \phi_{h}|/N)\right]}{\log(2)} = \frac{\log\left[|-0.06390 + 0.06605|/|-0.06605 + 0.07351|\right]}{\log(2)} = 1.79 (5.9)$$

Lattice Boltzmann yöntemi, teorik bölümde de anlatıldığı üzere ikinci dereceden yakınsaklığa sahiptir (Bkz. Chapman-Enskog analizi).

Bunun yanı sıra uygulanan sınır koşullarının da toplam yakınsaklık derecesini etkilediği bir gerçektir. Literatürde yer alan çalışmalarda ve konuya ilişkin kitaplarda [3;25;26] yansıma sınır koşulunun birinci dereceden yakınsaklığa sahip olduğundan söz edilmektedir. Lattice Boltzmann yönteminin yakınsaklık derecesini ve etkinliğini analiz eden kapsamlı bir makalede [23] yansıma sınır koşulunun kullanıldığı çözümlerde yakınsaklık derecesinin 1 ile 2 arasında olduğu söylenmektedir. Mevcut çalışma kapsamında elde edilen sonuçlar da (1.79) bu savı doğrular niteliktedir.

5.2 Kanal Akışı

Bu bölümde her iki duvarı/yüzeyi durağan bir kanala belirli bir sabit hızla giriş yapan akışkanın oluşturduğu akış farklı Reynolds sayıları için sıkıştırılamaz Lattice Boltzmann modeliyle çözümlenmiş ve elde edilen çıktılar analitik sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Şekil 5.15'te kanal akışının şematik gösterimi yer almaktadır. Kanalın ilk bölümü giriş uzunluğu, ikinci bölüm ise tam gelişmiş akış bölümüdür. Kanala sabit bir hızla giren akışkan, belirli bir giriş uzunluğundan sonra parabolik bir hız profiline ulaşır:



Şekil 5.15: Sabit hızlı kanal akışının şematik gelişimi (alıntıdır [20])

5.2.1 Analitik çözüm

Kanal akışı veya sabit giriş hızlı Poiseuille akışı için analitik formülasyonlar aşağıda verildiği gibidir:

U akışkanın kanala giriş hızı olmak üzere;

Maksimum akış hızı:

$$U_{max} = \frac{3}{2}U$$
 (5.10)

Herhangi bir noktadaki akış hızı ise kanal yarıçapı (R) ve akış yarıçapı (r) cinsinden aşağıdaki şekilde hesaplanır:

$$U(r) = U_{max} [1 - \left(\frac{r}{R}\right)^2]$$
 (5.11)

Kanal akışı için bir diğer parametre ise kanal giriş uzunluğu (İng. *Entrance Length*) dur. Giriş uzunluğu akışın tam gelişmiş hale gelebilmesi için gerekli minimum kanal boyunu ifade eder. Laminer kanal akışı için kanal giriş uzunluğu yaklaşık olarak:

şeklinde hesaplanır.

5.2.2 Sınır Koşulları

Üniform giriş hızı verilirken hareketli sınırlar için önerilen [27] sınır koşulu (İng. *Known Velocity Boundary Condition/Zhou-He Boundary Condition*) uygulanmıştır. Kanalın duvarlarında ise oyuk probleminde olduğu gibi yine yansıma yöntemiyle kaymazlık sınır koşulu söz konusudur. Zhou-He sınır koşulu ile kaymazlık koşulu birlikte uygulanmakta olduğundan, duvarlarda hız değerleri sıfır olarak alınmıştır. Kanalın çıkışında da yine hareketli sınır koşulları geçerlidir.

5.2.3 Girdi Parametrelerinin Belirlenmesi

Kanal akışı için çözümler esasen Reynolds 100, 400 ve 800 için gerçekleştirilmiştir. Bu Reynolds sayıları için sonuçları etkileyecek parametrelerin etkileri incelenmiş, söz konusu parametreler optimize edilmeye çalışılmış ve kanal akışının analitik çözümlerine en yakın sonuçlar karşılaştırmalı olarak sunulmuştur.

5.2.3.1 Zaman Adımı

Önceki bölümde de tartışıldığı üzere zaman adımı sayıları çözümün hassasiyet derecesiyle yakından ilişkilidir. Öyle ki genel bir doğru olarak aynı hücresel ağ yapısı içerisinde zaman adımı sayıları arttıkça sonuçların daha da iyileşeceği varsayılır.

Burada da diğer tüm parametreler sabit ve Reynolds sayısı 400 iken farklı zaman adımlarıyla çözümler gerçekleştirilmiş ve sonuçların değişimi gözlemlenmiştir. Aynı çalışma Reynolds sayısı 800 iken de yapılmıştır.

Sonuçların karşılaştırılacağı referans çıktı olarak, akış tam gelişmiş hale geldikten sonra kanalın çıkışında verdiği parabolik hız profili ele alınmıştır.

Parabolik hız profilinin maksimum noktası olan eksenel hız (İng. *Centerline Velocity*) ve çıkıştaki hız profillerinin tamamı analitik sonuçlarla karşılaştırılmıştır.

Kanal akışı için Reynolds sayısı aşağıdaki şekilde hesaplanır:

$$Re = \frac{U_{giris} D}{v} \quad (5.13)$$

 U_{giris} akışkanın kanala giriş hızı olmak üzere, ν kinematik viskozite değerini, D kanal çapını ve Lattice-Boltzmann yönteminde kanal kesiti yönündeki kafes noktası/hücre sayısını ($\Delta x = 1$ olduğu için D = N) temsil etmektedir. Buna göre LBM ile kanal akışı için Reynolds sayısı aşağıdaki gibi hesaplanmıştır:

$$u_{giris} = 0.2 \ birim$$

 $N = 77$
 $v = 0.0385$
 $Re = \frac{77*0.2}{0.0385} = 400$ (5.14)

Bu fiziksel parametrelere göre elde edilen hesaplanan dolaylı parametreler de çizelge 5.12'de yer almaktadır.

Çizelge 5.12: Re=400 zaman adımı çalışması parametreleri

| Reynolds | Mach | Hidrodinamik Giriş | Hücre | Gevşeme |
|----------|--------|-----------------------------|---------|-------------|
| Sayısı | Sayısı | Uzunluğu(<i>Elaminer</i>) | Sayısı | Parametresi |
| 400 | 0,3464 | ~ 1550 br. | 77x1850 | 1,625 |

Söz konusu parametreler çerçevesinde zaman adımları Re=400 için 10000 ile 50000 aralığında değiştirilmiş ve çizelge 5.13'teki sonuçlar elde edilmiştir.

Çizelge 5.13: Re=400 artan zaman adımlarına karşılık hata miktarlarının değişimi

| Zaman Adımı | Eksenel Hız (LBM) | Eksenel Hız (Analitik) | Mutlak Hata | Yüzdesel Hata |
|----------------|----------------------|---------------------------|----------------|------------------|
| 10000 | 0,11705 | 0,3 | 0,18295 | 60,98% |
| 20000 | 0,20682 | 0,3 | 0,09318 | 31,06% |
| 40000 | 0,28592 | 0,3 | 0,01408 | 4,69% |
| 50000 | 0,30067 | 0,3 | 0,00067 | 0,22% |

Lattice Boltzmann çözümünden elde edilen eksenel hız sonuçlarının zaman adımlarının artırılmasıyla iyileştiği ve 50000 adım sayısı için hata yüzdesinin %1'in altına düştüğü görülmektedir.

Çizelge 5.13'e ilişkin grafiksel gösterim de aşağıda yer almaktadır:



Şekil 5.16: Re=400 için artan zaman adımlarına karşı eksenel hızda yüzdesel hatanın değişimi

Reynolds 400 için LBM ile analitik çözümün kanal çıkışındaki hız profilleri de karşılaştırılmıştır.



Şekil 5.17: Re=400 Kanal çıkışındaki hız profilleri

Grafik incelendiğinde çıkıştaki hız profillerinin neredeyse tamamen örtüştüğü görülebilmektedir. Buradan hareketle de LBM'nin sıkıştırılamaz ve laminer bölgedeki akışları kabul edilebilir hassasiyette temsil ettiğini bir kez daha söylemek mümkün olacaktır.

Hız profilleri karşılaştırılırken ayrıca istatistikte "Karekök Ortalama" (İng. *Root Mean Square – kısaca RMS*) olarak adlandırılan yöntem de kullanılmıştır. RMS yöntemini kısaca izah etmek gerekirse, n sayıdaki değerin RMS değeri aşağıdaki biçimde hesaplanır;

Örneğin:

$$x = \{x_1, x_2, x_3 \dots x_n\} \quad (5.15)$$

Şeklinde bir dizi değer mevcut olsun. Bu dizinin RMS değeri:

$$x_{rms} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i^2} = \sqrt{\frac{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + \dots + x_n^2}{n}} \quad (5.16)$$

olacaktır.

Kanaldan çıkıştaki analitik ve LBM hız profilleri arasındaki hataların zaman adımlarına göre değişimleri hesaplanmış (RMS olarak) ve çizelge 5.14'e aktarılmıştır:

Çizelge 5.14: Re=400 artan zaman adımlarına karşılık RMS hataların değişimi

| Zaman Adımı | RMS Hatalar |
|-------------|-------------|
| 10000 | 0,14379 |
| 20000 | 0,07144 |
| 40000 | 0,01285 |
| 50000 | 0,00321 |

Bu kısımda son olarak Re=400'de 50000 zaman adımıyla elde edilen sonuçlar için kanal içerisindeki akışın gelişim grafiği şekil 5.18'de sunulmaktadır:





Kanal akışı için LBM ile yapılan çözüm sonucunda akışın gelişim grafiği incelendiğinde, analitik çözüme oldukça yakın sonuçlar alındığı anlaşılmaktadır.

Zaman adımlarını değiştirmenin sonuçları nasıl etkileyeceğine dair Reynolds sayısı 800 iken de bir çalışma yapılmıştır. Bu çalışmanın parametreleri çizelge 5.15'te yer almaktadır:

Çizelge 5.15: Re=800 zaman adımı çalışması parametreleri

| Reynolds | Mach | Hidrodinamik Giriş | Hücre | Gevşeme | |
|----------|--------|-----------------------------|---------|-------------|--|
| Sayısı | Sayısı | Uzunluğu(<i>Elaminer</i>) | Sayısı | Parametresi | |
| 800 | 0,3464 | ~ 3100 br. | 77x4000 | 1,793 | |

Bu parametrelerle yapılan çözümde zaman adımlarının sayısı 20000 ile 125000 aralığında değiştirilmiş ve çizelge 5.16'daki sonuçlar elde edilmiştir:

Çizelge 5.16: Re=800 artan zaman adımlarına karşılık hataların değişimi

| Zaman Adımı | Eksenel Hız (LBM) | Eksenel Hız (Analitik) | Mutlak Hata | Yüzdesel Hata |
|----------------|----------------------|---------------------------|----------------|------------------|
| 20000 | 0,08358 | 0,3 | 0,21642 | 72,14% |
| 50000 | 0,11901 | 0,3 | 0,18099 | 60,33% |
| 100000 | 0,28967 | 0,3 | 0,01033 | 3,44% |
| 125000 | 0,30475 | 0,3 | 0,00475 | 1,58% |

Benzer şekilde zaman adımı sayısı artırıldıkça sonuçların iyileştiği ve 125000 adım için yaklaşık %1,6'lık bir hatayla analitik sonuca yaklaşıldığı görülmektedir. Grafiksel gösterim şekil 5.19'da yer almaktadır:



Şekil 5.19: Re=800 için artan zaman adımlarına karşı eksenel hızda yüzdesel hatanın değişimi

Reynolds 800 için kanal çıkışındaki LBM ve analitik hız profilleri de aşağıda karşılaştırılmaktadır:



Şekil 5.20: Re=800 Kanal çıkışındaki hız profilleri

Grafik incelendiğinde LBM ile analitik çözümün Re=400 kadar olmasa da yüksek bir hassasiyet oranında örtüştüğü söylenebilir. Mach sayısı sabit olduğu halde Reynolds sayısı yükseldiğinde çözümün hassasiyetinin neden azaldığı sorusuna ise oyuk akışında olduğu gibi kinematik viskozitenin azalmasının kararsızlığı artırması ve artan Reynolds sayısının kanal içindeki fiziksel olayları değiştirmesi gerekçe gösterilebilir.

Çizelge 5.17'de artan zaman adımlarına karşı çıkıştaki hız profilinde RMS hataların değişimi sunulmuştur:

| Zaman Adımı | RMS Hatalar |
|----------------|----------------|
| 20000 | 0,01661 |
| 50000 | 0,01451 |
| 100000 | 0,00114 |
| 125000 | 0,00044 |

Çizelge 5.17: Re=800 artan zaman adımlarına karşılık RMS hataların değişimi

5.2.3.2 Ağ Yapısı ve Çözümün Yakınsaklığı

Çözümün hassasiyetini etkileyen bir diğer parametre olan "hücresel ağ yapısı"nın etkisi ise Reynolds sayısı 100 iken diğer tüm parametreler sabit tutularak kanal kesiti ve kanal boyunca hücre sayıları ve -Re sayısını sabit tutmak amacıyla-kinematik viskozite değerlerinin değiştirilmesi suretiyle incelenmiştir.

Aşağıdaki çizelgede gerçekleştirilen çalışmalara dair tüm parametreler yer almaktadır:

Sabit parametreler:

 $u = 0,05 \ birim$

Re = 100

 $Zaman ad_{1}m_{1} = 40000$

Değiştirilen parametreler ve değişen hata miktarları:

| | _ | | | | | | | |
|---|-----------------|--------------|-----------|-----------|------------|----------|-------|-----------|
| 1 | <u> 10-</u> | Do-100 orto | n hüara a | ovulorino | Loroi / | daăiaan | hoto | miltorior |
| L | JZEIDE D TO | Re = 100 ana | n nucie s | aviiarina | Karsi (| Decisen | naia. | пиканан |
| | 2120190 0. I O. | | | aynanna | i i Qi i V | aogiçoii | nata | minitian |

| Hücre Sayısı (DxL) | Kinematik Viskozite | Gevşeme Parametresi | Mutlak Hata (Eksenel Hız) | Yüzdesel Hata (Eksenel Hız) | RMS Hata (Çıkıştaki Hız Profili) |
|--------------------------|------------------------|------------------------|------------------------------|--------------------------------------|--|
| 8250 | | | | | |
| (33x250) | 0,0165 | 1,820 | 0,00130 | %1,74 | 0,00031 |
| 22000 | | | | | |
| (55x400) | 0,0275 | 1,717 | 0,00115 | %1,54 | 0,00015 |
| 38500 | | | | | |
| (77x500) | 0,0385 | 1,625 | 0,00114 | %1,52 | 0,00011 |
| 69300 | | | | | |
| (99x700) | 0,0495 | 1,542 | 0,00026 | %0,34 | 0,00006 |
| 96800 | | | | | |
| (121x800) | 0,0605 | 1,467 | 0,00004 | %0,06 | 0,00004 |

Ayrıca Re=100 için hücre sayıları ikişer kat artırılarak 5.9 numaralı denkleme göre çözümün hassasiyet derecesi de hesaplanmıştır. Hücre sayılarının artışına göre eksenel hızların değişimi çizelge 5.19'da yer almaktadır:

Çizelge 5.19: Artan hücre sayılarına göre eksenel hızların değişimi

| Hücre Sayısı | Eksenel Hız |
|--------------|-------------|
| 33x200 | 0,07630 |
| 67x400 | 0,07687 |
| 135x800 | 0,07521 |

Elde edilen sonuçlar çerçevesinde bir önceki bölümde verilen formülasyona göre çözümün yakınsaklık derecesi aşağıda hesaplanmıştır:

$$n \sim \frac{\log\left[(\sum |\phi_{4h} - \phi_{2h}|/N)/(\sum |\phi_{2h} - \phi_{h}|/N)\right]}{\log\left(2\right)} = \frac{\log\left[|0,075211 - 0,076874|/|0,076874 - 0,076304|\right]}{\log\left(2\right)} = 1.55$$
(5.17)

Bir önceki bölümde de belirtildiği üzere Lattice Boltzmann yöntemi teorik olarak ikinci dereceden yakınsaklığa sahip olsa da, kullanılan sınır koşulları toplam yakınsaklık derecesini önemli ölçüde etkilemektedir. Kanal akışı veya bir diğer deyişle Poiseuille akışı gibi basit akışlarda sınır koşulu olarak yansıma gibi birinci dereceden yakınsaklığa sahip sınır koşulları kullanıldığında toplam yakınsaklık derecesinin düştüğü yapılan bazı çalışmalarla ortaya konmuştur [27].

Bu durumun sebebini açıklamak üzere Lai,Lin ve Huang tarafından yayımlanmış 2010 tarihli makalede, sınır koşullarının Poiseuille akışı gibi basit akışlarda toplam yakınsaklığı daha fazla etkilediğinden söz edilmektedir. Buna gerekçe olarak da genel denklemde doğrusal olmayan taşınım teriminin yok sayılması ve yalnızca moleküler difüzyon teriminin mevcut olması ileri sürülmektedir. Bu sayede sınırlardaki yakınsaklık derecesinin tüm geometriyi etkileyebildiği düşünülmüştür [23].

Sonuç olarak kanal akışında yapılan yakınsaklık derecesi hesabında da Lattice Boltzmann yöntemi için yansıma koşulu kullanıldığında yakınsaklık derecesinin 1 ile 2 arasında bir değer aldığı (~1.55) görülmüştür.

5.3 Basamak Üzerinden Kanal Akışı

Akışkanlar mekaniğinde pek çok akışta akış ayrılması ve yeniden sınır tabaka oluşumu gibi olaylarla karşılaşılır. Bu tip akışlara tipik örnekler olarak ısı eşanjörlerinde ve kanallarda gerçekleşen akışlar verilebilir. Bu tür problemler arasında basamak üzerinden kanal akışı problemi (İng. *Backward Facing Step Flow*) önceki yıllarda pek çok çalışmaya konu olmuştur (Denham&Patrick 1974, Etheridge&Kemp 1978 gibi) ve geometrisinin basitliğine rağmen Reynolds sayısı, kanal yüksekliği ve basamak yüksekliği gibi parametrelere bağlı olarak içerisinde akış ayrılması, yeniden sınır tabaka oluşumu ve birden çok re-sirkülasyon bölgesinin oluşumu gibi zengin bir akış fiziği ortamı barındırmasıyla ön plana çıkmaktadır [21;22].



Şekil 5.21: Basamak üzerinden kanal akışının şematik gösterimi (alıntıdır [21])

Basamak üzerinden kanal akışı da bir tür kanal akışı olduğundan, önceki bölümde elde edilen parametreler doğrultusunda yeniden bir girdi parametresi belirleme çalışması yapılmaksızın Reynolds 200 ve 600 için iki çözüm gerçekleştirilmiş ve elde edilen sonuçlar Armaly ve diğerlerinin 1983 tarihli deneysel çalışması [22] ve Ercan Ertürk tarafından yapılan 2007 tarihli 2 boyutlu sonlu farklar Navier-Stokes çözümünü içeren çalışmadaki [21] sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Sınır koşulları için önceki bölüm olan kanal akışında belirlenmiş sınır koşulları değiştirilmemiştir.

Basamak üzerinden kanal akışı probleminde kanal akışından farklı olarak Literatürde verilen bilgiler doğrultusunda kanala giren akışkanın hız profili sabit değil parabolik olacak şekilde akış başlatılmıştır. Akışın gelişimi şematik olarak aşağıda yer almaktadır:



Şekil 5.22: Basamak üzerinden kanal akışının gelişimi (alıntıdır [21])

Çözümün gerçekleştirildiği Reynolds sayılarından Re=200 için yalnızca basamağın yanındaki genişliği (X1) olan re-sirkülasyon bölgesi görülmekte, Re=600 için ise genişliği (X3-X2) şeklinde hesaplanan ikinci bir re-sirkülasyon bölgesi daha ortaya çıkmaktadır.

Bu re-sirkülasyon bölgelerinin genişliği problemin fiziğinde genişlik oranı (İng. *Expansion Ratio*) denilen ve toplam kanal yüksekliğinin (H) basamak yüksekliğine (h) oranı şeklinde tanımlanan parametreye göre değişiklik arz etmektedir.

5.3.1 Sonuçlar

5.3.1.1 Re=200

Basamak üzerinden kanal akışı için Reynolds sayısı kanal akışıyla temelde aynı şekilde hesaplanır. Farklı olan nokta Reynolds sayısının hesaplanmasında Armaly ve diğerlerinin 1983 tarihli çalışmasında [22] belirttikleri üzere kanal giriş çapının iki katının alınmasıdır.

Örneğin Re=200 için:

$$Ugiris = 0,1 \ birim$$

$$v = 0,02 \ birim$$

$$D = H - h = 40 - 20 = 20 \ birim$$

$$Re = \frac{Umax \ 2(H-h)}{v} = \frac{0,1 \ 40}{0,02} = 200 \quad (5.15)$$

Re=200 için tüm çözüm parametreleri çizelge 5.20'de sunulmaktadır:

Çizelge 5.20: Re=200 basamak üzerinden kanal akışı için çözüm parametreleri

| Reynolds | Mach | Genişlik oranı (H/h) | Zaman | Hücre | Gevşeme |
|----------|--------|----------------------|-------|---------|-------------|
| Sayısı | Sayısı | | Adımı | Sayısı | Parametresi |
| 200 | 0,1732 | 2.0 | 50000 | 40x6400 | 1,786 |

Ertürk 2007 tarihli Navier-Stokes sonlu farklar çözümünde [21] 2.0 genişlik oranı için Reynolds sayısı 200 iken ana sirkülasyon bölgesi olarak da tanımlanan basamağın hemen yanındaki sirkülasyon bölgesinin genişliğini tayin eden X1 değerini basamak yüksekliğiyle normalize ederek sunmuştur. Ana sirkülasyon bölgesi için LBM ve Ertürk'ün sonuçları karşılaştırmalı olarak çizelge 5.21'de yer almaktadır:

Çizelge 5.21: Re=200 ana sirkülasyon bölgesinin genişliği

| Reynolds Sayısı | Genişlik Oranı (H/h) | LBM X1 (X/h) | Ertürk X1 (X/h) | Yüzdesel Fark (X1) |
|--------------------|-------------------------|--------------|-----------------|-----------------------|
| 200 | 2.0 | 5,1 | 4,982 | % 2,37 |

Sonuçta Lattice Boltzmann modelinin hücresel ağ yapısı çok sıkı olmasa ve zaman adımları daha da sıklaştırılmasa dahi sıkıştırılamaz Navier-Stokes akış modelini gayet kabul edilebilir hatalarla temsil ettiği bir kez daha görülmektedir. Ancak hücre sayısının bu düzeydeyken bile (toplam 256000 hücre) fazlalığı dolayısıyla çözüm süreleri önceki problemlere göre nispeten uzun olmaktadır. Zaman problemi ve önceki bölümlerde ilgili çalışmaların yapılmış olması dolayısıyla bu bölümde hücre/ağ/kafes yapısının etkileriyle ilgili detaylı bir incelemeye girilmemiştir.

Diğer makalelerde de belirtildiği üzere [18;23] tek nokta sistemiyle çalışan çözücüler için LBM yöntemi halen zaman açısından ekonomik durumda değildir. Bu problemi aşmak için önceki bölümlerde de değinildiği üzere işlemci paralelizasyonu önerilmektedir.

Mevcut ağ yapısı ve diğer parametreler sabit tutularak zaman adımları 2 ve 4 katına çıkarılmış ancak X1 genişliğinin değişmediği anlaşılmıştır. Sonuçlar çizelge 5.22'de yer almaktadır:

Çizelge 5.22: Re=200 artan zaman adımları için ana sirkülasyon bölgesinin

genişliği

| Zaman Adımı | X1(X/h) |
|-------------|---------|
| 50000 | 5,1 |
| 100000 | 5,1 |
| 200000 | 5,1 |

Reynolds sayısı 200 iken kanal içerisinde akış çizgileri (İng. *Streamlines*) Şekil 5.23'teki gibi oluşmaktadır:



Şekil 5.23: Re=200 için kanal içerisindeki akış çizgileri

Şekilden de anlaşılacağı üzere Re=200 için yalnızca X1 genişliği 5,1 olarak verilen ana sirkülasyon bölgesinden söz edilebilmektedir. Bu durum da Armaly ve Ertürk tarafından verilen sonuçlarla paralellik arz etmektedir.

5.3.1.2 Re=600

Mach sayısını değiştirmemek ve non-lineer/doğrusal olmayan kararsızlık durumunu etkilememek için giriş hızı ve kinematik viskozite sabit tutularak sadece kanal giriş çapı 3 katına (60 birim) çıkarılmış ve bu suretle Reynolds sayısı 600'e yükseltilmiştir.

Bu kısımda alınan sonuçlara referans olarak Armaly ve Ertürk sonuçları kullanılmıştır. Armaly ve diğerlerinin yaptığı çalışmada deneysel düzenek kurulurken kanal giriş çapı 5.2 birim, toplam kanal çapı ise 10.1 birim olarak seçildiğinden genişlik oranı (H/h) yaklaşık 1.942 olmaktadır. Lattice Boltzmann çözümünde hücresel ağ yapısı kurulurken tamsayılar dışında hücre sayısı kullanmak mümkün olmadığından, 1.942 genişlik oranını sağlamak mümkün olamamıştır. Dolayısıyla Armaly'den alınan sonuçlar referans olarak kullanılırken bu durum * simgesiyle vurgulanmıştır.

Re=600 için kullanılan çözüm parametreleri çizelge 5.23'te yer almaktadır:

Çizelge 5.23: Re=600 için çözüm parametreleri

| Reynolds | Mach | Genişlik oranı (H/h) | Zaman | Hücre | Gevşeme |
|----------|--------|----------------------|--------|-----------|-------------|
| Sayısı | Sayısı | | Adımı | Sayısı | Parametresi |
| 600 | 0,1732 | 2.0 | 200000 | 120x19200 | 1,786 |

Reynolds 600 için ana sirkülasyon bölgesinden başka bir sirkülasyon bölgesi daha mevcuttur. Ana sirkülasyon bölgesinin genişliği veya bir diğer deyişle ilk sınır tabaka oluşum noktası için karşılaştırmalı sonuçlar çizelge 5.24'te yer almaktadır:

Çizelge 5.24: Re=600 için ana sirkülasyon bölgesinin genişliği

| Çalışmalar | Genişlik oranı (H/h) | X1 |
|------------|----------------------|--------|
| Mevcut | | |
| Çalışma | 2.0 | 10,07 |
| Ertürk | 2.0 | 10,349 |
| Armaly | 1.942* | 11,4 |

Çizelge incelendiğinde deneysel ve farklı genişlik oranına sahip bir çalışma olan Armaly [22] ayrı tutulduğunda Ertürk'ün Navier-Stokes sonlu farklar çözümü ile mevcut LBM çalışması arasında yalnızca %2,7 civarında bir sapma olduğu görülmektedir.

İkinci ve üçüncü sınır tabaka oluşum noktaları yani X2 ve X3 için karşılaştırmalı sonuçlar ise çizelge 5.25'de yer almaktadır:

| Çalışmalar | Genişlik oranı (H/h) | X2 | X3 | Yüzdesel Fark(X2) | Yüzdesel Fark(X3) |
|------------|-------------------------|-------|--------|----------------------|----------------------|
| Mevcut | | | | | |
| Çalışma | 2.0 | 7,95 | 16,28 | %6,32 | %2,74 |
| Ertürk | 2.0 | 8,486 | 15,833 | | |

Çizelge 5.25: Re=600 için X2 ve X3 sınır tabaka oluşum noktaları

Navier-Stokes sonlu farklar modeline göre çözüm yapan Ertürk'ün sonuçları ile LBM-BB (Kısaltma: *Lattice Boltzmann Bounce Back*) çözücüsü içeren mevcut çalışmanın sonuçları arasında genel olarak %2 ile %6 arasında değişen sapmalar görülmektedir. Önceki bölümlerde detaylı olarak değinildiği üzere, hücresel ağ yapıları ve zaman adımlarında yapılacak artışlarla, Mach sayısının daha da düşürülmesi ve kararsızlık faktörlerinin azaltılmasıyla sonuçların daha da iyileştirilebileceği varsayılabilir.

Reynolds sayısı 600 iken kanal içerisindeki akış çizgileri aşağıdaki şekilde oluşmaktadır:



Şekil 5.24: Re=600 için kanal içerisindeki akış çizgileri

Re=600 için ana sirkülasyon bölgesinin dışında oluşan ikinci sirkülasyon bölgesi de açıkça görülebilmektedir. Basamak üzerinden kanal akışına ilişkin literatürde de Re sayısı 600 için yalnızca bu iki sirkülasyon bölgesinden söz edilmektedir.

Bu bölümde sunulacak son görsel Reynolds sayısı 600 için çözüm tamamlandığında alınmış u-hızı görüntüsüdür. Bu şekil incelendiğinde de ana sirkülasyon bölgesi ve ikinci sirkülasyon bölgesi görülebilmektedir:



Şekil 5.25: Re=600 için u-hızı görüntüsü

6. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu tez kapsamında Lattice Boltzmann yönteminin Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği'ndeki konumu ele alınmış, teorik altyapısı irdelenmiş ve 3 temel problem özelinde sayısal uygulamaları gerçekleştirilmiştir. Çözümlerde Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) modeli adı verilen çarpışma operatörü kullanılmıştır.

Sonuç olarak Mach sayısı düşük tutulduğunda sıkıştırılamaz akışlar için laminer bölgede Lattice Boltzmann yönteminin Navier-Stokes denklemlerini yeterli hassasiyette temsil ettiği görülmüştür. Ayrıca sayısal yöntemlerin genel bir doğrusu olarak optimum hücre/kafes noktası sayısı ve zaman adımı sayısına kadar daha fazla kafes noktası ve zaman adımıyla sonuçların iyileşmeye devam ettiği gözlemlenmiştir. ω gevşeme parametresi için literatürde önerilen 0,6< ω <1,9 aralığı dışında geçerli sonuçlar elde edilememiştir. LBM için bu durumun sebebi olarak, kinematik viskozite sıfıra doğru gittiğinde kararsızlığın (İng. *İnstability*) artması gösterilebilir. Ancak gevşeme parametresi, dolayısıyla kinematik viskozite değiştiğinde diğer tüm parametreler sabit tutulursa Reynolds sayısı da kaçınılmaz olarak değişmektedir. Reynolds sayısı yükseldiğinde problemin fiziğinde değişimler olacağından mevcut hücresel ağ yapılarının artan Reynolds sayılarında fiziksel olaylarla eşleşmede yetersiz kaldığı da (örneğin değişen akış fiziğine bağlı olarak oluşan yeni bir vorteksin mevcut ağ çözünürlüğünde temsil edilememesi gibi) düşünülebilir.

Lattice Boltzmann yöntemi teorik olarak ikinci dereceden yakınsaklığa sahip olsa da kullanılan sınır koşullarının çözümün toplam yakınsaklık derecesini etkilediği görülmüştür. Örneğin yansıma gibi birinci dereceden yakınsaklığa sahip bir sınır koşuluyla çözümün toplam yakınsaklık derecesi düşmekte ve 1 ila 2 aralığında bir değer elde edilmektedir.

Sayısal çözümlerin gerçekleştirildiği bilgisayarda olduğu gibi tek nokta sistemiyle çalışan işlemciler için hücre sayıları arttığında çözüm süreleri önemli ölçüde uzamaktadır. Lattice Boltzmann yönteminin esasen işlemci paralelizasyonuna uygun olduğu düşünülürse, bu sonuç makul karşılanabilir.

Yöntemin getirdiği belirli kısıtlamalar söz konusudur. Örneğin düşük Mach sayısı yaklaşımı dolayısıyla hangi akış problemi olursa olsun belirli bir kafes (lattice) giriş hızı değerinin üzerine çıkılamamaktadır.

Bunun yanı sıra kararsızlıkla ilgili kısıtlama dolayısıyla da kinematik viskozite değeri için bir alt sınır mevcuttur. Bu durum artan kafes noktası sayısına bağlı olarak görece yüksek Reynolds sayılarının simülasyonunu zorlaştırmaktadır.

Bu çalışmanın ardından ileri vadede; Lattice Boltzmann yönteminin partikül mekaniğine yatkın doğası sebebiyle gelecek çalışmalarda birden fazla parçacık türü içeren (Ör. Nano akışkanlar) akışların simülasyonları yapılabilir. Yanı sıra BGK gibi tek gevşeme süresi içeren görece basit bir çarpışma operatörü yerine "Multiple Relaxation Time (MRT)" modelleri kullanılarak çözümlerin kararlılık seviyesi ve hassasiyet dereceleri yükseltilebilir. Ayrıca literatürde örnekleri olduğu üzere, enerjinin korunumu denklemi de momentum denklemine benzer bir şekilde Lattice Boltzmann yöntemine entegre edilerek görece yeni olan bu yöntemin davranışları incelenebilir ve daha bütünlüklü bir çözücü oluşturulması yönünde çalışmalar yapılabilir.

KAYNAKLAR

- [1] Wesseling, P.: *Principles of Computational Fluid Dynamics*, Springer Verlag, **2000.**
- [2] S.Succi, *The Lattice Boltzmann Equation:For Fluid Dynamics and Beyond* Oxford University Press, **2001.**
- [3] A. Mohamad, *Lattice Boltzmann Method Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes*, Springer Verlag-London, **2011.**
- [4] J.C. Maxwell, Illustrations of the dynamical theory of gases. *Philosophical Magazine* 19, 19-32, *Philosophical Magazine* 20, 21-37, **1890.**
- [5] Laurendeau, Normand M. *Statistical thermodynamics: fundamentals and applications*, Cambridge University Press, **2005.**
- [6] L.Boltzmann, Über die Mechanische Bedeutung des Zweiten Hauptsatzes der Warmetheorie, *Wiener Berichte*, 53, 195-220, Vol 1., **1866.**
- [7] Chen S, Doolen G.D. Lattice Boltzmann method for fluid flows. *Annual Review of Fluid Mechanics,* Vol. 30: 329-364, **1998.**
- [8] Sukop M.C., Thorne D.T., *Lattice Boltzmann Modeling An introduction for Geoscientists and Engineers,* Springer Verlag, **2006.**
- [9] Cercignani, C. *The Boltzmann equation and its applications*. Applied Mathematical Sciences 67. Springer Verlag, New York, **1988**.
- [10] Cercignani, C.*Mathematical methods in kinetic theory* (2nd ed.), Springer Verlag, **1990.**
- [11] Bhatnagar P.L., Gross E.P., Krook M., A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems, *Physical Review* 94, 511–525, **1954.**
- [12] Qian Y.H., D'Humieres D., Lallemand P. Lattice BGK Models for Navier-Stokes Equation, *Europhysics Letters* 17, 479-484, **1992.**

- [13] He X. and Luo L.S. Theory of the lattice Boltzmann method : From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation, *Phys. Rev. E*,**56**, *6811-6818*, **1997.**
- [14] Cussler, E. L. *Diffusion: Mass Transfer in Fluid Systems*, Cambridge University Press, **1997.**
- [15] Zou Q., He X., On pressure and velocity boundary conditions for the Lattice Boltzmann BGK model, *Phys. Fluids*, *9*, *1592-1598*, **1997**
- [16] <u>http://wiki.palabos.org/media/numerics:cylinder.pdf (Ağustos</u>, **2014**)
- [17] Ghia et al. High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method*, *Journal of Computational Physics 48, 387-411*, **1982**
- [18] Çelik, Sıtkı Berat Analysis Of Single Phase Fluid Flow and Heat Transfer in Slip Flow Regime by Parallel Implementation of Lattice Boltzmann Method on GPUs, METU Mechanical Engineering Dep. M. Sc. Thesis, Ankara, **2012**
- [19] Graebel, W.P.*Engineering Fluid Mechanics*. Taylor & Francis Publishers, **2001**
- [20] <u>http://num3sis.inria.fr/blog/navier-stokes-computation-with-poiseuille-flow-and-backward-facing-step/ (</u>Ağustos, **2014**)
- [21] Ertürk E., Numerical Solutions of 2-D Steady Incompressible Flow Over a Backward-Facing Step, Part I: High Reynolds Number Solutions, *International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol 37, 633 655,* **2008.**
- [22] Armaly B.F., Durst F., Pereira J.C.F., Schönung B. Experimental and theoretical investigation of backward-facing step flow. *Journal of Fluid Mechanics* 127, 473–96, **1983.**
- [23] Yong G. L., Ching-Long L., Jianchun H., Accuracy and Efficiency Study of Lattice Boltzmann Method for Steady State Flow Simulations, *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals: An International Journal of Computation and Methodology, 39:1, 21-43,* **2001.**

- [24] Ferziger J.H., Peric M., Computational Methods for Fluid Dynamics, Springer Verlag, New York, **1999.**
- [25] Chen S., Wang Z., Shan X. W., Doolen G.D., Lattice Boltzmann Computational Fluid Dynamics in Three Dimensions, *Journal of Statistical Physics, vol. 68, 379-400*, **1992.**
- [26] Ginzbourg I., Alder P.M., Boundary Flow Condition Analysis for the Three Dimensional Lattice Boltzmann Model, *Journal de Physique II, France, vol . 4, 191-214*, **1994.**
- [27] He X., Zhou Q., Luo L.S., Dembo M., Analytical Solutions of Simple Flows and Analysis of No-Slip Boundary Condition for the Lattice Boltzmann BGK Model, *Journal of Statistical Physics, vol. 87, 115-136,* **1997.**

ÖZGEÇMİŞ

Kimlik Bilgileri

Adı Soyadı: Zekeriya Özcan Doğum Yeri: Kırıkkale Medeni Hali: Bekar E-Posta: ozcan.zekeriya@hotmail.com Adresi: Mustafa Kemal Mah. 2125. Sok No:1 Çankaya/ANKARA

Eğitim

Lisans: Akdeniz Üniversitesi Makine Mühendisliği Bölümü Yüksek Lisans: Hacettepe Üniversitesi Makine Mühendisliği Bölümü Doktora:

Yabancı Dil Düzeyi

İngilizce: İleri Almanca: İleri

İş Deneyimi

Türk Akreditasyon Kurumu (TÜRKAK) – 2013 – Halen

Deneyim Alanları

- Proses Mühendisliği
- Kalite Mühendisliği

Tezden Üretilmiş Projeler ve Bütçesi

Tezden Üretilmiş Yayınlar

Tezden Üretilmiş Tebliğ ve/veya Poster Sunumu ile Katıldığı Toplantılar