

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده مهندسی مکانیک

رشته مکانیک گرایش تبدیل انرژی

## بررسی دوفازی تشکیل و جدایش جت سیال

هاجر محمدزاده ثانی

استاد راهنما :

دکتر محمدحسن کیهانی

استاد مشاور:

دکتر محسن نظری

پایان نامه ارشد جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

بهمن ۱۳۹۴



فرم شماره ۶: صورت جلسه دفاع از پایان نامه تحصیلی دوره کارشناسی ارشد

با تأییدات خداوند متعال و با استعانت از حضرت ولی عصر (عج) ارزیابی جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد خانم هاجر محمدزاده ثانی به شماره دانشجویی ۹۲۱۲۵۸۴ رشته مهندسی مکانیک گرایش تبدیل انرژی تحت عنوان بررسی دوفازی تشکیل و جدایش جت سیال که در تاریخ ۹۴/۱۱/۲۸ با حضور هیأت محترم داوران در دانشگاه صنعتی شاهرود برگزار گردید به شرح ذیل اعلام می‌گردد:

|                                |                                    |                                                                       |
|--------------------------------|------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------|
| <input type="checkbox"/> مردود | <input type="checkbox"/> دفاع مجدد | <input checked="" type="checkbox"/> قبول (با درجه: عالی - امتیاز: ۲۰) |
|--------------------------------|------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------|

- ۱- عالی (۲۰ - ۱۹)  
 ۲- بسیار خوب (۱۸/۹۹ - ۱۸)  
 ۳- خوب (۱۷/۹۹ - ۱۶)  
 ۴- قابل قبول (۱۵/۹۹ - ۱۴)  
 ۵- نمره کمتر از ۱۴ غیر قابل قبول

| عضو هیأت داوران                 | نام و نام خانوادگی | مرتبه علمی | امضاء |
|---------------------------------|--------------------|------------|-------|
| ۱- استاد راهنمای اول            | محمدحسن کیهانی     | استاد      |       |
| ۲- استاد راهنمای دوم            |                    |            |       |
| ۳- استاد مشاور                  | محسن نظری          | دانشیار    |       |
| ۴- نماینده شورای تحصیلات تکمیلی | علی جباری مقدم     | استادیار   |       |
| ۵- استاد ممتحن اول              | محمود چهارطاقی     | استادیار   |       |
| ۶- استاد ممتحن دوم              | پوریا اکبرزاده     | استادیار   |       |

رئیس دانشکده:



این پایان نامه اثری است به ظاهر ناچیز اما بسیار گران بها

اثری... تبرک به دعاها و مهر و عطوفت های مادرانه ی مادری عزیزتر از جانم

اثری... مدین به نصیحت پدرانه استاد گران قدرم دکتر کیانی و راهنمایی های دبرانه دکتر نظری عزیز که بی گمان کادوهای این بوم اندوگمبندان  
مغزهای جوانانش از ضحاک های زمان که این خود رسالتی است که تنها یک معلم می تواند به دوش کشد و بس....

اثری... معطر به عطر نفس های خانواده عزیزم و دوستان گران قدرم که حضورشان و لبخندشان چراغی بود برای شب های تاریک و

خسته ی این دورانم

اثری... یادآور تلاش های شبانه روزی و محنتی ناپذیر دوران شباهم

و در آخر

این اثر را با چنان کنجینه عظیمی که در خویش نهفته دارد

تقدیم می کنم به

... او

## تعهد نامه

اینجانب هاجر محمدزاده ثانی دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته مهندسی مکانیک دانشکده

مکانیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه بررسی دوفازی تشکیل و جدایش جت سیال

تحت راهنمایی دکتر کیهانی و مشاورت دکتر نظری متعهد می شوم.

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهش های محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است.
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه صنعتی شاهرود » و یا « Shahrood University of Technology » به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان نامه تأثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می گردد.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه ، در مواردی که از موجود زنده ( یا بافتهای آنها ) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- ❖ در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری ، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است

### تاریخ

### امضای دانشجو

### مالکیت نتایج و حق نشر

- ❖ کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه های رایانه ای، نرم افزار ها و تجهیزات ساخته شده است ) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- ❖ استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی باشد.

\* متن این صفحه نیز باید در ابتدای نسخه های تکثیر شده پایان نامه وجود داشته باشد .

## چکیده

در این مطالعه از روش شبکه بولتزمن برای شبیه‌سازی تشکیل و جدایش قطره از ترکیب دو سیال مخلوط نشدنی استفاده شده است. اعداد بی‌بعد مهم در این مطالعه، عدد موینگی (نسبت بین نیروی لزجت و نیروی کشش سطحی)، نسبت لزجت دو فاز، نسبت سرعت ورودی دوفاز می‌باشد. برای شبیه‌سازی مسئله از دو روش شان و چن و انرژی آزاد استفاده شده است. برای بررسی تشکیل قطره نیوتنی در سیال پیوسته نیوتنی و توضیح دینامیک مسئله و پارامترهای تأثیرگذار بر جدایش و تشکیل قطره، از روش انرژی آزاد در یک میکروکانال  $T$  شکل استفاده شده است. در این بررسی دینامیک تشکیل و جدایش قطره مورد بررسی قرار گرفته و بیان شد که بر اساس این دینامیک سه نوع رژیم برای این جدایش پیشنهاد می‌شود: فشردگی<sup>۱</sup>، چکه کردن<sup>۲</sup>، جتی<sup>۳</sup>. در ادامه اثر عدد موینگی، نسبت نرخ جریان، زاویه تماس و نسبت لزجت دو فاز بر زمان جدایش قطره و اندازه قطره مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش عدد موینگی و افزایش نسبت نرخ جریان، زمان جدایش کاهش یافته و طول جدایش افزایش می‌یابد. با افزایش نسبت لزجت دو فاز طول و زمان جدایش قطره افزایش می‌یابد. همچنین نتایج نشان می‌دهد که در اعداد موینگی پایین (رژیم فشردگی) عدد موینگی تأثیر چندانی بر اندازه قطره ندارد و اندازه قطره به شدت وابسته به نسبت نرخ جریان می‌باشد و با افزایش نسبت نرخ جریان اندازه قطرات افزایش می‌یابد. اما در اعداد موینگی بیشتر (رژیم چکه کردن) عدد موینگی تأثیر زیادی بر اندازه قطرات داشته و سایز قطره تقریباً مستقل از نسبت نرخ جریان می‌باشد. در بخش بعد این تحقیق، به بررسی فرآیند تشکیل قطره سیال غیر نیوتنی در یک فاز پیوسته نیوتنی در یک میکروکانال هم‌محور پرداخته شده است. در این شبیه‌سازی، مدل غیرنیوتنی کاریاسودا برای شبیه‌سازی سیال غیرنیوتنی به کار گرفته شده است. در این تحقیق تأثیر ضریب کاریاسودا، عدد موینگی و نسبت سرعت بر فرآیند تشکیل قطره، اندازه، فرکانس قطرات

---

<sup>1</sup>Squeezing

<sup>2</sup>Dripping

<sup>3</sup>Jetting

و طول جدایش بررسی گردیده است. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش ضریب  $n$  مدل کاریاسودا، لزجت سیال افزایش می‌یابد و زمان شروع جدایش قطره کاهش یافته، طول آغاز جدایش اولین قطره کاهش می‌یابد و افزایش عدد موینگی هم منجر به کاهش طول جدایش می‌شود. با کاهش نسبت سرعت ( $R$ )، کاهش عدد موینگی و افزایش ضریب مدل کاریاسودا ( $n$ )، اندازه قطره کاهش می‌یابد. تأثیر ضریب  $n$  مدل کاریاسودا بر فاصله بین قطرات نیز بررسی شد. با افزایش  $n$ ، اندازه قطرات کاهش یافته و فرکانس تشکیل قطره افزایش می‌یابد و این باعث می‌شود فاصله بین قطرات کاهش یابد.

**کلید واژگان:** میکروکانال، روش شبکه بولتزمن، جریان‌های چندفازی، سیال غیرنیوتنی، قطره.

## فهرست مطالب

|                                          |    |
|------------------------------------------|----|
| ۱ فصل اول: مقدمه                         | ۱  |
| ۱-۱ مقدمه                                | ۲  |
| ۲-۱ مروری بر کارهای پیشین                | ۳  |
| ۳-۱ نوآوری و اهمیت مطالعه حاضر           | ۱۴ |
| ۴-۱ محتوای فصل‌های بعد                   | ۱۵ |
| ۲ فصل دوم: روش تحقیق                     | ۱۷ |
| ۱-۲ کلیات روش بولتزمن                    | ۱۸ |
| ۲-۲ سیستم‌های چندفازی                    | ۲۳ |
| ۱-۲-۲ مدل شان و چن                       | ۲۴ |
| ۲-۲-۲ مدل انرژی آزاد                     | ۲۷ |
| ۳-۲-۲ تفاوت مدل شان و چن و انرژی آزاد    | ۳۲ |
| ۳-۲ مدل غیرنیوتنی                        | ۳۳ |
| ۱-۳-۲ مدل توانی                          | ۳۳ |
| ۲-۳-۲ مدل کاریاسودا                      | ۳۴ |
| ۳-۳-۲ شبیه‌سازی غیرنیوتنی در مدل بولتزمن | ۳۴ |
| ۴-۲ شرایط مرزی                           | ۳۵ |
| ۱-۴-۲ شرایط مرزی هیدرودینامیک            | ۳۵ |
| ۲-۴-۲ شرایط مرزی مدل انرژی آزاد          | ۴۳ |

### ۳ فصل سوم: تشکیل و جدایش قطره در جریان دوفازی داخل یک میکروکانال

T شکل با استفاده از مدل انرژی آزاد ..... ۴۵

۱-۳ اعتبارسنجی ..... ۴۶

۱-۱-۳ آزمون لاپلاس ..... ۴۶

۲-۱-۳ آزمون زاویه تماس ..... ۴۸

۳-۱-۳ تغییر شکل قطره تحت جریان برشی ساده ..... ۵۰

3-2 شبیه سازی جریان در میکروکانال ..... ۵۴

۱-۲-۳ نتایج عددی ..... ۵۴

### ۴ فصل چهارم: تشکیل و جدایش قطره در جریان دوفازی داخل یک میکروکانال هم

محور با استفاده از مدل شان و چن ..... ۷۳

۱-۴ مقدمه ..... ۷۴

۲-۴ اعتبارسنجی ..... ۷۴

۱-۲-۴ جریان دوفازی لایه های مخلوط نشدنی ..... ۷۴

۲-۲-۴ جریان سه فازی لایه ای مخلوط نشدنی ..... ۷۷

۳-۲-۴ آزمون لاپلاس ..... ۷۹

۴-۲-۴ آزمون تشکیل دو قطره ..... ۸۰

۵-۲-۴ آزمون زاویه تماس ..... ۸۱

۳-۴ مدل سازی عددی ..... ۸۳

۴-۴ نتایج و بحث ..... ۸۴

۱-۴-۴ تأثیر ضریب مدل کاریاسودا (n) بر تشکیل قطره ..... ۸۴

|                                                   |    |       |
|---------------------------------------------------|----|-------|
| تأثير ضريب مدل کارياسودا (n) بر اندازه قطره ..... | ۸۷ | ۲-۴-۴ |
| تأثير عدد مويينگی بر تشکيل قطره .....             | ۸۹ | ۳-۴-۴ |
| تأثير ضريب مدل کارياسودا (n) بر طول جدایش .....   | ۹۰ | ۴-۴-۴ |

## فهرست شکل‌ها

- شکل ۱-۱: از نتایج پینگ-فرآیند تشکیل قطره در یک چرخه در یک میکروکانال هم-محور در یک عدد مویینگی ثابت  $Ca=0.1307$  و در یک نسبت سرعت‌های ورودی ثابت  $R=0.8$ ، ..... ۵
- شکل ۲-۱: تشکیل قطره در یک نرخ جریان فاز جداشونده  $Q_d=8 \times 10^{-3}$  در اعداد مویینگی مختلف: (الف)  $Ca=0.002$ ، (ب)  $Ca=0.003$ ، (ج)  $Ca=0.004$ ، (د)  $Ca=0.01$ ، (ه)  $Ca=0.02$ ، (و)  $Ca=0.035$  [۱۶] ..... ۷
- شکل ۳-۱: تأثیر نسبت نرخ جریان بر فرآیند تشکیل قطره (از چپ به راست در هر ردیف) در یک نسبت لزجت ثابت  $\eta_d/\eta_c = 0.5$  و در یک عدد مویینگی ثابت  $Ca=0.005$ ،  $Q_d/Q_c = 0.2$  (a)،  $Q_d/Q_c = 0.5$  (b)،  $Q_d/Q_c = 0.75$  (c)، ..... [۱۷] ..... ۷
- شکل ۴-۱: فرآیند تشکیل قطره (از چپ به راست در هر ردیف) تحت سه رژیم در یک نسبت لزجت ثابت  $\eta_d/\eta_c = 0.5$  و در یک نسبت نرخ جریان ثابت  $Q_d/Q_c = 0.5$ ،  $Ca=0.0015$  (a)،  $Ca=0.0079$  (c)، ..... [۱۷] ..... ۸
- شکل ۵-۱: فرآیند تشکیل قطره (از چپ به راست در هر ردیف) برای چهار نسبت عرض مختلف دو ورودی در عدد مویینگی ثابت  $Ca=0.006$ ،  $W_d/W_c=0.25$  (a)،  $W_d/W_c=1/0$  (b)،  $W_d/W_c=2/0$  (d)، ..... [۱۷] ..... ۸
- شکل ۶-۱: رژیم‌های جریان تشکیل قطره در میکروکانال هم-محور: (الف) نتایج عددی، (ب) مشاهدات آزمایشگاهی [۲۱] ..... ۱۰
- شکل ۷-۱: از نتایج علیزاده- تغییرات رفتار جریان در میکروکانال هم-محور برای نسبت سرعت ثابت بین فازها ( $Q_d/Q_c=2$ ) و در اعداد مختلف مویینگی ( $Ca$ ) ..... ۱۱
- شکل ۸-۱: تغییرات رفتار جریان در میکروکانال هم-محور برای مقدار ثابت  $Ca=0.065$  و در نسبت‌های گوناگون سرعت [۲۱] ..... ۱۲

- شکل ۹-۱: تأثیر ضریب توانی سیال فاز پیوسته بر فرآیند تشکیل قطرات. ستون اول ((e) - (a))  
 برای  $n = 0.4$ ، ستون دوم ((j) - (f)) برای  $n = 1$ ، ستون سوم ((o) - (k)) برای  $n = 1/4$ . [۲۴]..... ۱۳
- شکل ۱۰-۱: تشکیل قطرات در سیال غیرنیوتنی به ازای کشش سطحی‌های مختلف [۲۴]..... ۱۴
- شکل ۱-۲: نمایش ابر میکروسکوپی تابع توزیع ذره [۳۱]..... ۲۰
- شکل ۲-۲: مدل  $D_2Q_9$ ..... ۲۱
- شکل ۳-۲: طرحواره شبیه‌سازی جریان به کمک مدل شان وچن دومؤلفه‌ای ..... ۲۷
- شکل ۴-۲: توابع توزیع در مرزهای یک ناحیه [۳۴]..... ۳۶
- شکل ۵-۲: توابع توزیع یک مرز صاف روی دیوار پایین بعد از گام جاری‌شدن [۳۴]..... ۳۶
- شکل ۶-۲: نمونه‌ای از شرایط مرزی پرئودیک در دامنه‌ی حل [۳۳]..... ۳۷
- شکل ۷-۲: شرط مرزی تقارن [۳۳]..... ۴۱
- شکل ۸-۲: شرط مرزی بازگشت به عقب کامل [۳۳]..... ۴۲
- شکل ۹-۲: شرط مرزی بازگشت با دیوار میانی [۳۳]..... ۴۳
- شکل ۱۰-۲: شرط مرزی بازگشت به عقب [۳۴]..... ۴۳
- شکل ۱-۳: مقایسه نتایج روش شبکه بولترمن با قانون لاپلاس ..... ۴۶
- شکل ۲-۳: نمودار پارامتر  $\emptyset$  در مقطع میانی قطره با شعاع ۲۰. مقایسه نمودار با رابطه تئوری ..... ۴۷
- شکل ۳-۳: مقایسه سرعت‌های کاذب یک قطره در یک سیال آرام با کشش سطحی  $\sigma = 0.01$  و شعاع  $R = 20$  برای دو مدل شان و چن و مدل حاضر (انرژی آزاد) ..... ۴۸
- شکل ۴-۳: طرحواره زاویه تماس بین مایع و سطح جامد ..... ۴۹
- شکل ۵-۳: تغییر شکل قطره به ازای زوایای تماس مختلف ..... ۵۰
- شکل ۶-۳: نمودار زاویه تماس به عنوان تابعی از مقدار پارامتر  $\emptyset$  در سطح ..... ۵۰
- شکل ۷-۳: پارامتر تغییر شکل تیلور  $Df$  به عنوان تابعی از عدد موینگی ..... ۵۲

- شکل ۳-۸: نمودار فصل مشترک پایدار قطرات تغییر شکل داده برای اعداد موینگی مختلف ۵۲
- شکل ۳-۹: قطره تحت جریان برشی در  $Re=1/0$  در زمان‌های مختلف ..... ۵۳
- شکل ۳-۱۰: شماتیکی از تشکیل قطره در یک میکروکانال T شکل ..... ۵۴
- شکل ۳-۱۱: مراحل حرکت فاز جداشونده تا رسیدن به مرحله جدایش به ازای نسبت نرخ جریان  $R=0/5$ ، نسبت لزجت  $\eta_d/\eta_c = 0/5$  در دو عدد موینگی  $0/005$  و  $0/02$  ..... ۵۸
- شکل ۳-۱۲: شماتیکی از پیش روی قطره ..... ۵۸
- شکل ۳-۱۳: مراحل رشد قطره به ازای عدد موینگی  $Ca=0/005$ ، نسبت نرخ جریان  $R=0/5$ ، نسبت لزجت  $\eta_d/\eta_c = 0/5$  ..... ۵۹
- شکل ۳-۱۴: نمودار زمان جدایش بر حسب عدد موینگی برای نسبت نرخ جریان‌های  $0/5$  و  $0/3$  و  $0/15$  ..... ۶۰
- شکل ۳-۱۵: نمودار طول جدایش بر حسب عدد موینگی به ازای دو نسبت نرخ جریان  $0/5$  و  $0/3$  در نسبت لزجت ثابت  $0/5$  ..... ۶۰
- شکل ۳-۱۶: زمان جدایش به ازای اعداد موینگی مختلف  $0/005$ ،  $0/01$ ،  $0/02$ ،  $0/04$ ،  $0/05$ ،  $0/07$  و به ازای دو نسبت لزجت مختلف  $0/5$  و  $1/0$  ..... ۶۱
- شکل ۳-۱۷: نمودار زمان جدایش بر حسب عدد موینگی به ازای نسبت لزجت‌های  $0/5$  و  $1/0$  ..... ۶۲
- شکل ۳-۱۸: نمودار طول جدایش به ازای نسبت لزجت‌های  $0/5$  و  $1/0$  در یک نسبت نرخ جریان ثابت  $0/5$  ..... ۶۲
- شکل ۳-۱۹: نمودار اندازه قطره ( $L$ ) به ازای اعداد موینگی مختلف و در دو نسبت نرخ جریان  $0/5$  و  $0/3$  در نسبت لزجت ثابت  $0/5$  ..... ۶۴
- شکل ۳-۲۰: نمودار زمان تشکیل بین دو قطره متوالی بر حسب  $Ca$  به ازای نسبت نرخ جریان-های  $0/15$  و  $0/3$  و  $0/5$  در یک نسبت لزجت ثابت  $0/5$  ..... ۶۴

- شکل ۳-۲۱: شماتیکی از اندازه قطرات به ازای اعداد مویینگی مختلف در دو نسبت لزجت ۰/۵ و ۱/۰ و به ازای نسبت نرخ جریان ثابت ۰/۳ ..... ۶۵
- شکل ۳-۲۲: نمودار اندازه قطره بر حسب عدد مویینگی به ازای دو نسبت لزجت ۰/۵ و ۱/۰ در یک نسبت نرخ جریان ثابت ۰/۳ ..... ۶۵
- شکل ۳-۲۳: نمودار طول قطره به عنوان تابعی از نسبت نرخ جریان در عدد مویینگی ثابت  $Ca=0/0.5$  و مقایسه کار حاضر با رابطه خطی  $1+2x$  و کار تانگ و همکاران ..... ۶۷
- شکل ۳-۲۴: تغییرات اندازه قطره به ازای دو عدد مویینگی مختلف و به ازای نسبت عرض‌های ورودی دو کانال مختلف و به ازای سه نسبت نرخ جریان مختلف ۰/۳، ۰/۵ و ۰/۱ در یک نسبت لزجت ثابت ۰/۵ ..... ۶۸
- شکل ۳-۲۵: شماتیکی از تأثیر نسبت عرض‌ها بر اندازه قطرات در عدد مویینگی ۰/۰۱ و نسبت نرخ جریان ۰/۳ و نسبت لزجت ۰/۵ ..... ۶۹
- شکل ۳-۲۶: نمودار اندازه قطره در نسبت عرض‌های مختلف به ازای دو عدد مویینگی ۰/۰۰۵ و ۰/۰۱ به ازای یک نسبت نرخ جریان ثابت ۰/۳ و نسبت لزجت ثابت ۰/۵ ..... ۶۹
- شکل ۳-۲۷: الگوی جریان به ازای دو عدد مویینگی ۰/۰۰۵ و ۰/۰۱ و برای سه زاویه تماس ۱۴۰، ۱۸۰ و ۱۲۰ درجه ..... ۷۰
- شکل ۳-۲۸: الگوی جریان فاز جداشونده به ازای زوایای تماس مختلف در  $Ca=0/0.5$  و نسبت نرخ جریان ۰/۵ و نسبت ویسکوزیته ۰/۵ ..... ۷۱
- شکل ۴-۱: جریان دوفازی مخلوط نشدنی بین دو صفحه موازی ..... ۷۴
- شکل ۴-۲: نمودار سرعت برای  $M=1$  و  $G=1/5 \times 10^{-8}$  و  $Sw=0/5$  و  $\tau_1 = \tau_2 = 1$  ..... ۷۶
- شکل ۴-۳: نمودار سرعت برای  $M=1$  و  $G=1 \times 10^{-4}$  ..... ۷۸
- شکل ۴-۴: آزمایش لاپلاس جهت محاسبه کشش سطحی بین دوفاز ..... ۸۰
- شکل ۴-۵: یکی شدن دو قطره ثابت طی زمان ..... ۸۰

- شکل ۴-۶: طرحواره زاویه تماس بین مایع و سطح جامد ..... ۸۱
- شکل ۴-۷: زاویه‌های تماس مختلف بر حسب درجه به ترتیب متناسب با: ..... ۸۲
- شکل ۴-۸: حالات قطره در سه زاویه تماس مختلف ..... ۸۲
- شکل ۴-۹: طرحواره میکروکانال هم‌محور تشکیل شده از دوفاز پیوسته و فاز جداشونده ..... ۸۳
- شکل ۴-۱۰: ..... ۸۷
- شکل ۴-۱۱: تأثیر ضریب  $n$  مدل کاریاسودا و نسبت سرعت ( $R$ ) بر طول قطره در جهت جریان ( $D$ ) ..... ۸۸
- شکل ۴-۱۲: اثر ضریب  $n$  و نسبت سرعت ( $R$ ) بر اندازه قطره ( $D$ ) ..... ۸۸
- شکل ۴-۱۳: تأثیر ضریب  $n$  بر فاصله بین قطرات به ازای نسبت سرعت‌های  $R=0/8$  و  $R=1/2$  ..... ۸۹
- شکل ۴-۱۴: اثر عدد مویینگی بر اندازه قطره ..... ۹۰
- شکل ۴-۱۵: تغییرات طول جدایش و زمان جدایش در میکروکانال هم‌محور برای نسبت سرعت  $R=0/8$  و  $Ca=0/01307$  به ازای  $n$  های مختلف ..... ۹۱
- شکل ۴-۱۶: تغییرات طول جدایش در میکروکانال هم‌محور برای نسبت سرعت  $R=0/8$  و  $Ca=0/01307$  به ازای  $n$  های مختلف ..... ۹۲
- شکل ۴-۱۷: تغییرات طول جدایش در میکروکانال هم‌محور به ازای  $n$  های مختلف و به ازای اعداد مویینگی مختلف ..... ۹۲

## فهرست علائم اختصاری

|                                        |                                        |
|----------------------------------------|----------------------------------------|
| $\dot{\gamma}$                         | نرخ برش محلی (1/s)                     |
| $Pe$                                   | عدد پکلت                               |
| $\sigma$                               | کشش سطحی (N/m)                         |
| $\nu$                                  | لزجت سیال ( $m^2/s$ )                  |
| $\rho$                                 | چگالی سیال ( $Kg/m^3$ )                |
| $c_s$                                  | سرعت صوت در واحد لیتیس                 |
| $u$                                    | بردار سرعت سیال (m/s)                  |
| $Ca$                                   | عدد کاپیلاری                           |
| $Re$                                   | عدد رینولدز                            |
| $F$                                    | میدان نیرو (در واحد شبکه)              |
| $f, g$                                 | تابع توزیع ذرات                        |
| $f_{\alpha}^{(eq)}, g_{\alpha}^{(eq)}$ | تابع توزیع تعادلی ذرات در جهت $\alpha$ |
| $\tau$                                 | زمان آرامش                             |
| $Lu$                                   | واحد شبکه                              |
| $\vec{e}_{\alpha}$                     | بردارهای سرعت میکروسکوپی               |
| $G_{\sigma\bar{\sigma}}, G$            | پتانسیل برهم کنش بین دو سیال           |

# فصل اول: مقدمه

در سال‌های اخیر درک پدیده‌های فیزیکی در مقیاس میکرو به علت کاربرد فراوان و گسترده آن‌ها در صنعت و به ویژه علوم پزشکی از اهمیت خاصی برخوردار است. یکی از چالش‌های مهم در بررسی دینامیک سیالات در مقیاس میکرو، بررسی فرآیند تشکیل قطره در میکروکانال‌ها به منظور کنترل اندازه حرکت قطره‌های تولیدی می‌باشد. فرآیند تشکیل قطره از دو سیال مخلوط نشدنی در میکروکانال‌ها دارای کاربردهای فراوانی نظیر صنایع غذا و پلیمر [۱]، لوازم آرایشی، آنالیزهای دی-ان-ای<sup>۱</sup> [۲]، آنالیزهای بیوشیمیایی و ... دارد. از دیگر کاربردها، میکروراکتورها [۳] می‌باشند. زیرا تشکیل مداوم قطره‌های کوچک که با فاصله یکسان نسبت به یکدیگر در کانال در حال حرکت هستند، در ساختار راکتورها ضروری است. در تولید دارو نیز تشکیل قطره‌های منفرد جداشونده با فواصل یکنواخت نسبت به یکدیگر، بسیار مهم می‌باشد [۴].

در گذشته از رژیم‌های توربولانسی و در یک محفظه به منظور افزایش و بالا بردن جدایش قطره‌ها استفاده می‌گردید، که این کار بسیار پیچیده بوده است. اما امروزه با استفاده از دستگاه‌های میکروسیالی بستر رو به رشدی برای تولید انبوه و کنترل شده قطرات فراهم شده است. برای کنترل دقیق اندازه و شکل قطره‌ها از طریق دستگاه‌های میکروسیالی، آگاهی کامل از فرآیند و نحوه تشکیل قطره، حائز اهمیت است. در تشکیل قطره در میکروسیال‌ها، خواص سیال، هندسه میکروکانال و دبی جریان ورودی دو سیال مخلوط نشدنی به عنوان عوامل تعیین کننده شناخته می‌شوند. در نتیجه با تعیین ابعاد کانال و دبی دو جریان سیال، فرکانس و قطر قطره به دست می‌آیند. به طوری که اگر آهنگ سرعت دو سیال مخلوط نشدنی و ابعاد هندسه میکروکانال ثابت بمانند، اندازه قطره و فرکانس تشکیل آن نیز ثابت باقی خواهد ماند. این کاربردهای گسترده، موجب تحقیقات آزمایشگاهی و عددی بی‌شماری در این زمینه شده است. روش‌های ردیابی مرز مشترک و تسخیر مرز مشترک به عنوان دو

---

<sup>1</sup> DNA

نوع رهیافت مهم برای شبیه‌سازی جریان‌های چند فازی با استفاده از روش‌های دینامیک سیالات محاسباتی هستند. روش‌های انتگرال مرزی و المان محدود روش‌های عمومی برای ردیابی مرز مشترک می‌باشند. اما در سال‌های اخیر روش شبکه بولتزمن، به‌عنوان روشی که رویکرد محاسباتی جذابی برای شبیه‌سازی جریان سیال چند فازی ارائه داده است، بسیار مورد توجه قرار گرفته است. به‌دلیل مزیت‌های بسیار مانند مفاهیم فیزیکی مشخص، اعمال آسان شرایط مرزی و الگوریتم حل موازی در شبیه‌سازی مسائل پیچیده دینامیک سیالات، این روش کاربرد گسترده‌ای در حل جریان‌های چند فازی دارد.

## ۲-۱ مروری بر کارهای پیشین

تورسن و همکارانش [۵] برای نخستین بار شکل‌گیری قطرات آب در روغن را داخل میکروکانال مشاهده کردند. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که تشکیل قطره به نیروهای تنش برشی و کشش سطحی بین دو سیال بستگی دارد و طول قطره با افزایش نرخ جریان فاز پیوسته، کاهش می‌یابد.

آنا و همکاران [۶] برای اولین بار هندسه میکروکانال متقاطع را در یک دستگاه میکروسیالی ادغام کردند و به تولید امولسیون پرداختند. آن‌ها محدوده‌ای از رفتار تشکیل قطره در یک دستگاه میکروسیالی با کانال‌های مستطیلی متقاطع را ارائه دادند و روی تأثیر نسبت جریان فاز مایع بر الگوی تشکیل قطره مطالعاتی را انجام دادند. جریان‌های داخلی و خارجی کانال‌ها به ترتیب آب و روغن بود.

کوباد و همکاران [۷] جریان گاز-مایع را در یک هندسه متقاطع بررسی کردند و به این نتیجه رسیدند که تجزیه و فروپاشی حباب حاصل رقابتی بین فشار فازهای گاز و مایع می‌باشد و سائز حباب توسط نسبت نرخ جریان‌های مایع و گاز قابل پیش‌بینی است.

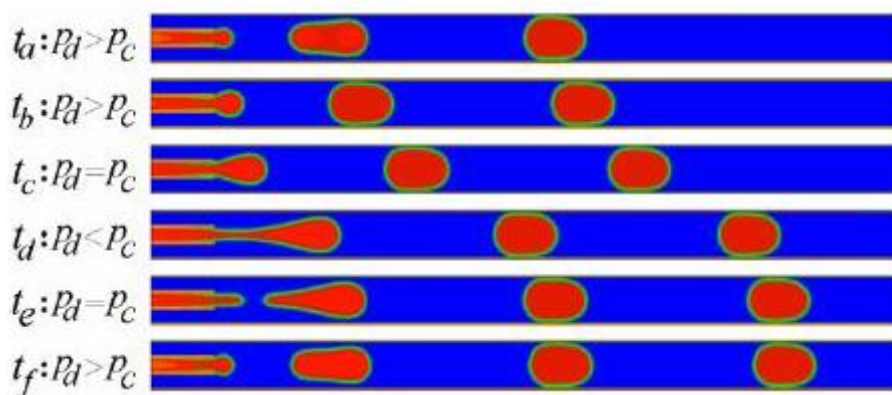
یو و همکاران [۸] جریان‌های گاز-مایع را در اعداد موینگی کم در میکروکانال متقاطع با استفاده از مدل شان و چن روش بولتزمن بررسی کردند و به این نتیجه رسیدند که، تشکیل حباب به

خاطر اختلاف فشار دو سیال مخلوط نشدنی می‌باشد.

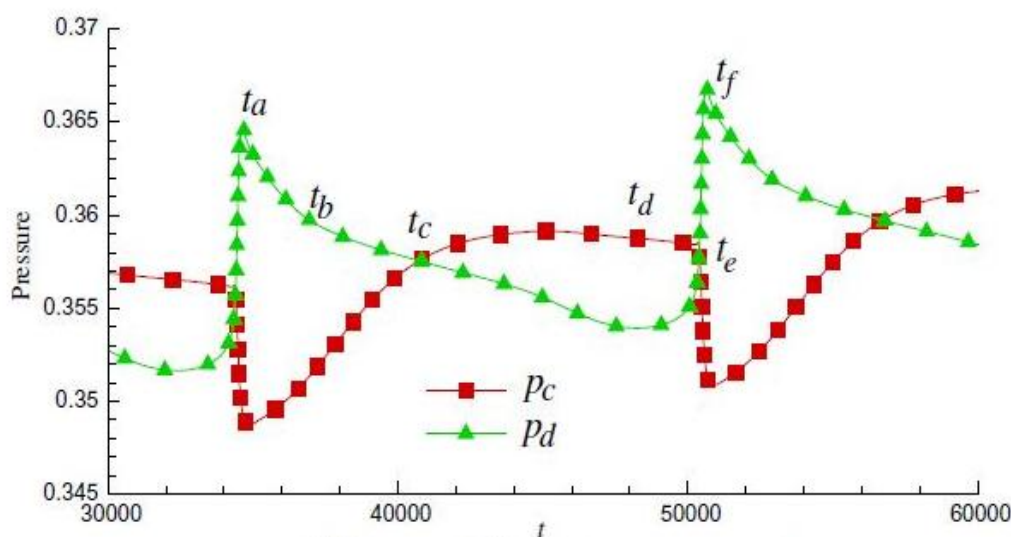
سیواسامی و همکاران [۹] نمودارهای فشار را در دو فاز به دست آورده و دریافتند که نمودار-های فشار فاز پیوسته و فاز جداشونده تازمانی که فرآیند تشکیل قطره ادامه یابد، تغییر می‌کند.

گارتسکی و همکاران [۱۰] آزمایش‌های تجربی را روی یک میکروکانال T شکل انجام دادند و به این نتیجه رسیدند که، تشکیل قطره از دو سیال مخلوط نشدنی در اعداد موینگی پایین به خاطر اختلاف فشار در راستای باریک شدگی قطره می‌باشد و به عبارتی در اعداد موینگی بالا نیروی لزجت نیروی حاکم است و قطره‌ها توسط پایداری موینگی تشکیل می‌شوند.

پینگ و همکاران [۱۱] فرآیند تشکیل قطره را در یک میکروکانال هم محور بررسی کردند. آن‌ها به این نتیجه رسیدند که، تجزیه و فروپاشی قطره به علت اختلاف فشاری است که بین دو فاز به وجود می‌آید. شکل ۱-۱-ب) تغییرات  $P_d$  و  $P_c$  را بر حسب زمان نشان می‌دهد که  $P_d$  و  $P_c$  به ترتیب فشار فاز پیوسته و فاز جداشونده در مقطع میانی کانال بیرونی و کانال مرکزی، می‌باشد. قطره (فاز جداشونده) از  $t_a$  تا  $t_c$  شروع به پیشروی می‌کند تا در زمان  $t_d$  فرآیند جدایش قطره رخ می‌دهد و بعد از زمان  $t_d$  تا  $t_e$  قطره جدا می‌شود و در سیال پیوسته پیش می‌رود. رشد قطره به وسیله اختلاف فشار مثبت ادامه می‌یابد تا زمانی که اختلاف فشار از بین برود.



(الف)



(ب)

شکل ۱-۱: از نتایج پینگ-فرآیند تشکیل قطره در یک چرخه در یک میکروکانال هم-محور در یک عدد موینگی ثابت  $Ca=0.1307$  و در یک نسبت سرعت‌های ورودی ثابت  $R=0.8$ .  
(الف) تغییرات زمانی تشکیل یک قطره در یک چرخه، (ب) تغییرات زمانی فشارهای  $Pd$  و  $Pc$  [۱۱].

فو و همکاران [۱۲] دریافتند که فرایند فروپاشی حباب در یک میکروکانال متقاطع توسط مرحله فروپاشی کنترل می‌شود و نرخ و زمان فروپاشی گلولی به نسبت نرخ جریان‌های گاز-مایع و لزجت فاز مایع بستگی دارد.

هو و همکاران [۱۳] با استفاده از روش حجم محدود<sup>۱</sup> مکانیزم تشکیل قطره را در یک میکروکانال هم‌محور بررسی کردند. آن‌ها اثرات نرخ جریان فاز پیوسته، لزجت و کشش سطحی را بر سائز قطره در هر دو رژیم قطره‌ای و جتی بررسی کردند.

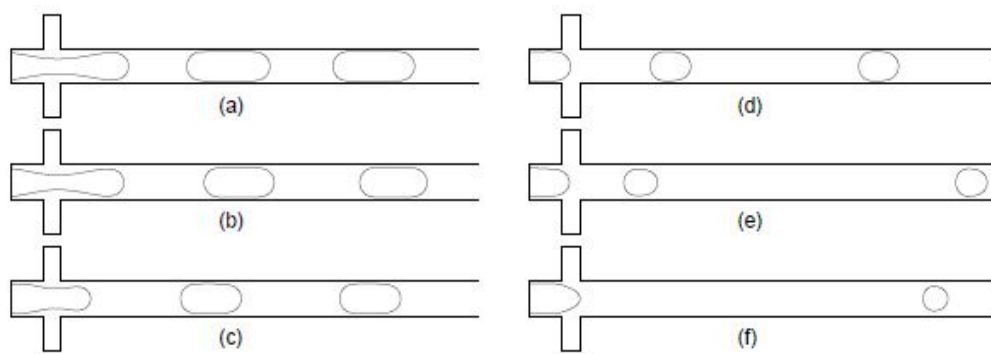
ونتا وانگ و همکاران [۱۴] با استفاده از روش شبکه بولتزمن و در یک ایده جدید با یک تغییر ساده در هندسه میکروکانال  $T$  شکل نتایج ارزشمندی را به دست آوردند. آن‌ها از یک میکروکانال ونتوری شکل به جای یک میکروکانال  $T$  شکل معمولی به منظور تأثیر بهتر در اندازه و فرکانس تشکیل قطره استفاده کردند. نتایج به وضوح نشان دادند که، در نسبت سرعت کم بین فازها (سرعت فاز

<sup>1</sup> Front tracking

پیوسته به فاز جداشونده) و در شرایط برابر، در میکروکانال ونتوری شکل، قطره‌های کوچک‌تر و با کیفیت بالاتری نسبت به قطره‌ها در هندسه  $T$  شکل معمولی تشکیل می‌شوند. اصل تولید قطره در یک میکروکانال  $T$  شکل بر پایه تعادل بین نیروی برشی اعمالی از فاز پیوسته روی فاز جداشونده، نیروی فشاری و نیروی کشش سطحی است. از این رو تغییر نیروی برشی اعمالی بر فاز جداشونده در طول مرحله اول تشکیل قطره می‌تواند به طور کاملاً موثری روی اندازه قطره و فرکانس تشکیل آن تأثیر بگذارد. نتایج شبیه‌سازی ونتوانگ نشان داد که جریان چند فاز در میکروکانال نسبت به تغییرات کوچک در هندسه کانال، بسیار حساس است.

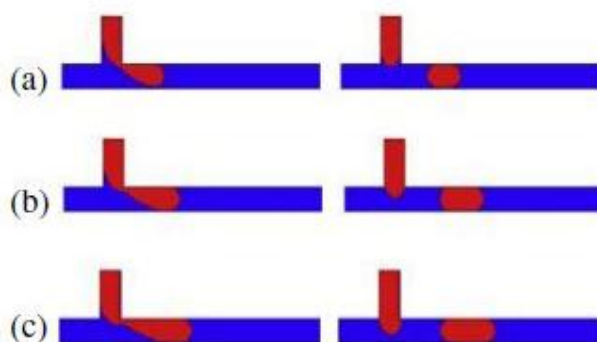
لئو و همکاران [۱۵] تأثیر عدد موینگی و نسبت لزجت بین دو فاز و نسبت دبی جریان را روی تشکیل قطرات آب در روغن در هندسه‌های متقاطع توسط مدل چند فاز در روش بولتزمن بررسی کردند. آن‌ها به این نتیجه رسیدند که، رابطه طول قطره با نسبت نرخ جریان‌های دو فاز یک تابع خطی است و همچنین با عدد موینگی رابطه‌ای توانی دارد. آن‌ها همچنین دریافتند که هندسه کانال نقش مهمی را در فرآیند تشکیل قطره ایفا می‌کند.

ژانگ و همکاران [۱۶] دینامیک تشکیل قطره و تأثیر عدد موینگی، نسبت نرخ جریان، نسبت لزجت و تأثیر لزجت فاز پیوسته را در یک میکروکانال متقاطع با استفاده از روش بولتزمن شبکه‌ای و مدل انرژی آزاد بررسی کردند. نتایج کار آن‌ها در شکل ۱-۲ بیان‌گر تأثیر عدد موینگی بر اندازه قطرات است. آن‌ها به این نتیجه رسیدند که، با افزایش عدد موینگی اندازه قطرات کاهش می‌یابد.



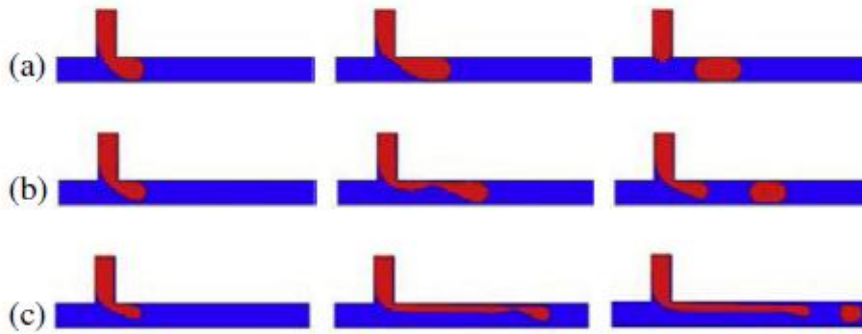
شکل ۳-۱: تشکیل قطره در یک نرخ جریان فاز جداشونده  $Qd = 8 \times 10^{-3}$  در اعداد موینگی مختلف: (الف)  $Ca = 0.002$  (ب)  $Ca = 0.003$  (ج)  $Ca = 0.004$  (د)  $Ca = 0.01$  (ه)  $Ca = 0.02$  (و)  $Ca = 0.35$  [۱۶].

شی و همکاران [۱۷] تشکیل قطره را در میکروکانال T شکل و با استفاده از روش بولتزمن بررسی کردند. آن‌ها تأثیر پارامترهای مختلف از قبیل: نسبت نرخ جریان  $(Q_d/Q_c)$ ، عدد موینگی  $(Ca)$ ، هندسه  $(W_d/W_c)$  و خاصیت ترشوندگی را در یک نسبت لزجت ثابت  $(\eta_d/\eta_c)$  مورد بررسی قرار دادند که  $Q_d$  و  $\eta_d$  به ترتیب عرض کانال فرعی، مقدار نرخ جریان و مقدار لزجت در فاز جداشونده و  $Q_c$ ،  $W_c$  و  $\eta_c$  به ترتیب عرض کانال اصلی، مقدار نرخ جریان و مقدار لزجت در فاز پیوسته می‌باشد. همچنین از بررسی تأثیر نسبت نرخ جریان بر اندازه قطرات به این نتیجه رسیدند که، اندازه قطرات با افزایش نسبت نرخ جریان افزایش می‌یابد (شکل ۳-۱).



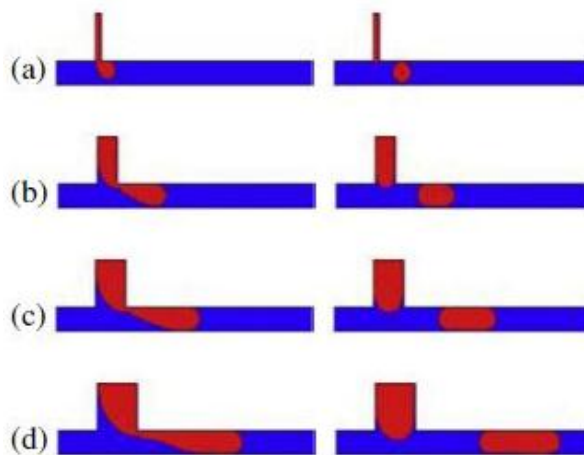
شکل ۳-۲: تأثیر نسبت نرخ جریان بر فرآیند تشکیل قطره (از چپ به راست در هر ردیف) در یک نسبت لزجت ثابت  $\eta_d/\eta_c = 0.5$  و در یک عدد موینگی ثابت  $Ca = 0.005$  (a)  $Q_d/Q_c = 0.2$  (b)  $Q_d/Q_c = 0.5$  (c)  $Q_d/Q_c = 0.75$  [۱۷].

آن‌ها تأثیر عدد موینگی را بر اندازه قطرات بررسی کرده و به این نتیجه رسیدند که با افزایش عدد موینگی اندازه قطرات کاهش می‌یابد (شکل ۴-۱).



شکل ۴-۱: فرآیند تشکیل قطره (از چپ به راست در هر ردیف) تحت سه رژیم در یک نسبت لزجت ثابت  $\eta_d/\eta_c = 0.5$  و در یک نسبت نرخ جریان ثابت  $Q_d/Q_c = 0.5$ . (a)  $Ca = 0.0015$ , (b)  $Ca = 0.015$ , (c)  $Ca = 0.15$  [۱۷].

شکل ۵-۱ نتایج بررسی اثر تأثیر هندسه کانال بر فرآیند تشکیل قطرات را نشان می‌دهد.



شکل ۵-۱: فرآیند تشکیل قطره (از چپ به راست در هر ردیف) برای چهار نسبت عرض مختلف دو ورودی در عدد موینگی ثابت  $Ca = 0.06$ . (a)  $W_d/W_c = 0.25$ , (b)  $W_d/W_c = 1/10$ , (c)  $W_d/W_c = 1/5$ , (d)  $W_d/W_c = 2/10$  [۱۷].

تن و همکاران [۱۸] تشکیل قطرات آب در روغن و روغن در آب را در هندسه میکروکانال متقاطع به صورت آزمایشگاهی بررسی کردند و به این نتیجه رسیدند که، اندازه قطرات با افزایش لزجت سیال پیوسته، کاهش می‌یابد و با افزایش دبی سیال جداشونده به آرامی افزایش می‌یابد.

زیهونگ و همکاران [۱۹]، با به کارگیری هندسه‌ای شامل دو کانال هم‌محور (کو-فلوئینگ) نتایج مربوط به فرآیند امولسیون در ابزارهای میکروسیالی مایع-مایع را در لزجت‌های مختلف ارائه کردند.

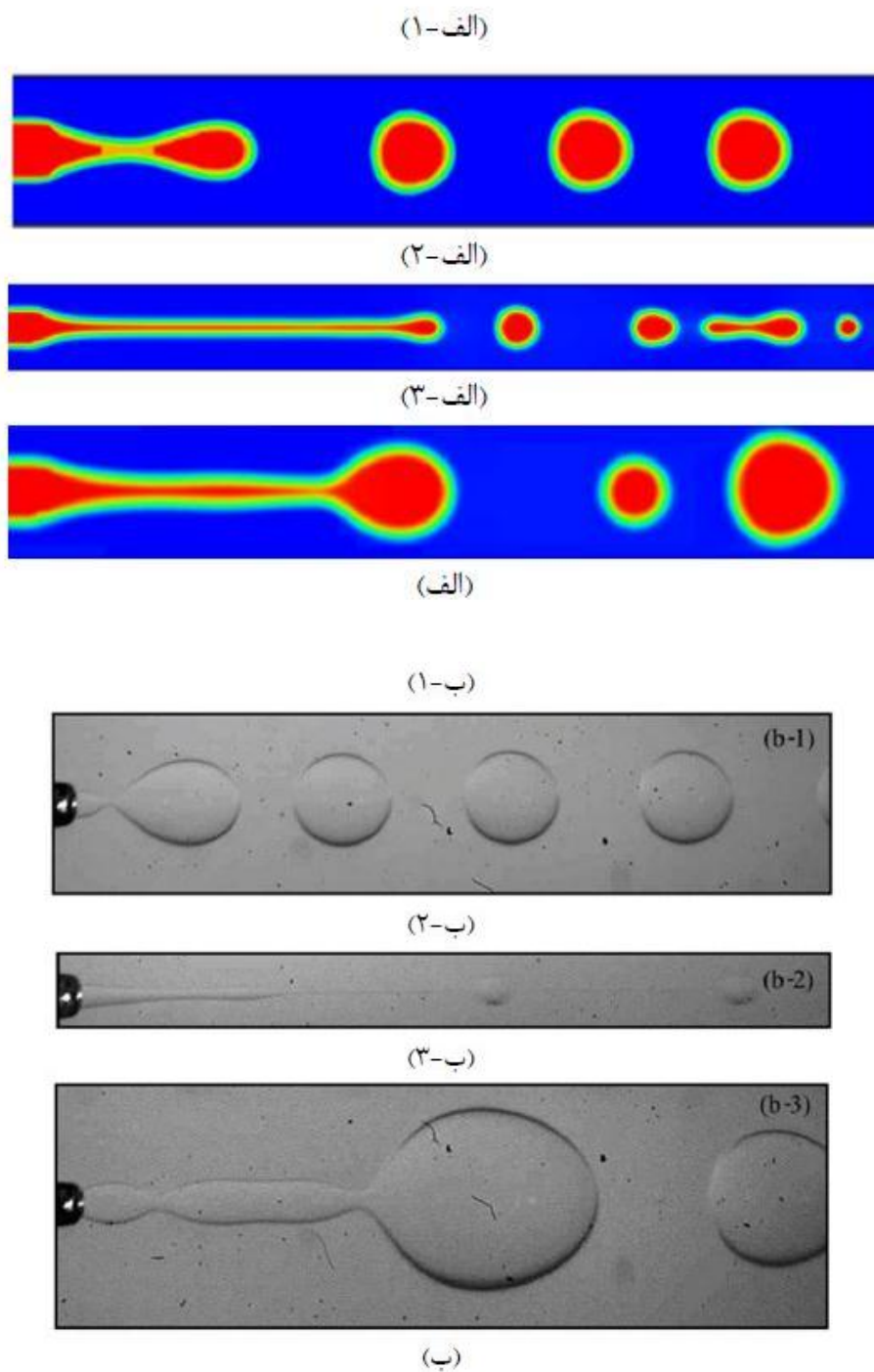
علیزاده و همکاران [۲۰]، از مدل تابع مشخصه‌هی برای شبیه‌سازی تشکیل قطره در فرآیند امولسیون (ترکیب دو سیال مخلوط نشدنی) در میکروکانال هم‌محور (کو-فلوئینگ) که دارای هندسه-ای پیچیده با سه ورودی می‌باشد، استفاده کردند. آن‌ها با استفاده از مدل‌سازی ریاضی، فرآیند تشکیل قطره را تحت گستره وسیعی از تغییرات دبی جریان، نسبت لزجت و کشش سطحی بین دو فاز شبیه-سازی کردند. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که دو نوع رژیم جریان چکه کردن<sup>۱</sup> و جتی<sup>۲</sup> (جتی باریک و جتی پهن) بر رفتار جریان در فرآیند تشکیل قطره حاکم است. شکل ۱-۶ نشان‌دهنده مطابقت خوب نتایج با مشاهدات تجربی است. آن‌ها دریافتند که، رژیم چکه کردن حالتی از فرآیند تشکیل قطره می‌باشد که در آن قطره‌ها به صورت تناوبی، مجزا از هم و با فرکانس ثابت از نوک جریان کانال میانی تشکیل می‌شوند. این رژیم در نسبت سرعت‌های پایین دو فاز اتفاق می‌افتد (شکل ۱-۶-الف-۱)، شکل ۱-۶-ب-۱). یکی دیگر از انواع رژیم‌های جریان حاکم بر فرآیند تشکیل قطره، رژیم جتی نام دارد که، در آن سیال جداشونده از کانال میانی، در ناحیه‌ای دورتر از نوک نازل، جدا شده و تبدیل به قطره می‌شود که نتایج آن‌ها نشان می‌داد که این رژیم در سرعت‌های بالای هر دو سیال رخ می‌دهد. در حالتی که سرعت سیال کانال بیرونی بالا باشد، قطره‌ها در ناحیه انتهایی جت شکل گرفته و جت باریک تشکیل می‌شود (شکل ۱-۶-الف-۲، شکل ۱-۶-ب-۲). نوع دوم رژیم جتی با افزایش دبی جریان سیال کانال میانی رخ می‌دهد، یک جت با انتهای پیاپی شکل و کشیدگی پهن تشکیل می‌شود و جدایش قطره در انتهای جت رخ می‌دهد (شکل ۱-۶-الف-۳، شکل ۱-۶-ب-۳). برخلاف رژیم چکه کردن، هر دو حالت رژیم جتی ناپایدار بوده و قطره‌های غیر یکسان با اندازه‌های بزرگ و کوچک

---

<sup>1</sup> Dripping

<sup>2</sup> Jetting

تشکیل می‌شوند.

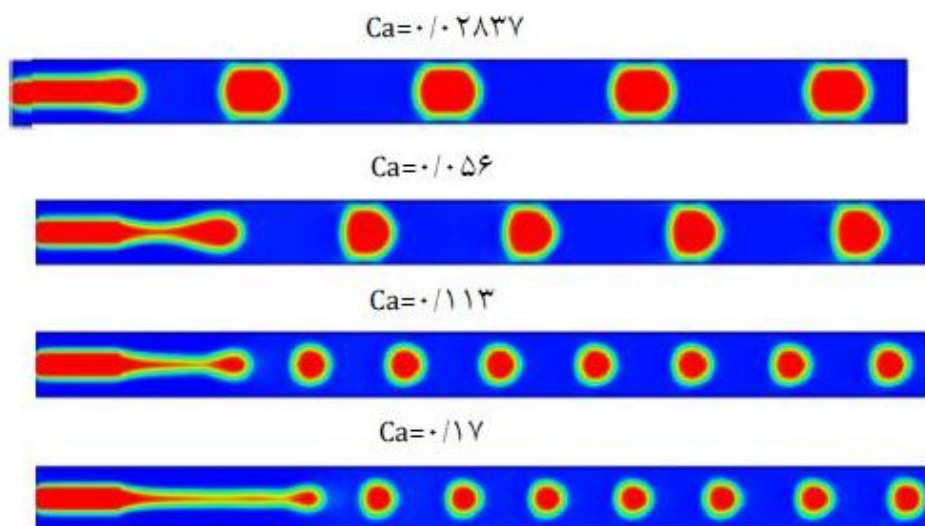


شکل ۱-۶. رژیم‌های جریان تشکیل قطره در میکروکانال هم-محور: (الف) نتایج عددی، (ب) مشاهدات آزمایشگاهی [۲۱].

همچنین آن‌ها در بررسی عدد موینگی دریافتند که در یک نسبت سرعت ثابت با افزایش عدد

مویبگی اندازه قطره‌ها کاهش یافته و فرکانس تشکیل افزایش می‌یابد. به‌طور کلی در بررسی رفتار جریان در میکروکانال‌ها، هنگامی که عدد مویبگی کوچک باشد ( $Ca < 0.1$ ) تشکیل قطره تحت تأثیر فشار اطراف خود می‌باشد. به عبارت دیگر قطره‌ها عمدتاً توسط اختلاف فشار بین دو فاز پیوسته و جداشونده بریده می‌شوند. در این حالت قطره‌ها بزرگتر از عرض کانال بوده و اصطلاحاً اسلاگ<sup>۱</sup> تشکیل می‌شود.

هنگامی که عدد مویبگی بزرگ می‌شود ( $Ca > 0.1$ ) نیروی لزجت به اندازه کافی قوی می‌باشد تا بر نیروی کشش سطحی غلبه کند و قطره‌ها اغلب با استفاده از ناپایداری برشی شکل می‌گیرند. نیروی کشش سطحی در این حالت به اندازه کافی قوی نیست تا بر نیروی برشی اعمالی از فاز پیوسته غلبه کند در نتیجه فاز جداشونده تحت تأثیر این نیروی اعمالی به صورت یک جریان باریک کشیده می‌شود. در نهایت قطره‌هایی کروی با شعاع‌هایی بسیار کوچک‌تر از عرض کانال در نوک فاز کشیده شده، تشکیل می‌شوند (شکل ۷-۱).

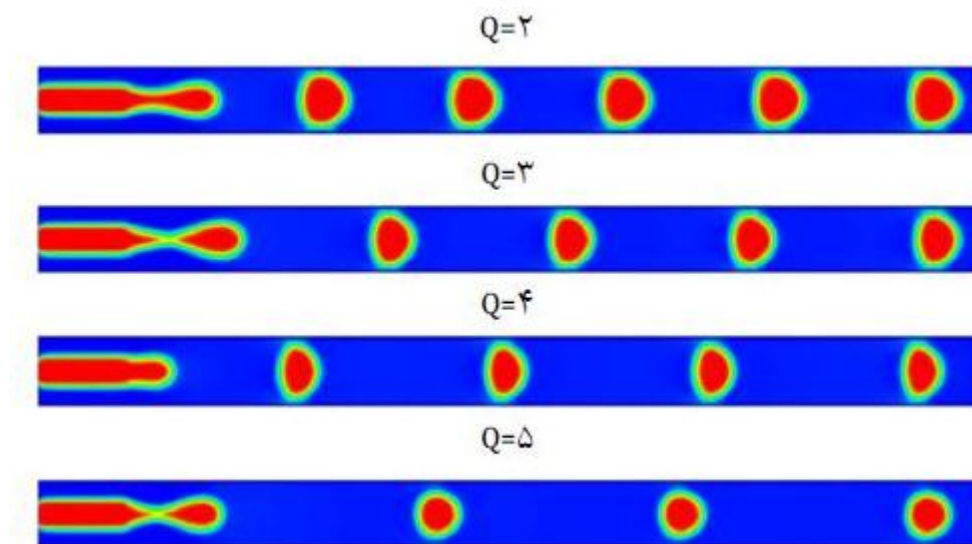


شکل ۷-۱: از نتایج علیراده- تغییرات رفتار جریان در میکروکانال هم‌محور برای نسبت سرعت ثابت بین فازها ( $Q_d/Q_c=2$ ) و در اعداد مختلف مویبگی ( $Ca$ )

آنها تأثیر نسبت سرعت بین فازها را بر فرآیند تشکیل و اندازه قطره‌ها بررسی کرده و به این

<sup>1</sup> Slug

نتیجه رسیدند که در یک عدد موینگی ثابت، با افزایش نسبت جریان، اندازه قطره‌ها کاهش می‌یابد زیرا با افزایش سرعت جریان فاز پیوسته، میدان فشار پشت قطره زمان کمتری برای شکل گرفتن دارد و در نتیجه قطره‌ها زودتر جدا شده و قطر قطره‌ها کاهش می‌یابد. (شکل ۸-۱)



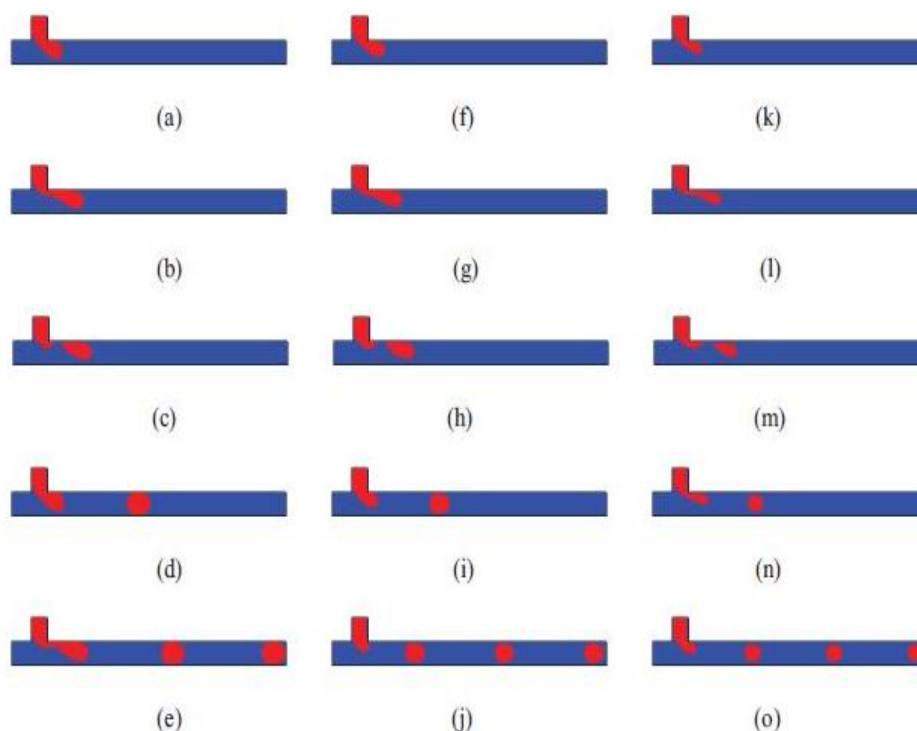
شکل ۸-۱: تغییرات رفتار جریان در میکروکانال هم‌محور برای مقدار ثابت  $Ca=0.065$  و در نسبت‌های گوناگون سرعت [۲۱].

در تحقیقات پیشین هر دو سیال مورد بررسی، آب و روغن، نیوتنی فرض شده بودند. در حالی که در بسیاری از موارد، سیال جاری داخل کانال میکرو، یک سیال غیرنیوتنی است و باید خواص رئولوژیکی آن در نظر گرفته شود.

کو و همکاران [۲۲] تشکیل قطرات روغن را در سیال فاز پیوسته در میکروکانال به صورت عددی بررسی کردند و به این نتیجه رسیدند که، رئولوژی سیال پیوسته در شکل‌گیری و اندازه قطره تأثیر بسزایی دارد.

سانگ و همکاران [۲۳] اثرات لزجت را برای سیال توانی و بینگهام روی تشکیل قطره در میکروکانال T شکل بررسی کردند.

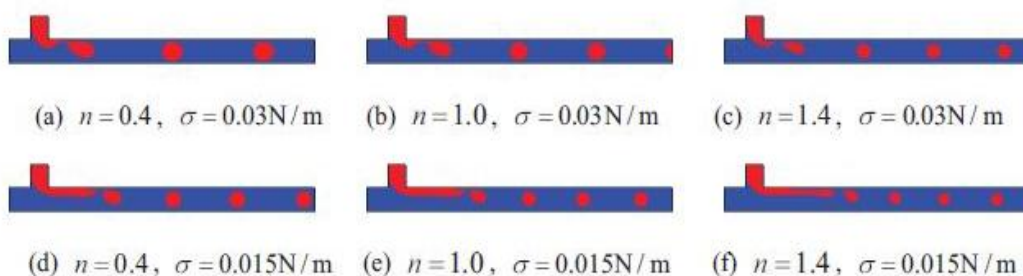
تانگ و همکاران [۲۴]، تشکیل قطرات نیوتنی و غیرنیوتنی را در یک سیال پیوسته غیرنیوتنی در میکروکانال‌های T شکل و میکروکانال هندسه متقاطع با استفاده از روش انرژی آزاد بررسی کردند. آن‌ها تأثیر ضریب غیرنیوتنی توانی ( $n$ )، لزجت ( $\mu$ ) و کشش سطحی ( $\sigma$ ) را بر تشکیل قطرات مطالعه کردند. آن‌ها به این نتیجه رسیدند که با افزایش ضریب غیرنیوتنی مدل توانی در سیال پیوسته، لزجت سیال پیوسته افزایش یافته که این مانع از رشد قطره در سیال پیوسته می‌شود. بنابراین با افزایش ضریب غیرنیوتنی توانی در سیال پیوسته، اندازه قطره کاهش می‌یابد و فرکانس تشکیل قطرات افزایش خواهد یافت.



شکل ۹-۱: تأثیر ضریب توانی سیال فاز پیوسته بر فرآیند تشکیل قطرات. ستون اول ((a) - (e)) برای  $n = 0.4$ ، ستون دوم ((f) - (j)) برای  $n = 1$ ، ستون سوم ((k) - (o)) برای  $n = 1/4$ . [۲۴].

آن‌ها همچنین دریافتند که با کاهش اندازه کشش سطحی، طول قطرات کاهش می‌یابد (شکل

۱۰-۱).



شکل ۱-۱۰: تشکیل قطرات در سیال غیرنیوتنی به ازای کشش سطحی‌های مختلف [۲۴].

در مجموع نتایج آن‌ها نشان می‌داد که فرض سیال نیوتنی برای سیالات غیرنیوتنی چون روغن، در شبیه‌سازی‌های عددی فرض مناسبی نیست و باید رئولوژی غیرنیوتنی را در محاسبات عددی در نظر گرفت. همچنین روش شبکه بولتزمن پتانسیل خوبی برای بررسی تشکیل قطره در جریان‌های چند فازي دارد.

### ۳-۱ نوآوری و اهمیت مطالعه حاضر

هدف این پژوهش، مطالعه فرآیند تشکیل قطره نیوتنی و غیر نیوتنی در سیال نیوتنی با استفاده از روش شبکه بولتزمن دوفازی در میکروکانال‌ها می‌باشد. تاکنون کارهای آزمایشگاهی و شبیه‌سازی‌هایی برای بررسی دینامیک جدایش و تشکیل قطرات و تأثیر پارامترهای مختلف انجام گرفته اما کارهای کمی در رابطه با بررسی دینامیک جدایش با استفاده از روش بولتزمن شبکه‌ای و تلفیق آن با انرژی آزاد انجام گرفته است. در این مطالعه از تلفیق روش بولتزمن شبکه‌ای با روش انرژی آزاد برای بررسی دینامیک تشکیل قطره و اثر پارامترهای مختلف بر زمان و طول جدایش قطره استفاده شده است. همچنین اثر این پارامترها بر اندازه قطرات تشکیل‌شده، بررسی گردید. در تمام این پژوهش‌ها در زمینه میکروکانال‌ها، هر دو سیال مورد بررسی نیوتنی فرض شده بودند درحالی‌که در بسیاری از موارد، سیال جاری داخل کانال میکرو، یک سیال غیرنیوتنی است و باید خواص رئولوژیکی برای آن در نظر گرفته شود. از آنجایی که تاکنون کارهای کمی در رابطه با استفاده از شبکه بولتزمن برای جریان‌های چند فازي غیرنیوتنی انجام شده، در ادامه تلاش شده تا قابلیت روش شبکه بولتزمن (مدل شان و

چن) را برای شبیه‌سازی تشکیل قطره غیریوتنی در سیال نیوتنی در میکروکانال هم‌محور نشان داده شود. در این مطالعه اثر پارامترهای مختلف و خواص رئولوژیکی بر زمان و طول جدایش قطرات و اندازه قطرات بررسی شده است.

## ۴-۱ محتوای فصل‌های بعد

در فصل دوم این مطالعه روش بولتزمن شبکه‌ای به طور کامل معرفی می‌شود. در این فصل ابتدا معرفی جامعی از روش شبکه بولتزمن انجام شده و سپس به توضیح دو مدل استفاده شده در این شبیه‌سازی، شان و چن و انرژی آزاد پرداخته می‌شود. همچنین مدل‌های غیریوتنی و شبیه‌سازی سیال غیریوتنی در روش بولتزمن بیان شده است. در انتهای فصل، توضیح جامعی در مورد شرایط مرزی و نحوه اعمال آن‌ها در هر یک از مدل‌ها، داده می‌شود.

در فصل سوم تشکیل و جدایش قطره در جریان دوفازی درون میکروکانال T شکل با استفاده از مدل انرژی آزاد بیان می‌شود. در این فصل به توضیح دینامیک جدایش و تشکیل قطره در میکروکانال T شکل، رژیم‌های شناسایی شده و تأثیر پارامترها و اعداد بی‌بعد در هر یک از این رژیم‌ها پرداخته می‌شود.

در فصل چهارم نیز تشکیل و جدایش قطره غیر نیوتنی در جریان دوفازی درون میکروکانال هم‌محور با استفاده از مدل شان و چن بررسی می‌شود. در این فصل برای شبیه‌سازی سیال غیریوتنی از مدل کاریاسودا استفاده شده و تشکیل قطره غیریوتنی در سیال نیوتنی در یک میکروکانال هم‌محور و تأثیر اعداد بی‌بعدی همچون عدد موینگی و نسبت نرخ جریان بررسی می‌شود



## ۲ فصل دوم: روش تحقیق

## ۱-۲ کلیات روش بولتزمن

برای تحلیل جریان سیال روش‌های مختلفی وجود دارد. نخستین روشی که برای حل هر مسئله‌ای به ذهن می‌رسد، حل تحلیلی معادلات حاکم بر آن مسئله است. اما برای بسیاری از پدیده‌های طبیعی و صنعتی شامل جریان سیال، حل تحلیلی وجود ندارد. لذا همگام با پیشرفت فناوری و توسعه کامپیوترها، روش‌های عددی حل معادلات حاکم بر جریان مورد توجه قرار گرفتند. روش‌های اختلاف محدود، حجم محدود و اجزای محدود از جمله روش‌های متداول عددی در تحلیل جریان هستند. در این روش‌ها معادلات ناویر-استوکس به عنوان معادلات حاکم بر جریان در نظر گرفته می‌شود و با گسسته سازی، جبری سازی، خطی سازی و حل دستگاه معادلات، جریان سیال تحلیل می‌شود. این معادلات تنها بر رژیم جریان پیوسته حاکم هستند. پیوستگی جریان با عدد بی بعد نودسن<sup>۱</sup> سنجیده می‌شود. رژیم جریانی که عدد نودسن آن، نسبت طول آزاد میانگین مولکولی به مقیاس طول مشخصه‌ی جریان، کمتر از  $0/1$  باشد پیوسته در نظر گرفته می‌شود. بنابراین با کوچک شدن ابعاد مسئله و در نتیجه افزایش عدد نودسن، نمی‌توان از فرض پیوسته بودن جریان و روابط حاکم بر جریان که با استفاده از این فرض به دست آمده‌اند استفاده کرد.

جریان در میکروکانال‌ها نمونه‌ای از این مسائل است. یکی از روش‌های تحلیل این نوع جریان‌ها، روش‌های شبیه‌سازی برخورد مولکولی یا دینامیک مولکولی است. در این روش‌ها برخوردهای بین مولکولی شبیه‌سازی می‌شود و با کمک قانون دوم نیوتن، مکان و سرعت هر مولکول در هر لحظه با استفاده از مکان و سرعت آن مولکول در لحظه قبل محاسبه می‌گردد و در پایان شبیه‌سازی، مجموعه‌ی کاملی از اطلاعات در مورد موقعیت، سرعت و انرژی تک تک مولکول‌ها و توزیع آن‌ها به دست می‌آید که با تحلیل آن‌ها نسبت به زمان می‌توان پارامترهایی نظیر دما و فشار را بررسی کرد.

همان‌طور که می‌توان حدس زد در این روش‌ها مقدار محاسبات بسیار زیاد است. این مشکل

---

<sup>۱</sup>Knudsen

باعث می‌شود که بررسی رفتار برخوردهای مولکولی از دیدگاه آماری، به عنوان روش مناسب‌تر در نظر گرفته شود. در حال حاضر یکی از کارآمدترین روش‌ها برای شبیه‌سازی جریان‌های با عدد نودسن بالا، شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو<sup>۱</sup> است. در این روش مولکول‌هایی با خواص یکسان نظیر دما و سرعت، به صورت یک ذره در نظر گرفته می‌شود و به جای بررسی تک‌تک مولکول‌ها، برخورد این ذرات شبیه‌سازی می‌شود. در نهایت خواص میکروسکوپی جریان با تحلیل آماری به دست می‌آیند. در این روش هر چند حجم عملیات نسبت به روش‌های دینامیک مولکولی کمتر می‌باشد، ولی همچنان چشم‌گیر است. بنابراین محدودیت دیگری بر روی روش‌های دینامیک مولکولی اعمال شد و روش‌های دیگری به نام روش‌های شبکه‌ای ایجاد گردید. در این روش‌ها درجات آزادی ذرات محدود شده است یعنی ذرات تنها اجازه دارند در جهت‌های خاصی از میدان حرکت کنند. اگرچه در این روش‌ها نوع ذرات و قواعد برخورد، در سطح میکروسکوپی، مطابق با واقعیت فیزیکی نیست ولی اثبات می‌گردد که الگوریتم‌های آن‌ها در سطح میکروسکوپی منجر به ارضای معادلات بقای جرم و ممنتوم می‌گردد.

آغاز شبکه بولتزمن از سال ۱۹۸۰ با کار فریش و همکاران<sup>۲</sup> آغاز شد. پس از کمک لاد<sup>۳</sup> و تحقیق روی رفتار مرزهای جامد و تلاش‌های فراوان دیگران، روش شبکه بولتزمن به یک روش قدرتمند تبدیل شده و مکرراً به عنوان یک روش محاسباتی به دلیل سادگی و کارایی محاسباتی به کار برده شد. از لحاظ تاریخی، روش شبکه بولتزمن از شبکه گازی ماشینی<sup>۴</sup> سرچشمه گرفته و بعداً از معادله بولتزمن پیوسته استخراج شده است. روش شبکه بولتزمن بر پایه مدل میکروسکوپی و معادله جنبشی مزوسکوپی<sup>۵</sup> استوار است، که مجموعه رفتار ذرات در یک سیستم را در شبیه‌سازی در نظر می‌گیرد. در سال‌های اخیر، این روش، به عنوان یک الگوریتم عددی مطلوب برای شبیه‌سازی جریان های سیال و مدل‌سازی فیزیکی پدیده‌های متفاوتی، توسعه یافته است. در واقع این روش، پلی است

---

<sup>۱</sup> Direct simulation of Monte Carlo

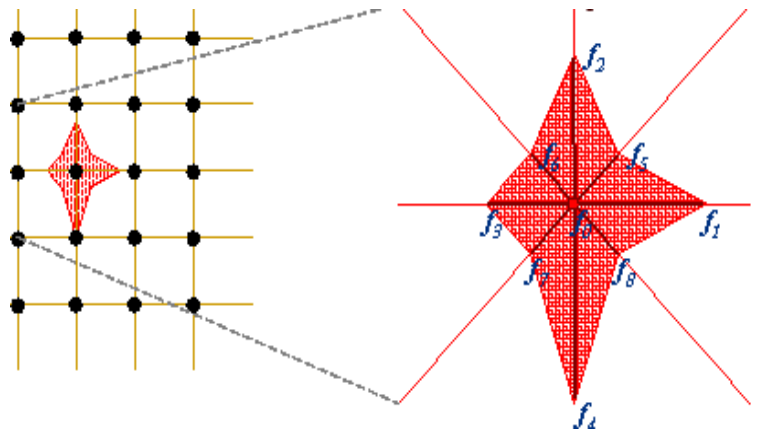
<sup>۲</sup> Frish

<sup>۳</sup> Ladd

<sup>۴</sup> lattice gas automaton(LGA)

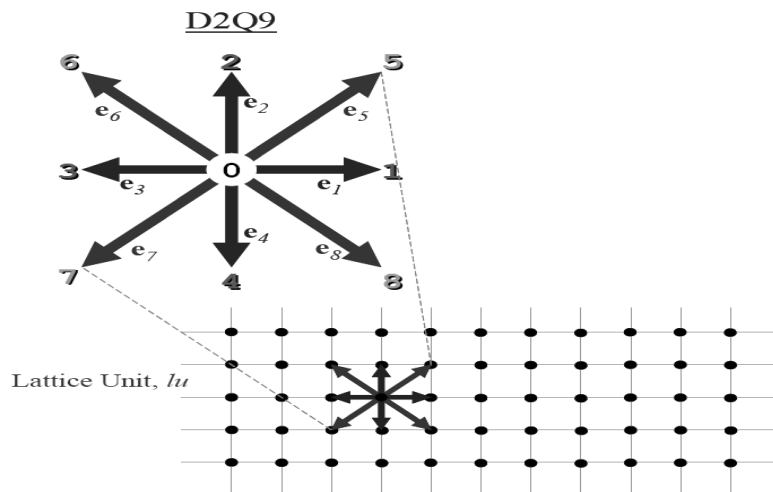
<sup>۵</sup> Mesoscopi

که دو دیدگاه میکروسکوپی و ماکروسکوپی را به یکدیگر مرتبط می‌نماید. این روش به ویژه برای مدل‌سازی شرایط مرزی پیچیده‌ای همچون محیط‌های متخلخل واقعی [۲۵]، جریان‌های چندفازی یا چندجزیی [۲۶]، جریان‌های آشفته [۲۷]، جریان در نانو یا میکروکانال‌ها [۲۸] و جریان سیالات غیرنیوتنی [۲۹، ۳۰] مناسب است.



شکل ۲-۱ نمایش ابر میکروسکوپی تابع توزیع ذره [۳۱]

روش شبکه بولتزمن روشی با اساس سینتیکی برای شبیه‌سازی جریان سیال است. این روش جریان سلول را به بخش‌های ذرات سیال تقسیم می‌کند که می‌تواند ساکن بوده یا به یکی از گره‌های همسایه حرکت کند. در این بخش مدل شبکه بولتزمن دو بعدی  $D_2Q_9$  (D2 نشان‌دهنده دو بعدی و  $Q_9$  بیانگر ۹ جهت می‌باشد) غیر قابل تراکم روی یک شبکه یکنواخت شرح داده می‌شود. شبکه بولتزمن از سه دسته ذره تشکیل شده است: ذرات ساکن که در نقاط شبکه ساکن هستند، ذراتی که در امتداد جهت‌های مختصات حرکت می‌کنند و ذراتی که در امتداد قطر حرکت می‌کنند.



شکل ۲-۲: مدل D<sub>2</sub>Q<sub>9</sub>

برای هر گره از شبکه بولتزمن در مکان  $x$  و زمان  $t$ ، یک تابع توزیع ذره  $f_i(x, t)$  وجود دارد که بیانگر احتمال حضور ذره در مسیر  $i$  می‌باشد. لذا معادله بولتزمن را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$f_i(x + e_i \delta t, t + \delta t) = f_i(x, t) + \Omega_i(x, t) \quad (۱-۲)$$

از آنجا که هدف متداول روش‌های شبکه‌ای، مدل‌سازی دینامیک ماکروسکوپی می‌باشد، اپراتور برخورد دقیق بیش از حد لزوم پیچیده بوده و بنابراین از لحاظ عددی ناکارآمد می‌باشد. یک تعریف ساده برای اپراتور برخورد بر اساس مدلی با نام اختصاری LBGK<sup>۱</sup> می‌باشد که در آن توزیع ذرات مجازی همواره نزدیک به توزیع تعادلی باقی می‌ماند و به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\Omega_i = -\frac{1}{\tau} (f_i - f_i^{eq}). \quad (۲-۲)$$

فرض بر این است که اپراتور برخورد فقط تابع توزیع اولیه و توزیع تعادلی می‌باشد. از طرف دیگر توزیع تعادلی فقط تابع سرعت و دانسیته موضعی می‌باشد. بنابراین توزیع جدید با استفاده از توزیع اولیه و سرعت و دانسیته موضعی قابل محاسبه است. در این مدل تأثیر متقابل ذراتی که در آستانه

<sup>۱</sup> Lattice boltzmann Bhatnagar–Gross–Krook relaxation

برخورد هستند در نظر گرفته نشده است.

$$\rho \vec{u} = \sum_i \vec{e}_i f_i \quad (3-2)$$

$$\rho = \sum_i f_i \quad (4-2)$$

در این مدل، سرعت ذرات سیال منفصل به گونه ای است که در هر گام زمانی می‌توانند از یک نقطه به نقطه دیگر حرکت کنند. همان‌طور که در شکل ۲-۲ مشاهده می‌شود، ۸ ذره متحرک و یک ذره ساکن در این مدل وجود دارد. این سرعت‌ها را می‌توان برای حالت دو بعدی به صورت زیر نوشت:

$$e_i = \begin{cases} (i, i) & i = 0 \\ \left( \cos \left[ \frac{\pi(i-1)}{2} \right], \sin \left[ \frac{\pi(i-1)}{2} \right] \right) c & i = 1:4 \\ \sqrt{2} \left( \cos \left[ \frac{\pi \left( i - \frac{9}{2} \right)}{2} \right], \sin \left[ \frac{\pi \left( i - \frac{9}{2} \right)}{2} \right] \right) c & i = 5:8 \end{cases} \quad (5-2)$$

تابع توزیع تعادلی به فرم زیر می‌باشد:

$$f_i^{eq} = w_i \rho_i \left[ 1 + 3 \frac{e_i \cdot u}{c^2} + \frac{9}{2} \frac{(e_i \cdot u)^2}{c^4} - \frac{3}{2} \frac{u^2}{c^2} \right] \quad (6-2)$$

که

$$w = \begin{cases} \frac{4}{9} & i = 0 \\ \frac{1}{9} & i = 1:4 \\ \frac{5}{36} & i = 5:8 \end{cases} \quad (7-2)$$

توابع وزنی هستند.

## ۲-۳-۲- لزجت

لزجت سینماتیکی سیال ( $\nu$ ) در روش شبکه بولتزمن به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\nu = (\tau_\nu - 0.5)/3 \quad (۸-۲)$$

از معادله (۸-۲) می‌توان ملاحظه نمود در صورتی که  $\tau_\nu < ۱/۲$  باشد، برای لزجت عدد منفی خواهیم داشت، بنابراین باید عدد آرامش بزرگتر از  $۰/۵$  در نظر گرفته شود. با نزدیک شدن این پارامتر به  $۰/۵$  مشکلاتی در روند حل عددی ایجاد می‌گردد. بهترین مقدار برای زمان آرامش  $\tau_\nu = ۱$  است که برای مدل  $D_2Q_9$ ، لزجت  $\nu = ۱/۶$ ،  $\tau_\nu = ۱$  را نتیجه می‌دهد.

## ۲-۲ سیستم‌های چندفازی

یکی از مسائلی که به طور عمده در مکانیک سیالات مورد بررسی قرار می‌گیرد، مسائلی است که در آنها تنها یک سیال مورد بررسی قرار نمی‌گیرد و با چند سیال در آن محیط مواجه می‌شویم. این شاخه از سیالات به عنوان سیالات چندفازی مطرح می‌شوند. از جمله مشکلات موجود در این مسائل، وجود سطح مشترک بین چند فاز می‌باشد. این سطح مشترک سبب ناپیوستگی در کمیت‌های موجود در مرز مشترک می‌شود. این ناپیوستگی‌ها مدل‌سازی و اعمال شرایط مرزی در این مرزها را سخت و پیچیده می‌کند. برای شبیه‌سازی جریان‌های چندفازی به کمک دینامیک سیالات محاسباتی نیاز است تا از مدل‌هایی که در آن کسر حجمی سیال به طور دقیق مدل می‌شود، استفاده نمود. به همین دلیل مدل‌سازی سطح مشترک بین چندفاز بخصوص در مواقع بسیار حساس از قبیل شناسایی حرکت قطره و نیز رژیم‌های حاکم بر آن بسیار پیچیده به نظر می‌رسد [۶، ۱۳، ۳۵]. روش‌های ردیابی مرز مشترک و تسخیر مرز مشترک به عنوان دو نوع رهیافت مهم برای شبیه‌سازی جریان‌های چندفازی با استفاده از روش‌های دینامیک سیالات محاسباتی هستند. روش‌های انتگرال مرزی و المان محدود روش‌های عمومی برای ردیابی مرز مشترک می‌باشند [۲۰]. اما همان‌طور که در ابتدای فصل هم بدان اشاره شد

یکی از قابلیت‌های حائز اهمیت روش بولتزمن توانایی آن در مدل‌سازی جریان‌های چندفازی است. در این پایان‌نامه تلاش شده تا با استفاده از دو مدل مختلف از این روش، مدل شان و چن و مدل انرژی آزاد، قابلیت این روش را در مدل‌سازی جریان‌های چندفازی نشان دهیم.

## ۱-۲-۲ مدل شان و چن

مدل پتانسیل بین مولکولی (شان و چن) شرایطی را فراهم می‌کند که با یک فرآیند یکپارچه، فصل مشترک گاز و مایع، خیس شدن سطح جامد و نیز حرکت مربوط به فاز میانی در هندسه‌های پیچیده با ظرافت و سهولت بیشتری نسبت به روش‌هایی نظیر دنبال کردن سطح مشترک یا روش‌های تصویری نظیر دنبال کردن جبهه، VOF یا مجموعه سطوح، بررسی شود [۳۶]. در اینجا از معادله بولتزمن شبکه‌ای مدل دوفازی دومؤلفه‌ای شان و چن استفاده شده است [۳۲, ۳۷]. در این مدل برای هر فاز طبق رابطه (۹-۲) تابع توزیع مجزایی تعریف می‌شود که در آن  $f_i^\sigma(x, t)$  تابع توزیع مؤلفه  $\sigma$  ام در جهت  $i$  ام می‌باشد،  $\sigma$  می‌تواند مقادیر یک یا دو را اختیار کند.

$$f_a^\sigma(x + e_a \Delta t, t + \Delta t) = f_a^\sigma(x, t) - \frac{[f_a^\sigma(x, t) - f_a^{\sigma, eq}(x, t)]}{\tau_\sigma} \quad (9-2)$$

معادله (۹-۲) از دو بخش تشکیل می‌شود: قسمت نخست مربوط به مرحله جاری شدن و قسمت دوم مربوط به مرحله برخورد است. براین اساس مرحله جاری شدن طبق رابطه (۱۰-۲) نوشته می‌شود که در آن مقادیر  $f_i$  ها را در یک لحظه پس از جاری شدن در نقاط مجاور به دست می‌دهد که ترتیب این عملیات اهمیتی نداشته و تنها توالی آنها مهم است.

$$f_a^\sigma(x + e_a \Delta t, t + \Delta t) = f_a^\sigma(x, t) \quad (10-2)$$

لزجت سینماتیکی سیال طبق رابطه (۱۱-۲) تعریف می‌شود که در آن  $\tau_\sigma$  زمان رهاسازی منفرد مؤلفه  $\sigma$  ام می‌باشد.

$$\nu_\sigma = (\tau_\sigma - 0.5)/3 \quad (11-2)$$

تابع توزیع تعادلی  $f_i^{\sigma,eq}(x,t)$  طبق رابطه (۱۲-۲) به دست می‌آید که در  $w_i$  و  $\vec{c}_i$  ها به ترتیب ضرایب وزنی و سرعت‌های گسسته برای شبکه D2Q9 می‌باشد که طبق معادله (۱۳-۲) تعریف می‌شود.

$$f_i^{\sigma,eq}(\vec{x},t) = w_i \rho_\sigma \left[ 1 + 3\vec{e}_i \cdot \vec{u}_\sigma^{eq} + \frac{9}{2} (\vec{e}_i \cdot \vec{u}_\sigma^{eq})^2 - \frac{3}{2} \vec{u}_\sigma^{eq} \cdot \vec{u}_\sigma^{eq} \right] \quad (۱۲-۲)$$

$$w_i = \begin{cases} \frac{4}{9} & , \quad i = 0 \\ \frac{1}{9} & , \quad i = 1,2,3,4 \\ \frac{1}{36} & , \quad i = 5,6,7,8 \end{cases} \quad (۱۳-۲)$$

$$c_0 = 0$$

$$c_i = \left[ \cos\left((i-1)\frac{\pi}{2}\right), \sin\left((i-1)\frac{\pi}{2}\right) \right], i = 1,2,3,4$$

در معادله (۱۲-۲)  $\vec{u}$  و  $\rho$  کمیت‌های سرعت و چگالی ماکروسکوپیک هستند که از رابطه (۱۳-۲) به دست می‌آیند.

$$\rho = \sum_i f_i = \sum_i f_i^{eq} \quad (۱۴-۲)$$

$$\rho \vec{u} = \sum_i \vec{c}_i f_i = \sum_i \vec{c}_i f_i^{eq} \quad (۱۵-۲)$$

سرعت تعادلی  $\vec{u}_\sigma^{eq}$  در رابطه (۱۲-۲) طبق معادله (۱۷-۲) به دست می‌آید که در آن  $\vec{u}$  سرعت ترکیبی نامیده می‌شود و مطابق معادله (۱۶-۲) تعریف می‌شود.

$$\vec{u} = \frac{\sum_\sigma \left( \sum_i \frac{f_i^\sigma \vec{e}_i}{\tau_\sigma} \right)}{\sum_\sigma \frac{\rho_\sigma}{\tau_\sigma}} \quad (۱۶-۲)$$

$$\vec{u}_\sigma^{eq} = \vec{u} + \frac{\tau_\sigma \vec{F}_\sigma}{\rho_\sigma} \quad (۱۷-۲)$$

در رابطه (۱۷-۲)  $\vec{F}_\sigma = \vec{F}_{c,\sigma} + \vec{F}_{ads,\sigma} + \vec{F}_{body,\sigma}$  کل نیروهای وارد بر سیال مؤلفه  $\sigma$  ام می‌باشد که

$\vec{F}_{c,\sigma}$  نیروی مربوط به اندرکنش داخلی دو سیال و  $\vec{F}_{ads,\sigma}$  نیروی بین سیال و جسم جامد و  $\vec{F}_{body,\sigma}$  نیروهای حجمی می‌باشند. مقادیر  $\vec{F}_{c,\sigma}$  به کمک معادله (۱۸-۲) به دست می‌آید.

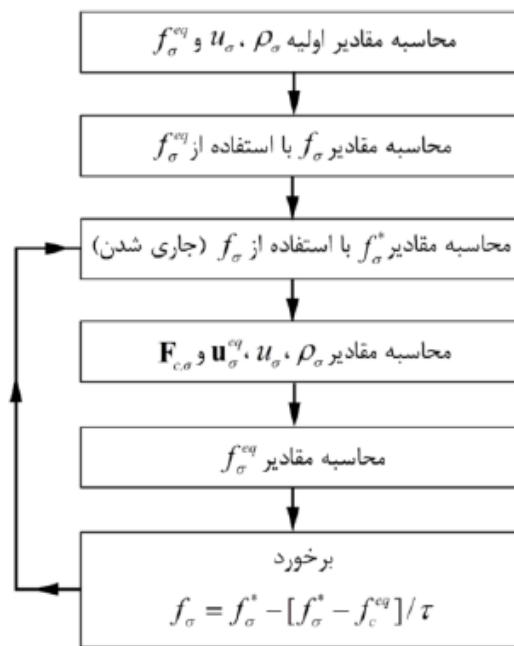
$$\vec{F}_{c,\sigma} = -G_c \rho_\sigma(\vec{x}, t) \sum_i w_i \rho_\sigma^-(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta t, t) \vec{e}_i \quad (۱۸-۲)$$

که در آن  $\Psi^\sigma$  برابر با چگالی انتخاب می‌شود و  $G_{\sigma\bar{\sigma}}$  نشان‌دهنده قدرت برهمکنش دو سیال می‌باشد.  $\vec{F}_{ads,\sigma}$  نیروی بین سیال-جامد است که توسط رابطه (۱۹-۲) به دست می‌آید.

$$\vec{F}_{ads,\sigma} = -G_{ads} \rho(\vec{x}, t) \sum_i w_i s(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta t) \vec{e}_i \quad (۱۹-۲)$$

در رابطه (۱۹-۲) مقدار پارامتر  $s(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta t)$  هنگامی که روی سطح جامد قرار دارد، برابر با یک، و هنگامی که در سیال باشد برابر با صفر خواهد بود. پارامتر  $G_{ads}$ ، قدرت برهمکنش بین جامد و سیال می‌باشد.

شکل ۳-۲ مراحل شبیه‌سازی و حل عددی جریان دوفاز به کمک مدل شان‌وچن دوفازی را نشان می‌دهد [۳۶]. به این ترتیب که ابتدا برای هر فاز تابع توزیع مجزای اولیه‌ای حدس می‌زنیم سپس با استفاده از این حدس اولیه، چگالی، سرعت و تابع توزیع تعادلی را در هر فاز محاسبه می‌کنیم و با این تابع توزیع تعادلی‌ها به محاسبه تابع توزیع در هر فاز می‌پردازیم. سپس نوبت به مرحله جاری-شدن می‌رسد و در این مرحله توابع توزیع به‌روز می‌شوند و با استفاده از این توابع به‌روز مجدداً مقدار چگالی، سرعت، سرعت تعادلی و مقدار نیروها را محاسبه می‌کنیم و با این نیروها به محاسبه توابع توزیع تعادلی پرداخته و با این توابع توزیع به مرحله برخورد می‌رویم و با اتمام این مرحله یک چرخه کامل از این چرخه را طی کردیم و این چرخه را تا همگرا شدن ادامه می‌دهیم.



شکل ۲-۳: طرحواره شبیه‌سازی جریان به کمک مدل شان‌وچن دومؤلفه‌ای

## ۲-۲-۲ مدل انرژی آزاد

مدل دیگری که در این تحقیق از آن استفاده شده طرحی از شبکه بولتزمن است که توسط سئیت [۳۸] توسعه یافته و سپس توسط لو و ژانگ [۶] تکمیل شد. یکی از ویژگی‌های بارز این مدل استفاده از تابع انرژی آزاد است که نه تنها خواص تعادلی سیستم‌های چند فاز را کنترل می‌کند که به شدت دینامیک سیستم‌های چند فاز را نیز تحت تأثیر قرار می‌دهد. در این مدل تغییرات و فروپاشی سطح مشترک فازها به طور طبیعی اتفاق می‌افتد که می‌تواند توسط تئوری‌های ترمودینامیکی نظیر معادله کان-هیلارد [۳۹] توصیف شود. از مزایای این روش ابقای ممنتوم محلی، سرعت‌های کاذب پایین به خصوص در اطراف فصل مشترک و فصل مشترک با ضخامت پایین است. همچنین برای فازهای مخلوط نشدنی، نفوذ در فصل مشترک تدریجی اتفاق می‌افتد.

روش شبکه بولتزمن قادر به مدل‌سازی هیدرودینامیک جدایی فازها و جریان دوفازی می‌باشد. سازگاری ترمودینامیکی، مستقیماً با تعریف تانسور فشار غیرمحلی در اپراتور برخورد، برقرار می‌شود. همچنین، چگونگی به کارگیری یک پتانسیل شیمیایی خارجی برای ارضای شرایط مرزی استاندارد، به

منظور بررسی اثر ترشوندگی روی جدایی فاز و جریان سیال در هندسه‌های محدود نشان داده می‌شود. این روش، مزیت‌های اضافی از جمله کاهش تعداد زیادی از مشکلات غیر فیزیکی متداول در روش‌های دیگر شبکه بولتزمن را دارا می‌باشد. به خاطر اساس فیزیکی قوی‌ای که این مدل دارد به طور گسترده در شبیه‌سازی تغییر شکل، اتصال و فروپاشی قطرات استفاده می‌شود.

## ۱-۲-۲-۲ تئوری انرژی آزاد

یک سیستم دوفازی تراکم‌ناپذیر که از دو فاز A و B با چگالی‌های  $\rho_A$  و  $\rho_B$  تشکیل شده باشد را در نظر می‌گیریم. از تابع انرژی آزاد گینزبرگ-لاندا طبق معادله (۲۰-۲) استفاده می‌کنیم.

$$F(\rho, \phi, \nabla\phi) = \int \left[ \Psi(\phi) + \frac{1}{2} k |\nabla\phi|^2 + \rho c_s^2 \ln \rho \right] dV \quad (20-2)$$

که در آن  $\rho$  چگالی کل است که از مجموع چگالی فازها تشکیل می‌شود،  $\rho = \rho_A + \rho_B$ . پارامتر  $\phi$  مشتق نرمال چگالی‌های دو فاز می‌باشد،  $\phi = (\rho_A - \rho_B)/\rho$ .  $\Psi(\phi)$  چگالی حجمی انرژی آزاد برای یک سیستم همگن می‌باشد،  $\Psi(\phi) = \frac{1}{4} a (\phi^2 - 1)^2$ ، که در این رابطه  $a$  یک ضریب ثابت مثبت است.  $\frac{1}{2} k |\nabla\phi|^2$  چگالی انرژی سطحی است که با کشش سطحی در ارتباط است. آخرین ترم در رابطه تابع انرژی آزاد هیچ تأثیری بر رفتار فاز ندارد و تنها معرف اعمال تراکم‌ناپذیری در بولتزمن می‌باشد.

پتانسیل شیمیایی  $\mu$  به عنوان مشتقات جزئی تابع انرژی آزاد طبق معادله (۲۱-۲) تعریف می‌شود.

$$\mu = \delta F / \delta \phi = \Psi'(\phi) - k \nabla^2 \phi = a \phi (\phi^2 - 1) - k \nabla^2 \phi \quad (21-2)$$

نمودار فصل مشترک تعادلی از معادله (۲۱-۲) به ازای  $\mu = 0$  حاصل می‌شود که منجر به دو حل پایدار یکنواخت  $\phi = \pm 1$  می‌شود که نشان‌دهنده فازهای حجمی هم‌زمان می‌باشند. برای یک حل یک‌بعدی غیریکنواخت، اگر جهت  $x$  در راستای گرادیان  $\phi$  باشد، نمودار گذرنده از فصل مشترک طبق رابطه (۲۲-۲) به دست می‌آید که در آن  $\gamma$  ضخامت فصل مشترک است که توسط رابطه ((۲۳-۲) به

دست می‌آید.

$$\phi(x) = \tanh(x/\zeta) \quad (22-2)$$

$$\zeta = \sqrt{2k/a} \quad (23-2)$$

تنش سطحی  $\sigma$  به عنوان انرژی آزاد مازاد بر واحد سطح فصل مشترک تفسیر می‌شود که برای یک سطح، فصل مشترک در تعادل می‌تواند توسط رابطه (24-2) محاسبه شود. [۱۶]

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} k \left( \frac{d\phi}{dz} \right)^2 dz \quad (24-2)$$

$$\sigma = \frac{4k}{3\zeta} \quad (25-2)$$

با استفاده از معادلات (23-2) و (25-2) می‌توان با پارامترهای  $k$  و  $a$  میزان تنش سطحی و ضخامت فصل مشترک را کنترل کرد.

هیدرودینامیک دو سیال مخلوط نشدنی توسط معادلات پیوستگی، معادلات ناویراستوکس و معادله کانیهیلارد (معادلات (26-2) تا (28-2)) توصیف می‌شود.

$$\nabla \cdot u = 0 \quad (26-2)$$

$$\rho \left( \frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u \right) = -\nabla p + \nabla \cdot [\eta(\nabla u + \nabla u^T)] + F_s \quad (27-2)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot (M \nabla \mu) \quad (28-2)$$

که در این معادلات  $\vec{u}$  سرعت سیال،  $\eta$  لزجت دینامیکی،  $M$  تابع محرک کانیهیلارد<sup>۱</sup> است. در معادله (27-2)،  $p$  فشار اصلاح شده است که توسط رابطه  $p = \rho C_s^2 + \phi \mu$  به دست می‌آید و در تابع توزیع تعادلی اصلاح شده نیز شرکت می‌کند و  $F_s$  نیروهای خارجی است که در صورت وجود باید لحاظ گردد.

---

<sup>1</sup> Cahn-Hilliard mobility

## ۲-۲-۲-۲ مدل شبکه بولتزمن

معادلات پیوستگی و ناویر و کانیهیلارد با استفاده از یک الگوریتم شبکه بولتزمن می‌توانند حل شوند. این ایده بر پایه استفاده از توابع توزیع برای ذرات و شبکه‌بندی برای زمان و مکان با استفاده از یک مجموعه بردارهای سرعت شبکه‌ای  $\vec{e}_i$ ، استوار است. در ادامه از یک مدل دو بعدی ۹-سرعتی ( $D_2Q_9$ ) استفاده می‌شود.

دو تابع توزیع  $f_i$  و  $g_i$  برای توصیف تغییرات پارامتر  $\phi(\vec{x})$  و سرعت میدان جریان  $\vec{u}(x)$  در هر مکان شبکه  $x$  و زمان  $t$  به کار رفته است. تغییرات این توابع توزیع با استفاده از معادلات بولتزمن با تک زمان آرامش مطابق زیر است.

$$f_a^\sigma(x + e_a \Delta t, t + \Delta t) = f_a^\sigma(x, t) - \frac{[f_a^\sigma(x, t) - f_a^{\sigma, eq}(x, t)]}{\tau_f} + F_a \quad (29-2)$$

$$g_a(x + e_a \Delta t, t + \Delta t) = g_a(x, t) - \frac{[g_a(x, t) - g_a^{eq}(x, t)]}{\tau_g} \quad (30-2)$$

در معادلات بالا  $\tau_f$  و  $\tau_g$  بیانگر دو زمان آرامش مستقل برای هر یک از توابع توزیع می‌باشند و  $F_a$  اجزای نیروهای سطحی را در هر مکان شبکه نشان می‌دهد. توابع توزیع تعادلی طبق معادلات زیر به دست می‌آید.

$$f_a^{eq} = w_a \left[ A_a + \rho \left( \begin{array}{c} 3\vec{e}_a \cdot \vec{u} + \frac{9}{2} (\vec{e}_i \cdot \vec{u}_\sigma)^2 \\ -\frac{3}{2} \vec{u} \cdot \vec{u} \end{array} \right) \right] \quad (31-2)$$

$$g_a^{eq} = w_a \left[ B_a + \phi \left( \begin{array}{c} 3\vec{e}_a \cdot \vec{u} + \frac{9}{2} (\vec{e}_i \cdot \vec{u}_\sigma)^2 \\ -\frac{3}{2} \vec{u} \cdot \vec{u} \end{array} \right) \right] \quad (32-2)$$

$$F_a = \left( 1 - \frac{1}{2\tau_f} \right) w_a \left[ \frac{\vec{e}_a - \vec{u}}{c_s^2} + \frac{\vec{e}_a \cdot \vec{u}}{c_s^4} \vec{e}_a \right] \cdot \vec{F}_s \delta_t \quad (33-2)$$

که ضرایب  $A_a$  و  $B_a$  توسط معادلات زیر به دست می‌آید.

$$A_a = \begin{cases} \frac{P}{c_s^2} & (i > 0) \\ \frac{\left[ \rho - \frac{(1-w_0)P}{c_s^2} \right]}{w_0} & (i = 0) \end{cases} \quad (34-2)$$

$$B_a = \begin{cases} \frac{\Gamma\mu}{c_s^2} & (i > 0) \\ \frac{\left[ \phi - \frac{(1-w_0)\Gamma\mu}{c_s^2} \right]}{w_0} & (i = 0) \end{cases} \quad (35-2)$$

که  $w_i$  ها فاکتورهای وزنی می باشند،  $w_0=4/9$ ،  $w_{1-4}=1/9$ ،  $w_{5-8}=1/36$ ، مقادیر لزجت دینامیکی  $\eta$  و

تابع تحرک  $M$  توسط معادلات زیر به دست می آیند.

$$\eta = \rho c_s^2 \delta_t \left( \tau_f - \frac{1}{2} \right) \quad (36-2)$$

$$M = \Gamma \delta_t \left( \tau_g - \frac{1}{2} \right) \quad (37-2)$$

پارامتر  $\Gamma$  که در تابع توزیع تعادلی  $g_a^{eq}$  ظاهر می شود، پارامتر قابل تنظیمی می باشد و  $\tau_g$  نیز مقدار قابل تنظیمی است که در این تحقیق برای حداقل کردن خطای عددی مقدار  $1/3 - \sqrt{3}$  لحاظ گردید [۱۶]. برای لزجتهای نابرابر دو فاز، لزجت به صورت تابع خطی از لزجتها طبق معادله زیر تعریف می شود که در اینصورت  $\eta$  به صورت اتوماتیک در مرز بین دو فاز با نموداری شبیه  $\tanh$  تغییر می کند.

$$\eta(\phi) = \frac{1-\phi}{2} \eta_A + \frac{1+\phi}{2} \eta_B \quad (38-2)$$

در انتها نیز کمیت های ماکروسکوپیک توسط روابط زیر به دست می آیند.

$$\phi(\vec{x}, t) = \sum_i g_i(\vec{x}, t) \quad (39-2)$$

$$\rho(\vec{x}, t) = \sum_i f_i(\vec{x}, t) \quad (40-2)$$

$$\rho \vec{u}(\vec{x}, t) = \sum_i f_i(\vec{x}, t) \vec{e}_i + \mu \nabla \phi \delta_t / 2 \quad (۴۱-۲)$$

همان‌طور که در بالا نیز بدان اشاره شد  $\zeta$  یک پارامتر آزاد است و اندازه آن باید به شکلی انتخاب شود که فصل مشترک بین فازها کمترین ضخامت را داشته باشد و برای این کار باید مقدار کمی داشته باشد اما اگر این مقدار بسیار کوچک انتخاب شود می‌تواند باعث ناپایداری در فصل مشترک شود. برای یک ضخامت محدود انتخاب شده جریان‌های کششی می‌توانند ضخامت فصل مشترک را زیاد یا کم کنند که این باید با نفوذ بالانس گردد. این موضوع بدین معنی است که نفوذ زیاد می‌تواند به شدت جریان را دمپ کند بنابراین بالانس مناسب بین نفوذ و جابجایی در فصل مشترک مهم است که توسط عدد پکلت  $Pe$  بیان می‌شود. عدد پکلت به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$Pe = UL/Ma \quad (۴۲-۲)$$

که در آن  $U$  و  $L$  سرعت و طول مشخصه سیستم هستند. در این شبیه‌سازی  $\zeta$  برابر با  $1/5$  در نظر گرفته شده که نتیجه آن فصل مشترکی با ضخامت ۴ تا ۵ لایس می‌باشد و عدد پکلت بین ۱۰ تا ۱۰۰ خواهد بود.

## ۳-۲-۲ تفاوت مدل شان و چن و انرژی آزاد

در اغلب روش‌های شبکه‌ای، شکل سطح میانی به صورت پدیده‌ای با اصلاح اپراتور برخورد بولتزمن، برای دربرگرفتن جدایش فاز معرفی شده است. در روش شان\_چن، با تعریف دوباره‌ی توزیع تعادلی سرعت برای مدل‌سازی سیال با معادله حالت غیر ایده‌آل جدایش فاز را به برهم‌کنش‌های میکروسکوپی مربوط کنند. با وجود این، روش آن‌ها منجر به تناقض ترمودینامیکی می‌گردد مگر این‌که معادله حالت خاصی انتخاب شود. زیرا این روش بر اساس خاصیت پتانسیل جذب بین دو فاز عمل کرده که یک روش ریاضی است و استناد فیزیکی ندارد. همچنین در این روش شرط پیوستگی جرم همیشه برقرار نیست. علاوه بر این، تمام طرح‌های دوفازی، به توزیع تعادلی‌هایی با نوسانات

غیرفیزیکی سرعت در ناحیه‌ی بین سطوح می‌انجامد.

مدل شان و چن از پتانسیل برهمکنش برای شبیه‌سازی نیروهای جاذب استفاده می‌کند درحالی‌که در مدل انرژی آزاد از سیالات غیرایده‌آل استفاده شده است و نیازی به اضافه نمودن نیروهای جاذب به صورت شان و چن ندارد. همچنین برخلاف مدل شان و چن که محدود به نسبت چگالی پایین است، این مدل می‌تواند نسبت چگالی بالاتر را نیز شبیه‌سازی کند.

در مدل انرژی آزاد شرایطی فراهم می‌شود که سطح مشترک بین دو فاز نازک باقی بماند و موقعیت سطح مشترک به خوبی قابل تشخیص باشد. اندازه سرعت‌های مصنوعی در این روش بسیار کوچک‌تر از روش شبه پتانسیل شان و چن بوده که به قیمت پیچیدگی روابط حاکم و سنگین‌تر شدن محاسبات تمام شده است.

## ۳-۲ مدل غیرنیوتنی

در سیال نیوتنی ضریب لزجت در نرخ برش، ثابت است در حالی‌که در سیالات غیرنیوتنی رابطه‌ای غیرخطی بین تنش برشی و نرخ کرنش برشی وجود دارد. به طور کلی سیالات غیرنیوتنی به سه گروه بزرگ سیالات مستقل از زمان، سیالات تابع زمان و سیالات ویسکوالاستیک تقسیم می‌شوند [۴۰-۴۳].

### ۱-۳-۲ مدل توانی

یکی از رایج‌ترین مدل‌هایی که برای شبیه‌سازی سیالات غیرنیوتنی استفاده می‌شود، مدل توانی است. معادله ساختاری این سیالات به صورت زیر است [۱۸]:

$$\mu = \mu_0 \dot{\gamma}^{n-1} \quad (۴۳-۲)$$

پارامتر بی‌بعد  $n$ ، درجه رفتار غیرنیوتنی را بیان می‌کند و هنگامی که  $n=1$  می‌باشد، در واقع سیال نیوتنی با لزجت  $\mu_0$  است. برای سیالاتی با  $n>1$  لزجت مؤثر با افزایش نرخ برش زیاد می‌شود که به

این سیالات دیالاتنت گفته می‌شود. برای سیالات با  $n > 0$  لزجت مؤثر با افزایش نرخ برش کاهش می‌یابد و سیال رفتار نازک‌شونده خواهد داشت که این گونه سیالات، شبه پلاستیک نامیده می‌شوند.

## ۲-۳-۲ مدل کاریاسودا

مدل کاریاسودا که برای شبیه‌سازی سیالات مستقل از زمان به کار می‌رود، اغلب برای شبیه‌سازی‌های هیدرودینامیکی مورد استفاده قرار می‌گیرد [۴۴, ۴۵]. معادله ساختاری این سیالات به صورت زیر است [۴۶]:

$$\frac{\mu - \mu_\infty}{\mu_0 - \mu_\infty} = (1 + (\lambda\dot{\gamma})^a)^{\frac{n-1}{a}} \quad (۴۴-۲)$$

که در آن  $\mu_0$  و  $\mu_\infty$  به ترتیب لزجت‌های دینامیکی در نرخ برشی صفر و بینهایت می‌باشند و  $\dot{\gamma}$  نرخ برش و  $\lambda$  زمان مشخصه ویسکوالاستیک سیال است. در نرخ برش بحرانی  $1/\lambda$  لزجت سیال شروع به کاهش می‌کند. پارامتر بی‌بعد  $n$ ، درجه رفتار غیرنیوتنی را بیان می‌کند و هنگامی که  $n=1$  می‌باشد، در واقع سیال نیوتنی با لزجت  $\mu_0$  می‌باشد. پیوستگی این مدل در نرخ‌های برش پایین باعث شده تا کاربرد این مدل در شبیه‌سازی‌های عددی بیشتر باشد.

## ۳-۳-۲ شبیه‌سازی غیرنیوتنی در مدل بولتزمن

در هر دو مدل گفته شده در بالا نیاز به محاسبه تانسور نرخ برش می‌باشد.  $\dot{\gamma}$  اندازه نرخ برش محلی می‌باشد که با اینورینت دوم تانسور نرخ کرنش  $S_{\alpha\beta}$  به صورت زیر مرتبط است [۴۷]:

$$\dot{\gamma} = \sqrt{S_{\alpha\beta} S_{\alpha\beta}} \quad (۴۵-۲)$$

$$S_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right) \quad (۴۶-۲)$$

$$S_{\alpha\beta} = -\frac{3}{2\rho c^2 \tau_v} \sum_{i=0} f_i^{(1)} e_{i\alpha} e_{i\beta} \quad (۴۷-۲)$$

که  $f_i^{(1)}$  قسمت غیرتعادلی تابع توزیع می‌باشد که به صورت  $f_i^{(1)} = f_i^{neq} - f_i^{eq}$  تعریف می‌شود. از

فواید محاسبه برش با استفاده از رابطه (۲-۴۷) این است که بدین طریق نیاز به محاسبه مشتقات سرعت نبوده و بنابراین برش به صورت محلی محاسبه می‌شود.

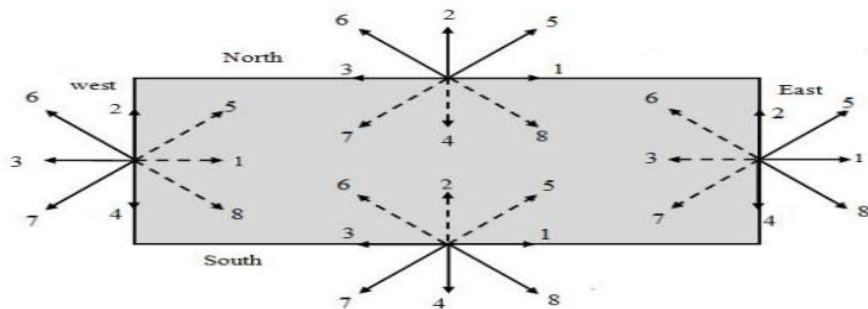
در سیال نیوتنی مقدار زمان آرامش (معادله (۲-۳۶)) در هر نقطه شبکه مقدار ثابتی می‌باشد، اما در سیال غیرنیوتنی به دلیل اینکه گرادیان سرعت در هر نقطه کانال متفاوت از سایر نقاط شبکه است، لزجت نیز در هر نقطه متفاوت از نقطه مجاور است. در الگوریتم حل عددی در هر تکرار طبق رابطه (۲-۴۶) گرادیان سرعت و طبق رابطه (۲-۴۷) تابع توزیع غیرتعادلی، محاسبه شده و با استفاده از این‌ها  $S_{\alpha\beta}$  و سپس با معادله (۲-۴۵) تانسور نرخ برش محاسبه می‌شود. حال با توجه به مدل انتخابی، با استفاده از تانسور نرخ برش، لزجت ظاهری محاسبه شده که به تبع آن، زمان آرامش جدید هم محاسبه می‌شود و از این زمان آرامش جدید در گام زمانی بعدی استفاده می‌گردد.

## ۴-۲ شرایط مرزی

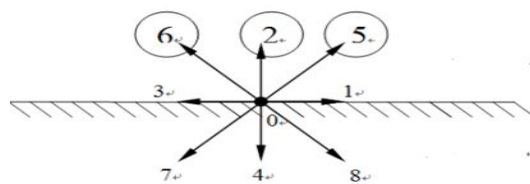
### ۱-۴-۲ شرایط مرزی هیدرودینامیک

دینامیک واقعی سیال به شدت به محیط احاطه‌کننده‌ی آن بستگی دارد. این وابستگی از دیدگاه ریاضی با بیان مناسب شرایط مرزی توصیف می‌شود. همان‌طور که در بخش‌های قبل بیان شد در روش شبکه بولتزمن خواص ماکروسکوپیکی مانند سرعت و فشار به وسیله‌ی معادلات شامل توابع توزیع محاسبه می‌گردند و این توابع توزیع هستند که در محاسبات این روش شرکت می‌کنند. بنابراین در این روش مانند سایر روش‌های مرسوم دینامیک سیالات محاسباتی، نمی‌توان شرایط مرزی را به وسیله کمیات ماکروسکوپیکی اعمال کرد. به عنوان مثال برای دیواره‌ای با سرعت معلوم، در روش‌های مرسوم دینامیک سیالات محاسباتی، شرط مرزی با برابر قرار دادن سرعت سیال روی دیواره، با سرعت دیواره، اعمال می‌شود، اما در روش شبکه بولتزمن باید توابع توزیع را به گونه‌ای تعریف کرد تا سرعت مورد نظر برای سیال روی دیواره به دست آید. در واقع اعمال شرایط مرزی در

روش شبکه بولتزمن به تعیین توابع توزیع مجهول روی مرزها خلاصه می‌شود. به عنوان مثال در شکل ۴-۲ توابع توزیعی که با خطوط پیوسته نشان داده شده‌اند از مرحله جاری‌شدن به دست آمده و مشخص هستند اما توابع توزیعی که با خط چین نشان داده شده‌اند نامعین می‌باشند که براساس شرایط مرزی مختلف تعیین می‌شوند.



شکل ۴-۲: توابع توزیع در مرزهای یک ناحیه [۳۴]



توابع توزیع مجهول (وارد شونده به ناحیه محاسباتی) :  $f_2, f_5, f_6$   
 توابع توزیع معلوم (خارج شونده از ناحیه محاسباتی) :  $f_4, f_7, f_8$

شکل ۵-۲: توابع توزیع یک مرز صاف روی دیوار پایین بعد از گام جاری‌شدن [۳۴]

در واقع این توابع توزیع در مرحله جاری‌شدن به گره‌های داخلی منتقل می‌شوند، بنابراین نحوه‌ی اعمال شرایط مرزی به طور مستقیم بر جواب نهایی اثر می‌گذارد. در روش بولتزمن شرایط مرزی تأثیر بسزایی در شبیه‌سازی دارند و به همین دلیل تلاش‌های فراوانی برای ارائه شرایط مرزی بهتر با دقت بالاتر انجام شده [۴۸-۵۱] که در زیر به تعدادی از این شرایط مرزی اشاره می‌شود.

## شرایط مرزی باز ۱-۱-۴-۲

شرایط مرزی باز به طور کلی شامل ورودی‌ها، خروجی‌ها، مرزهای پریودیک، خطوط تقارن و نامحدود می‌باشند. پرکاربردترین شرایط مرزی باز در این قسمت معرفی می‌شوند.

### شرط مرزی پریودیک [۳۳] ۱-۱-۱-۴-۲

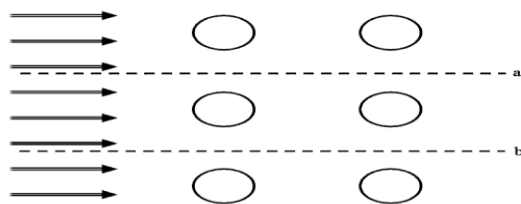
هنگامی که روند جریان به گونه‌ای کاملاً مشابه تکرار می‌شود می‌توان به جای تحلیل کل جریان، بخشی از جریان را تحلیل کرد و نتیجه را به کل جریان بسط داد. در این مواقع شرط مرزی پریودیک کاربرد دارد. برای مثال شکل ۶-۲ جریانی را نشان می‌دهد که از روی تعدادی لوله می‌گذرد. فرض کنید شرایط جریان در بالای خط  $a$  و پایین خط  $b$  کاملاً مشابه باشند. در این شرایط برای شبیه‌سازی جریان بین دو خط  $a$  و  $b$  استفاده از شرایط مرزی پریودیک ضروری است. در واقع توابع توزیعی که خط  $a$  را ترک می‌کنند دقیقاً برابر توابع توزیعی است که وارد خط  $b$  می‌شوند و برعکس. در واقع توابع توزیع  $f_4, f_7$  و  $f_8$  روی خط  $a$  و توابع توزیع  $f_2, f_5$  و  $f_6$  روی خط  $b$  نامشخص هستند که با توجه به شرایط مرزی پریودیک به صورت زیر محاسبه می‌شوند:

• در طول خط  $a$

$$f_{4,a} = f_{4,b}; f_{7,a} = f_{7,b}; f_{8,a} = f_{8,b} \quad (۴۸-۲)$$

• در طول خط  $b$

$$f_{5,a} = f_{5,b}; f_{6,a} = f_{6,b}; f_{2,a} = f_{2,b} \quad (۴۹-۲)$$



شکل ۶-۲ نمونه‌ای از شرایط مرزی پریودیک در دامنه‌ی حل [۳۳]

## ۲-۴-۱-۱-۲ شرط مرزی با سرعت معلوم

در بسیاری از مسائل کاربردی مؤلفه‌های سرعت ثابتی در طول زمان برای مرز وجود دارد. روش‌های مختلفی برای محاسبه توابع توزیع مجهول روی این نوع مرزها ارائه شده است. روش زو و هی یکی از این روش‌هاست که در ادامه به توضیح آن پرداخته می‌شود.

فرض کنید روابط مقادیر ماکروسکوپی برای مرز غربی نوشته شده است:

$$\rho_w = f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8 + f_0 \quad (50-2)$$

$$\rho_w u_w = f_1 + f_5 + f_8 - (f_6 + f_3 + f_7) \quad (51-2)$$

$$\rho_w v_w = f_5 + f_2 + f_6 - (f_7 + f_4 + f_8) \quad (52-2)$$

از آنجا که سرعت‌ها معلوم هستند، سه معادله و چهار مجهول داریم؛ مجهولات عبارتند از: سه تابع توزیع و چگالی. معادله چهارم شرط تعادل عمودی روی مرز است که توسط زو و هی پیشنهاد شد:

$$f_1 - f_1^{eq} = f_3 - f_3^{eq} \quad (53-2)$$

با جایگذاری  $f_1^{eq}$  و  $f_3^{eq}$  در معادله (۵۳-۲) داریم:

$$f_1 = f_3 + \frac{2}{3} \rho_w u_w \quad (54-2)$$

با ترکیب معادلات (۵۰-۲) - (۵۲-۲) و معادله (۵۴-۲) سه مجهول  $\rho_w$ ،  $f_5$  و  $f_8$  به صورت زیر محاسبه خواهند شد:

$$\rho_w = \frac{1}{1-u_w} [f_4 + f_2 + f_9 + 2(f_3 + f_6 + f_7)] \quad (55-2)$$

$$f_5 = f_7 - \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + \frac{1}{6}\rho_w u_w + \frac{1}{2}\rho_w v_w \quad (56-2)$$

$$f_8 = f_6 - \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + \frac{1}{6}\rho_w u_w - \frac{1}{2}\rho_w v_w \quad (57-2)$$

با معلوم شدن مقدار  $\rho_w$ ، مقدار  $f_1$  از معادله (۵۴-۲) قابل محاسبه خواهد بود. به همین ترتیب برای

سایر مرزها در صورت داشتن سرعت معلوم می‌توان توابع توزیع را محاسبه نمود.

#### ۳-۱-۱-۴-۲ شرط مرزی دیریکله (فشار ثابت)

شرط مرزی دیریکله، فشار یا چگالی را بر روی مرز مقید می‌کند. حل برای آن مرزها بسیار شبیه مرزهای سرعت می‌باشد. با داشتن مقدار چگالی،  $\rho_0$ ، سرعت قابل محاسبه می‌باشد (توجه کنید که از آنجایی که معادله حالت، چگالی را به فشار مربوط می‌کند، دانستن مقدار چگالی به معنای دانستن مقدار فشار است). در اینجا فرض می‌گردد که سرعت مماس بر مرز صفر بوده (مرز ورودی و خروجی) و معادلات برای مؤلفه‌های سرعت عمود به مرز حل می‌شود. مثلاً اعمال شرط مرزی فشار بر روی دیواره بالایی یک محفظه را در نظر بگیرید؛ سه تابع توزیع  $f_4, f_7, f_8$  که از سمت دیواره خارج و وارد ناحیه محاسباتی می‌شوند و مقدار سرعت عمود بر دیواره، مجهول می‌باشند.

$$\rho_N = f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8 + f_0 \quad (58-2)$$

$$\rho_N v_N = f_5 + f_2 + f_6 - (f_7 + f_4 + f_8) \quad (59-2)$$

$$\rho_N u_N = f_1 + f_5 + f_8 - (f_6 + f_3 + f_7) = 0 \quad (60-2)$$

با جمع کردن روابط فوق خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} \rho_N + \rho_N v_N &= f_1 + f_2 + f_3 + f_5 + f_6 + f_0 + f_5 + f_2 + f_6 \\ v_N &= \frac{f_1 + f_3 + f_0 + 2(f_5 + f_2 + f_6)}{\rho_N} - 1 \end{aligned} \quad (61-2)$$

مانند قبل:

$$\begin{aligned} f_2 - f_2^{eq} &= f_4 - f_4^{eq} \\ f_4 &= f_2 - \frac{2}{3} \rho_N v_N \end{aligned} \quad (62-2)$$

با جایگذاری معادله (۶۲-۲) در معادله (۵۹-۲) و با استخراج  $f_8$  از معادله (۶۰-۲) و جایگذاری در

معادله (۵۹-۲) خواهیم داشت:

$$\rho_N v_N = f_2 + f_5 - f_7 + f_6 - f_2 + \frac{2}{3} \rho_N v_N - \underbrace{(f_3 - f_1 - f_5 + f_6 + f_7)}_{f_8} \Rightarrow \quad (۶۳-۲)$$

$$f_7 = f_5 + \frac{1}{2} (f_1 - f_3) - \frac{1}{6} \rho_N v_N$$

با تکرار مراحل فوق این بار برای به دست آوردن  $f_8$ ، خواهیم داشت:

$$f_8 = f_6 + \frac{1}{2} (f_1 - f_3) - \frac{1}{6} \rho_N v_N \quad (۶۴-۲)$$

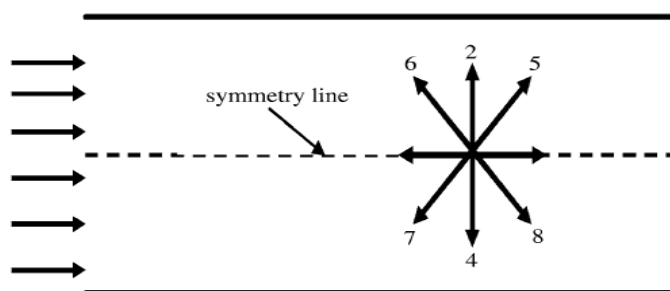
در نتیجه تمام توابع توزیع مجهول و بنابراین سرعت به دست آمد.

خلاصه کاری که در این بخش انجام شده به این صورت است که مقدار چگالی در مرز مشخص می‌گردد و سپس با استفاده از چهار معادله، سرعت ماکروسکوپیک و سه تابع توزیع مجهول را حساب می‌کنیم. این معادلات از روابط عادی متغیرهای ماکروسکوپیک و این فرض که شرط مرزی پرش به عقب در راستای عمود بر مرز دیریکله برقرار است، به دست آمده‌اند.

## ۴-۱-۱-۴-۲ شرط مرزی تقارن [۳۳]

بسیاری از مسائل کاربردی حول یک خط یا صفحه، تقارن دارند. بنابراین پیدا کردن راه‌حلی که فقط نیمی از دامنه‌ی حل را شامل شود در کاهش هزینه‌ی محاسباتی مفید است. به عنوان مثال شکل ۷-۲ جریان در کانالی را نشان می‌دهد که جریان زیر خط تقارن تصویر جریان بالای خط تقارن می‌باشد. به عنوان مثال برای این شکل می‌توان فقط قسمت بالا را تحلیل کرد. راه اعمال شرط مرزی تقارن این است که مقادیر توابع توزیع مجهول را برابر قرینه آنها حول خط تقارن قرار دهیم. یعنی در طول خط تقارن خواهیم داشت:

$$f_6 = f_8; f_2 = f_4; f_5 = f_7 \quad (۶۵-۲)$$



شکل ۷-۲: شرط مرزی تقارن [۳۳]

#### ۵-۱-۱-۴-۲ شرط مرزی گرادیان صفر

برای اعمال این شرط در خروجی کافی است مجهولات در ستون آخر شبکه برابر مقادیر آن در ستون یکی مانده به آخر قرار داده شود. در ورودی هم مقادیر ستون دوم در مجهولات ستون اول قرار گیرند.

$$f_{\alpha}(i=1, j) = f_{\alpha}(i=2, j) \quad (۶۶-۲)$$

$$f_{\alpha}(i= nx, j) = f_{\alpha}(i= nx-1, j) \quad (۶۷-۲)$$

#### ۲-۱-۴-۲ شرط مرزی دیواره جامد

برای اعمال شرط مرزی عدم لغزش در روش شبکه بولتزمن معمولاً از طرح بازگشت به عقب<sup>۱</sup> استفاده می‌شود. نحوه‌ی اعمال این طرح با توجه به موقعیت قرارگیری دیوار نسبت به گره‌های شبکه متفاوت است. در صورتی که مرز مورد نظر دقیقاً روی نقاط شبکه قرار گیرد از طرح بازگشت به عقب کامل<sup>۲</sup> و در صورتی که در بین نقاط شبکه قرار گیرد از طرح بازگشت به عقب با دیوار میانی<sup>۳</sup> استفاده می‌شود.

- طرح بازگشت به عقب کامل

بر اساس این طرح، تابع توزیع ذره که از گره سیال در امتداد لینک شبکه جریان می‌یابد بعد از برخورد با گره دیوار در همان امتداد در جهت مخالف باز می‌گردد. به زبان ساده‌تر می‌توان گفت تمام

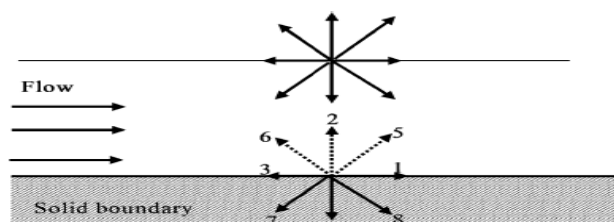
<sup>۱</sup> Bounce Back

<sup>۲</sup> Complete bounceback scheme

<sup>۳</sup> Half way bounceback scheme

توابع توزیع روی گره دیوار معکوس می‌شوند. شکل ۸-۲ نشان‌دهنده‌ی این شرایط مرزی است. در این شکل یک مرز جنوبی با توابع توزیع مجهول  $f_5$ ،  $f_2$  و  $f_6$  به نمایش در آمده است. براساس طرح بازگشت به عقب کامل خواهیم داشت:

$$f_2 = f_4; f_6 = f_8; f_5 = f_7 \quad (۶۸-۲)$$



شکل ۸-۲: شرط مرزی بازگشت به عقب کامل [۳۳]

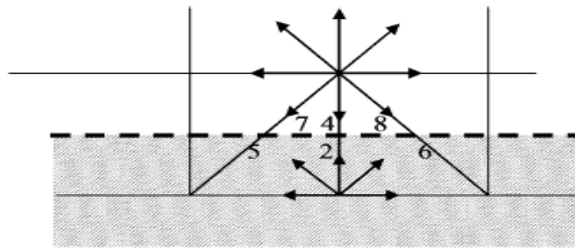
هرچند این طرح دارای دقت مرتبه اول است، اما به دلیل سادگی استفاده از آن بسیار معمول است.

#### • طرح بازگشت به عقب با دیوار میانی

همان‌طور که گفته شد طرح بازگشت به عقب کامل دارای دقت مرتبه اول است. لاد<sup>۱</sup> پیشنهاد کرد مرز جسم را به جای قرار دادن در روی نقاط شبکه، در بین نقاط شبکه قرار دهیم و اثبات کرد که به این ترتیب می‌توان به دقت مرتبه دوم دست یافت [۵۲، ۵۳]. در این طرح توابع توزیع جاری شده از سیال به سمت دیوار، در دیوار ذخیره شده و در گام زمانی بعد به سیال بازگردانده می‌شود. از لحاظ ریاضی می‌توان این طرح را به عنوان مثال برای دیوار جنوبی نمایش داده شده در شکل ۹-۲، به صورت زیر نمایش داد که  $(x, y)$  بیانگر موقعیت گره جامد درون مرز است.

$$f_2(x, y) = f_4(x, y+1); \quad f_5(x, y) = f_7(x+1, y+1); \quad f_6(x, y) = f_8(x-1, y+1) \quad (۶۹-۲)$$

<sup>۱</sup> Ladd

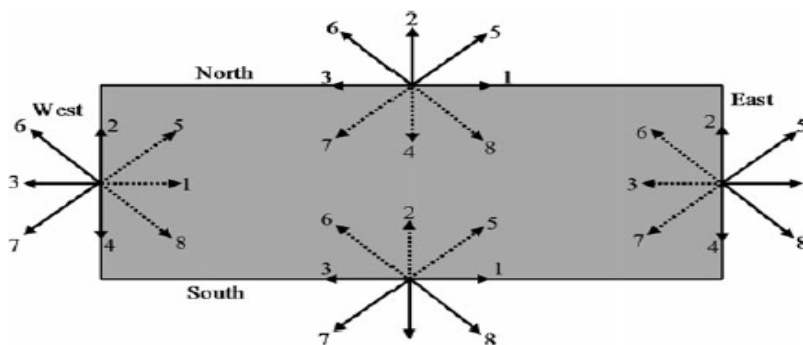


شکل ۹-۲: شرط مرزی بازگشت با دیوار میانی [۳۳]

## ۲-۴-۲ شرایط مرزی مدل انرژی آزاد

همان‌طور که در توضیح بخش ۲-۲-۲ در توضیح مدل انرژی آزاد گفته شد، در این مدل دو تابع توزیع  $f$  برای توزیع هیدرودینامیک و  $g$  برای توزیع تابع تحرک وجود دارد و به همین خاطر به دو گروه شرایط مرزی، نیاز است. شرایط مرزی مربوط به هیدرودینامیک مسئله، به عبارتی شرایط مرزی برای  $f$  می‌باشد که در قسمت شرایط مرزی هیدرودینامیک گفته شد و شرایط مرزی مربوط به تابع  $g$  در این قسمت بیان خواهد شد.

شرط مرزی دیواره، شرط مرزی بازگشت به عقب، برای تابع  $f$  باعث عدم لغزش و عدم انتقال ممثوم خواهد شد به همین طریق اعمال آن برای تابع توزیع  $g$  باعث عدم انتقال جرم از مرزها خواهد شد. در شرایط مرزی ورودی و خروجی مانند شرط مرزی سرعت ثابت یا فشار ثابت می‌توان از مدل ارائه شده توسط هو و چانگ [۵۴] استفاده کرد.



شکل ۱۰-۲: شرط مرزی بازگشت به عقب [۳۴]

برای مثال با در نظر گرفتن مرز سمت چپ در شکل ۲-۱۰،  $g_1, g_5, g_8$  توابع توزیعی هستند که بعد از مرحله جاری شدن نامعلوم هستند. برای مشخص شدن آنها کافی است مقدار  $\phi$  را در ورودی با علم به اینکه چه سیالی در این مرز داریم، با داشتن مقدار  $\phi$  و باتوجه به رابطه (۲-۳۹) خواهیم داشت:

$$\phi_{in} = g_1 + g_2 + g_3 + g_4 + g_5 + g_6 + g_7 + g_8 + g_0 \quad (۲-۷۰)$$

$$g_1 + g_5 + g_8 = \phi_{in} - (g_2 + g_3 + g_4 + g_6 + g_7 + g_0) \quad (۲-۷۱)$$

$$\phi_* = \phi_{in} - (g_2 + g_3 + g_4 + g_6 + g_7 + g_0) \quad (۲-۷۲)$$

طبق معادله (۲-۷۲) در این روش باید مقادیر  $g_1, g_5, g_8$  به شکلی انتخاب گردند که مجموع آنها برابر  $\phi_*$  گردد. با فرض زیر برای این توابع رابطه (۲-۷۱) نیز ارضا می شود.

$$g_i = \frac{w_i \phi_*}{w_1 + w_5 + w_8} \quad i = 1, 5, 8 \quad (۲-۷۳)$$

برای سایر مرزها نیز به همین شکل عمل می شود یعنی توابع مجهول با دانستن مقدار  $\phi$  در آن مرزها و رابطه (۲-۳۹) و در نظر گرفتن مقادیر مناسب برای  $g_i$  ها به دست خواهد آمد.

خواص ترشوندگی در مرزهای جامد-سیال نیز حائز اهمیت است. گرا و ایواهارا [۵۵، ۵۶] دیوار را به صورت مخلوطی از دو سیال در نظر گرفتند که در نتیجه باید دارای یک مقدار مشخص  $\phi_s$  باشد. کان [۳۹] طبق مدل شرط مرزی که ارائه داد، ابتدا برای سطح تر، یک زاویه تماس  $\theta_s$  در نظر گرفته و سپس با استفاده از رابطه زیر مقدار  $\phi_s$  به دست می آید.

$$\cos(\theta_s) = \frac{1}{2} \phi_s (3 - \phi_s^2) \quad (۲-۷۴)$$

۳ فصل سوم: تشکیل و جدایش قطره در جریان دو فازي داخل يك

میکروکانال T شکل با استفاده از مدل انرژی آزاد

### ۱-۳ اعتبارسنجی

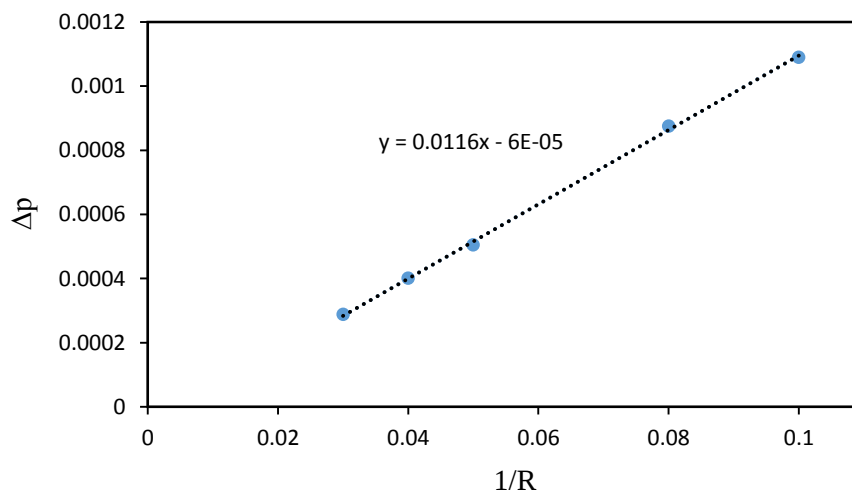
#### ۱-۱-۳ آزمون لاپلاس

اولین اعتبارسنجی که برای نشان دادن صحت اعمال مدل، مورد استفاده قرار می‌گیرد، اعتبارسنجی سنتی آزمون لاپلاس است. برای این آزمون، یک ناحیه محاسباتی  $120 \times 120$  در نظر گرفته می‌شود. مربعی در مرکز این ناحیه قرار داده می‌شود. شرایط مرزی تناوبی بر تمام مرزهای این ناحیه اعمال می‌شود. مطابق با قانون لاپلاس وقتی سیستم به حالت تعادل می‌رسد، اختلاف فشار داخل و خارج قطره توسط رابطه (۱-۳) به کشش سطحی دو فاز مرتبط می‌شود.

$$\nabla p = \frac{\sigma}{R} \quad (1-3)$$

$R$  در رابطه (۱-۳) شعاع قطره است.

شکل ۱-۳ نمودار اختلاف فشار  $\nabla p$  را بر حسب  $1/R$  با استفاده از مقادیر زمان آرامش  $\tau_f = 1$ ، کشش سطحی  $\sigma = 0.01$  و پارامتر آزاد انرژی آزاد (بیان شده در قسمت ۲-۲-۲)،  $\Gamma = 4/0$ ، نشان می‌دهد.



شکل ۱-۳: مقایسه نتایج روش شبکه بولتزمن ۱ با قانون لاپلاس

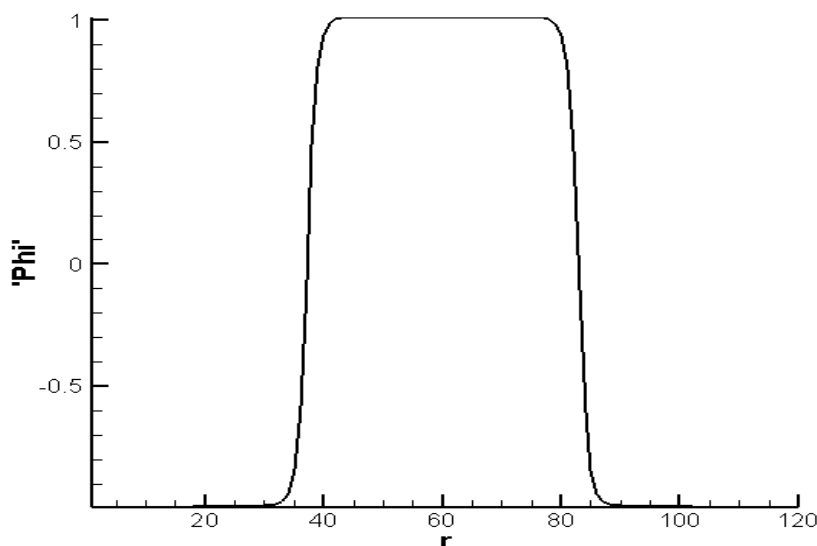
همان‌طور که از شکل مشخص است پیش‌بینی مدل انرژی آزاد مطابقت خوبی با قانون لاپلاس دارد. همچنین این آزمون برای نسبت لزجت دو فاز ۱ و ۱۰ انجام شده و ثابت شد که نتایج این آزمون با تغییر نسبت لزجت تغییری نمی‌کند و ماهیت آن مستقل از لزجت است که این با آنچه که قانون لاپلاس پیش‌بینی می‌کند، تطابق خوبی دارد. با استفاده از معادله

(۲-۳) می‌توان دقت نتایج عددی را تعیین کرد.

$$\phi(x, y) = \tanh \frac{R - \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}}{\xi} \quad (2-3)$$

که در آن  $x_0$  و  $y_0$  مختصات مرکز قطره هستند. شکل ۲-۳ پارامتر  $\phi$  را به عنوان تابعی از فاصله تا مرکز قطره نشان می‌دهد که در مطابقت خوبی با نمودار تعادلی تئوری که توسط رابطه

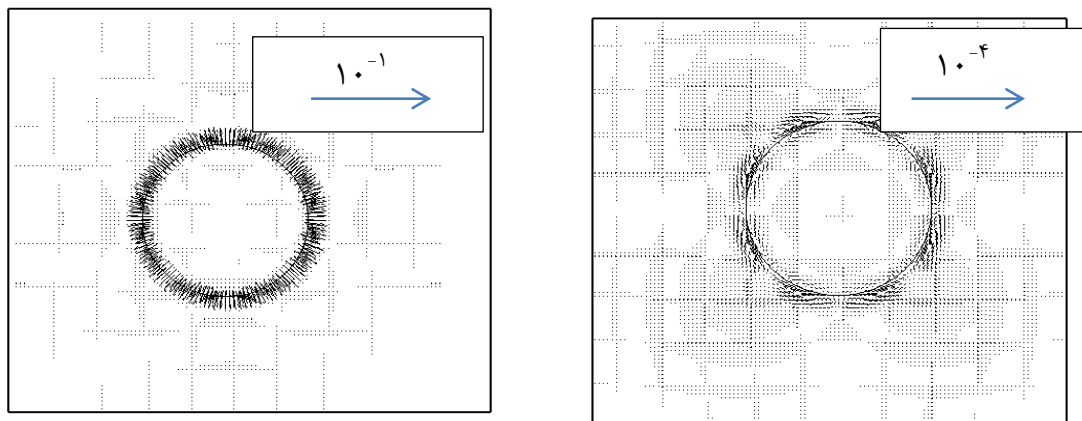
(۲-۳) به دست می‌آید، دارد. این نشان می‌دهد که این مدل به خوبی توانسته فصل مشترک بین دو فاز را مدل کند.



شکل ۲-۳: نمودار پارامتر  $\phi$  در مقطع میانی قطره با شعاع ۲۰. مقایسه نمودار با رابطه (۲-۳).

اما در اکثر روش‌های عددی سرعت‌های کاذبی در فصل مشترک بین فازها وجود دارد که در

این مدل اعمالی نیز این مشکل وجود دارد. شکل ۳-۳ نمودارهای بردار سرعت را در مرحله انتهایی شکل گیری قطره برای دو مدل شان و چن و مدل حاضر نشان می دهد. همان طور که از نمودار مشخص است اندازه سرعت های کاذب در فصل مشترک در مدل حاضر بسیار کمتر از مدل هایی چون شان و چن است و این یکی از مزیت های این مدل نسبت به شان و چن است. نتایج مطابقت خوبی با مرجع [۱۵] دارد.



ب) مدل شان و چن

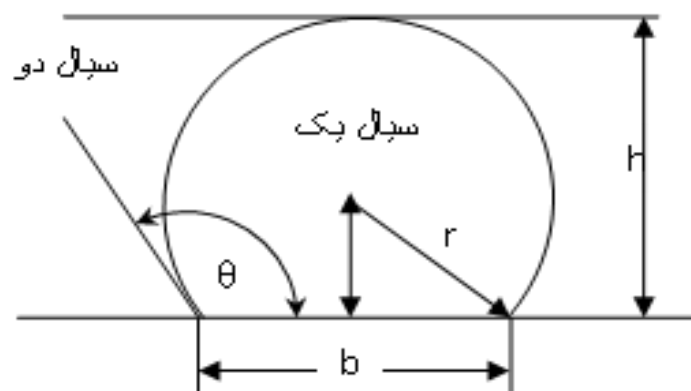
الف) مدل انرژی آزاد

شکل ۳-۳: مقایسه سرعت های کاذب یک قطره در یک سیال آرام با کشش سطحی  $\sigma = 0.01$  و شعاع  $R=20$  برای دو مدل شان و چن و مدل حاضر (انرژی آزاد)

### ۳-۱-۲ آزمون زاویه تماس

هنگامی که یک قطره انحلال ناپذیر<sup>۱</sup> در تماس با یک سطح جامد قرار می گیرد، آنگاه میان دو سیال و سطح جامد خط تماسی ایجاد می شود (شکل ۴-۶).

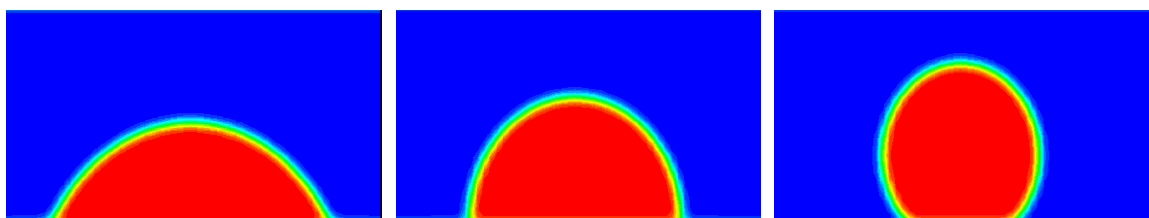
<sup>1</sup>Immiscible



شکل ۳-۴: طرحواره زاویه تماس بین مایع و سطح جامد

ترشوندگی<sup>۱</sup> یک سطح نسبت به سیال، بستگی به زاویه تماس ( $\theta$ ) دارد. برای زاویه کمتر از ۹۰ درجه، سیال تمایل به خیس کردن سطح دارد. چنین سطوحی آبدوست<sup>۲</sup> نامیده می‌شود. برای زاویه بزرگتر از ۹۰ درجه، سیال به شکل سیال فشرده درمی‌آید چنین سطوحی آبگریز<sup>۳</sup> نامیده می‌شود.

برای محاسبه زاویه تماس، نیم‌دایره ای با شعاع ۲۰ واحد در میدان محاسباتی به ابعاد  $60 \times 180$  به صورت مماس بر دیواره پایینی قرار داده می‌شود. چگالی قطره و محیط یکسان در نظر گرفته می‌شود. نسبت لزجت دینامیکی به صورت  $\eta_d/\eta_c = 1$  تنظیم می‌شود که  $d$  و  $c$  به ترتیب سیال جداشونده و سیال پیوسته است. مقادیر فیزیکی چگالی و لزجت دو فاز  $\rho_c = \rho_d = 1$  و  $\eta_c = \eta_d = 0.001$  می‌باشند. شکل ۳-۵ قطره را در سه زاویه تماس مختلف نشان می‌دهد. قطره (سیال  $d$ ) با رنگ قرمز در شکل و سیال پیوسته (سیال  $c$ ) با رنگ آبی در شکل نشان داده شده است.



(الف)  $\theta = 60^\circ$

(ب)  $\theta = 90^\circ$

(ج)  $\theta = 140^\circ$

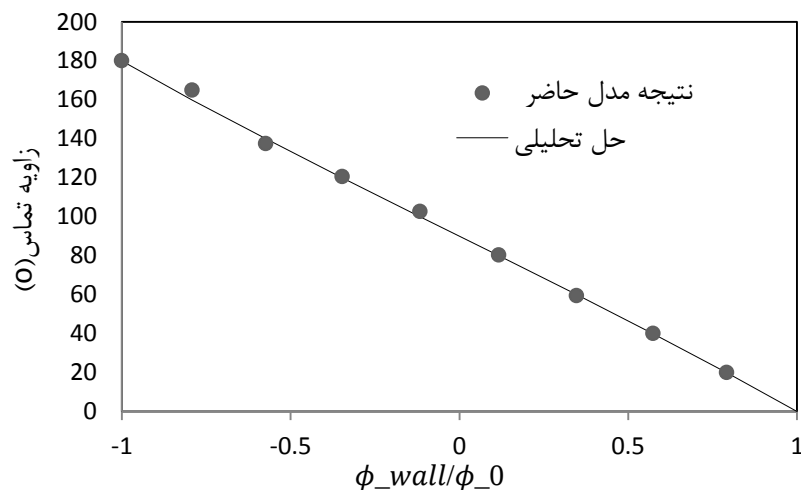
شکل ۳-۵: تغییر شکل قطره به ازای زوایای تماس مختلف

<sup>1</sup> wettability

<sup>2</sup> hydrophilic

<sup>3</sup> hydrophobic

شکل ۳-۶ نموداری است که محاسبه زاویه تماس به دست آمده از نتایج عددی مدل را در مقایسه با نتایج تئوری نشان می‌دهد که ارتباط خطی بین زاویه تماس و پارامتر  $\phi$  وجود دارد که با نتایج حل تحلیلی  $\cos(\theta) = \frac{3}{2} \frac{\phi_{wall}}{\phi_0} \left(1 - \frac{1}{3} \left(\frac{\phi_{wall}}{\phi_0}\right)^2\right)$  همخوانی دارد. [۵۷]. نتایج مطابقت خوبی با مرجع [۱۷] دارد.



شکل ۳-۶: نمودار زاویه تماس به عنوان تابعی از مقدار پارامتر  $\phi$  در سطح

### ۳-۱-۳ تغییر شکل قطره تحت جریان برشی ساده<sup>۱</sup>

برای درک اینکه مدل چند فازی قادر است مسائل دینامیکی را به درستی اعمال کند یا نه، اغلب از تغییر شکل تیلور استفاده می‌شود. بدین شکل که یک قطره بین دو صفحه موازی قرار می‌گیرد. این دو صفحه در دو جهت مخالف برای ایجاد نرخ برش خطی در رژیم استوکس (اعداد رینولدز پایین)، حرکت می‌کنند. تشکیل قطره به عنوان تابعی از نرخ برش مطالعه می‌شود. اعداد بدون بعد رینولدز و موینگی به صورت زیر تعریف می‌شوند.

$$Re = \frac{\gamma R^2 \rho}{\eta}, Ca = \frac{\gamma R \eta}{\sigma} \quad (3-3)$$

که در این روابط  $\gamma$  نرخ برش است که به صورت  $\gamma = 2U/H$  تعریف می‌شود که  $U$  سرعت

<sup>1</sup> Simple shear flow

حرکت صفحات و  $H$  ارتفاع کانال می‌باشد و  $R$  شعاع اولیه قطره است. در این مورد فرض می‌شود که چگالی و لزجت دوفاز برابر باشند. شبیه‌سازی برای یک قطره به شعاع ۳۲ واحد بولتزمن در یک ناحیه محاسباتی  $128 \times 256$  در عدد رینولدز  $Re=0.1$  انجام شده است. در حالت تعادلی قطره به شکل یک بیضی درمی‌آید که معمولاً با پارامتر تغییر شکل  $Df$  به شکل زیر تعریف می‌شود.

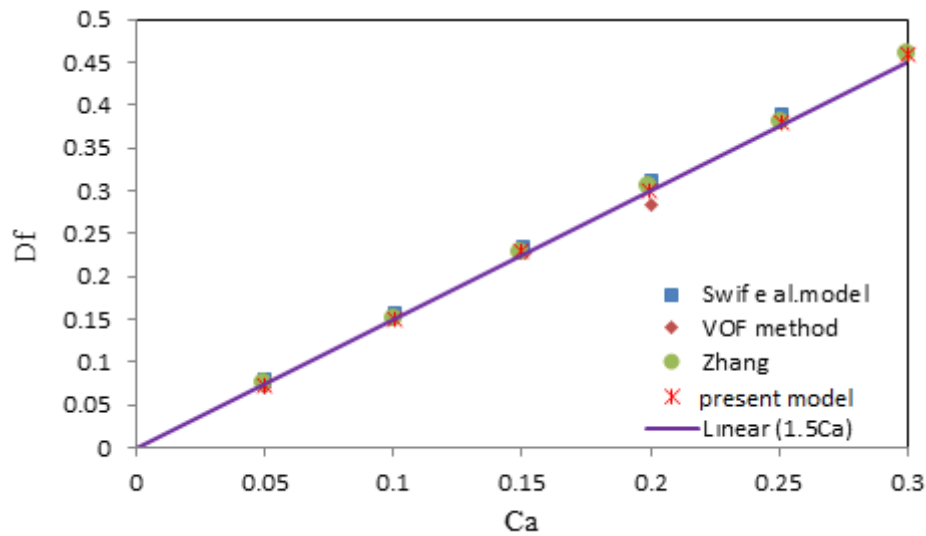
$$Df = \frac{L - B}{L + B} \quad (4-3)$$

که  $L$  و  $B$  قطر بزرگ و کوچک بیضی هستند. در دو بعد انتظار می‌رود که  $Df$  از رابطه تیلور برای اعداد موینگی کوچک [۵۸] تبعیت کند. (رابطه (۵-۳))

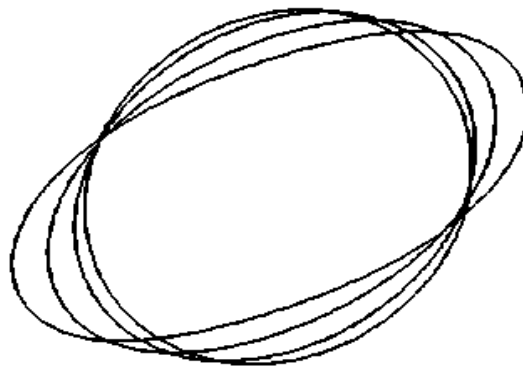
$$Df = f(\lambda)Ca \quad (5-3)$$

$\lambda$  نسبت لزجت بین قطره و سیال محیطی می‌باشد.

شکل ۷-۳ تغییرات  $Df$  بر حسب عدد موینگی ( $Ca$ ) را نشان می‌دهد. نتایج استفاده شده از مدل انرژی آزاد توسعه یافته توسط سئیت [۳۸] و روش VOF با پارامترهایی کاملاً مشابه شبیه‌سازی مقاله ژانگ [۵۹، ۱۶] که در آن از روش انرژی آزاد استفاده شده در این تحقیق، با پارامترهای مشابه استفاده شده است و به نوعی از نتایج این مقاله برای اعتبارسنجی نتایج تحقیق حاضر استفاده شده است. از شکل ۷-۳ مشخص است که نتایج شبیه‌سازی تحقیق حاضر انطباق مناسبی با مدل سئیت و روش VOF است و همچنین با مراجع [۵۹، ۱۶] دارد. در اعداد موینگی پایین همان‌طور که از رابطه (۵-۳) انتظار می‌رود رابطه خطی است. بر اساس نتایج شبیه‌سازی  $Df=1.5Ca$  شده است. شکل ۸-۳ حالت‌های قطره در حالت پایدار برای اعداد موینگی مختلف را نشان می‌دهد. نمودارها مطابقت خوبی با نتایج زو و پزریکیدیس [۵۹] داشته و همه نمودارها از دو نقطه ثابت می‌گذرد.



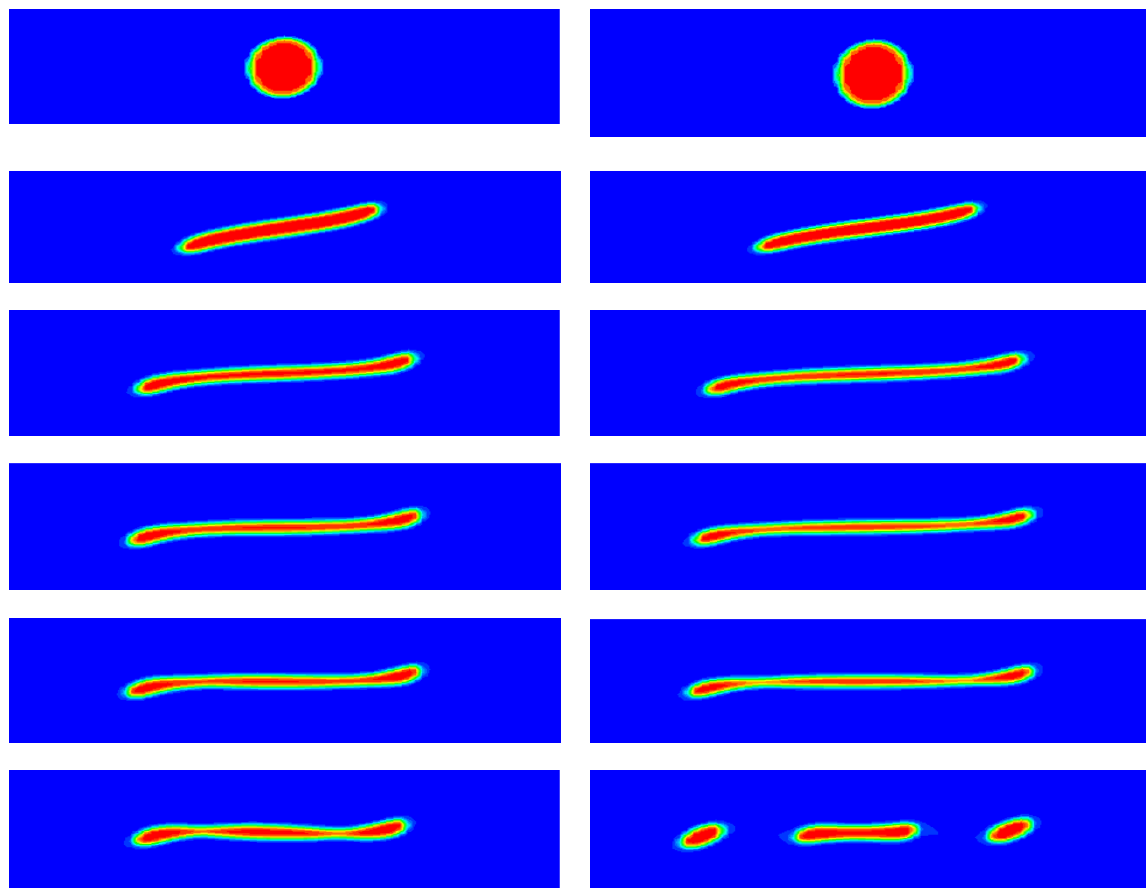
شکل ۳-۷: پارامتر تغییر شکل تیلور  $Df$  به عنوان تابعی از عدد موینگی



شکل ۳-۸: نمودار فصل مشترک پایدار قطرات تغییر شکل داده برای اعداد موینگی مختلف  
 $Ca = 0.3, 0.2, 0.1, 0.05, 0.01$

نتایج نشان می‌دهد که تجزیه قطره در عدد موینگی بحرانی ( $Ca_{cr}$ ) بین  $0.9$  و  $1.0$  برای عدد رینولدز  $Re = 1.0$  اتفاق می‌افتد و مطابقت خوبی با نتایج زو و پوزریکیدیس [۵۹، ۱۶] دارد. شکل ۳-۹ تغییر شکل قطره را تحت جریان برشی ساده برای الف)  $Ca = 0.9$  و ب)  $Ca = 1$  مورد مقایسه قرار داده است. زمان بی‌بعد به صورت  $T = \gamma t$  تعریف می‌شود. همان‌طور که از شکل مشخص است در عدد موینگی  $Ca = 1$ ، رشته میانی کوچک خواهد شد و قطره‌های کوچک‌تر از حجم جدا می‌شوند. در عدد موینگی  $Ca = 0.9$  تغییر شکل بیشینه به اندازه کافی نیست که بتواند باعث جدا شدن قطره‌های

کوچک‌تر از رشته میانی گردد. نتایج به خوبی با نتایج ارائه شده در مرجع [۵۹] و مقاله ژانگ [۱۶] همخوانی دارد.



$Ca=0.9$  (ب)

$Ca=1.0$  (الف)

شکل ۳-۹: قطره تحت جریان برشی در  $Re=1.0$  در زمان‌های مختلف.  
الف)  $Ca=1.0$  که فروپاشی قطره به دو قطره اتفاق می‌افتد. ب)  $Ca=0.9$ .

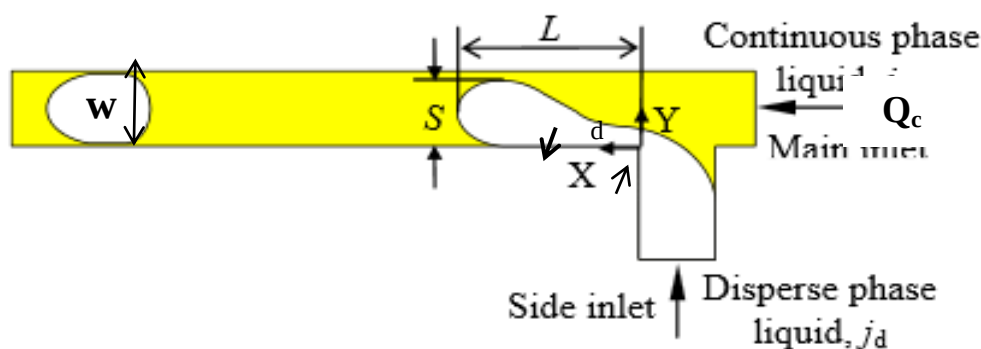
### ۴-۱-۳ شبیه‌سازی مسئله با استفاده از نرم‌افزار کامسول

پس از اعتبارسنجی‌های ذکر شده در بالا، کد شبکه بولتزمن از لحاظ مدل کردن دینامیک مسئله و تشخیص فازها صحت سنجی شد اما برای بررسی اینکه آیا کد اصلی هندسه میکروکانال را توانسته است به درستی مدل کند یا خیر، از نرم‌افزار کامسول استفاده شده است. هندسه میکروکانال با پارامترهای مشابه در نرم‌افزار کامسول شبیه‌سازی شده و نتایج آن با نتایج کد اصلی و یک مقاله به

عنوان اعتبارسنجی مقایسه شده است (شکل ۳-۲۳). پارامترهای شبیه‌سازی در بخش ۳-۲-۱-۴ بیان شده است.

### ۳-۲ شبیه‌سازی جریان در میکروکانال

هدف این بخش بررسی مکانیزم تشکیل قطره در میکروکانال‌ها می‌باشد. برای بررسی، میکروکانال  $T$  شکل انتخاب شده است. کانال  $T$  شکل میکروکانالی است که شامل یک ورودی و خروجی است (شکل ۳-۱۰). همان‌طور که در شکل مشخص شده است فاز پیوسته از میان کانال اصلی و فاز جدا شونده از میان کانال فرعی به داخل میکروکانال تزریق می‌شود. در این شبیه‌سازی، شرایط مرزی استفاده شده، سرعت مشخص در ورودی‌ها که مطابق طرح پیشنهادی زو و هی [۵۱] (بیان شده در قسمت ۲-۴-۱) و خروجی شرط مرزی خروجی آزاد [۳۳] تنظیم شده است. در دیواره‌ها نیز شرط مرزی بازگشت به عقب استفاده شده است.



شکل ۳-۱۰: شماتیکی از تشکیل قطره در یک میکروکانال  $T$  شکل

$Q_d$

### ۳-۲-۱ نتایج عددی

تشکیل قطره در یک میکروکانال  $T$  شکل تحت تأثیر چندین عدد بی‌بعد است، که اغلب توسط متغیرهای قابل اندازه‌گیری آزمایشگاهی مانند کشش سطحی، دبی جریان‌های ورودی ( $Q_c$  و  $Q_d$ ) و لزجت‌های دو جریان ( $\eta_c$  و  $\eta_d$ )، تعریف می‌شوند. یکی از مهم‌ترین اعداد بی‌بعد استفاده شده در این مسئله، عدد موینگی فاز پیوسته ( $Ca$ ) است، که به صورت نسبت نیروی ویسکوز به کشش سطحی به

صورت  $Ca = \frac{U_c \eta_c}{\gamma}$  تعریف می‌شود، که  $U_c$  میانگین سرعت ورودی فاز پیوسته،  $\eta_c$  لزجت فاز پیوسته و  $\gamma$  کشش سطحی بین دو سیال می‌باشد. از دیگر پارامترهای بی‌بعد مهم، عدد رینولدز  $Re = \frac{\rho U_c w_c}{\eta_c}$ ، نسبت نرخ‌های جریان  $Q = \frac{Q_d}{Q_c}$  و نسبت لزجت‌های دو فاز  $\lambda = \frac{\eta_d}{\eta_c}$  است. عدد بی‌بعد بوند به علت اختلاف کمی که چگالی‌های دو سیال مخلوط نشدن دارند، بسیار کوچک بوده و قابل صرف نظر است.

### ۳-۲-۱ تأثیر عدد موینگی، نسبت نرخ جریان و نسبت لزجت بر فرآیند

#### تشکیل قطره، زمان جدایش و طول جدایش

در این قسمت دینامیک جدایش قطره را در میکروکانال مورد بررسی قرار داده و نیروهایی که بر قطره اعمال می‌شود و کنش این نیروها را که منجر به جدایش قطره می‌شود، مطالعه می‌گردد. سه نیروی مختلفی که بر فاز جداشونده در طول جدایش وارد می‌شود و کنش این نیروها منجر به جدایش می‌شوند، عبارتند از: نیروی کشش سطحی ( $F_\gamma$ )، نیروی تنش برشی دیوار ( $F_T$ ) و نیروی فشاری ( $F_R$ ). حرکت فاز پیوسته و جدایش قطره، حاصل برهمکنش این نیروها در موقعیت‌های مختلف می‌باشد. وقتی فاز پیوسته در کانال اصلی جریان پیدا می‌کند، به علت تنش برشی و فشار وارده، قطره به سمت پایین دست حرکت می‌کند.

در مرحله اولیه فرآیند تشکیل قطره، جبهه فاز جداشونده وارد کانال اصلی می‌شود. وقتی سیال جداشونده وارد کانال اصلی می‌شود، به دلیل جهت جریان فاز پیوسته، به سمت پایین دست حرکت می‌کند. بعد از اینکه فاز جداشونده تمام عرض کانال را اشغال کرد، گلوئی فاز جداشونده شروع به باریک شدن می‌کند و سرانجام جدایش رخ می‌دهد. مراحل جدایش شامل ۵ مرحله است: ۱- جبهه فاز جداشونده وارد کانال اصلی می‌شود. ۲- قطره در راستای  $y$  کشیده می‌شود تا تمام عرض کانال اصلی را پر کند. ۳- قطره در جهت پایین دست کشیده شده (ضخامت گلوئی ( $d$ ) کاهش می‌یابد). ۴- جدایش اتفاق می‌افتد و قطره جدا شده و به سمت پایین دست حرکت می‌کند.

برای قطره جدا شده که در یک حالت تعادلی قرار گرفته، مرتبه بزرگی کشش سطحی را می-توان با  $\Delta p_L = 2\gamma/R$  برآورد کرد که  $R$  شعاع مشخصه انحنای فصل مشترک  $R \approx w/2$  خواهد بود.

الگوهای جریان به سه رژیم مختلف فشرده‌گی، چکه کردن<sup>۱</sup> و جتی<sup>۲</sup> تقسیم می‌شود. در رژیم فشرده‌گی، سیال فاز جداشونده تمایل دارد تمام عرض کانال اصلی را اشغال کند و گوشه تیز قسمت  $T$  شکل، نقطه جدایش قطره است. در این حالت، فشار حاصله از فاز پیوسته بر روی فاز جداشونده نقش اساسی در این مسئله دارد. در رژیم چکه کردن نیروهای تنش ویسکوز نقش مهمی دارند و در نسبت نرخ جریان‌های کوچک، نقطه جدایش همان نقطه تیز کانال  $T$  شکل است. با افزایش نسبت نرخ جریان، نقطه جدایش از گوشه تیز قسمت  $T$  شکل به طرف پایین دست جریان حرکت می‌کند. در نتیجه در اعداد موینگی بالا و نسبت نرخ جریان بالا نقطه جدایش به سمت پایین دست حرکت کرده و حالت جت پایداری را به وجود آورده است.

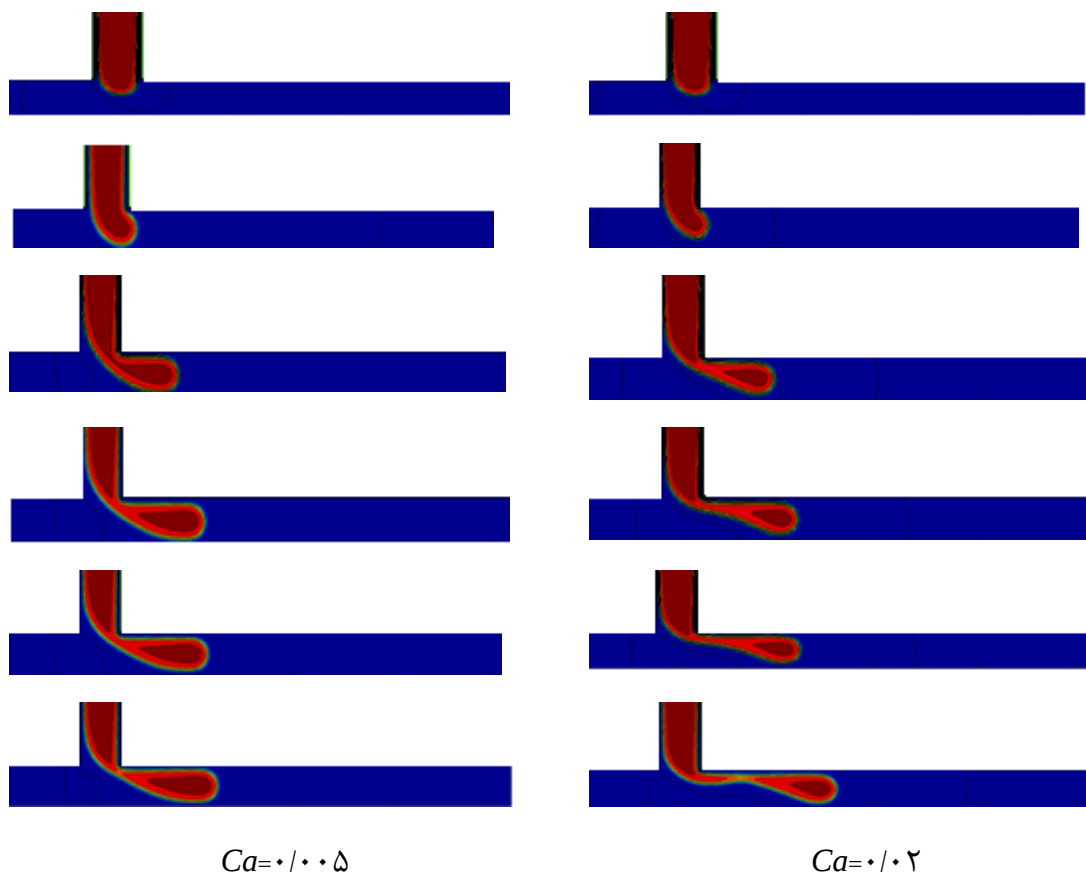
شکل ۳-۱۳ نمودار  $S$  (نشان داده در شکل ۳-۱۰) را بر حسب زمان نشان می‌دهد. همان‌طور که در این نمودار هم مشخص شده است فرآیند اولیه تشکیل قطره شامل سه مرحله است: مرحله رشد در جهت  $x$  و  $y$ ، مرحله رشد در جهت  $x$  و مرحله جدایش. شکل ۳-۱۱ فرآیند تشکیل قطره را به ازای اعداد موینگی مختلف و نسبت نرخ جریان‌های مختلف نشان می‌دهد. همان‌طور که از شکل ۳-۱۱ مشخص است این رفتار در تمام موارد قابل مشاهده است. در مرحله رشد قطره در جهت  $x$  و  $y$ ، قسمت پلاگ شکل هم در جهت  $x$  (موازی کانال اصلی) و هم در جهت  $y$  (عمود بر کانال اصلی) شروع به رشد کرده و وارد کانال اصلی می‌شود و به طور هم‌زمان در جهت  $x$  و  $y$  نیز پیشروی می‌کند تا سر قطره به دیوار پایینی کانال اصلی برسد. در این حالت قطره تمام عرض کانال اصلی را اشغال می‌کند. در اینجا مرحله رشد در جهت  $y$  پایان یافته و مرحله رشد در جهت  $x$  آغاز می‌گردد. در این مرحله قطره شروع به پیشروی در جهت  $x$  می‌کند. گلوئی قطره به واسطه فشار اعمالی از طرف فاز پیوسته بر

<sup>1</sup> Dripping

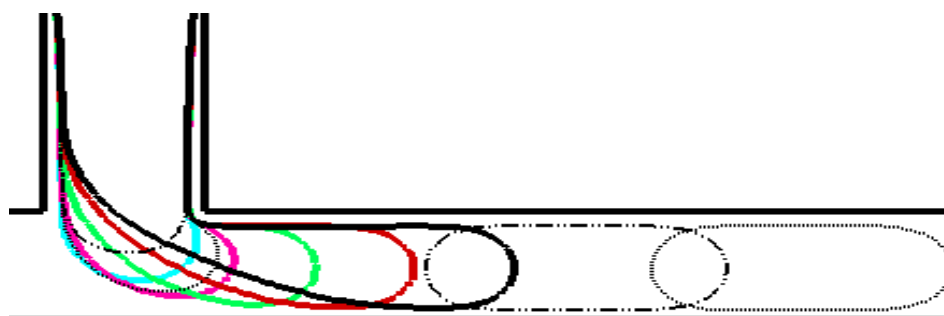
<sup>2</sup> Jetting

فاز جداشونده به طرف پایین دست جریان کشیده می‌شود و باریک و باریک‌تر می‌شود تا زمانی که جدایش آغاز می‌شود. زمانی را که طول می‌کشد تا این فرآیند شکل گرفته و قطره به نقطه جدایش برسد را زمان جدایش گویند. همان‌طور که در شکل ۳-۱۱ مشاهده می‌شود بیشترین زمان جدایش در مرحله رشد در جهت  $x$  و  $y$  می‌باشد.

همان‌طور که در قسمت بالا ذکر شد  $S$  به طور پیوسته در مرحله رشد در جهت  $x$  و  $y$  افزایش می‌یابد، اما افزایش نرخ  $S$  به آرامی انجام می‌شود تا به یک مقدار مشخصی برسد و سپس پلاگ شروع به رشد در جهت  $x$  می‌کند. همین‌طور که پلاگ در جهت  $y$  رشد می‌کند، مسیر جریان فاز پیوسته باریک‌تر می‌شود و سرعت مؤثر آن افزایش می‌یابد تا بتواند نیروی دراگ را افزایش دهد. اندازه  $S$  در مرحله رشد در جهت  $x$  ثابت می‌ماند. در مرحله جدایش،  $S$  مجدداً افزایش می‌یابد، چون قسمت پلاگ شده در داخل میکروکانال قصد دارد شکل خود را به کمک کشش سطحی به حالت کروی نزدیک‌تر کند.

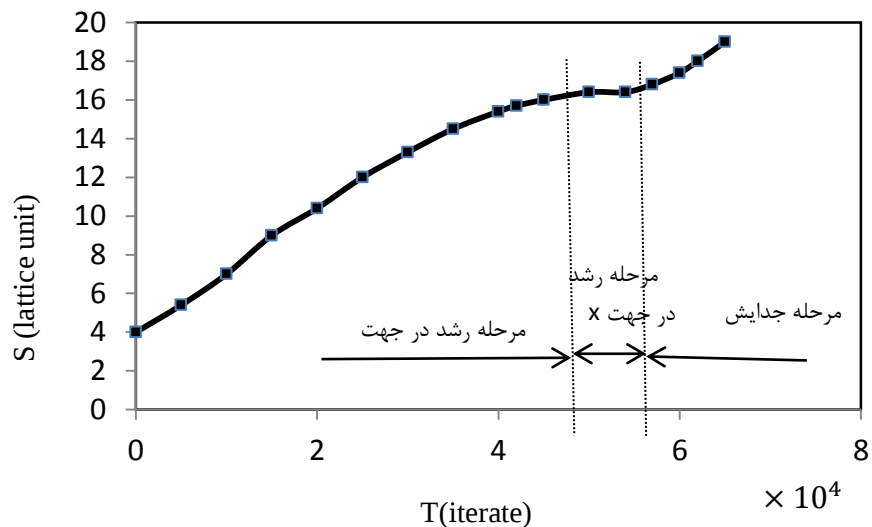


شکل ۱۱-۳: مراحل حرکت فاز جداشونده تا رسیدن به مرحله جدایش به ازای نسبت نرخ جریان  $R=0.5$ ، نسبت لزجت  $\frac{\eta_d}{\eta_c}=0.5$  در دو عدد موینگی ۰/۰۰۵ و ۰/۰۲



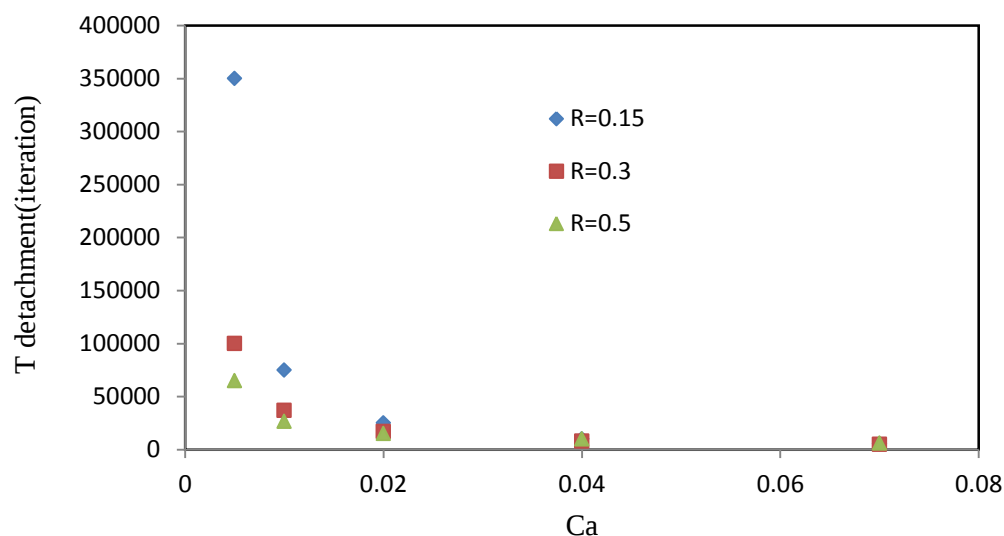
شکل ۱۲-۳: شما تیکی از پیش روی قطره

از مرحله نخستین یعنی نفوذ سیال جداشونده در کانال اصلی (آبی رنگ) و سپس پیشروی تا وقتی فاز جداشونده کل عرض کانال اصلی را اشغال کند (صورتی-سبز) و سپس مرحله مرحله حرکت و کشیده شدن در راستای  $X$  (قرمز) و سپس مرحله جدایش (خط پر سیاه رنگ) و بعد از جدایش قطره جدا شده و در کانال اصلی به سمت پایین دست جریان حرکت می کند (پلاگ های خط چین مشکی)

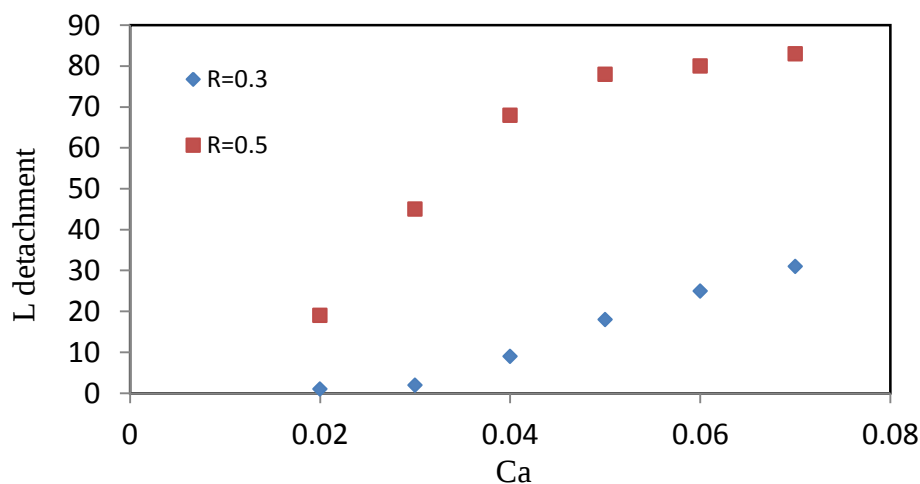


شکل ۳-۱۳: مراحل رشد قطره به ازای عدد موینگی  $Ca=0.005$ ، نسبت نرخ جریان  $R=0.5$ ، نسبت لزجت  $\frac{\eta_d}{\eta_c}=0.5$

شکل ۳-۱۴ زمان جدایش را به ازای اعداد موینگی‌های مختلف در سه نسبت نرخ جریان  $0.5/0.3$  و  $0.15/0$  نشان می‌دهد. همان‌طور که از نمودار هم مشخص است با افزایش عدد موینگی و با افزایش نسبت جریان، زمان جدایش کاهش می‌یابد. به عبارتی با افزایش سرعت فاز پیوسته زمان جدایش کاهش می‌یابد. شکل ۳-۱۵ طول جدایش را به ازای عدد موینگی‌های مختلف و دو نسبت نرخ جریان  $0.5/0.3$  و  $0.15/0$  را نشان می‌دهد. همان‌طور که در بالا نیز بدان اشاره شد با افزایش عدد موینگی، قطره طول بیشتری را به سمت پایین دست کشیده شده و طول جدایش افزایش می‌یابد. با افزایش نسبت نرخ جریان طول جدایش نیز افزایش می‌یابد (نزدیک شدن به رژیم جتی).



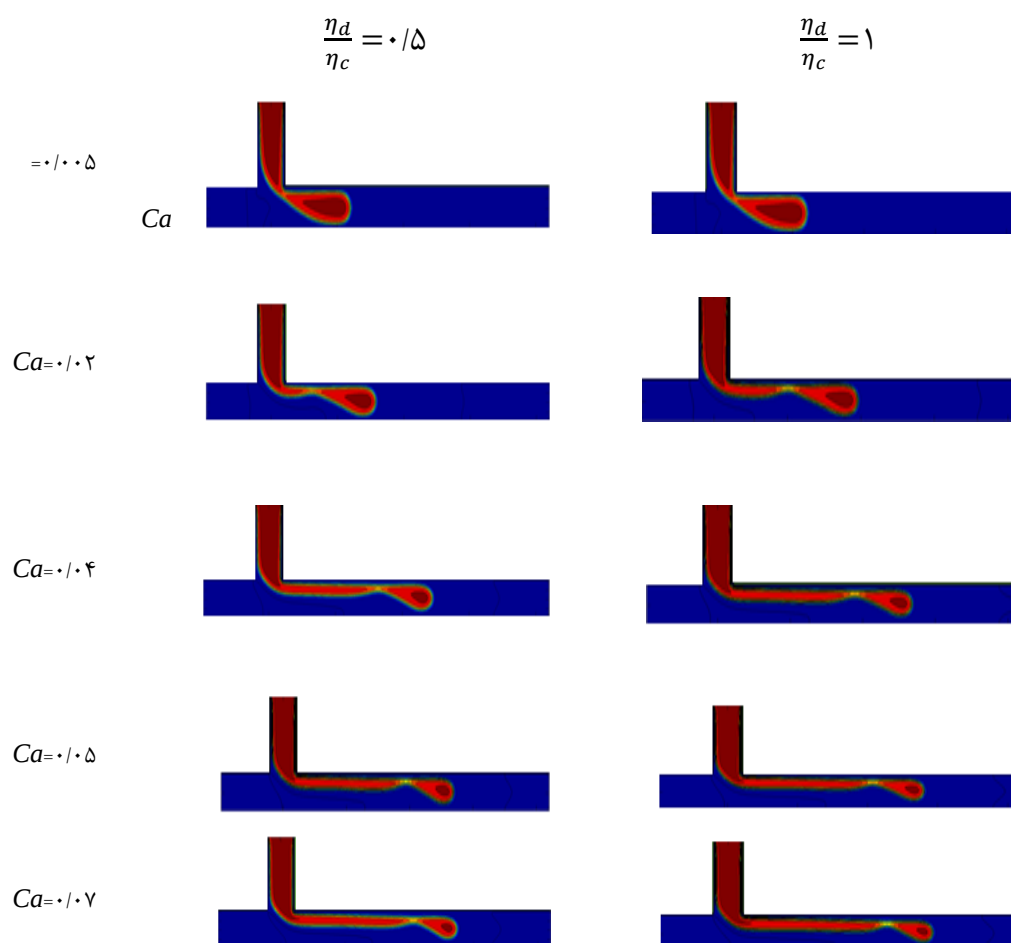
شکل ۳-۱۴: نمودار زمان جدایش بر حسب عدد موینگی برای نسبت نرخ جریان‌های ۰/۵ و ۰/۳ و ۰/۱۵



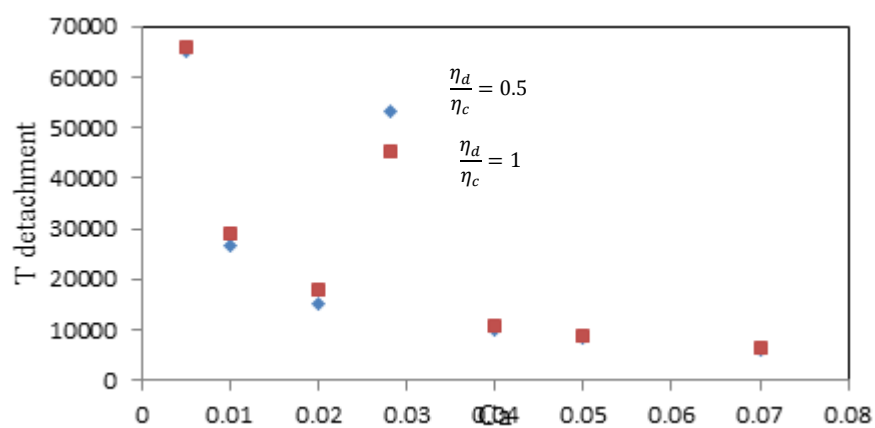
شکل ۳-۱۵: نمودار طول جدایش بر حسب عدد موینگی به ازای دو نسبت نرخ جریان ۰/۵ و ۰/۳ در نسبت لزجت ثابت ۰/۵

مطابق

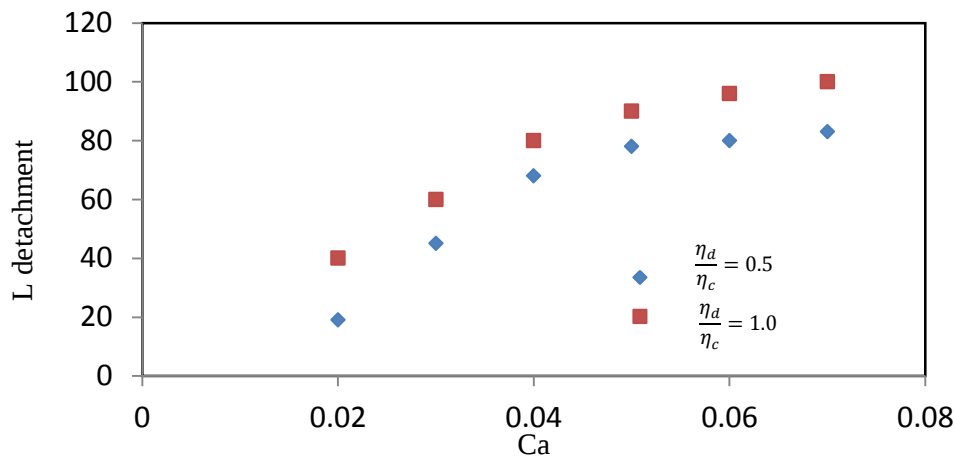
شکل ۳-۱۶ وقتی لزجت فاز جداشونده افزایش می‌یابد، کشیدگی گردن طولانی‌تر شده و زمان جدایش افزایش می‌یابد. نمودار شکل ۳-۱۷ تغییرات زمان جدایش را برای نسبت لزجت‌های مختلف نمایش می‌دهد. نمودار شکل ۳-۱۸ افزایش کشیدگی گردن (افزایش طول جدایش) را با افزایش نسبت لزجت نشان می‌دهد.



شکل ۳-۱۶: زمان جدایش به ازای اعداد موینگی مختلف ۰/۰۵، ۰/۰۱، ۰/۰۲، ۰/۰۴، ۰/۰۵، ۰/۰۷ و به ازای دو نسبت لزجت مختلف ۰/۵ و ۱/۰



شکل ۳-۱۷: نمودار زمان جدایش بر حسب عدد موینگی به ازای نسبت لزجت‌های ۰/۵ و ۱/۰



شکل ۳-۱۸: نمودار طول جدایش به ازای نسبت لزجت‌های ۰/۵ و ۱/۰ در یک نسبت نرخ جریان ثابت ۰/۵

### ۳-۲-۱-۲ تأثیر عدد موینگی بر اندازه قطره و فرکانس تشکیل

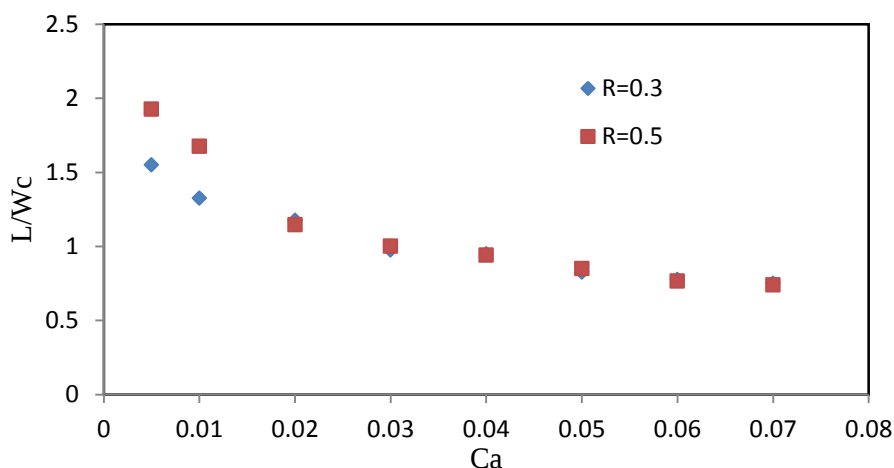
عدد موینگی فاز پیوسته پارامتر مهمی در دسته‌بندی رژیم‌های جریان دوفازی در میکروکانال‌ها می‌باشد [۱۰، ۶۰، ۶۱]. سه رژیم جریان را می‌توان برای فاز جداشونده پیدا کرد: رژیم فشردگی<sup>۱</sup> ( $L > 2W_c$ )، رژیم چکه کردن<sup>۲</sup> ( $2W_c > L > W_c$ ) و رژیم جتی<sup>۳</sup> ( $L < W_c$ ) [۶۱] که  $L$  طول قطره و  $W_c$  عرض کانال میانی می‌باشد. نمودار شکل ۳-۱۹ تغییرات اندازه قطره را در اعداد موینگی مختلف به ازای دو نسبت نرخ جریان ۰/۵ و ۰/۳ نشان می‌دهد که همخوانی خوبی با نتایج دی‌منخ و همکاران (۲۰۰۸) دارد. در رژیم فشردگی عدد موینگی تأثیر چندانی بر اندازه قطره ندارد و اندازه قطره به شدت وابسته به نسبت نرخ جریان‌ها می‌باشد و با افزایش نسبت نرخ جریان قطره‌های بزرگتری تشکیل می‌شود. اما در مقابل در رژیم چکه کردن عدد موینگی تأثیر زیادی بر اندازه قطره داشته و اندازه قطره تقریباً مستقل از نسبت نرخ جریان می‌باشد. در این حالت قطره‌ها به صورت تناوبی، مجزا

<sup>1</sup>Squeezing

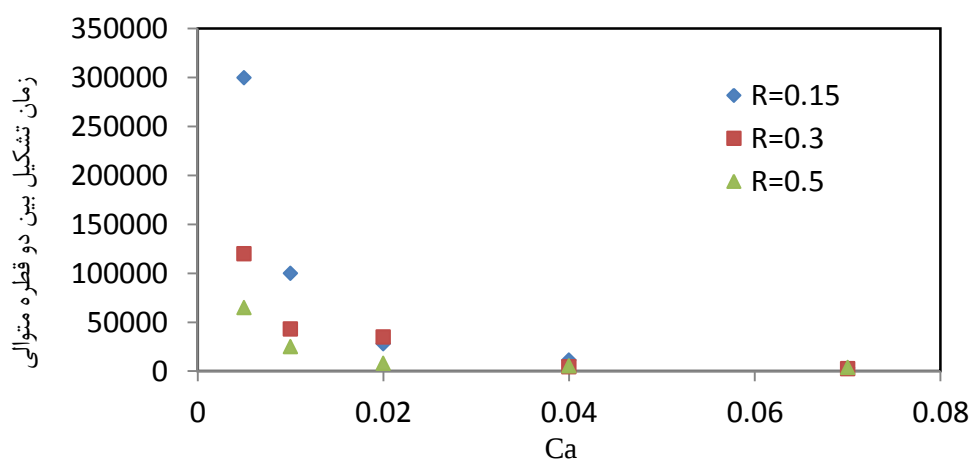
<sup>2</sup>Dripping

<sup>3</sup>Jetting

از هم و با فرکانس ثابت از نوک کانال تشکیل می‌شوند و این رژیم در نسبت سرعت‌های پایین اتفاق می‌افتد. در رژیم جتی سیال جداشونده از کانال میانی در ناحیه‌ای دورتر از نوک کانال جدا شده و تبدیل به قطره می‌شود. این رژیم در نسبت سرعت‌های بالا رخ می‌دهد. همان‌طور که در نمودار مشخص شده به ازای اعداد موینگی  $Ca \leq 0.1$  رژیم فشردگی و برای اعداد موینگی بین  $0.1$  تا تقریباً  $0.3$  رژیم چکه کردن و برای اعداد موینگی بالاتر، رژیم جتی مشاهده می‌شود. برای نسبت نرخ جریان‌های خیلی کم همچون  $Q=0.15$  و در اعداد موینگی پایین (رژیم فشردگی)، سیال فاز جداشونده تمایل دارد تمام عرض کانال اصلی را اشغال کند و گوشه تیز قسمت  $T$  شکل، نقطه جدایش قطره می‌شود و فشار حاصله از فاز پیوسته بر روی فاز جداشونده نقش اساسی در این مسئله دارد و نسبت نرخ جریان تأثیری بر این رژیم ندارد. اما با افزایش  $Ca$  به  $0.2$  رژیم به چکه کردن تغییر می‌کند که در این رژیم نیروهای تنش ویسکوز نقش مهمی دارند و در نسبت جریان‌های کوچک نقطه جدایش همان نقطه تیز کانال  $T$  شکل است. اما با افزایش نسبت نرخ جریان نقطه جدایش از گوشه تیز قسمت  $T$  شکل به طرف پایین دست جریان حرکت می‌کند. در اعداد موینگی بالا و نسبت نرخ جریان بالا نقطه جدایش به سمت پایین دست حرکت کرده و حالت جت پایداری را به وجود آورده است. فرکانس تشکیل قطره به صورت ۱ تقسیم بر زمان تشکیل بین دو قطره متوالی تعریف می‌شود. در اعداد موینگی کم با افزایش نسبت نرخ جریان، فاصله بین قطرات کاهش یافته و طبق نمودار شکل ۳-۲۰ زمان تشکیل بین دو قطره متوالی افزایش می‌یابد. با افزایش عدد موینگی و ورود به رژیم چکه کردن همین روند ادامه پیدا می‌کند. اما از عدد موینگی تقریباً  $0.4$  به بعد افزایش نسبت نرخ جریان تأثیر چندانی در فاصله بین قطرات و زمان تشکیل بین دو قطره متوالی ندارد. این نتایج در شبیه‌سازی‌های [۱۷، ۶۰] و مشاهدات آزمایشگاهی [۶۲] نیز مشاهده شده است.



شکل ۳-۱۹: نمودار اندازه قطره ( $L$ ) به ازای اعداد موینگی مختلف و در دو نسبت نرخ جریان  $0/3$  و  $0/5$  در نسبت لزجت ثابت  $0/5$

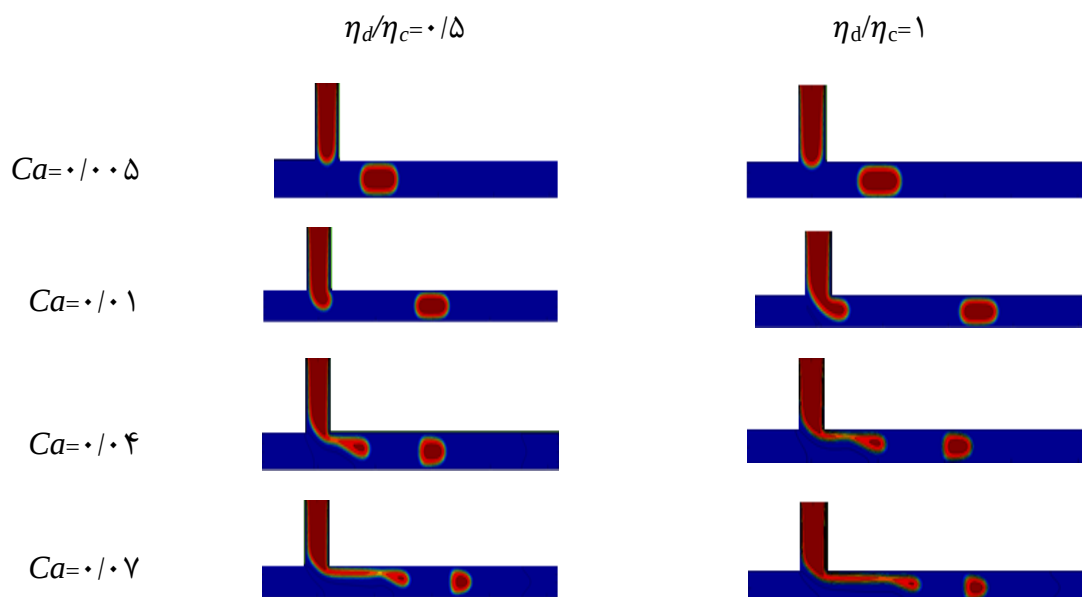


شکل ۳-۲۰: نمودار زمان تشکیل بین دو قطره متوالی بر حسب  $Ca$  به ازای نسبت نرخ جریانهای  $0/15$  و  $0/3$  و  $0/5$  در یک نسبت لزجت ثابت  $0/5$

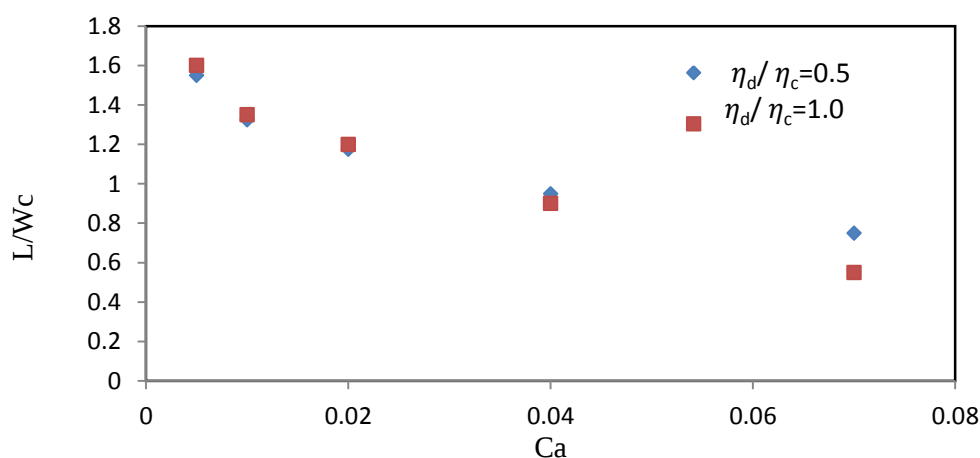
### ۳-۱-۲-۳ تأثیر نسبت لزجت بر اندازه قطره

شکل ۳-۲۱ فرآیند تشکیل قطره را به ازای دو نسبت لزجت ( $\eta_d/\eta_c$ ) مختلف  $0/5$  و  $1/0$  در یک نسبت نرخ جریان ثابت  $0/3$ ، نشان می‌دهد. مطابق شکل در اعداد موینگی پایین همان‌طور که قبلاً ذکر شد قطره تمام عرض کانال را پر کرده و جدایش در قسمت نقطه تیز قسمت  $T$  شکل برای دو نسبت لزجت اتفاق می‌افتد و نسبت لزجت تأثیری در اندازه قطره ندارد. با افزایش عدد موینگی و عبور از رژیم فشردگی، نسبت لزجت بیشتر، موقعیت نقطه جدایش را به سمت پایین دست جریان هل می‌دهد. در

این حالت فروپاشی قطره حاصل رقابت بین نیروی برشی ویسکوز و نیروی موینگی است. شکل ۳-۲۲ نمودار اندازه قطره در اعداد موینگی مختلف در دو نسبت لزجت ۱/۰ و ۰/۵ را نشان می‌دهد. مطابق شکل در اعداد موینگی پایین (رژیم فشردگی) و بخشی از رژیم چکه کردن، اندازه قطره مستقل از نسبت لزجت می‌باشد اما از یک عدد موینگی به بعد ( $Ca=0.04$ ) اندازه قطره به نسبت لزجت کاملاً وابسته است و برای نسبت لزجت بیشتر، قطرات کوچکتری را شاهدیم.



شکل ۳-۲۱: شماتیکی از اندازه قطرات به ازای اعداد موینگی مختلف در دو نسبت لزجت ۰/۵ و ۱/۰ و به ازای نسبت نرخ جریان ثابت ۰/۳



شکل ۳-۲۲: اندازه قطره بر حسب عدد موینگی برای نسبت لزجت ۰/۵ و ۱/۰ در یک نسبت نرخ جریان ۰/۳

### ۴-۱-۲-۳ تأثیر نسبت نرخ جریان ( $Q_d/Q_c$ ) بر اندازه قطره

همان‌طور که در بالا ذکر شد در رژیم فشردگی عدد مویینگی تأثیر چندانی بر اندازه قطره ندارد و اندازه قطره به شدت وابسته به نسبت نرخ جریان‌ها می‌باشد. شکل ۳-۲۳ وابستگی اندازه قطره را به ازای نسبت جریان‌های مختلف در اعداد مویینگی پایین (رژیم فشردگی) نشان می‌دهد. در اعداد مویینگی پایین معمولاً کمتر از ۰/۱ تشکیل قطره نتیجه نیروی فشاری‌ای هست که توسط فاز پیوسته بر فاز جداشونده اعمال می‌شود. تنش برشی اعمال شده بر فصل مشترک، نیروهای دراگ ویسکوز، در مقایسه با نیروهای کشش سطحی برای قطره در حال ظهور می‌تواند نادیده گرفته شود و فشار فشرده‌کننده، نقش اساسی را در فروپاشی قطره ایفا می‌کند. نیروهای ویسکوز به اندازه کافی قوی نیستند تا بر نیروهای فصل مشترک غلبه کنند بنابراین قطره تمام قسمت  $T$  شکل کانال اصلی و در نتیجه جریان سیال پیوسته را مسدود می‌کند. در این لحظه طول قطره تقریباً مساوی با عرض کانال تخمین زده می‌شود که این منجر به افزایش فشار در قسمت بالادستی جریان قطره در حال ظهور می‌شود. گردن قطره فشرده می‌شود و این رشد به نوبه خود در قطره در یک نسبت نرخ جریان  $Q_d$  ادامه می‌یابد. سر فاز جداشونده به سمت کانال اصلی دراز می‌شود تا زمانی که گردن فاز جداشونده (ضخامت گردن فاز جداشونده با پارامتر  $d$  مشخص شده است) به اندازه کافی باریک شود. نرخ کاهش ضخامت گردن فاز جداشونده ( $d$ ) تقریباً با سرعت متوسط فاز پیوسته برابر است،  $U_{squeeze} \approx U = Q_c/hw$ . در طول این فرآیند قطره با نرخ  $U_{growth} \approx Q_d/hw$  کشیده می‌شود تا در نهایت قطره‌ای از سیال جداشونده تشکیل و از سیال، جدا شود که در نتیجه طول نهایی قطره خواهد شد:

$$L \approx w + \left( \frac{d}{U_{squeeze}} \right) U_{growth} = w + dQ_d/Q_c$$

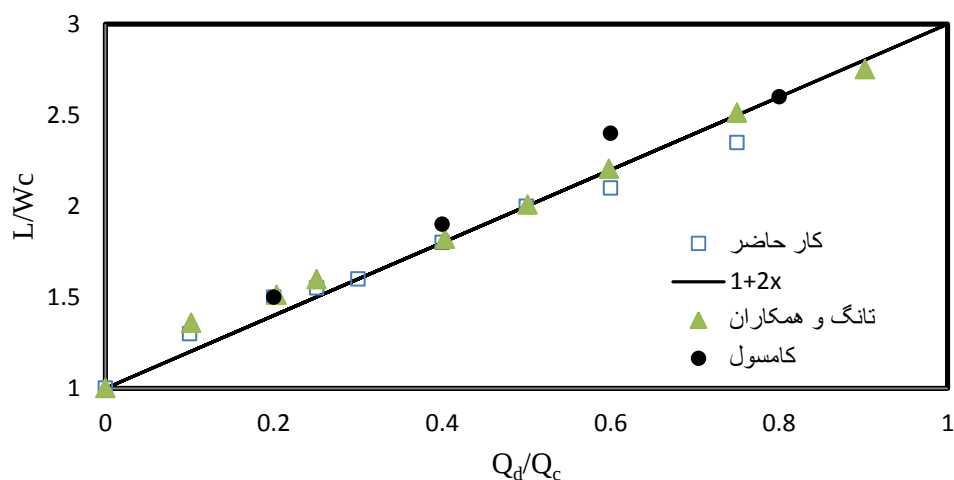
با بی‌بعد سازی آن خواهیم داشت:

$$\frac{L}{W_c} = 1 + \alpha \frac{Q_d}{Q_c} = 1 + \alpha \frac{U_d \times W_d}{U_c \times W_c} \quad (۶-۳)$$

بنابراین طول قطره می‌تواند از قانون مقیاس گذاری از تک معادله زیر پیروی کند که همخوانی

خوبی با روابط و نتایج ارائه شده توسط داده‌های آزمایشگاهی گاراستکی (۲۰۰۶) و کریستوفر (۲۰۰۸)

دارد که در آن  $L$  طول قطره جداشونده،  $W_c$  عرض کانال اصلی و  $\alpha$  یک ثابت است. در این بخش هندسه میکروکانال با نرم افزار کامسول نیز شبیه سازی شد تا بتوان نمودار طول قطره به ازای نسبت نرخ جریان های مختلف را با نرم افزار کامسول و همچنین نتایج تانگ و همکاران مقایسه کرد. نتایج مطابقت خوبی با کار تانگ و همکاران و نتایج مستخرج از شبیه سازی کامسول دارد که این خود می تواند دلیلی بر صحت کد باشد.

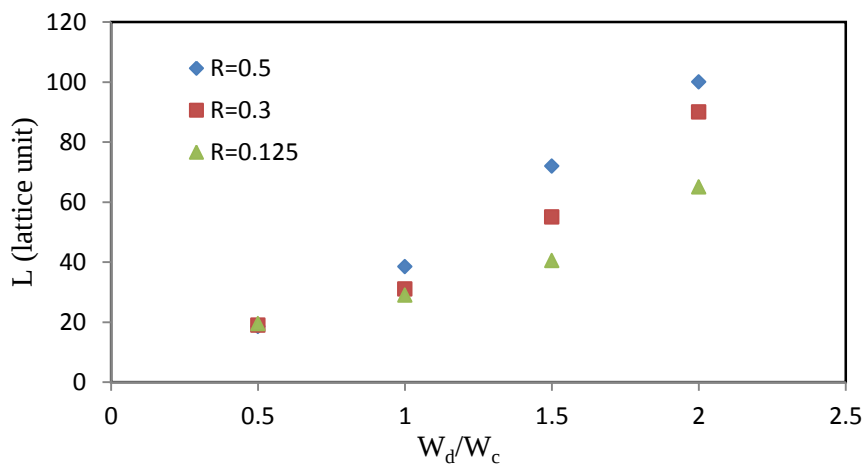


شکل ۳-۲۳: نمودار طول قطره به عنوان تابعی از نسبت نرخ جریان در عدد موینگی ثابت  $Ca=0.05$  و مقایسه کار حاضر با رابطه خطی  $1+2x$  و کار تانگ و همکاران

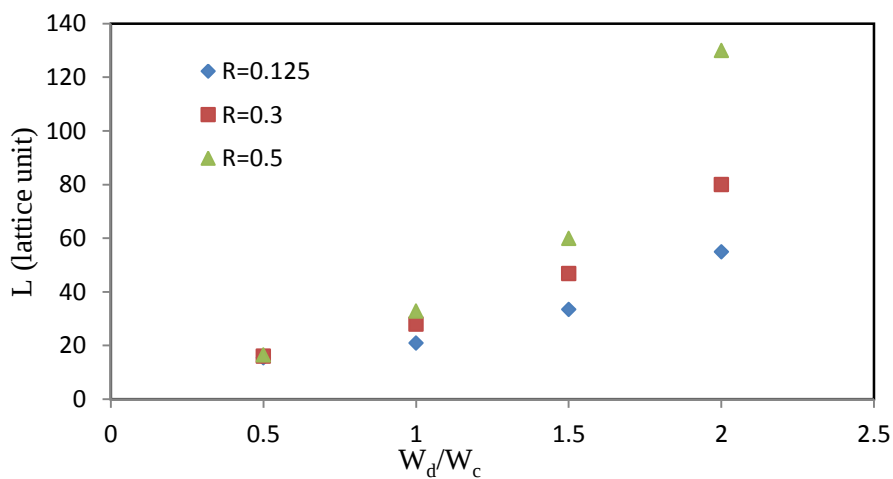
### ۵-۱-۲-۳ تأثیر هندسه

نسبت عرض کانال اصلی ( $W_c$ ) به کانال فرعی ( $W_d$ ) نیز می تواند بر طول قطره اثر بگذارد. در این بخش تغییرات نسبت عرض ها ( $W_d/W_c$ ) و اثر آن بر طول قطره مورد مطالعه قرار می گیرد. زاویه تماس سیال با دیواره ها ۱۸۰ درجه در نظر گرفته می شود. چگالی های دوفاز را برابر و برابر مقدار ۱ و نسبت لزجت بین دو فاز ۰/۵ در نظر گرفته می شود. شکل ۳-۲۴ تغییرات اندازه قطره را به ازای نسبت عرض کانال های مختلف و به ازای سه نسبت نرخ جریان ۰/۱۵، ۰/۳ و ۰/۵ در دو عدد موینگی  $Ca=0.05$  و  $Ca=0.1$  و عرض کانال اصلی ثابت را نشان می دهد. همان طور که مشاهده می شود، هر چه قدر عرض کانال فرعی کمتر باشد، قطرات بزرگتری تشکیل می شود. همان طور که از شکل مشخص است برای تمام نمونه ها وقتی نسبت عرض ها ( $W_d/W_c$ ) کمتر از ۱/۰ باشد، به ازای نسبت

سرعت‌های مختلف طول نهایی قطره اختلاف محسوسی ندارد اما با افزایش نسبت عرض، اختلاف طول نهایی قطره به ازای نسبت سرعت‌های مختلف افزایش می‌یابد.

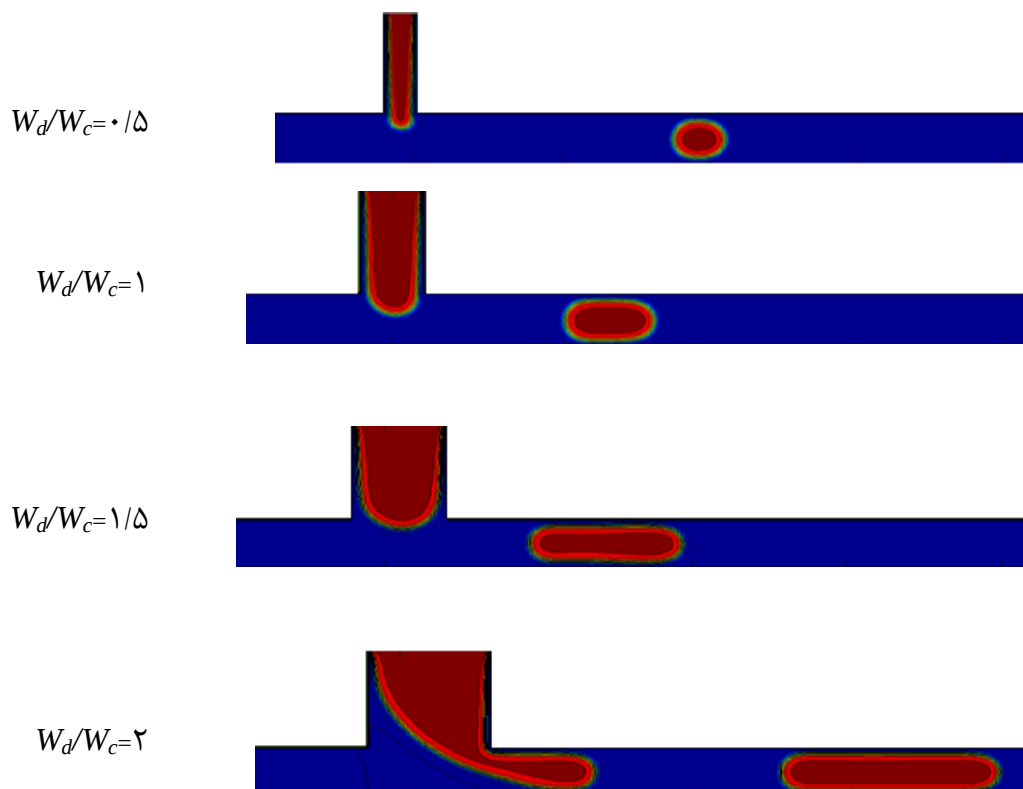


الف)  $Ca=0.05$

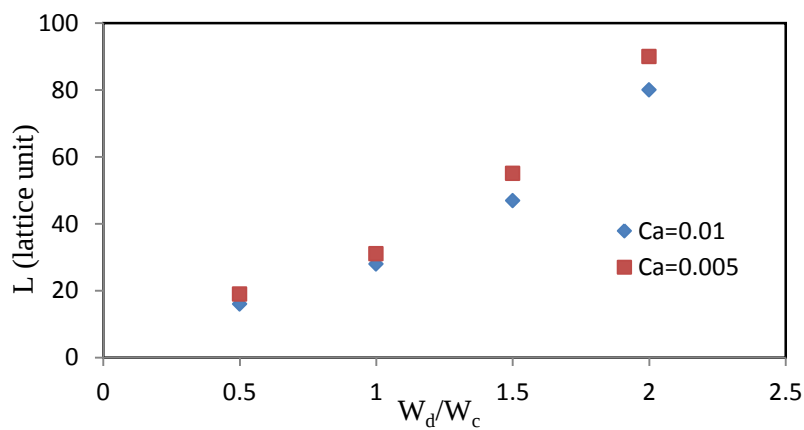


ب)  $Ca=0.1$

شکل ۳-۲۴: تغییرات اندازه قطره به ازای دوعدد موینگی مختلف و به ازای نسبت عرض‌های ورودی دو کانال مختلف و به ازای سه نسبت نرخ جریان مختلف ۰/۱۵، ۰/۳ و ۰/۵ در یک نسبت لزجت ثابت ۰/۵



شکل ۳-۲۵: شماتیکی از تأثیر نسبت عرض‌ها بر اندازه قطرات در عدد مویینگی ۰/۰۱ و نسبت نرخ جریان ۰/۳ و نسبت لزجت ۰/۵



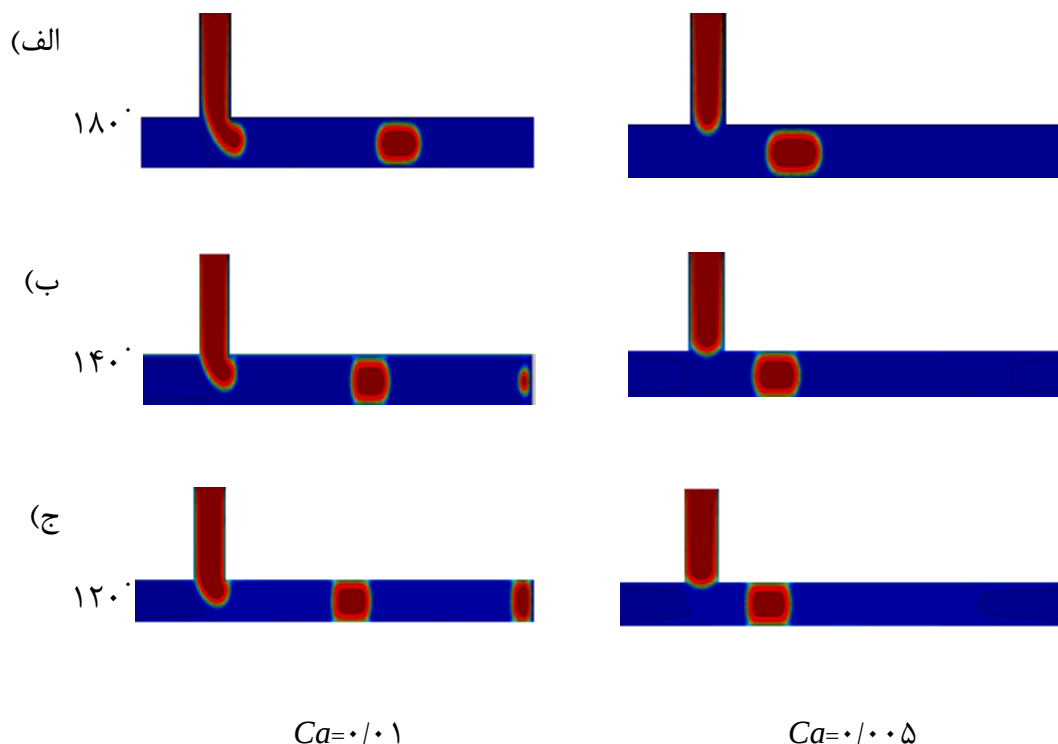
شکل ۳-۲۶: نمودار اندازه قطره در نسبت عرض‌های مختلف به ازای دو عدد مویینگی ۰/۰۰۵ و ۰/۰۱ به ازای یک نسبت نرخ جریان ثابت ۰/۳ و نسبت لزجت ثابت ۰/۵

### ۳-۲-۱-۶ تأثیر خواص ترشوندگی

زاویه تماس قطره با سطح دیوار، نقش مهمی را در طول نهایی قطره در اعداد مویینگی پایین ایفا می‌کند.

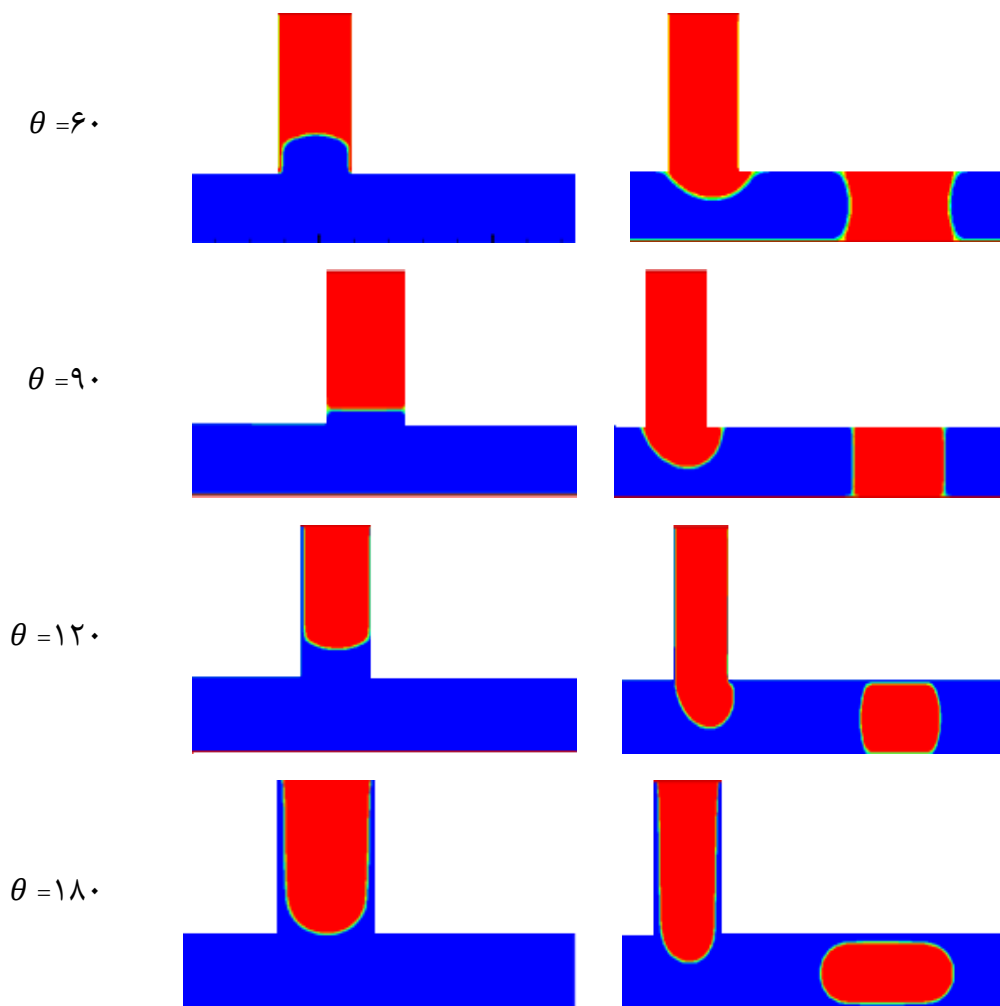
کند. مهم‌ترین دلیل این است که سایز قطره در اعداد موینگی پایین خیلی بزرگ است و قطرات پلاگ شکل هستند و در نتیجه بخش بزرگی از قطره به دیواره‌های کانال چسبیده است. بنابراین قطره تشکیل شده در کانال‌هایی با دیواره‌های آبگریز بزرگتر از قطرات تولیدی در کانال‌هایی با دیواره‌های آبدوست، می‌باشند (شکل ۳-۲۷، ستون دوم). اما وقتی جریان دوفازی در رژیم قطره‌شدن است، سایز قطره کوچک است و تنها بخش کوچکی از قطره در تماس با دیوار قرار دارد، بنابراین این تأثیر با افزایش عدد موینگی به تدریج کاهش می‌یابد.

در ضمن یک پدیده جالب در کانال اصلی ظاهر می‌شود که با توسعه و کاهش زاویه تماس قطره، متفاوت می‌باشد. شکل قطره با کاهش زاویه تماس به تدریج از شبه کره به گلابی شکل، تغییر می‌کند. در نتیجه به منظور به دست آوردن قطرات تقریباً کروی زاویه تماس بین قطره و دیواره‌های کانال نباید خیلی کوچک تنظیم گردد.



شکل ۳-۲۷: الگوی جریان به ازای دو عدد موینگی ۰/۰۱ و ۰/۰۰۵ و برای سه زاویه تماس ۱۲۰ و ۱۴۰ و ۱۸۰ درجه

شکل ۲۸-۳ الگوی جریان را از مرحله پایین آمدن فاز جداشونده تا جدایش و در نهایت تشکیل قطره را به ازای یک عدد موینگی ثابت در زوایای تماس مختلف، نشان می‌دهد. وقتی که زاویه تماس بین قطره و دیوار کم باشد، قطره با انحنايي مقعر فرود می‌آید و زاویه‌ای که قطره با دیوارهای کانال فرعی می‌سازد، کمتر از  $90^\circ$  است. دیواره‌های کانال به شدت آبدوست هستند بنابراین قطره با دیواره‌های کانال انحنای مقعری می‌سازد که در شکل ۲۸-۳ مشاهده می‌شود. وقتی زاویه تماس بین قطره و دیوار کانال  $90^\circ$  است، قطره با انحنایی  $90^\circ$  درجه فرود می‌آید و یک قطره تقریباً مستطیل شکل در میکروکانال تولید می‌شود. این نتایج با شبیه‌سازی‌های عددی گراف و شبیه‌سازی عددی تانگ [۱۷] مطابقت کامل دارد.



شکل ۲۸-۳: الگوی جریان فاز جداشونده به ازای زوایای تماس مختلف در  $Ca=0.05$  و نسبت نرخ جریان  $0.5$  و نسبت ویسکوزیته  $0.5$

### ۳-۳ نتیجه گیری فصل سوم

در این فصل از روش شبکه بولتزمن با مدل انرژی آزاد برای شبیه‌سازی فرآیند تشکیل قطره نیوتونی در یک سیال نیوتونی در میکروکانال  $T$  شکل (شامل دوسیال مخلوط‌نشدنی) استفاده شده است. برای صحت‌سنجی اعمال صحیح مدل، از آزمون لاپلاس، آزمون زاویه تماس و آزمون تغییر شکل قطره تحت جریان برشی ساده استفاده شده است. در ادامه دینامیک تشکیل قطره مورد مطالعه قرار گرفته است. سه رژیم فشردگی، چکه کردن و جتی معرفی شده است. رژیم فشردگی در اعداد موینگی پایین مشاهده می‌شود و نیروی موثر در این رژیم اختلاف فشار بین دو سیال است. با افزایش عدد کپیلری تاثیر نیروی اختلاف فشار می‌تواند نادیده گرفته شود و نیروی موثر در این رژیم نیروی برشی می‌باشد. در ادامه تاثیر عدد موینگی، نسبت نرخ جریان و نسبت لزجت بر طول جدایش، زمان جدایش و اندازه قطره مورد مطالعه قرار گرفت. با افزایش عدد موینگی، قطره طول بیشتری را به سمت پایین دست کشیده شده و طول جدایش افزایش می‌یابد. با افزایش نسبت نرخ جریان طول جدایش نیز افزایش می‌یابد (نزدیک شدن به رژیم جتی). در رژیم فشردگی عدد موینگی تاثیر چندانی بر اندازه قطره ندارد و اندازه قطره به شدت وابسته به نسبت نرخ جریان‌ها می‌باشد و با افزایش نسبت نرخ جریان قطره‌های بزرگتری تشکیل می‌شود. اما در مقابل در رژیم چکه کردن عدد موینگی تاثیر زیادی بر اندازه قطره داشته و سایز قطره تقریباً مستقل از نسبت نرخ جریان می‌باشد در اعداد موینگی پایین (رژیم فشردگی) و بخشی از رژیم چکه کردن، اندازه قطره مستقل از نسبت لزجت می‌باشد اما از یک عدد موینگی به بعد ( $Ca=0.04$ ) اندازه قطره به نسبت لزجت کاملاً وابسته است و برای نسبت لزجت بیشتر، قطرات کوچکتری را شاهدیم. برای تمام نمونه‌ها وقتی نسبت عرض‌ها ( $W_d/W_c$ ) کمتر از  $1/0$  باشد، به ازای نسبت سرعت‌های مختلف طول نهایی قطره اختلاف محسوسی ندارد اما با افزایش نسبت عرض، اختلاف طول نهایی قطره به ازای نسبت سرعت‌های مختلف افزایش می‌یابد.

۴ فصل چهارم: تشکیل و جدایش قطره در جریان دو فازي داخل يك

ميكروكانال هم محور با استفاده از مدل شان و چن

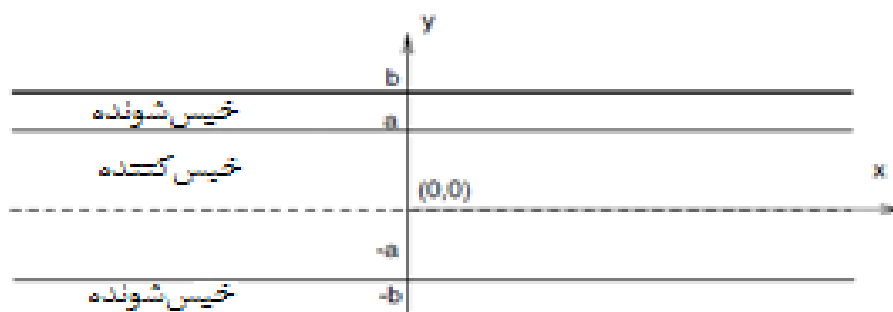
## ۱-۴ مقدمه

در سال‌های اخیر درک پدیده‌های فیزیکی در مقیاس میکرو به علت کاربرد فراوان و گسترده آن‌ها در صنعت و به ویژه علوم پزشکی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. یکی از چالش‌های مهم در بررسی دینامیک سیالات در مقیاس میکرو، بررسی فرآیند تشکیل قطره در میکروکانال‌ها به منظور کنترل اندازه حرکت قطره‌های تولیدی می‌باشد. در این بخش تلاش شده تا با استفاده از روش بولتزمن و مدل شان و چن چندفازی فرایند تشکیل قطره در اثر برهمکنش دو سیال مخلوط نشدنی در یک میکروکانال با هندسه هم‌محور<sup>۱</sup>، شبیه‌سازی شود. ابتدا به اعتبارسنجی روش توسط آزمون لاپلاس، آزمون تشکیل دو قطره، بررسی جریان دو و سه‌فازی لایه‌ای و آزمون زاویه تماس می‌پردازیم و سپس به مدل‌سازی عددی میکروکانال پرداخته و نتایج بیان می‌گردد.

## ۲-۴ اعتبارسنجی

### ۱-۲-۴ جریان دوفازی لایه‌ای مخلوط نشدنی

جریان دوفازی لایه‌ای مخلوط نشدنی بین دو صفحه موازی مطابق شکل ۱-۴ در نظر گرفته می‌شود. ابتدا حل تحلیلی جریان مورد نظر بین دو صفحه موازی انجام می‌گردد و سپس با شرایط مرزی مناسب، به معتبرسازی کد پرداخته می‌شود.



شکل ۱-۴: جریان دوفازی مخلوط نشدنی بین دو صفحه موازی

<sup>1</sup> Co-flowing

عامل حرکت در این کانال گرادیان فشاری است که به سیال اعمال می‌شود. در این صورت با وارد کردن گرادیان فشاری به سیال اول، باعث حرکت آن شده، در نتیجه سیال دوم هم به واسطه حرکت سیال اول کشیده می‌شود و یا بلعکس. در روش بولترمن با افزودن نیروی  $G$  به نیروهایی که در راستای حرکت سیال می‌باشند، می‌توان گرادیان فشار را اعمال نمود. در ابتدا ناحیه محاسباتی  $10 \times 10$ ، با اعمال شرایط مرزی تناوبی به مرزهای ورودی و خروجی و اعمال شرط مرزی دیواره ثابت<sup>۱</sup> به دیواره‌های بالا و پایین، در نظر گرفته شد. مطابق شکل ۴-۱ سیال خیس‌کننده<sup>۲</sup> در ناحیه  $|a| < |y| < |b|$  و سیال خیس‌شونده<sup>۳</sup> در ناحیه قرار دارد. لزجت دینامیکی و نسبت چگالی برای هر دو سیال خیس‌کننده و خیس‌شونده به ترتیب در معادلات (۴-۱) و (۴-۲) بیان شده است که در این روابط  $v_w$  و  $\rho_w$  به ترتیب لزجت و چگالی سیال خیس‌کننده و  $v_{nw}$  و  $\rho_{nw}$  به ترتیب لزجت و چگالی سیال خیس‌شونده می‌باشد. عامل حرکت، نیروی حجمی  $G = 1/5 \times 10^{-8}$  است.

$$v_{nw} = v_w = c_s^2(\tau - 0.5) \quad (4-1)$$

$$M = \rho_{nw} / \rho_w \quad (4-2)$$

حل تحلیلی مسئله مورد نظر طبق معادله (۴-۳) می‌باشد.

$$\left\{ \begin{array}{l} U_i = -A_i * y^2 + D_i \quad 0 \leq y \leq a \\ U_o = -A_o * y^2 + C_o * y + D_o \quad a \leq y \leq b \\ A_i = \frac{G_i}{2 * v_i}, A_o = \frac{G_o}{2 * v_o}, \\ C_o = 2(A_o - MA_i)a, \\ D_o = A_o b^2 - C_o b, \\ D_i = (A_i - A_o)a^2 + C_o a + D_o \end{array} \right. \quad (4-3)$$

شکل ۴-۲ نمودار سرعت را برای  $M=1$  و با در نظر گرفتن  $a=25$ ،  $b=75$  و  $a$  و  $b$  در شکل ۴-۱

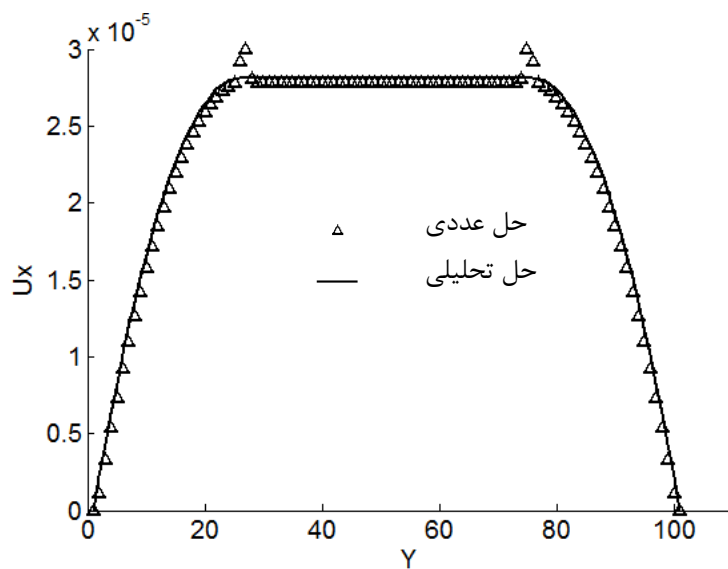
<sup>1</sup> Bounce-back

<sup>2</sup> Wetting

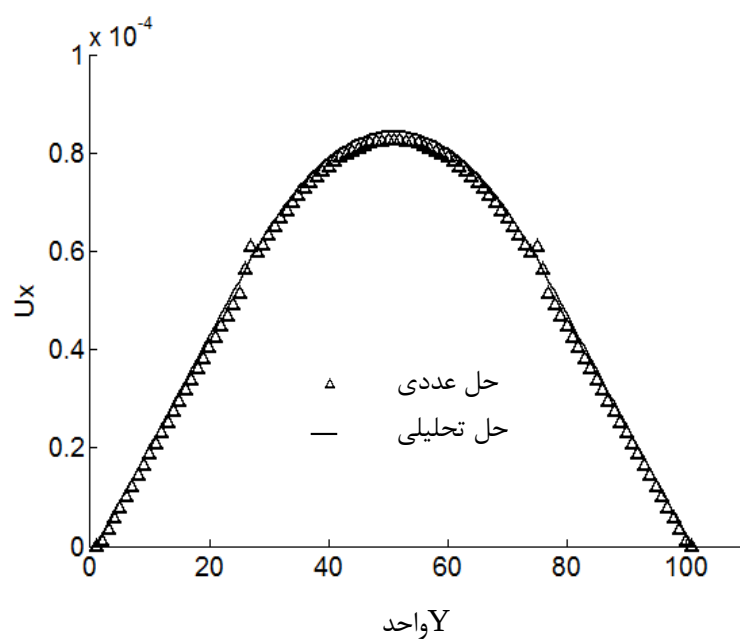
<sup>3</sup> Non wetting

نشان داده شده است)،  $1 - \frac{a}{b} = 0.5$  و  $S_w = 1$  و  $\rho_1 = \rho_2 = 1$  در  $x=0.5$  بر حسب  $y$  را نشان می‌دهد، که

تطابق خوبی با حل تحلیلی دارد.



(الف)



(ب)

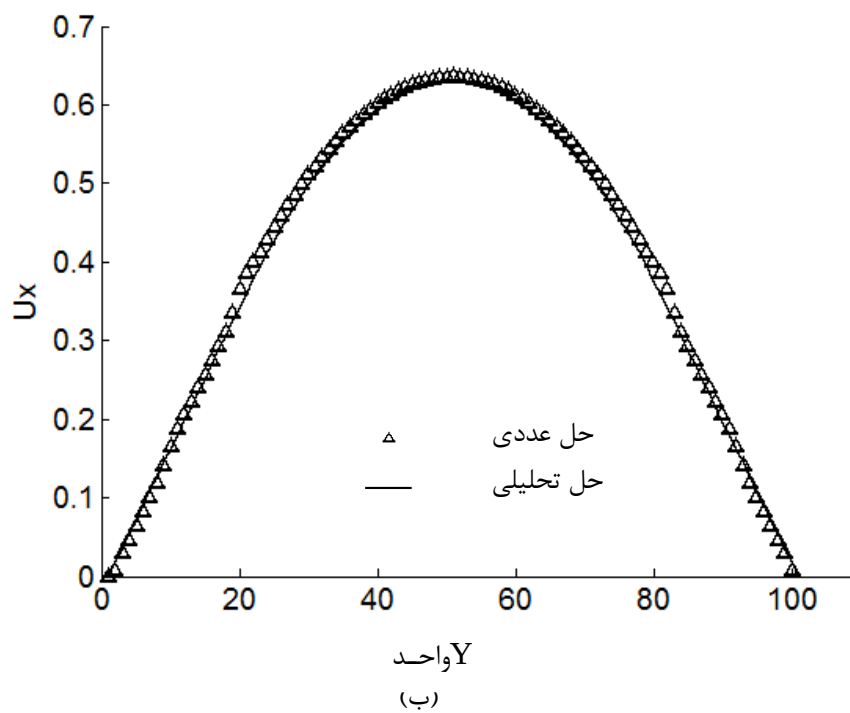
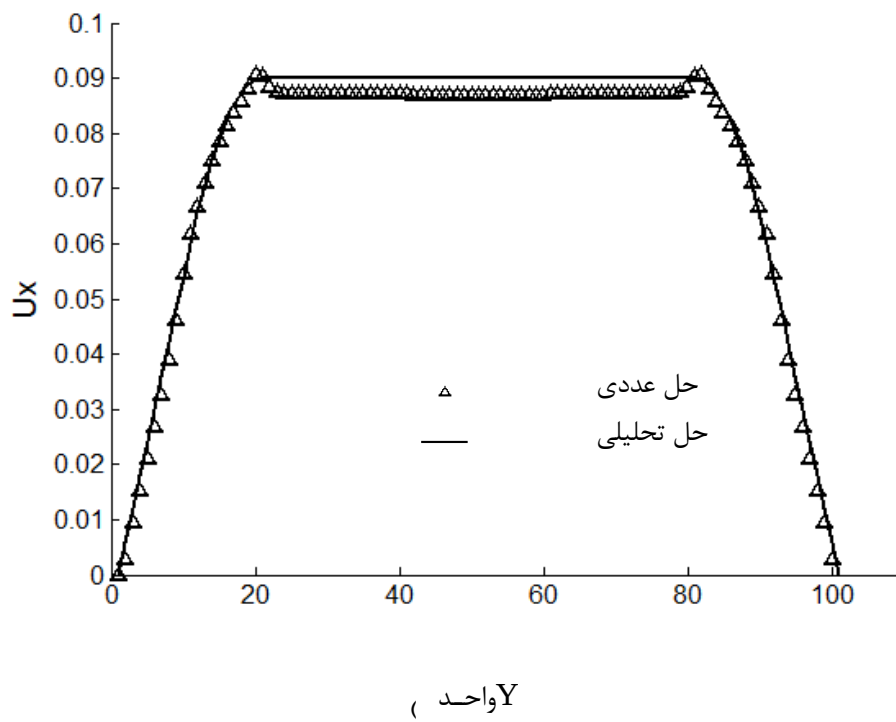
شکل ۴-۲: نمودار سرعت برای  $M=1$  و  $G=1.5 \times 10^{-8}$  و  $S_w=0.5$  و  $\tau_1 = \tau_2 = 1$

(الف)  $G$  به سیال ۱ وارد می‌شود (ب)  $G$  به سیال ۲ وارد می‌شود

## ۲-۲-۴ جریان سه فازي لایه‌ای مخلوط نشدنی

در این آزمون، کانال بخش (۱-۲-۴) در نظر گرفته می‌شود، با این تفاوت که سه فاز در آن جریان دارد. چگالی سه فاز برابر در نظر گرفته شده است. حل تحلیلی این مسئله مطابق با معادله (۴-۴) می‌باشد، که در آن  $G_i$  گرادیان‌های فشاری است که به فازهای مختلف وارد می‌شود. شکل ۳-۴ نمودار سرعت بر حسب  $y$  را در  $x=0/5$  نشان می‌دهد.

$$\left\{ \begin{array}{l} u_1 = G_1 \frac{y^2}{2\mu_1} + \frac{c_1}{\mu_1} y + c_2 \\ u_2 = G_2 \frac{y^2}{2\mu_2} + \frac{c_3}{\mu_2} y + c_4 \\ u_3 = G_3 \frac{y^2}{2\mu_3} + \frac{c_5}{\mu_3} y + c_6 \\ A_1 = -\frac{G_1}{(2\mu_1)}, \quad A_2 = -\frac{G_2}{(2\mu_2)}, \quad A_3 = -\frac{G_3}{(2\mu_3)} \\ c_1 = 0.0, \quad c_3 = a(G_1 - G_2) \\ c_6 = -A_3 c^{'2} - c_5(c/\mu_3) \\ c_4 = (A_3 - A_2)b^2 + b\left(\frac{c_5}{\mu_3}\right) - \left(\frac{c_3}{\mu_2}\right) + c_6, \\ c_2 = (A_2 - A_1)a^2 + a\left(\frac{c_3}{\mu_2}\right) + c_4 \\ , c_5 = b(G_2 - G_3) + c_3 \end{array} \right. \quad (4-4)$$



شکل ۴-۳: نمودار سرعت برای  $M=1$  و  $G=10^{-4}$   
 الف)  $G$  به سیال ۲ وارد می‌شود ب)  $G$  به سیال ۱ وارد می‌شود

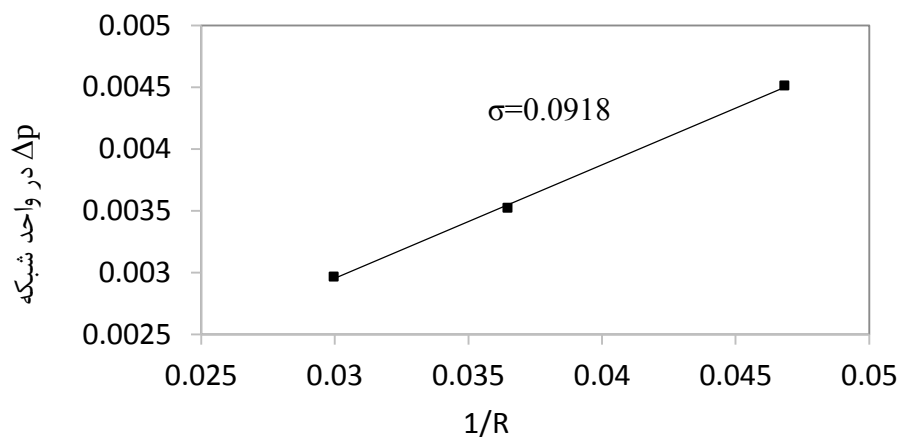
## ۳-۲-۴ آزمون لاپلاس

در جریان‌های چندفازی، مدل‌سازی دینامیک سطح مشترک بین دو سیال بسیار مهم است. آزمون لاپلاس و آزمون زاویه تماس از جمله آزمون‌های معروفی هستند که به بررسی شبیه‌سازی این موضوع می‌پردازند. آزمون لاپلاس از جمله مهم‌ترین آزمون‌ها در صحت‌سنجی کدهای چندفازی است که صحت‌سنجی کد را در شبیه‌سازی دینامیک سطح مشترک دوسیال مورد بررسی قرار می‌دهد. برطبق قانون لاپلاس رابطه بین اختلاف فشار داخل و خارج قطره ( $P_{in}-P_{out}$ ) طبق معادله زیر محاسبه می‌شود.

$$P_{in}-P_{out}=\sigma/R_d \quad (۵-۴)$$

که  $\sigma$  کشش سطحی بین دوفاز و  $R_d$  شعاع قطره می‌باشد.

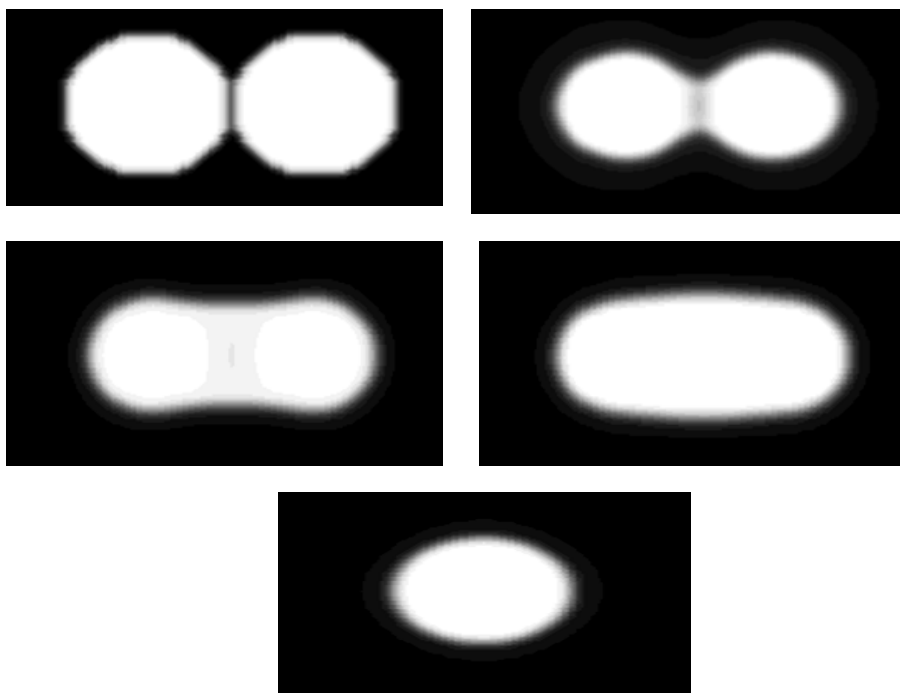
در مدل شبه‌پتانسیل [۱۱]، کشش سطحی توسط ضریب  $G_{۱۲}$  (معادله (۲-۱۸)) که نشان‌دهنده قدرت برهمکنش بین دوفاز است، تعیین می‌گردد. برای صحت‌سنجی روش و اندازه‌گیری کشش سطحی، در مرکز یک ناحیه محاسباتی  $۱۰۰ \times ۱۰۰$  با مرزهای تناوبی، قطراتی با شعاع‌های مختلف در نظر گرفته می‌شود. در این آزمون مقادیر به صورت  $u_1=u_2=0.15$ ،  $\rho_1=\rho_2=1$ ،  $G_{۱۱}=G_{۲۲}=0$ ،  $G_{۲۱}=G_{۱۲}=0.2$  انتخاب می‌شوند که اندیس ۱ مربوط به فاز پیوسته و اندیس ۲ مربوط به فاز جداشونده می‌باشد. شکل ۴-۴ نشان می‌دهد که نمودار  $\Delta p$  (اختلاف فشار) بر حسب  $1/R_d$  به صورت خط راست است و شیب این خط نشان‌دهنده کشش سطحی می‌باشد. با تغییر  $G_{۱۲}$ ، شیب این خط و در نتیجه مقدار کشش سطحی تغییر می‌کند. با افزایش  $G_{۱۲}$  کشش سطحی کاهش می‌یابد، در واقع نیروی جاذبه بین ملکولی کاهش می‌یابد. با توجه به شکل ۴-۴ کشش سطحی  $0.0918$  برای ادامه کار در نظر گرفته می‌شود.



شکل ۴-۴: آزمایش لاپلاس جهت محاسبه کشش سطحی بین دوفاز

#### ۴-۲-۴ آزمون تشکیل دو قطره

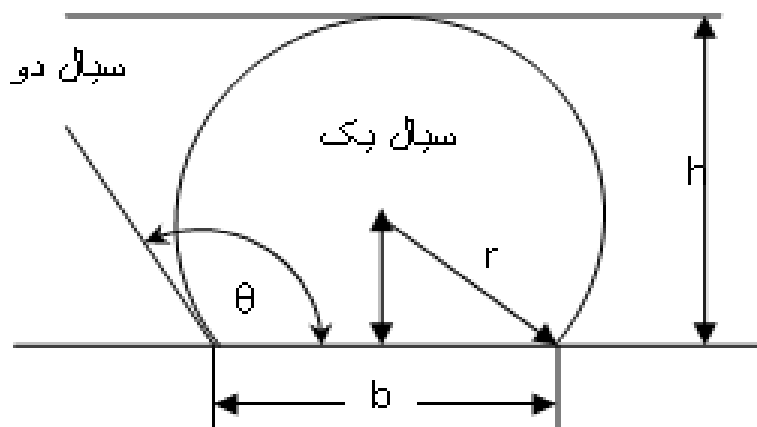
در این قسمت صحت سنجی کد با تشکیل قطره واحد توسط دو قطره ثابت به شعاع ۱۲، که در کنار یکدیگر در یک ناحیه محاسباتی  $100 \times 100$  قرار دارند، انجام می‌گیرد. مطابق شکل ۴-۶ دو قطره ابتدا در کنار یکدیگر قرار دارند، کشش سطحی بین دو قطره باعث نزدیک شدن دو قطره به هم و در نهایت تشکیل یک قطره می‌شود.



شکل ۴-۵: یکی شدن دو قطره ثابت طی زمان

#### ۵-۲-۴ آزمون زاویه تماس

هنگامی که یک قطره انحلال‌ناپذیر<sup>۱</sup> در تماس با یک سطح جامد قرار می‌گیرد، آنگاه میان دو سیال و سطح جامد خط تماسی ایجاد می‌شود (شکل ۶-۴).



شکل ۶-۴: طرحواره زاویه تماس بین مایع و سطح جامد

ترشوندگی<sup>۲</sup> یک سطح نسبت به سیال، بستگی به زاویه تماس ( $\theta$ ) دارد. برای زاویه کمتر از ۹۰ درجه، سیال تمایل به خیس کردن سطح دارد. چنین سطوحی آبدوست<sup>۳</sup> نامیده می‌شود. برای زاویه بزرگ‌تر از ۹۰ درجه، سیال به شکل سیال فشرده درمی‌آید چنین سطوحی آبگریز<sup>۴</sup> نامیده می‌شود. برای محاسبه زاویه تماس، ابتدا قطره با قطر ۶۰ واحد در میدان محاسباتی به ابعاد  $120 \times 60$  بصورت مماس بر دیواره پایینی قرار داده می‌شود)

شکل ۷-۴). با در نظر گرفتن  $G_{ads1} = 0$  و مقدار معینی برای  $G_{ads2}$ ، که قدرت برهمکنش بین سطح جامد و سیال را کنترل می‌کند (رابطه (۲-۱۹))، و بعد از ۴۰۰۰۰ مرحله که میدان به حالت پایا درآمد، مقدار زاویه تماس محاسبه خواهد شد. به منظور تعیین رابطه بین ضریب برهمکنش سیال\_جامد و زاویه تماس، یک سری قطره، آزمایش شده‌اند. شرایط مرزی دیواره بالا و پایین شرط

<sup>1</sup> Immiscible

<sup>2</sup> Wettability

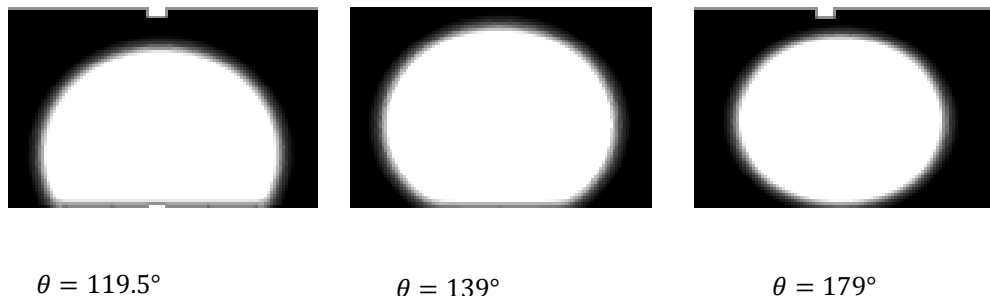
<sup>3</sup> Hydrophilic

<sup>4</sup> Hydrophobic

بازگشت به عقب و شرط مرزی دیواره‌های جانبی شرط مرزی تناوبی می‌باشد. زاویه تماس به کمک پارامترهای هندسی شکل‌های حاصل و با استفاده از معادله (۴-۶) محاسبه می‌شود، که  $h$  ارتفاع قطره و  $b$  طول پخش شده قطره روی سطح می‌باشد.

$$\theta = \pi - \arctan \left[ \frac{b}{2(r-h)} \right] \quad (۴-۶)$$

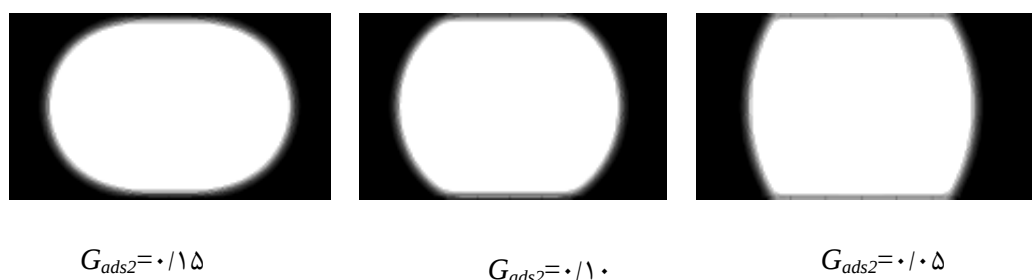
در این رابطه مقدار  $r = h/2 + b^2/8h$  خواهد بود. با تغییر مقادیر  $G_{ads2}$ ، زوایای مختلف به دست خواهند آمد [۵۶].



شکل ۴-۷: زاویه‌های تماس مختلف بر حسب درجه به ترتیب متناسب با:

$$G_{ads2} = 0.05, 0.10, 0.15$$

برای نشان دادن اثر ترشوندگی به ازای زوایای مختلف، قطره را در حالت تعادل در ناحیه محاسباتی قرار می‌دهیم به طوری که با دیواره بالا و پایین در تماس باشد [۱۱]. شکل ۴-۸ تغییر شکل قطره را به ازای  $G_{s2} = 0.05, 0.10, 0.15$  متناسب با سه زاویه تماس مختلف  $\theta = 119.5, 139, 179$  می‌باشد، را نشان می‌دهد. برای ادامه کار  $G_{ads2} = 0.15$  در نظر گرفته می‌شود.

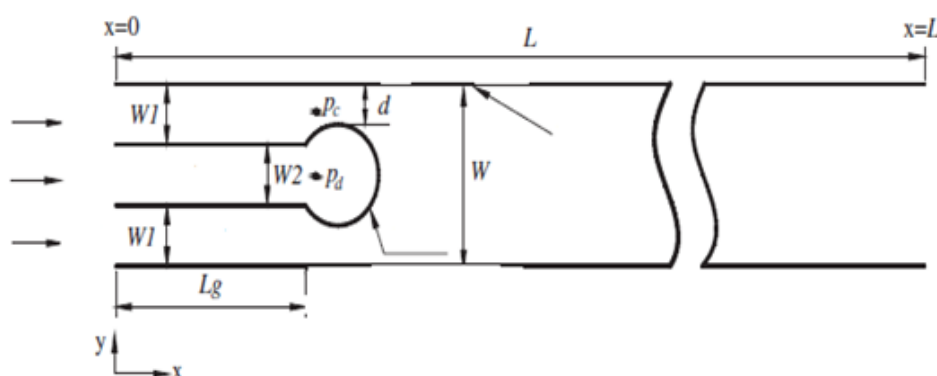


شکل ۴-۸: حالات قطره در سه زاویه تماس مختلف

$$\theta = 119.5, 139, 179$$

### ۳-۴ مدل سازی عددی

شکل ۹-۴ نمایی از یک میکروکانال دوبعدی به طول  $L=480$  و عرض  $W=24$  است. تمامی ابعاد در واحد شبکه بولتزمن هستند. در ورودی، فاز پیوسته از طریق دو زیرکانال و فاز جداشونده از طریق یک زیرکانال میانی به صورت جت به داخل فاز پیوسته فرستاده می شود. زیرکانال ها هر یک دارای عرض  $W_1=W_2=8$  و طول  $L_g=31$  می باشند.



شکل ۹-۴: طرحواره میکروکانال هم محور تشکیل شده از دوفاز پیوسته و فاز جداشونده

شرایط مرزی به صورت زیر تنظیم شده است: در ورودی کانال ( $x=0$ ) سرعت فاز جداشونده و پیوسته به ترتیب  $U_d$  و  $U_c$  و دبی سیال تزریقی  $Q_d$  و دبی سیال پیوسته  $Q_c$  هستند و در خروجی کانال ( $x=L$ ) شرط مرزی فشار ثابت داریم و سرعت در دیواره ها نیز به صورت شرط مرزی برگشت به عقب در نظر گرفته شده است [۳۶]. به طور کلی رفتار جریان در میکروکانال ها توسط پارامترها و خواصی مانند کشش سطحی بین دو فاز، سرعت های متوسط فازها در هر ورودی و لزجت های دینامیکی دو فاز تعیین می شود. برای بررسی رفتار جریان تحت شرایط مختلف، از اعداد بدون بعد استفاده می شود که اهمیت ارتباط بین این پارامترها را در تاثیرگذاری جریان نشان می دهند. از اعداد بی بعد مهم در میکروکانال ها برای فهم الگوهای جریان های چندفازی، عدد موینگی است که نسبت نیروی لزجت به نیروی کشش سطحی است و به صورت رابطه (۴-۷) تعریف می شود که در آن  $\mu_c$  لزجت دینامیکی فاز پیوسته و  $U_c$ ، سرعت ورودی فاز پیوسته و  $\sigma$ ، کشش سطحی بین دوفاز است. عدد

بی‌بعد مهم دیگر در این مسئله نسبت سرعت‌های ورودی دو فاز است که به صورت  $R=U_d/U_c$  تعریف می‌شود و عددی تاثیرگذار در تعیین رژیم‌های جریان می‌باشد.

$$Ca = \frac{\mu_c U_c}{\sigma} \quad (۷-۴)$$

در ادامه با بررسی این اعداد بی‌بعد، رفتار جریان و مکانیزم تشکیل قطره در این هندسه میکروکانال مورد مطالعه قرار می‌گیرد.

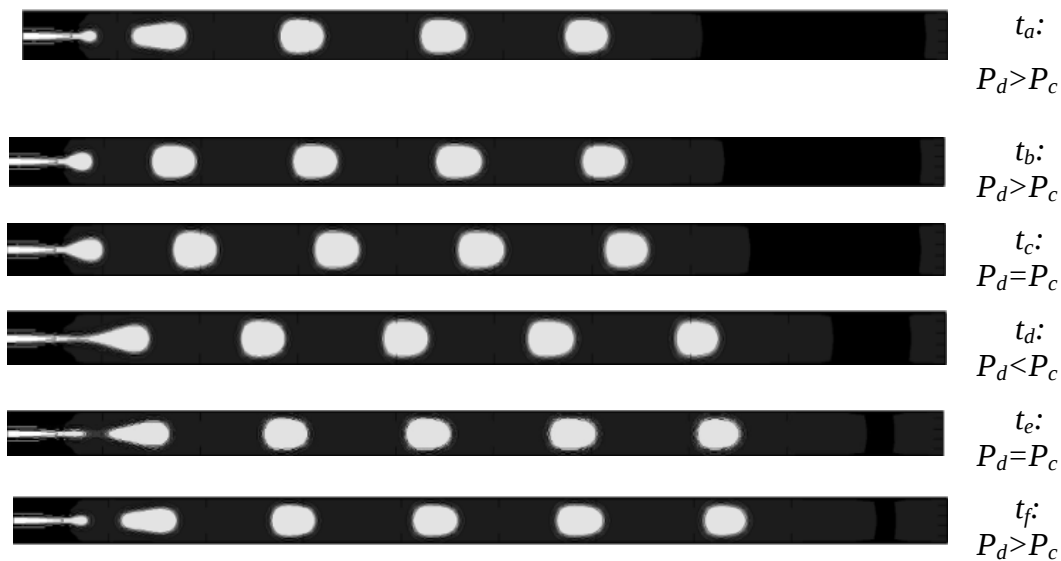
#### ۴-۴ نتایج و بحث

در این بخش با استفاده از مدل‌سازی ریاضی فرایند تشکیل قطره نیوتنی و غیرنیوتنی در یک میکروکانال هم‌محور، تحت گستره وسیعی از تغییرات دبی جریان، نسبت سرعت‌های ورودی دو فاز و عدد موئینگی و ضریب غیرنیوتنی ( $n$ ) شبیه‌سازی شده است. برای مدل‌سازی سیال غیرنیوتنی از مدل کاریاسودا طبق رابطه (۲-۴۴) استفاده شده است. در این مدل  $n=1$  نشان‌دهنده‌ی سیال نیوتنی است. بنابراین در هر قسمت نتیجه مربوط به  $n=1$  در واقع تشکیل قطره نیوتنی را مورد بررسی قرار داده است.

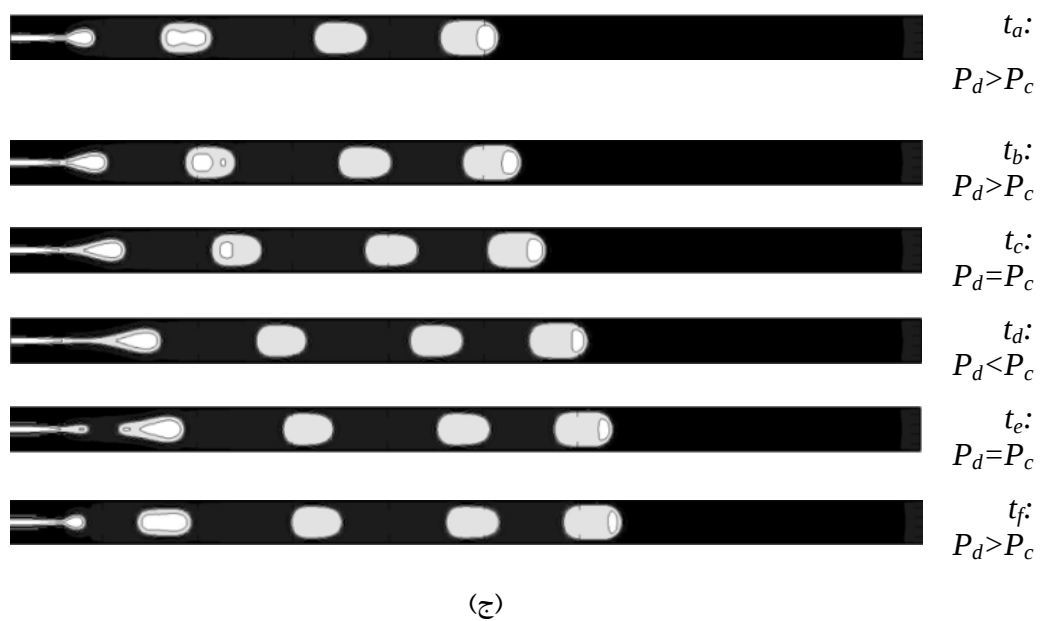
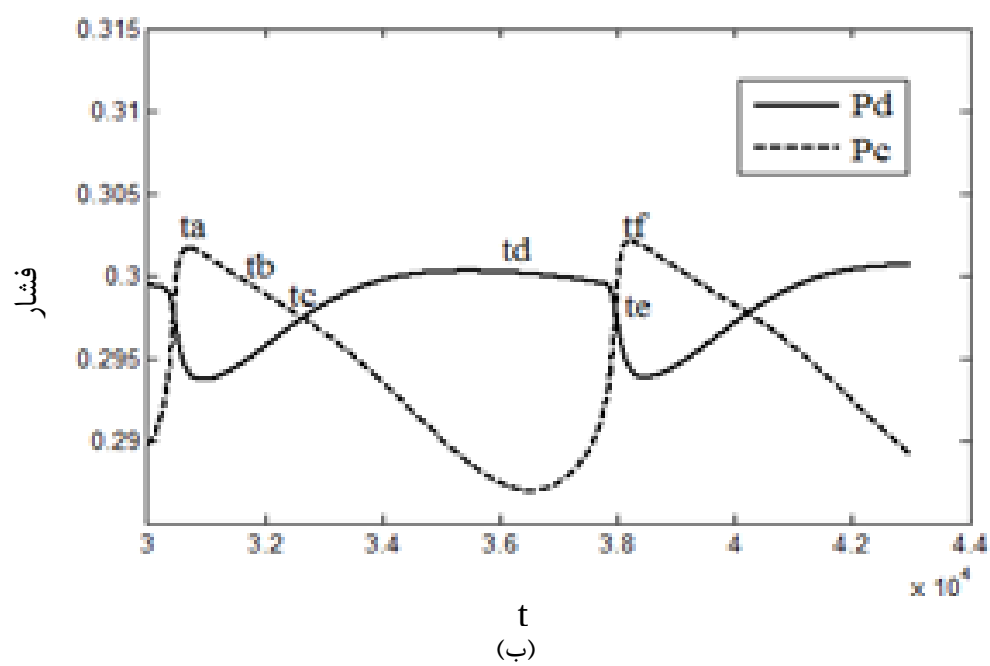
##### ۴-۴-۱ تأثیر ضریب مدل کاریاسودا ( $n$ ) بر تشکیل قطره

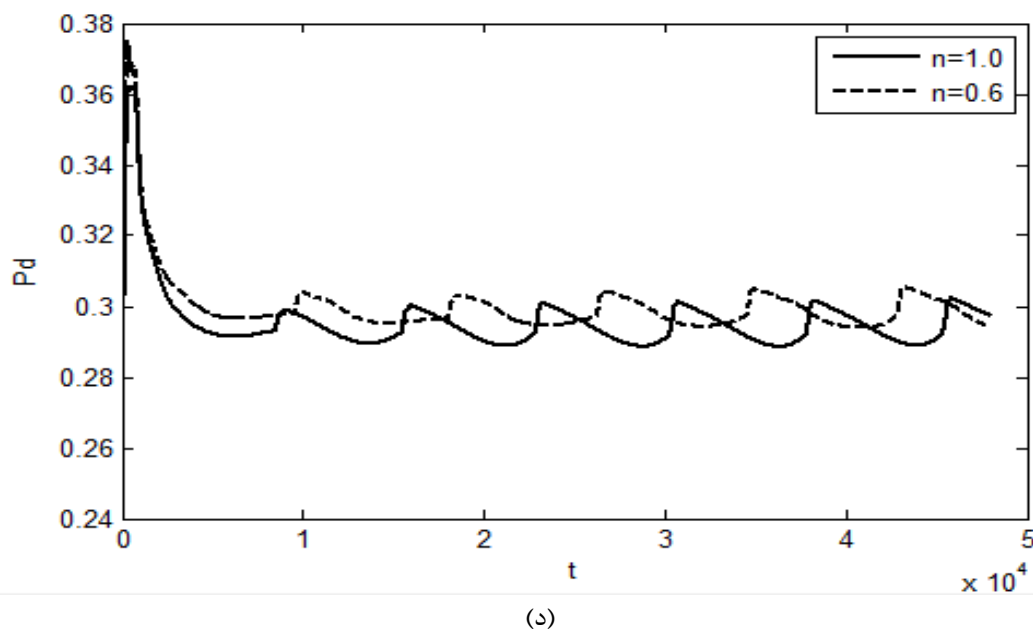
شکل ۴-۱۰-الف) فرآیند تشکیل قطره در زمان‌های مختلف در یک چرخه را با در نظر گرفتن نسبت سرعت  $R=0.8$  که با  $Ca=0.13307$  متناسب است و به ازای  $n=1$  نشان می‌دهد. طبق رابطه (۲-۴۴) وقتی  $n$  برابر یک باشد، سیال نیوتنی می‌شود. همان‌طور که در این شکل مشاهده می‌شود، قطره (فاز جداشونده) از  $t_d$  تا  $t_c$  شروع به پیشروی می‌کند تا در زمان  $t_d$  فرایند جدایش قطره رخ می‌دهد و بعد از زمان  $t_d$  تا  $t_e$  قطره جدا شده و در سیال پیوسته پیش می‌رود. شکل ۴-۱۰-ب) تغییرات  $P_c$  و  $P_d$  را بر حسب زمان نشان می‌دهد که  $P_c$  و  $P_d$  به ترتیب فشار فاز پیوسته و فاز جداشونده در مقطع میانی کانال بیرونی و کانال مرکزی، می‌باشد. رشد قطره به وسیله اختلاف فشار مثبت ادامه می‌یابد تا زمانی-

که اختلاف فشار از بین برود. شکل ۴-۱۰- (الف) در واقع فرآیند تشکیل قطره نیوتنی در یک سیال نیوتنی می‌باشد که نتایج آن در مقایسه با مرجع [۱۱] تایید شده می‌باشد. شکل ۴-۱۰- (ج) فرآیند تشکیل قطره در زمان‌های مختلف در یک چرخه را به ازای  $n=0/6$  نشان می‌دهد. شکل ۴-۱۰- (د) نمودار  $P_d$  برای دو سیال نیوتنی ( $n=1$ ) و سیال رقیق ( $n=0/6$ ) می‌باشد. همان‌طور که در شکل ۴-۱۰- (د) مشاهده می‌شود و در شکل ۴-۱۰- (ب) توضیح داده شد، نقاط ماکزیمم نمودار  $P_d$  زمان جدایش قطره ( $t_d$ ) است، بنابراین چون اولین نقطه ماکزیمم  $P_d$  طبق شکل ۴-۱۰- (د) به ازای  $n=1$ ، زودتر رخ می‌دهد، بنابراین تشکیل قطره در سیال نیوتنی ( $n=1$ ) زودتر رخ می‌دهد و به همین خاطر تعداد قطرات تشکیل شده در یک زمان مشخص در  $n=1$ ، بیشتر از  $n=0/6$  است.



(الف)





شکل ۴-۱۰:

- الف) چرخه زمانی شکل‌گیری یک قطره در یک سیال نیوتنی ( $n=1$ )  
 ب) تغییرات  $P_d$  و  $P_c$  در یک چرخه زمانی شکل‌گیری یک قطره  
 ج) چرخه زمانی شکل‌گیری یک قطره در یک سیال غیرنیوتنی ( $n=0.6$ )  
 د) نمودار مقایسه  $P_d$  به ازای  $n=1$  و  $n=0.6$

#### ۲-۴-۴ تأثیر ضریب مدل کاریاسودا ( $n$ ) بر اندازه قطره

در این بخش فرآیند تشکیل قطره به ازای  $n$  های مختلف فاز تزریق‌شونده و به ازای نسبت سرعت‌های مختلف و تأثیر این پارامترها بر اندازه قطره مورد مطالعه قرار می‌گیرد. در شکل ۴-۱۱ تغییرات رفتار جریان به ازای نسبت سرعت‌های  $R=1/2$  و  $R=2/5$  و به ازای  $n$  های مختلف مدل کاریاسودا،  $n=1$  و  $n=0.6$ ، بررسی می‌شود. مطابق شکل ۴-۱۱ در یک  $R$  مشخص در  $n$  های کوچک ( $n=0.6$ )، قطره مطابق شکل ۴-۱۱-الف) تمایل دارد تمام عرض کانال را اشغال کند و قطرات بزرگ‌تری شکل می‌گیرد که در اصطلاح به آن رژیم پلاگ<sup>۱</sup> گفته می‌شود، اما در  $n$  های بزرگتر ( $n=1$ ) قطره فقط قسمتی از عرض کانال را اشغال می‌کند و به همین دلیل قطرات کوچک‌تری تشکیل می‌شود که رژیم چکه-

<sup>1</sup> Plug

کردن<sup>۱</sup> نامیده می‌شود.



(الف)  $R=2/5$  ،  $n=0/6$



(ب)  $R=2/5$  ،  $n=1$



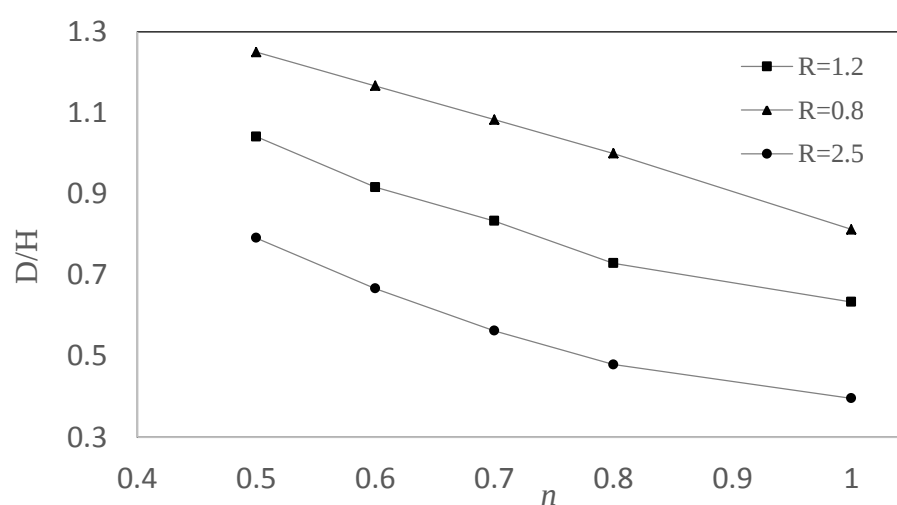
(ج)  $R=1/2$  ،  $n=0/6$



(د)  $R=1/2$  ،  $n=1$

شکل ۴-۱۱: تأثیر ضریب  $n$  مدل کاریاسودا و نسبت سرعت ( $R$ ) بر طول قطره در جهت جریان ( $D$ )

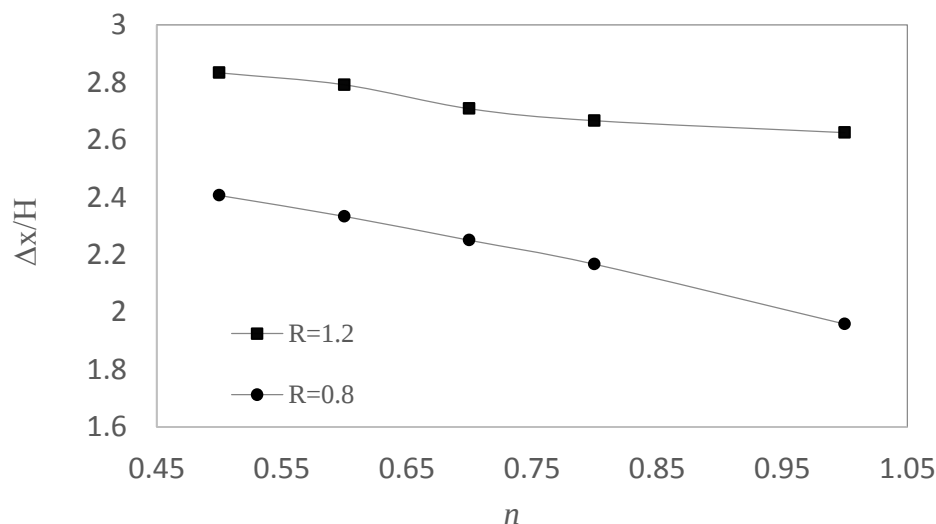
شکل ۴-۱۲ نمودار  $D/H$  بر حسب  $n$  را در نسبت سرعت‌های مختلف نشان می‌دهد که  $D$ ، اندازه قطره و  $H$ ، عرض کانال است. با افزایش  $n$ ، لزجت سیال تزریقی افزایش یافته که منجر به تشکیل قطرات با اندازه کوچک‌تر می‌شود و با افزایش نسبت سرعت در یک  $n$  مشخص، کاهش طول قطره را خواهیم داشت.



شکل ۴-۱۲: اثر ضریب  $n$  و نسبت سرعت ( $R$ ) بر اندازه قطره ( $D$ )

<sup>1</sup> Dripping

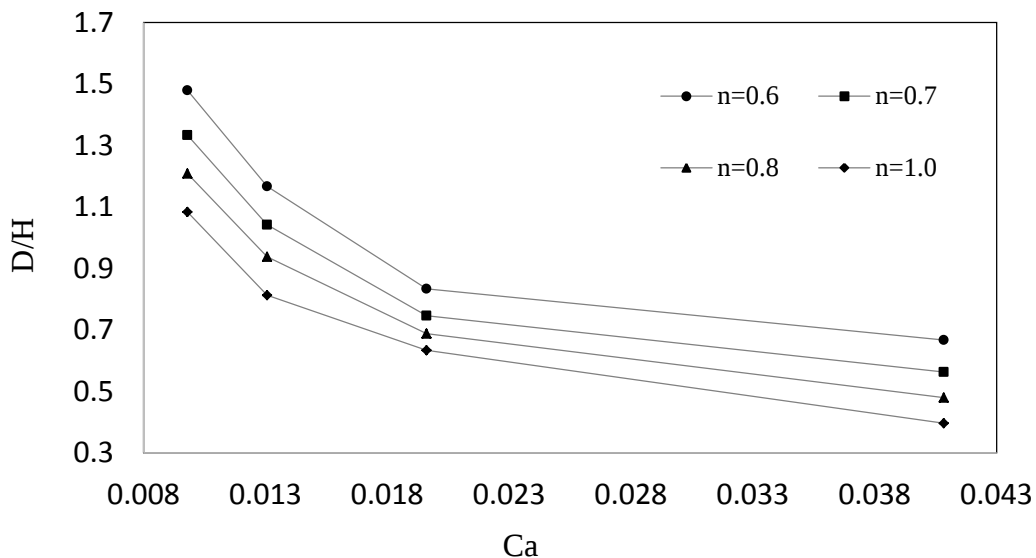
طبق شکل ۴-۱۳ فاصله بین قطرات ( $\Delta x$ ) به ازای تغییر پارامتر  $n$  مدل کارباسودا در دو نسبت سرعت ثابت  $R=0.8$  و  $R=1.2$  بررسی می‌شود. با افزایش  $n$ ، اندازه قطرات کاهش یافته و فرکانس تشکیل قطره افزایش می‌یابد که در نتیجه فاصله بین قطرات کاهش می‌یابد.



شکل ۴-۱۳: تأثیر ضریب  $n$  بر فاصله بین قطرات به ازای نسبت سرعت‌های  $R=0.8$  و  $R=1.2$

#### ۴-۴-۳ تأثیر عدد موینگی بر تشکیل قطره

عدد بی‌بعد موینگی همان‌طور که قبلاً به آن اشاره شد، نسبت نیروی ویسکوز به کشش سطحی می‌باشد و از جمله مهم‌ترین پارامترها در فرآیند شکل‌گیری قطره است. در این بخش تأثیر عدد موینگی بر اندازه قطره به ازای  $n$  های مختلف مورد مطالعه قرار می‌گیرد. در شکل ۴-۱۴ اندازه قطره به ازای اعداد موینگی مختلف و کشش سطحی ثابت  $0.0918$ ، به ازای  $n$  های مختلف نشان داده شده است. با تغییر سرعت فاز پیوسته و نسبت بین سرعت‌های دو فاز، عدد موینگی تغییر کرده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش عدد موینگی در یک  $n$  مشخص، نیروی ویسکوز بر نیروی کشش سطحی بین دو فاز غلبه کرده و این منجر به کاهش اندازه قطره می‌شود. در یک عدد موینگی ثابت با کاهش  $n$ ، لزجت کاهش می‌یابد و در نتیجه قطره تمایل دارد، تمام عرض کانال را اشغال کند. بنابراین قطرات بزرگتری تشکیل می‌شود.



شکل ۴-۴: اثر عدد موینگی بر اندازه قطره

#### ۴-۴-۴ تأثیر ضریب مدل کاریاسودا ( $n$ ) بر طول جدایش<sup>۱</sup>

طول جدایش، فاصله از شروع کانال تا محل جدایش اولین قطره است. به ازای نسبت سرعت  $R=0.8$  و چگالی دوفاز  $\rho_2 = \rho_1 = 1$ ، طبق آزمون لاپلاس کشش سطحی برابر  $0.0918$  می‌شود. شکل ۴-۱۵ طول جدایش و زمان جدایش اولین قطره را به ازای  $n$ های مختلف در کشش سطحی  $0.0918$  و در نسبت سرعت ثابت  $R=0.8$  متناسب با  $Ca=0.1307$ ، را نشان می‌دهد. همان‌طور که در شکل ۴-۱۵ مشاهده می‌شود با افزایش  $n$ ، زمان شروع جدایش کاهش می‌یابد، قطره سریع‌تر جدا شده و طول جدایش کم می‌شود. به عبارتی با رقیق شدن سیال، لزجت سیال کاهش یافته، طول و زمان جدایش قطره افزایش می‌یابد.

<sup>1</sup>Detachment



الف)  $n=0.5$  ،

$$T=26000$$



ب)  $n=0.51$  ،

$$T=18000$$



ج)  $n=0.54$  ،

$$T=12600$$



د)  $n=0.6$  ،

$$T=8700$$



ه)  $n=0.8$  ،

$$T=8000$$

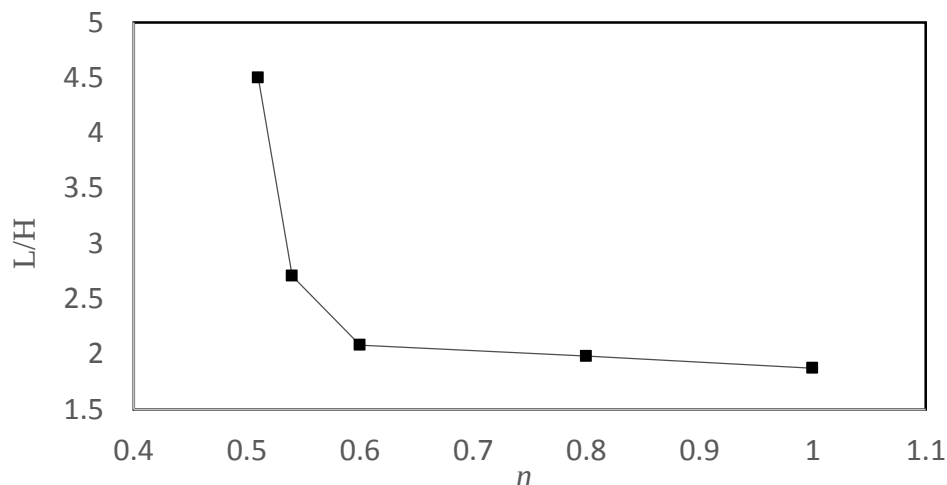


و)  $n=1$  ،

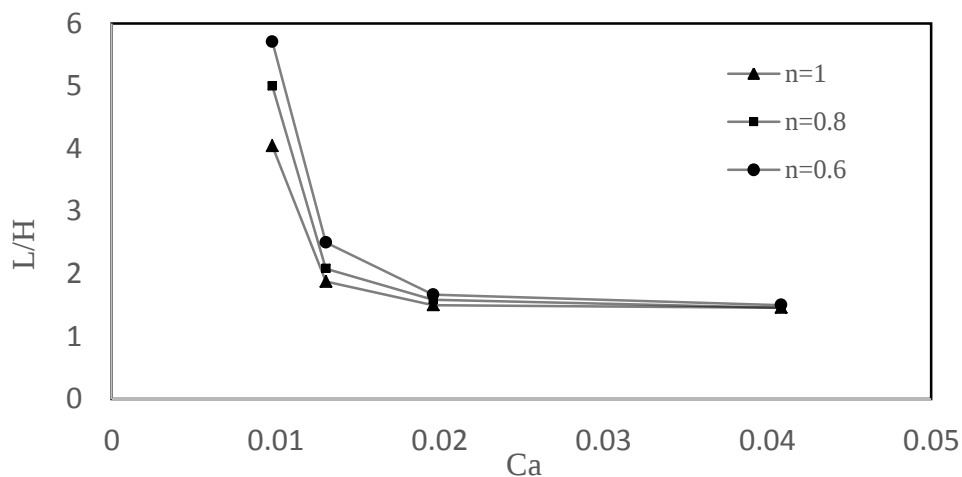
$$T=7520$$

شکل ۴-۱۵: تغییرات طول جدایش و زمان جدایش در میکروکانال هم‌محور برای نسبت سرعت  $R=0.8$ ،  $Ca=0.1307$  و به ازای  $n$  های مختلف

شکل ۴-۱۶ طول جدایش را به صورت تابعی از  $n$  در نسبت سرعت  $R=0.8$  نشان می‌دهد که نموداری کاهشی می‌باشد. شکل ۴-۱۷ طول جدایش را به ازای اعداد موینگی مختلف و به ازای  $n=0.5$  ،  $n=0.6$  ،  $n=0.8$  و  $n=1$  نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش عدد موینگی، نیروی ویسکوز نسبت به نیروی کشش سطحی افزایش می‌یابد و در نتیجه قطره سریع‌تر جدا شده و طول جدایش کاهش می‌یابد.



شکل ۴-۱۶: تغییرات طول جدایش در میکروکانال هم‌محور برای نسبت سرعت  $R=0/8$ ،  $Ca=0/01307$  و به ازای  $n$  های مختلف



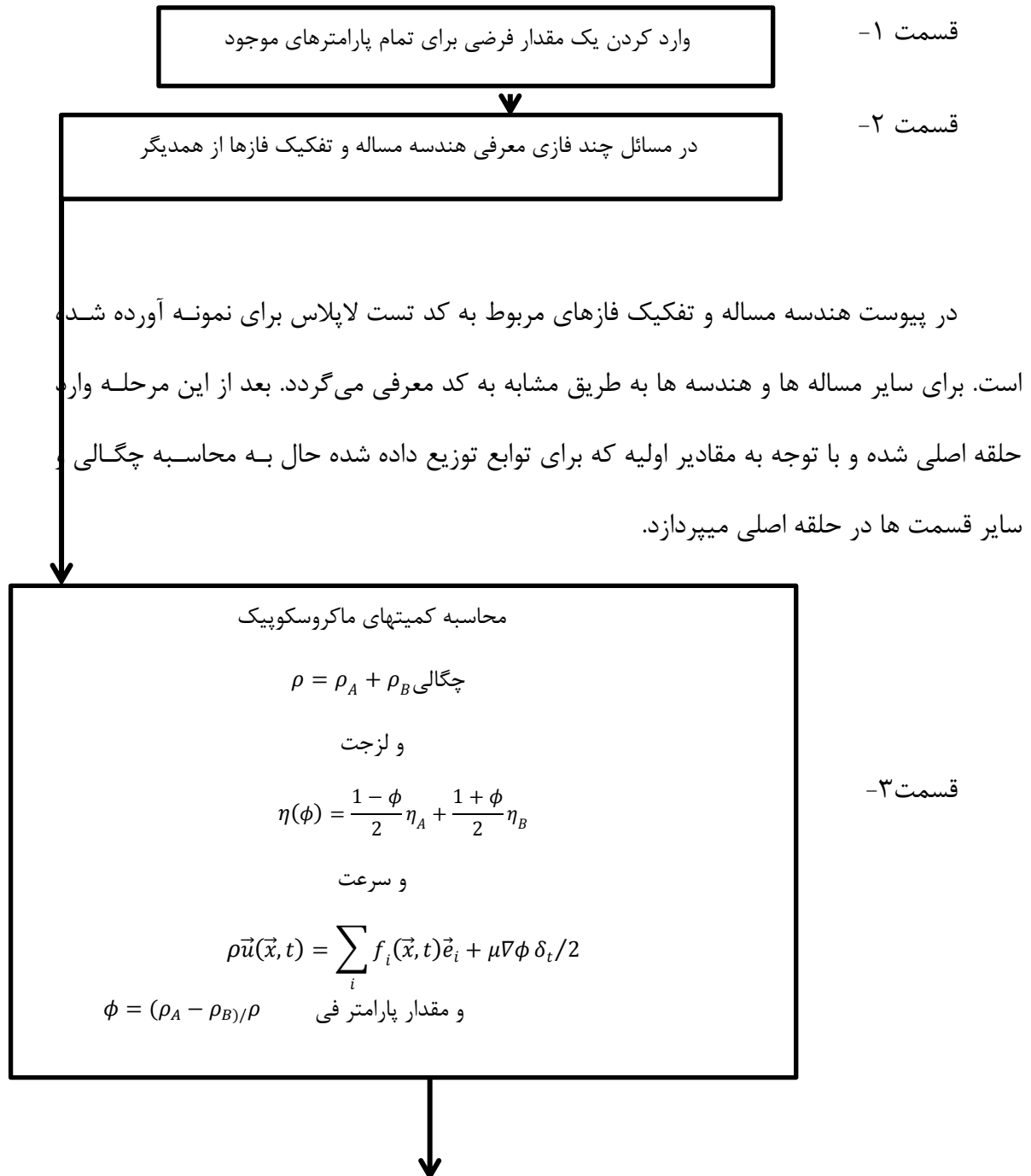
شکل ۴-۱۷: تغییرات طول جدایش در میکروکانال هم‌محور به ازای  $n$  های مختلف و به ازای اعداد موینگی مختلف

## ۴-۵ نتیجه گیری فصل چهارم

در این فصل از روش شبکه بولتزمن با مدل شبه پتانسیل (شان و چن) برای شبیه‌سازی فرآیند تشکیل قطره غیرنیوتونی در یک سیال نیوتونی در میکروکانال هم‌محور استفاده شده است. ابتدا از دو آزمون لاپلاس و زاویه تماس برای اعتبارسنجی کد استفاده شده و برای صحت‌سنجی اعمال صحیح مدل، از مقایسه نتایج کد با نتایج تحلیلی جریان دوفازی و سه‌فازی بین دو صفحه موازی استفاده شده است. برای سیال غیرنیوتونی مدل کاریاسودا انتخاب شده است. تاثیر ضریب  $n$  مدل کاریاسودا، نسبت

سرعت‌های دوفاز و تاثیر عدد موینگی بر تشکیل قطره مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش ضریب  $n$  مدل کاریاسودا، لزجت سیال افزایش می‌یابد و زمان شروع جدایش قطره کاهش یافته و قطره سریع‌تر شروع به جدایش می‌کند و طول آغاز جدایش اولین قطره کاهش می‌یابد و افزایش عدد موینگی هم منجر به کاهش طول جدایش می‌شود. با کاهش  $n$  و رقیق‌تر شدن سیال، لزجت سیال نیز کاهش می‌یابد و قطره تمایل دارد تمام عرض کانال را اشغال کند و قطرات بزرگتری تشکیل می‌شوند. با کاهش نسبت سرعت ( $R$ ) و کاهش عدد موینگی، طول و اندازه قطره کاهش می‌یابد. تاثیر ضریب  $n$  مدل کاریاسودا بر فاصله بین قطرات نیز بررسی شد. با افزایش  $n$ ، اندازه قطرات کاهش یافته و فرکانس تشکیل قطره افزایش می‌یابد و فاصله بین قطرات کاهش یابد.

## ۱-۵ پیوست کدنویسی انرژی آزاد



محاسبه توابع توزیع تعادلی

$$f_a^{eq} = w_a \left[ A_a + \rho \left( 3\vec{e}_a \cdot \vec{u}^{\square} + \frac{9}{2} (\vec{e}_i \cdot \vec{u}_\sigma^{\square})^2 - \frac{3}{2} \vec{u}^{\square} \cdot \vec{u}^{\square} \right) \right]$$

$$g_a^{eq} = w_a \left[ B_a + \phi \left( 3\vec{e}_a \cdot \vec{u}^{\square} + \frac{9}{2} (\vec{e}_i \cdot \vec{u}_\sigma^{\square})^2 - \frac{3}{2} \vec{u}^{\square} \cdot \vec{u}^{\square} \right) \right]$$

قسمت ۴-

مرحله برخورد (collision)

$$f_a^\sigma(x + e_a \Delta t, t + \Delta t) = f_a^\sigma(x, t) - \frac{[f_a^\sigma(x, t) - f_a^{\sigma,eq}(x, t)]}{\tau_f} +$$

$$= \left( 1 - \frac{1}{2\tau_f} \right) w_a \left[ \frac{\vec{e}_a - \vec{u}}{c_s^2} + \frac{\vec{e}_a \cdot \vec{u}}{c_s^4} \vec{e}_a \right] \cdot \vec{F}_s \delta_t$$

$$g_a^{\square}(x + e_a \Delta t, t + \Delta t) = g_a^{\square}(x, t) - \frac{[g_a^{\square}(x, t) - g_a^{eq}(x, t)]}{\tau_g}$$

قسمت ۵-

مرحله جاری شدن (streaming)

قسمت ۶-

شرایط مرزی

با توجه به نوع مساله در انتهای کد باید شرایط مرزی مساله را گذاشت . شرط مرزی متناسب با تست لاپلاس همان طور که در متن پایان نامه هم توضیح داده شد تناوبی هست که در قسمت جاری شدن اعمال شده است. برای نمونه شرایط مرزی تست زاویه تماس که دو سمت دیواره جامد است و دو طرف تناوبی آورده شده است.

قسمت ۷-

## قسمت ۱-

```

! =====!
!-----farze avaliye tamame parametrha-----!
! =====!

DO j=1,jm
  DO i=1,im
    DO k=1,IK
      f_middle(i,j,k)=0.d0;
      g_middle(i,j,k)=0.d0;
      f(i,j,k)=0.d0;
      g(i,j,k)=0.d0;
      feq(i,j,k)=0.d0;
      geq(i,j,k)=0.d0;
! *****
      density(i,j)=0.d0;
! *****
      u1(i,j)=0.0;
      v1(i,j)=0.0;
      u_x(i,j)=0.0;
      u_y(i,j)=0.0;
      Muo(i,j)=0.0;

    end Do
  end Do
end Do

! =====

ksi=1.5D0;
sigma=0.01D0
Ga=4.0;
Kk=(3*sigma*ksi)/4.D0;
aa=(2*Kk)/(ksi**2.D0);

! =====

```

## قسمت ۲-

```

! =====!
www(9)=(4.0/9.0);
alpha(9)=-4*2/6;
do k=1 , 4
  www(k)=(1.0/9.0);
  alpha(k)=1/6;
  www(k+4)=(1.0/36.0);
  alpha(k+4)=1/6;
end Do
Cx(9)= 0.0 ; Cy(9)= 0.0 ;
Cx(1)= 1.0 ; Cy(1)= 0.0;
Cx(2)= 0.0 ; Cy(2)= 1.0;
Cx(3)=-1.0 ; Cy(3)= 0.0;
Cx(4)= 0.0 ; Cy(4)=-1.0;
Cx(5)= 1.0 ; Cy(5)= 1.0;
Cx(6)=-1.0 ; Cy(6)= 1.0;
Cx(7)=-1.0 ; Cy(7)=-1.0;
Cx(8)= 1.0 ; Cy(8)=-1.0;
! =====!
!-----initialization-----!
! =====!

do j=1,jm
  do i=1,im
    density1(i,j)=0.0;!
    density2(i,j)=1.0;

```

```

        density(i,j)=density1(i,j)+density2(i,j);
        Phi(i,j)= (density1(i,j)- density2(i,j))/ density(i,j);
    end Do
end Do
! =====!
do j=1,jm
    do i=1,im
        if ((i>=60.0-20.0) .AND. (i<=60.0+20.0) .AND. (j>=60.0-20.0) .AND.
(j<=60.0+20.0)) then
            density1(i,j)=1.d0;
            density2(i,j)=0.d0;!10^(-6);
            density(i,j)=density1(i,j)+density2(i,j);
            Phi(i,j)= (density1(i,j)- density2(i,j))/ density(i,j);

        end if
    end Do
end Do
! =====

```

### قسمت ۳-

```

! =====!
! -----macro-----!
! =====!

do j=1,jm
    do i=1,im
        density(i,j) = sum( f(i,j,:) );
        Phi(i,j) = sum( g(i,j,:) );
    end Do
end Do

! =====

! =====
! u_x and u_y
! =====

do j=1,jm
    do i=1,im
        u1(i,j)=( f(i,j,1)-f(i,j,3)+f(i,j,5)-f(i,j,6)-f(i,j,7)+f(i,j,8) );
        u_x(i,j)= (u1(i,j)+0.5*Muo(i,j)*GradPhix(i,j))/density(i,j);

        v1(i,j)=( f(i,j,2)-f(i,j,4)+f(i,j,5)+f(i,j,6)-f(i,j,7)-f(i,j,8) );
        u_y(i,j)=( v1(i,j)+0.5*Muo(i,j)*GradPhiy(i,j))/density(i,j);
    end Do
end Do

! =====

! =====!
! -----Mu-----!
! =====!

do i=1,im
    do j=1,jm
        Muo(i,j)=aa*Phi(i,j)*((Phi(i,j)**2.0)-1)-Kk*LapPhi(i,j);
no(i,j)=0.5*(1-Phi(i,j))*no2+0.5*(1+Phi(i,j))*no1;
taof(i,j)= ((no(i,j)*3)/density(i,j))+0.5;
    end Do
end Do

! =====!

! =====
! Grad Phi
! =====

```

```

do i=1,im
do j=1,jm
GradPhix(i,j)=dPhix(i,j);
GradPhiy(i,j)=dPhiy(i,j);
end Do
end Do
!=====

dPhix(i,j)=3.0*0.5*((1.D0/9.D0)*2*(Phi(ip,j)-Phi(in,j))+(1.D0/36.D0)*2*(Phi(ip,jp)-
Phi(in,jn)+Phi(ip,jn)-Phi(in,jp)))

dPhiy(i,j)=3.0*0.5*((1.D0/9.D0)*2*(Phi(i,jp)-
Phi(i,jn))+(1.D0/36.D0)*2*(Phi(ip,jp)-Phi(in,jn)+Phi(in,jp)-Phi(ip,jn)))

!=====

```

## قسمت ۴ -

```

!=====
do j=1,jm
do i=1,im
femp2=(u_x(i,j)*u_x(i,j))+(u_y(i,j)*u_y(i,j));
gemp2=(u_x(i,j)*u_x(i,j))+(u_y(i,j)*u_y(i,j));
do k=1,kp
femp3=Cx(k)*u_x(i,j)+Cy(k)*u_y(i,j);
gemp3=Cx(k)*u_x(i,j)+Cy(k)*u_y(i,j);
feq(i,j,k)=www(k)*(A(i,j,k)+(density(i,j)*(3.0*femp3+(9.0/2.0)*(femp3**2.0)-
(3.0/2.0)*femp2)));
geq(i,j,k)=www(k)*(B(i,j,k)+(Phi(i,j)*(3.0*gemp3+(9.0/2.0)*(gemp3**2.0)-
(3.0/2.0)*gemp2)));
end Do
end Do
end Do
!=====

!=====
do j=1,jm
do i=1,im
B(i,j,9)=(Phi(i,j)-(1-www(9))*Ga*Muo(i,j)*3)/www(9);
do k=1,ik-1
B(i,j,k)=Ga*Muo(i,j)*3;
end Do
end Do
end Do
!=====

do j=1,jm
do i=1,im
A(i,j,9)=(density(i,j)-(1-www(9))*Pressure(i,j)*3)/www(9);
do k=1,ik-1
A(i,j,k)=Pressure(i,j)*3;
end Do
end Do
end Do
!=====

!=====
! Pressure
!=====
do j=1,jm
do i=1,im
Pressure(i,j)=(density(i,j)/3.0)+(Phi(i,j)*Muo(i,j));
end Do
end Do
!=====

```

## قسمت ۵-

```

=====
!=====collision=====
!=====

do j=1,jm
  do i=1,im
    do k=1,kp
      femplx=Cx(k)-u_x(i,j);
      femply= Cy(k)-u_y(i,j);
      femp4= ( (3* femplx)+(9*femp3*Cx(k)))*GradPhix(i,j)*Muo(i,j);
      femp5= ( (3* femply)+(9*femp3*Cy(k)))*GradPhiy(i,j)*Muo(i,j);
      f_middle(i,j,k)=f(i,j,k)-((f(i,j,k)-feq(i,j,k))/taof(i,j))+((1-
      (1.0/(2.0*taof(i,j))))*www(k)*( femp4+ femp5));
      g_middle(i,j,k)=g(i,j,k)-((g(i,j,k)-geq(i,j,k))/taog);
    end Do
  end Do
end Do
!=====

```

## قسمت ۶-

```

! =====!
!-----streaming-----!
!=====!

do j=1,jm
  if(j>1) then
    jn=j-1;
  else
    jn=jm;
  end if

  if(j<jm) then
    jp = j+1;
  else
    jp=1;
  end if

  do i=1,im
    if(i>1) then
      in=i-1;
    else
      in=im;
    end if

    if(i<im) then
      ip=i+1;
    else
      ip=1;
    end if

    f(i,j,9) = f_middle(i,j,9);
    f(ip,j,1) = f_middle(i,j,1);
    f(in,j,3) = f_middle(i,j,3);

    g(i,j,9) = g_middle(i,j,9);
    g(ip,j,1) = g_middle(i,j,1);
    g(in,j,3) = g_middle(i,j,3);

    f(i,jp,2) = f_middle(i,j,2);
    f(ip,jp,5) = f_middle(i,j,5);
    f(in,jp,6) = f_middle(i,j,6);
  end do
end do

```

```

g(i,jp,2) = g_middle(i,j,2);
g(ip,jp,5) = g_middle(i,j,5);
g(in,jp,6) = g_middle(i,j,6);

f(i,jn,4) = f_middle(i,j,4);
f(in,jn,7) = f_middle(i,j,7);
f(ip,jn,8) = f_middle(i,j,8);

g(i,jn,4) = g_middle(i,j,4);
g(in,jn,7) = g_middle(i,j,7);
g(ip,jn,8) = g_middle(i,j,8);
end Do
end Do

```

!=====

## قسمت ۷-

!=====

شرایط مرزی تست زاویه تماس!

!=====

```

do i=1,im
do j=1,jm

if(is_solid_node(i,j)==1) then
Phi(i,j)=Phi_w;
end if
end do

!=====
Phi_w=-1;! motanaseb ba contact angle 180 daraje
!=====

do i=1,im
f(i,2,2) = f_middle(i,2,4);
f(i,2,5) = f_middle(i,2,7);
f(i,2,6) = f_middle(i,2,8);

g(i,2,2) = g_middle(i,2,4);
g(i,2,5) = g_middle(i,2,7);
g(i,2,6) = g_middle(i,2,8);
end do

do i=1,im
f(i,jm-1,4) = f_middle(i,jm-1,2);
f(i,jm-1,7) = f_middle(i,jm-1,5);
f(i,jm-1,8) = f_middle(i,jm-1,6);

g(i,jm-1,4) = g_middle(i,jm-1,2);
g(i,jm-1,7) = g_middle(i,jm-1,5);
g(i,jm-1,8) = g_middle(i,jm-1,6);
end do
!=====

```

- [١] K. Cal, "How does the type of vehicle influence the in vitro skin absorption and elimination kinetics of terpenes?," Arch Dermatol Res, vol. 297, pp. 311-5, Jan 2006.
- [٢] M. A. Burns, B. N. Johnson, S. N. Brahmasandra, K. Handique, J. R. Webster, M. Krishnan, et al., "An Integrated Nanoliter DNA Analysis Device," Science, vol. 282, pp. 484-487, 1998.
- [٣] M. W. Losey, R. J. Jackman, S. L. Firebaugh, M. A. Schmidt, and K. F. Jensen, "Design and fabrication of microfluidic devices for multiphase mixing and reaction," Microelectromechanical Systems, Journal of, vol. 11, pp. 709-717, 2002.
- [٤] M. Richter, P. Woias, and D. Weiß, "Microchannels for applications in liquid dosing and flow-rate measurement," Sensors and Actuators A: Physical, vol. 62, pp. 480-4.١٩٩٧, ٨٣
- [٥] T. Thorsen, R. W. Roberts, F. H. Arnold, and S. R. Quake, "Dynamic pattern formation in a vesicle-generating microfluidic device," Phys. Rev. Lett., vol. 86, pp. 4163-4166, 2001.
- [٦] S. L. Anna, N. Bontoux, and H. A. Stone, "Formation of dispersions using "flow focusing" in microchannels," Applied physics letters, vol. 82, pp. 364-366, 2003.
- [٧] T. Cubaud, M. Tatineni, X. Zhong, and C.-M. Ho, "Bubble dispenser in microfluidic devices," Physical Review E, vol. 72, p. 037302, 09/26/ 2005.
- [٨] Z. Yu, O. Hemminger, and L.-S. Fan, "Experiment and lattice Boltzmann simulation of two-phase gas-liquid flows in microchannels," Chemical Engineering Science, vol. 62, pp. 7172-7183, 2007.
- [٩] S. J., W. TN., N. NT., and K. LTH., "An investigation on the mechanism of droplet formation in a microfluidic T-junction," Microfluidics and nanofluidics, vol. 11, pp. 1-10, 2011.
- [١٠] P. Garstecki, M. J. Fuerstman, H. A. Stone, and G. M. Whitesides, "Formation of droplets and bubbles in a microfluidic T-junction-scaling and mechanism of break-up," Lab on a Chip, vol. 6, pp. 437-446, 2006.
- [١١] S. Gong, P. Cheng, and X. Quan, "Lattice Boltzmann simulation of droplet formation in microchannels under an electric field," International Journal of Heat and Mass Transfer ,vol. 53, pp. 5863-5870, 2010.
- [١٢] T. Fu, Y. Ma, D. Funfschilling, and H. Z. Li, "Bubble formation and breakup mechanism in a microfluidic flow-focusing device," Chemical Engineering Science, vol. 64, pp. 2392-2400, 5/15/ 2009.
- [١٣] J. Hua, B. Zhang, and J. Lou, "Numerical simulation of microdroplet formation in coflowing immiscible liquids," AIChE Journal, vol. 53, pp. 2534-2548, 2007.
- [١٤] W. Wang, Z. Liu, Y. Jin, and Y. Cheng, "LBM simulation of droplet formation in micro-channels," Chemical Engineering Journal, vol. 173, pp. 828-836, 2011.

- [۱۵] H. Liu and Y. Zhang, "Droplet formation in microfluidic cross-junctions," *Physics of Fluids* (1994-present), vol. 23, p. 082101, 2011.
- [۱۶] H. Liu and Y. Zhang, "Lattice Boltzmann simulation of droplet generation in a microfluidic cross-junction," *Communications in computational physics*, vol. 9, pp. 1235-1256, 2011.
- [۱۷] Y. Shi, G. H. Tang, and H. H. Xia, "Lattice Boltzmann simulation of droplet formation in T-junction and flow focusing devices," *Computers & Fluids*, vol. 90, pp. 155-163, 2014.
- [۱۸] J. Tan, J. H. Xu, S. W. Li, and G. S. Luo, "Drop dispenser in a cross-junction microfluidic device: Scaling and mechanism of break-up," *Chemical Engineering Journal*, vol. 136, pp. 306-311, 2008.
- [۱۹] Z. Nie, M. Seo, S. Xu, P. C. Lewis, M. Mok, E. Kumacheva, et al., "Emulsification in a microfluidic flow-focusing device: effect of the viscosities of the liquids," *Microfluidics and Nanofluidics*, vol. 5, pp. 585-594, 2008.
- [۲۰] م. علیزاده، م. طیبی رهنی، م. افتخاری یزدی، "بررسی عددی فرایند امولسیون در میکروکانال‌ها با استفاده از روش شبکه بولتزمن با مدل تابع مشخصه،" *مهندسی مکانیک مدرس*, vol. 15, pp. 13-22, 2015.
- [۲۱] Y. Chen, L. Wu, and C. Zhang, "Emulsion droplet formation in coflowing liquid streams," *Physical Review E*, vol. 87, p. 013002, 2013.
- [۲۲] D. Qiu, L. Silva, A. L. Tonkovich, and R. Arora, "Micro-droplet formation in non-Newtonian fluid in a microchannel," *Microfluidics and Nanofluidics*, vol. 8, pp. 531-548, 2010.
- [۲۳] L. Sang, Y. Hong, and F. Wang, "Investigation of viscosity effect on droplet formation in T-shaped microchannels by numerical and analytical methods," *Microfluidics and nanofluidics*, vol. 6, pp. 621-635, 2009.
- [۲۴] Y. Shi and G. H. Tang, "Lattice Boltzmann Simulation of Droplet Formation in Non-Newtonian Fluids," *Communications in Computational Physics*, vol. 17, pp. 1056-1072, 2015.
- [۲۵] C. Pan, L.-S. Luo, and C. T. Miller, "An evaluation of lattice Boltzmann schemes for porous medium flow simulation," *Computers & fluids*, vol. 35, pp. 898-909, ۲۰۰۶.
- [۲۶] R. Illner, "Lattice Boltzmann Modeling: An Introduction for Geoscientists and Engineers (Michael C. Sukop and Daniel T. Thorne, Jr.)," *SIAM REVIEW*, vol. 49, p. 141, 2007.
- [۲۷] D. Yu, R. Mei, L.-S. Luo, and W. Shyy, "Viscous flow computations with the method of lattice Boltzmann equation," *Progress in Aerospace Sciences*, vol. 39, pp. 329-367, 2003.
- [۲۸] A. Karimipour, A. H. Nezhad, A. D'Orazio, and E. Shirani, "Investigation of the gravity effects on the mixed convection heat transfer in a microchannel using lattice Boltzmann method," *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 54, pp. 142-152, 2012.
- [۲۹] K. Fallah, M. Khayat, M. H. Borghei, A. Ghaderi, and E. Fattahi, "Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann simulation of non-Newtonian flows past a

- rotating circular cylinder," *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, vol. 177, pp. 1-14, 2012.
- [۳۰] A. Salehi-Shabestari, K. Sadeghy, and M. Raisee, "On the use of lattice Boltzmann model for simulating dean flow of non-Newtonian fluids in curved square ducts," *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, vol. 17, pp. 4250-4261, 2012.
- [۳۱] D. T. Thorne, *Lattice Boltzmann modeling: An introduction for geoscientists and engineers*: Springer, 2006.
- [۳۲] M. Ikeda, "A novel multiple-phase, multiple-component, thermal lattice Boltzmann model," 2012.
- [۳۳] A. A. Mohamad, *Lattice Boltzmann method: fundamentals and engineering applications with computer codes*: Springer Science & Business Media, 2011.
- [۳۴] M. C. Sukop, "DT Thorne, Jr .Lattice Boltzmann Modeling Lattice Boltzmann Modeling," 2006.
- [۳۵] P. B. Umbanhowar, V. Prasad, and D. A. Weitz, "Monodisperse emulsion generation via drop break off in a coflowing stream," *Langmuir*, vol. 16, pp. 347-351, 2000.
- [۳۶] م. تقیلو م. رحیمیان, "شبیه‌سازی نفوذ قطره دو بعدی در داخل محیط متخلخل با استفاده از روش بولتزمن شبکه ای," *مهندسی مکانیک مدرس*, vol. 13, pp. 43-56, 2014.
- [۳۷] A. Nabovati and A. C. M. Sousa, "Fluid flow simulation in random porous media at pore level using the Lattice Boltzmann Method," *Journal of Engineering Science and Technology*, vol. 2, pp. 226-237, 2007.
- [۳۸] M. R. Swift, E. Orlandini, W. R. Osborn, and J. M. Yeomans, "Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems," *Physical Review E*, vol. 54 ,p. 5041, 1996.
- [۳۹] J. W. Cahn, "Critical point wetting," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 66, pp. 3667-3672, 1977.
- [۴۰] F. Delplace and J. C. Leuliet, "Generalized Reynolds number for the flow of power law fluids in cylindrical ducts of arbitrary cross-section," *The Chemical Engineering Journal and The Biochemical Engineering Journal*, vol. 56, pp. 33-37, 1995.
- [۴۱] A. Emerson, "Model experiments using dilute polymer solutions instead of water," *Trans NECIES*, vol. 81, pp. 201-212, 1965.
- [۴۲] S. Gabbanelli, G. Drazer, and J. Koplik, "Lattice-Boltzmann Method for Non-Newtonian Fluid Flows," *arXiv preprint cond-mat/0506768*, 2005.
- [۴۳] B. A. Toms, "Some observations on the flow of linear polymer solutions through straight tubes at large Reynolds numbers ",pp. 135-141.
- [۴۴] F. J. H. Gijzen, "Modeling of wall shear stress in large arteries," 1998.
- [۴۵] A. Quarteroni, M. Tuveri, and A. Veneziani, "Computational vascular fluid dynamics: problems, models and methods," *Computing and Visualization in Science*, vol. 2, pp. 163-197, 2000.
- [۴۶] M. Yoshino, Y. Hotta, T. Hirozane, and M. Endo, "A numerical method for incompressible non-Newtonian fluid flows based on the lattice Boltzmann

- method," *Journal of non-newtonian fluid mechanics*, vol. 147, pp. 69-78, 2007.
- [٤٧] R. B. Bird, R. Armstrong, and O. Hassager, "Dynamics of polymeric liquids. Vol. 1: Fluid mechanics," 1987.
  - [٤٨] J. Bao, "High density ratio multi-component lattice Boltzmann flow model for fluid dynamics and CUDA parallel computation," 2010.
  - [٤٩] T. Inamuro, M. Yoshino, and F. Ogino, "A non-slip boundary condition for lattice Boltzmann simulations," *Physics of Fluids (1994-present)*, vol. 7, pp. 2928-2930, 1995.
  - [٥٠] P. Yuan, "Thermal lattice Boltzmann two-phase flow model for fluid dynamics," 2005.
  - [٥١] Q. Zou and X. He, "On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model," *Physics of Fluids (1994-present)*, vol. 9, pp. 1591-1598, 1997.
  - [٥٢] A. J. C. Ladd, "Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 1. Theoretical foundation," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 271, pp. 285-309, 1994.
  - [٥٣] A. J. C. Ladd, "Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 2. Numerical results," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 271, pp. 311-339, 1994.
  - [٥٤] L. Hao and P. Cheng, "Lattice Boltzmann simulations of liquid droplet dynamic behavior on a hydrophobic surface of a gas flow channel," *Journal of Power Sources*, vol. 190, pp. 435-446, 2009.
  - [٥٥] A. M. Artoli, A. G. Hoekstra, and P. M. A. Slood, "Mesoscopic simulations of systolic flow in the human abdominal aorta," *Journal of biomechanics*, vol. 39, pp. 873-884, 2006.
  - [٥٦] H. Fang, Z. Wang, Z. Lin, and M. Liu, "Lattice Boltzmann method for simulating the viscous flow in large distensible blood vessels," *Physical Review E*, vol. 65, p. 051925, 2002.
  - [٥٧] S. Van der Graaf, T. Nisisako, C. Schroen, R. G. M. Van Der Sman, and R. M. Boom, "Lattice Boltzmann simulations of droplet formation in a T-shaped microchannel," *Langmuir*, vol. 22, pp. 4144-4152, 2006.
  - [٥٨] T. Roths, C. Friedrich, M. Marth, and J. Honerkamp, "Dynamics and rheology of the morphology of immiscible polymer blends—on modeling and simulation," *Rheologica acta*, vol. 41, pp. 211-222, 2002.
  - [٥٩] H. Zhou and C. Pozrikidis, "The flow of suspensions in channels: single files of drops," *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics (1989-1993)*, vol. 5, pp. 311-324, 1993.
  - [٦٠] M. De Menech, P. Garstecki, F. Jousse, and H. A. Stone, "Transition from squeezing to dripping in a microfluidic T-shaped junction," *journal of fluid mechanics*, vol. 595, pp. 141-161, 2008.
  - [٦١] J. H. Xu, S. W. Li, J. Tan, and G. S. Luo, "Correlations of droplet formation in T-junction microfluidic devices: from squeezing to dripping," *Microfluidics and Nanofluidics*, vol. 5, pp. 711-717, 2008.
  - [٦٢] G. F. Christopher, N. N. Noharuddin, J. A. Taylor, and S. L. Anna,

"Experimental observations of the squeezing-to-dripping transition in T-shaped microfluidic junctions," Physical Review E, vol. 78, p. 036317, 2008.

- [۶۳] M. Taghilou and M. H. Rahimian, "SIMULATION OF 2D DROPLET PENETRATION IN POROUS MEDIA USING LATTICE BOLTZMANN METHOD," 2014.

**Abstract:**

In this study, the lattice Boltzmann method is used to simulate the droplet formation and breakup process from mixing of immiscible fluids. The dimensionless numbers such as Capillary, viscosity ratio and velocity ratio are most important dimensionless numbers in determination of fluid flow characteristics in micro-channel. Two models are used for simulation: The intermolecular potential model of the lattice Boltzmann method and free-energy model. In this research free-energy model is used to simulate Newtonian phase droplet in Newtonian continuous fluid in a T-junction micro-channel and explain the dynamics of problem and important parameters that effect on the droplet formation are investigated. Flow pattern is divided into three different regimes such as squeezing, dripping and jetting. The influence of capillary number, velocity ratio, viscosity ratio and contact angle on the detachment time and length of droplet are investigated. We found that by increasing the capillary number and velocity ratio, droplet detachment time decreases and detachment length increase, and by increasing the viscosity ratio, droplet detachment time and detachment length increases. also at low capillary number that named squeezing regime, Capillary number doesn't have significant effect on droplet size and droplet size number is heavily dependent on the ratio of flow rates and increases with increasing flow rate but in dripping regime, capillary number has significant effect on droplet length and droplet size is almost independent of flow rate ratio. at next part, the intermolecular potential model of the lattice Boltzmann method is used to simulate the non-Newtonian droplet formation in Newtonian continuous phase in a co-flowing micro-channel. the influence of capillary number, the non-Newtonian fluid Carreau-Yasuda exponent and velocity ratio on the droplet formation. The final droplet size, droplet generation frequency, and detachment point of the droplet has been studied. The results reveal that with the increasing Carreau-Yasuda exponent  $n$ , the viscosity of the fluid is increased, the time of starting of detachment point of the droplet is decreased and length of starting of detachment point of the first droplet is decreased. also increasing of the Capillary number leads to a reduction in the detachment point of the drop. The size of drop decreases, due to reducing the velocity ratio and Capillary number and increasing Carreau-Yasuda exponent  $n$ . The effect of Carreau-Yasuda exponent  $n$  on the distance of droplets is studied. The droplet generation frequency increases with the decreasing of the droplet length and this leads to reduction in the distance of droplets.

**Keywords:** micro-channel, lattice Boltzmann method, non-Newtonian fluid, droplet



**Shahrood University of Technology**

**Faculty of Mechanical Engineering**

**Two phase Analysis of formation and Breakup of a fluid jet**

**Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements for the  
Degree of Master of Science (M.Sc)**

**Hajar mohamadzade sani**

**Supervisors:**

**Dr. M. Kayhani**

**Dr. M. Nazari**

**February 2016**