

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده مهندسی مکانیک

رشته مکانیک-تبدیل انرژی

رساله دکتری

بررسی الگوی جریان دو سیال مخلوط نشدنی در سیستم LOD به روش بولتزمن شبکه‌ای

نگارنده: بتول حسین پور گنجاودی

استاد راهنما

دکتر علی سر رشته‌داری

استاد مشاور

دکتر حمیدرضا عاشوری نژاد

دی ماه ۱۳۹۸



مدیریت تحصیلات تکمیلی

باسمه تعالی

شماره: ۳۰۴۵۵/۹۸/۱۱/۲۳
تاریخ: ۹۸/۱۱/۲۳
ویرایش:

فرم شماره ۱۲: صورت جلسه نهایی دفاع از رساله دکتری (Ph.D)
(ویژه دانشجویان ورودی های ۹۴ و ما قبل)

بدینوسیله گواهی می شود خانم بتول حسین پور گنجاوردی دانشجوی دکتری رشته مهندسی مکانیک-تبدیل انرژی به شماره دانشجویی ۹۳۰۰۴۵۵ ورودی ماه مهر سال ۱۳۹۳ در تاریخ ۹۳/۱۰/۲۲ از رساله نظری / عملی ☐ خود با عنوان: بررسی الگوی جریان دو سیال مخلوط نشدنی در سیستم LOD به روش بولتزمن شبکه‌ای در سیستم LOD به روش بولتزمن شبکه‌ای دفاع و با اخذ نمره ۱۹/۲۰ به درجه: خوب نائل گردید.

الف) درجه عالی: نمره ۱۹-۲۰ ☒
ب) درجه بسیار خوب: نمره ۱۸/۹۹ - ۱۷ ☐
ج) درجه خوب: نمره ۱۶/۹۹ - ۱۵ ☐
د) غیر قابل قبول و نیاز به دفاع مجدد دارد ☐
ه) رساله نیاز به اصلاحات دارد ☐

ردیف	هیئت داوران	نام و نام خانوادگی	مرتبه علمی	امضاء
۱	دکتر علی سرشته‌داری	استاد راهنما	استادیار	
۲	دکتر حمیدرضا عاشوری‌نژاد	استاد مشاور	استادیار	
۳	دکتر کاظم هجران‌فر	استاد مدعو خارجی	استاد	
۴	دکتر پوریا اکبرزاده	استاد مدعو داخلی	دانشیار	
۵	دکتر محسن نظری	استاد مدعو داخلی	دانشیار	
۶	دکتر محمد حسن کیهانی	سرپرست (نماینده) تحصیلات تکمیلی دانشکده	استاد	

مدیر محترم تحصیلات تکمیلی دانشگاه:

ضمن تأیید مراتب فوق مقرر فرمائید اقدامات لازم در خصوص انجام مراحل دانش آموختگی خانم بتول حسین پور گنجاوردی بعمل آید.

نام و نام خانوادگی رئیس دانشکده: دکتر مهدی گردویی
تاریخ و امضاء و مهر دانشکده:

۹۸/۱۱/۲۱

تقدیم به

بابا، مامان، آرزو، الهام، نوید و سامان عزیزم. آنان که زندگی در پرتو مهرشان هرگز نمی‌میرد.

تشکر و قدردانی

از زحمات آقای دکتر علی سررشته‌داری که در طی این مسیر همراه من بوده‌اند و همچنین از جناب آقای دکتر عاشوری-نژاد که از راهنمایی‌های راه‌گشای خود در انجام این رساله مرا بهره‌مند نمودند، سپاسگزارم.

تعمدنامه

اینجانب **بتول حسین پور گنjarودی** دانشجوی دوره دکتری مکانیک دانشکده مهندسی مکانیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان‌نامه با عنوان **بررسی الگوی جریان دو سیال مخلوط نشدنی در سیستم LOD به روش بولتزمن شبکه‌ای تحت راهنمایی دکتر علی سررشته‌داری** متعهد می‌شوم:

- تحقیقات در این پایان‌نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهش‌های محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب مندرج در پایان‌نامه 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 می‌باشد 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 پایان‌نامه تأثیرگذار بوده‌اند در مقالات مستخرج از پایان‌نامه رعایت می‌گردد.
- در کلیه مراحل انجام این پایان‌نامه، در مواردی که از موجود زنده (یا بافت‌های آنها) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در کلیه مراحل انجام این پایان‌نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری، ضوابط و اصول اخلاقی انسانی رعایت شده است.

دی ماه ۱۳۹۸

بتول حسین پور گنjarودی

مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه‌های رایانه‌ای، نرم افزارها و تجهیزات ساخته شده است) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می‌باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.

چکیده

از آنجا که سیستم‌های میکروفلوئیدیک از موضوعات و فناوری‌های نوین مطرح، با کاربردهای متنوع، در سال‌های اخیر توجه پژوهشگران را جلب کرده است، هدف اصلی این رساله به شبیه‌سازی سیستم‌هایی میکروفلوئیدیک آزمایشگاه بر روی دیسک توسط روش بولتزمن شبکه‌ای اختصاص یافته است که از روش‌های کارآمد در شبیه‌سازی‌های عددی می‌باشد. علاوه بر این، این امر زمینه توسعه روش بولتزمن شبکه‌ای را در موضوع مطالعاتی جدید و امکان درک بهتر عملکرد و سازوکار این سیستم‌ها با بررسی کمیت‌های تاثیرگذار فراهم می‌کند. از آنجا که این پژوهش توسط روش عددی بولتزمن شبکه‌ای و روش پیشنهادی لی برای شبیه‌سازی سیستم‌های دوفاز انجام گرفته، این روش، شرایط مرزی و مختصری از روش‌های مطرح در شبیه‌سازی دوفاز و ویژگی‌های آنها ارائه شده است. از این رو، فصل‌های این پژوهش، بر اساس آنچه که در رساله پیشنهادی مطرح گردید و بر اساس برنامه و جدول مراحل انجام کار، که در انتهای رساله آورده شده تدوین شده است. در بخش نتایج در این رساله و در مراحل مختلف آن علاوه بر صحت سنجی صورت گرفته، نتایج به صورت هدفمند و کاربردی توسعه یافته است. در بخش‌هایی که مربوط به بررسی دینامیک قطره متحرک است، افزایش تعداد قطره‌ها با ایجاد مانع کیفی شکل یا مثلی مورد مطالعه قرار گرفت. هر دو سیستم میکروفلوئیدیک LOC و LOD شبیه‌سازی شده و سعی بر آن بوده تا علاوه بر بررسی رژیم‌های مختلف جریان، نوآوری‌هایی نیز انجام پذیرد. از این رو، تکنیک‌هایی جهت ایجاد تاخیر در ورود فاز ثانویه به داخل کانال اصلی، که با نام فرایند ولوینگ شناخته می‌شود و همچنین افزایش تعداد قطره تولید شده، که از فرایندهای مهم در آزمایش‌های نوکلئیک اسید می‌باشند، معرفی می‌گردد. تاثیر تغییر هندسه جریان بر فرایند تولید قطره، تاثیر اعداد بی‌بعد تاثیرگذار و اثر همزمان برخی از پارامترها از موضوعات مورد بررسی در این رساله است.

واژگان کلیدی: سیستم‌های میکروفلوئیدیک، آزمایشگاه روی دیسک، جریان‌های دوفازی، تولید قطره، بولتزمن

شبکه‌ای

فهرست مطالب

فصل اول: معرفی سیستم‌های میکروفلویدیک	۱
۱-۱ مقدمه	۲
۲-۱ میکروفلویدیکس	۲
۳-۱ مفهوم میکرواسکیل برای سیال	۳
۴-۱ سیستم‌های میکروفلویدیک بر پایه قطره	۵
۵-۱ لزوم استفاده از سیستم‌های میکروفلویدیک	۷
۶-۱ برخی فرآیندهای مهم در سیستم‌های میکروفلویدیک	۹
۱-۶-۱ ذخیره واکنش گر و نمونه	۱۰
۲-۶-۱ انتقال مایعات	۱۰
۳-۶-۱ کنترل سیال از طریق دریچه یا شیر	۱۱
۴-۶-۱ اندازه‌گیری و تقسیم به دو قسمت مساوی (الیکوتینگ)	۱۲
۵-۶-۱ اختلاط	۱۳
۶-۶-۱ جداسازی	۱۴
۷-۶-۱ دستکاری قطره	۱۵
۷-۱ عملکرد نیروها در سیستم‌های میکروفلویدیک	۱۶
۸-۱ خلاصه برخی پژوهش‌های انجام شده	۱۸
۹-۱ نوآوری	۲۲
۱۰-۱ ساختار تدوین رساله	۲۴
فصل دوم: روش بولتزمن شبکه‌ای و شرایط مرزی	۲۵
۱-۲ تئوری لتیس بولتزمن	۲۶
۲-۲ تئوری جنبشی گازها	۲۷
۳-۲ شبکه سلولی گازی	۳۰
۴-۲ اصول بولتزمن شبکه‌ای	۳۱
۵-۲ فرمول‌بندی بولتزمن شبکه‌ای	۳۱
۶-۲ گسسته‌سازی محدوده حل	۳۳
۷-۲ گسسته‌سازی D_2Q_9	۳۳
۸-۲ فرآیند برخورد	۳۴
۹-۲ مدل باتانکار - گراس - کروگ (LBGK) برای اوپراتور برخورد	۳۵

۱۰-۲	تابع تعادل.....	۳۶
۱۱-۲	دقت و پایداری.....	۳۶
۱۲-۲	استقلال دقت روش از کمیت‌های مدل.....	۳۷
۱۳-۲	روش انتخاب کمیت‌های مدل.....	۳۸
۱۴-۲	واحدهای لتیس.....	۳۹
۱۵-۲	مدل بولتزمن شبکه‌ای برای شبیه‌سازی جریان دو فاز مخلوط نشدنی.....	۳۹
۱۶-۲	مروری بر روش‌های شبیه‌سازی جریان‌های دو فاز.....	۴۲
۱-۱۶-۲	مدل شان-چن.....	۴۳
۲-۱۶-۲	مدل هی-شان-دولن.....	۴۴
۳-۱۶-۲	مدل انرژی آزاد.....	۴۶
۴-۱۶-۲	مدل رنگی.....	۴۷
۱۷-۲	جمع‌بندی.....	۴۸
فصل سوم: روش لی و شرایط مرزی.....		
۱-۳	روش لی.....	۵۲
۲-۳	مدل ریاضی.....	۵۵
۳-۳	معادلات بولتزمن شبیه‌سازی شده برای گازهای ایده‌آل.....	۵۶
۴-۳	تنش و شکل پتانسیلی نیروهای بین مولکولی.....	۵۹
۵-۳	معادله گسسته بولتزمن برای فشار و ممنتوم.....	۶۰
۶-۳	معادله بولتزمن شبکه‌ای برای کمیت مرتبه.....	۶۳
۷-۳	جداسازی معادلات بولتزمن شبکه‌ای با دو تابع توزیع.....	۶۴
۸-۳	گسسته‌سازی عبارت‌های نیرویی.....	۶۷
۹-۳	تفاضل مرکزی مرتبه دوم.....	۶۹
۱۰-۳	تفاضل یک‌طرفه مرتبه دوم.....	۷۰
۱۱-۳	تفاضل مختلط مرتبه دوم.....	۷۰
۱۲-۳	شرایط مرزی متداول در روش شبکه‌ای بولتزمن.....	۷۱
۱-۱۲-۳	شرط مرزی برخورد و بازگشت.....	۷۲
۲-۱۲-۳	شرط مرزی تناوبی.....	۷۲
۳-۱۲-۳	شرط مرزی سرعت ثابت.....	۷۳
۴-۱۲-۳	شرط مرزی تقارن.....	۷۴
۵-۱۲-۳	شرط مرزی جریان خروجی باز.....	۷۵

۷۵.....	۱۳-۳	جمع‌بندی.....
۷۷.....		فصل چهارم: نتایج.....
۷۸.....	۱-۴	شبیه‌سازی حباب استاتیک.....
۷۸.....	۱-۱-۴	مقدمه.....
۷۸.....	۲-۱-۴	شبیه‌سازی حباب استاتیک.....
۷۹.....	۳-۱-۴	معادله لاپلاس.....
۸۲.....	۲-۴	بررسی دینامیک قطره متحرک در کانال افقی.....
۸۲.....	۱-۲-۴	مقدمه.....
۸۵.....	۲-۲-۴	معادلات بولتزمن.....
۸۷.....	۳-۲-۴	شرایط مرزی.....
۹۰.....	۴-۲-۴	نتایج.....
۹۴.....	۳-۴	نتیجه‌گیری.....
۹۵.....	۴-۴	اثر نیروی گرانش: صعود و سقوط قطره.....
۹۵.....	۱-۴-۴	مقدمه.....
۹۷.....	۲-۴-۴	معادلات بولتزمن.....
۹۸.....	۳-۴-۴	شرایط مرزی.....
۹۹.....	۴-۴-۴	شبیه‌سازی صعود حباب تحت اثر گرانش.....
۱۰۰.....	۵-۴-۴	سقوط قطره.....
۱۰۶.....	۵-۴	نتیجه‌گیری.....
۱۰۷.....	۶-۴	آزمایشگاه بر روی تراشه LOC.....
۱۰۷.....	۱-۶-۴	مقدمه.....
۱۰۹.....	۲-۶-۴	شبیه‌سازی عددی.....
۱۱۲.....	۳-۶-۴	معادلات بولتزمن شبکه‌ای.....
۱۱۲.....	۴-۶-۴	شرایط مرزی.....
۱۱۴.....	۵-۶-۴	شبیه‌سازی آزمایشگاه بر روی تراشه (Lab On Chip).....
۱۲۴.....	۷-۴	نتیجه‌گیری.....
۱۲۵.....	۸-۴	آزمایشگاه بر روی دیسک LOD.....
۱۲۷.....	۱-۸-۴	مقدمه.....
۱۲۸.....	۲-۸-۴	معادلات بولتزمن شبکه‌ای.....
۱۳۱.....	۳-۸-۴	عملکرد نیروها در سیستم‌های میکروفلوئیدیک گریز از مرکز.....

۴-۸-۴	شرایط مرزی.....	۱۳۳
۵-۸-۴	نتایج و بحث.....	۱۳۳
۶-۸-۴	نسبت چگالی ۱.....	۱۳۹
۷-۸-۴	نسبت چگالی ۵.....	۱۴۲
۸-۸-۴	نسبت چگالی ۱۰.....	۱۴۳
۹-۸-۴	تأثیر هندسه بر فرآیند تولید قطره در نسبت چگالی ۱۰۰.....	۱۴۵
۱۰-۸-۴	تغییر پهنای نازل یا کانال فرعی.....	۱۴۵
۱۱-۸-۴	تغییر ارتفاع دو طرف تقاطع.....	۱۴۶
۹-۴	نتیجه گیری.....	۱۴۷

فهرست جداول

- جدول ۱-۱: برخی سیستم‌های میکروفلوئیدیک جهت اندازه‌گیری [۶۲]..... ۱۲
- جدول ۱-۴: مقادیر سرعت‌های پارازیتی در قطره ساکن..... ۸۲
- جدول ۲-۴: خواص سیالات به کار رفته در آزمایش [۳۰۴]..... ۱۳۳
- جدول ۳-۴: کمیت‌های به کار رفته در شبیه‌سازی..... ۱۳۸

فهرست اشکال

- شکل ۱-۱: تصویر سیستم‌های میکروفلوئیدیک Lab On Chip و Lab On Disk [۴] ۳
- شکل ۲-۱: هندسه‌های متداول در سیستم‌های میکروفلوئیدیک [۱۵] ۶
- شکل ۳-۱: دو نمونه از شیرهای مورد استفاده در سیستم‌های میکروفلوئیدیک [۴۱] ۱۲
- شکل ۴-۱: نمونه‌ای از سیستم‌های میکروفلوئیدیک برای اندازه‌گیری [۶۲] ۱۳
- شکل ۵-۱: شمایی از یک سیستم آزمایشگاه بر روی دیسک (LOD) و نیروهای وارد بر سیال درون میکروکانال [۷۶] ۱۷
- شکل ۱-۲: مرحله برخورد و جاری شدن [۱۵۳] ۳۲
- شکل ۲-۲: ساختار شبکه‌ای D_2Q_9 [۱۵۲] ۳۴
- شکل ۱-۳: معادله $P-\rho$ هم‌دما در $T=0.9$ [۲۰۴] ۵۸
- شکل ۲-۳: جریان روی سطح و بردارهای $D2Q9$ بر روی مرزهای بالا و پایین [۱۴] ۷۲
- شکل ۳-۳: جریان روی سطح و شرط مرزی تناوبی [۱۴] ۷۳
- شکل ۴-۳: شرط مرزی تقارن [۱۴] ۷۵
- شکل ۱-۴: بررسی تغییر شکل حباب استاتیک مربعی با لزجت 0.333 [۲۱۳] ۷۹
- شکل ۲-۴: بررسی قانون لاپلاس مربوط به شبیه‌سازی [۲۱۴] ۸۰
- شکل ۳-۴: بررسی قانون لاپلاس مربوط به شبیه‌سازی حاضر ۸۰
- شکل ۴-۴: تغییرات چگالی به صورت تابعی از فاصله از مرکز دایره ۸۱
- شکل ۵-۴: مقایسه سرعت‌های پارازیتی با نتایج (الف) لی [۲۳۰] و (ب) شبیه‌سازی حاضر ۸۱
- شکل ۶-۴: اوریفیس ارائه شده توسط کاپولا و همکارانش در [۲۲۲] ۸۳
- شکل ۷-۴: شبیه‌سازی شرط مرزی همرفت بدون مانع در شبیه‌سازی حاضر (الف) و مقایسه آن با نتایج لو و همکاران [۲۲۲] ۸۹
- شکل ۸-۴: شبیه‌سازی شرط مرزی همرفت با مانع در شبیه‌سازی حاضر (الف) و مقایسه آن با نتایج لو و همکاران [۲۲۸] ۹۰
- شکل ۹-۴: شبیه‌سازی قطره متحرک در کانال افقی با سه نسبت مختلف d/w و مقایسه با نتایج میرزایی و رحیمیان [۲۱۴] ۹۱
- شکل ۱۰-۴: هندسه مورد بررسی ۹۱
- شکل ۱۱-۴: تغییرات قطره در برخورد با مانع در عدد رینولدز ثابت ۶ و اعداد وبر متفاوت ۹۲
- شکل ۱۲-۴: تغییرات قطره در برخورد با مانع در عدد رینولدز ثابت ۶ و عدد وبر ۸ در زاویه‌های متفاوت ۵، ۱۰، ۱۵ ۹۳
- شکل ۱۳-۴: (الف) پروفیل سرعت (ب) خطوط جریان روی گوه (ج) برخورد قطره با گوه ۹۴
- شکل ۱۴-۴: شبیه‌سازی صعود قطره تحت اثر گرانش در اعداد بوند و مورتون متفاوت و مقایسه آن با نتایج آمایبوتر و لی [۲۶۷-۲۶۱] ۱۰۰
- [..... ۱۰۰
- شکل ۱۵-۴: مقایسه نتایج حاصل از شبیه‌سازی حاضر (الف) سقوط قطره تحت اثر گرانش در $oh=0.3$ در شبیه‌سازی حاضر با نتایج فخاری و رحیمیان [۲۶۰] (ب) در ۱۰۱
- شکل ۱۶-۴: نمایی از هندسه کانال مورد مطالعه با قرارگیری مانع قیفی شکل در سقوط قطره ۱۰۲

- شکل ۴-۱۷: سقوط قطره در اعداد Eo متفاوت با مانع با زاویه ۴۰ در Oh=0.3 در c) $t^* = 10.86$ b) $t^* = 11.67$ a)
- $t^* = 10.05$ d) $t^* = 9.24$ ۱۰۳
- شکل ۴-۱۸: تاثیر اعداد Oh بر سقوط قطره در کانال عمودی با مانع در نسبت چگالی‌های مختلف در Theta=30 و Eo=43 و
- $t^* = 11.67$ ۱۰۴
- شکل ۴-۱۹: سقوط قطره در کانال عمودی در نسبت چگالی‌های مختلف در Oh=0.3 و Eo=43 و $t^* = 13.36$ ۱۰۵
- شکل ۴-۲۰: سقوط قطره در کانال عمودی در زوایای مختلفی از مانع در Oh=0.3 و Eo=43 ۱۰۶
- شکل ۴-۲۱: شبیه‌سازی خیس‌شوندگی سطح در سه زاویه ۳۰، ۶۰، ۱۵۰ و مقایسه آن با پژوهش لی [۲۸۳] ۱۱۱
- شکل ۴-۲۲: مطابقت زوایای خیس‌شوندگی سطح در سه زاویه ۳۰، ۶۰، ۱۵۰ در پژوهش حاضر (خطوط قرمز) با پژوهش لی [۲۸۳]
- خطوط آبی..... ۱۱۱
- شکل ۴-۲۳: مقایسه شبیه‌سازی انجام شده با شبیه‌سازی آمایبوتر و لی [۲۷۲] و نتایج تجربی ون استیجن و همکاران [۲۷۱] در
- نسبت چگالی ۱۰۰۰..... ۱۱۵
- شکل ۴-۲۴: مقایسه نتایج منخ [۲۸۲] در نسبت چگالی واحد و نسبت لزجت $\lambda = 0.125$ ۱۱۵
- شکل ۴-۲۵: طول قطره بیبعد در نرخ‌های حجمی متفاوت در نسبت لزجت ۰/۲۵ و Ca=0.005 ۱۱۶
- شکل ۴-۲۶: مقایسه تشکیل قطره در نسبت‌های مختلف پهنای دو طرف تقاطع در Ca=0.005 و $T = 1/33$ در حالت‌های ۱۱۸
- شکل ۴-۲۷: مقایسه تعداد قطره‌های تولید شده در اعداد موینگی متفاوت در الف) $H_L / H_R = 1.5$ و مقایسه آن با ب) $H_R / H_L = 1$ ۱۲۰
- شکل ۴-۲۸: تاثیر نسبت پهنای متفاوت دو کانال اصلی و فرعی در شرایط $H_L / H_R = 1.5$, Q=0.25 ۱۲۱
- شکل ۴-۲۹: مقایسه تشکیل قطره در شبیه‌سازی حاضر(الف) و تحقیق شی(ب) [۲۸۰] در $ca=0.006$ و $w_d / w_c = 1$ ۱۲۱
- شکل ۴-۳۰: تشکیل قطره در حالت Ca=0.006 و در نسبت دبی‌های حجمی متفاوت برای $H_L / H_R = 1.5$ ۱۲۱
- شکل ۴-۳۱: مقایسه سائز قطره در نسبت پهنای متفاوت با تحقیق شی [۲۸۰] در Ca=0.006 و $H_L / H_R = 1.5$ ۱۲۲
- شکل ۴-۳۲: تاثیر زاویه تقاطع در فرایند تشکیل قطره در دو نسبت دبی حجمی در $Ca = 0/005$ و نسبت لزجت ۰/۱۲۵ و زاویه تقاطع $\theta = 60$ (الف) Q=0.5 و (ب) Q=1.5 ۱۲۳
- شکل ۴-۳۳: تاثیر زاویه تقاطع در فرایند تشکیل قطره در دو نسبت دبی حجمی در $Ca = 0/005$ و نسبت لزجت ۰/۱۲۵ و زاویه تقاطع $\theta = 80$ (الف) Q=0.5 و (ب) Q=1.5 ۱۲۳
- شکل ۴-۳۴: مقایسه خطوط جریان در دو زاویه مختلف در شرایط $\theta = 90$, $\theta = 60$, $\eta_d / \eta_c = 0.125$, Q=0.5, Ca=0.005 ۱۲۴
- شکل ۴-۳۵: شمایی از یک سیستم آزمایشگاه بر روی دیسک (LOD) و نیروهای وارد بر سیال درون میکروکانال [۳۰۰] ۱۳۲
- شکل ۴-۳۶: تولید قطره در سه کانال موازی در فاصله‌های مختلف از مرکز دیسک در زمانهای مختلف در شبیه‌سازی حاضر (ردیف بالا) و مقایه با نتایج رن [۳۰۵] در $Bo = 0/02$ ۱۳۴
- شکل ۴-۳۷: بررسی استقلال حل از تعداد شبکه در Bo=0.12 در نسبت داسیته ۱ برای تعداد شبکه به ترتیب (۱) 90×3000 (۲) 90×4100 (۳) 90×5500 (۴) 100×6100 (۵) 100×6700 (۶) 100×7100 ۱۳۶

- شکل ۳۸-۴: تاثیر تغییر عدد بوند بر طول بی‌بعد شده در شبیه‌سازی حاضر و مقایسه آن با نتایج رن [۳۰۴]..... ۱۳۷
- شکل ۳۹-۴: تاثیر نسبت لزجت بر طول قطره بی‌بعد در نسبت چگالی ۱ و $Bo=0.1$ ۱۴۰
- شکل ۴۰-۴: تاثیر افزایش عدد بوند بر طول قطره‌های تولید شده و رژیم جریان در نسبت چگالی ۱ و نسبت لزجت ۵..... ۱۴۱
- شکل ۴۱-۴: تاثیر نسبت لزجت بر طول قطره بی‌بعد در نسبت چگالی ۵ و $Bo=4$ ۱۴۲
- شکل ۴۲-۴: کاهش طول بی‌بعد قطره‌های تولید شده با افزایش عدد بوند در نسبت چگالی و لزجت ۵..... ۱۴۳
- شکل ۴۳-۴: تاثیر افزایش عدد بوند بر طول قطره‌های تولید شده و رژیم جریان در نسبت چگالی ۵ و نسبت لزجت ۵..... ۱۴۳
- شکل ۴۴-۴: تاثیر نسبت لزجت بر طول قطره بی‌بعد در نسبت چگالی ۱۰ و $Bo=3$ ۱۴۴
- شکل ۴۵-۴: تاثیر افزایش عدد بوند بر طول قطره‌های تولید شده و رژیم جریان در نسبت چگالی ۱۰ و نسبت لزجت ۵..... ۱۴۴
- شکل ۴۶-۴: کاهش طول بی‌بعد قطره‌های تولید شده با افزایش عدد بوند در نسبت چگالی ۱۰ و لزجت ۵..... ۱۴۵
- شکل ۴۷-۴: تشکیل قطره در نسبت‌های مختلف پهنای نازل در $\lambda=5$ و $Bo=20$ و $\rho_r=0.01$ ۱۴۶
- شکل ۴۸-۴: تاثیر پهنای مختلف کانال در اطراف تقاطع بر طول قطره، تعداد آن و تشکیل آن در گام زمانی ۲۰۰۰۰۰..... ۱۴۷

فصل اول

معرفی سیستم‌های میکروفلوئیدیک

۱-۱ مقدمه

توسعه سیستم‌های میکروفلوئیدیک در دهه‌های اخیر، امکان بررسی گسترده‌تری را در زمینه‌های تحلیل علوم فیزیکی، شیمیایی و زیست-پزشکی^۱ گشوده است. نیازهای موجود، دو ایده را پیش‌روی محققان قرار می‌داد. اول اینکه سیستم‌های تحلیل مورد نیاز می‌بایست قابل جابجایی، مستقل و دارای مخازنی جهت ذخیره سیالات و مواد مورد استفاده باشد، دوم اینکه امکان انجام آزمایشات و تحلیل‌های متعدد با بازدهی بالا را امکان‌پذیر سازد. درواقع سیستم‌های میکرو و میکروکانال‌ها بر پایه قطره^۲، شامل ذرات معلق در سیال زمینه، به دلیل استفاده گسترده آن، الگوی طراحی این سیستم‌ها قرار گرفت که در زمان ابداع آن، به عنوان ابزارهای تحلیلی موجود برای بررسی‌های تک فاز استفاده می‌شد.

۲-۱ میکروفلوئیدیکس

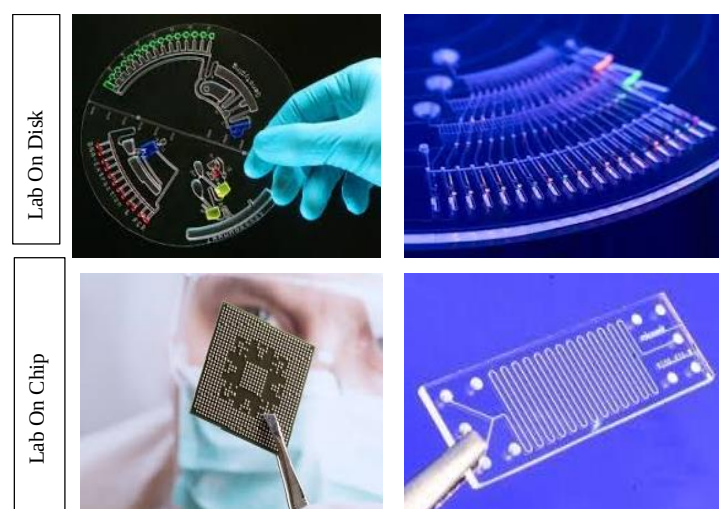
میکروفلوئیدیکس به مطالعه سیستم‌هایی متشکل از مجموعه‌ای از میکروکانال‌ها که در آن مقادیر سیال از چند میکرون تا چند میلیمتر است، می‌پردازد [۱]. این سیستم‌ها جایگاه ویژه‌ای را در بسیاری از علوم خصوصاً تحلیل‌های زیست-شیمی^۳، صنعت نفت و گاز، داروسازی، سنتزهای شیمیایی، پزشکی و آزمایش‌های زیست‌محیطی به خود اختصاص داده‌اند. به این صورت که از این سیستم‌ها در فرایندهای مختلفی از جمله اختلاط، واکنش‌های شیمیایی، جداسازی سیال و دستکاری ذرات معلق در سیال زمینه استفاده می‌شود. به همین ترتیب، میکروپمپ‌ها و ابزارهای مورد نیاز جهت ایجاد نیرو محرکه برای جاری ساختن سیالات نیز طراحی گردید [۲]. نقطه قوت سیستم‌های میکرو فلوئیدیک، در توانایی برای یکپارچه‌سازی همزمان چند فرآیند، سرعت بالای انجام آزمایش‌ها و امکان تحلیل و آزمایش‌ها در ابعاد

¹ Biomedical

² Droplet-based microfluidic

³ Biochemistry

میکرو (μTAS) نهفته است که معمولا این سیستم‌ها به عنوان سیستم‌های آزمایشگاه روی تراشه^۱ شناخته می‌شوند [۳]. این ابزارهای یکپارچه کارآمد، امکان آماده‌سازی نمونه‌ها، دستکاری، آزمایش و تحلیل را همزمان فراهم می‌کند [۳]. علاوه بر این، این سیستم‌ها خودکار و دارای بازده کاربرپسند می‌باشند [۴]. این قابلیت‌ها در کنار نیاز به مقادیر بسیار کم از سیالات شرکت کننده در انجام فرایند تاثیر بسزا و چشم‌گیری در بکارگیری آنها و پیشرفت در زمینه‌های مطالعاتی ذکر شده داشته است [۵-۶]. تصویری از این سیستم‌ها در شکل ۱-۱ دیده می‌شود.



شکل ۱-۱: تصویر سیستم‌های میکروفلویدیک Lab On Disk و Lab On Chip [۴]

۳-۱ مفهوم میکرواسکیل برای سیال

ویژگی‌های فیزیکی در میکروسیستم‌ها توسط قوانین مقیاس‌بندی^۲ که در آن تغییر مقادیر فیزیکی و هندسی، با مقیاس طول L در سیستم مورد نظر، با این شرط که دیگر کمیت‌ها مثل دما و فشار ثابت هستند، بیان می‌شوند [۷]. به عنوان مثال، یکی از قوانین مقیاس‌پذیر که در میکروسیستم‌ها به وفور استفاده می‌شود، نسبت نیروهای کشش سطحی و لزجت به نیروهای حجمی مانند گرانش و

^۱ Lab-on-a-chip

^۲ Scaling laws

اینرسی است. این قانون مقیاس را به صورت زیر می‌توان بیان نمود.

$$\frac{\text{surface force}}{\text{volume force}} \propto \frac{L^2}{L^3} \propto L^{-1} \xrightarrow{L \rightarrow 0} \infty \quad (1-1)$$

که نشان دهنده اهمیت نیروهای سطحی در میکروسیستم است [۲]. علاوه بر قوانین مقیاس‌بندی، اعداد بی‌بعد، مانند، موینگی^۱، رینولدز^۲ و پکلت^۳، امکان بررسی گسترده‌تری را در تحلیل تجهیزات میکروفلوئیدیک فراهم آورده و از معادلات اساسی حاکم بر رفتار سیال مشتق شده‌اند [۸]. به عنوان مثال، معادله ناویر-استوکس ساده شده، به صورت زیر است:

$$\rho \frac{d\bar{u}}{dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \bar{u} + \bar{f} \quad (2-1)$$

که در آن ρ چگالی سیال، u بردار سرعت، μ لزجت و f نیروهای حجمی را نشان می‌دهد [۸]. یکی از کمیت‌های بی‌بعد که به وفور در سیستم‌های میکروفلوئیدیک مورد استفاده قرار می‌گیرد و با بی‌بعدسازی معادله بدست می‌آید، عدد رینولدز است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\text{Re} = \frac{\rho u_0 L_0}{\mu} \quad (3-1)$$

که در آن u_0 سرعت جریان ورودی و L_0 طول مشخصه است. عدد رینولدز به مقایسه اهمیت نیروهای اینرسی و لزجت می‌پردازد. با توجه به ابعاد در این سیستم‌ها، عدد رینولدز در این تجهیزات بسیار کوچک است ($\text{Re} \ll 2000$). در این رژیم، نیروهای ویسکوز نیروهای غالب و قوانین جریان لایه‌ای حاکم است [۸-۹]. عدد پکلت، دیگر عدد بی‌بعد که از معادلات مشابه بدست می‌آید، نسبت تاثیرات همرفت و نفوذ را در کانال‌ها نشان می‌دهد. این عدد، مرتبه و شکل اختلاط سیالات را نشان

¹ Capillary

² Reynolds

³ Pecklet

داده و در طراحی ابزارهایی که جهت سنجش و جداسازی^۱ سیالات و اجزای آنها مورد استفاده قرار می‌گیرند، اهمیت می‌یابد.

۴-۱ سیستم‌های میکروفلوئیدیک بر پایه قطره

سیستم‌های میکروفلوئیدیک بر پایه قطره^۲ قادر به کوچک‌سازی و جداسازی سیالات مخلوط‌نشدنی به ابعاد پیکولیتتر تا میکرولیتر می‌باشند. قطره‌های تولید شده در میکروکانال‌های بسته یا باز شبیه به آنچه که در کانال‌های معمولی با جریان پیوسته اتفاق می‌افتد، حرکت می‌کنند. در واقع در سیستم‌های میکروفلوئیدیک، میکروکانال‌ها در بخش‌های جداگانه به صورت موازی بر روی تراشه یا به صورت شعاعی بر روی یک دیسک به گونه‌ای طراحی شده‌اند که قطره‌های تشکیل شده و یا محصول واکنش‌های شیمیایی مورد نظر بدون هیچگونه تداخلی قابل حصول باشند. این نقطه قوت، سیستم‌های میکروفلوئیدیک را تجهیزاتی با بازدهی بالا و مناسب برای تحقیقات می‌سازد که امکان انجام همزمان چند فرایند به صورت موازی در آن وجود دارد و این به معنی صرفه جویی در زمان و هزینه است. زیرا بسیاری از سیالات یا نمونه‌های مورد مطالعه در زمینه‌های یاد شده، از بافت یا بدن انسان یا دیگر موجودات زنده گرفته می‌شوند که دارای مقادیر بسیار کمی هستند و یا واکنش‌گرایی که در واکنش‌های شیمیایی مورد استفاده قرار می‌گیرند، بسیار گران‌قیمت هستند.

یکی از اولین سیستم‌های آزمایش بر پایه قطره، سیستم SFA^۳ یا CFA^۴ است. در سیستم‌های SFA، یک جریان سیال پیوسته به یک سیال منقطع توسط حباب‌های هوا تبدیل می‌شد [۱۰]. این پیشرفت تکنیکی، به طور عمده‌ای نمونه‌های سیال مورد استفاده و نرخ تولید آنها را افزایش می‌داد. اما تراکم پذیری هوا منجر به رفتار غیرقابل کنترل و تولید قطره‌های نابرابر و اختلال در روند تولید

¹ Sensing and separating

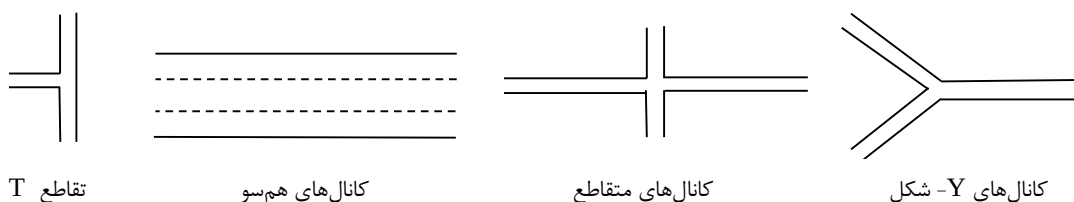
² Droplet – based - microfluidics

³ Segmented flow analysis

⁴ Continuous flow analysis

قطره (نمونه) می‌شد که بعدها برای رفع این مشکل از روغن به جای هوا جهت تولید قطره استفاده شد [۱۱-۱۲].

تولید قطره‌های با ابعاد پیکولیتتر (PL) یا نانولیتتر (nL) در سیستم‌های با کانال بسته^۱، به طور معمول به روش‌های انفعالی و توسط ایجاد ناپایداری و تغییرات غیرخطی در یک جریان دو فاز لایه‌ای انجام می‌شود [۱۳]. دو یا چند جریان از سیال‌های مخلوط‌نشده در ارتباط با یکدیگر قرار می‌گیرند به نحوی که نیروی برشی در سطح بین دو فاز به اندازه کافی بزرگ است و به این ترتیب نیروی برشی وارد شده از طرف فاز پیوسته باعث شکسته شدن دیگر فازها به قطره‌ها و قسمت‌های کوچک‌تر می‌گردد [۱۴]. همزمان، تراکم‌ناپذیری فازهای موجود در فرآیند، جداسازی و ایزوله ماندن قطره‌های تولید شده را تضمین می‌کند. هندسه‌های متعددی جهت تولید قطره یا حباب مورد استفاده قرار می‌گیرند مانند کانال‌های هم‌سو^۲، کانال‌های متقاطع^۳ و تقاطع T-شکل که در شکل ۱-۲ می‌توان نمونه‌های آن را مشاهده کرد.



شکل ۱-۲: هندسه‌های متداول در سیستم‌های میکروفلویدیک [۱۵]

اما متداول‌ترین و اصلی‌ترین هندسه‌ای که مورد استفاده قرار می‌گیرد، هندسه T-شکل است [۱۵]. معمولاً در هر کدام از این سیستم‌ها، فرآیند تولید قطره تحت تاثیر تغییرات عدد بی‌بعد موینگی (Ca) است که به صورت زیر تعریف می‌شود.

¹ Closed conduit system

² Co – flowing system

³ Cross – junction

$$Ca = \frac{\mu u}{\sigma} \quad (4-1)$$

که در آن μ و u به ترتیب لزجت و سرعت سیال پیوسته هستند و σ کشش سطحی در مرز مشترک بین دو فاز است [۱۶]. به طور معمول، در اعداد موینگی کوچک $Ca < 0.01$ تنش برشی، نیروی غالب است و هندسه جریان و خواص آن، مانند چگالی، می‌تواند فرآیند شکست فاز ثانویه (پراکنده) را تحت تاثیر قرار دهد. علاوه بر این، برخی تکنیک‌ها که تکنیک‌های انفجالی^۱ نامیده می‌شوند و برای آزمایش‌های تجربی، که در آن‌ها تعداد بسیار زیادی از نمونه مورد نیاز است، مانند فرآیند PCR^۲ یا تکنیک‌های کشت سلولی، در افزایش تعداد قطره‌های تولید شده مطلوب هستند [۱۷-۱۸]. ضمناً، ترکیب‌شدن قطره‌های تولید شده که در مجاورت یکدیگر هستند می‌توانند توسط تنظیم جریان بالادست کنترل گردد [۱۹]. این مسئله خصوصاً برای فرآیندهای شیمیایی تحلیلی مثل آزمایش‌های سنتزی [۱۹-۲۰]، آزمایش‌های مربوط به تولید دارو [۲۰] و آزمایش‌های کریستالی کردن پروتئین‌ها بسیار مهم است زیرا این قطره‌ها باید برای تست‌های متعددی از حلال و محلول جهت بهینه‌سازی نتیجه فرآیند مورد استفاده قرار گیرند [۲۰].

۵-۱ لزوم استفاده از سیستم‌های میکروفلوئیدیک

سیستم‌های میکروفلوئیدیک به دلیل توانایی انجام آزمایش‌ها و واکنش‌های مورد نیاز در مقدار کم مواد واکنش‌گر و نمونه‌های مورد نیاز و انجام سریع فرآیند، قابلیت جایگزینی در مقیاس ماکرو را دارند. علاوه بر این، مقیاسی که این فرآیندها در آن انجام می‌شوند، بسیار مرتبط با فرآیندهای مربوط به زیست‌شناسی مولکولی، داروسازی، تشخیص‌های سلولی در زمینه پزشکی هستند [۲۱-۲۶]. پیشرفت‌های گسترده در توسعه و بکارگیری سیستم‌های میکروفلوئیدیک برای محدوده وسیعی از تشخیص و

¹ passive

² Polymer chain Reaction

درمان بیماری‌ها، گواه این مطلب است [۲۲]. گرایش‌های کلی در این زمینه، بیشتر به سوی توسعه سیستم‌های مجتمع میکرو ۱ است که در آن امکان انجام چندین فرآیند مانند تهیه نمونه مورد آزمایش، آماده‌سازی، انتقال، واکنش شیمیایی و اکتشاف در یک یا چند بستر ۲، که به صورت موازی با یکدیگر در ارتباط هستند، قابل اجرا است. این فناوری در بسیاری از کشورهای جهان سوم که از ضعف اقتصادی رنج می‌برند، در پیشگیری، تشخیص و درمان بسیاری از بیماری‌ها، راهگشا بوده است [۲۲]. اگر چه ابعاد کانال‌ها در این سیستم‌ها در ۱ تا ۱۰۰۰ میکرومتر متغیر است، این سیستم‌ها قادر به تولید مواد در ابعاد بسیار کوچک‌تر یعنی نانومتر هستند. این ویژگی کاربرد این سیستم‌ها را توسعه می‌دهد و به معنی سرعت بالاتر در پیشرفت در تحقیقات است. چنین ابعادی امکان انجام فرآیندهای مرتبط با DNA و مطالعه آن‌ها را فراهم می‌کند [۲۳]. این طور به نظر می‌رسد که با این کاهش اندازه و سایز ابعاد، موضوع پیوستگی در مورد معادله ناویر-استوکس که حاکم بر رفتار سیال است به چالش کشیده شود. اما مطالعات نشان داد که حتی در ابعاد کم‌تر از یک دهم نانومتر در شرایط نرمال، پیوستگی هیدرودینامیک برای بسیاری از مایعات همچنان برقرار است. از این رو، معادلات ناویر - استوکس به دقت و قوت خود باقی خواهند ماند [۲۴]. یکی از ویژگی‌های منحصر به فرد این تجهیزات در مسائل نانوسیال است که در آن امکان بررسی اثرات سطح و کشش سطحی وجود دارد، مسئله‌ای که امکان بررسی آن در مسائل ابعاد میکرو به وضوح امکان‌پذیر نیست.

با وجود پیشرفت‌های عمده در این زمینه نوظهور، همچنان محدودیت‌هایی در تولید گسترده این نوآوری حاکم است که معطوف به مسائل اقتصادی آن می‌گردد. روش‌های جدید حکاکی (PDMS) و پیشرفت‌ها در زمینه مواد، به طور عمده‌ای هزینه‌های تولید مواد سیستم‌های میکروفلوئیدیک را کاهش داده است. اما همچنان لزوم وجود فناوری‌های الکترونیکی ویژه جهت طراحی میکروکانال‌ها با طرح‌های مختلف برای هدف‌های خاص، هزینه‌های تولید این ابزارها را بالا نگه می‌دارد [۲۵]. علاوه بر

¹ Micro – total analytical sys

² platform

این، استفاده از چند ماده مختلف در ساخت این ابزارها (مواد به کار رفته در لایه‌های مختلف)، واکنش‌گرها، محل ذخیره محصولات فرآیند، بسته‌بندی و آماده‌سازی نهایی ابزار، اتصال به کامپیوترها، کنترل، نظارت^۱ بر فرآیندها انجام شده در میکروکانال‌ها، همه بر هزینه‌های انجام فرآیند می‌افزاید. با این وجود، پتانسیل چشم‌گیر این سیستم‌ها در انجام فرآیند به صورت اتوماتیک و محدوده وسیع استفاده از این تجهیزات در زمینه‌های مختلف، تولید و بهره‌گیری از این تجهیزات را نه تنها محدود نکرده بلکه گسترش داده و از این میان، سیستم‌های میکروفلوئیدیک بر پایه قطره بیشتر از دیگر سیستم‌ها مورد توجه پژوهش‌گران قرار گرفته است.

۱-۶ برخی فرآیندهای مهم در سیستم‌های میکروفلوئیدیک

یک سیستم میکروفلوئیدیک، بستر^۲ یا سیستمی است که در آن انجام مجموعه‌ای از واکنش‌ها توسط فناوری‌های نوین فراهم می‌شود و برای هر کدام از بخش‌های طراحی شده، عملکرد خاصی در نظر گرفته می‌شود که شامل فراهم کردن و ذخیره واکنش‌گرها و نمونه‌های مورد مطالعه، انتقال مایعات، کنترل سیالات^۳، تعویض جهت چرخش^۴، اندازه‌گیری^۵، تقسیم سیال^۶، اختلاط^۷ و تشخیص^۸ می‌باشد. این سیستم مجتمع، امکان انجام فرآیند را به صورت زنجیره‌ای فراهم می‌کند. به این ترتیب، فرآیندهایی چون جداسازی پلاسما خون، لیزینگ سلولی^۹، تصفیه اسیدنوکلئیک، ازدیاد اسیدنوکلئیک، ایمن‌زایی^{۱۰} و شستشو را همزمان با هم می‌توان انجام داد. جهت روشن شدن و شفافیت

¹ monitoring

² platform

³ valving

⁴ switching

⁵ metering

⁶ aliquoting

⁷ mixing

⁸ detection

⁹ Cell lysis

¹⁰ Immune capture

بیشتر، عملکرد چند نمونه از آن توضیح داده می‌شود.

۱-۶-۱ ذخیره واکنش‌گر و نمونه

به طور کلی، مواد واکنش‌گر و نمونه‌های مورد مطالعه، در تراشه یا دیسک، قبل یا هنگام انجام فرآیند، جهت سهولت، ذخیره می‌شوند. اما در برخی تحلیل‌ها نیاز به تزریق نمونه در چند مرحله وجود دارد. معمولاً تزریق واکنش‌گرها هم توسط پیپت و هم توسط ربات‌های پیپت انجام می‌پذیرد. هر دو روش نیاز به ارتباط آزاد با محیط دارند. در حالی که کارتریج در حال چرخش یا حرکت نباشد [۲۶-۲۸]. اما مسئله عدم حرکت را می‌توان توسط تکنیک‌های موجود، که ملزوماتی را به کارتریج اضافه می‌کنند، حل نمود [۲۹-۳۱].

۲-۶-۱ انتقال مایعات

یکی از مسائل مهم در سیستم‌های میکروفلوئیدیک، انتقال مایعات و سیالات مورد مطالعه از مخازن ذخیره^۱ به کانال‌هاست. به طور معمول، از نیروی گریز از مرکز یا کریولیس، که توسط یک سرعت چرخشی معین ایجاد می‌گردند، بهره برده می‌شود که سیال را در جهت شعاعی یا عمود بر آن، درون میکروکانال‌ها هدایت می‌کند. چون مخازن حاوی مایعات باید با فاصله از مرکز دوران دیسک، جهت ایجاد نیروی گریز از مرکز، تعبیه شوند، این مسئله امکان یکپارچه‌سازی چند فرآیند را که باید به صورت همزمان و یا موازی انجام شود محدود می‌کند. زیرا شعاع دیسک‌هایی که مورد استفاده قرار می‌گیرند، جهت جلوگیری از لرزش‌های احتمالی و همچنین محدودیت‌های ساخت و هزینه، نمی‌تواند از یک حد معینی بزرگ‌تر باشد. اما در سالهای اخیر، تمهیداتی جهت کاهش این محدودیت‌ها و بهره‌برداری هر چه بیشتر از این سیستم‌ها صورت گرفته است [۳۲-۳۴]. به عنوان مثال، همزمان با اعمال نیروی گریز از مرکز، مخازنی از یک گاز که با حرارت دچار انبساط قابل توجه می‌شود و یا یک

¹ chamber

گاز ذخیره شده با فشار بالا برای کمک به رانش سیال و کاهش فاصله مخزن ذخیره مایع از مرکز دیسک استفاده می‌شود [۳۵] و در برخی از موارد با تکنیک‌های مربوط به چرخش و با تغییر اندازه آن می‌توان نیروی رانش سیال را درون میکروکانال‌ها تقویت نمود و از این رو کارآمدی این سیستم‌ها را جهت یکپارچه‌سازی چند فرآیند ارتقا داد [۳۶-۴۰].

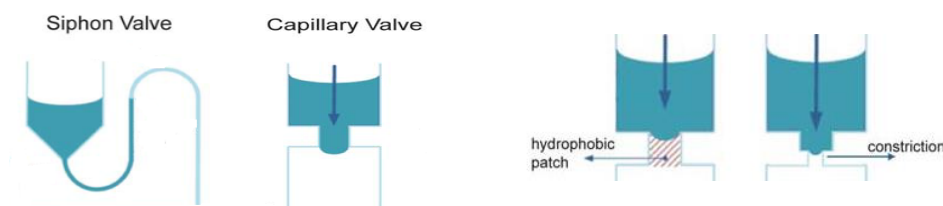
۱-۶-۳ کنترل سیال از طریق دریچه یا شیر

دریچه‌سازی و کنترل سیال از طریق دریچه، یکی دیگر از موارد مهم جهت کنترل سیال و آزادسازی آن درون میکروکانال‌ها در سیستم‌های میکروفلویدیک است. همچنین، از دیگر وظایف آن می‌توان به عبور سریع سیال در یک نقطه مشخص مکانی-زمانی، سازگاری با محدوده وسیعی از سیالات با ویژگی‌های فیزیکی-شیمیایی مختلف، تاخیر در آزادسازی سیال و برخی فرآیندهای حجم مرده کم^۱ اشاره کرد [۴۱]. به طور کلی دریچه‌ها به دو دسته تقسیم می‌شوند: دریچه‌های فعال^۲ و دریچه‌های منفعل^۳. دریچه‌های نوع دوم به نوعی از دریچه‌ها اطلاق می‌گردد که در آن از اصول آزادسازی سیال بر پایه نیروی گریز از مرکز استفاده می‌شود [۴۱]. اما دریچه‌های فعال دریچه‌هایی هستند که در آن از روش‌های فیزیکی مانند برخی وکس‌ها یا موم‌ها جهت جلوگیری از جاری شدن سیال مورد نظر استفاده می‌شود. سپس، در لحظه مورد نظر با حرارت دادن وکس، موم آب شده و سیال وارد کانال می‌گردد. واضح است که دریچه‌های منفعل بر دریچه‌های فعال ارجحیت دارند زیرا به یک ماده یا وسیله‌ی اضافی، که باعث آلودگی سیال مورد نظر هم می‌شود، برای انجام فرآیند نیازی ندارند [۴۲]. شماری از طراحی‌ها و کاربردهای گسترده دریچه‌ها در پژوهش‌های تجربی، که در شکل ۱-۳ نمونه‌ای از شیرهای منفعل آن دیده می‌شود، آورده شده است [۴۳-۶۱].

¹ Low dead volume

² active

³ passive



شکل ۱-۳: دو نمونه از شیرهای مورد استفاده در سیستم‌های میکروفلوئیدیک [۴۱]

۴-۶-۱ اندازه‌گیری و تقسیم به دو قسمت مساوی (الیکوتینگ)

بیشتر فرآیندهای انجام گرفته در سیستم‌های میکروفلوئیدیک نیاز به مقادیر دقیق از سیال دارند تا بتوانند نتایجی درست و با دقت بالا ارائه دهند. در نتیجه مقدار سیالات شرکت کننده در فرایند باید به دقت اندازه‌گیری^۱ شوند. تقسیم سیال به دو یا چند قسمت الیکوتینگ^۲ نامیده می‌شود، که سیال مورد نظر را به اندازه‌های مساوی از طریق زیرشاخه‌های معین تقسیم‌بندی می‌کند [۶۲]. برخی از سیستم‌های میکروفلوئیدیک که جهت اندازه‌گیری و تقسیم سیال مورد استفاده قرار می‌گیرند در جدول ۱-۱ معرفی شده‌اند.

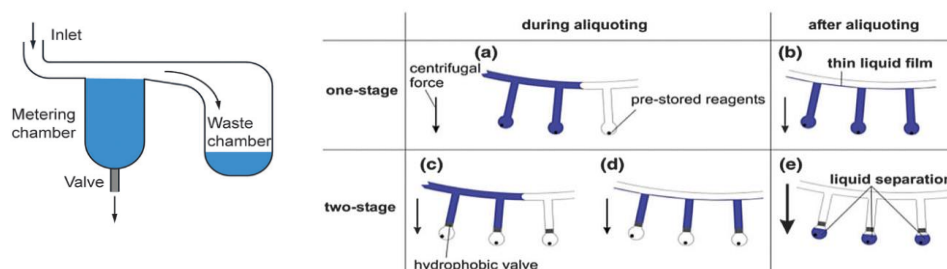
جدول ۱-۱: برخی سیستم‌های میکروفلوئیدیک جهت اندازه‌گیری [۶۲]

Integrated valve type	Aliquoted volume	CV(%)	Number of parallel aliquot
Hydrophobic valve	200 nL	0.75	112
Hydrophobic valve	20 nL	1.90	1
Centrifugo pneumatic valve	6-10 nL	2.2-3.6	8 or 16
Capillary siphone	500 nL	< 5	1
Capillary valve	40 nL	1-5.5	120
Capillary valve	31 nL	2.80	24
Ferrowax based microvalves	100 μ L	Not reported	5

^۱ metering

^۲ aliquoting

ساده‌ترین حالتی که می‌توان برای آن در نظر گرفت شامل یک کانال متصل به منبع ورودی، زیر شاخه‌های اندازه‌گیری با حجم مشخص طراحی شده و یک مخزن جهت ذخیره سیال مازاد است (شکل ۴-۱).



شکل ۴-۱: نمونه‌ای از سیستم‌های میکروفلوئیدیک برای اندازه‌گیری [۶۲]

اندازه‌گیری می‌تواند با دريچه‌سازی در این سیستم‌ها ترکیب شود که با تعبیه این دریچه‌ها در انتهای کانال اندازه‌گیری جهت انجام دیگر فرآیندها امکان‌پذیر است. این دریچه‌ها شامل دریچه‌های آب‌گریز [۶۲-۶۳]، دریچه‌های سانتریفیوژ - پنوماتیک [۶۴] و دریچه‌های موئین سیفونی [۶۵] می‌باشد. فرآیند اندازه‌گیری سیالات اساساً متأثر از دقت ابزارهای ساخت، حفره‌ها و کانال‌های طراحی شده بر روی دیسک [۶۶] و تأثیرات سطح مایع ناشی از نیروی موئینگی است [۶۷]. استفاده از نیروهای موئینگی همگام با نیروهای گریز از مرکز، منتهی به اندازه‌گیری با دقت بسیار بالا در ابعاد نانولیت‌ر شوند [۶۸].

۵-۶-۱ اختلاط

هدف از فرآیند اختلاط در این سیستم‌ها رسیدن به توزیع یکنواخت و همگن مولکول‌های نمونه و واکنش‌گر است. بطوری که واکنش شیمیایی مورد نظر با سرعت بالاتر و کیفیت بهتری انجام پذیرد. فرآیندهای اختلاط معمولی در سیستم‌های ماکروسکوپی معمولاً توسط فرآیندهایی چون تکان دادن،

به هم‌زدن یا چرخاندن انجام می‌شود. این فرآیند در سیستم‌های LOD بسیار مشکل است زیرا کارتریج به شافت یک موتور متصل می‌شود که با چرخش این شافت نیروی گریز از مرکز لازم جهت رانش سیال تامین می‌گردد. از آنجا که اختلاط یکی از بخش‌های مهم، لازم و ضروری در بسیاری از فرآیندها مانند آزمایش‌های بیوشیمی است، روش‌های متعددی برای انجام اختلاط در این سیستم‌ها پیشنهاد شده است. به عنوان مثال، به جای تکان و جابه‌جایی سیال در سیستم‌های ماکروسکوپی، با تغییر پیوسته سرعت چرخشی در فاز اصلی در میکروکانال‌ها می‌توان اختلاط دو سیال با چگالی و لزجت مختلف را تحت تاثیر قرار داد. ممنتوم زاویه‌ای که توسط کاهش یا افزایش سرعت زاویه‌ای و از طریق نیروی اوایلر ایجاد می‌شود منجر به اختلاط موثرتری در سیالات مورد آزمایش می‌گردد. نتیجه این تئوری را می‌توان توسط رنگ دانه‌هایی که در سیال ریخته می‌شود مورد مطالعه قرارداد و کیفیت اختلاط و زمان لازم برای آن را بررسی نمود. نتایج نشان می‌دهد که با این روش زمان لازم برای اختلاط دو سیال برای حالت معمول ۷ دقیقه بود در حالی که با اعمال این تکنیک، زمان مورد نظر برای اختلاط همان دو سیال به ۳ دقیقه کاهش یافت [۶۹-۷۰]. که این تفاوت در سرعت بخشیدن به انجام واکنش‌ها بسیار چشم‌گیر بود. علاوه بر این، می‌توان از مهره‌های بسیار ریز مغناطیسی و خاصیت آن‌ها در بالا بردن هر چه با کیفیت‌تر مخلوط حاصل استفاده نمود. این تکنیک عمل اختلاط را به ۵/۰ ثانیه کاهش می‌دهد [۶۹].

۶-۶-۱ جداسازی

جداسازی ذرات معلق در مایعات از دیگر فرآیندهای لازم و ضروری در آزمایشات شیمیایی و زیست‌شیمی است. ماده مورد نظر جهت جداسازی می‌تواند در اندازه چند مولکول، ماکرو مولکول مانند نوکلئیک اسیدها یا پروتئین‌ها و یا المان‌های بزرگ‌تر مانند سلول‌ها یا ذرات جامد معلق در یک سیال باشد. معمولاً تکنیک‌هایی که جهت جداسازی این ذرات مورد استفاده قرار می‌گیرد، بر پایه تفاوت در خواص فیزیکی یا شیمیایی آن‌هاست. بخش بزرگی از تکنیک‌های مربوط به جداسازی

فیزیکی که در سیستم‌های میکروفلوئیدیک گریز از مرکز (LOD) صورت می‌گیرد، از طریق دو فرآیند فیلترینگ و رسوب انجام می‌شود [۵۷]. فیلترینگ روشی است که معمولاً برای جدایی ذرات جامد معلق و یا ذرات معلق که امکان چسبیدن آن‌ها به یکدیگر و انسداد مجرا وجود دارد استفاده می‌شود. اما در روش رسوب از اختلاف چگالی دو سیال و تقابل آن با نیروی گریز از مرکز جهت جدایش ذرات معلق بهره برده می‌شود [۵۷، ۶۹، ۷۱].

۷-۶-۱ دستکاری قطره

در حالی که سیستم‌های میکروفلوئیدیک بر پایه قطره^۱ از بخش‌های بسیار فعال و پرکاربرد در میکروسیستم‌ها می‌باشند، تاکنون مطالعات کمی در مورد بررسی و دستکاری قطره‌های^۲ تولید شده در سیستم‌های گریز از مرکز صورت گرفته است [۷۲-۷۳]. در این سیستم‌ها، معمولاً حباب یا قطره تولید شده و از خاصیت غیر قابل حل بودن سیالات و یا عدم واکنش آن‌ها با یکدیگر استفاده می‌شود. یکی از دلایلی که از این سیستم‌ها جهت تولید قطره یا حباب استفاده می‌شود این است که می‌توان از مواد موجود حداکثر استفاده را کرد. به این معنی که حجم مرده سیالات مورد استفاده در این سیستم‌ها بسیار کم است.

به عنوان مثال قطره‌های چیتوسان - آلجینیت^۳ توسط یک نازل تعبیه شده در یک مجرا حاوی روغن تولید شد [۷۳، ۷۴]. سیالی که از نازل بیرون می‌آید در تماس با روغن قرار می‌گیرد و به صورت یک قطره جامد غیر قابل حل در سیال زمینه درمی‌آید. این تکنیک، امکان استفاده حداکثر از مواد مورد استفاده را می‌داد. علاوه بر این، مزیت این روش تولید قطره علاوه بر سرعت بالای آن، اندازه یک‌دست قطره‌های تولید شده بود [۷۴]. بعدها از تکنیکی که از گذاشتن این نازل در میکروکانال اصلی برای تولید میکروقطره‌ها استفاده شد، برای تولید دیگر قطره‌ها از جنس‌های دیگر نیز بهره برده

¹ Droplet – based microfluidic

² Droplet handling

³ Chitosan – alginate

شد [۷۵]. در کنار فرایند تولید قطره از طریق سیستم‌های گریز از مرکز، امکان اتوماسیون و موازی‌سازی این فرایند با دیگر فرآیندهای مربوط به آن، مانند آزمایش‌های خالص‌سازی و تکثیر نوکلئیک اسیدها، که از سری آزمایشات مربوط به زنجیره‌ای مربوط به سیستم ایمنی بدن است، وجود دارد. که مزایای استفاده از این سیستم‌های بدون پالس مبتنی بر گرانش را تنها به تولید میکروقطره‌ها با حداقل حجم مرده از مواد اولیه محدود نمی‌کند [۷۶].

۷-۱ عملکرد نیروها در سیستم‌های میکروفلوئیدیک

به منظور بدست آوردن درک درستی از مکانیزم عملکرد نیروها در سیستم‌های میکروفلوئیدیک گریز از مرکز (LOD)، ابتدا لازم است نیروهای موثر در این سیستم‌ها معرفی گردد. به طور کلی، نیروها در این سیستم‌ها به دو دسته کلی نیروهای شبه‌پتانسیل^۱ و نیروهای غیرشبه‌پتانسیل^۲ تقسیم می‌شوند. نیروهای شبه‌پتانسیل به آن دسته از نیروهایی اطلاق می‌گردد که در اثر شتاب ناشی از نیروی گریز از مرکز بر سیال اثر می‌کنند. این نیروها شامل نیروی گریز از مرکز (F_c)، نیروی کریولیس (F_{co}) و نیروی اوپلر (F_{Eo}) هستند که هر سه تابعی از شتاب گریز از مرکز می‌باشند و به صورت زیر معرفی می‌گردند.

$$F_{Eu} = -m \frac{d\omega}{dt} \times r \quad (۵-۱)$$

$$F_{co} = -2m\omega \times \frac{dr}{dt} \quad (۶-۱)$$

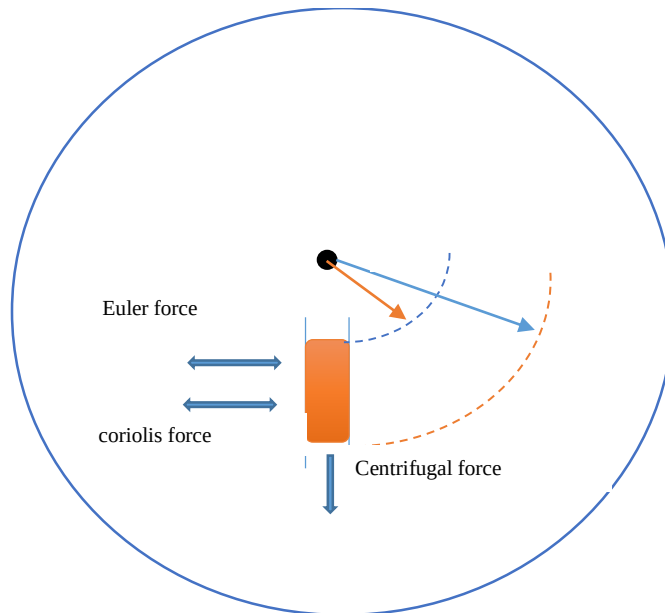
$$F_c = -m\omega \times (\omega \times r) \quad (۷-۱)$$

که در آن‌ها m نمایانگر جرم، ω فرکانس چرخشی و r فاصله از مرکز دیسک می‌باشد. جهت

^۱ Pseudo Forces

^۲ Non – pseudo Forces

عملکرد این نیروها در شکل ۵-۱ به نمایش در آمده است [۷۷-۷۹]. در سیستم‌های میکروفلوئیدیک گریز از مرکز، جهت ذخیره سیالات مورد مطالعه منابعی به شکل کروی توسط تجهیزات مربوطه تراشیده می‌شود و سیالات از طریق پیپت یا ربات‌های پیپت در این مخازن تزریق می‌گردند.



شکل ۵-۱: شمایی از یک سیستم آزمایشگاه بر روی دیسک (LOD) و نیروهای وارد بر سیال درون میکروکانال [۷۶]

مکانیزم عملکرد این نیروها به این صورت است که هنگامی که نیروی گریز از مرکز از آستانه نیروی مقاومت ناشی از چسبندگی سیال و دیواره عبور می‌کند، در واقع این نیرو بر نیروی چسبندگی سیال و دیواره غلبه می‌کند و باعث جاری شدن سیال اصلی یا پیوسته در کانال اصلی می‌گردد. در این هنگام، نیروی کریولیس، که یک نیروی متقاطع که عمود بر فاز پیوسته در کانال اصلی است، نیروی محرکه لازم جهت حرکت فاز پیوسته ایجاد می‌کند. در اثر این نیرو، فاز ثانویه وارد کانال اصلی شده و حجمی از مقطع این کانال را پر می‌کند و لایه‌ای از فاز ثانویه به تدریج در کانال اصلی تشکیل می‌گردد. تقابل این دو نیرو در کانال اصلی منجر به تشکیل قطره یا لایه نازکی از فاز پیوسته در کانال اصلی می‌گردد. در فصل نهایی توضیح مفصل‌تری از فرایند تشکیل قطره آورده شده است.

۸-۱ خلاصه برخی پژوهش‌های انجام شده

سیستم‌های میکروفلوئیدیک بر پایه صفحه^۱ یا آزمایشگاه بر روی صفحه^۲، به عنوان یکی از تحقیقات رو به رشد از زمان پیدایش آن در اوایل سال‌های ۲۰۰۰، بستر مناسبی را برای دستکاری و تحلیل عملکرد سیال برای محدوده وسیعی از کاربردها شامل تشخیص بسیاری از بیماری‌ها یا دستکاری‌های ژنتیکی، بررسی‌های زیست محیطی و حتی کاربردهای وسیعی در زمینه آزمایش‌های مواد غذایی فراهم کرد. به طوریکه تحقیقات متعددی بر ساخت این سیستم‌های مجتمع کم‌هزینه، تکنیک‌های ساخت و توسعه کاربردهای آن‌ها پرداخته‌اند. در پژوهش لی و همکاران [۸۰]، تکنیک‌های یاد شده گردآوری شده است. در پژوهش چن و همکاران [۸۱]، آزمایش‌های تجربی و تحلیل‌های مرتبط بر روی شیرهای موئین در سیستم‌های میکروفلوئیدیک گریز از مرکز انجام شده است. آن‌ها در پژوهش خود به تحلیل فشار و نیروی لازم برای غلبه بر نیروی موئین و جاری شدن سیال پرداختند.

از میان مدل‌های مختلف میکروتراشه‌ها که از نیروی گریز از مرکز برای رانش سیال استفاده می‌کنند، سیستمی که برای آزمایش‌های آنزیمی مرتبط با ایمنی برای تشخیص و تعیین خاصیت عوامل بیولوژیکی مورد استفاده قرار می‌گیرند، ملقب به الیسا^۳ هستند و کاربردهای گسترده‌ای از جمله آزمایشات خون دارند. یکی از مسائل پیش رو در این سیستم‌ها، تقسیم مساوی جریان کانال اصلی در میکروشاخه‌های جانبی می‌باشد. لین [۸۲]، در پژوهشی که انجام داد با اعمال تغییر در هندسه و ساختار سیستم‌های الیسا توانست راه‌حل‌های نوینی برای تقسیم مساوی جریان اصلی پیشنهاد کند. او از طراحی یک بافر با ساختار دایروی و نیم دایروی در مسیر کانال اصلی صحبت کرد و با مجموعه‌ای از آزمایش‌های تجربی نشان داد که چگونه سیال در ناحیه دایره یا نیم دایره به تقسیم جریان به طور مساوی در شاخه‌های جانبی کمک می‌کند. شیرها از موضوع‌های مطرح در سیستم‌های آزمایشگاه روی

¹ Paper - based

² Lab on paper

³ ELISA

دیسک^۱ و به طور کلی سیستم‌های میکروفلوئیدیک هستند. کای و همکاران [۸۳]، برگونه‌ای از شیرها تحقیق نمودند که از نوعی پین برای کنترل جریان اصلی استفاده می‌کرد. در دو دهه اخیر، پیشرفت‌های قابل توجهی نیز در زمینه سیستم‌های میکروفلوئیدیک مرتبط با آزمایش‌های زنجیره‌ای پلیمری^۲ (PCR) صورت گرفته است. در این نوع از آزمایش، سیستم‌های میکروفلوئیدیک که بر پایه قطره هستند از اهمیت بسیار بالایی برخوردارند. زیرا می‌توانند از آلودگی سیال مورد نظر و عوامل باز دارنده آزمایش PCR جلوگیری کنند. از طرفی برای تحلیل و بررسی سیستم‌های تک‌سلولی و تک‌مولکولی مناسب هستند. ژانگ و جیانگ [۸۴]، مروری بر دستاوردها و توسعه‌های اخیر بر سیستم‌های PCR انجام دادند. علاوه بر این، راه‌حل‌های نوینی را جهت کنترل جریان‌های روی تراشه و همچنین ابزارهای مفید ساخت و طراحی آن پیشنهاد کردند. از این ابزارهای پیشرفته و مناسب برای تولید دیسک یا تراشه‌هایی که برای انجام آزمایش‌های ویژه‌ای مانند تست‌های رنگی^۳ که نیاز به تراشیدن کانال‌های اسپیرال و مارپیچ دارند نیز استفاده می‌شود [۸۵]. بررسی برخی پدیده‌ها مانند چسبندگی لوکوسیت^۴ با ابزارهای معمول بسیار مشکل است. سیستم‌های میکروفلوئیدیک، که از تکنیک‌های میکرو و نانو جهت ساخت این مجموعه‌ها بهره می‌برند، این امکان را فراهم ساخته‌اند تا فرآیندهای پیچیده‌ای مانند چرخش لوکوسیت‌های خون و چسبندگی آن‌ها به دیواره، جداسازی سلولی و واکنش آن‌ها با واکنش‌گرها با جزئیات و دقت بالاتری مورد بررسی قرار گیرد [۸۶]. نه تنها جریان‌های مایع-مایع بلکه جریان گاز-مایع، نیز توسط این ابزارها مورد تحلیل قرار گرفته‌اند [۸۷-۹۳]. در تحقیق فو و همکاران [۹۴]، یک سیستم میکروفلوئیدیک انبساطی با زاویه ۶۰ درجه، برای بررسی مکانیزم به هم پیوستن آن‌ها، مکان و میدان سرعت، به عنوان عوامل تاثیرگذار مورد بحث و بررسی قرار گرفته است. این سیستم‌ها، همچنین امکان بررسی سیالات ناخالص مطرح در صنعت نفت

¹ Lab – on - disk

² Polymer Chain Reaction

³ Staining assays

⁴ Leucocytes

جهت خالص سازی آن، به هم پیوستن قطره های نفت معلق در آب، محاسبه زمان لازم جهت انجام این فرآیند و کمیت های تاثیرگذار را فراهم آورده است [۹۵]. شیرهای موئین، همواره برای کنترل جریان در سیستم های میکروفلویدیک LOD و LOC مورد استفاده قرار می گیرند که همواره به صورت تغییر هندسه انبساطی در میکروکانال اعمال می گردند. تحقیقات انجام شده نشان می دهد که آب دوست یا آب گریز سطح نیز می تواند بر عملکرد آن تاثیرگذار باشد. [۹۶-۹۷]

قطره های ویسکوالاستیک که در زمره سیالات غیرنیوتنی قرار می گیرند، عملکردی شبیه داروها و کپسول ها دارند [۹۸-۱۰۰]. چگونگی تولید و فناوری تولید آن ها، چسبندگی و دنباله دار بودن قطره های ویسکوالاستیک در این فرآیند و کنترل آن ها در پژوهشی از هاروی و همکاران [۱۰۱] مورد بررسی قرار گرفته است. این ابزارها همچنین در بررسی عمیق تر جداسازی پلاکت ها، تکثیر DNA [۱۰۲-۱۰۷] و یا در بررسی های سلولی، تکثیر آن ها و عملکرد آن ها در واکنش با واکنش گرهای مورد استفاده قرار گرفته اند [۱۰۸-۱۱۵]. مطالعات بسیاری در زمینه تولید قطره با هندسه های متفاوتی از T- شکل یا کانال های جریان متقاطع انجام شده است [۱۱۶-۱۲۷]. علاوه بر تحقیقات تجربی، همواره شبیه سازی عددی مورد توجه بسیاری از محققان و علاقه مندان جریان های چند فاز بوده است. روش های متعددی در این زمینه پیشنهاد شده است که پروسپریتی و تریگسوا [۱۲۸-] به جمع آوری برخی از مرسوم ترین آن ها در قالب یک کتاب پرداختند اما از آنجا که روش مورد استفاده در پژوهش حاضر روش بولتزمن شبکه ای است، به برخی از پژوهش های عددی انجام شده دوفاز در این چهارچوب به طور خلاصه اشاره می شود.

از آنجا که خیس شونده گی سطوح جامد نقش مهمی را در جریان های چند فاز بازی می کند، کمالی و همکاران به بررسی این موضوع در جریان دوفاز پرداخته اند [۱۲۹-۱۳۰]. گو و همکاران [۱۳۱] به بررسی و مقایسه دو روش LBE^۱ و GKS^۲ در شبیه سازی دوبعدی جریان های دوبعدی پرداخته و

^۱ Lattice Boltzmann Equations

^۲ Gas – kinetic - scheme

دریافتند که اگرچه طبیعت هر دو روش ریشه در تئوری جنبشی گاز دارد، عملکرد عددی آن‌ها با یکدیگر متفاوت است و ریشه‌های این تفاوت را بررسی کردند. دریافت‌های آنها نشان می‌دهد که LEB یک روش تفاضل محدود، مناسب برای جریان‌های کاملاً تراکم‌پذیر مناسب است، در حالی که GKS یک روش حجم محدود می‌باشد که نتایج بهتری برای جریان‌های تراکم ناپذیر ارائه می‌دهد. آن‌ها جریان گذرنده از اطراف یک مانع مربعی دوبعدی را که در یک کانال قرار گرفته بود در اعداد رینولدز $300 - 10$ بررسی کردند. نتایج نشان می‌دهد که هر دو روش از لحاظ کمیت نتایج مشابهی را در شبیه‌سازی جریان‌های آرام ارائه می‌دهند به این شرط که تعداد مش‌های استفاده شده برای شبیه‌سازی، به اندازه کافی باشد. همچنین، برای مسائل دوبعدی، روش LBE به ترتیب برای مسائل پایا و ناپایا تقریباً 10 و 3 برابر سریع‌تر از روش GKS است. ژانگ و همکاران [۱۳۲]، مدلی را برای شبیه‌سازی جریان حرارتی بخار-مایع ارائه کردند که کاملاً رویکرد ترمودینامیکی دارد و در مقیاس ماکروسکوپی نیز کاملاً پایاست. در این پژوهش فرآیند جوشش بخار-مایع، تشکیل حباب‌ها و به هم پیوستن آن‌ها برای اولین بار شبیه‌سازی گردید. یکی از مسائلی که روش بولتزمن همواره با آن روبه‌رو بوده، توانایی روش در مدل‌سازی نسبت چگالی‌های بالا است. از این رو تلاش محققان همیشه به سمت ارتقا توانایی این روش برای شبیه‌سازی جریان‌های گاز-مایع با نسبت چگالی تا 1000 نیز بوده است. یکی از پژوهش‌های صورت گرفته توسط گوک‌هالتون و همکاران [۱۳۳] در سال 2006 ارائه شد که قادر به شبیه‌سازی تا نسبت چگالی 1000 بود. در روش آن‌ها اگرچه نیاز به حل معادله پواسون برای فشار و معادلات پیچیده برای محاسبه مشتقات نبود اما رویکرد مشخصی برای مدل‌سازی سطح بین دو فاز نداشت. از این رو استفاده از آن در شبیه‌سازی حرارتی تغییر فاز سوالات زیادی پیش رو داشت و همچنین مدل عددی استفاده شده در آن D_2Q_5 بود. در حالی که تعداد معادلات ارائه شده در روش لی [۱۳۴] در سال 2005 ، برای شبیه‌سازی‌های با نسبت چگالی و لزجت بالا، کم‌تر بوده و رویکرد مشخص و دقیق‌تری در مدل‌سازی سطح بین دو فاز داشت. از آنجا که در شبیه‌سازی عددی در نسبت چگالی و کشش سطحی بالا، مدل‌سازی سطح بین دو فاز همواره از اهمیت بالایی برخوردار بوده، تلاش‌های

متعددی نیز صورت گرفته است تا مدل‌های بولتزمن موجود، به عنوان مثال معادله کان-هیلارد که در روش لی نیز از آن استفاده می‌شود، را تکامل ببخشد. دی پالما و همکاران [۱۳۵] از روش زمینه فازی^۱ استفاده کردند تا عملکرد بولتزمن شبکه‌ای در شبیه‌سازی سطح بین دو سیال مخلوط نشدنی را بهبود بخشند. مزیت اصلی روش آن‌ها این است که سطح بین دو فاز را به عنوان بخشی از دینامیک حجمی حل و به عنوان یک عبارت چشمه / چاه در معادله برخورد بولتزمن در نظر می‌گیرد و در نتیجه اعمال مدل و عملکرد آن مستقل از هندسه و تغییر شکل سطح بین دو سیال است. علاوه بر سطح بین دو فاز، شرایط مرزی نیز از اهمیت بالایی در شبیه‌سازی عددی برخوردار است زیرا نفوذ نیروهای محرک جریان از طریق مرزها صورت می‌گیرد به همین دلیل توجه بسیاری از پژوهش‌ها بر این نقطه تمرکز یافته است [۱۳۶-۱۴۴]. در تحقیقی که توسط هالیس و همکاران انجام شد [۱۴۵]، الگوریتمی ارائه گردید که در آن شرط مرزی دریکله که به عنوان شرط مرزی سرعت شناخته می‌شود، برگره‌های مرزی در مدل شبکه‌ای بولتزمن اعمال گردید. گره‌هایی که در آن در واقع نیرو خارجی باعث ایجاد سرعت در سیال می‌شود و به مدل قبلی آن‌ها بقای جرم را اضافه می‌کند. لی و همکاران [۱۴۶] پژوهشی انجام دادند که در آن از توانایی روش IB^۲ در شبیه‌سازی شرط عدم لغزش برای دیواره‌های متحرک و قابل تغییر شکل در روش بولتزمن شبکه‌ای استفاده می‌کرد. نتیجه تحقیق دوبعدی و سه‌بعدی آن‌ها برای جریان‌های تک‌فاز و چندفاز نشان می‌دهد که ترکیب این دو روش جواب‌های بهتر و قابل قبول‌تری را برای شرایط مرزی ارائه می‌دهد.

۹-۱ نوآوری

سیستم‌های میکروفلوئیدیک به عنوان یکی از تجهیزات و بسترهای کارآمد، در زمینه‌های مختلف علوم، جایگاه ارزشمندی را به خود اختصاص داده است. ویژگی‌هایی چون نیاز به مواد اولیه کم،

^۱ Phase - field

^۲ Immersed boundary

بازدهی بالا، امکان بررسی دقیق نتایج در ابعاد میکرو و نانو، امکان موازی‌سازی چندین آزمایش در کنار هم و به صورت همزمان و صرفه‌جویی در زمان و نیروی انسانی، لزوم جایگزینی این تجهیزات را با روش‌های سنتی، نشان می‌دهد. قابلیت طراحی‌های گوناگون این سیستم‌ها نیز امکان به کارگیری این ابزارها را در فرایندهای مختلفی مانند جداسازی پلاسما خون و حتی واکنش‌های شیمیایی فراهم می‌کند. در همین راستا و همگام با آزمایش‌های تجربی، پژوهش‌های مهندسی صورت گرفته در زمینه سیستم‌های دوفاز، راه را برای استفاده از روش‌های عددی در جهت کاهش هزینه‌های زمانی و مادی، در گستره وسیع‌تری از کمیت‌های موثر، هموار می‌کند. به این ترتیب، نه تنها زمینه توسعه روش‌های عددی در زمینه‌های دیگری از علوم، بلکه گسترش و ارتقا خود روش‌های عددی نیز فراهم می‌گردد. در برخی زمینه‌ها در این سیستم‌ها چالش‌هایی وجود دارد. مثلاً برای بررسی فرایندهایی که در این سیستم‌ها صورت می‌گیرد نیاز به دوربین‌های عکس‌برداری با توانایی‌های بسیار بالا می‌باشد که بتواند تعداد عکس‌های کافی برای تحلیل فرایند مورد نظر را ثبت کند. این دوربین‌ها بسیار گران‌قیمت هستند و به طور سفارشی ساخته می‌شوند. به این معنی که تهیه دوربین‌هایی با قابلیت هزینه راه‌اندازی و ساخت این سیستم‌ها را چند برابر می‌کند. بر اساس مطالعاتی که انجام شد، پژوهش عددی که رژیم‌های مختلف جریان در سیستم‌های گریز از مرکز را بررسی کند، انجام نشده است و رژیم‌های مختلف جریان با تغییر در فرکانس چرخش دیسک ایجاد می‌شوند. که در پژوهش حاضر این بررسی‌ها صورت گرفته است. علاوه بر این، فرایند ولوینگ^۱، که برای ایجاد تاخیر در ورود فاز ثانویه به داخل فاز کانال اصلی صورت می‌گیرد، از چالش‌های مطرح بود که تکنیک‌های هندسی جهت ایجاد تاخیر ارائه شده است. همچنین، با استفاده از شبیه‌سازی عددی در این زمینه، نه تنها می‌توان روش بولتزمن شبکه‌ای را در زمینه کاربردی جدیدی توسعه داد بلکه امکان بررسی پارامترهای تاثیرگذار در این فرایندها فراهم می‌شود و به این ترتیب می‌توان در هزینه‌های مادی و زمانی و انسانی نیز

¹ Valving

۱۰-۱ ساختار تدوین رساله

برای آشنایی با سازوکار، کاربردها و فرایندهایی که توسط سیستم‌های میکروفلوئیدیک انجام می‌شود، فصل اول به معرفی این سیستم‌ها اختصاص یافته است. از آنجا که این پژوهش توسط روش عددی بولتزمن شبکه‌ای و روش پیشنهادی لی برای شبیه‌سازی سیستم‌های دوفاز انجام گرفته است، در فصل دوم این پژوهش به معرفی روش بولتزمن شبکه‌ای و مختصری از روش‌های مطرح در شبیه‌سازی دوفاز و ویژگی‌های آنها پرداخته شده و در فصل سوم، توضیح و بررسی کاملی از روش پیشنهادی لی^۱، شکل‌ها و توضیحات آن آورده شده است. از آنجا که شبیه‌سازی سیستم‌های LOD توسط روش بولتزمن شبکه‌ای انجام می‌شود، در ابتدای فصل چهارم، که فصل نتایج می‌باشد، شبیه‌سازی حباب استاتیک به منظور آشنایی با روش به عنوان مرحله اول شبیه‌سازی صورت گرفته است. سپس حرکت یک متحرک در یک کانال افقی، برای حصول شرایط مرزی مناسب خروجی، شبیه‌سازی شده است. از آنجا که مرحله نهایی پژوهش مربوط به استفاده از نیروی خارجی جهت رانش سیال است، شبیه‌سازی سقوط و صعود یک قطره تحت نیروی گرانش و شروط مرزی مربوط به آن، در بخش سوم از فصل چهارم، بررسی شده است. چون پیش از سیستم‌های آزمایشگاه بر روی دیسک (LOD)^۲، سیستم‌های آزمایشگاه بر روی تراشه (LOC)^۳ مورد استفاده قرار می‌گرفت و تحقیقات تجربی و عددی متعددی برای بررسی آنها وجود دارد و علاوه بر این، وجود سازوکار، مفهوم و اصول مشترک با سیستم‌های LOD، بخش چهارم از فصل نهایی به شبیه‌سازی این سیستم‌ها پرداخته و بخش نهایی از فصل آخر نیز به شبیه‌سازی اولیه سیستم‌های LOD و بررسی کمیت‌های تاثیرگذار و رژیم‌های مختلف جریان اختصاص داده شده است.

¹ Lee

² Lab-On-Disk

³ Lab-On-Chip

فصل دوم

روش بولتزمن شبکه‌ای و شرایط مرزی

۲-۱ تئوری لتیس بولتزمن

جریان سیال می‌تواند در چهارچوب‌های فضایی و مکانی مختلف مورد بررسی قرار گیرد. از دیدگاه ماکروسکوپی یک سیال می‌تواند در عبارت‌هایی از مقادیر هیدرودینامیک پیوسته مانند سرعت و چگالی تعریف شود در حالی که از دیدگاه میکروسکوپی، یک سیال به صورت یک سیستم از تعداد زیادی ذره یا مولکول که در تعامل با یکدیگر هستند، اما برهم‌کنش‌های بین مولکولی هیچ تاثیری بر رفتار سیال در حالت ماکروسکوپی ندارد، معرفی می‌شود [۱۴۷].

اصول روش بولتزمن شبکه‌ای، ساختن و معرفی معادلات سینماتیک ساده‌ای است که بتواند معادلات هیدرودینامیک کلاسیک در دیدگاه ماکروسکوپی را در چهارچوب مزوسکوپی بیان کند [۱۴۸]. این رویکرد را به این صورت می‌توان توجیه کرد که رفتار مجموعه‌ای از ذرات میکروسکوپی می‌تواند منتهی به رفتار ماکروسکوپی سیال شود [۱۴۹]. به این ترتیب، دیگر نیاز به بررسی مولکولی در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی یا حل معادلات دیفرانسیل سنگین و پیچیده ناویر-استوکس نخواهد بود. در حالی که می‌توان از طریق بولتزمن شبکه‌ای به معادلات ناویر-استوکس رسید و همچنین فشار را می‌توان از طریق معادلات حالت محاسبه کرد [۳، ۱۴۹]. علاوه بر اینکه طبیعت و ساختار معادلات بولتزمن شبکه‌ای، بسیاری از مزیت‌های روش دینامیک مولکولی مانند دادن تصویری واضح از فرآیند انجام شده در ابعاد کوچک و به کارگیری آسان شرایط مرزی و یک الگوریتم حل آسان را ارائه می‌دهد. این روش، از لحاظ تاریخی، توسعه‌ای از شبکه سلول گاز (LGCA)^۱ می‌باشد. در واقع این مدل از شبکه سلولی گاز و روش بولتزمن شبکه‌ای، اساسا ریشه در تئوری جنبشی ارائه شده توسط لودویگ بولتزمن دارند [۱۵۰].

ایده اصلی کارهای بولتزمن بر اساس این نظریه بنا نهاده شده بود که گاز از ذراتی در تعامل با یکدیگر تشکیل شده است که می‌تواند توسط مکانیک کلاسیک توصیف شود. اما چون تعداد این ذرات

¹ Lattice Gas Cellular Automata

زیاد است، تنها یک توصیف آماری از آن می‌تواند مناسب و ضروری باشد. در نهایت، مکانیزم برهم‌کنش ذرات با به‌کارگیری ایده برخورد ذرات مانند بازی بلیارد و تئوری پخش^۱ ساده گردید. روش‌های بولتزمن ساده و ساده‌تر شد مانند آنچه که در مدل گاز شبکه‌ای ارائه شد و در حال حاضر نیز از این روش برای شبیه‌سازی رفتار سیالات نیز استفاده می‌شود. مفهوم اساسی تئوری جنبشی گازها و مکانیک آماری که در روش بولتزمن از آن استفاده شده است در ادامه به طور خلاصه توضیح داده می‌شود.

۱-۱-۲ تئوری جنبشی گازها

یک گاز رقیق را در نظر بگیرید که شامل ذرات معلق کروی شکل که با سرعت v در حال حرکت هستند. فرض می‌شود که ذرات دارای برهم‌کنش الاستیک هستند. اگر فرض شود که هر کدام از ذرات دارای مشخصات معین با بردار مکانی X و ممتموم P هستند، حالت دینامیکی سیستم می‌تواند توسط معادلات کلاسیک مکانیک مشخص شود که امکان پیش بینی حالت‌های بعدی را امکان پذیر می‌سازد. تابع توزیع f را که تعریف کننده سیستم بر اساس ویژگی‌های مشخصه هر ذره است به صورت زیر در یک فضای فازی مشخص و در زمان t تعریف می‌شود.

$$f^N(X^N, P^N, t) \quad (1-2)$$

که در آن N تعداد ذرات است. محاسبه زمانی تابع توزیع توسط معادلات لیوویل صورت می‌گیرد که دارای $6N$ معادله است. بدیهی است که این تعداد تعریف از تابع توزیع غیرعملی است زیرا N از مرتبه عدد آووگادرو یعنی 10^{23} است که بسیار بسیار بزرگ‌تر از توان حل کامپیوترهای امروزی است. بنابراین، منطقی به نظر می‌رسد که رفتار سیستم از نقطه نظر آماری بررسی شود. که این کار از

^۱ streaming

پیچیدگی مختلفی برخوردار است اما ساده‌ترین شکل آن روش سطح جنبشی تک-جسمی^۱ است.

تابع توزیع $f^N(x^N, P^N, t)$ احتمال حضور یک ذره یا مولکول را در موقعیت X و با ممنتوم P نشان می‌دهد. مکان و ممنتوم $N-1$ مولکول باقی مانده در نظر گرفته نمی‌شود. تنها تابع توزیع f^1 برای توصیف ویژگی‌های گاز که به مکان نسبی دیگر مولکول‌ها وابسته نیست، کافیست. تعداد احتمالی مولکول‌هایی با موقعیت مکانی در محدوده $x+dx$ و ممنتوم $p+dp$ می‌تواند با تابع توزیع $f^1(x, p, t)dx dp$ تعیین شود. فرض می‌شود که یک نیروی F که کوچک است بر نیروهای بین‌مولکولی بر روی سیستم اثر می‌کند. اگر برخوردی وجود نداشته باشد، در زمان $t+dt$ ، موقعیت مکانی مولکول‌ها به صورت تابع زیر تعریف می‌شود:

$$x + \left(\frac{p}{m}\right)dt = x + \left(\frac{dx}{dt}\right)dt = x + dc \quad (2-2)$$

و ممنتوم آن به صورت زیر می‌باشد

$$p = p + Fdt = p + (dp/dt)dt = p + dp \quad (3-2)$$

بنابراین هنگامی که برخوردی وجود ندارد و هنگامی که موقعیت مکانی و ممنتوم در زمان معین

t مشخص باشد، f^1 در زمان $t+dt$ به این صورت تعیین می‌گردد.

$$f^{(1)}(x+dx, p+dp, t+dt)dx dp = f^{(1)}(x, p, t)dx dp \quad (4-2)$$

این همان فرآیند جاری شدن است. هرچند که در واقع برخوردها در سیستم رخ می‌دهند اما

برخوردهایی که در نقطه (x, p) اتفاق می‌افتند به $(x+dx, p+dp)$ منتقل نمی‌شوند. همچنین

مولکول‌هایی وجود دارند که در نقطه (x, p) قرار ندارند اما به نقطه $(x+dx, p+dp)$ می‌رسند. اجازه دهید

تعداد مولکول‌هایی که از موقعیت مکانی (x, p) شروع به حرکت می‌کنند و به نقطه $(x+dx, p+dp)$

¹ One – body kinetic level

می‌رسند و آن مولکول‌هایی که از نقطه دیگری غیر از (x, p) شروع به حرکت می‌کنند و به نقطه مورد نظر $(x+dx, p+dp)$ می‌رسند را به دلیل برخوردهایی که در بازه زمانی dt رخ می‌دهند، به ترتیب با $\Gamma^+ dx dp$ و $\Gamma^- dx dp$ نشان دهیم. بنابراین بعد از در نظر گرفتن معادلات برخورد (۲-۳) می‌تواند به صورت زیر اصلاح شود:

$$f^{(l)}(x+dx, p+dp, t+dt) dx dp = f^{(l)}(x, p, t) dx dp + [\Gamma^+ - \Gamma^-] dx dp dt \quad (۵-۲)$$

که بسط تیلور سمت چپ معادله بالا به صورت زیر است:

$$f^{(l)}(x+dx, p+dp, t+dt) dx dp = f^{(l)}(x, p, t) dx dp + dx \cdot \nabla_x f^{(l)} + dp \cdot \nabla_p f^{(l)} + \left(\frac{\partial f^{(l)}}{\partial t} \right) dt + \dots \quad (۶-۲)$$

با ترکیب دو معادله بالا (۲-۴) و (۲-۵) خواهیم داشت:

$$\left[f^{(l)}(x, p, t) + dx \cdot \nabla_x f^{(l)} + dp \cdot \nabla_p f^{(l)} + \left(\frac{\partial f^{(l)}}{\partial t} \right) dt + \dots \right] dx dp = f^{(l)}(x, p, t) dx dp + [\Pi^{(+)} - \Pi^{(-)}] dx dp dt \quad (۷-۲)$$

با ساده‌سازی روابط بالا به رابطه زیر می‌رسیم:

$$v \cdot \nabla_x f^{(l)} + F \cdot \nabla_x f^{(l)} + \frac{\partial f^{(l)}}{\partial t} = \Pi^{(+)} - \Pi^{(-)} \quad (۸-۲)$$

معادله (۲-۷) معادله دیفرانسیل بولتزمن است. سمت راست معادله بالا عملگر برخورد ذرات است که در شکل کامل آن یک معادله دیفرانسیل غیرخطی است. در معادله شبکه گازی^۱ و معادلات شبکه‌ای بولتزمن، معادله بولتزمن در دیدگاه ذره‌ای^۲ حل شده است و تمرکز آن‌ها بر روی بدست آوردن یک معادله شبیه معادله (۲-۴) است که به صراحت دارای عملگرهای برخورد^۳ و هدایت^۴ می‌باشد.

^۱ Lattice gas automota

^۲ Particle perspective

^۳ collision

^۴ streaming

۲-۲ شبکه سلولی گازی

یک ماشین سلولی مدل گسسته‌ای است شامل شبکه‌ای منظم از سلول‌هایی که لیس خوانده می‌شوند. هر کدام از نقاط در این شبکه، عدد معین متفاوتی را به خود اختصاص می‌دهند. در همسایگی هر کدام از گره‌ها در لیس یا شبکه، تعداد مشخص از دیگر گره‌ها وجود دارد. هر کدام از این گره‌ها دارای بردار مکانی مشخص x و سرعت v هستند. محاسبات مربوط به هر کدام از این گره‌ها در یک گام زمانی مشخص انجام می‌شود. حالت هر گره یا هر لیس، در هر گام زمانی، با توجه به محاسبات انجام شده برای خود گره و همسایگان اطراف آن معین می‌گردد.

در ماشین سلولی گازی، حالت گره یک بولین^۱ است به این معنی که اگر ذره گازی در آن مکان مورد نظر وجود داشته باشد به آن عدد ۱ و در غیر این صورت به آن عدد صفر اختصاص داده می‌شود. هر دو مرحله برخورد و انتشار در هر گام زمانی انجام می‌گیرد. خاصیت و حالات هر گره توسط بردارهای سرعت، به گره‌های مجاور خود انتقال می‌یابد. در گام برخورد^۲ قوانین حاکم در برخورد الاستیک برای پیش‌بینی اینکه چه اتفاقی پس از برخورد رخ خواهد داد استفاده می‌شود. در مرحله هدایت^۳، ارزیابی تعداد ذره‌ها از رابطه زیر صورت می‌پذیرد.

$$n_i(x + c_i, t + 1) = n_i(x, t) + \Omega_i(n(x, t)) \quad (i = 0, 1, 2, \dots, M) \quad (9-2)$$

که در آن x ، موقعیت مکانی گره‌های شبکه است. c_i سرعت ذره، Ω_i عملگر برخورد و M که تعداد جهت‌های سرعت در هر گره از لیس است. خواص و مقادیر ماکروسکوپیک مانند چگالی و ممنتوم به ترتیب با جمع کردن ذرات در هر گام زمانی و ضرب کردن در سرعت‌ها قبل از جمع کردن بدست می‌آید.

روش ماشین سلولی گازی مزایا و معایب خود را دارد. مزیت اصلی آن این است که چون

^۱ boolean

^۲ Collision step

^۳ streaming

سیستم حاکم بر آن بولین است، امکان محاسبه دقیق را بدون هیچگونه خطا امکان پذیر می‌سازد. همچنین امکان شبیه‌سازی موازی در این روش وجود دارد. توسعه روش بولتزمن شبکه‌ای نشأت گرفته از ویژگی‌های این روش مانند استقلال فشار از میدان سرعت و نسبت سیگنال – نویز بالا است. یکی از محدودیت‌ها و در واقع عمده‌ترین آن در ضریب انتقال^۱ (به عنوان مثال لزجت) است که از اوپراتور برخورد آن که در بازه محدودی کار می‌کند ناشی می‌شود [۱۵۰].

۲-۳ اصول بولتزمن شبکه‌ای

ویژگی اساسی بولتزمن شبکه‌ای این است که مؤلفه موقعیت ذره در روش شبکه گازی که همان خاصیت بولین است با تابع توزیع جایگزین شده است [۱۵۱]. یعنی

$$f_i(x, t) = \langle n_i(x, t) \rangle \quad (10-2)$$

که در آن $\langle \rangle$ متوسط اثر کلی را نشان می‌دهد که کمکی برای حذف اثرات ناخواسته استاتیکی در LBM است. این تابع توزیع در هر گره از شبکه وجود دارد و باعث ساختن محدوده سیال و تشکیل متغیرهای اصلی است. تابع توزیع در واقع احتمال حضور ذرات سیال، که در حال حرکت با سرعتی مشخص و در جهتی مشخص در یک گام زمانی معین است، را در هر گره نشان می‌دهد.

۲-۴ فرمول‌بندی بولتزمن شبکه‌ای

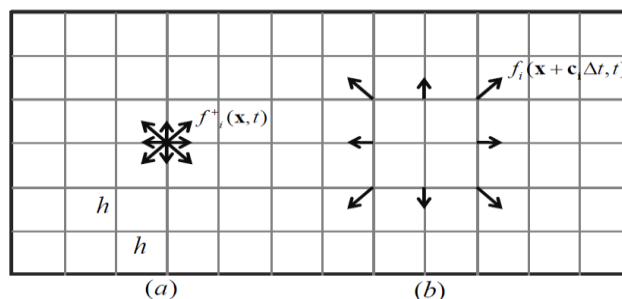
ایده اصلی شکل‌بندی بولتزمن شبکه‌ای تعریف کردن قانونی است که بر جابه‌جایی ذرات سیال در یک شبکه حاکم است [۱۵۳]. معادله بولتزمن شبکه‌ای برای محاسبه تابع توزیع به صورت زیر بیان می‌شود:

$$f_i^+(x + e_i \Delta t, t + Dt) = f_i(x, t) + \Omega_i(f(x, t)) \quad (i = 0, 1, 2, \dots, M) \quad (11-2)$$

¹ Transport coefficient

که در آن x موقعیت ذره، Δt گام زمانی، e_i سرعت در راستای i و Ω_i اوپراتور برخورد است که در واقع کنترل نرخ آرام‌سازی^۱ توابع توزیعی که در یک گره به یکدیگر می‌رسند را به عهده دارد و M تعداد جهت‌های سرعت در هر گره است. گسسته‌سازی فضا در بولتزمن شبکه‌ای به طریقی انجام می‌شود که با معادله جنبشی گازها سازگار است. به طوری که سرعت‌های تابع توزیع، موازی با محل قرارگیری گره‌های همسایه است. بنابراین، گره‌های همسایه نسبت به گره x می‌توانند به صورت $x + c_i \Delta t$ تعریف شوند.

روش بولتزمن شبکه‌ای دارای دو مرحله در هر بازه زمانی است. اوپراتور برخورد، در یک مرحله مسئولیت باز پخش توابعی را که به یک گره می‌رسند به عهده دارد و در مرحله دیگر اوپراتور هدایت، توابع توزیع شده را به همسایه‌های مجاور انتشار می‌دهد. فرآیند برخورد و جاری شدن شکل ۱-۲ در زیر نمایش داده شده است. شکل سمت چپ a ، مرحله برخورد و سمت راست b ، مرحله هدایت به سمت گره‌های همسایه را نشان می‌دهد.



شکل ۱-۲: مرحله برخورد و جاری شدن [۱۵۳]

که عبارت هدایت آن به صورت زیر است:

$$f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^+(x, t) \quad (12-2)$$

بنابراین دیده می‌شود که هیچ محاسبه اضافه‌ای برای مرحله هدایت نیاز نمی‌باشد. در واقع توابع

¹ Relaxation rate

توزیع پس از برخورد، به گره‌های همسایه منتقل می‌شوند. هر کدام از متغیرهای ماکروسکوپیک، مانند چگالی (ρ) و ممنتوم (ρu)، می‌تواند در هر گره به صورت زیر محاسبه شود:

$$\rho u = \sum_i f_i c_i \quad \rho = \sum_i f_i \quad (13-2)$$

و معادله حالت ایزوترمال که برای فشار از آن استفاده می‌شود به شکل زیر است:

$$c_s^2 = c/\sqrt{3} \quad P = C_s^2 \rho \quad (14-2)$$

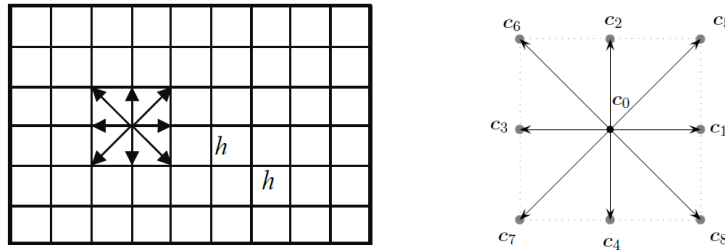
۵-۲ گسسته‌سازی محدوده حل

مدل شبکه‌ای گاز به حداقل تقارن نیاز دارد تا ایزوتروپی تانسور سرعت و ارضا معادله ناویر – استوکس را در مدل جنبشی گاز تضمین کند. آرایه‌های نوسانی^۱ چند درجه‌ای، در دو و سه بعد، به عنوان ساختار لیتیس استفاده شده‌اند که تعداد سرعت‌ها و تقارون آن‌ها را افزایش می‌دهند. اما تقارون افزوده شده می‌تواند هزینه‌های محاسباتی را زیاد کند. یک محدوده از ساختارهای لیتیس هم‌خانواده به صورت $D_n Q_m$ تعریف می‌شود که در آن تعداد m مدل در n جهت وجود دارد. به عنوان مثال، طرح $D_2 Q_9$ که در آن D نشان‌دهنده تعداد ابعاد و Q بردارهای سرعت لازم برای هدایت و یا به عبارت دیگر تعداد گره‌های همسایه لازم برای حل مسئله است.

۶-۲ گسسته‌سازی $D_2 Q_9$

یک جریان سیال دوبعدی غیرقابل تراکم با چگالی ρ و لزجت سینماتیکی ν را در یک محدوده حل R در نظر بگیرید. کل فضای حل به شبکه یا لیتس‌هایی منظم، با فاصله h در هر دو جهت x و y ، تقسیم شده است. همانطور که در نمایش داده شده، فاز سیال به صورت مجموعه‌ای از ذرات سیال که در گره‌های شبکه قرار گرفته‌اند، تعریف می‌شود [۱۵۲].

¹¹ Periodic



شکل ۲-۲: ساختار شبکه‌ای D_2Q_9 [۱۵۲]

این ذرات می‌توانند در جهت‌های معینی و با سرعت‌های معینی در یک گام زمانی به سمت ذرات همسایه حرکت کنند. مدل D_2Q_9 که در شکل ۲-۲ نشان داده شده، یک مدل بسیار مرسوم گسسته‌سازی در حل مسائل سیالاتی است. در این طرح، هر ذره از سیال امکان حرکت تنها به هشت همسایه با ۸ سرعت مختلف را دارد. یک سهم معین از ذرات در هر گره باقی می‌ماند که به آن سرعت صفر اطلاق می‌گردد C_0 . با پیروی از سیستم شماره‌گذاری که در شکل ۲-۲ نشان داده شده است، این نه بردار سرعت را به صورت زیر می‌توان تعریف کرد:

$$C_i = \begin{cases} 0 (i=0) \\ c \left(\cos \frac{\pi(i-1)}{2}, \sin \frac{\pi(i-1)}{2} (i=1, \dots, 4) \right) \\ c \left(\cos \frac{\pi(2i-q)}{2}, \sin \frac{\pi(2i-q)}{2} (i=5, \dots, 8) \right) \end{cases} \quad (15-2)$$

که در آن c سرعت لتیس است و برابر است با

$$C = \frac{h}{\Delta t} \quad (16-2)$$

۷-۲ فرآیند برخورد

در ماشین سلولی گازی (LGCA)، فرآیند برخورد، احتمالات ممکن برای هر داده ورودی را توسط قوانین پراکندگی مورد بررسی قرار می‌دهد. مدیریت همه این قوانین و بررسی آن از نقطه نظر

محاسبات بسیار هزینه‌بردار و مشمول صرف زمان زیادی برای محاسبه است. هینگوئرا و خیمنز [۱۵۳] مدل ساده شده‌ای از بولتزمن شبکه‌ای را پیشنهاد کردند که عملکرد برخورد در آن خطی شده و به صورت زیر ارائه شد.

$$\Omega_i(f(x,t)) = -M_{ij} \left(f(x,t) - f^{eq}(x,t) \right) \quad (۱۷-۲)$$

که در آن M_{ij} ماتریس برخورد و $f^{eq}(x,t)$ تابع توزیع تعادل است. فرض می‌شود که حتی در جریان‌های دینامیک، تابع توزیع ذرات خیلی دور از حالت تعادل خود نیستند. ابعاد ماتریس مربعی برخورد با تعداد تابع‌های لتیس (شبکه) برابر و اوپراتور برخورد، به عملکرد لزجت هیدرودینامیک در روش بولتزمن شبکه‌ای مربوط است [۱۵۴]. از معادله (۱۷-۲) چنان که بر می‌آید، فرآیند برخورد، قسمت غیرمتعادل از تابع توزیع در گره را به سمت تعادل پیش می‌برد. همچنین، فرآیند برخورد یک فرآیند محلی است به این معنی که تنها توابع توزیعی که به یک نقطه خاص در شبیه‌سازی می‌رسند در فرآیند برخورد در نظر گرفته می‌شوند. این ویژگی محلی از فرآیند برخورد، یکی از مشخصات مهم از طبیعت روش بولتزمن شبکه‌ای است.

۸-۲ مدل باتانکار – گراس – کروگ (LBGK) برای اوپراتور

برخورد

در مدل باتانکار – گراس – کروگ که توسط محققان پیشنهاد شده [۱۵۵-۱۵۶]، اعضای ماتریس برخورد M_{ij} ساده شده است. با این فرض که اوپراتور برخورد، توزیع ذرات محلی را با نرخ یکسانی مدیریت می‌کند و به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$M_{ij} = -\frac{1}{\tau} \delta_{ij} \quad (۱۸-۲)$$

در روش LBGK، اوپراتور برخورد به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\Omega_i(f(x,t)) = -\frac{Dt}{\tau} \left(f(x,t) - f^{eq}(x,t) \right) \quad (19-2)$$

کمیت آسایش τ ، میزان نرخی را که در آن توزیع ذرات به سمت تعادل میل می‌کند با عملکرد مستقیم بر روی قسمت نامتعادل تابع، کنترل می‌کند که با لزجت سینماتیک سیال ν ، به طور مستقیم، و با دیگر کمیت‌های گسسته‌سازی h و Δt به صورت زیر رابطه دارد:

$$\nu = \frac{1}{3} \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \frac{h^2}{Dt} = \frac{1}{3} \left(\tau - \frac{1}{2} \right) Ch \quad (20-2)$$

۹-۲ تابع تعادل

تابع توزیع تعادل f^{eq} که در فرآیند برخورد از آن استفاده می‌شود توسط رابطه زیر در مدل D_2Q_9 تعریف می‌شود:

$$f_0^{eq} = w_0 \rho \left(1 - \frac{3}{2c} v \cdot v \right) (i=0) \quad (21-2)$$

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left(1 + \frac{3}{c^2} e_i \cdot v + \frac{q}{2c^4} (e_i \cdot v)^2 - \frac{3}{2c^2} v \cdot v \right) (i=1, \dots, 8)$$

$$w_0 = \frac{4}{9} \quad w_{1,2,3,4} = \frac{1}{9} \quad w_{5,6,7,8} = \frac{1}{36} \quad (22-2)$$

که در آن، w_i فاکتورهای وزنی است:

۱۰-۲ دقت و پایداری

معادلات بولتزمن شبکه‌ای، معادلات غیرقابل تراکم ناویر-استوکس را در مرتبه دوم از فضا و زمان ارضا می‌کنند [۱۵۲]. بر اساس این واقعیت که معادلات بولتزمن (۹-۲) از بسط خطی تئوری جنبشی بدست می‌آیند، نتایج ماکروسکوپی بدست آمده به حلی از معادله غیرقابل تراکم ناویر-استوکس با مرتبه Ma^2 (عدد ماخ) نزدیک است، که در آن Ma دارای شکل زیر است:

$$Ma = \frac{v_{\max}}{c} \quad (23-2)$$

که در آن v_{max} ، سرعت ماکزیمم شبیه‌سازی در جریان است. بنابراین نیاز است که

$$Ma \ll 1 \quad (2-24)$$

این مساله نشان می‌دهد که سرعت لتیس باید به اندازه کافی بزرگ‌تر از ماکزیمم سرعت سیال باشد تا دقت حل قابل قبولی را تضمین کند. همچنین از معادله (2-14) که معادله حالت مربوط به فشار است، می‌توان دریافت که تراکم‌ناپذیری سیال تقریباً توسط روابط بولتزمن شبکه‌ای ارضا می‌شود. بنابراین هر چه مقدار c در رابطه (2-23) بزرگ‌تر باشد، تراکم‌ناپذیری را با دقت بسیار بالاتری تضمین می‌کند.

۱۱-۲ استقلال دقت روش از کمیت‌های مدل

سه کمیت زمان آسایش τ ، کمیت گسسته‌سازی h و گام زمانی Δt در روش بولتزمن شبکه‌ای به گونه‌ای انتخاب می‌شوند که دقت حل مطلوب و با هزینه زمانی قابل قبول حاصل شود. خطای گسسته‌سازی فضای حل توسط کمیت h و خطای مربوط به گسسته‌سازی زمان هم با Δt مرتبط است که این کمیت، مدت زمان لازم برای رسیدن به جواب نهایی را هم تعیین می‌کند. به طور کلی، خطای کلی در روش بولتزمن شبکه‌ای با عبارت زیر بیان می‌شود:

$$o(h^2) + o(Ma^2) \quad (2-25)$$

از این رو خطای تراکم‌پذیری باید معادل با خطای تفکیک‌پذیری باشد. زمان آسایش، توسط مقیاس زمانی برخورد ذرات سیال و لزجت سیال لتیس در مقیاس لتیس تعیین می‌گردد و دارای رابطه زیر است:

$$\bar{v} = \frac{1}{3}(\tau - \frac{1}{2}) \quad (2-26)$$

لزجت واقعی ν و لزجت لتیس $\bar{\nu}$ نیز توسط رابطه زیر به هم مرتبط می‌شوند:

$$v = v \frac{h^2}{Dt} = \bar{v} C^2 Dt \quad (27-2)$$

از رابطه (۲-۲۵) و (۲-۲۶) می‌توان دریافت که زمان آسایش باید دارای تعریف زیر باشد

$$\tau > 1/2 \quad (28-2)$$

τ همچنین در پایداری حل نیز تاثیرگذار است. مقادیر بالای τ به این معنی است که سیال بسیار لزج بوده و شبیه‌سازی بولتزمن دارای پایداری بیشتری است.

۱۲-۲ روش انتخاب کمیت‌های مدل

از معادله (۲-۲۰) Δt به صورت زیر تعیین می‌گردد:

$$\Delta t = \left(\zeta - \frac{1}{2}\right) \frac{h^2}{3v} \quad (29-2)$$

اسلوب زیر به عنوان پیشنهادی اولیه جهت تعیین بهینه کمیت‌های مدل برای یک سیال با لزجت ν معرفی می‌گردد:

۱- کمیت گسسته‌سازی فضای h ، از نقطه نظر محاسباتی تعیین می‌شود.

۲- مقدار τ از معادله پایداری (۲-۲۸) محاسبه می‌شود.

۳- مقدار Δt از معادله (۲-۲۹) انتخاب می‌شود و سرعت لتیس بر اساس آن تعیین می‌گردد.

۴- شبیه‌سازی انجام می‌شود. اگر یک حل پایدار حاصل شود، سرعت ماکزیمم بدست می‌آید و عدد ماخ کنترل می‌گردد. اگر عدد ماخ به اندازه کافی کوچک باشد، دقت حل مطلوب حاصل می‌شود.

اگر حل انجام شده پایدار نباشد باید فرآیند بالا با مقدار بزرگ‌تری از τ تکرار شود. از معادله (۲-۲۹) می‌توان نتیجه گرفت که در یک لزجت ν و τ ثابت، با کاهش h به نصف، Δt کاهش می‌یابد. بنابراین سرعت لتیس C دو برابر می‌شود و حل با دقت بالاتری انجام می‌گیرد، اگر چه این فرآیند، زمان محاسباتی را افزایش می‌دهد.

۱۳-۲ واحدهای لتیس

معادله‌های بولتزمن شبکه‌ای در ابعاد فیزیکی معرفی می‌شوند. همه متغیرهای فیزیکی مرتبط، واحدهای استاندارد خودشان را دارند و مطلوب‌تر است که حل عددی در واحدهای لتیس توسط متغیرهای بدون بعد انجام شود. تابع توزیع ذرات f_i و کمیت آسایش τ قبلاً بی‌بعد شده‌اند بنابراین در سیستم محاسبات بدون تغییر باقی می‌مانند. در واحد لتیس $\bar{h}$ و $\Delta\bar{t}$ هر دو واحد هستند. بنابراین سرعت لتیس $\bar{c}$ نیز واحد باقی می‌ماند. به این ترتیب، $\bar{x}$ که موقعیت و بازه زمانی $\bar{t}$ ، عدد صحیح می‌باشند. چگالی بی‌بعد لتیس نیز به صورت $\bar{\rho} = \rho / \rho_0$ تعریف می‌شود که در آن ρ_0 چگالی واقعی سیال است. معادلات بولتزمن (۲۱-۲)، با جایگزینی همه کمیت‌ها با کمیت‌های مرتبط در لتیس، به واحدهای لتیس تبدیل می‌شوند. بنابراین، معادلات LBGK در واحدهای لتیس به صورت زیر تعیین می‌گردند:

$$f_i(\bar{x} + \bar{e}_i, \bar{t} + 1) = f_i(\bar{x}, \bar{t}) - \frac{1}{\tau} [f_i(\bar{x}, \bar{t}) - f_i^{eq}(\bar{x}, \bar{t})] (i = 0, \dots, 8) \quad (۳۰-۲)$$

و تابع توزیع حالت تعادل f^{eq} نیز به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$f_i^{eq} = w_i \bar{\rho} (1 - \frac{3}{2} \bar{v} \cdot \bar{v}) (i = 0) \quad (۳۱-۲)$$

$$f_i^{eq} = w_i \bar{\rho} (1 + 3 \bar{e}_i \cdot \bar{v} + \frac{9}{2} (\bar{e}_i \cdot \bar{v})^2 - \frac{3}{2} \bar{v} \cdot \bar{v})$$

۱۴-۲ مدل بولتزمن شبکه‌ای برای شبیه‌سازی جریان دو فاز

مخلوط نشدنی

در مسائل شامل جریان‌های چند فاز مخلوط‌نشدنی، معادلات حاکم بر سیالات دارای عبارت مخصوصی هستند که سطح بین دو فاز را تعریف می‌کند. سطح بین دو فاز در واقع سطحی است که دارای ویژگی دو سیال مانند کشش سطحی است. یک تعریف متداول از سطح بین دو فاز از دو سیال

مخلوط نشدنی در روابط، بر اساس مدل‌های مربوط به نفوذ سطح^۱ تعریف می‌شود که در آن‌ها مقادیری مانند کشش سطحی، به عنوان مثال در ناحیه بین دو سطح توزیع می‌شوند. در چنین تعریفی، کشش سطحی به عنوان یک تنش توزیع شده در این ناحیه تعریف می‌گردد. شبیه‌سازی‌های عددی جریان‌های دو فازی توسط دو رویکرد صورت می‌گیرد. رویکرد لاگرانژی و رویکرد اویلری. در این رویکردها، لازم است که سطح بین دو فاز در طول زمان دنبال گردد. در رویکرد لاگرانژی، همچنان که ذرات سیال مورد نظر مورد تحلیل قرار می‌گیرند، به دقت می‌تواند سطح بین دو فاز را بررسی کند. با این توصیف، اگر موقعیت مکانی سطح^۲ به طور کامل تغییر کند، پیش بینی و دنبال کردن سطوح خوب پیش نخواهد رفت زیرا در این دیدگاه مشکل نقاط تکین^۳ وجود دارد. علاوه بر این، در محاسبات سه بعدی، هزینه زمانی زیادی را به این دیدگاه تحمیل می‌کند زیرا نیاز به مش‌زدن هندسه‌های پیچیده است. در رویکرد اویلری، تحلیل‌ها توسط مشاهده متغیرهای میدان مانند سرعت، فشار و چگالی انجام می‌پذیرد. به جای اینکه سطح بین دو فاز را به طور صریح شبیه‌سازی و دنبال کند، آن را به عنوان یک کانتور از متغیرهای میدان بازسازی می‌کند. بنابراین روش‌های اویلری بر معایب روش‌های لاگرانژی غلبه می‌کنند زیرا قادر به شبیه‌سازی تغییر شکل‌های زیاد در سطح بین دو فاز، بدون نیاز به مش‌زدن دوباره فضای حل، هستند. با این وجود، مشکل موجود در مورد این مسائل وجود اثرات مربوط به روش شبیه‌سازی سطح بین دو فاز، به دلیل فقدان عملکرد صریح معادلات است که ناحیه اطراف آن را هم تحت تاثیر قرار می‌دهد. بررسی‌های میکرو-ماکروسکوپی جریان‌های دو فاز نشان می‌دهد که جداسازی دو فاز ناشی از نیروهای بین دو سیال و سطح انرژی جنبشی است. روش بولتزمن شبکه‌ای، همچنان که توضیح داده شد، یک مدل جنبشی ساده شده می‌سازد که رفتاری مشابه معادلات هیدرودینامیک کلاسیک ارائه می‌کند. همچنین LBM می‌تواند روی کامپیوترهای موازی اجرا گردد. بنابراین جایگاه مستحکمی را نسبت به دیگر روش‌ها به خود اختصاص

¹ Diffuse interface

² topology

³ singularity

می‌دهد، از این رو که برهم‌کنش بین ذرات می‌تواند در تابع توزیع لحاظ گردد. به عنوان یک نتیجه، مدل چند فاز لتیس-بولتزمن، ردیابی سطوح بین فازها را آسان می‌کند. که این ویژگی به صورت ذاتی، با در نظر گرفتن دینامیک ذرات اعمال می‌شود، بدون اینکه آن‌ها را ردیابی یا دنبال کند. در این راستا، بسیاری از روش‌های بولتزمن شبکه‌ای و بولتزمن گازی ارائه گردید که هر کدام مزایا و معایب خودشان را داشتند. روش هفت سرعتی شان-چن به طور گسترده برای شبیه‌سازی جریان‌های چند فاز مورد استفاده قرار گرفت که این به دلیل سادگی در اعمال معادلات آن بود. از آنجا که جریان‌های با بیش از چند فاز معادله حالت غیرایده‌آل داشتند، شان و چن به اعمال این ویژگی در چهار چوب بولتزمن شبکه‌ای پرداختند. با در نظر گرفتن برهم‌کنش‌های غیرایده‌آل توسط تعریف مفهوم پتانسیل برهم‌کنش در روش شان-چن، کشش سطحی، با توانایی برهم‌کنش میکروسکوپی و بر اساس پروفیل چگالی در سطح بین گاز-مایع، شبیه‌سازی گردید [۱۵]. اگر چه امکان تنظیم کردن این دو کمیت به صورت مستقل با ثابت نگه داشتن پروفیل چگالی و تغییر کشش سطحی تا رسیدن به حالت مطلوب وجود دارد، مقدار مطلق و دقیق کشش سطحی قبل از محاسبه پروفیل چگالی سطح بین دو فاز نامعلوم است. به همین دلیل در کاری که توسط چن و همکاران [۱۵۷] انجام شد، در بررسی قانون لاپلاس با اوپراتور برخورد LBGK، کشش سطحی، خطای قابل توجهی را نشان داد. همچنین در شبیه‌سازی جریان پویزویل، تفاوت چشم‌گیری نزدیک ناحیه سطح بین دو فاز دیده شد. دیگر مدل‌های بولتزمن شبکه‌ای نیز برای جریان‌های دو فاز مخلوط‌نشده‌ی مطرح گردید. سوئیفت و همکاران [۱۶] مدلی را ارائه کردند که در آن سطح بین دو فاز با استفاده از رویکرد انرژی آزاد^۱ شبیه‌سازی می‌شد. در این مدل، تانسور فشار آن متأثر از تانسوری است که تابع انرژی آزاد برای سیال غیر یکنواخت^۲ است. در این روش ضخامت سطح بین دو فاز، مانند آنچه که لاتوا - کوکو^۳ [۱۷] به آن اشاره کردند، نسبتاً زیاد است. اما به مدل پیشنهادی آن‌ها که مرتبط با رویکرد انرژی آزاد است

¹ Free energy

² Non - uniform

³ Latva - kokko

انتقاداتی توسط لو [۱۵۸] وارد شد. رویکرد دیگر برای شبیه‌سازی جریان دو فاز مخلوط نشدنی، روشی بر اساس گرادیان رنگ است که اولین بار توسط گوانستنسن [۱۸] ارائه شد. این مدل با تئوری پیشنهادی مک نامارا و زانتی [۱۵۹-۱۶۰] در مورد روش بولتزمن تک فاز ترکیب شد. در این روش یک عبارت اغتشاش به اوپراتور برخورد خطی شده اضافه شد که تانسور فشار را در نزدیکی سطح به طور محلی ناهمسانگرد^۱ می‌کرد. نتیجه اضافه کردن این عبارت، همگن باقی ماندن کشش سطحی در ناحیه سطح بین دو فاز، منطبق بر معادلات ناویر - استوکس است. این عبارت اغتشاش، منتهی به انتقال جرم در راستای لینک‌های ارتباط دهنده لتیس‌ها در مجاورت سطح مشترک و اضافه شدن جرم به آن‌ها می‌شد. در این مدل، از اوپراتور کاملاً خطی شده استفاده شد که به نوعی در شبیه‌سازی‌های سه بعدی ناکارآمد نشان می‌داد و محدود به جریان‌هایی با چگالی و لزجت‌های معین می‌شد. همچنین، معادلات حاکم در این روش دقیقاً برای جریان‌های دو فاز نیستند. مزیت کلیدی مدل بولتزمن که در آن از الگوریتم گازی چند فازی الگو برداری شده و توسط کلر و روتمن [۲۰] ارائه شد، این است که نسبت چگالی، لزجت و کشش سطحی، می‌توانند به صورت مستقل انتخاب شوند. دیگر مدل‌ها نیز در همین راستا و به منظور شبیه‌سازی سیستم‌های چند فاز ارائه گردید که از این میان می‌توان به روش تولکه [۱۶۱] که امکان شبیه‌سازی جریان‌های چند فاز در نسبت چگالی و لزجت بیشتر را می‌داد و یا روش ریز و فیلیپس [۲۲] که در آن برخی اصلاحات به روش گوانستنسن [۱۸] اضافه شده بود، اشاره کرد. گرچه سیر تکامل روش‌ها محدود به مطالب گفته شده نیست، روش‌های مختلفی در چهارچوب بولتزمن شبکه‌ای مطرح شده که به چند روش مطرح و مورد استفاده در پژوهش‌ها اشاره می‌شود.

۱۵-۲ مروری بر روش‌های شبیه‌سازی جریان‌های دو فاز

در روش بولتزمن شبکه‌ای، تفاوت در شبیه‌سازی جریان دوفاز در روش‌های مختلف در واقع به نوع شبیه‌سازی و رویکرد سطح بین دو فاز باز می‌گردد که بیشتر این روش‌ها را می‌توان در پژوهش

¹ isotropic

اندرسون [۱۶۲] مشاهده کرد. در این روش‌ها در واقع جداسازی فازها از طریق عبارت نیرویی که در معادلات بولتزمن وارد می‌شود انجام می‌گیرد. ویژگی‌های این عبارت نیرویی که روش را قادر به شبیه‌سازی سطح بین دو فاز می‌کند، می‌تواند هم از مدل‌های جنبشی سیالات چگال مانند لو [۱۵۸]، با معادلات حالتی مانند واندروالس و یا معادلات واقعی‌تر مانند آنچه که هی و همکاران [۱۶۳] پیشنهاد می‌کند، معادلات وارد شود.

۱-۱۵-۲ مدل شان-چن

این روش یکی از قدیمی‌ترین روش‌های مدل‌سازی جریان‌های دوفاز است. تأثیر سیالات غیرایده‌آل از طریق یک نیروی جاذبه بین مولکولی میان نزدیک‌ترین همسایه‌ها تعریف می‌شود [۱۵].

$$F_{attr} = G \psi(r, t) \sum_{a=0}^b w_a \psi(r + V_a \Delta t, t) V_a \quad (۳۲-۲)$$

که در آن G عددی مثبت و بیانگر قدرت جاذبه و w_a فاکتورهای وزنی در جهات تعیین شده لتیس هستند. در معادله بالا، ψ پتانسیل برهم‌کنش بوده و تابعی احتمالی از چگالی است و به صورت تجربی^۱ به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\psi(r, t) = \psi(p(r, t)) = \psi_0 \exp\left(-\frac{\rho_0}{\rho}\right) \quad (۳۳-۲)$$

که در آن ρ_0 و w_0 ثابت‌های احتمالی هستند. این شکل از تابع پتانسیل به گونه‌ای طراحی شده است تا در نواحی با چگالی بالا، نیروی کشش بزرگ‌تر و در نواحی با چگالی پائین‌تر، نیروی کشش کوچک‌تری را اعمال کند [۱۴]. در مدل شان-چن، اثرات نیرویی در شبیه‌سازی، با انتقال توزیع سرعت ماکروسکوپی به تابع توزیع تعادل، به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$u' = u + c \left(\frac{F_{attr}}{\rho} \right) \quad (۳۴-۲)$$

و بنابراین تابع توزیع حالت تعادل F^{eq} براساس تابع u' در هر گام زمانی با جایگزینی u' به

^۱ Empirically

جای u بدست می‌آید. می‌توان نشان داد که اینگونه اعمال عبارت نیرویی در تابع توزیع تعادل دارای دقتی از مرتبه u و معادل با اعمال شتاب خارجی $a_{tr} = F_{attr} / \rho$ در هر گام مکانی می‌باشد. تابع معادله (۲-۳۴) می‌تواند توسط بسط سری تیلور به صورت زیر نوشته شود:

$$\psi(r + V_a \Delta t, t) = \psi(r, t) + V_a \Delta t \nabla \psi + \frac{(V_a \Delta t)^2}{2} \nabla^2 \psi + \dots \quad (۳۵-۲)$$

که شتاب جاذبه نیز طبق تحقیقات هو و همکاران [۳] به صورت زیر تعریف می‌گردد:

$$a_{attr} = \nabla \left[\frac{GRT}{2} \Delta t (\psi^2 + RT \Delta t^2 (\psi \nabla^2 \psi - \frac{1}{2} (\nabla \psi)^2)) \right] I \quad (۳۶-۲)$$

از طریق اعمال بسط انسگوک- چاپمن در معادلات ناویر- استوکس، اثر a_{attr} (کشش) را می‌توان در عبارت فشاری زیر ترکیب کرد:

$$p = \rho RT + \frac{GRT}{2} \psi^2 \Delta t \quad (۳۷-۲)$$

که به معادله حالت غیرایده‌آل معروف است و عبارت‌های باقیمانده مرتبه بالای معادله (۲-۳۷) مربوط به کشش سطحی در مدل شان- چن هستند. همانند آنچه در بالا ارائه شد، نیروی سیال- دیواره توسط تعریف نیروی چسبندگی دیواره که توسط مارتیس و چن [۱۶۴] معرفی گردید، تعریف می‌شود:

$$F_{ads} = G_{ads} \psi(r, t) \sum_{a=0}^b W_a S(r + V_a \Delta t, t) V_a \quad (۳۸-۲)$$

که در آن G_{ads} مرتبه نیروی چسبندگی دیواره تعریف می‌شود. که در آن تغییر در G_{ads} منجر به تعریف زاویه تماس بین سیال و دیواره می‌شود. S بردار بولین است که دیوار را در دامنه حل تعیین می‌کند.

۲-۱۵-۲ مدل هی - شان - دولن

برای شبیه‌سازی یک سیال غیره ایده‌آل، این مدل، نیروی جاذبه بین مولکولی F_{attr} ، نیروی

دافعه F_{rep} و نیروی گرانش F_{grav} را در قالب یک عبارت نیرویی عمومی در روش بولتزمن شبیه‌سازی می‌کند [۱۶۳-۱۷۰].

$$\frac{\partial F}{\partial t} + V \cdot \nabla_c f = -\frac{f - f^q}{\tau} + \frac{F \cdot (V - u)}{c_s^2} f^{eq} \quad (39-2)$$

که در آن $F = \frac{1}{\rho}(F_{attr} + F_{rep} + F_{grav})$ عبارت شتاب (نیرو در واحد جرم) برای هر ذره است و

نیروهای F_{attr} و F_{rep} به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$F_{attr} = \rho \nabla (2\bar{a}\rho + \bar{k} \nabla^2 \rho) \quad (40-2)$$

$$F_{rep} = -B_2 \rho^2 RTg \nabla \ln(\rho^2 g) \quad (41-2)$$

که در آن $\bar{a}$ و $\bar{k}$ ثابت‌های مربوط به پتانسیل جذب بین ذرات هستند. اینجا، F_{attr} نیروی جاذبه بین مولکولی با تقریب میانگین میدان^۱ تعریف می‌شود و F_{rep} تأثیر غیرحجمی انسگوک را نشان می‌دهد. با ترکیب سه نیروی یاد شده می‌توان نوشت:

$$F = \rho \nabla (2\bar{a}\rho + \hat{k} \nabla^2 \rho) - B_2 \rho^2 RTg \nabla \ln(\rho^2 g) + F_{grav} \quad (42-2)$$

معادله بالا می‌تواند به صورت زیر ساده‌سازی شود:

$$F = -\nabla U + F_{surf} + F_{grav} \quad (43-2)$$

که در آن F_{surf} عبارت نیرویی شامل کشش سطحی و معادل است با:

$$F_{surf} = \hat{k} p \nabla \nabla^2 \rho \quad (44-2)$$

و U به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$U = B_2 \rho^2 RTg - \bar{a} \rho^2 \quad (45-2)$$

علاوه بر این، تحلیل انسگوک-چاپمن برای این مدل به حل معادله حالت غیر ایده‌آل منتهی

گردید:

$$P = \rho RT + U = \rho RT(1 + B_2 \rho g) - \bar{a} \rho^2 \quad (46-2)$$

¹ mean-field approximation

۳-۱۵-۲ مدل انرژی آزاد

سوئیفت و همکاران [۱۶] مدلی از معادلات بولتزمن برای شبیه‌سازی ارائه کردند که در آن از مفاهیم ترمودینامیکی در شبیه‌سازی سطح بین دو فاز استفاده شده بود. در مدل پیشنهادی آن‌ها که با عنوان مدل انرژی آزاد^۱ شناخته می‌شود، تانسور فشار حالت تعادل برای یک سیال غیرایده‌آل مستقیماً در قسمت معادلات برخورد اعمال شده و سپس بین تانسور فشار و انرژی آزاد ارتباط ایجاد شده بود. حالت تعادل ترمودینامیکی توسط اعمال مدل‌های کان-هیلیارد و جینگزبرگ-لاندو، با استفاده از مفهوم عملکرد انرژی آزاد، در چهارچوب بولتزمن انجام شد. و برای فشار از معادله حالت واندروالس استفاده گردید که برای تصدیق قانون لاپلاس مورد آزمایش قرار گرفت. نیو و همکاران [۱۷۰] طرح عددی نوینی را برای بهبود بخشیدن به پایداری عددی این روش ارائه کردند. بعدها، پالمر و رکتور [۱۷۱] الگوریتمی را برای شبیه‌سازی جریان دوفاز ارائه کرد که در آن از مفاهیم روش انرژی آزاد استفاده شده بود. اینامورو [۱۷۳] روش انرژی آزاد را با روش تصویرکردن^۲ تلفیق نمود تا با استفاده از آن بتوان شبیه‌سازی جریان دو فاز در نسبت چگالی بالا را انجام داد. در روش پیشنهادی تکامل یافته انرژی آزاد، برای شبیه‌سازی دو سیال ۱ و ۲ با دو چگالی متفاوت ρ_1 ، ρ_2 ، از دو تابع توزیع f_i و g_i برای محاسبه چگالی، سرعت و کمیت مرتبه استفاده گردید که به صورت زیر تعریف شدند:

$$f_i(x_i + e_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(x, t) = \frac{1}{\tau_f} [f_i^{eq}(x, t) - f_i(x, t)] \quad (۴۷-۲)$$

$$g_i(x_i + e_i \Delta t, t + \Delta t) - g_i(x, t) = \frac{1}{\tau_g} [g_i^{eq}(x, t) - g_i(x, t)] \quad (۴۸-۲)$$

که در آن τ_f و τ_g کمیت‌های مربوط به زمان آسایش^۳ هستند و f^{eq} و g^{eq} توابع توزیع حالت

^۱ Free energy

^۲ Projection method

^۳ Relaxation time

تعداد به شمار می آیند و دارای معادلات زیر هستند.

$$f_1^{eq} = F_i + \rho w_i \left(\frac{3}{c^2} e_i \cdot u + \frac{q}{2c^4} (e_i \cdot u)^2 - \frac{3}{2c^2} |u|^2 \right) \quad (49-2)$$

$$g_i^{eq} = w_i \left[\frac{\pi \mu}{c_s^2} + \varphi \left(\frac{3}{c^2} e_i \cdot u + \frac{9}{2c^2} (e_i \cdot u)^2 - \frac{3}{2c^2} |u|^2 \right) \right] \quad (50-2)$$

و μ از طریق رابطه زیر به کمیت تحرک^۱ مربوط می شود:

$$M = \pi \left(\tau_g - \frac{1}{2} \right) \delta \quad (51-2)$$

جزئیات کاملی از این روش را می توان در پژوهش ليو و همکاران [۱۷۴] پیدا کرد.

۴-۱۵-۲ مدل رنگی

این مدل از معادلات شبکه گازی که توسط روتمن و کلر [۲۰] پیشنهاد گردید الگو گرفته است و در ابتدا توسط گوانستنسن و همکاران [۱۸] برای دو سیال مخلوط نشدنی برای شبیه سازی دوبعدی ارائه گردید. بعداً این روش توسط گرونا و همکارانش [۱۷۵] اصلاح شد تا بتواند در محدوده گسترده تری از چگالی و لزجت جریان های دو فاز را شبیه سازی کند. در این مدل، دو تابع توزیع قرمز و آبی برای شبیه سازی دوسیال مورد استفاده قرار گرفت و تابع توزیع کلی از مجموع دوتابع توزیع آبی و قرمز حاصل گردید که هر کدام از این توابع شامل مراحل برخورد و جاری شدن می باشند و به صورت زیر تعریف می شوند:

$$f_i^{kt}(x, t) = f_i^k(x, t) + \Omega_i^k(x, t) \quad (52-2)$$

$$f_i^k(x_i + e_i \delta t, t + \delta t) = f_i^{kt}(x, t) \quad (53-2)$$

در حالی که k می تواند R یا B به معنای قرمز یا آبی باشد و عملگرد برخورد Ω_i^k از سه زیرمجموعه

زیر تشکیل شده است [۱۷۶-۱۷۷]:

$$\Omega_i^k = (\Omega_i^k)^{(3)} [(\Omega_i^k)^1 + (\Omega_i^k)^2] \quad (54-2)$$

¹ Mobility

بقای جرم و معادلات ممنتوم هم برای آن به صورت زیر تعریف می شود:

$$\begin{aligned}\rho_k &= \sum_i f_i^k = \sum_i f_i^{keq} \\ \rho a &= \sum_i \sum_k f_i^k = \sum_i \sum_k f_i^{eq} e_i\end{aligned}\quad (55-2)$$

که در آن f_k چگالی هر سیال و $\rho = \rho_k + \rho_B$ چگالی کلی می باشد. Ω_i^k اوپراتور برخورد دو فاز است که شامل مرحله اغتشاش مربوط به ناحیه بین دو سطح بوده و کشش سطحی را ایجاد می کند و با معادله زیر تعریف می گردد:

$$(\Omega_i^k)^2 = \frac{A_k}{2} |u| \left[\frac{(e_i \cdot u)^2}{|u|^2} - \frac{1}{2} \right] \quad (56-2)$$

که در آن A_k کمیت آزاد کنترل کننده کشش سطحی گرادیان رنگ و دارای معادله زیر می باشد:

$$G(x, t) = \sum_i [\rho_R(x + e_i t) - \rho_B(x + e_i, \tau)] e_i \quad (57-2)$$

هرچند ریس و فیلیپس [۲۲] و لیو و ژانگ [۱۷۸] دریافتند که بسط مستقیم اوپراتور اغتشاش در مدل های $D_2 Q_9$ و $D_3 Q_{19}$ نمی تواند معادلات دوفاز ناویر-استوکس را پوشش داده و آنرا ارضا کند. از این رو به اصلاح معادلات ابتدایی ارائه شده پرداختند که شرح کاملی از این اصلاحات را می توان در پژوهشی که توسط لیو و ژانگ [۱۷۸] انجام شده است مشاهده نمود. از آنجا که در پژوهش حاضر از روش لی در شبیه سازی استفاده شده، لازم است که این روش، با جزئیات بیشتر، توضیح داده شود. در طی انجام هر کدام از مراحل شبیه سازی، روابط استفاده شده و توضیح بیشتر آورده می شود.

۱۶-۲ جمع بندی

بولتزمن شبکه ای بر اساس تئوری جنبشی گازها و از روش سلولی گازی الگو گرفته شده است که در آن از مزیت دیدگاه میکروسکوپی در بررسی دقیق مسائل، و از مزیت دیدگاه ماکروسکوپی در حجم محاسبات بهره می برد. به طور کلی این روش دارای دو بخش کلی هدایت و برخورد است. بر اساس شبکه انتخاب شده، که به شبیه سازی مسائل سیالاتی یا جامداتی و یا حل سه بعدی مربوط می شود، در قسمت جاری شدن، کمیت محاسبه شده بر گره های اطراف گره مورد نظر تاثیر می گذارد

و در بخش برخورد، کنترل توابع توزیعی که به یک گره می‌رسند را به عهده دارد که هماهنگ‌سازی آنها به زمان آسایش انتخاب شده بستگی دارد. این روش روابط ناویر-استوکس را ارضا می‌کند در حالی که در آن نیاز به کحاسبات پیچیده و حل معادلات دیفرانسیل درجه دوم نمی‌باشد. پس از مطرح شدن روش عددی بولتزمن شبکه‌ای که برگرفته از روش شبکه‌ای گازی است، روش‌های عددی متعددی نیز در زمینه‌های جریان دوفاز مطرح شدند. بیشتر چالش‌های موجود در این زمینه، مربوط به پایداری در سطح مشترک بین دوفاز و توانایی شبیه‌سازی در سطح مشترک دوفاز بوده است. نیروی کشش سطحی بین دوفاز، در قسمت برخورد، در عبارت نیرویی معادلات که شامل نیروهای خارجی است، در نظر گرفته می‌شود و برای پایداری آن از معادلات حالت گوناگونی مانند کان-هیلیارد و یا کارناهان-استرلینگ استفاده می‌شود. به این ترتیب، رویکردهای متفاوتی جهت تکامل این روش مطرح گردید که از آن جمله می‌توان به روش انرژی آزاد، روش هی، لی و روش اصلاح‌شده شان و چن اشاره کرد.

فصل سوم

روش لی و شرایط مرزی

۳-۱ روش لی

دو موضوع عمده‌ترین مسئله مطرح در زمینه شبیه‌سازی جریان‌های دو یا چند فازی هستند. اولین موضوع، مسئله شبیه‌سازی سطح بین دو فاز و سرعت‌های پارازیتی در نزدیکی این سطح است که منجر به ناپایداری حل می‌گردد و دومین مسئله، توانایی مدل در شبیه‌سازی جریان‌های دو یا چند فاز در نسبت چگالی و لزجت بالا (در حدود ۱۰۰۰) است تا بتوان از آن در مدل‌سازی جریان‌های گاز-مایع نیز استفاده نمود. علاوه بر این، اعمال کشش سطحی مستقل از دیگر کمیت‌ها نیز همواره مطرح بوده است. از دیگر موارد، توانایی روش در اعمال خاصیت آب‌دوست یا آب‌گریزی سطح است که عامل مهمی در مدل‌سازی این جریان‌ها به شمار می‌رود. زیرا در شبیه‌سازی‌هایی که مایع با سطح جامد در ارتباط است، این مسئله اهمیت بسزایی را در فرآیند حل مسئله ایفا می‌کند. هر مرزی در سطح بین دو فاز در طبیعت خود یک مزوسکوپیک است [۱۷۹]. گرادیان‌های مادی در نزدیک سطح بین دو فاز در جهت عمود بر سطح بسیار تیز و به مقیاس مولکولی نزدیک هستند. این مساله مستلزم بررسی پارامترهایی در ابعاد میکروسکوپیک است که ابعاد وسیع‌تری را تحت تاثیر قرار می‌دهد. در واقع روش بولتزمن شبکه‌ای بر اساس مدل‌های میکروسکوپیک و معادلات جنبشی مزوسکوپیک است [۱۸۰]. اگر چه تمرکز اصلی بولتزمن شبکه‌ای بر روی رفتار ماکروسکوپیک متوسط است، طبیعت جنبشی آن زمینه بررسی‌هایی در ابعاد دینامیک مولکولی را امکان‌پذیر می‌سازد که خصوصاً برای شبیه‌سازی سطح مشترک فازها در گازهای غیر ایده‌آل و یا سیالات دو فازی [۱۸۱-۱۸۷، ۱۵، ۱۶، ۱۸] و رفتار نزدیک دیواره در سطح میکروسیال [۱۸۸-۱۹۱] بسیار راهگشاست. بسیاری از مدل‌های پیشنهادی در روش بولتزمن شبکه‌ای از تکنیک نفوذ^۱ برای مدل‌سازی سطح بین دو فاز استفاده می‌کنند که در آن کشش سطحی به صورت یک نیروی حجمی بر روی شبکه‌هایی که به عنوان سطح مشترک در نظر گرفته می‌شوند اعمال می‌گردد [۱۶۲]. به طور کلی، می‌توان گفت که این تکنیک مزیت‌های قابل توجهی هم

^۱ Diffuse interface method

از لحاظ تئوری و هم عددی نسبت به دیگر تکنیک موجود، که همان سطح با شیب تند^۱ است، را دارد. معمولاً، محاسبات در این روش، در شبیه‌سازی سه بعدی که در آن تغییرات سطح مشترک بین دو فاز پیچیده است، بسیار راحت‌تر می‌باشد و خصوصاً این روش برای مسائل مرتبط با تغییر فاز بسیار پرکاربرد است [۱۹۲-۱۹۳]. علاوه بر این، تکنیک نفوذ به طور منحصر به فردی برای حل مسائلی، مانند دینامیک خط تماس سیال با دیواره و به هم پیوستن قطره‌ها، که حل آن‌ها توسط روش سطح با شیب تیز دشوار است، مناسب می‌باشد. در سال‌های اخیر، هی [۱۶۳] با استفاده از معادلات بولتزمن گسسته‌شده (DBE) و تقریب یک زمان آسایش، روابط نوآورانه‌ای برای شبیه‌سازی گازهای غیرایده‌آل ارائه کرد که در آن برای جداسازی فازها، از ناپایداری مکانیکی در منحنی دیاگرام فازی استفاده می‌کرد [۱۹۴] و برهم‌کنش بین مولکولی در آن از بسط انسگوک معادله بولتزمن مشتق می‌شد. به طور کلی، بکارگیری اصول و مفاهیم ترمودینامیکی در آن، این روش را منعطف‌تر از مدل‌های پیشنهادی قبلی چون روش شان-چن [۱۵، ۱۸۱، ۱۶۵]، که بسیار پرکاربرد هم هستند، می‌ساخت. هی و همکارانش دریافتند که ناهمگنی که در روش شان-چن گزارش شده بود در واقع نتیجه به‌کارگیری نیروی برهم‌کنش ناصحیح است. همچنین تغییرناپذیری گاليله با به‌کارگیری اصول انرژی آزاد^۲، که در دیگر مدل‌های پیشنهادی [۱۶، ۱۸۲، ۱۹۵] از آن استفاده شده بود، کاملاً در شکل‌بندی آن‌ها حذف شده بود. اما روش پیشنهادی هی نیز اشکالاتی داشت که نظر منتقدین را به خود جلب کرد. یکی از انتقاداتی که بر آن وارد می‌شد، ناپایداری عددی‌ای بود که عمدتاً در جریان‌های دوفاز با نسبت چگالی بالا در آن دیده می‌شد [۱۹۶، ۱۹۳]. اما هی و همکاران [۱۸۳] روابط قبلی خود را اصلاح نمودند و برای اثبات توانایی آن به شبیه‌سازی ناپایداری ریلی-تیلور به صورت دو بعدی و سه بعدی پرداختند که نتایج قابل قبولی را نشان می‌داد. بعدها، آن‌ها اثرات کشش سطحی را در مدل پیشنهادی خود لحاظ کردند و اثرات نیروی کشش سطحی را در ناپایداری کلین-هلمهولتز بررسی نمودند. روش هی و

¹ Sharp interface

² Free-energy

همکارانش بر اساس تبدیل تابع توزیع به صورت تابعی از جرم و ممنتوم به تابعی از فشار هیدرودینامیک و ممنتوم بود. نتیجه مستقیم این تغییر این بود که معادلات ناویر-استوکس تراکم‌پذیر به معادلات ناویر-استوکس تقریباً تراکم‌ناپذیر تبدیل می‌شد [۱۹۳]. آن‌ها ادعا می‌کردند که کاهش قابل توجه ناپایداری در روش پیشنهادی آن‌ها ناشی از کاهش خطای گسسته‌سازی در عبارت نیرویی معادلات بولتزمن بود. به طوریکه مرتبه عبارت نیروهای بین مولکولی از ۱ به مرتبه u (سرعت) کاهش می‌یافت. همچنین، از یک تابع توزیع دیگر، که شامل کمیت مرتبه^۱ می‌شد و خصوصاً برای گازهای ایده‌آل مناسب بود، در معادلات پیشنهادی خود استفاده می‌کرد. اما حداکثر نسبت چگالی که می‌توانست این روش در شبیه‌سازی ریلی-تیلور انجام دهد حدود ۲۰ بود که در مقایسه با دیگر روش‌های قبلی تفاوت قابل ملاحظه‌ای را نشان می‌داد. در حالی که کاهش خطای گسسته‌سازی در عبارت‌های نیروی بین مولکولی یک مساله حیاتی در کاهش ناپایداری عددی محسوب می‌شد، ایده به‌روز کردن فشار کمیتی است که از همان اهمیت برخوردار بود. فشار، در روش اولیه هی [۱۶۳]، توسط معادله حالت گاز غیرایده‌آل به‌روز می‌شد و در مقابل، فشار در شکل‌بندی اصلاح شده [۱۹۳]، یک فشار هیدرودینامیک بود که به آسانی شرط واگرا نبودن^۲ را ارضا می‌کرد. به طور کلی، پروفیل فشار هیدرودینامیک در نزدیکی سطح مشترک دو فاز هموارتر از پروفیل فشار ترمودینامیک است، که هموار بودن فشار هیدرودینامیک قویاً متأثر از نیروی کشش سطحی است. حال اگر عدد ماخ کوچک باشد، ساده‌سازی معادلات امکان‌پذیر است. در این مورد، فشار هیدرودینامیک چندین مرتبه کوچک‌تر از فشار ترمودینامیک است و عبارت‌های مرتبه بالا که به فشار هیدرودینامیک مرتبط هستند می‌توانند صرف نظر شوند [۱۹۷-۱۹۸]. که در این صورت، خطای شبیه‌سازی در نسبت چگالی بالا کاهش می‌یابد. در واقع تلاش‌های زیادی در جهت هر چه پایدار کردن مدل‌های پیشنهادی بولتزمن شبکه‌ای در نسبت چگالی بالا صورت گرفته است. از این میان می‌توان به روش تنگ و همکاران [۱۹۹]، روش

¹ Order parameter

² Divergence-Free

رانگ-کوتا [۲۰۰] اشاره کرد که در آن‌ها به کمک روش گسسته‌سازی TVD امکان شبیه‌سازی جریان‌های با نسبت چگالی تا ۱۰۰۰ نیز فراهم گردید. اما ساختار روش‌های پیشنهادی اغلب دارای شکل‌بندی‌های بسیار زیاد و پیچیده بود که امکان استفاده از آن را تا حد بسیاری زیادی محدود می‌کرد. به عنوان مثال روشی که اینامورو و همکاران پیشنهاد کردند، دارای تعداد روابط زیاد و علاوه بر آن، روابط نیز بسیار پیچیده بود [۲۰۱-۲۰۲]. اما در روشی که توسط لی پیشنهاد شد، مجموعه‌ای از استراتژی‌های گسسته‌سازی خودپایا به کار گرفته شده است. در این روش، فرض می‌شود که عدد ماخ بسیار کوچک است و علاوه بر این، در آن از تنش و شکل‌های پتانسیلی تنش برای نیروی کشش سطحی و گسسته‌سازی پایا برای عبارت نیروهای بین‌مولکولی استفاده شده که دستاورد آن، قابلیت بالای روش در شبیه‌سازی در نسبت چگالی و لزجت بالا و همچنین کاهش سرعت‌های پارازیتی در فصل مشترک دو فاز می‌باشد.

۲-۳ مدل ریاضی

معادلات بولتزمن، برای گازهای غیرایده‌آل با عملگر برخورد BGK، به صورت زیر است [۱۶۳]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \zeta_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + F_i \frac{\partial f}{\partial \zeta_i} = -\frac{f - f^{eq}}{\lambda} \quad (۱-۳)$$

که در آن f تابع توزیع در فضای (x_i, ζ_i) است که در آن ζ_i سرعت میکروسکوپی، f_i سرعت حجمی خارجی، λ زمان آسایش ناشی از برخورد و f^{eq} تابع توزیع ماکسول-بولتزمن است. از آنجا که $\frac{\partial f}{\partial \zeta_i}$ نمی‌تواند مستقیم محاسبه شود، هی و همکاران [۱۸۳]، تابع توزیع حالت تعادل f^{eq} را به عنوان بخش اصلی و راهنما تابع توزیع در نظر گرفتند و رابطه زیر را معرفی کردند:

$$\frac{\partial f}{\partial \zeta_i} \approx \frac{\partial f^{eq}}{\partial \zeta_i} = -\frac{\zeta_i - c_i}{c_s^2} f^{eq} \quad (۲-۳)$$

که در آن c_s سرعت صوت لیس است. با این تقریب، گسسته‌سازی میدان سرعت

میکروسکوپی ζ_i در واحد لیس به سرعت میکروسکوپی گسسته‌شده e_α منتهی می‌شود:

$$\frac{Df_\alpha}{Dt} = \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + e_{ia} \frac{\partial f_\alpha}{\partial x_i} = -\frac{1}{\lambda} (f_\alpha - f_\alpha^{eq}) + \frac{(e_{ia} - u_i) F_i}{pc_s^2} f_\alpha^{eq} \quad (3-3)$$

که در آن f_α تابع توزیع ذره در جهت α در یک لایه، e_{ai} مولفه i ام از سرعت میکروسکوپی در جهت α و ρ چگالی است و تابع توزیع تعادل نیز به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$f_\alpha^{eq} = t_{\alpha\rho} \left[1 + \frac{e_{ai} u_i}{c_s^2} + \frac{e_{ai} e_{aj} - c_s^2 \partial_{ij}}{2c_s^4} u_i u_j \right] \quad (4-3)$$

که در آن t_α فاکتور وزنی است که بر اساس مدل سرعت مورد استفاده $D_d Q_b$ با بعد b انتخاب می‌شود. شرح کاملی از این توابع وزنی در پژوهش کیان و چن [۲۰۳] آمده است.

۳-۳ معادلات بولتزمن شبیه‌سازی شده برای گازهای ایده‌آل

معادلات (۳-۵) و (۳-۶)، معادلات جرم و ممنتوم ماکروسکوپی را ارضا می‌کند.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (5-3)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\partial(\rho u_i u_j))}{\partial x_j} = \frac{\partial \sigma_{ij}^{ig}}{\partial x_j} + F_i \quad (6-3)$$

که در آن σ_{ij} تنش گاز ایده‌آل است و به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\sigma_{ij} = -\rho c_s^2 \partial_i + \mu(\partial_i u_j + \partial_j u_i) \quad (7-3)$$

δ_{ij} ، دلتای کرونگر است و μ لزجت مولکولی است. F_i نیروی بین‌مولکولی است که با حذف

F_i از معادله (۳-۶)، معادلات گاز ایده‌آل ناویر-استوکس بدست می‌آید. برای بدست آوردن F_i ،

معادله ممنتوم برای گازهای غیر ایده‌آل در نظر گرفته می‌شود [۱۹۶].

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \quad (8-3)$$

که تنش σ_{ij} به سه بخش تقسیم می‌شود:

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \sigma_{ij}^{(v)} + \sigma_{ij}^{(l)} \quad (9-3)$$

و در آن $P = P(\rho)$ فشار ترمودینامیک برای سیال ایزوترمال و $\sigma_{ij}^{(v)}$ تانسور تنش لزجی است.

$$\sigma_{ij}^{(v)} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \quad (10-3)$$

عبارت دوم در سمت راست معادله، عبارت لزجت حجمی است که در سیالات غیرقابل تراکم

قابل صرف نظر کردن است. عبارت $\sigma_{ij}^{(l)}$ از معادله انرژی آزاد کان - هیلارد مشتق می شود که دارای

شکل زیر است:

$$\sigma_{ij}^{(l)} = k \left[\left(\frac{1}{2} \frac{\partial \rho}{\partial x_k} \frac{\partial \rho}{\partial x_k} + \rho \frac{\partial^2 \rho}{\partial x_k \partial x_k} \right) \delta_{ij} - \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \right] \quad (11-3)$$

که در آن k عدد ثابت و به مرتبه کشش سطحی مربوط می شود. مقایسه سمت راست معادله

(۳-۶) و (۳-۷) نشان می دهد که نیروی بین مولکولی F_i شکل زیر را به خود خواهد گرفت:

$$F_i = \partial_j \sigma_{ij} - \partial_j \sigma_{ij}^{ig} \quad (12-3)$$

و بنابراین به صورت زیر تعریف می شود:

$$F_i = \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho c_s^2 - p) \delta_{ij} + k \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{1}{2} \frac{\partial \rho}{\partial x_k} \frac{\partial \rho}{\partial x_k} + \rho \frac{\partial^2 \rho}{\partial x_k \partial x_k} + \rho \frac{\partial^2 \rho}{\partial x_k \partial x_k} \right) \delta_{ij} - \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \right] \quad (13-3)$$

هی و همکاران [۱۸۳، ۱۶۳] F_i را به عنوان نیروی جاذبه بین مولکولی و اثرات دفع مولکولی بر

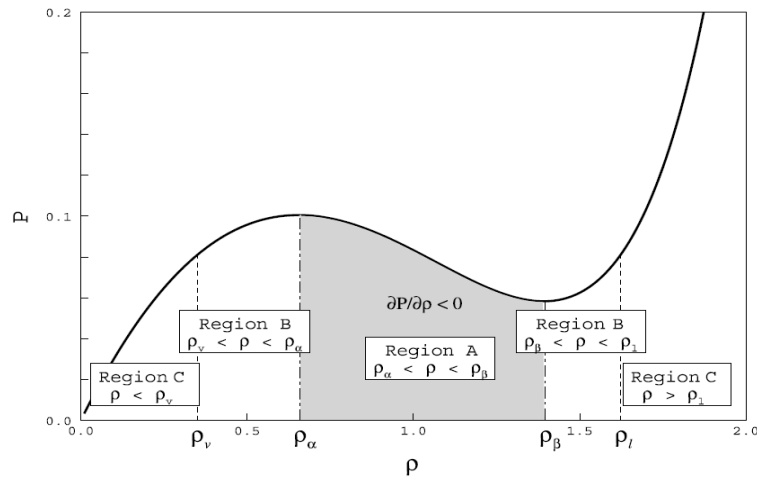
خواص تعادلی گاز چگال در نظر گرفتند که در آن فشار ترمودینامیک p از معادله حالت گاز غیر

ایده آل مانند معادله حالت ون دروالس تعیین می گردد. معادله حالت واندروالس می تواند توسط دمای

بحرانی T_c و چگالی بحرانی ρ_c و سرعت صوت $C_s = \frac{1}{\sqrt{3}}$ نرمالیزه گردد.

$$p_{vw} = \frac{\rho}{3-\rho} - \frac{3\rho^2}{8T} \quad (14-3)$$

که در آن فشار واندروالس، ρ و T ، به ترتیب، چگالی و دمای نرمالیزه هستند. در نقطه بحرانی $\rho=1$ و $T=1$ است. شکل ۱-۳ توزیع سه ناحیه A، B و C را نشان می‌دهد [۲۰۴].



شکل ۱-۳: معادله P - ρ هم دما در $T=0.9$ [۲۰۴]

که در آن شکل اصلاح شده فشار به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$p = p - k\rho \frac{\partial^2 \rho}{\partial x_k \partial x_k} + \frac{k}{2} \frac{\partial \rho}{\partial x_k} \frac{\partial \rho}{\partial x_k} \quad (۱۵-۳)$$

عبارت دوم سمت راست معادله (۱۳-۳)، تانسور تنش کشش سطحی و محورهای اصلی آن عمود بر صفحه مماس بر سطح بین دو فاز می‌باشند. تنش عمود بر صفحه صفر است و دو تنش نرمال مماسی برابر هستند. این مسئله تضمین می‌کند که کشش سطحی، ممنتوم کلی را در هر سطحی که با سطوح دیگر در تقاطع نیست تغییر نخواهد داد [۲۰۵]. مهم‌تر اینکه پروفیل فشار اصلاح شده در سطح بین دو فاز، در مقایسه با شکل پتانسیلی، هموارتر است که این مسئله پایداری را در مواردی که کشش سطحی بزرگ‌تر است بهبود می‌بخشد. بنابراین شکل تنشی برای ممنتوم و فشار در معادلات DBE مورد استفاده قرار گرفت. در این روش، برای معادلات DBE مورد استفاده در تابع توزیع‌ای که برای بدست آوردن کمیت مرتبه مورد استفاده قرار می‌گیرد، از شکل پتانسیلی نیروی کشش سطحی بهره برده می‌شود. شکل پتانسیلی زمانی مناسب است که جداسازی فازها مهم است. علاوه بر این، ضخامت سطح بین دو فاز و کشش سطحی می‌تواند به آسانی با شکل پتانسیلی کنترل شود. این سه

ناحیه، به ترتیب، به نواحی ناپایدار، پایدار نسبی و پایدار مربوط می‌شوند. در دیاگرام نشان داده شده که مربوط به معادله حالت واندروالس است، حالت $\rho < \rho_a$ نشان‌دهنده حالت گاز و $\rho > \rho_\beta$ به عنوان حالت مایع در نظر گرفته می‌شود. اگر $T < 1$ باشد، ناحیه A که در آن $\frac{\partial P}{\partial \rho}$ مقادیر منفی را دارد و از لحاظ مکانیکی ناپایدار است، حالتی است که جدایی فازهای مایع و گاز را نشان می‌دهد.

۳-۴ تنش و شکل پتانسیلی نیروهای بین مولکولی

نیروی کشش سطحی در عبارت نیروی بین مولکولی معادله (۳-۱۳) می‌تواند به صورت شکل‌های تنشی و پتانسیلی نوشته شود. زمانی که بقای ممنتوم مهم باشد، شکل تنشی دارای اهمیت است. درحالی‌که شکل پتانسیلی برای سیالاتی مناسب است که به سمت حالت تعادل می‌روند [۲۰۵ و ۳۵]. در مدل پیشنهادی لی از دو تابع توزیع، یکی برای بدست آوردن ممنتوم و فشار و دیگری برای محاسبه کمیت مرتبه^۱ استفاده می‌شود. از آنجا که نقش اصلی دو تابع توزیع متفاوت است، شکل پتانسیلی و تنشی نیروی کشش سطحی باید منطبق بر تابع توزیع انتخاب شود. شکل تنشی دارای رابطه زیر است:

$$F_i^s = \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho c_s^2 - p) \delta_{ij} + \frac{k}{\partial x_j} \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \delta_{ij} - \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \right) \quad (۳-۱۶)$$

که شکل پتانسیلی از معادله (۳-۱۳) با کمی دست‌کاری جبری استخراج می‌گردد:

$$F_i^p = \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_s^2 - p) \delta_{ij} + k \rho \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x_j \partial x_i} \quad (۳-۱۷)$$

فشار در شکل پتانسیلی می‌تواند در شکل مناسب‌تری برای کنترل ضخامت سطح بین دو فاز و

کشش سطحی، در حالت تعادل، بیان شود. روابط ترمودینامیکی نشان می‌دهد که

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_T = \rho \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \rho} \right)_T \quad (۳-۱۸)$$

^۱ Order parameter

که در آن p از طریق رابطه زیر به انرژی آزاد E_f مرتبط است:

$$p = \rho \left(\frac{\partial E_f}{\partial \rho} \right) T - E_f \quad (۱۹-۳)$$

که φ پتانسیل شیمیایی است و از گرفتن مشتق از معادله انرژی آزاد نسبت به چگالی ρ بدست می‌آید و به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\varphi = \left(\frac{\partial E_f}{\partial \rho} \right) T \quad (۲۰-۳)$$

از معادله (۳-۱۹) می‌توان نتیجه گرفت که:

$$\frac{\partial \rho}{\partial x_i} = \rho \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \quad (۲۱-۳)$$

با استفاده از مشخصات ترمودینامیکی رابطه (۳-۱۷) می‌تواند به صورت زیر بازنویسی شود:

$$F_i^p = \frac{\partial \rho c_s^2}{\partial x_j} \delta_{ij} - \rho \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\varphi - k \frac{\partial^2 \rho}{\partial x_j \partial x_j} \right) \quad (۲۲-۳)$$

معادله انتشار کان - هیلارد انرژی کلی را به سمت کم‌ترین مقدار می‌برد و تمایل دارد تا

پروفیل φ^{eq} را برابر صفر نگاه دارد که در آن

$$\varphi^{eq} = \varphi - k \frac{\partial^2 \rho}{\partial x_k \partial x_k} \quad (۲۳-۳)$$

۳-۵ معادله گسسته بولتزمن برای فشار و ممنتوم

لی شکل گسسته معادله بولتزمن جرم و ممنتوم (۳-۳) را به شکل مناسبی از معادلات DBE

برای فشار هیدرودینامیک و ممنتوم تبدیل کرد. این تبدیل، امواج آکوستیک را از مدل دو فاز معادله

بولتزمن حذف کرد و پایداری آن را در محدوده فرکانس پایین ارتقا داد [۱۸۳-۱۹۳]. به منظور انجام

این تبدیل لی یک تابع توزیع جدید معرفی کرد:

$$g_\alpha = f_\alpha + \left(\frac{p}{c_s^2} - \rho \right) \Pi_\alpha(0) \quad (24-3)$$

که در آن

$$\Pi_\alpha(0) = t_\alpha \left(1 + \frac{e_{ai} u_i}{c_s^2} \right) + \frac{(e_{ai} e_{aj} - c_s^2 \delta_{ij}) u_i u_j}{2c_s^2} \quad (25-3)$$

با استفاده از تعریف مشتق اساسی

$$\begin{aligned} \frac{Dg_\alpha}{Dt} &= \frac{Df_\alpha}{Dt} + \frac{1}{c_s^2} \frac{Dp}{Dt} \Pi_\alpha(0) - \frac{Dp}{Dt} \Pi_\alpha(0) = -\frac{1}{\lambda} (g_\alpha - g_\alpha^{eq}) \\ &+ \frac{(e_{ai} - u_i) \partial_i (\rho c_s^2 - p)}{c_s^2} [\Pi_\alpha(u) - \Pi_\alpha(0)] \\ &+ \frac{(e_{ai} - u_i)}{c_s^2} [k \partial_i (\partial_k \rho \partial_k \rho) - k \partial_j (\partial_j \rho - \partial_i \rho)] \Pi_\alpha(u) \end{aligned} \quad (26-3)$$

که در آن تابع g^{eq} تعادل به صورت زیر تعریف می‌گردد:

$$g_\alpha^{eq} = t_\alpha \left[\frac{p}{c_s^2} + \rho \left(\frac{e_{ai} u_i}{c_s^2} + \rho \left(\frac{e_{ai} u_i}{c_s^2} + \frac{e_{ai} e_{aj} - c_s^2 \delta_{ij} u_i u_j}{2c_s^4} \right) \right) \right] \quad (27-3)$$

و به این ترتیب، شکل تنشی نیروی کشش سطحی به کار گرفته می‌شود. مشتق‌های معادله

(۳-۲۶) نیاز به معادله پیوستگی و شرط عدم واگرایی^۱ دارد. به عنوان مثال $\partial_i u_i = 0$ که به شرح زیر

است [۱۸۳].

$$\frac{1}{c_s^2} \frac{Dp}{Dt} \Pi_\alpha(0) = \frac{(e_{ai} - u_i)}{c_s^2} \frac{\partial p}{\partial x_i} \Pi_\alpha(0) \quad (28-3)$$

و

$$\frac{Dp}{Dt} \Pi_\alpha(0) = (e_{ai} - u_i) \frac{\partial p}{\partial x_i} \Pi_\alpha(0) \quad (29-3)$$

شبیه‌سازی جریان به روش لیتیس بولتزمن، در حالتی که سرعت پایین و عدد ماخ نیز کوچک

است، بهترین حالت ممکن در شبیه‌سازی است. تحلیل‌ها نشان می‌دهد که وقتی عدد ماخ جریان

کوچک است، فشار به دو بخش تقسیم می‌شود. فشار ترمودینامیکی که در تمام فضای سیال یکنواخت

^۱ Divergence free condition

است و فشار هیدرودینامیک که چندین مرتبه کوچکتر از فشار ترمودینامیک است [۱۹۷-۱۹۸]. از آنجا که فشار ترمودینامیک در تمام سیال یکنواخت است، فشار P که در معادله (۳-۱۵) تعریف شده است، می‌تواند به عنوان فشار هیدرودینامیک در نظر گرفته شود. تحلیل ابعادی نشان می‌دهد که اگر فشار هیدرودینامیک با رابطه ρv_0^2 بی‌بعد شود، که در آن v_0 سرعت مشخصه سیستم است، مشتق فشار از مرتبه Ma^2 خواهد بود. بنابراین تقریب عدد ماخ پایین بیان می‌کند که:

$$\frac{(e_{ai} - u_i) \partial_\alpha}{c_s^2} (\Pi_\alpha(u) - \Pi_\alpha(0)) \approx (Ma^3) \quad (3-30)$$

که در واقع مرتبه این جمله در معادله (۳-۲۶) معادل خطای گرد کردن در روش بولتزمن شبکه‌ای است و می‌تواند از این جمله حذف شود. و چون سهم $\partial_i \rho c_s^2$ از مرتبه u است، بنابراین انتظار می‌رود که پایداری ارتقا یابد. این تقریب باعث حذف امواج آکوستیک در شرایط فرکانس پایین می‌شود [۲۰۶]. همچنین معادله‌های ماکروسکوپی نیز از طریق بست چارمن - انسگوک حاصل می‌شوند:

$$\frac{1}{\rho c_s^2} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3-31)$$

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) = & - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] \\ & + k \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial p}{\partial x_k} \frac{\partial p}{\partial x_k} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial p}{\partial x_i} \frac{\partial p}{\partial x_j} \right) \right] \end{aligned} \quad (3-32)$$

در شرایطی که عدد ماخ بسیار کوچک است، شرط عدم واگرایی سرعت تقریباً ارضا می‌شود. همچنین، این مسئله قابل توجه است که تقریب عدد ماخ کوچک در معادلات DBE، تنها بر معادلات مربوط به فشار و ممنتوم اعمال می‌شوند و نه برای معادلاتی که مربوط به کمیت مرتبه^۱ هستند.

¹ Order parameter

۳-۶ معادله بولتزمن شبکه‌ای برای کمیت مرتبه

در بخش قبلی معادلات بولتزمن شبکه‌ای برای جرم و ممنتوم به معادلات بولتزمن برای ممنتوم و فشار هیدرودینامیک تبدیل شد. لی تابع توزیع دیگری را برای کمیت مرتبه معرفی کرد که از آن برای بدست آوردن چگالی استفاده می‌شود. برای این منظور، معادله (۳-۳) با شکل پتانسیلی نیروی کشش سطحی کفایت می‌کند. زیرا این شکل از نیروی کششی، جداسازی فازها را بهتر شبیه‌سازی می‌کند. معادله DBE برای کمیت مرتبه به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} + e_{\alpha} \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial x_i} = -\frac{1}{\lambda} (f_{\alpha} - f_{\alpha}^{eq}) + \frac{(e_{\alpha} - u_i)}{c_s^2} [\partial_i \rho c_s^2 - \rho \partial_i (cp - k \partial_i^2 \rho)] \Pi(u) \quad (33-3)$$

در مجاورت نقطه بحرانی، برای کنترل ضخامت سطح بین دوفاز و کشش سطحی معادله حالت (EOS) می‌تواند ساده شود [۳۷، ۲۱۹]. در این مورد، فرض می‌شود که انرژی E_f صورت زیر را اتخاذ می‌کند [۱۹۲].

$$E_f(\rho) \cong \beta (\rho - \rho_v^{sat})^2 (\rho - \rho_l^{sat})^2 \quad (34-3)$$

که در آن β ثابت است و ρ_v^{sat} و ρ_l^{sat} به ترتیب چگالی بخار و مایع در حالت اشباع می‌باشند. دیفرانسیل گیری از معادله (۳-۳۱) پتانسیل شیمیایی را نتیجه می‌دهد:

$$\begin{aligned} \varphi(\rho) &\approx 4\beta(\rho - \rho_v^{sat})(\rho - \rho_l^{sat})(\rho - \rho_m) \\ \rho_m &= (\rho_v^{sat} + \rho_l^{sat})/2 \end{aligned} \quad (35-3)$$

معادله انرژی آزاد کان-هیلارد به کار گرفته شد تا رفتار مخلوط در نزدیکی نقطه بحرانی، هنگامی که گرادیان چگالی بسیار کوچک است، توصیف شود. هر چند زمانی که گرادیان چگالی بزرگ است نیز برای پیش‌بینی رفتار مخلوط پیشنهاد می‌شود [۲۰۸-۲۰۹]. در حالت تعادل، پروفیل چگالی در طول سطح به صورت زیر است:

$$\rho(\zeta) = \frac{\rho_l^{sat} + \rho_s^{sat}}{2} + \frac{\rho_l^{sat} + \rho_v^{sat}}{2} \tanh\left(\frac{2\zeta}{D}\right) \quad (36-3)$$

که D ضخامت سطح بین دو فاز است:

$$D = \frac{(\rho_l^{sat} - \rho_v^{sat})^3}{6} \sqrt{2k\beta} \quad (37-3)$$

ضخامت سطح بین دو فاز در حالت تعادل، که بر اساس پژوهش ژاکمین [۲۰۵] یک کمیت عددی است، با $\sqrt{k/\beta}$ و کشش سطحی نیز با $\sqrt{k\beta}$ متناسب است. معادله اصلی حالت تعادل نیز اصلاح می‌شود که این مساله ممکن است ترمودینامیک سیستم را تحت تاثیر قرار دهد. معادله ماکروسکوپیک حاکم، که از معادله (۳-۳۳) گرفته می‌شود، با شرط میدان سرعت بدون واگرایی به صورت زیر هستند [۱۹۳]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u_i \frac{\partial \rho}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\lambda \left(\frac{\partial \rho}{\partial x_j} - \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \right) \right] \quad (38-3)$$

عبارت‌های سمت راست معادله (۳-۳۸) ریشه در تفاوت میان فشار ترمودینامیک و فشار هیدرودینامیک دارند و از آنجا که فشار هیدرودینامیک قابل صرف نظر کردن است، معادله (۳-۳۸) به معادله زیر تبدیل می‌شود:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u_i \frac{\partial \rho}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \rho \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \right) \quad (39-3)$$

که در آن $\lambda \rho = \frac{\mu}{C_s^2}$ به عنوان کمیت تحرک^۱ در معادله کان - هیلارد با عبارت همرفت عمل

می‌کند [۲۰۱، ۲۰۵].

۷-۳ جداسازی معادلات بولتزمن شبکه‌ای با دو تابع توزیع

در نهایت، آنچه که در بخش‌های قبلی مورد بحث و بررسی قرار گرفت را می‌توان در قالب

^۱ mobility

معادلات گسسته در بازه زمانی δt به صورت زیر بیان کرد:

$$g_{\alpha}(x+e_{\alpha}\delta t, t+\delta t)-g_{\alpha}(x, t)=-\int_t^{t+\delta t} \frac{g_{\alpha}-g_{\alpha}^{eq}}{\lambda} dt + \quad (40-3)$$

$$\int_t^{t+\delta t} \frac{(e_{ai}-u_i)^2}{C_s^2} [\Pi_{\alpha}(u)-\Pi_{\alpha}(0)] dt$$

$$+ \int_t^{t+\delta t} \frac{(e_{ai}-u_i)}{C_s^2} [k\partial_i(\partial_k\rho\partial_k\rho)-k\partial_j(\partial_i\rho\partial_j\rho)]$$

$$\Pi_{\alpha}(u)dt$$

در این روابط، انتگرال زمانی $[t, t+\delta t]$ با انتگرال مکانی $[x, x+e_{\alpha}\delta t]$ هم گام شده است. تحلیل انسگوک-چاپمن نشان می دهد که قانون دوزنقه ای برای انتگرال گیری باید مورد استفاده قرار گیرد. زیرا از به وجود آمدن مشتقات پارازیتی در سیستم، در حالی که دقت از مرتبه ۲ است، جلوگیری می شود. اعمال قانون دوزنقه ای رابطه زیر را برای تابع توزیع g_{α} نتیجه می دهد:

$$g_{\alpha}(x+e_{\alpha}\delta t, t+\delta t)-g_{\alpha}(x, t)=-\frac{g_{\alpha}-g_{\alpha}}{2\zeta}\Big|_{(x,t)}-\frac{g_{\alpha}-g_{\alpha}}{2\zeta}\Big|_{(x+e_{\alpha}\delta t, t+\delta t)}+\frac{\delta t}{2}\frac{(e_{ai}-u_i)\delta_i\rho C_s^2}{C_s^2} \quad (41-3)$$

$$[\Pi_{\alpha}(u)-\Pi_{\alpha}(0)]_{x,t}+\frac{\delta t}{2}\frac{(e_{ai}-u_i)\delta_i\rho C_s^2}{C_s^2}[\Pi_{\alpha}(u)-\Pi_{\alpha}(0)]_{x,t}$$

$$+\frac{\delta t}{2}\frac{(e_{ai}-u_i)}{C_s^2}[k\partial_j(\partial_k\rho\partial_k\rho)-k\partial_j(\partial_i\rho\partial_j\rho)]\Pi_{\alpha}(u)\Big|_{x,t}$$

$$+\frac{\delta t}{2}\frac{(e_{ai}-u_i)}{C_s^2}[k\partial_i(\partial_k\rho\partial_k\rho)-k\partial_j(\partial_i\rho\partial_j\rho)]\Pi_{\alpha}(u)\Big|_{(x+e_i\delta t, t+\delta t)}$$

که در آن $\tau = \frac{\lambda}{\delta t}$ است. مشابه معادلات بالا را می توان برای f_{α} نیز نوشت:

$$f_{\alpha}(x+e_{\alpha}\delta t, t+\delta t)-f_{\alpha}(x, t)=-\frac{f_{\alpha}-f_{\alpha}^{eq}}{2\zeta}\Big|_{(x,t)}-\frac{f_{\alpha}-f_{\alpha}^{eq}}{2\zeta}\Big|_{(x+e_i\delta t, t+\delta t)} \quad (42-3)$$

$$+\frac{\partial t}{2}\frac{(e_{ai}-u_i)}{C_s^2}[\partial_i\rho C_s^2-\rho\partial_i(\varphi-k\partial_j^2\rho)]\Pi_{\alpha}(u)\Big|_{x,t}+$$

$$\frac{\partial t}{2}\frac{(e_{ai}-u_i)}{C_s^2}[\partial_i\rho C_s^2-\rho\partial_i(\varphi-k\partial_j^2\rho)]\Pi_{\alpha}(u)\Big|_{(x+e_i\delta t, t+\delta t)}$$

معادلات بالا در سه مرحله می تواند حل شود:

مرحله برخورد قبل از هدایت:

$$\bar{g}_\alpha(x, t) = g_\alpha(x, t) - \frac{1}{2\zeta} (g_\alpha - g_\alpha^{eq})|_{(x, t)} + \frac{\partial t}{2} \frac{(e_{ai} - u_i) \partial_i \rho c_s^2}{c_s^2} \quad (43-3)$$

$$[\Pi_\alpha(u) - \Pi_\alpha(0)]_{x, t} + \frac{\partial t}{2} \frac{(e_{ai} - u_i)}{c_s^2} [k \partial_i (\partial_k \rho \partial_k \rho) - k \partial_j (\partial_i \rho \partial_j \rho)] \Pi_\alpha(u)|_{x, t}$$

$$\bar{f}_\alpha(x, t) = f_\alpha(x, t) - \frac{1}{2\zeta} (f_\alpha - f_\alpha^{eq})|_{(x, t)} + \frac{\partial t}{2} (e_{ai} - u_i) \partial_i \rho c_s^2 - \rho \partial_i (\varphi - k \partial_k^2 \rho) \Pi_\alpha(u)|_{(x, t)} \quad (44-3)$$

مرحله هدایت تابع توزیع‌های محاسبه شده:

$$\bar{g}_\alpha(x + e_\alpha \delta t, t + dt) = \bar{g}_\alpha(x, t) \quad (45-3)$$

$$\bar{f}_\alpha(x + e_\alpha \delta t, t + dt) = \bar{f}_\alpha(x, t) \quad (46-3)$$

مرحله برخورد پس از هدایت:

$$g_\alpha(x + e_\alpha \delta t, t + \delta t) = \bar{g}_\alpha(x + e_\alpha \delta t, t + \delta t) - \frac{1}{2\zeta + 1} (g_\alpha - g_\alpha^{eq})|_{(x + e_\alpha \delta t, t + \delta t)} + \frac{2\zeta}{2\zeta + 1} \frac{\partial t}{2} \frac{(e_{ai} - u_i) \partial_i \rho c_s^2}{c_s^2} [\Pi_\alpha(u) - \Pi_\alpha(0)]_{(x + e_\alpha \delta t, t + \delta t)} + \frac{2\zeta}{2\zeta + 1} \frac{\partial t}{2} \frac{(e_{ai} - u_i)}{c_s^2} [k \partial_i (\partial_k \rho \partial_k \rho) - k \partial_j (\partial_i \rho \partial_j \rho)] \Pi_\alpha(u)|_{(x + e_\alpha \delta t, t + \delta t)} \quad (47-3)$$

$$f_\alpha(x + e_\alpha \delta t, t + \delta t) = \bar{f}_\alpha(x + e_\alpha \delta t, t + \delta t) - \frac{1}{2\zeta + 1} (\bar{f}_\alpha - f_\alpha^{eq}) + \frac{2\zeta}{2\zeta + 1} \frac{\partial t}{2} \frac{(e_{ai} - u_i)}{c_s^2} [\partial_i \rho c_s^2 - \rho \partial_i (\varphi - k \partial_k^2 \rho)] \Pi_\alpha(u) \quad (48-3)$$

بنابر مطالب گفته شده، چگالی، سرعت و فشار هیدرودینامیک بعد از مرحله هدایت به صورت

زیر محاسبه می‌شود:

$$\rho = \sum_\alpha \bar{f}_\alpha \quad (49-3)$$

$$\rho_{ui} = \sum_\alpha e_\alpha \bar{g}_\alpha + \frac{\delta t}{2} k \left[\frac{\delta}{\partial x_i} \left(\frac{\delta \rho}{\partial x_k} \frac{\delta \rho}{\partial x_i} \right) - \frac{\delta}{\partial x_j} \left(\frac{\delta \rho}{\partial x_i} \frac{\delta \rho}{x_j} \right) \right]$$

$$\rho = \sum_\alpha \bar{g}_\alpha + \frac{\partial t}{2} u_i \frac{\partial \rho c_s^2}{\partial x_i} \quad (50-3)$$

که دو مرحله برخورد قبل و بعد از هدایت می‌توانند با هم ترکیب شوند [۱۸۳]. اما در شبیه‌سازی اولیه‌ای که لی انجام داد، از همین الگوریتم سه مرحله‌ای برای حل و نشان دادن توانایی روش پیشنهادی خود استفاده کرد و زمان آرام‌سازی را به صورت زیر معرفی نمود [۲۱۰]:

$$\zeta = c\tau_l - (1-c)\tau_v \quad (51-3)$$

که در آن τ_l و τ_v به ترتیب زمان آسایش حالت مایع و بخار می‌باشد. و c کامپوزیشن یا ترکیب است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$c = (\rho - \rho_v^{sat}) / (\rho_l^{sat} - \rho_v^{sat}) \quad (52-3)$$

و رابطه لزجت سینماتیکی، طبق رابطه زیر، با زمان آسایش در ارتباط است:

$$\nu = \pi \zeta^2 \delta t \quad (53-3)$$

۳-۸ گسسته‌سازی عبارت‌های نیرویی

از آنجایی که مرحله هدایت^۱ نه خطای عددی و نه اتلاف ایجاد می‌کند، مرحله برخورد^۲ می‌بایست مکانیزم حل را پایدار نگه دارد. در این رابطه، گسسته‌سازی مکانی و زمانی و مشتق‌های موجود در معادله تابع توزیع برخورد نقش حیاتی را ایفا می‌کنند. اگر به طور صریح در مورد این مسئله صحبت شود، باید گفت که مشتق‌های جهتی^۳ محدودیت‌های شدیدی را در هر گام زمانی و حتی اندازه شبکه‌ها ایجاد می‌کنند. به عنوان مثال، در LBE، برای کمیت مرتبه، بالاترین مرتبه عبارت نیرویی، مشتق جهتی چگالی $e_\alpha \cdot \nabla \rho \Pi$ است که، طبق رابطه زیر، از مرتبه‌ای معادل با تابع توزیع f است:

$$o(e_\alpha \cdot \nabla \rho \Pi) \approx o(e_\alpha \cdot \nabla f_\alpha) \quad (54-3)$$

بنابراین، واضح است که در اعمال صریح مشتق‌های جهتی چگالی باید نهایت دقت صورت گیرد.

¹ Streaming step

² Collision

³ Directional derivatives

علاوه بر این، گسسته‌سازی مکانی باید به اندازه کافی هموار و دقیق باشد تا پایداری و دقت مرتبه دوم معادلات LBE را پوشش دهد. جداسازی مرتبه پایین، دقت معادلات را خدشه‌دار می‌کند و در عین حال گسسته‌سازی مرتبه‌های بالاتر ممکن است لرزش، سرعت و ناپایداری‌های ناخواسته‌ای به وجود آورند. از این رو، الگوی پیمایش زمانی غیرصریح برای جداسازی (گسسته‌سازی) معادلات بولتزمن و به عنوان یک رویکرد دقیق و پایدار برای عبارت نیروی بین‌مولکولی مورد استفاده قرار گرفته است. برای روشن‌شدن جداسازی مشتق‌های جهتی در LBE، معادله یک‌بعدی همرفت زیر را با یک عبارت منبع در نظر بگیرید:

$$\frac{d\varphi}{dt} + e \frac{d\varphi}{dx} = e \frac{ds(\varphi)}{dx} \quad (55-3)$$

که در آن φ می‌تواند تابع توزیع ذره، $s(\varphi)$ تابعی از φ و e سرعت همرفت ثابت در نظر گرفته شود. این معادله می‌تواند رفتار CBE را بدون تاثیر عبارت برخورد و عبارت‌های مرتبه بالاتر تقلید کند. برای ساده‌سازی تحلیل، s فرض می‌شود که تابعی خطی از φ باشد. به عنوان مثال $s = k\varphi$. در این مورد خاص، معادله مدل به یک معادله همرفت با سرعت همرفت $e(1-k)$ کاهش داده می‌شود. همانند جداسازی صورت گرفته در مورد معادلات LBE، معادله مدل به صورت زیر جداسازی می‌شود:

$$\varphi(x + e\delta t, t + \delta t) - \varphi(x, t) = \int_t^{t+\delta t} Ke \frac{d\varphi}{dx} dt \quad (56-3)$$

سمت چپ معادله بالا عاری از خطاهای عددی است زیرا حل دقیق معادله همرفت است. تنها مسئله‌ای که باقی می‌ماند حل سمت راست معادله بالاست که یک انتگرال است. یک طرح گسسته‌سازی خوب می‌بایست پروفیل اولیه φ را بدون هیچگونه نوسانی در طول فرآیند همرفت ایجاد کند. اعمال قانون دوزنقه‌ای منتهی می‌شود به معادله زیر:

$$\varphi(x + e\delta t, t + \delta t) - \varphi(x, t) = \frac{ke\delta t}{2} \left(\frac{d\varphi}{dx} \Big|_{(x+e\delta t, t+\delta t)} - \frac{d\varphi}{dx} \Big|_{(x, t)} \right) \quad (57-3)$$

که می‌توان مانند معادلات LBE در سه مرحله حل شود:

مرحله قبل از هدایت:

$$\bar{\varphi}(x, t) = \varphi(x, t) + \frac{ke\delta t}{2} \frac{d\varphi}{dx} \Big|_{(x, t)} \quad (58-3)$$

مرحله هدایت:

$$\bar{\varphi}(x + e\delta t, t + \delta t) = \bar{\varphi}(x, t) \quad (59-3)$$

مرحله بعد از هدایت:

$$\varphi(x + e\delta t, t + \delta t) - \frac{ke\delta t}{2} \frac{d\varphi}{dx} \Big|_{(x + e\delta t, t + \delta t)} = \bar{\varphi}(x + e\delta t, t + \delta t) \quad (60-3)$$

یک الگوی جداسازی مطلوب برای مشتقات جهتی باید پایدار و از مرتبه ۲ باشد که انتخاب رایج برای آن تفاضل بایسد^۱ مرتبه اول است [۱۷۲، ۱۵۸].

۳-۹ تفاضل مرکزی مرتبه دوم

$$e\delta t \frac{d\varphi}{dx} \Big|_{(x)} = \frac{\varphi(x + e\delta t) - \varphi(x - e\delta t)}{2} \quad (61-3)$$

علاوه بر دقت مرتبه دوم، الگوی تفاضل مرتبه دوم تقارون را نیز ایجاد می‌کند. نکته اصلی تفاضل مرکزی مرتبه دوم در محاسبه مشتق‌های جهتی، خطای پراکندگی^۲ ناشی از پشتیبانی محاسبات غیرفشرده^۳ است. بر این اساس، معادله (۵۷-۳) با تفاضل مرکزی مرتبه دوم به چهار نقطه احتیاج دارد. و برای یک گسسته‌سازی منسجم (فشرده)، بسط سری تیلور حول نقطه $(x + e\delta t)$ می‌تواند استفاده شود:

$$\frac{d\varphi}{dx} \Big|_{(x)} = \left[\frac{d\varphi}{dx} - e\delta t \frac{d^2\varphi}{dx^2} \right]_{(x + e\delta t)} + o(\delta x^2) \quad (62-3)$$

اولین عبارت داخل براکت در سمت راست معادله بالا، یک تقریب مرتبه پایین برای مشتق

¹ biased

² Dispersion error

³ Non-compact computational supports

سمت راست و عبارت دوم سمت راست معادله (۳-۶۲) می تواند به عنوان عبارت اصلاحی در نظر گرفته شود.

۳-۱۰ تفاضل یک طرفه مرتبه دوم

این تفاضل از رابطه زیر حاصل می شود:

$$e\delta \frac{d\varphi}{dx}\bigg|_{(x)} = \frac{-\varphi(x+2e\delta) + 4\varphi(x+e\delta) - 3\varphi(x)}{2} \quad (۳-۶۳)$$

با تفاضل بایسد مرتبه دوم معادله (۵۷-۳) می تواند به صورت زیر بازنویسی شود:

$$\varphi(x+e\delta, t+\delta) - \varphi(x, t) = \frac{ke\delta}{2} \left(\frac{d\varphi}{dx}\bigg|_{(x+e\delta, t+\delta)} + \frac{d\varphi}{dx}\bigg|_{(x, t)} \right) \quad (۳-۶۴)$$

که مشتق جهتی در $(x+e\delta, t+\delta)$ ، با استفاده از الگوی مرکزی مرتبه دوم، جهت تقارون، گسسته سازی می شود. به طور کلی، الگوی مرکزی مرتبه دوم، نوساناتی را در لبه جلویی موج ایجاد می کند. در حالی که الگوی بایسد عملکرد بهتری را نشان می دهد. بنابراین منطقی به نظر می رسد که الگویی برای مشتق در نظر گرفته شود که هر دو مشتق مرتبه مرکزی و بایسد را شامل شود، که الگوی مشتق مختلط مرتبه دوم ریشه در این ایده دارد.

۳-۱۱ تفاضل مختلط مرتبه دوم

تفاضل مختلط مرتبه دوم به صورت زیر در نظر گرفته می شود:

$$\frac{d\varphi}{dx}\bigg|_{(x)} = \frac{d\varphi}{dx}\bigg|_{(x)}^{2B}, \text{ if } \left(\frac{d\varphi}{dx}\bigg|_{(x)}^{2B} \times \frac{d\varphi}{dx}\bigg|_{(x)}^{2c} \geq 0 \right) \quad (۳-۶۵)$$

$$\frac{d\varphi}{dx}\bigg|_{(x)} = \frac{d\varphi}{dx}\bigg|_{(x)}^{2c}, \text{ if } \left(\frac{d\varphi}{dx}\bigg|_{(x)}^{2B} \times \frac{d\varphi}{dx}\bigg|_{(x)}^{2c} < 0 \right)$$

که در آن $\frac{d\varphi}{dx}\bigg|_{(x)}^{2c}$ نشان گر هموار بودن و $\frac{d\varphi}{dx}\bigg|_{(x)}^{2c}$ یک تقریب مرتبه پایین تر برای $\frac{d\varphi}{dx}\bigg|_{(x)}^{2B}$ است

و همواره یک پروفیل یکنواخت تولید می‌کند. اگر $\frac{d\varphi}{dx}\bigg|_{(x)}^{2c}$ علامت متفاوتی از $\frac{d\varphi}{dx}\bigg|_{(x)}^{2B}$ داشته باشد،

محاسبات به سادگی به سمت $\frac{d\varphi}{dx}\bigg|_{(x)}^{2c}$ میل می‌کند. این نکته قابل توجه است که تفاضل مختلط در

واقع از دقت مرتبه دوم است زیرا از مشتقات مرتبه دوم تشکیل یافته است. مشتقات موجود، متفاوت

از مشتقات جهتی، می‌توانند با گسسته‌سازی مرتبه دوم یک‌بعدی مرکزی، برای مشتقات مرتبه اول و

دوم محاسبه شود. اگر چه این مسئله، بر پایداری کلی حل تاثیرگذار نمی‌باشد، برای محاسبه مشتقات

مرتبه اول و دوم می‌توان از روابط زیر استفاده کرد:

$$\frac{d\varphi}{dx} = \sum_{\alpha \neq 0} t_{\alpha} e_{\alpha}^i [\varphi(x + e_{\alpha} \delta t) - \varphi(x - e_{\alpha} \delta t)] / 2c_s^2 \delta t \quad (66-3)$$

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \sum_{\alpha \neq 0} t_{\alpha} [\varphi(x + e_{\alpha} \delta t) - 2\varphi(x) + \varphi(x - e_{\alpha} \delta t)] / 2c_s^2 \delta t \quad (67-3)$$

که در آن i بردار واحد در جهت i ام محور مختصات است. معادله (۶۶-۳) در معادلات LBE در

ضرب داخلی بردار سرعت ظاهر می‌شود که از مرتبه ماخ است. بنابراین سهم آن در خطای گرد کردن

بسیار کوچک‌تر از مشتقات جهتی است. معادله (۶۷-۳) نیز برای محاسبه شکل پتانسیلی نیروی کشش

سطحی مورد مورد استفاده قرار می‌گیرد.

۱۲-۳ شرایط مرزی متداول در روش شبکه‌ای بولتزمن

یکی از مهمترین و اساسی‌ترین موضوعات در هر شبیه‌سازی عددی، شروط مرزی مناسب

می‌باشد. تفاوت روش بولتزمن شبکه‌ای با روش‌های سنتی متداول در CFD این است که شرایط مرزی

در این روش از طریق توابع توزیع اعمال می‌شوند. برخی شرایط مرزی متداول در شبکه بولتزمن بر

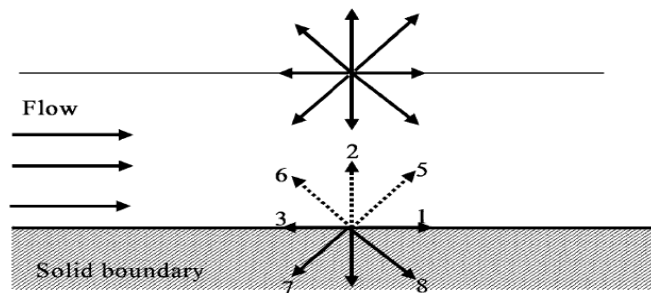
اساس معادلات بولتزمن پیوسته ارائه می‌گردند که شرح کاملی از آنها را در پژوهش‌های متعددی

می‌توان یافت [۱۲، ۱۴، ۲۱۱، ۲۱۲].

۱-۱۲-۳ شرط مرزی برخورد و بازگشت

این شرط مرزی به وفور در شبیه‌سازی‌های بولتزن مورد استفاده قرار می‌گیرد. از موارد مهم استفاده از این شرط، شبیه‌سازی شرط عدم لغزش در دیواره‌هاست. نحوه اعمال آن به این صورت است که تابع توزیع پس از برخورد به دیواره، در راستای حرکت خود، منعکس می‌شود. بر اساس آنچه در شکل ۲-۳ دیده می‌شود، می‌توان شرط مرزی برخورد و بازگشت را برای دیوار پایین، به عنوان مثال، برای یک جریان به صورت زیر نوشت:

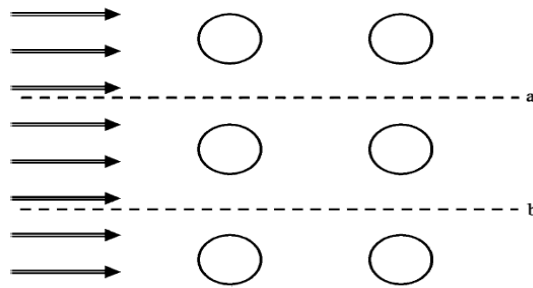
$$f_5 = f_7 \quad f_2 = f_4 \quad f_6 = f_8 \quad (۶۸-۳)$$



شکل ۲-۳: جریان روی سطح و بردارهای D2Q9 بر روی مرزهای بالا و پایین [۱۴]

۲-۱۲-۳ شرط مرزی تناوبی

مفهوم شرط مرزی تناوبی این است که مولفه‌های معلوم در خروجی با مقادیر مجهول متناظر در ورودی جایگزین می‌گردند. عکس این مطلب برای مقادیر ورودی هم صادق است. به این ترتیب به عنوان مثال در شرط مرزی تناوبی بر اساس شکل ۳-۳ شرایط مرزی در بالای خط a باید با شرایط موجود در زیر خط b مشابه باشد.



شکل ۳-۳: جریان روی سطح و شرط مرزی تناوبی [۱۴]

$$f_{4a} = f_{4b} \quad f_{7a} = f_{7b} \quad f_{8a} = f_{8b} \quad (۶۹-۳)$$

۳-۱۲-۳ شرط مرزی سرعت ثابت

در این شرط مرزی، سرعت‌های عمودی و مماس بر مرز مشخص می‌باشند. روند اجرای چنین شرط مرزی، را برای یک مرز (مثلا مرز سمت چپ) در شبکه D_2Q_9 که مورد استفاده در مکانیک سیالات است ارائه می‌گردد. توابع توزیع مجهول که در مرز سمت چپ به عنوان ورودی باید مشخص شوند f_1, f_5, f_8 می‌باشند. ژو و هی [۱۲] شرح کاملی از روش محاسبه توابع توزیع مجهول را در این شرط مرزی ارائه می‌دهند که از محاسبه معادله پیوستگی آغاز می‌گردد.

$$\rho = f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8 + f_9 \quad (۷۰-۳)$$

برای سرعت در جهت x و y به ترتیب می‌توان نوشت:

$$\rho u = f_1 + f_5 + f_8 - f_6 - f_3 - f_7 \quad (۷۱-۳)$$

$$\rho v = f_5 + f_2 + f_6 - f_7 - f_4 - f_8 \quad (۷۲-۳)$$

در معادلات بالا، سه مجهول توابع توزیع و یک مجهول ρ وجود دارد. بنابراین چهار مجهول وجود دارد در حالی که سه معادله از معادلات بولتزمن حاصل می‌شود. بنابراین یک معادله دیگر برای محاسبه مجهول چهارم مورد نیاز می‌باشد. اگر فرض شود که سرعت در جهت x در ورودی مقدار مشخص u_w و در جهت y مقدار v_w را داشته باشد، معادلات بالا به صورت زیر خواهند شد:

$$\rho_w = f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8 \quad (73-3)$$

$$\rho_w u_w = f_1 + f_5 + f_8 - f_6 - f_3 - f_7$$

$$\rho_w v_w = f_5 + f_2 + f_6 - f_7 - f_4 - f_8 \quad (74-3)$$

$$\rho_w v_w = f_5 + f_2 + f_6 - f_7 - f_4 - f_8 \quad (75-3)$$

معادله چهارمی که پیشنهاد می شود استفاده از شرط تابع توزیع تعادل عمود بر مرز است:

$$f_1 - f_1^{eq} = f_3 - f_3^{eq} \quad (76-3)$$

که در آن معادلات f_1^{eq} و f_3^{eq} به صورت زیر خواهند بود:

$$f_1^{eq} = \frac{1}{9} \rho_w \left[1 + 3u_w + \frac{9}{2} u_w^2 - \frac{3}{2} (u_w^2 + v_w^2) \right] \quad (77-3)$$

$$f_3^{eq} = \frac{1}{9} \rho_w \left[1 - 3u_w + \frac{9}{2} u_w^2 - \frac{3}{2} (u_w^2 + v_w^2) \right] \quad (78-3)$$

با جایگزینی معادلات بالا نتیجه می شود:

$$f_1 = f_3 + \frac{2}{3} \rho_w u_w \quad (79-3)$$

و همینطور برای دیگر مجهولات خواهیم داشت:

$$\rho_w = \frac{1}{1-u_w} [f_0 + f_2 + f_4 + 2(f_3 + f_6 + f_7)] \quad (80-3)$$

$$f_5 = f_7 - \frac{1}{2} (f_2 - f_4) + \frac{1}{6} \rho_w u_w + \frac{1}{2} \rho_w v_w \quad (81-3)$$

$$f_8 = f_6 + \frac{1}{2} (f_2 - f_4) + \frac{1}{6} \rho_w u_w - \frac{1}{2} \rho_w v_w \quad (82-3)$$

شرایط سرعت مرزی مشخص برای دیگر مرزها نیز به همین صورت محاسبه می گردد.

۴-۱۲-۳ شرط مرزی تقارن

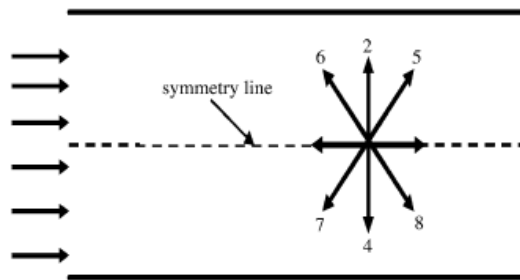
بسیاری از مسائل مطرح در شبیه سازی شامل هندسه ها یا شرایط متقارن می باشند. بنابراین،

محاسبات مربوط به یک بخش از دامنه حل، از نظر زمان لازم برای محاسبات، بسیار مفید خواهد بود.

در واقع، شرط مرزی تقارن بیان می کند که جریان بالای خط تقارن، تصویر آینه ای از شرایط خط زیر

تقارون است. این شرایط مرزی، مانند آنچه در شکل ۳-۴ نشان داده شده است، شرط مرزی تقارون برای مرز بالا به صورت زیر خواهد بود:

$$f_5 = f_8 \quad f_2 = f_4 \quad f_6 = f_7 \quad (۳-۸۳)$$



شکل ۳-۴: شرط مرزی تقارن [۱۴]

۳-۱۲-۵ شرط مرزی جریان خروجی باز

در برخی از شرایط مرزی سرعت خروجی نامشخص است. یکی از شرایط مرزی متداول در این شرایط استفاده از برون‌یابی برای بدست آوردن توابع توزیع مجهول می‌باشد. اگر این شرایط مرزی مثلاً برای سمت راست یک جریان محاسبه شود خواهیم داشت:

$$f_{3,n} = 2f_{3,n-1} - f_{3,n-2} \quad f_{6,n} = 2f_{6,n-1} - f_{6,n-2} \quad f_{7,n} = 2f_{7,n-1} - f_{7,n-2} \quad (۳-۸۴)$$

۳-۱۳ جمع‌بندی

وجود سرعت‌های پارازیتی در مرز بین دوفاز و قابلیت روش در حل مسائلی که دارای چگالی و لزجت بالایی هستند، از چالش‌های روش‌های مطرح در زمینه روش‌های حل عددی مسائل دوفاز بوده‌اند. لی روشی را پیشنهاد کرد که در آن، برخلاف دیگر روش‌های موجود، از دو تابع توزیع برای محاسبه کمیت‌های ماکروسکوپیک استفاده می‌کرد. در واقع الگوی پیشنهادی لی، طرحی توسعه یافته‌تر از هی بود که در آن از اصول و ناپایداری‌های ترمودینامیکی برای شبیه‌سازی سطح بین دوفاز

استفاده می‌کرد. بر این اساس، سطح پایدار سطحی است که در آن انرژی در کمترین مقدار است. استفاده از معادله انرژی و معادله انتشار کان-هیلارد در مدل ارائه شده لی، منتهی به کاهش چشم‌گیر سرعت‌های پارازیتی گردید و در تحقیقات بعدی لی و همکارانش، با تغییراتی جزئی در معادلات روش، این سرعت‌ها تقریباً به طور کامل حذف گردید. علاوه بر این، روش قابلیت شبیه‌سازی در نسبت چگالی و لزجت بالا را نشان می‌داد. همچنین، این روش مدل مناسبی برای شبیه‌سازی‌های تغییر فاز ارائه می‌داد. مجموع قابلیت‌های گفته شده در این روش، آن را برای کاربرد در زمینه‌های مختلف شبیه‌سازی مناسب نشان می‌دهد. از این رو، برای مدل‌سازی رساله حاضر نیز در نظر گرفته شده است.

فصل چہارم

نتائج

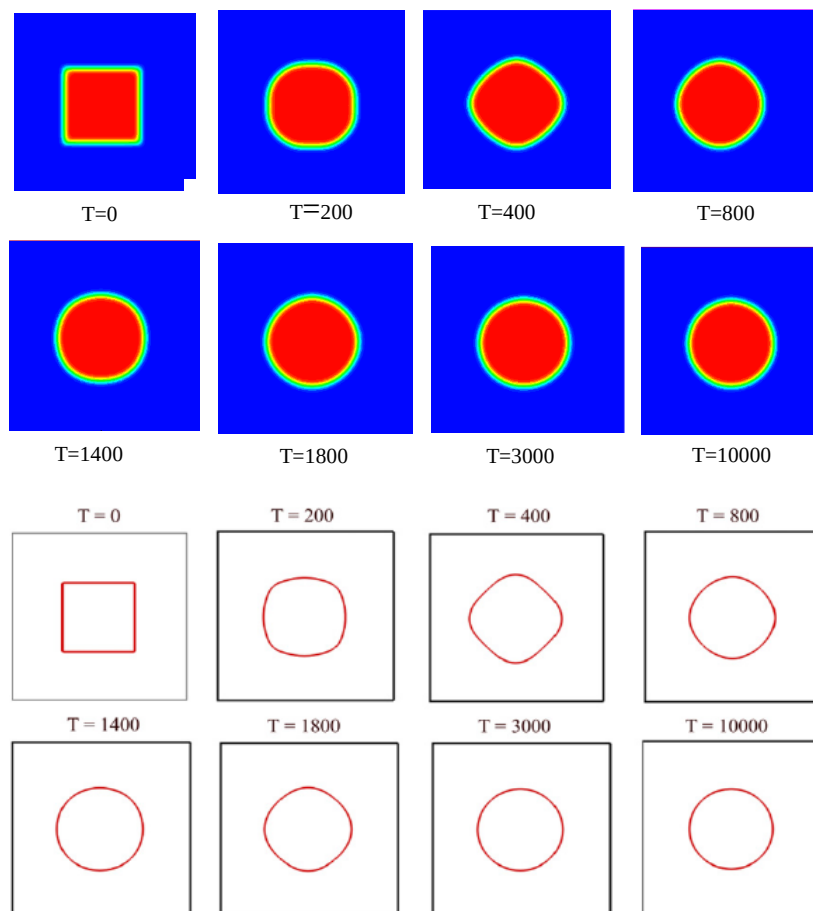
۴-۱ شبیه‌سازی حباب استاتیک

۴-۱-۱ مقدمه

در آغاز بررسی روش عددی، ابتدا نمونه‌ای ساده، برای بدست آوردن اطلاعات پایه در مورد معادلات به کار رفته در آن، کمیت‌های مهم و درک تاثیر هر کدام از کمیت‌های مطرح، مورد بررسی قرار می‌گیرد. در مسائل دوفاز به روش بولتزمن شبکه‌ای، اولین گام برای بدست آوردن اطلاعات ذکر شده، شبیه‌سازی حباب استاتیک است.

۴-۱-۲ شبیه‌سازی حباب استاتیک

حباب استاتیک معمولاً به دو صورت شبیه‌سازی می‌گردد. به صورت یک قطره مربع شکل در سیالی دیگر، به این صورت که در طی زمان، قطره تغییر شکل‌های مشخصی پیدا می‌کند و در نهایت به صورت دایره در می‌آید. مورد دوم، به صورت بررسی قطره دایروی در مرکز یک سیال زمینه است که به بررسی صحت معادله لاپلاس می‌پردازد. در این راستا، یک قطره مربعی با ابعاد 40×40 در مرکز مربعی بزرگتر با ابعاد 100×100 قرار داده شد. چگالی‌ها یکسان و لزجت‌ها برای هر دو سیال $\nu = 0.03333$ در نظر گرفته شده است. نتایج در گام‌های زمانی یکسان با پژوهش تقی‌لو و همکاران [۲۱۳] در شکل ۴-۱ الف و ب نمایش داده شده است. مشاهده می‌شود که، یافته‌ها تطابق رضایت‌بخشی را با یکدیگر نشان می‌دهند.



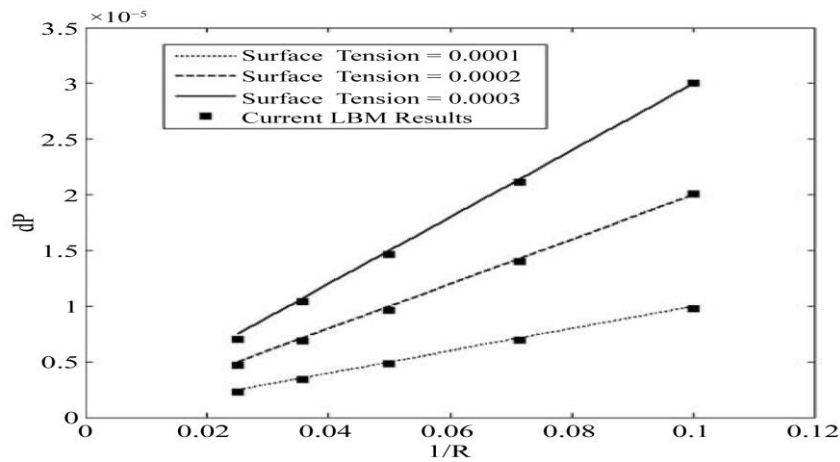
شکل ۱-۴: بررسی تغییر شکل حباب استاتیک مربعی با لزجت 0.0333 [۲۱۳]

۳-۱-۴ معادله لاپلاس

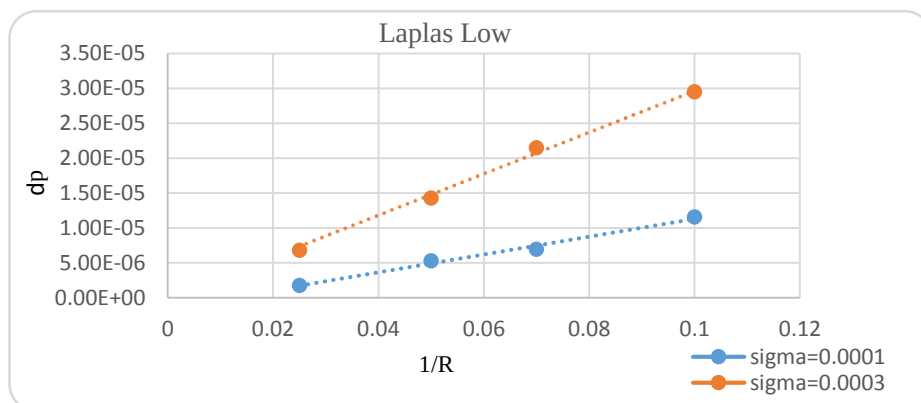
Δp در معادله لاپلاس بیانگر اختلاف فشار درون و بیرون حباب است که توسط کشش سطحی بین دو سیال به حالت تعادل می‌رسد. بر این اساس، این اختلاف پس از رسیدن به حالت تعادل در معادله لاپلاس صدق می‌کند. در بخش نخست این پژوهش، هر دو صورت از صحت‌سنجی انجام گرفته است. شکل ۲-۴ و شکل ۳-۴ مربوط به قطره کروی و بررسی قانون لاپلاس است. همانطور که در نمودار مشخص است، قانون لاپلاس برای هر دو مورد شبیه‌سازی حاضر و پژوهش میرزایی و رحیمیان [۲۱۴] کاملاً منطبق بوده و آن را ارضا می‌کند. شکل ۴-۴ تغییر فشار حباب را تا رسیدن به حالت تعادل، در دو مقدار مشخص کشش سطحی (σ) که در فضای محاسباتی 100×100 ،

$\rho_l = 0.12$ ، $\rho_h = 1$ و $\tau = 0.5$ انجام شده است و شکل ۴-۶ تغییرات چگالی بر اساس تابعی از فاصله

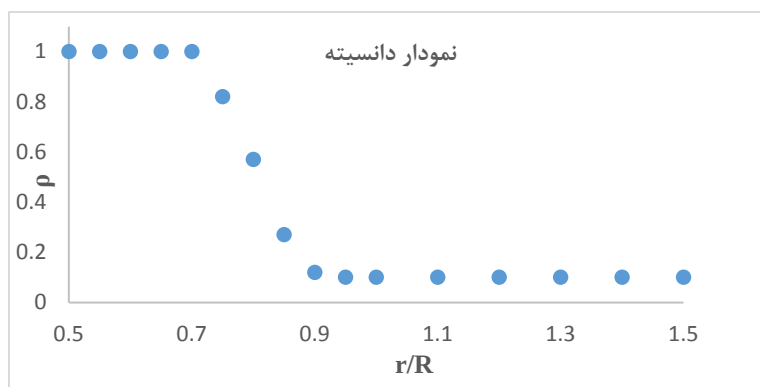
از مرکز دایره نشان می‌دهد.



شکل ۴-۲: بررسی قانون لاپلاس مربوط به شبیه‌سازی [۲۱۴]

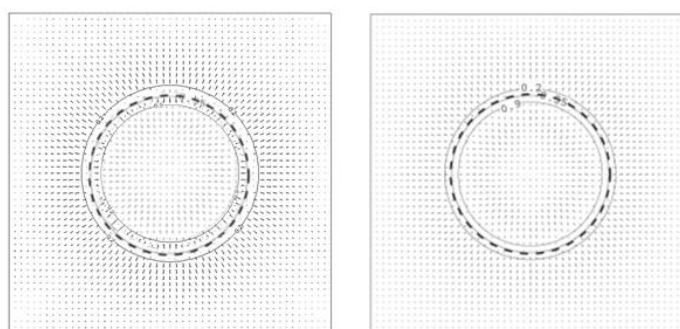


شکل ۴-۳: بررسی قانون لاپلاس مربوط به شبیه‌سازی حاضر



شکل ۴-۴: تغییرات چگالی به صورت تابعی از فاصله از مرکز دایره

همچنین الگو و مقادیر سرعت‌های پارازیتی را می‌توان برای حباب استاتیک محاسبه کرد که در شکل ۴-۵ و جدول ۴-۱ نتایج حاصل از شبیه‌سازی حاضر با نتایج لی [۲۳۰] مقایسه شده است. در روش لی، ادی‌هایی که در اطراف قطره، در روش‌های قبلی بولترمن شبکه‌ای وجود داشت برداشته شد و مرتبه سرعت‌های پارازیتی به حد قابل قبولی کاهش یافت. به صورتی که امکان شبیه‌سازی جریان‌های دوفازی را تا نسبت چگالی و لزجت ۱۰۰۰ فراهم می‌کرد.



شکل ۴-۵: مقایسه سرعت‌های پارازیتی با نتایج الف) لی [۲۳۰] و ب) شبیه‌سازی حاضر

جدول ۴-۱: مقادیر سرعت‌های پارازیتی در قطره ساکن

Maximum value of parasitic currents in terms of Mach number				
	Shan-chen	Nourgaliev	Lee [230]	present
Ma_{max}	3×10^{-2}	2×10^{-4}	8×10^{-15}	5.44×10^{-12}

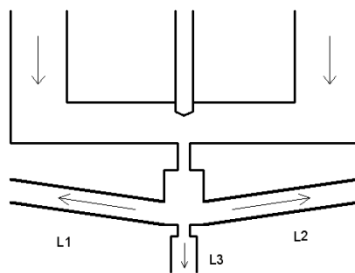
۴-۲ بررسی دینامیک قطره متحرک در کانال افقی

در این بخش، رفتار یک قطره در یک کانال افقی بررسی شده و سپس برای بررسی بیشتر، دینامیک یک قطره متحرک در یک کانال افقی در برخورد با یک مانع ق و تغییر شکل قطره، ناشی از برخورد با مانع مورد تحلیل قرار گرفته است. بسیاری از پژوهش‌های انجام شده در این زمینه از یک مانع مربعی برای تقسیم قطره استفاده می‌کنند. با بکارگیری یک مانع مثلثی، می‌توان بدون تغییر جایگاه مانع، قطره متحرک را به دو قسمت نامساوی تقسیم نمود. تقسیم نابرابر قطره می‌تواند با تغییر زاویه راس مانع، ابعاد مانع و یا چرخش آن ایجاد شود. به این منظور، سه زاویه قرارگیری و تاثیر عدد وبر، که عدد بی‌بعد موثر در بررسی دینامیک قطره متحرک می‌باشد، مورد بررسی قرار گرفته است.

۴-۲-۱ مقدمه

سیستم‌های دوفاز، خصوصاً سیستم‌های بر پایه قطره، به دلیل کاربردهای متعدد در فرآیندهای شیمیایی و خالص‌سازی نفت و گاز، پژوهش‌های تجربی متعددی را به خود اختصاص داده است. بررسی دینامیک قطره‌های متحرک، تقسیم‌شدن و به‌هم‌پیوستن آن‌ها از موضوعات مهم و مورد بررسی در هندسه‌های مختلف است. در پژوهش موسوی و همکاران [۲۱۵]، فرایند شکستن قطره در یک میکروکانال T-شکل در برخورد با دیواره کانال و تاثیر تغییر هندسه تقاطع و برخی پارامترهای تاثیرگذار بر آن مانند عدد مویینگی مورد بررسی قرار گرفته است. به هم پیوستن قطره‌ها در برخورد آنها با یکدیگر در یک سیستم میکروکانال T-شکل تحت تاثیر سرعت‌های مختلف برخورد شبیه‌سازی شده است [۲۱۶]. در پژوهش عزت‌نشان و همکاران [۲۲۰-۲۱۷] تاثیر معادله‌های مختلف حالت در

روش شان-چن در فرایند تبخیر و آغاز آن مطالعه گردید. نتایج نشان می‌دهد که در نظر گرفتن خیس‌شوندگی سطح در توابع حالت مختلف می‌تواند بر پایداری عددی و شروع فرایند تبخیر تاثیرگذار باشد. یک پژوهش مقایسه‌ای در بکارگیری مدل‌های مختلفی از اوپراتور برخورد در روش بولتزمن صورت گرفته که نشان می‌دهد در محدوده نسبت چگالی پایین مدل زمان آسایش یگانه (single relaxation time) می‌تواند پایداری قابل قبولی را ارائه دهد. در حالیکه مدل زمان آسایش چندگانه (multi relaxation time) می‌تواند در نسبت چگالی بالا پایداری روش را ارتقا دهد [۲۲۰]. انصاری و همکاران [۲۲۱]، یک جریان دوفاز در یک زانویی بزرگ در چند شیب متوالی را به طور تجربی شبیه‌سازی نموده و اثرات ناشی از تغییرات هندسی مسیر بر روی تغییر شکل حباب را مورد بحث و بررسی قرار دادند. کاپولا و همکاران [۲۲۲] در پژوهش خود مطابق شکل ۴-۶، به طراحی سیستمی پرداختند که در آن از یک اوریفیس در خروجی ۳ برای جدا کردن قطره‌های معلق آب در نفت استفاده شده است. با طراحی این اوریفیس، بخش اعظم ذرات معلق، از خروجی ۳ خارج می‌شوند که در نتیجه آن یک جداسازی موثر اتفاق می‌افتاد.



شکل ۴-۶: اوریفیس ارائه شده توسط کاپولا و همکارانش در [۲۲۲]

شن و همکاران [۲۲۳] به بررسی مکانیزم به هم پیوستن قطره‌ها پرداختند. آن‌ها ابتدا تئوری و مکانیزم به هم پیوستن حباب‌ها را توضیح داده و سپس روش‌های انفعالی به هم پیوستن قطره‌ها توسط تغییر هندسه کانال و اضافه کردن مواد فعال در سطح را ارائه نمودند. در کنار پژوهش‌های

آزمایشگاهی، تحقیقات عددی و محاسباتی نیز انجام شده است که به طور کلی برای بررسی محاسباتی اینگونه جریان‌ها دیدگاه‌های متعددی وجود دارد که آن‌ها را در سه حالت کلی دسته بندی می‌کنند [۲۲۴]: دیدگاه ماکروسکوپی، مزوسکوپی و میکروسکوپی. دیدگاه ماکروسکوپی با نگاه توده‌ای به سیال، با استفاده از معادلات اساسی حاکم بر مکانیک سیالات به بررسی آن‌ها می‌پردازد. در حالی که دیدگاه میکروسکوپی به مسائل و پدیده‌ها در ابعاد مولکولی می‌نگرد. در این میان، دیدگاه مزوسکوپی حد واسطی میان دو دیدگاه فوق است. به این ترتیب، به تدریج روش‌های مزوسکوپی در حل این مسائل جایگاه قابل توجهی را پیدا نمودند. بولتزمن شبکه‌ای هم به عنوان یک روش مطرح در این دیدگاه، در چهارچوب‌های متفاوتی مانند روش شان - چن^۱، لی^۲، هی^۳، روش رنگی^۴ و انرژی آزاد^۵ برای بررسی جریان دو فاز، مطرح گردیده است که مفاهیم مربوط به جزئیات روش بولتزمن شبکه‌ای در پژوهش محمد [۲۲۵] به تفصیل بیان شده است. یکی از مسائلی که همواره در شبیه‌سازی‌های عددی در جریان دو فاز مطرح می‌باشد، مدل‌سازی سطح بین دو فاز و سرعت‌های پارازیتی می‌باشد که منجر به ناپایداری در سطح مشترک بین دو فاز می‌گردد. در پژوهش صورت گرفته توسط سام خانیانی و انصاری [۲۲۶] تاثیر چند روش در کاهش این سرعت‌های پارازیتی در روش حجم سیال انجام گرفته است. آن‌ها از اعمال یک فیلتر عددی در این روش، سرعت‌های پارازیتی را کاهش دادند. چن و همکاران [۲۲۷] به مطالعه روش‌های مطرح در چهار چوب بولتزمن پرداخته و راه‌کارهایی جهت کاهش سرعت‌های پارازیتی اشاره کردند. اما در میان روش‌های بولتزمن موجود هی [۱۶۳] و لی [۱۳۴] به دلیل استفاده از مفاهیم ترمودینامیکی، نتایج بهتری را در شبیه‌سازی جریان دو فاز ارائه دادند. از این جهت که روش پیشنهادی آنها قادر به شبیه‌سازی جریان دو فاز در نسبت‌های چگالی و لزجت بالا با کاهش بسیار چشم‌گیر سرعت‌های پارازیتی در سطح مشترک بین دو فاز است.

¹ Shan-chen

² Lee

³ He

⁴ Color-method

⁵ Free energy

لو و همکاران [۲۲۸] بر مسئله چگونگی عملکرد شرط مرزی‌های خروجی مطرح در روش بولتزمن در یک جریان دو فاز به روش هی پرداختند. آن‌ها با قرار دادن مانعی مربعی و مستطیلی در کانال، تغییر شکل قطره و عملکرد شرط مرزی همرفتی^۱ را پس از برخورد مورد بررسی قرار دادند. دریافت‌های آن‌ها نشان می‌دهد که شرط مرزی همرفتی نتایج مطلوب‌تر و دقیق‌تری را نسبت به دیگر شرط مرزی‌های موجود ارائه می‌دهد. مدل ارائه شده توسط لی [۱۳۴] که طرحی توسعه یافته‌تر از مدل هی است، قادر به شبیه‌سازی در نسبت چگالی و لزجت‌های تا حدود ۱۰۰۰ در جریان دو فاز است، در حالی که سرعت‌های پارازیتی در سطح مشترک بین دو فاز را به مقدار قابل توجهی کاهش می‌دهد. در پژوهشی که توسط لی [۲۲۹] انجام شده به بررسی جزئی‌تری از سازوکار مدل پیشنهادی خود در یک سیستم گاز-مایع و همچنین حذف سرعت‌های پارازیتی در سیستم دوفاز غیرقابل تراکم [۲۳۰] پرداخته است. در پژوهش‌های انجام شده در شبیه‌سازی‌های دو سیال مخلوط نشدنی بر پایه قطره در جریان‌های دو فاز، معمولاً تقسیم قطره به قسمت‌های برابر و نابرابر توسط جابجایی مانعی که در مسیر جریان تعبیه شده است، انجام می‌گیرد. این بخش به بررسی دینامیک قطره در یک کانال بدون مانع و با مانع مثلی، که امکان تقسیم قطره به قسمت‌های نامساوی بدون جابه‌جایی مانع، با تغییر زاویه‌گیری آن را فراهم می‌کند و تاثیر عدد بی‌بعد وبر، به روش لی اختصاص یافته است.

۲-۲-۴ معادلات بولتزمن

معادلات توابع توزیع بولتزمن $\bar{g}_\alpha$ و $\bar{h}_\alpha$ در این بخش به شرح زیر است:

$$\begin{aligned} & \bar{g}_\alpha(x + e_\alpha \delta, t + \delta) - \bar{g}_\alpha(x, t) \\ &= -\frac{1}{\tau + 0.5} (\bar{g}_\alpha - \bar{g}_\alpha^{eq})(x, t) + \delta(e_\alpha - u) \cdot [\nabla \rho c_s^2 (\Gamma_\alpha - \Gamma_\alpha(0)) + C \nabla \mu \Gamma_\alpha]_{(x, t)}. \end{aligned} \quad (1-4)$$

¹ Convective boundary condition

$$\begin{aligned} & \bar{h}_\alpha(x + e_\alpha \delta t, t + \delta t) - \bar{h}_\alpha(x, t) \\ &= -\frac{1}{\tau + 0.5} (\bar{h}_\alpha - \bar{h}_\alpha^{eq})(x, t) + \delta (e_\alpha - u) \cdot [\nabla C - \frac{C}{\rho_s^2} (\nabla p + C \nabla \mu)] \Gamma_\alpha \Big|_{(x,t)} \\ &+ \delta \nabla \cdot (M \nabla \mu) \Gamma_\alpha \Big|_{(x,t)}. \end{aligned} \quad (2-4)$$

که در آن C ، ρ ، μ و τ به ترتیب ترکیب^۱، چگالی، پتانسیل شیمیایی و زمان آسایش^۲ می باشد و از این دو تابع توزیع ذکر شده برای بدست آوردن کمیت های ماکروسکوپی استفاده می شود:

f_α^{eq} و g_α^{eq} نیز توابع توزیع تعادلی بوده و از رابطه زیر به دست می آیند

$$f_\alpha^{eq} = t_\alpha \rho \left[1 + \frac{e_\alpha \cdot u}{c_s^2} + \frac{(e_\alpha \cdot u)^2}{2c_s^4} - \frac{(u \cdot u)}{2c_s^2} \right]. \quad (3-4)$$

$$g_\alpha^{eq} = t_\alpha \left[p_1 + \rho_s^2 \left(\frac{e_\alpha \cdot u}{c_s^2} + \frac{(e_\alpha \cdot u)^2}{2c_s^4} - \frac{(u \cdot u)}{2c_s^2} \right) \right]. \quad (4-4)$$

$$h_\alpha^{eq} = C \Gamma_\alpha. \quad (5-4)$$

و $\bar{g}_\alpha^{eq}$ و $\bar{h}_\alpha^{eq}$ نیز در تابع توزیع های g و h به صورت زیر خواهند بود

$$\bar{g}_\alpha^{eq} = g_\alpha^{eq} + \frac{\delta}{2} (e_\alpha - u) \cdot [\nabla \rho_s^2 (\Gamma_\alpha - \Gamma_\alpha(0)) - C \nabla \mu \Gamma_\alpha]. \quad (6-4)$$

$$\bar{h}_\alpha^{eq} = h_\alpha^{eq} + \frac{\delta}{2} (e_\alpha - u) \cdot [\nabla C - \frac{C}{\rho_s^2} (\nabla p + C \nabla \mu)] \Gamma_\alpha - \frac{\delta}{2} \nabla \cdot (M \nabla \mu) \Gamma_\alpha. \quad (7-4)$$

که t_α و e_α به ترتیب کمیت های وزنی و سرعت های لیس می باشند که در ساختار D2Q9 قرار می گیرند. نیروهای بین مولکولی به عنوان نیروی خارجی فرض شده و طبق رابطه زیر محاسبه می شوند:

$$f = \nabla \rho_s^2 - (\nabla p - C \nabla \mu) \quad (8-4)$$

که در روابط بالا p فشار دینامیک و μ پتانسیل شیمیایی است که طبق رابطه زیر محاسبه می گردد:

$$\mu = \mu_0 - K \nabla^2 C = const \quad (9-4)$$

و در آن $\mu_0 = \frac{\partial E_0}{\partial C}$ بخش کلاسیک پتانسیل شیمیایی بوده و پروفیل مشترک بین دو سطح

¹ Composition

² Relaxation time

بصورت زیر تعریف می شود:

$$C(z) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{R-z}{D}\right) \quad (10-4)$$

و E_0 انرژی حجمی $E_0 = \beta C^2 (C-1)^2$ است. با فرض اینکه β ثابت بوده، K کمیت گرادیان می باشد. و D ضخامت فصل مشترک است که بر اساس دقت حل مسئله انتخاب می شود. با داشتن D و β می توان کمیت گرادیان K و کشش سطحی σ را از روابط زیر بدست آورد:

$$\sigma = \frac{\sqrt{2K\beta}}{6} \quad (11-4)$$

$$K = \frac{\beta D^2}{8}$$

بر این اساس، کمیت های ماکروسکوپی فشار، سرعت و چگالی از روابط زیر محاسبه می شوند:

$$p = \sum_{\alpha} \bar{g}_{\alpha} + \frac{\delta}{2} u \cdot \nabla \rho c_s^2. \quad (12-4)$$

$$\rho(C) = C\rho_1 + (1-C)\rho_2, \quad (13-4)$$

$$\rho u = \frac{1}{c_s^2} \sum_{\alpha} e_{\alpha} \bar{g}_{\alpha} - \frac{\delta}{2} C \nabla \mu, \quad (14-4)$$

۳-۲-۴ شرایط مرزی

شرح کاملی از برخی شرایط مرزی پرکاربرد در روش بولتزمن شبکه ای توسط سکوپ و همکاران [۱۴] ارائه شده است که همواره به عنوان مرجع در بیشتر پژوهش ها مورد استفاده قرار می گیرد. در این پژوهش، شرایط مرزی برای دیواره ها شرط عدم لغزش بوده و شرط مرزی سرعت ثابت برای ورودی [۱۴] و از CBC (شرط مرزی همرفت) که در پژوهش لو و همکاران [۲۲۸] مورد بررسی قرار گرفته، به عنوان شرط مرزی خروجی استفاده شده است، که به طور کلی با سه رویکرد از تعریف سرعت که وابسته زمانی هستند تعریف می شود:

$$U = \begin{cases} U_{\max}(t) \equiv \max\{u(N-1, j, t)\} \\ U_{\text{ave}}(t) \equiv \frac{1}{M+1} \sum_j u(N-1, j, t) \\ U_{\text{local}}(N-1, j, t) \equiv u(N-1, j, t) \end{cases} \quad (۱۵-۴)$$

در روابط بالا $0 \leq j \leq M$ و N تعداد لایه‌ها در جهت Y می‌باشد. بر این اساس، معادله همرفت

$$(۱۶-۴)$$

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} + U \frac{\partial \chi}{\partial x} = 0, \quad x = N \quad (۱۶-۴)$$

را می‌توان به صورت‌های جداسازی شده مرتبه اول نوشت:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \chi}{\partial t}(N, j) &= \frac{\chi(N, j, t + \delta t) - \chi(N, j, t)}{\delta t} \\ \frac{\partial \chi}{\partial t}(N, j) &= \frac{\chi(N, j, t + \delta t) - \chi(N-1, j, t + \delta t)}{\delta x} \end{aligned} \quad (۱۷-۴)$$

که رابطه زیر را نتیجه می‌دهد:

$$\chi(N, j, t + \delta t) = \frac{\chi(N, j, t) + \lambda \chi(N-1, j, t + \delta t)}{1 + \lambda} \quad (۱۸-۴)$$

$\lambda = U(t + \delta t) / \delta x$ می‌باشد که از مرحله هدایت در لایه $N-1$ بدست می‌آید. بنابراین صورت

مزوسکوپیک رابطه همرفت به صورت زیر بیان می‌شود:

$$f_i(N, j, t + \delta t) = \frac{f_i(N, j, t) + \lambda f_i(N-1, j, t + \delta t)}{1 + \lambda} \quad (۱۹-۴)$$

$$g_i(N, j, t + \delta t) = \frac{g_i(N, j, t) + \lambda g_i(N-1, j, t + \delta t)}{1 + \lambda} \quad (۲۰-۴)$$

بر اساس پژوهش لو و همکاران [۲۲۸]، با استفاده از تکنیک گره‌های مجازی [۲۳۱-۲۲۵]

می‌توان نتایج دقیق‌تری را بدست آورد. از این رو، اگر گره‌های مورد نیاز برای اعمال شرط مرزی در

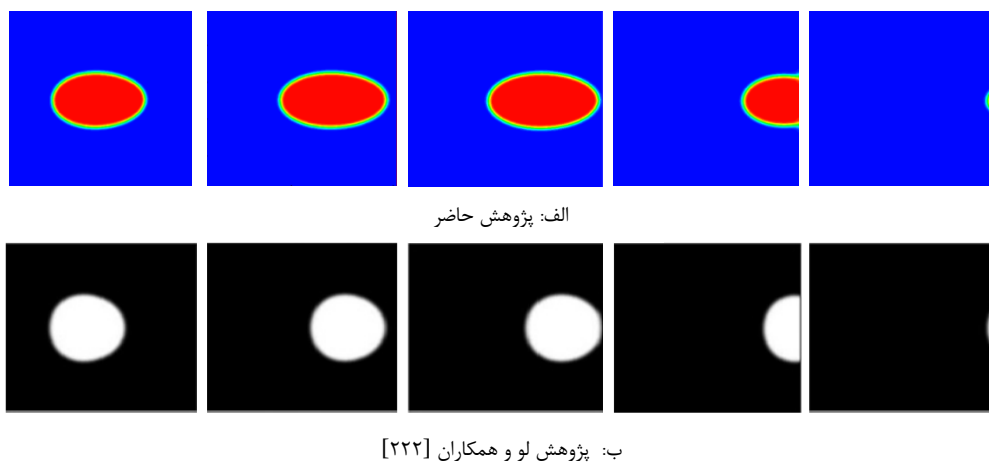
دیوار جامد قرار گرفته باشند می‌توان موقعیت آن‌ها را با روابط زیر جایگزین کرد:

$$\chi(x_f + c_i \delta t) = \chi(x_f, t), \quad \chi(x_f + 2c_i \delta t) = \varphi(x_f - c_i \delta t) \quad (۲۱-۴)$$

نتایج حاصل از شبیه‌سازی حاضر با دستاورد پژوهش لو و همکاران [۲۲۸] در شکل ۴-۷ و شکل

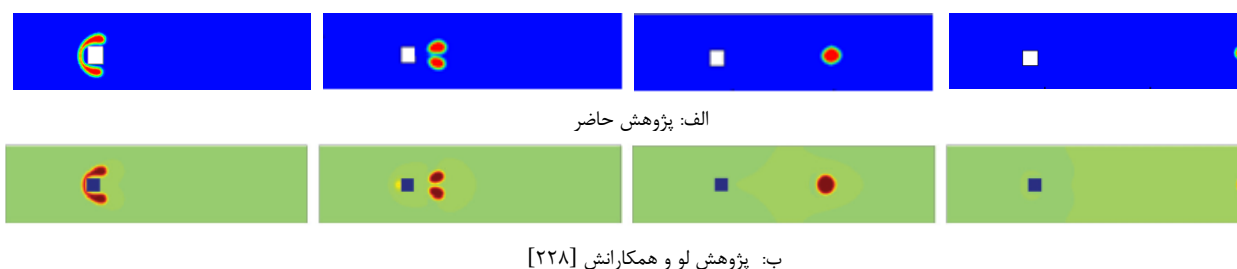
۴-۸ در دو حالت الف و ب با قرارگیری مانع در داخل کانال و بدون آن نشان داده شده است. در داخل

کانال، یک سرعت اولیه $u_0(x, y, 0) = -4U_m y(y - H/H^2)$ در سراسر کانال برقرار می‌شود که در آن U_m سرعت متوسط است و از $Re = \frac{HU_m}{\nu_l}$ بدست می‌آید. کشش سطحی σ را نیز می‌توان از رابطه $Ca = \frac{\mu_l U_m}{\sigma}$ محاسبه کرد و سپس در روابط (۴-۱۱) استفاده نمود. محدوده رینولدز در پژوهش لو و همکاران [۲۲۲] عدد ۲۰ در نظر گرفته شد. از آنجایی که سرعت‌های ورودی با استفاده از عدد رینولدز محاسبه می‌شوند، بازه سرعت‌ها حدود $0.15 - 0.2$ قرار می‌گیرند.



شکل ۴-۷: شبیه‌سازی شرط مرزی همرفت بدون مانع در شبیه‌سازی حاضر (الف) و مقایسه آن با نتایج لو و همکاران [۲۲۲]

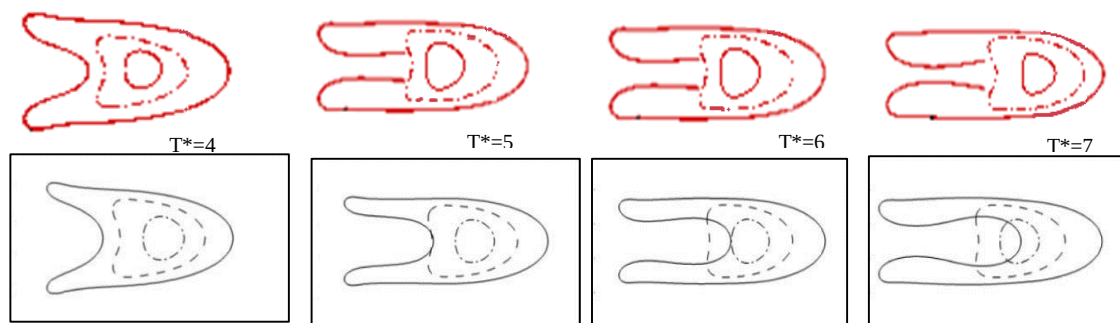
پس از رسیدن به حالت پایدار، در زمان بی‌بعد $t^* = d/U_m = 2.71$ ، یک قطره با $\rho_l = 0.2$ در کانالی که با سیالی با چگالی $\rho_v = 0.1$ پر شده است، قرار داده می‌شود. $Re = 20$ و $Ca = 0.1$ برای جریان در نظر گرفته شده است. همانگونه که مشاهده می‌شود، در شرط مرزی همرفت، قطره بدون چسبندگی به انتهای کانال و هیچگونه لرزش، مکش یا تغییر شکلی از انتهای کانال خارج می‌شود که این از ویژگی‌های این شرط مرزی در خروجی به شمار می‌رود. همچنین در شکل ۴-۸ ب، قطره پس از برخورد با مانع و تقسیم شدن، دوباره با یکدیگر ترکیب شده و از انتهای کانال، بدون مکش یا لرزش و بدون تغییر شکل، خارج می‌شوند.



شکل ۴-۸: شبیه‌سازی شرط مرزی همرفت با مانع در شبیه‌سازی حاضر (الف) و مقایسه آن با نتایج لو و همکاران [۲۲۸]

۴-۲-۴ نتایج

نتایج بدست آمده از بررسی عددی حاضر، با نتایج شبیه‌سازی صورت گرفته توسط میرزایی و رحیمیان [۲۱۴]، برای قطره در یک کانال افقی و در نسبت چگالی ۵ و برای عدد وبر و رینولدز به ترتیب ۶ و ۸، در زمان‌های برابر مقایسه شده است. همانطور که در شکل ۴-۹ دیده می‌شود، سه قطره با شعاع‌های متفاوت ۱۰ و ۱۵ و ۲۵ در کانال قرار داده شده است. با گذشت زمان دیده می‌شود که به طور کلی هر چه قطر قطره کوچک‌تر باشد، تغییر شکل آن کمتر خواهد بود. با حرکت قطره در طول کانال، به تدریج انتهای قطره تخت شده و قطره از شکل کروی به صورت مثلثی تغییر می‌یابد. زمانی که قطر قطره بزرگتر است، درگ فشاری در پشت قطره باعث ایجاد حفره در انتهای قطره شده و انحنای آن افزایش می‌یابد. دیده می‌شود که نتایج دو شبیه‌سازی تطابق خوبی را با یکدیگر نشان می‌دهند.



شکل ۹-۴: شبیه‌سازی قطره متحرک در کانال افقی با سه نسبت مختلف d/w و مقایسه با نتایج میرزایی و رحیمیان [۲۱۴]

۱-۴-۲-۴ تاثیر عدد وبر

در شبیه‌سازی قطره متحرک در درون کانال معمولاً دو عدد بی‌بعد Re و We ، که به صورت زیر

تعریف می‌شوند:

$$Re = \frac{\rho_l u_{inlet} W}{\mu_l} \quad We = \frac{\rho_l u_{inlet}^2 W}{\sigma} \quad (۲۲-۴)$$

مورد بررسی قرار می‌گیرند. اما از آنجا که بر اساس تحقیق صورت گرفته [۲۱۴] در شکست

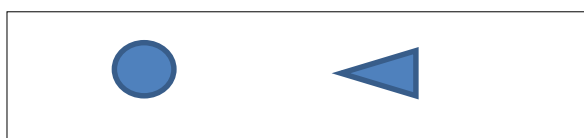
قطره، کمیت رینولدز که نسبت نیروهای اینرسی به ویسکوز است، تاثیر بسیار ناچیزی را در حرکت

قطره در کانال نشان می‌دهد، تاثیر عدد وبر که نسبت نیروی اینرسی به کشش سطحی است مورد

بررسی قرار گرفته است. که در آن W عرض کانال، u_{inlet} سرعت ورودی، σ کشش سطحی، ρ_l

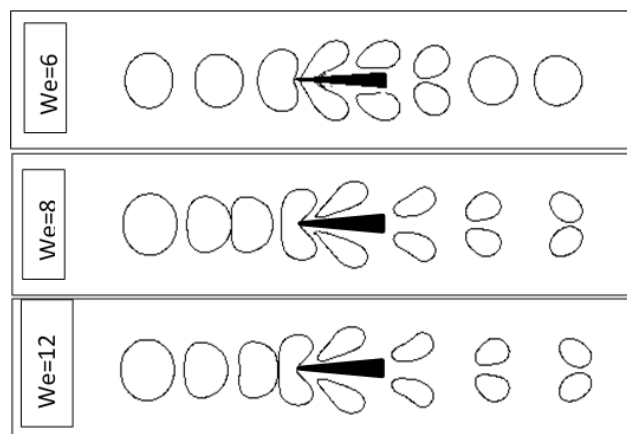
چگالی فاز سنگین، نسبت چگالی ۵ و نسبت لزجت ۸ می‌باشد. هندسه مورد مطالعه را نشان می‌دهد

که در آن یک قطره با شعاع ۲۵ و یک مانع مثلی با نسبت ارتفاع به قاعده ۸ قرار دارد.



شکل ۱۰-۴: هندسه مورد بررسی

شکل ۴-۱۱، تغییرات قطره پس از برخورد با مانع در عدد رینولدز ثابت ۶ و اعداد وبر متفاوت را نشان می‌دهد. در شکل مشخص است که با افزایش عدد وبر، مقاومت قطره در مقابل شکسته شدن کاهش می‌یابد. مطابق معادله (۴-۲۲)، عدد وبر مرتبط با کمیت کشش سطحی است. به این صورت که افزایش عدد وبر منجر به کاهش کشش سطحی خواهد شد. هر چه کمیت کشش سطحی کوچک‌تر باشد، مقاومت قطره در مقابل تغییر شکل پس از برخورد با مانع کمتر خواهد بود و از این رو قطره حالت کشسان کمتری را نشان خواهد داد و برعکس کاهش عدد وبر، σ را افزایش می‌دهد و باعث مقاومت بیشتر قطره در مقابل شکسته شدن خواهد شد. در عدد وبر ۶، کشش سطحی در مقایسه با عدد وبر ۸ و ۱۲، بزرگ‌تر است. بنابراین قطره در مقابل شکسته شدن مقاومت بیشتر و در نتیجه تغییر شکل بیشتری را نشان می‌دهد. در حالی که در اعداد وبر ۸ و ۱۲ قطره پس از برخورد با مانع شکسته



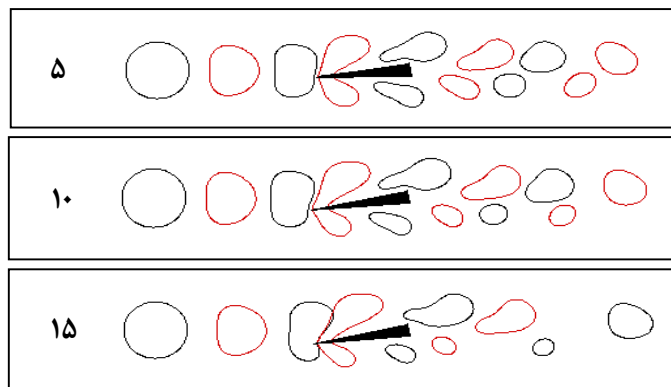
شکل ۴-۱۱: تغییرات قطره در برخورد با مانع در عدد رینولدز ثابت ۶ و اعداد وبر متفاوت

می‌شود.

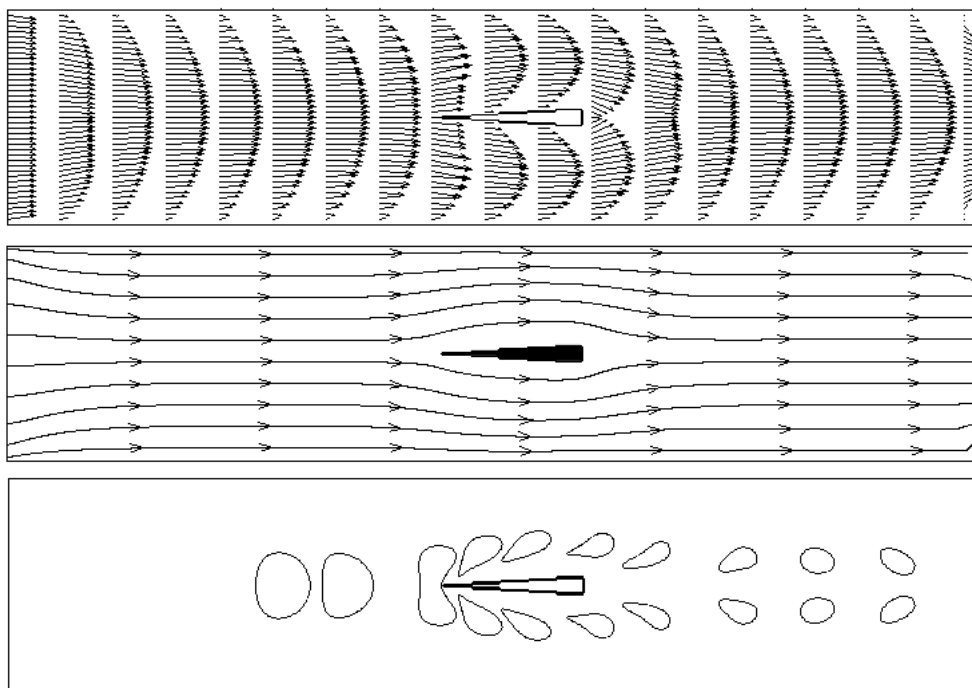
۴-۲-۴ زاویه قرارگیری مانع

در شکل ۴-۱۱، به دلیل قرارگرفتن مانع در مرکز کانال، قطره به صورت متقارن و به قسمت‌های مساوی شکسته می‌شود. می‌توان با تغییر زاویه راس مانع و انحراف آن از خط مرکزی کانال، قطره را

به قسمت‌های نابرابر بدون جابجایی مانع تقسیم کرد. شکل ۵ تاثیر تغییر زاویه قرارگیری مانع ۵ و ۱۰ و ۱۵ را در فرآیند شکست قطره نشان می‌دهد. همانطور که انتظار می‌رود، هر چه زاویه چرخش مانع افزایش می‌یابد، اندازه قسمت کوچک‌تر قطره کاهش بیشتری را نشان می‌دهد و برای تکه‌های بزرگ‌تر عکس این مسئله صادق است. هنگامی که زاویه قرارگیری مانع تغییر می‌کند، توزیع سرعت در داخل کانال نسبت به حالت مرکزی مانع، تحت تاثیر قرار می‌دهد. با چرخش مانع سطح مقطع سیال، هنگام عبور از اطراف آن تغییر می‌کند و این مسئله منتهی به توزیع نامتقارن سرعت در اطراف مانع می‌شود. قطعه بزرگ‌تر، پس از تقسیم در ناحیه‌ای قرار می‌گیرد که سیال، به دلیل تغییر زاویه مانع، دارای سرعت بیشتری شده است. از این رو، همانطور که در شکل ۴-۱۲ نشان داده شده است، قطعه بزرگ‌تر سریع‌تر از قطعه کوچک‌تر به انتهای کانال می‌رسد. هر چه زاویه راس مانع افزایش می‌یابد، عدم توازن سرعت تاثیر بیشتری را نشان داده و فاصله دو قطره تولید شده در انتهای کانال بیشتر می‌شود. نتایج حاصل در بیست و ششمین کنفرانس بین المللی مکانیک [۲۳۲] ارائه و چاپ شده است.



شکل ۴-۱۲: تغییرات قطره در برخورد با مانع در عدد رینولدز ثابت ۶ و عدد وبر ۸ در زاویه‌های متفاوت ۵، ۱۰، ۱۵. پروفیل سرعت در کانال با مانع که شرط عدم لغزش بر روی آن را نشان می‌دهد، خطوط جریان عبور کننده از روی مانع و برخورد قطره با مانع و شرط نفوذ ناپذیری آن و جدا شدن قطره از سطح در شکل ۴-۱۳ نشان داده شده است.



شکل ۴-۱۳: الف) پروفیل سرعت ب) خطوط جریان روی گوه ج) برخورد قطره با گوه

۳-۴ نتیجه گیری

در این بخش دینامیک حرکت قطره در برخورد با مانع مثلی در یک کانال افقی بررسی شده است. از آنجا که مقاومت قطره در برخورد با مانع به کشش سطحی و زاویه برخورد بستگی دارد، بررسی دو کمیت تاثیرگذار زاویه قرارگیری مانع و عدد وبر که در کمیت کشش سطحی موثر است مورد تحقیق قرار گرفت. بررسی‌ها نشان می‌دهد هر چه زاویه قرارگیری مانع افزایش یابد تکه‌های کوچک، کوچک‌تر می‌شود. افزایش عدد وبر باعث کاهش کشش سطحی کوچک‌تر شده بنابراین میزان مقاومت قطره در برخورد با مانع کاهش می‌یابد و به دو قسمت کاملاً مجزا تقسیم می‌شود. در حالیکه با کاهش عدد وبر و نهایتاً افزایش کشش سطحی، قطره مقاومت بیشتری را در برخورد نشان می‌دهد.

۴-۴ اثر نیروی گرانش: صعود و سقوط قطره

شکستن و دو نیم کردن قطره‌ها یا سلول‌ها از موضوعات مورد توجه در صنعت داروسازی، مهندسی پزشکی، دارورسانی و صنعت نفت می‌باشد. این فرآیند توسط قرار دادن یک مانع در مسیر قطره انجام می‌شود. در این قسمت از پژوهش، دینامیک قطره تحت اثر نیروی گرانش در اثر برخورد با یک مانع مثلی در یک کانال عمودی مورد بررسی قرار گرفته و علاوه بر این، صعود یک حباب در اثر نیروی گرانشی نیز بررسی شده است.

۱-۴-۴ مقدمه

جریان‌های دو یا چندفازی، علی‌الخصوص مطالعات بر پایه قطره^۱، که شامل فرایندهای شکستن، به هم پیوستن یا تولید قطره می‌شود، از موضوعات پر کاربرد امروز است. از این جریان‌ها برای بررسی تشکیل قطرات باران و همچنین بررسی دینامیک حباب‌های گاز در ستونی از مایع در راکتورها بهره برده می‌شود [۲۳۳]. شکستن قطرها و تشکیل آن‌ها، با استفاده از سیستم‌های میکروفلوئیدیک در زمینه سلول‌های زیستی و کپسول‌سازی مورد بررسی قرار گرفته است [۲۳۴]. یافته‌های تجربی کلیت و همکاران [۲۳۵] در بررسی صعود حباب‌ها تحت تاثیر نیروی گرانش نشان می‌دهد که شکل قطره‌ها به سه دسته کلی تقسیم می‌شود. کروی، بیضوی و کلاهدک بیضوی. این تغییر شکل‌ها با استفاده از تغییر دو عدد Bo (بوند) و Re (رینولدز) قابل حصول است. آرکی و همکاران [۲۳۶] نشان دادند که ناپایداری سقوط قطره‌های سنگین در داخل یک سیال سبک‌تر را می‌توان با عدد بی بعد اشمیت^۲ و عدد شکست^۳ بررسی کرده و کاهش داد. باگها و وبر [۲۳۷] با یک مطالعه گسترده نشان دادند که چگونه شکل یک حباب در حال صعود متاثر از سرعت آن خواهد بود در حالی که همکاران آن‌ها، هان

¹ Droplet - base

² Schmit

³ Fragmentation number

و تریگواسون [۲۳۸] با یک بررسی عددی، تغییر شکل یک قطره در حال سقوط را متأثر از اعداد اتووس (Eo)، اهنزورگ (Oh) و نسبت دانستیه و لزجت دو سیال مخلوط نشدنی دانستند. که دو عدد بی بعد یاد شده، طبق روابط زیر، به ترتیب، نسبت نیروهای گرانشی به کشش سطحی و همچنین لزجت به کشش سطحی می باشند و زمان بی بعد t^* به صورت زیر تعریف می شود:

$$Eo = \frac{g\Delta\rho D^2}{\sigma} \quad Oh = \frac{\mu_d}{\sqrt{\rho_d D \sigma}} \quad t^* = \frac{t}{\sqrt{D/g}} \quad (۲۳-۴)$$

که در این روابط ρ_d ، μ_d و D به ترتیب لزجت، چگالی، قطر قطره و g شتاب گرانش می باشند. در همین راستا، نی و همکاران [۲۳۹] دو روش تصویرسازی^۱ و روش مجموعه سطوح^۲ را با یکدیگر ترکیب کردند و الگوریتمی ارائه دادند تا مسئله عدم بقای حجم را در شبیه سازی قطره ها تحت اثر نیروی گرانش برطرف نمایند. بولتزمن شبکه ای، کارآمدی خود را در شبیه سازی پدیده های مختلفی چون نانوسیال ها [۲۴۰-۲۴۲]، جریان های عکس العملی [۲۴۳-۲۴۴]، سیال های غیرنیوتنی [۲۴۶-۲۴۵]، رسانه های متخلخل [۲۴۷-۲۴۸]، جریان های آشفته [۲۴۹]، تحلیل معکوس^۳ [۲۴۴-۲۵۰] و جریان های چندفازی [۲۵۱-۲۶۵] به اثبات رسانیده است. فخاری و رحیمیان [۲۶۰-۲۶۶]، با استفاده از روش هی^۴، سقوط یک قطره را در گستره مختلفی از اعداد اتووس و اهنزورگ بررسی نمودند. بر اساس یافته های این پژوهش، در اعداد اتووس و اهنزورگ که کشش سطحی نیروی غالب است، تغییر شکل ملایم بدون هیچگونه شکستی مشاهده می شود. پس از معرفی روش لی [۱۳۴]، که نمونه و الگوی کامل تری را جهت مدل سازی جریان های دوفازی در نسبت چگالی و لزجت بالاتر ارائه می کند، آمایابوئر و لی [۲۶۷] بر اساس تئوری سطح بین دو فاز کان - هیلارد، صعود یک حباب را در گستره ای از اعداد بی بعد بوند (Bo) و مورتون (Mo)، تحت اثر نیروی گرانش و در نسبت چگالی ۱۰۰۰ برای بدست آوردن ارتباط میان کمیت های موثر در تغییر شکل حباب، مورد بررسی قرار دادند. بر اساس

¹ Projection metod

² Level set method

³ Inverse analysis

⁴ He

مراحل انجام پژوهش، این بخش، به سقوط یک قطره در یک کانال افقی تحت اثر نیروی گرانش، در محدوده متفاوتی از اعداد اتووس و اهنزورگ و همچنین صعود یک حباب در یک کانال عمودی در نسبت چگالی بالا براساس یافته‌های آمایابوئر و لی [۲۶۷]، اختصاص یافته است. علاوه بر این، شرط مرزی پیشنهادی لو و همکاران [۲۲۲] که شرط مرزی همرفت (CBC) می‌باشد، به عنوان شرط مرزی خروجی در نظر گرفته شده است.

۲-۴-۴ معادلات بولتزمن

روش بولتزمن در ابتدا به عنوان معادلات گازی شبکه‌ای [۲۲۵] معرفی گردید. بعدها این روش، به دلیل اینکه امکان استفاده از معادلات دیفرانسیلی مرتبه اول را به جای استفاده از معادلات پیچیده و مرتبه دوم ناویر-استوکس جهت حل مسائل سیالاتی فراهم می‌کرد، مورد توجه محققان قرار گرفت. با توسعه آن، این روش برای حل مسائل دوفازی نیز مورد استفاده شد. مدل‌های متعددی در این راستا پیشنهاد گردید. به عنوان مثال می‌توان به روش‌های انرژی آزاد^۱ [۱۶، ۱۸۲] و شبه‌پتاسیل [۱۵] که به روش شان-چن معروف است اشاره کرد که در بسیاری از پژوهش‌های دوفاز مورد استفاده قرار گرفته‌اند. اما هی [۱۶۳] روش جدیدتری را در ساختار بولتزمن شبکه‌ای پیشنهاد کرد که در آن، برای شبیه‌سازی سطح بین دوفاز، از مفاهیم ترمودینامیک بهره گرفته شده بود و نقایص روش‌های قبلی را تا حدود زیادی برطرف می‌ساخت و علاوه بر این امکان شبیه‌سازی جریان‌های دوفاز را در محدوده وسیع‌تری از نسبت چگالی و لزجت فراهم می‌نمود. روند توسعه با روشی که لی در پژوهش خود در سال ۲۰۰۵ ارائه کرد، ادامه یافت. الگویی را پیشنهاد نمود که در آن علاوه بر آنکه می‌توان جریان‌های دوفاز با نسبت چگالی بالا (۱۰۰۰) را شبیه‌سازی کرد، سرعت‌های پارازیتی در سطح بین دوفاز تا اندازه بسیار قابل توجهی حذف می‌شد. در این بخش معادلات مربوط به روش لی که در آن عبارت نیروی گرانش مورد استفاده قرار گرفته، آورده شده است. در این روش از دو تابع توزیع g و h

¹ Free energy

برای بدست آوردن کمیت‌های ماکروسکوپیک

چون سرعت، فشار و همچنین چگالی استفاده می‌شود که به ترتیب زیر است:

$$\bar{g}_\alpha(x + e_\alpha \delta t, t + \delta t) - \bar{g}_\alpha(x, t) \quad (24-4)$$

$$= -\frac{1}{\tau + 0.5}(\bar{g}_\alpha - \bar{g}_\alpha^{eq})(x, t) + \delta t(e_\alpha - u) \cdot [\nabla \rho_s^2 (\Gamma_\alpha - \Gamma_\alpha(0)) + (\mu \nabla C + F) \Gamma_\alpha]_{(x, t)}.$$

$$\bar{h}_\alpha(x + e_\alpha \delta t, t + \delta t) - \bar{h}_\alpha(x, t) \quad (25-4)$$

$$= -\frac{1}{\tau + 0.5}(\bar{h}_\alpha - \bar{h}_\alpha^{eq})(x, t) + \delta t(e_\alpha - u) \cdot [\nabla C - \frac{C}{\rho_s^2}(\nabla p_t - \mu \nabla C + F)] \Gamma_\alpha \Big|_{(x, t)} + \delta t \nabla \cdot (M \nabla \mu) \Gamma_\alpha \Big|_{(x, t)}.$$

که در آن F نیروی خارجی است. شرح کاملی از کمیت‌های به کاررفته در روابط در قسمت نمادها آورده شده است که از تکرار آن‌ها در هر بخش پرهیز می‌شود. تنها تفاوتی که این روابط با روابط مراحل قبل دارند جایگزینی عبارت $C \nabla \mu$ با $\mu \nabla C$ است. که بر اساس پژوهش کانینگتون و لی [۲۶۸] مشخص شد که این تغییر می‌تواند سرعت‌های پارازیتی را بیش از پیش کاهش دهد. بر اساس یافته‌های چن و همکاران [۲۶۹]، طرح‌های مختلفی برای وارد کردن عبارت گرانش به معادلات پیشنهاد شد که از این میان می‌توان به سه معادله زیر اشاره کرد. از بین معادلات پیشنهاد شده بالا، معادله (۲۸-۴) را به عنوان دقیق‌ترین شکل معادله گرانش می‌توان در نظر گرفت.

$$F_g = \rho g \quad (26-4)$$

$$F_g = \rho g \left(1 - \frac{\rho_{ave}}{\rho} \right) \quad (27-4)$$

$$F_g = g(\rho - \rho_l) \quad (28-4)$$

شرایط مرزی ۳-۴-۴

شرط مرزی خروجی ۱-۳-۴-۴

بر اساس پژوهش‌های انجام شده [۲۲۵، ۱۴]، شرط‌های مرزی مرسوم به عنوان شرط مرزی

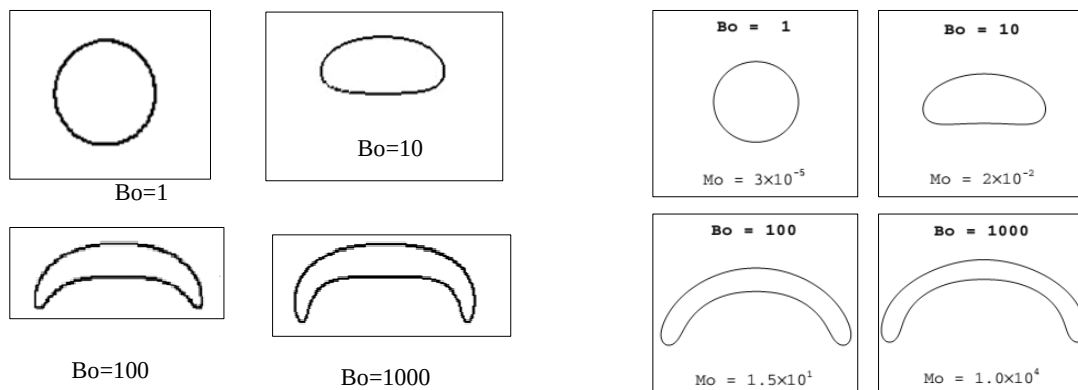
خروجی، شرط مرزی نیومن و شرط مرزی برون‌یابی می‌باشند. اما در پژوهشی که لو و همکاران [۲۲۸] انجام دادند، مشخص گردید که شرط مرزی همرفت بهترین عملکرد را به عنوان شرط مرزی خروجی نشان می‌دهد در شبیه‌سازی صورت‌گرفته، شرط لغزش آزاد^۱ به عنوان شرط مرزی ورودی، شرط مرزی همرفت^۲ برای خروجی و در دیواره‌ها، شرط عدم لغزش در نظر گرفته شده است. شرح کاملی از شرط‌های مرزی به کار رفته در بخش ۱۲-۳ توضیح داده شده است.

۴-۴-۴ شبیه‌سازی صعود حباب تحت اثر گرانش

لی و آمایابوئر [۲۶۷] در ادامه توسعه کاربردهای روش لی، صعود یک حباب معلق در یک سیال را تحت نیروی گرانش در ۴ عدد بوند (Bo) و مورتون (Mo) متفاوت مورد بررسی قرار دادند. همانگونه که در شکل ۴-۱۴ الف مشخص است، هر چه عدد بوند کوچک‌تر باشد، حباب در هنگام صعود دچار تغییر شکل کمتری می‌شود به طوریکه در $Bo=1$ قطره، شکل اولیه خود را حفظ کرده است. به تدریج با افزایش عدد Bo از ۱۰ به ۱۰۰۰ می‌توان تغییر شکل‌های بیضوی و کلاهک-بیضوی را، که در مطالعه کلیفت و همکاران [۲۳۵] به آن اشاره شده، مشاهده کرد. بر اساس آنچه لی و آمایابوئر [۲۶۷] بیان می‌کنند و در شکل ۴-۱۴ ب نیز دیده می‌شود، با افزایش عدد Bo ، حباب حالت محدب‌تری به خود می‌گیرد به طوریکه در عدد $Bo=1000$ و در نواحی مرکزی حباب قسمت مسطح افزایش یافته است.

¹ Free slip

² Convective boundary condition



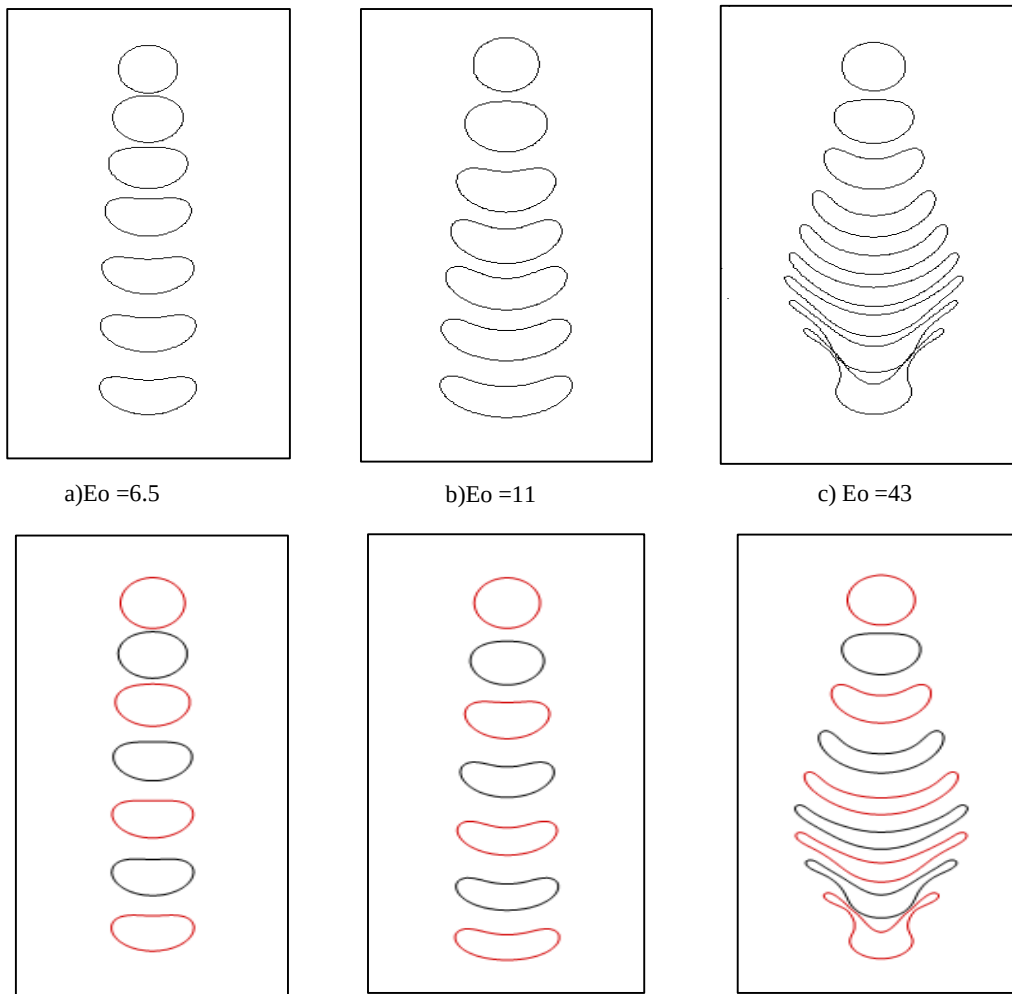
الف: شبیه‌سازی حاضر

ب: نتایج آزمایش‌ها و لی [۲۶۱]

شکل ۴-۱۴: شبیه‌سازی صعود قطره تحت اثر گرانش در اعداد بوند و مورتون متفاوت و مقایسه آن با نتایج آزمایش‌ها و لی [۲۶۱-۲۶۷]

۵-۴-۴ سقوط قطره

در شکل ۴-۱۵ نتایج پژوهش حاضر با یافته‌های فخاری و رحیمیان [۲۶۶]، در نسبت چگالی ۵ و لزجت سینماتیکی ۰/۱ در محدوده حل 301×151 ، مطابق آنچه در این تحقیق [۲۶۶] گزارش داده شده، در عددهای اتووس متفاوت مورد مقایسه قرار گرفته است. همانگونه که در شکل مشاهده می‌شود، هر چه عدد Eo افزایش می‌یابد قطره دچار تغییر شکل بیشتر یا به عبارت دیگر دچار تقعر بیشتری می‌گردد. برای بررسی گسترده‌تر، یک مانع قیفی شکل در کانال عمودی قرار داده شده است تا رفتار دینامیکی قطره در برخورد آن، با تغییر کمیت‌های تاثیرگذار و استفاده از دو عدد بی‌بعد Eo و Oh ، مورد بررسی قرار گیرد.



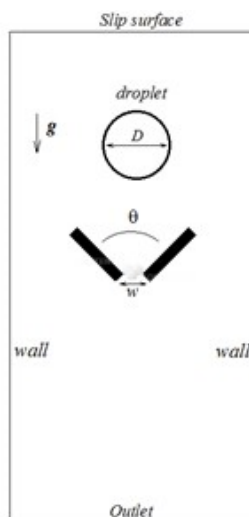
شکل ۴-۱۵: مقایسه نتایج حاصل از شبیه‌سازی حاضر (الف) سقوط قطره تحت اثر گرانش در $oh = 0.3$ در شبیه‌سازی حاضر با نتایج فخاری و رحیمیان [۲۶۰] (ب) در

a) $t^* = 7.59$ b) $t^* = 8.02$ c) $t^* = 9.16$

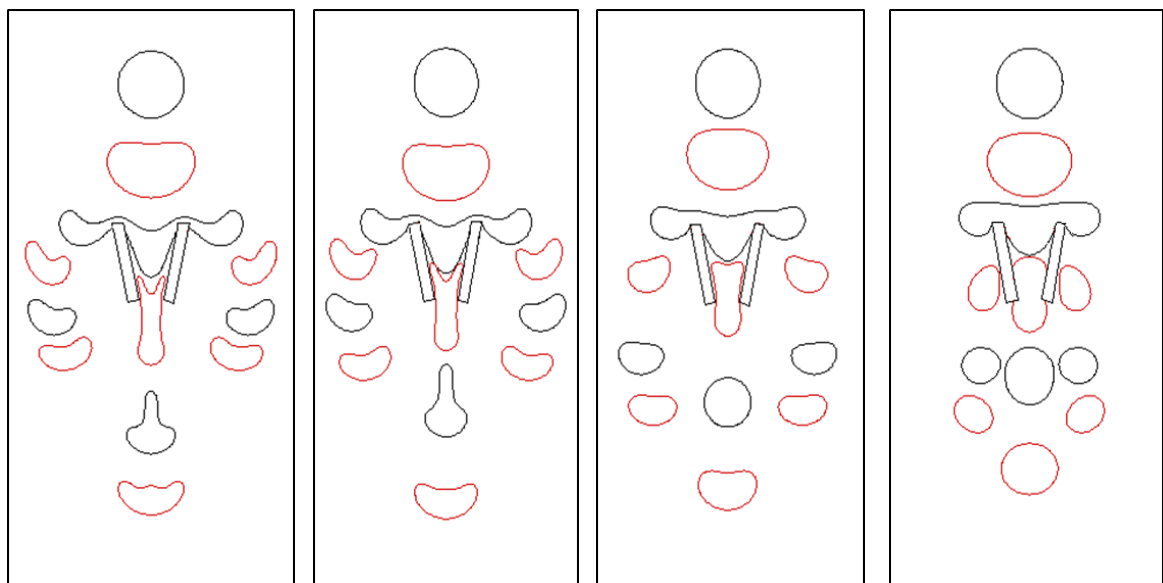
۴-۵-۱ تاثیر عدد Eo در برخورد قطره با مانع

تقسیم قطره از موضوعات مهم در زمینه تحلیل سلول‌های سرطانی و یا مطالعات مربوط به ژن به شمار می‌رود. مزیت قرارگیری مانع کیفی شکل در مقایسه با مانع مربعی یا مستطیلی این است که در این نوع موانع برای ایجاد تکه‌های نابرابر نیازی به جابجایی مانع نمی‌باشد و می‌توان با تغییر زاویه آن قطره را به قسمت‌های بیشتر و نابرابر تقسیم کرد. در شکل ۴-۱۶ شماتیکی از هندسه مساله نمایش داده شده است و برای نمایش بهتر تغییر شکل، محدوده حل به تعداد 151×451 افزایش داده

شده است. در شکل ۴-۱۷ تاثیر عدد Eo بر تغییر شکل قطره در برخورد با این مانع، در $D=30$ و $W=5$ ، مشاهده می‌شود. با ازدیاد عدد اتووس، قطره پس از برخورد دچار تغییر شکل بیشتری می‌گردد و در اتووس‌های پایین‌تر قطره تمایل به حفظ شکل کروی خود دارد که این مسئله می‌تواند ناشی از غلبه نیروی کششی سطحی بر نیروی گرانشی وارد بر قطره باشد و به دلیل موقعیت قرارگیری مانع درست، توزیع سرعت در کانال و اندازه قطره‌ها یکسان نمی‌باشند. از این رو هر قسمت از قطره شکسته شده با سرعت و در زمان متفاوتی به انتهای کانال می‌رسند.



شکل ۴-۱۶: نمایی از هندسه کانال مورد مطالعه با قرارگیری مانع قیفی شکل در سقوط قطره



a) $E_o = 43$

b) $E_o = 22$

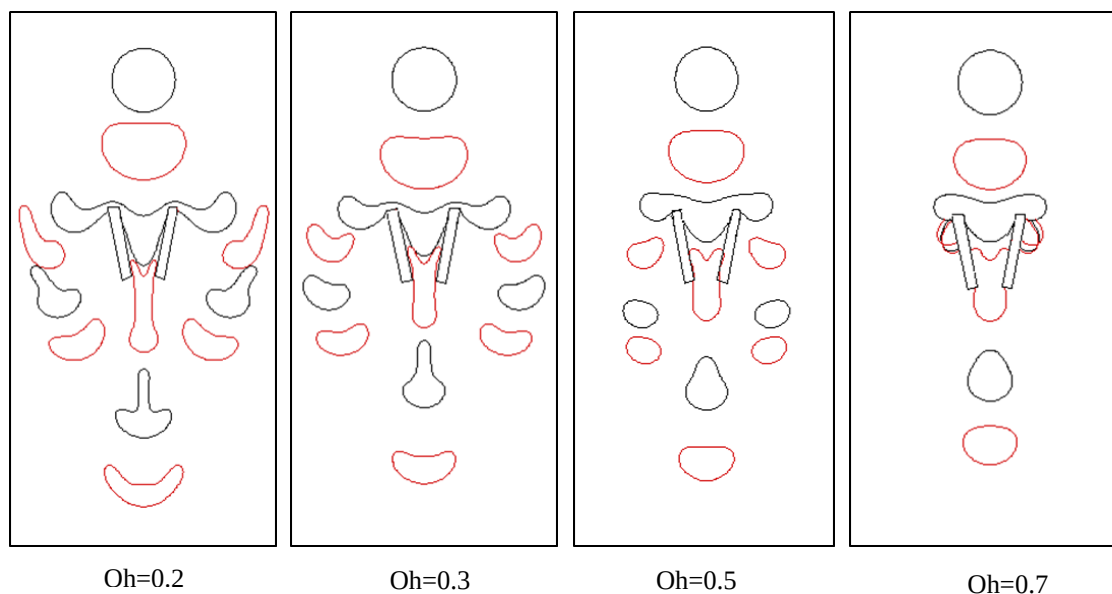
c) $E_o = 11$

d) $E_o = 6.5$

شکل ۴-۱۷: سقوط قطره در اعداد E_o متفاوت با مانع با زاویه 40° در $Oh = 0.3$ در a) $t^* = 11.67$ b) $t^* = 10.86$ c) $t^* = 10.05$ d) $t^* = 9.24$

۴-۵-۲ تاثیر عدد Oh در برخورد قطره با مانع

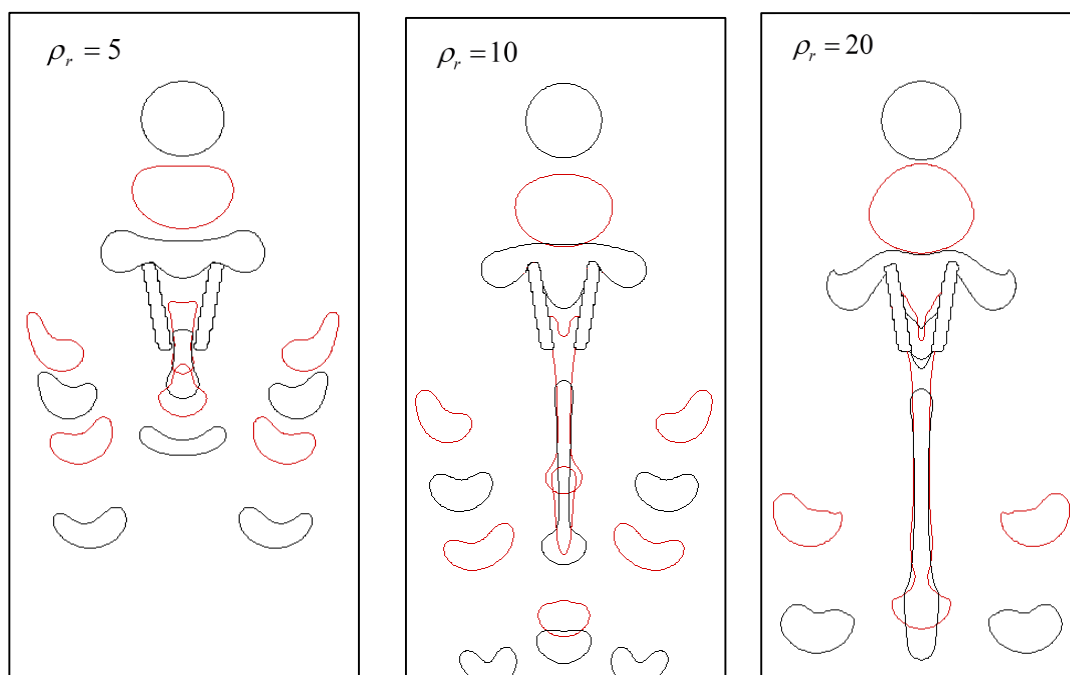
شکل ۴-۱۸، تاثیر عدد اهنزورگ در برخورد قطره با مانعی که دارای زاویه 40° درجه است به تصویر کشیده شده است. همانطور که در شکل مشخص است، هرچه عدد Oh کاهش می‌باید، تغییر شکل قطره قابل توجه‌تر بوده به طوریکه تکه قطره بزرگتر در $oh = 0.2$ کاملاً شکل مقعر به خود می‌گیرد و قطعات کوچکتر نیز اعوجاج بیشتری را نسبت به $oh = 0.7$ که هر سه قسمت قطره حالت کروی خود را حفظ می‌کنند، نشان می‌دهند.



شکل ۴-۱۸: تاثیر اعداد Oh بر سقوط قطره در کانال عمودی با مانع در نسبت چگالی‌های مختلف در $\Theta=30$ و $Eo=43$ و $t^*=11.67$

۳-۵-۴-۴ اثر نسبت چگالی در برخورد قطره با مانع

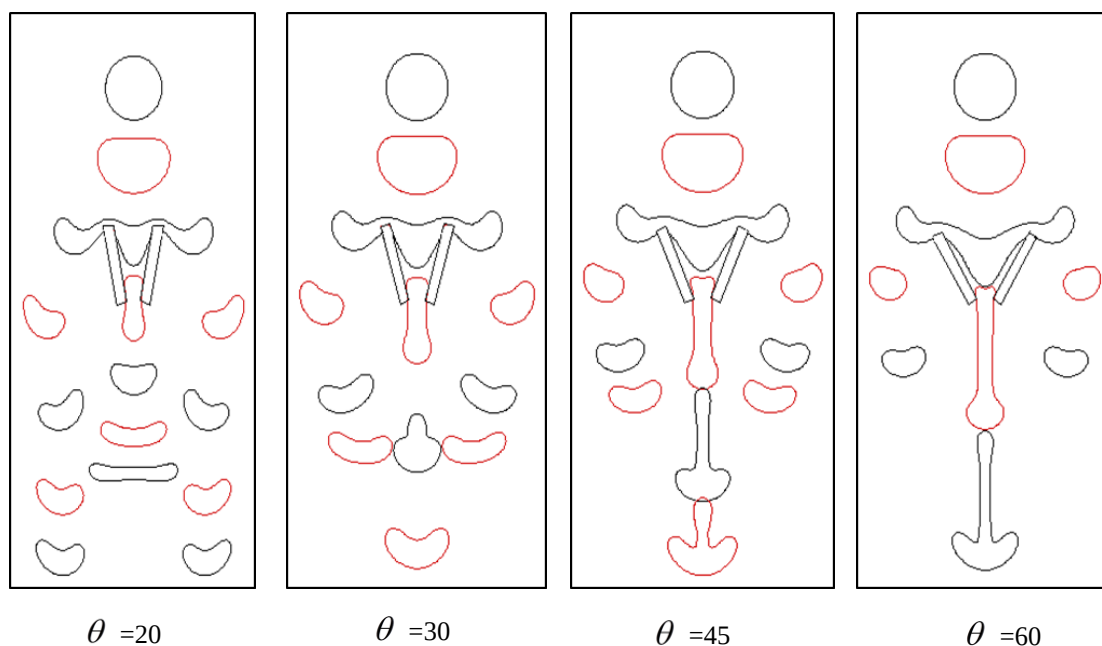
معمولا در فرآیند دوفازی سیال - سیال نسبت چگالی دو سیال از مرتبه واحد است. اما برای بررسی گسترده‌تر، نسبت چگالی دو سیال به ۲۰ برابر افزایش یافته و تاثیر آن در شکل ۴-۱۹ نشان داده شده است. از شکل می‌توان استنتاج نمود، با افزایش نسبت چگالی قطره دچار تغییر شکل بیشتری می‌گردد. این مساله را با استفاده از معادله ۱۱C می‌توان توجیه کرد. چرا که افزایش نسبت چگالی به معنای افزایش تفاضل چگالی‌های دو سیال بوده و در نتیجه نیروی گرانش وارد بر قطره نیز افزایش یافته و منجر به تغییر شکل بیشتری می‌گردد.



شکل ۴-۱۹: سقوط قطره در کانال عمودی در نسبت چگالی‌های مختلف در $Oh=0.3$ و $Eo=43$ و $t^*=13.36$

۴-۵-۴-۴ تاثیر زاویه قرارگیری مانع در شکست قطره

با تغییر در زاویه قرارگیری مانع، همانطور که در شکل ۴-۲۰ نشان داده شده، امکان شکستن قطره به قسمت‌های با نابرابری بیشتر فراهم می‌گردد. به طبع، هر چه زاویه قرارگیری مانع بیشتر باشد، نابرابری در قسمت‌های شکسته شده بیشتر بوده و همچنین توازن سرعت را در داخل کانال تحت تاثیر قرار داده و منجر به تفاوت در رسیدن قطره‌ها به انتهای کانال می‌شود. نتایج بیشتر، حاصل از بررسی گسترده‌تری از کمیت‌های هندسی به چاپ رسیده است [۲۷۰].



شکل ۴-۲۰: سقوط قطره در کانال عمودی در زوایای مختلفی از مانع در $Oh=0.3$ و $Eo=43$

۴-۵ نتیجه گیری

در این بخش از پژوهش صعود و سقوط قطره تحت اثر نیروی گرانش مورد بررسی قرار گرفت. در صعود قطره، هر چه عدد اتووس افزایش می‌یابد، قطره تغییر شکل بیشتری را نشان می‌دهد. افزایش عدد اتووس به معنی کاهش کشش سطحی و افزایش اثر گرانش و در نتیجه کاهش مقاومت قطره در برابر تغییر شکل ناشی از اعمال نیروی بر آن می‌باشد. در سقوط قطره، دو عدد اتووس و اهنزورگ برای بررسی دینامیک قطره متحرک به کار گرفته شد. نتایج نشان می‌دهد که در اعداد اتووس بالا، به دلیل غلبه نیروی گرانش بر نیروی کشش سطحی، قطره تغییر شکل و کش و قوس بیشتری را در برخورد با مانع نشان می‌دهد. در حالی که در اعداد اهنزورگ بالاتر، نیروی ویسکوز نیروی غالب بوده و قطره تمایل به حفظ شکل کروی اولیه خود را دارد. هر چه زاویه قرارگیری مانع تغییر می‌یابد، نابرابری بیشتری در قطره‌های شکسته شده دیده می‌شود و به دلیل تغییر در پروفیل سرعت داخل کانال قطره‌ها همزمان به انتهای کانال نمی‌رسند. با توجه به معادله گرانش، هر چه نسبت چگالی افزایش

می‌یابد، اختلاف چگالی دو سیال نیز افزایش می‌یابد و این به معنی افزایش نیروی وارد بر قطره بوده و در نتیجه تغییر شکل و انحنای بیشتری در برخورد با مانع مشاهده می‌شود.

۴-۶ آزمایشگاه بر روی تراشه LOC

ایده ابداع سیستم‌های میکروفلوئیدیک از آنجا آغاز گردید که نمونه مورد بررسی در بسیاری از آزمایش‌ها، از جمله پزشکی و زیست‌شناسی، از بافت یا سلول اعضای زنده تهیه می‌شد. این موضوع که امکان نمونه‌برداری متعدد از بافت یا نسج زنده، به دلیل رسیدن آسیب به اعضا، وجود نداشت، محققان را بر آن داشت که به دنبال راهی باشند تا بتوان از نمونه استفاده بهینه نمود. به این صورت که فرآیندهای لازم جهت آزمایش را به صورت متوالی و با صرف هزینه زمانی و مالی کم به انجام رسانید. به این ترتیب، سیستم‌های میکروفلوئیدیک، به عنوان یک ابزار کارآمد، برای نمونه‌های کم و گران‌قیمت معرفی گردید. در طراحی‌های اولیه، در این سیستم‌ها، از ایجاد یک سرعت ورودی، توسط میکروپمپ‌ها، برای رانش سیال به داخل میکروکانال‌ها استفاده می‌شود. از زمان ابداع این سیستم‌ها، تحقیقات متعددی شامل بررسی کمیت‌های تاثیرگذار مانند نسبت چگالی، نسبت لزجت، نرخ جریان حجمی (Q) و عدد موینگی (Ca)، انجام شده است. در این بخش از پژوهش، ابتدا تطابق اولیه شبیه‌سازی حاضر براساس آزمایشات تجربی ون استیجن و همکاران [۲۷۱] و شبیه‌سازی عددی آمایابوئر و لی [۲۷۲] صورت گرفته است و سپس به بررسی دیگر عوامل تاثیرگذار مانند هندسه کانال پرداخته می‌شود.

۴-۶-۱ مقدمه

شبیه‌سازی برهم‌کنش سیالات مخلوط‌نشده شامل سیستم‌های گاز-مایع یا مایع-مایع مورد تحلیل بسیاری از علوم بوده است. پس از روی کار آمدن سیستم‌های میکروفلوئیدیک، که امکان طراحی و اتصال میکروکانال‌ها در شکل‌های متفاوت برای بهره‌برداری در آزمایش مورد نظر را فراهم می‌نمود،

کاربردهای آنها در زمینه‌هایی چون کپسول‌سازی، جداسازی ناخالصی‌ها از آب، دستکاری‌های ژنتیکی، آزمایش‌های صنایع غذایی و زیست محیطی نیز گسترش یافت. ژو و همکاران [۲۷۳] پژوهشی را در یک میکروکانال Y شکل انجام داده و نشان دادند که چگونه نسبت نرخ جریان حجمی شاخه‌ها به جداسازی بهتر ذرات معلق کمک می‌کند. قطره‌های تولید شده می‌توانند به هم بپیوندند و رژیم‌های متفاوتی از جریان را ایجاد کنند. فنگ و همکاران [۲۷۴] پژوهشی انجام دادند که در آن از مواد شیمیایی معلق در سطح و تغییر در هندسه T-شکل سیستم برای بررسی مکانیزم به هم پیوستن قطره‌ها استفاده می‌شد. یافته‌های آنها نشان می‌دهد که تغییر در هندسه میکروکانال‌ها بیش از هر عامل دیگری می‌تواند در به هم پیوستن قطره‌ها تاثیرگذار باشد. از میکروسیستم‌ها می‌توان برای فرآیند اختلاط دو سیال نیز استفاده کرد. پنیک و همکاران [۲۷۵] به بررسی عملکرد پنج نوع میکرو-مخلوط‌کننده پرداختند. آنها دریافتند که هر چه افت فشار بیشتری در میکرو-مخلوط‌کننده ایجاد شود، فرآیند اختلاط با کیفیت بیشتری انجام خواهد شد. گورکین و همکاران [۲۷۶] مطالعاتی در زمینه آزمایش‌های بایومدیکال انجام داده و نتیجه گرفتند که تغییر در هندسه میکروکانال‌ها در یک سیستم میکروفلوئیدیک، مانند انبساط یا انقباض، می‌تواند از عوامل بسیار تاثیرگذار در نتیجه آزمایش باشد. همگام با آزمایش‌های تجربی، شبیه‌سازی‌های عددی نیز به بررسی و توسعه کاربردهای روش‌های عددی در این سیستم‌ها پرداختند. از میان هندسه‌های موجود، هندسه‌های T-شکل، Y-شکل و کانال‌های موازی بیشتر مورد توجه قرار گرفتند. زیرا هندسه‌های پیچیده‌تر از ترکیب این هندسه‌ها قابل حصول هستند. لی و همکاران [۲۷۷] حرکت قطره‌ها در سه هندسه یاد شده تحت نیروهای حرارتی - موئینگی با استفاده از روش بولتزمن شبکه‌ای را بررسی کردند. نتایج آنها نشان می‌دهد که چگونه استفاده از حرارت در فرآیندهایی چون جداسازی یا مرتب‌سازی قطرها می‌تواند تاثیرگذار باشد. لیو و همکاران [۲۷۸] نیز معادلات حرارت را وارد معادلات بولتزمن نمودند و با ایجاد یک میدان حرارتی به بررسی رفتار قطره‌ها، حرکت و کنترل آنها تحت این میدان پرداختند. همچنین آنها در ادامه کار خود [۲۷۹] از شکل پتانسیلی برای مدل‌سازی سطح بین دوفاز استفاده کردند و

ثابت کردند که این شکل، سطح بین دوفاز را با پایداری و دقت بیشتر شبیه‌سازی می‌کند. گوپتا [۱۱۷] در پژوهشی که بر روی میکروکانال با شکل متقاطع^۱ برای تشکیل قطره انجام داد ثابت کرد که طول و پهنای اوریفیس کمیتی موثر در سایز قطره و فرآیند تشکیل آن است. شی و همکاران [۲۸۰] به بررسی شکل قطره‌های تشکیل شده توسط هندسه‌های متفاوت پرداختند. این پژوهش نشان داد که میکروکانال T- شکل تولید قطره‌های تقریباً کروی می‌کند اما در هندسه متقاطع قطره‌ها بیضوی خواهند بود. ریاد و همکاران [۲۸۱] دو روش لاتوا- کوکو و شان-چن را با هم ترکیب کردند تا بتوانند الگوی مناسبی جهت کاهش سرعت‌های پارازیتی در سطح بین دو فاز ایجاد کنند. لی و آمایابوئر [۲۷۲] نیز به مطالعه هندسه T- شکل به روش لی و تاثیر کمیت‌های مختلفی چون عدد موینگی Ca، نسبت چگالی بالا و نسبت لزجت پرداخته و الگوهای جریان مختلفی مانند قطره‌ای^۲، فشاری^۳ و جهشی^۴ را بررسی کردند. برای تطابق شبیه‌سازی انجام شده در این بخش، علاوه بر شبیه‌سازی سیستم گاز- مایع و مقایسه آن با پژوهش تجربی ون استجن و همکاران [۲۷۱] و عددی لی و آمایابوئر [۲۷۲]، نتایج بدست آمده با نتایج تجربی سیستم مایع - مایع در نسبت چگالی واحد که توسط منخ [۲۸۲] انجام شده نیز مقایسه می‌شود. در سیستم‌های LOD و LOC، که در ادامه خواهند آمد، نیروهای اینرسی و اعداد رینولدز بسیار کوچک هستند ($Re < 0.1$). بنابراین از تاثیر آن صرف نظر می‌شود [۲۸۳].

۲-۶-۴ شبیه‌سازی عددی

۱-۲-۶-۴ زاویه تماس

در شبیه‌سازی‌های عددی جریان‌های دو یا چندفاز که سیالات با دیوار جامد در تماس هستند،

^۱ Flow focusing

^۲ dripping

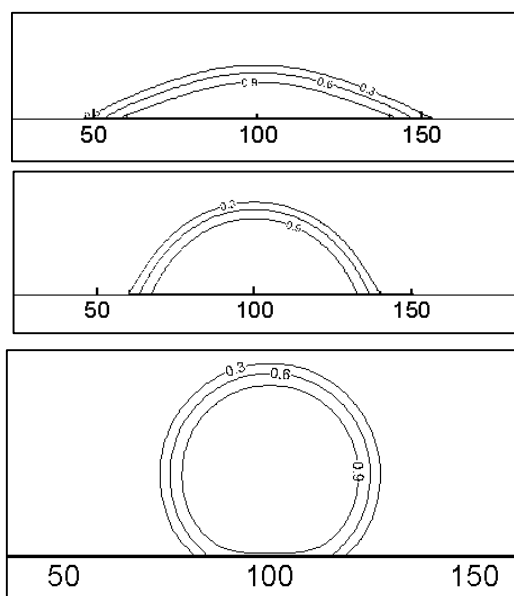
^۳ squeezing

^۴ jetting

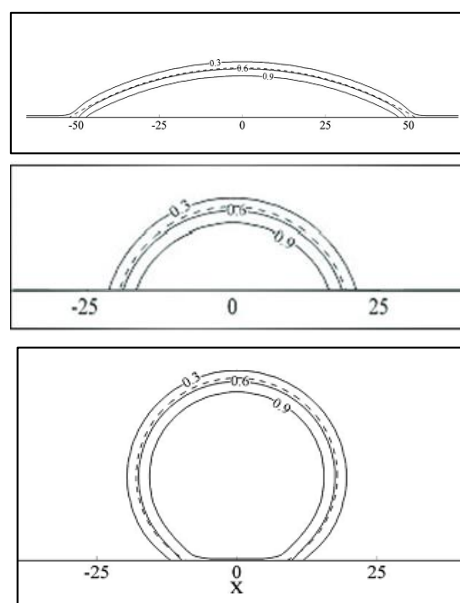
اولین مرحله به اعتبارسنجی زاویه تماس اختصاص می‌یابد. به این صورت که یک قطره بر روی یک دیوار جامد قرار داده شده و سپس زوایای مورد نظر با سطح، که نشان‌گر آبدوست یا آبگریز سطح می‌باشند، بر آن اعمال می‌گردد. بر اساس پژوهشی که توسط لی و همکاران [۲۸۴] انجام شده است، از روابط زیر برای تعریف این خاصیت بر دیوار جامد استفاده می‌شود که در آن θ_{eq} زاویه مورد نظر به منظور اعمال مفهوم آبدوست یا آبگریز و C_{s1} و C_{s2} کمیت‌های مربوط به دیوار جامد می‌باشند که برگرفته از تابع یونگ $\cos \theta_{eq} = (\sigma_{sg} - \sigma_{sl}) / \sigma = -\Omega_c$ هستند.

$$C_{s1} = \frac{1 + \sqrt{1 + \Omega}}{2} \quad C_{s2} = \frac{1 - \sqrt{1 - \Omega}}{2} \quad \Omega = -\cos \theta_{eq} \quad (28-4)$$

به منظور تصدیق زاویه تماس، یک قطره در حالتی که نسبت چگالی $0/2$ و ضخامت سطح بین دوفاز ($D=4$) است بر روی یک دیوار جامد قرار داده شد و سه زاویه تماس 30° ، 60° ، 150° درجه، بر قطره در تماس با دیوار اعمال گردید. که این سه زاویه به ترتیب مطابق با مفهوم آبدوست، نیمه آبدوست و آبگریز می‌باشد. در شکل ۴-۲۱ و شکل ۴-۲۲، یافته‌های شبیه‌سازی حاضر با نتایج حاصل از پژوهش لی [۲۸۴] تطابق قابل قبولی را نشان می‌دهند.

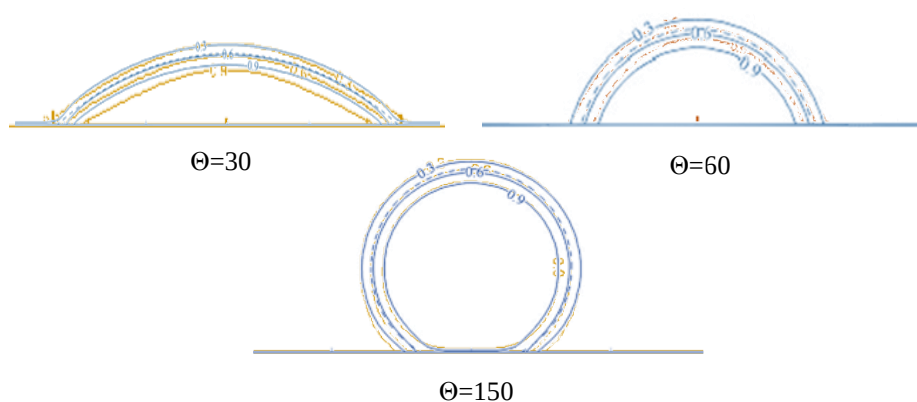


Present simulation



Lee simulation

شکل ۴-۲۱: شبیه‌سازی خیس‌شوندگی سطح در سه زاویه ۳۰، ۶۰، ۱۵۰ و مقایسه آن با پژوهش لی [۲۸۳]



شکل ۴-۲۲: مطابقت زوایای خیس‌شوندگی سطح در سه زاویه ۳۰، ۶۰، ۱۵۰ در پژوهش حاضر (خطوط قرمز) با پژوهش لی [۲۸۳] خطوط آبی

۳-۶-۴ معادلات بولتزمن شبکه‌ای

معادلات به کار رفته در این بخش نیز همانند مرحله قبل بوده با این تفاوت که نیروی خارجی در معادلات وجود ندارد و سرعت ورودی هر دو فاز عامل حرکت سیال است.

۴-۶-۴ شرایط مرزی

مطابق با پژوهش لو و همکاران [۲۲۸] می‌توان از روابط زیر برای شرط مرزی سرعت ثابت استفاده کرد. که به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$f_i(x_f, t + \delta t) = -f'_i(x_f, t) + 2w_i\phi_f \left[1 + \frac{(c_i \cdot u_b)^2}{2c_s^4} - \frac{u_b \cdot u_b}{2c_s^2} \right] \quad (۲۹-۴)$$

$$g_i(x_f, t + \delta t) = g'_i(x_f, t) - 2w_i\rho_f c_i \cdot u_b \quad (۳۰-۴)$$

که در آن u_b سرعت مرز است و g'_i و f'_i توابع توزیع پس از مرحله برخورد است و $u(x_f) = u_f$ سرعت در نقاط مرزی است.

$$f'_i(x_f, t) = \left(1 - \frac{1}{\tau}\right) f_i(x_f, t) + \frac{1}{\tau} f_i^{eq}(x_f, t) - \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \frac{(c_i - u_f) \cdot \nabla \psi(\phi)}{c_s^2} \Gamma_i(u_f) \delta t \quad (۳۰-۴)$$

$$g'_i(x_f, t) = \left(1 - \frac{1}{\tau}\right) g_i(x_f, t) + \frac{1}{\tau} g_i^{eq}(x_f, t) + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) (c_i - u_f) \quad (۳۱-۴)$$

$$\cdot \{\Gamma_i(u_f) F_s - [\Gamma_i(u_f) - \Gamma_i(0)] \nabla \psi(\rho) \delta t$$

که $c_i = -c$ و x_f گره سیال نزدیک مرز می‌باشد و چنانچه دیوار جامد باشد روابط بالا به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\begin{aligned} f_i(x_f, t + \delta t) &= -f'_i(x_f, t) + 2w_i\phi_f \\ g_i(x_f, t + \delta t) &= g'_i(x_f, t) \end{aligned} \quad (33-4)$$

نکته مهم، اطمینان از عدم عبور شار جرمی از مرزها است که برای آن باید شرط $n.\nabla\mu|_s = 0$ برای گرادیان پتانسیل برقرار باشد. شرط مهم دیگر، که از طریق مینیمم کردن انرژی فراهم می‌شود، به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$n.\nabla C|_s = \frac{\phi_c}{k}(C_s - C_s^2) \quad (34-4)$$

از این رو، کانینگتون و لی [۲۶۸] در پژوهش خود نشان دادند که برای پایداری مرزها و جلوگیری از شار عبوری از آن باید نسبت به اعمال $\nabla^2 C$ و $\nabla^2 \mu$ در مرزها با دقت بیشتری عمل کرد. از آنجا که شرایط مرزی برای اعمال عدم شار جرمی برقرار است، توجه و دقت، بیشتر معطوف $\nabla^2 C$ می‌شود. خصوصاً شرایطی که در آن سطح جامد با تعریف خیس‌شوندگی ارتباط دارد. از این رو، پیشنهاد شد که در معادلات مربوط به مشتقات مرتبه دو، اگر گره‌ای در داخل یا روی دیوار جامد قرار گرفته بود با رابطه زیر جایگزین شود:

$$C(x_s + e_\alpha \partial t) = C(x_s - e_\alpha \partial t) - 2\frac{\phi_c}{k}(C(x_s) - C(x_s)^2) \quad (35-4)$$

در واقع گرادیان مرتبه دو برای مرزی که $C(x_s + e_\alpha \partial t)$ در داخل دیوار جامد قرار گرفته باشد به صورت زیر تبدیل می‌شود:

$$\begin{aligned} (\partial t e_\alpha . \nabla^{CD})^2 C(x_s) &= \\ 2[C(x_s - e_\alpha \partial t) - C(x_s) - \frac{\phi_c}{k}(C(x_s) - C^2(x_s))] \end{aligned} \quad (36-4)$$

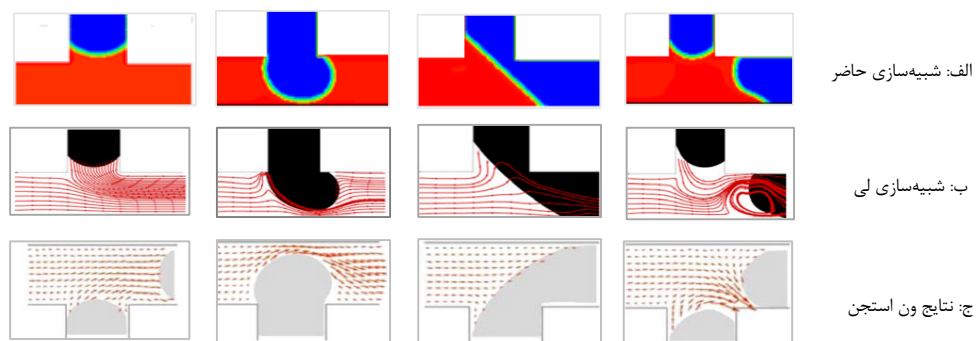
که در آن ϕ_c کمیت مربوط به خیس‌شوندگی است و از رابطه یونگ، که در همین فصل توضیح داده شد، به دست می‌آید.

۴-۶-۵ شبیه‌سازی آزمایشگاه بر روی تراشه (Lab On Chip)

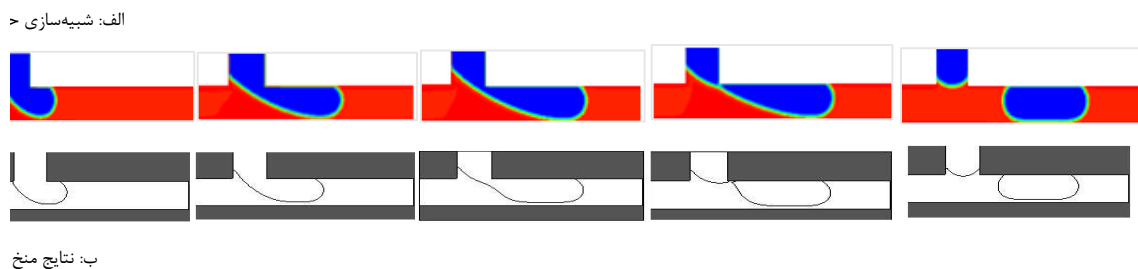
(Chip)

براساس مطالعات انجام گرفته [۲۷۵ و ۲۷۶]، به طور کلی سه رژیم جریان مختلف، برای جریان‌های دوفاز، بر اساس عدد بی‌بعد موینگی (Ca) تعریف می‌شود که شامل رژیم فشاری، قطره‌ای و جتی می‌باشد. از این میان، دو رژیم جریان اول به عنوان فرآیندهای تولید قطره در نظر گرفته می‌شوند، با این تفاوت که مکان و مکانیزم تشکیل قطره در این دو رژیم متفاوت است. در رژیم فشاری، قطره‌ها در محل تقاطع دو کانال و در رژیم قطره‌ای، در داخل کانال اصلی تشکیل می‌شوند. این پدیده را اینگونه می‌توان توضیح داد که در رژیم جریان فشاری، که در محدوده $Ca < 0.01$ تعریف می‌شود، به عنوان مثال در یک کانال T-شکل، نیروی برشی فاز اصلی می‌تواند بر کشش سطحی فاز پراکنده غلبه کند. درحالی‌که در رژیم قطره‌ای، که در محدوده $Ca > 0.01$ قرار می‌گیرد، نیروی برشی قادر به غلبه بر نیروی کشش سطحی در محل تقاطع دوفاز نیست و این باعث وارد شدن سیال ثانویه به داخل کانال اصلی و پس از آن تشکیل قطره‌های بیشتر در کانال اصلی اما در سایزهای کوچک‌تر می‌گردد. در رژیم جریان جتی، در اثر تماس و برخورد دو فاز، قطره تشکیل نمی‌شود و سیال ثانویه از کانال جانبی وارد کانال اصلی شده و تنها یک لایه سیال نازک از آن در کانال تشکیل می‌گردد. برای تشکیل این رژیم جریان، لازم است باید $Ca > 0.01$ باشد. شکل ۴-۲۳ نتایج حاصل از شبیه‌سازی حاضر با نتایج حاصل شبیه‌سازی آمایابوئر و لی [۲۷۲] و همین‌طور نتایج تجربی ون‌استیجن و همکاران [۲۷۱] را نشان می‌دهد که در آن سطوح کاملاً خیس‌شونده در نظر گرفته شده‌اند و سیال‌های مربوطه هوا و متان با نسبت چگالی ۱۰۰۰ می‌باشند. پهنای کانال اصلی و فرعی اندازه یکسان ۲۰۰ میکرومتر و طول کانال اصلی ۸۰۰ میکرومتر می‌باشد. فرایند نشان داده شده در شکل، مکانیزم تشکیل قطره را در رژیم فشاری نشان می‌دهد. در این رژیم، فاز پراکنده (ثانویه) از کانال فرعی وارد کانال اصلی می‌شود و مجرای کانال اصلی را مسدود کرده و باعث تجمع فاز اصلی در پشت آن می‌شود. فشاری که از تجمع

فاز اصلی به فاز پراکنده وارد می‌شود، به تدریج باعث نازک‌تر شدن گردن این فاز در محل تقاطع دو کانال و نهایتاً تشکیل قطره می‌گردد. همانطور که مشاهده می‌شود نتایج حاصل از مدل‌سازی حاضر با نتایج لی و ون استیجن تطابق بسیار خوبی را نشان می‌دهد. علاوه بر این طول بی‌بعد شده $(\frac{L}{W})$ ، که در آن L طول قطره و W پهنای کانال می‌باشد، برای نتایج تجربی ون استیجن $3/75$ ، برای شبیه‌سازی لی $3/95$ گزارش شده است. که اندازه این طول بی‌بعد برای شبیه‌سازی حاضر 4 می‌باشد. برای تایید مدل‌سازی در نسبت چگالی یک که بسیاری از سیستم‌های مایع-مایع را شامل می‌شود، نتایج شبیه‌سازی حاضر با نسبت چگالی یک و نسبت لزجت $0/25$ در $Ca = 0/005$ با نتایج تجربی منخ [۲۸۲] در شکل ۴-۲۴ مقایسه شده است. و نتایج تطابق قابل قبولی را با یکدیگر نشان می‌دهند.



شکل ۴-۲۳: مقایسه شبیه‌سازی انجام شده با شبیه‌سازی آمایابوئر و لی [۲۷۲] و نتایج تجربی ون استیجن و همکاران [۲۷۱] در نسبت چگالی 1000



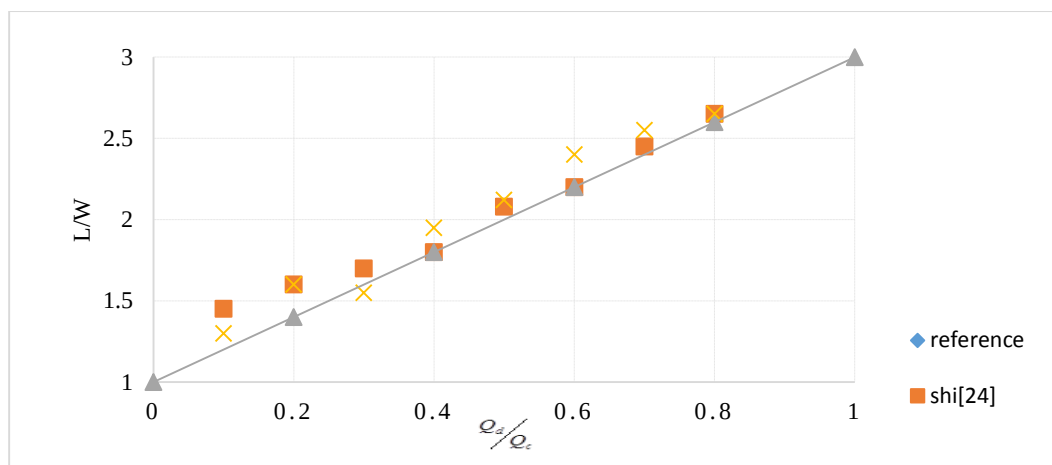
شکل ۴-۲۴: مقایسه نتایج منخ [۲۸۲] در نسبت چگالی واحد و نسبت لزجت $\lambda=0.125$

گارستکی [۲۸۵] نشان داد که در رژیم جریان فشاری که در $Ca < 0.01$ اتفاق می‌افتد، تنش برشی قابل اغماض است. زیرا مکانیزمی که باعث تشکیل قطره می‌شود فشار ناشی از تجمع سیال اصلی در پشت آن می‌باشد. علاوه بر این، در این تحقیق ثابت گردید که طول قطره تولید شده متناسب با نسبت نرخ حجمی فاز پیوسته به فاز ثانویه است. این تئوری با رابطه زیر بیان می‌گردد.

$$\frac{L}{W} = \alpha_1 + \alpha_2 Q \quad (۳۷-۴)$$

که در آن L طول قطره تولید شده، W پهنای کانال اصلی یا نازل و $Q = \frac{Q_d}{Q_c}$ می‌باشد. α_1 و

α_2 ثابت‌های از مرتبه واحد هستند که به هندسه کانال بستگی دارند و معمولاً در محدوده ۱-۲ تعیین می‌شوند. بر این اساس، بررسی کمی بر روی قطره‌های تولید شده در این شبیه‌سازی با رابطه تئوری بیان شده و نتایج شی [۲۸۰] در شکل ۴-۲۵ مقایسه شده است.

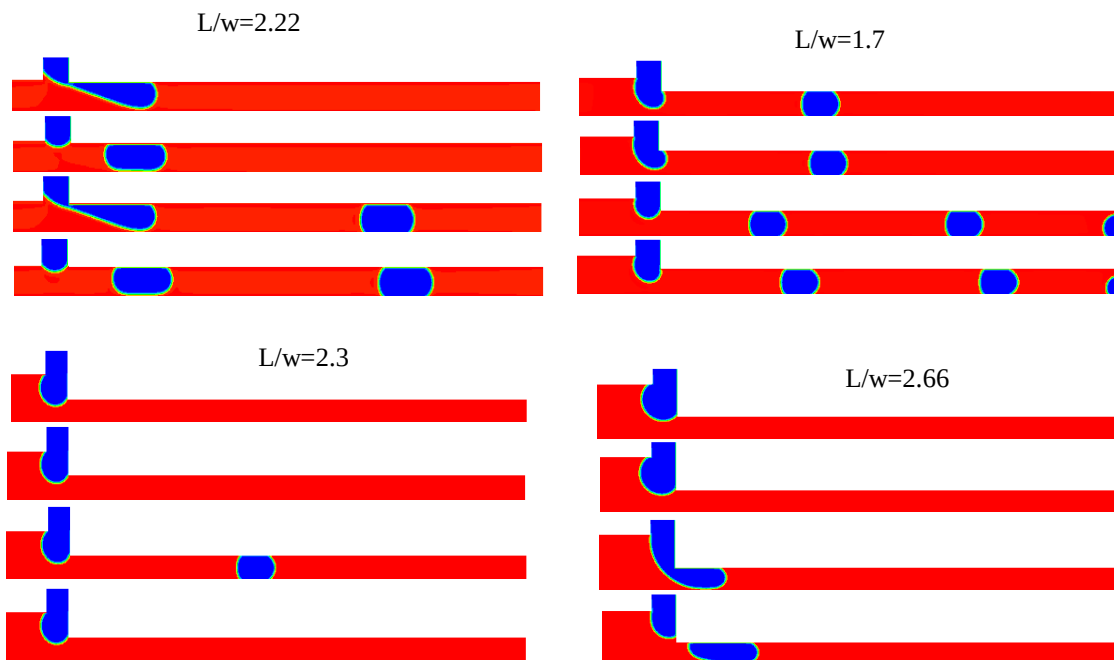


شکل ۴-۲۵: طول قطره بی‌بعد در نرخ‌های حجمی متفاوت در نسبت لزجت ۰.۲۵ و $Ca=0.005$

۴-۶-۵-۱ تاثیر هندسه بر روی فرآیند تولید قطره

همانگونه که قبلاً نیز بیان شد، بسیاری از تحقیقات انجام شده به تاثیر کمیت‌های موثر بر سائز و شکل قطره‌ها اختصاص یافته است. در این قسمت مطالعه‌ای انجام شده است تا بتوان تاثیر عدم تقارن ایجاد شده در دو قسمت مقطع میکروکانال T-شکل را در زمان بی‌بعد $T = \frac{t}{t_n}$ که در آن $t_n = \frac{H}{v_g}$ ، پهنای کانال و v_g سرعت فاز سبک است [۲۷۲]، بررسی نمود. که در آن دیگر کمیت‌ها بر اساس تحقیق منخ [۲۸۲] در نسبت چگالی ۱ و نسبت لزجت ۰/۱۲۵ تنظیم شده‌اند. همانطور که در شکل ۴-۲۶ دیده می‌شود، با افزایش پهنای کانال سمت چپ، H_l ، به ۱/۵ برابر عرض نازل (W)، در حالی که عرض کانال سمت راست تقاطع H_R ($H_R = W$) ثابت است، اندازه قطره‌ها کوچک‌تر و تعداد قطره‌ها افزایش یافته اما در ایجاد تاخیر در آزادسازی قطره‌ها از کانال فرعی تاثیری نداشته است. با افزایش H_l به ۲ برابر عرض نازل (W)، در شکل ۴-۲۶ (ج) می‌توان دید که تنها یک قطره تولید شده است. در مقایسه این شکل با حالتی که H_l به ۲/۵ افزایش یافته دیده می‌شود که در شکل ۴-۲۶ (د) نیز تنها یک قطره اما با طول بزرگ‌تر در کانال اصلی تشکیل شده است. با نگاهی به شکل ۴-۲۶ (ج) و شکل ۴-۲۶ (د) می‌توان دریافت که با ایجاد عدم تقارن در دو طرف تقاطع T-شکل، از یک تفاضل معین به بعد، فاز پراکنده در جهت مخالف جریان در کانال اصلی حرکت می‌کند که این باعث ایجاد تاخیر در وارد شدن فاز پراکنده به داخل کانال اصلی و در نتیجه تشکیل قطره می‌گردد. هر چه این فاصله بیشتر باشد، حجم سیال ثانویه‌ای که این اختلاف ارتفاع را پر می‌کند بیشتر می‌شود. از این رو، در شکل ۴-۲۶ (د)، طول قطره تشکیل شده نیز بیشتر خواهد بود.

¹ Junction



شکل ۴-۲۶: مقایسه تشکیل قطره در نسبت‌های مختلف پهنای دو طرف تقاطع در $Ca=0.005$ و $T=1/33$ در حالت‌های

(a) $H_L/H_R=1$, (b) $H_L/H_R=1.5$, (c) $H_L/H_R=2$, (d) $H_L/H_R=2.5$

یکی از موضوعات مهم در زمینه تولید قطره در دارورسانی و کپسول‌سازی که از طریق سیستم‌های میکروفلوئیدیک انجام می‌شوند مربوط به دریچه یا شیر است. یکی از اهداف ایجاد شیر یا دریچه ایجاد تاخیر در ورود فاز پراکنده^۱ یا ثانویه به داخل کانال اصلی است. به طور کلی، دو نوع شیر وجود دارد. شیرهای منفعل^۲ و شیرهای فعال^۳ [۲۷۶]. رویکردهای متفاوتی در زمینه شیرها پیشنهاد شده است. به عنوان مثال در برخی از فرآیندها از نوعی وکس یا موم برای انسداد مسیر فاز پراکنده، در کانال فرعی، استفاده می‌کنند. سپس موم یا وکس، در زمان مورد نظر، توسط لیزر ذوب شده و باعث آزاد شدن فاز پراکنده یا ثانویه می‌شود. اگر چه این روش دقیق بوده و فاز ثانویه را درست در زمان مورد نظر آزاد می‌کند، اما ذوب شدن وکس باعث آلودگی سیالات شرکت‌کننده در فرآیند می‌شود که

¹ Dispersed phase

² Passive valve

³ Active vave

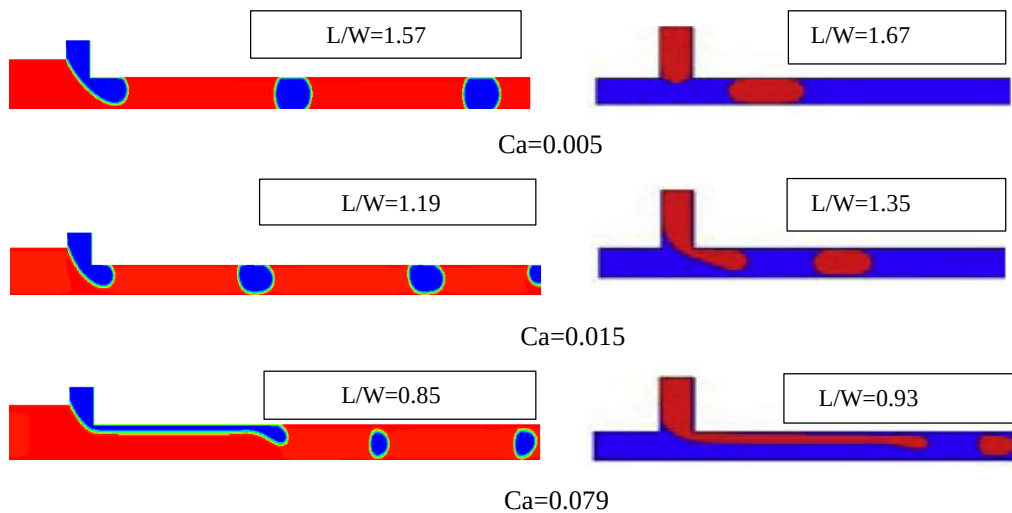
این مسئله مطلوب نمی‌باشد. این موضوع محققان را بر آن داشت تا با استفاده از دیگر روش‌ها، مانند استفاده از ربات‌های متحرک، به هدف مورد نظر برسند. این رویکرد همان روش آزمون و خطا در آزمایش‌ها است که می‌تواند هزینه‌های مالی و زمانی قابل توجهی را تحمیل کند. به این ترتیب، روش‌های مهندسی و علوم شبیه‌سازی به دلیل امکان ارزیابی کمیت‌های تاثیرگذار در فرآیندهای مختلف می‌توانند راهگشا باشند. از نتایج بدست آمده اینگونه می‌توان نتیجه گرفت که این اختلاف ارتفاع می‌تواند نقشی مشابه شیر در سیستم‌های میکروفلویدیک ایفا کند.

۴-۶-۵-۲ تاثیر عدد بی بعد موینگی Ca

در آزمایش‌های نوکلئیک اسید (NA) یا تحلیل سلولی، افزایش تعداد قطره‌های تولید شده جهت آماده‌سازی نمونه‌های مورد آزمایش بسیار مطلوب است. یکی از راه‌های افزایش تعداد قطره در سیستم‌های میکروفلویدیک افزایش عدد موینگی است. به طوری که با افزایش این عدد رژیم جریان از فشاری به قطره‌ای تغییر پیدا می‌کند و در رژیم جریان قطره‌ای، تعداد قطره‌ها افزایش می‌یابد در حالی که اندازه قطره‌های تولید شده کوچک‌تر می‌گردد.

برای افزایش تاثیر عدد موینگی در افزایش تعداد قطره‌ها، یافته این پژوهش از مرحله قبل یعنی $H_l = 1.5H_g$ که باعث افزایش تعداد قطره‌های تولید شده بود به عنوان هندسه مورد مطالعه انتخاب شده است. دیگر کمیت‌های این بخش بر اساس تحقیق شی [۲۸۰] در نظر گرفته شده و ثابت نگه داشته شده‌اند. همانطور که در شکل دیده می‌شود، با افزایش عدد کاپیلاری از ۰/۰۰۵ به ۰/۰۷۹ در یک تقاطع T - شکل نامتقارن تعداد قطره‌های تولید شده دو برابر شده است. این افزایش می‌تواند در آزمایش‌های تکثیر ژن و نوکلئیک اسید که نیاز به تعداد نمونه بیشتری برای انجام آزمایش دارند می‌تواند پر کاربرد باشد. همچنین انتظار می‌رود که تغییر رژیم جریان به قطره‌ای در $Ca = ۰/۰۱$ اتفاق بیفتد در حالی که در شکل ۴-۲۷ می‌توان دید که در $Ca = ۰/۱۵$ همچنان رژیم جریان به صورت فشاری باقی می‌ماند. از این رو می‌توان دریافت که تغییر در هندسه تقاطع در سیستم‌های

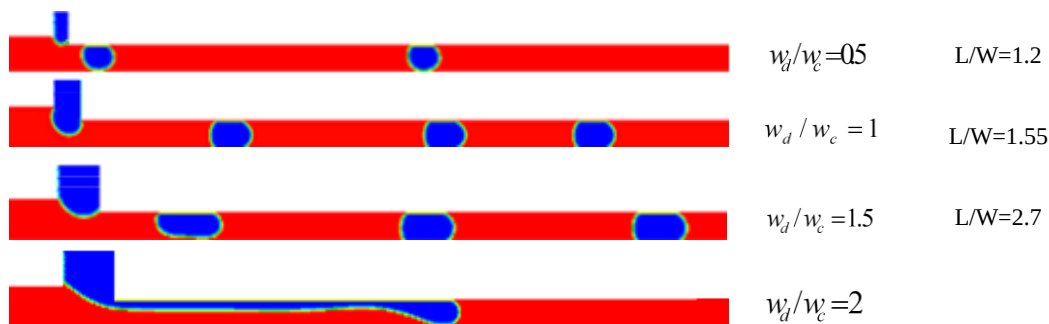
میکروفلویدیک می‌تواند مرزهای تغییر رژیم جریان را نیز تا اندازه‌ای تغییر دهد.



شکل ۴-۲۷ مقایسه تعداد قطره‌های تولید شده در اعداد موینگی متفاوت در الف) $H_L / H_R = 1.5$ و مقایسه آن با ب) $H_L / H_R = 1$

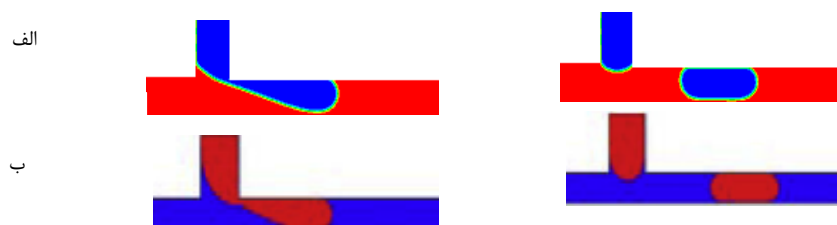
۴-۵-۳ تغییر در پهنای کانال فرعی یا نازل

پژوهش‌های قبلی [۲۷۲-۲۸۰] نشان می‌دهد که تغییر در عرض کانال فرعی می‌تواند بر اندازه قطره‌ها تاثیرگذار باشد. به این صورت که با افزایش پهنای کانال فرعی، اندازه قطره‌ها بزرگ‌تر می‌شود. در این بخش $H_l = 1.5H_g$ به عنوان هندسه مورد مطالعه انتخاب شده است تا تغییر ایجاد شده به دلیل تغییر در پهنای کانال اصلی بررسی گردد. در شکل ۴-۲۸، در مقایسه شکل b با دیگر حالت‌ها می‌توان دریافت که تغییر نسبت پهنای کانال فرعی به 0.5 ، اندازه و تعداد قطره‌های تولید شده را کوچک‌تر کرده است. در حالی که با افزایش این نسبت به مقدار $1/5$ تفاوتی در تعداد مشاهده نمی‌شود اما طول قطره‌ها افزایش قابل توجهی داشته است. با افزایش نسبت پهنای کانال فرعی به اصلی به 2 ، رژیم جریان به رژیم جتی تغییر یافته و قطره تشکیل نشده است.

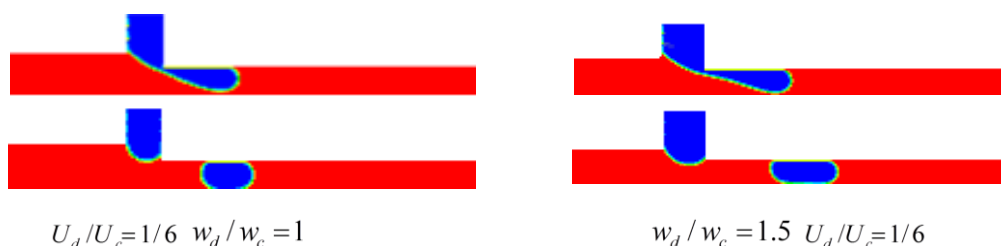


شکل ۴-۲۸: تاثیر نسبت پهنای متفاوت دو کانال اصلی و فرعی در شرایط $H_L/H_R=1.5$, $Q=0.25$

برای ارزیابی بیشتر، مقایسه‌ای بین نتایج حاصل از شبیه‌سازی حاضر با نتایج حاصل از شی [۲۸۰]، در نسبت چگالی واحد، نسبت لزجت $0.25/0$ و در نرخ جریان‌های حجمی مختلف صورت گرفته، در شکل ۴-۲۹ به تصویر درآمده است. نتایج حاصل از شبیه‌سازی حاضر با نتایج حاصل از شبیه‌سازی شی [۲۸۰] در حالتی که ارتفاع دو طرف تقاطع یکسان است، تطابق خوبی را نشان می‌دهند.

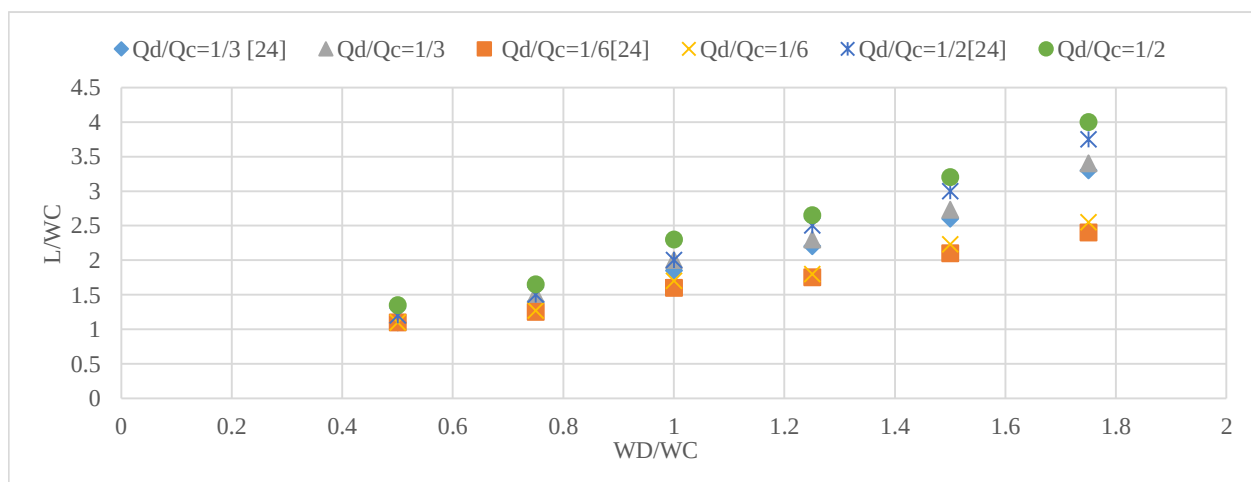


شکل ۴-۲۹: مقایسه تشکیل قطره در شبیه‌سازی حاضر (الف) و تحقیق شی (ب) [۲۸۰] در $Ca=0.006$
 $w_d/w_c=1$



شکل ۴-۳۰: تشکیل قطره در حالت $Ca=0.006$ و در نسبت دبی‌های حجمی متفاوت برای $H_L/H_R=1.5$

مرحله دوم، $H_l = 1.5H_R$ در نظر گرفته شد. از نتایجی که در شکل ۴-۳۰ مشاهده می‌شود می‌توان دریافت که به طور کلی با افزایش نسبت سرعت‌های دو کانال اصلی به فرعی و با افزایش نسبت پهنای کانال فرعی به اصلی، طول بی‌بعد شده قطره‌های تولید شده افزایش یافته، اما در $H_l = 1.5H_g$ ، طول قطره‌ها تا حدودی افزایش بیشتری را نشان می‌دهند. برای مشاهده بیشتر، نتایج حاصل از $\frac{u_d}{u_c} = \frac{1}{6}$ در دو حالت $\frac{W_d}{W_c} = 1$ و $\frac{W_d}{W_c} = 1.5$ در شکل ۴-۳۱ نشان داده شده است. در شکل دیده می‌شود که افزایش نسبت پهنای دو کانال در یک نسبت سرعت یکسان، طول قطره‌های تولید شده را افزایش می‌دهد.

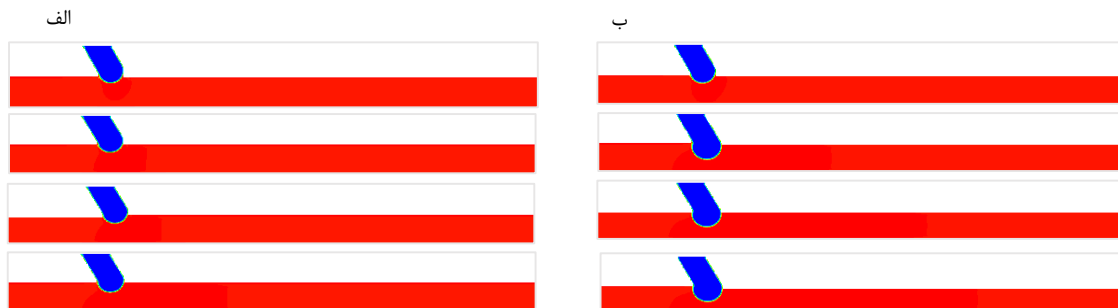


شکل ۴-۳۱: مقایسه سائز قطره در نسبت پهنای متفاوت با تحقیق شی [۲۸۰] در $Ca=0.006$ و $H_L / H_R = 1.5$

۴-۵-۶-۴ تاثیر زاویه تقاطع T-شکل

برای بررسی تاثیر زاویه تقاطع، دو زاویه ۸۰ و ۶۰ درجه برای آن در نظر گرفته شده است. بر اساس یافته‌های قبلی، در رژیم جریان فشاری در محدوده $Ca < 0.01$ انتظار می‌رود که قطره تشکیل شود. اما همانطور که در شکل ۴-۳۲ و شکل ۴-۳۳ دیده می‌شود، با کاهش زاویه تقاطع به ۶۰ درجه، نه تنها قطره‌ای تشکیل نمی‌شود بلکه فاز پراکنده از کانال فرعی بدون هیچ گونه شکستی وارد کانال اصلی شده و یک جریان باریک از این سیال را در کانال اصلی ایجاد می‌کند. با افزایش مقدار نرخ

جریان حجمی به $1/5$ عرض این جریان افزایش می‌یابد و امکان اختلاط آرام‌تر و با سطح تماس بیشتر فراهم می‌شود.



شکل ۳۲-۴ تاثیر زاویه تقاطع در فرایند تشکیل قطره در دو نسبت دبی حجمی در $Ca = 0.005$ و نسبت لزجت 0.125 و زاویه تقاطع $\theta = 60$ (الف) $Q = 0.5$ و (ب) $Q = 1.5$



شکل ۳۳-۴ تاثیر زاویه تقاطع در فرایند تشکیل قطره در دو نسبت دبی حجمی در $Ca = 0.005$ و نسبت لزجت 0.125 و زاویه تقاطع $\theta = 80$ (الف) $Q = 0.5$ و (ب) $Q = 1.5$

با تغییر زاویه تقاطع به مقدار 80 درجه، در هر دو مقدار نرخ جریان حجمی 0.5 و $1/5$ فاز ثانویه به داخل کانال اصلی وارد می‌شود و در جهت عکس جریان اصلی حرکت می‌کند. برای درک بهتر علت آن، خطوط جریان در دو زاویه 90 و 60 درجه در محل تقاطع در شکل ۳۴-۴ نشان داده شده است. همانطور که در شکل دیده می‌شود، جهت چرخش ورتی سیتی‌ها در زاویه 90 درجه، به گونه‌ایست که به حرکت فاز ثانویه به داخل کانال اصلی کمک می‌کند اما در زاویه 60 درجه جهت

چرخش و رتیسیتی‌ها عکس یکدیگر می‌باشد. نتایج حاصل در مجله سیالات مولکولی^۱ به چاپ رسیده است [۲۸۶].



شکل ۴-۳۴: مقایسه خطوط جریان در دو زاویه مختلف در شرایط $Ca=0.005$, $Q=0.5$, $\eta_d/\eta_c = 0.125$, $\theta = 60$ و $\theta = 90$

در برخی از فرآیندهای شیمیایی، بدست آوردن یک ترکیب یک‌دست از سیال‌های مورد استفاده، مطلوب است. که یک اختلاط آرام می‌تواند ترکیب یک‌دست‌تری را ایجاد کند. نتایج این بخش نشان می‌دهد که یک عدد موینگی در محدوده رژیم جریان فشاری با تغییر زاویه تقاطع می‌تواند زمینه اختلاط موثرتر با افزایش سطح تماس را برای سیالات مورد آزمایش، بدون تغییر عدد موینگی، فراهم کند.

۷-۴ نتیجه‌گیری

در این قسمت از پژوهش، تشکیل قطره در یک میکروکانال T-شکل شبیه‌سازی شد. از آنجا که زاویه تماس در فرایند تشکیل قطره تاثیرگذار است، ابتدا اعتبار سنجی آن انجام شده و سپس نتایج حاصل از شبیه‌سازی تشکیل قطره در پژوهش حاضر با دیگر نتایج تجربی و عددی مقایسه گردید. سپس تاثیر کمیت‌هایی چون عدد موینگی و تغییر هندسه کانال مورد بررسی قرار گرفت. نتایج حاصل نشان می‌دهد که تغییر در ارتفاع دو طرف محل تقاطع منجر به تاخیر در تشکیل قطره و وارد شدن فاز ثانویه در کانال اصلی گردید. این عملکرد را می‌توان به عنوان عملکرد شیر در آزادسازی فاز ثانویه در نظر گرفت. کاهش نسبت پهنای کانال فرعی به اصلی، باعث کاهش اندازه و تعداد قطره‌های

¹ Moliquar Liquid

تولید شده گردید و با افزایش آن، تعداد قطره‌ها افزایش و طول بی‌بعد شده آن‌ها نیز افزایش یافت. افزایش عدد موینگی در تقاطع T - شکل نامتقارن، افزایش بیشتری در تعداد قطره‌های تولید شده نشان داد و تغییر زاویه تقاطع به ۶۰° و ۸۰°، در محدوده عدد موینگی رژیم فشاری، منتهی به تشکیل جریانی از فاز ثانویه بدو تشکیل قطره در کانال اصلی گردید که این مساله می‌تواند زمینه‌ای مناسب و آرام برای ترکیب و واکنش دو سیال را در واکنش‌های شیمیایی فراهم کند.

۸-۴ آزمایشگاه بر روی دیسک LOD

در سیستم‌های آزمایشگاه بر روی تراشه (LOC) نیروی محرکه لازم برای حرکت سیال درون میکروکانال‌های روی تراشه از طریق میکروپمپ‌ها تامین می‌شود. این مسئله برای پژوهش‌گران چالشی در سیستم‌های LOC محسوب می‌شود چرا که ساختار شیمیایی میکروپمپ‌های ساخته شده باید سازگار با نوع سیالات شرکت کننده در فرایند باشد تا بتواند آن را به درون میکروکانال‌ها پمپاژ کند. به عبارت دیگر، هیچ‌گونه واکنش شیمیایی با سیالات نداشته باشد. از این رو استفاده از LOC‌ها محدود به برخی آزمایش‌ها مشخص و زمینه‌های کاربردی معین می‌شود. این مسئله، توجه محققان را به استفاده از بکارگیری دیگر نیروها جهت تامین نیروی محرکه لازم برای حرکت سیال درون میکروکانال‌ها ترغیب نمود. یکی از راه‌حل‌های خلاقانه‌ای که مطرح گردید، استفاده از صفحاتی به شکل دیسک بود که در آن میکروکانال‌ها با طرح‌های مشخص به صورت متقارن بر روی دو صفحه دیسک بسیار نازک، با ابزارهای مخصوص، تراشیده شده و سپس این دو صفحه توسط چسب‌های ورقه‌ای شکل، با الگویی مطابق میکروکانال‌های تراشیده شده بر روی دیسک‌ها، به یکدیگر چسبانده می‌شوند. این دیسک‌های دایروی از مرکز دیسک بر روی یک پین قرار می‌گیرند و این پین‌ها با سرعت‌های دورانی مشخص شروع به چرخش کرده و سیالی که در مخزن‌های تعبیه شده در داخل این دیسک‌ها قرار دارند، از طریق نیروی گریز مرکز یا کریولیس وارد شده بر آن‌ها در داخل کانال‌ها جاری می‌شوند. این نوآوری، بسیاری از محدودیت‌های LOC‌ها را نداشت و از طرفی امکان تغییر جهت حرکت

سیال با استفاده از تغییر جهت چرخش پین فراهم می‌شد. علاوه بر آن، امکان آزمایش‌های متعدد همزمان با سری‌سازی آن‌ها، در زمینه‌های گوناگون و حتی انجام واکنش‌های شیمیایی را فراهم می‌ساخت. بررسی‌ها نشان داد که در برخی زمینه‌ها چالش‌هایی در این سیستم‌ها وجود دارد. مثلاً برای بررسی فرایندهایی که در این سیستم‌ها صورت می‌گیرد نیاز به دوربین‌های عکس‌برداری با توانایی‌های بسیار بالا می‌باشد که بتواند تعداد عکس‌های کافی برای تحلیل فرایند مورد نظر را ثبت کند. این دوربین‌ها بسیار گران‌قیمت هستند و به طور سفارشی ساخته می‌شوند. بنابراین امکان بررسی فرایندها در هر دور چرخشی وجود نداشت. یعنی قابلیت دوربین‌ها تا حدودی آزمایش‌های را محدود می‌کرد. بر اساس مطالعاتی که انجام شد، پژوهش عددی که رژیم‌های مختلف جریان در سیستم‌های گریز از مرکز را بررسی کند، انجام نشده بود. رژیم‌های مختلف جریان با تغییر در فرکانس چرخش دیسک ایجاد می‌شوند. همچنین فرایند ولوینگ، که برای ایجاد تاخیر در ورود فاز ثانویه به داخل فاز کانال اصلی صورت می‌گیرد، از چالش‌های مطرح بود. با استفاده از شبیه‌سازی عددی در این زمینه، نه تنها می‌توان روش بولتزمن شبکه‌ای را زمینه کاربردی جدیدی توسعه داد بلکه امکان بررسی پارامترهای تاثیرگذار در این فرایندها فراهم می‌شود و به این ترتیب می‌توان در هزینه‌های مادی و زمانی و انسانی صرفه‌جویی کرد. هدف نهایی این رساله بررسی عددی سیستم‌های آزمایشگاه بر روی دیسک یا LOD با استفاده از روش بولتزمن شبکه‌ای، در نسبت چگالی و لزجت $0.1 - 1$ است که در محدوده اعداد Bo از 0.09 تا 0.9 که به صورت پیش فرض برای آن تعیین گردید، جهت بررسی رژیم‌های مختلف جریان، می‌باشد. لذا، در این بخش از رساله ابتدا نیروهای محرکه در این سیستم‌ها معرفی شده و نحوه عملکرد آن‌ها توضیح داده می‌شود. سپس اعتبار سنجی لازم صورت گرفته و در نهایت بررسی کمیت‌ها تاثیرگذار و رژیم‌های مختلف جریان مورد بررسی قرار می‌گیرد. از آنجا که در سیستم‌های میکروفلویدیک گریز از مرکز، دو نیروی گرانشی گریز از مرکز در تقابل با نیروی کشش سطحی است، عدد بی‌بعد بوند که بیانگر این نسبت‌هاست به عنوان عدد بی‌بعد مطرح در این سیستم‌ها مورد بررسی قرار می‌گیرد.

از زمان ابداع سیستم‌های میکروفلوئیدیک که قریب به ۲۰ سال از آن می‌گذرد، این سیستم‌ها به عنوان یک ابزار کارآمد در آزمایش‌های مربوط به زیست‌شناختی، که در آن از سلول‌های موجودات زنده برای تحقیق استفاده می‌شود، به کار گرفته شدند. این صفحات از این مزیت بهره می‌برند که از آن‌ها می‌توان برای انجام همزمان چند فرآیند، مانند اختلاط نمونه‌های مورد آزمایش و تکثیر ژن با استفاده از شبکه‌ای از میکروکانال‌های مرتبط استفاده نمود. شبکه میکروکانال‌ها به این معنی است که آزمایش‌ها و فرآیندهای مختلف جداگانه بر روی دیسک در یک زمان انجام می‌شوند که این آزمایش‌ها یا فرآیندها می‌توانند به هم مرتبط باشند یا نباشند. همچنین به دلیل اندازه بسیار کوچک این سیستم‌ها، نه تنها اندازه بسیار کوچکی از نمونه‌های بیولوژیکی برای انجام آزمایش لازم است بلکه سرعت و دقت انجام آزمایش نیز افزایش خواهد یافت. به طور کلی، در ابتدا دو رویکرد مختلف برای تامین نیرو محرکه این دیسک‌ها در نظر گرفته شد. پمپ‌های خارجی و نیروهای گریز از مرکز. اما استفاده از نیروی گریز از مرکز بیشتر مورد توجه پژوهش‌گران قرار گرفت. زیرا در مقایسه با دیگر نیروها از مواد ارزان‌تری قابل تامین بود که با یک موتور ساده قابل حصول است و نه تنها می‌تواند نیروی گریز از مرکز لازم را تامین کند بلکه حباب‌ها و مواد بجا مانده از آزمایش قبلی را می‌توان با تزریق مقدار کمی آب در میکروکانال‌ها کاملاً زدود. علاوه بر این، محدودیت پمپ‌ها، که از لحاظ شیمیایی باید با سیالات مورد آزمایش سازگار باشد را ندارد و امکان استفاده از سیالات گوناگون با خواص فیزیکی-شیمیایی مختلف را فراهم می‌کند. این ویژگی‌های برجسته پژوهشگران را متقاعد به استفاده گسترده از این تجهیزات در زمینه‌های تحقیقاتی مختلف علی‌الخصوص آزمایش‌های پزشکی کرده است [۲۸۷، ۲۷۶] که از کاربردهای آن می‌توان به موارد زیر اشاره کرد: آزمایش‌های بر پایه اسید نوکلئیک [۲۸۹-۲۹۲] که عموماً مربوط به آماده‌سازی نمونه‌های مورد استفاده در تحقیقات مربوط به ژن می‌باشد، آزمایش‌ها مربوط به بررسی سیستم ایمنی بدن که بر اساس نزدیکی عملکرد آنتی‌بادی‌ها

به آنتی ژن در سیستم بیولوژیکی بدن هستند [۲۹۳-۲۹۴]. اندازه گیری دقیق سیالاتی که به محاسبات بسیار دقیق سیالات مورد استفاده در فرآیند به چند زیرشاخه، برای بدست آوردن نتایج دقیق تر، می پردازد [۲۹۶-۲۹۸] و اختلاط سیالات که از فرآیندهای دشوار در سیستم های میکروفلوئیدیک است و به توزیع یک دست نمونه ها و واکنش گر ها در فرآیندهای شیمیایی اختصاص دارد. یکی از زمینه های بسیار پر کاربرد و فراگیر میکروفلوئیدیک دست کاری قطره های تولید شده است. زیرا این فرآیند دارای قابلیت موازی سازی با دیگر فرآیندها مانند تکثیر اسید نوکلئیک، آماده سازی پی در پی نمونه های مورد آزمایش و آزمایش های مربوط به سیستم ایمنی با استفاده مقرون به صرفه از سیالات گران قیمت مورد استفاده در واکنش است [۲۹۹-۳۰۰]. در طی انجام همه فرایندهای ذکر شده، برای مشاهده دقیق آنچه در این سیستم ها اتفاق می افتد، نیاز به استفاده از دوربین های عکس برداری دقیق با سرعت بالای تصویربرداری می باشد که این مسئله هزینه های هنگفت و قابل توجهی را بر پژوهش تحمیل می کند. از این رو، همگام با آزمایش های تجربی، روش های شبیه سازی مهندسی در کاهش هزینه های مالی و زمانی می تواند راه گشا باشد. از آنجایی که سیستم های آزمایشگاه بر روی دیسک (LOD) نوظهور هستند، شبیه سازی های عددی بسیار محدودی به آنها اختصاص یافته است [۳۰۱-۳۰۵]. در این بخش، شبیه سازی این سیستم ها با استفاده از روش بولتزمن شبکه ای، فرایند تولید قطره و بررسی رژیم های مختلف جریان صورت گرفته است. پیش از ارائه نتایج حاصل از شبیه سازی، اعتبارسنجی و توسعه آن، به نیروهای مرتبط در فرآیندهای میکروفلوئیدیک و معادلات مرتبط پرداخته می شود.

۲-۸-۴ معادلات بولتزمن شبکه ای

در معادلات مورد استفاده در این بخش، بجای عبارت نیروی گرانشی که در بخش ۳-۴ آمده است، نیروهای گریز از مرکز و کریولیس جایگزین می شوند. مقادیر ماکروسکوپی سرعت ها و فشار به ترتیب u ، v و p توسط تابع توزیع g و غلظت (C) و چگالی (ρ) نیز توسط معادله $\bar{h}$ محاسبه

می‌گردند. F عبارت نیرویی است که به عنوان عامل حرکت یا نیروی محرکه سیال شناخته می‌شود که در سیستم‌های LOD همان نیروی گریز از مرکز و کریولیس می‌باشند و در بخش بعدی شرح کاملی از آن آورده شده است.

$$\bar{g}_\alpha(x + e_\alpha \delta t, t + \delta t) - \bar{g}_\alpha(x, t) \quad (38-4)$$

$$= -\frac{1}{\tau + 0.5} (\bar{g}_\alpha - \bar{g}_\alpha^{eq})(x, t) + \delta t (e_\alpha - u) \cdot [\nabla \rho_s^2 (\Gamma_\alpha - \Gamma_\alpha(0)) + (\mu \nabla C + F) \Gamma_\alpha]_{(x, t)}.$$

$$\bar{h}_\alpha(x + e_\alpha \delta t, t + \delta t) - \bar{h}_\alpha(x, t) \quad (39-4)$$

$$= -\frac{1}{\tau + 0.5} (\bar{h}_\alpha - \bar{h}_\alpha^{eq})(x, t) + \delta t (e_\alpha - u) \cdot [\nabla C - \frac{C}{\rho_s^2} (\nabla p_t - \mu \nabla C + F)] \Gamma_\alpha \Big|_{(x, t)} + \delta t \nabla \cdot (M \nabla \mu) \Gamma_\alpha \Big|_{(x, t)}.$$

کمیت‌های چگالی و غلظت^۱ نیز از روابط زیر بدست می‌آیند:

$$C = \sum_\alpha \bar{h}_\alpha \quad (40-4)$$

$$\rho(C) = C\rho_1 + (1 - C)\rho_2 \quad (41-4)$$

این روش از رویکرد نفوذ برای برای شبیه‌سازی سطح بین دوفاز استفاده می‌کند و به این منظور از مفهوم سطح حداقل انرژی در مرز بین دوفاز و پتانسیل شیمیایی بهره می‌برد که رابطه انرژی، با حذف عبارت‌هایی که قابل اغماض هستند، به صورت زیر در نظر گرفته می‌شود:

$$E_{mix}(C, \nabla C) = E_0(C) + \frac{K}{2} |\nabla C|^2, \quad (42-4)$$

که در آن

¹ Composition

$$E_0(C) \approx \beta C^2 (C-1)^2 \quad (43-4)$$

و از طریق روابط زیر پتانسیل شیمیایی با آن ارتباط پیدا می کند:

$$\mu = \mu_0 - K \nabla^2 C = \text{const} \quad (44-4)$$

$$\mu_0 = \partial_c E_0 \quad (45-4)$$

در روابط زیر D ضخامت سطح بین دوفاز است که معمولاً برابر ۴ واحد لیتس در نظر گرفته می شود و با داشتن مقادیر K و β می توان دیگر کمیت ها مانند کشش سطحی σ را محاسبه کرد.

$$K = \frac{\beta D^2}{8} \quad \sigma = \frac{\sqrt{2K\beta}}{6} \quad (46-4)$$

خیس شونده گی سطح از طریق قانون یونگ $\cos \theta_{eq} = (\sigma_{sg} - \sigma_{sl}) / \sigma = -\Omega_c$ و عدم انتقال جرم از مرزها با اعمال شرط $n \cdot \nabla C|_s = \frac{\phi_c}{k} (C_s - C_s^2)$ بر روی دیواره جامد، مطابق آنچه در بخش قبل توضیح داده شد، تضمین می شود که در این روابط σ_{sg} و σ_{sl} به ترتیب کشش سطحی بین فاز جامد-گاز و فاز مایع-جامد است و n بردار عمود بر سطح جامد و به سمت داخل فضای حل می باشد و در آن ϕ_c از طریق روابط یونگ قابل محاسبه است. فاکتورهای ماکروسکوپی فشار p و سرعت u نیز از روابط (۴۷-۴) و (۴۸-۴) قابل محاسبه هستند.

$$p = \sum_{\alpha} \bar{g}_{\alpha} + \frac{\delta t}{2} u \cdot \nabla \rho c_s^2 \quad (47-4)$$

$$\rho u = \frac{1}{c_s^2} \sum_{\alpha} e_{\alpha} \bar{g}_{\alpha} + \frac{\delta t}{2} \mu \nabla C \quad (48-4)$$

۳-۸-۴ عملکرد نیروها در سیستم‌های میکروفلوئیدیک گریز

از مرکز

به منظور بدست آوردن درک درستی از مکانیزم عملکرد نیروها در سیستم‌های میکروفلوئیدیک گریز از مرکز (LOD)، ابتدا لازم است نیروهای موثر در این سیستم‌ها معرفی گردد. به طور کلی، نیرو در این سیستم‌ها به دو دسته کلی نیروهای شبه پتانسیل^۱ و نیروهای غیر شبه پتانسیل^۲ تقسیم می‌شوند. نیروهای شبه پتانسیل به آن دسته از نیروهای اطلاق می‌گردد که در اثر شتاب ناشی از نیروی گریز از مرکز بر سیال اثر می‌کند. این نیروها شامل نیروی گریز از مرکز (F_c)، نیروی کریولیس (F_{co}) و نیروی اوپلر (F_{Eu}) هستند که هر سه تابعی از شتاب گریز از مرکز می‌باشند و به صورت زیر معرفی می‌گردند.

$$F_c = -m\omega \times (\omega \times r) \quad (49-4)$$

$$F_{co} = -2m\omega \times \frac{dr}{dt} \quad (50-4)$$

$$F_{Eu} = -m \frac{d\omega}{dt} \times r \quad (51-4)$$

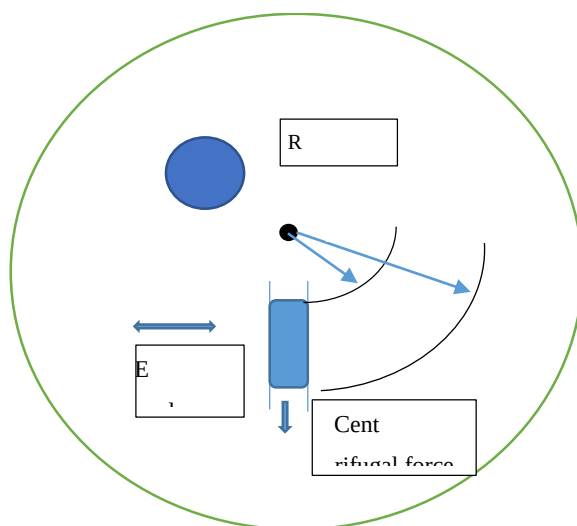
که در آن‌ها m نمایانگر جرم، ω فرکانس چرخشی و r فاصله از مرکز دیسک می‌باشد. جهت عملکرد این نیروها در شکل ۳۵-۴ نمایش داده شده است. بر اساس [۳۰۵-۳۰۱] نسبت نیروی کریولیس به گریز از مرکز را به صورت زیر می‌توان تعریف کرد که در آن ρ و μ نشان‌دهنده چگالی و لزجت سیال ثانویه (پراکنده) و w پهنای کانال فرعی می‌باشند.

$$\frac{F_{co}}{F_c} = \frac{\rho \omega^2 w}{4\mu} \quad (52-4)$$

¹ Pseudo Forces

² Non – pseudo Forces

علاوه بر میکروکانال‌ها، در سیستم‌های میکروفلوئیدیک گریز از مرکز، جهت ذخیره سیالات مورد آزمایش، منابعی به شکل کروی تعبیه و در داخل دیسک تراشیده می‌شود و سیالات از طریق پیپت یا ربات‌های پیپت در این مخازن تزریق می‌گردند.



شکل ۴-۳۵: شمایی از یک سیستم آزمایشگاه بر روی دیسک (LOD) و نیروهای وارد بر سیال درون میکروکانال [۳۰۰]

مکانیزم عملکرد این نیروها به این صورت است که هنگامی که نیروی گریز از مرکز از آستانه نیروی مقاومت ناشی از چسبندگی سیال و دیواره عبور می‌کند، این نیرو بر نیروی چسبندگی سیال و دیواره غلبه کرده و باعث جاری شدن سیال اصلی یا پیوسته در کانال اصلی می‌گردد. در این هنگام، نیروی کریولیس که مرتبه بزرگی آن به نیروی گریز از مرکز مرتبط است، یک نیروی متقاطع که عمود بر فاز پیوسته در کانال اصلی است، ایجاد می‌شود. در واقع نیروی کریولیس بر سیال ثانویه در کانال فرعی اعمال می‌شود و باعث رانش سیال پراکنده (ثانویه) در این کانال می‌گردد. در اثر این نیرو، فاز ثانویه وارد کانال اصلی شده و حجمی از مقطع این کانال را پر می‌کند و لایه‌ای از فاز ثانویه به تدریج در کانال اصلی تشکیل می‌گردد. هنگامی که نیروی برشی ناشی از فاز اصلی بر نیروی کشش سطحی فاز ثانویه غلبه کند، باعث نازک‌تر شدن تدریجی سیال ثانویه در کانال اصلی و در نهایت شکسته شدن

آن می‌گردد. در این مکانیزم که به جریان فشاری معروف است، در واقع بخشی از سیال اصلی در کانال اصلی، که در پشت سیال ثانویه‌ای که در کانال اصلی قرار دارد، جمع می‌گردد و فشار ناشی از آن باعث شکسته شدن سیال ثانویه می‌شود. مکانیزم تشکیل دیگر رژیم‌ها، یعنی رژیم‌های قطره‌ای و جتی، نیز مانند آنچه در سیستم‌های LOC توضیح داده شد، می‌باشد.

۴-۸-۴ شرایط مرزی

برای هر دو فاز پیوسته و پراکنده (به ترتیب اصلی و ثانویه)، شرایط مرزی ورودی شرط لغزش آزاد^۱ مطابق آنچه که لی در حباب بالا رونده تحت نیروی گرانش اعمال کرده بود [۲۶۷] در نظر گرفته شده و برای خروجی، شرط مرزی همرفت^۲ که در بخش LOC نیز معرفی گردید [۲۲۸] اعمال شده است.

۵-۸-۴ نتایج و بحث

دقت نتایج شبیه‌سازی حاضر با نتایج حاصل از شبیه‌سازی رن و همکاران [۳۰۵] اعتبار سنجی شده است. هندسه‌ای مانند آنچه که در این پژوهش استفاده شده و در شکل ۴-۳۶ نشان داده شده است، دارای پهنای کانال ۲۰۰ میکرومتر برای کانال فرعی و اصلی، در نظر گرفته شد و خواص سیالات مورد استفاده در جدول ۲-۴ بیان شده است.

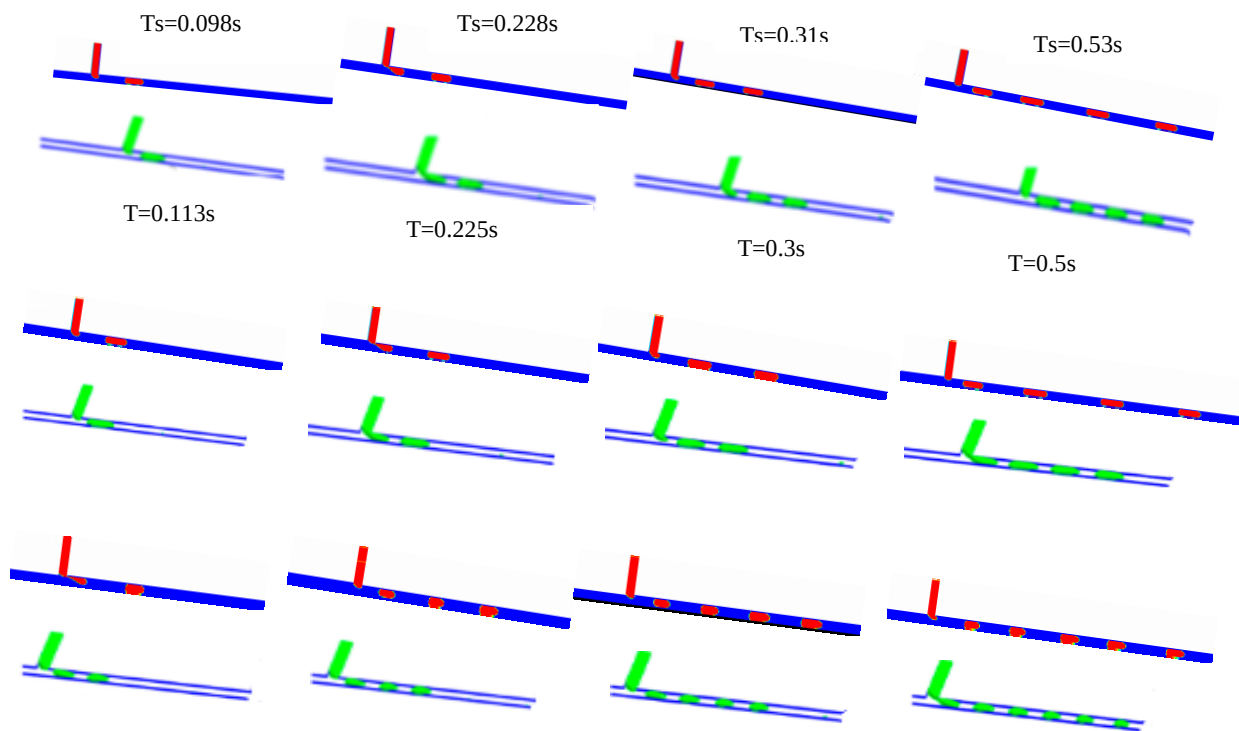
جدول ۲-۴: خواص سیالات به کار رفته در آزمایش [۳۰۴]

Test Fluids	η (cP)	ρ (K/m^3)	σ (mN/m)
Sunflower oil	62.2	909	28.33
water	1.09	1005	

¹ Free Slip

² Convective boundary condition

دو سیال دارای چگالی تقریباً یکسان هستند اما تفاوت در مرتبه نسبت لزجت‌ها قابل توجه است. هدف از انتخاب روغن آفتابگردان و آب نه تنها به دلیل کاربرد گسترده آن‌ها در آزمایش‌های زیست‌شناسی و میکروبیولوژی است بلکه برای اثبات قابلیت شبیه‌سازی انجام شده می‌باشد [۳۰۵].



شکل ۴-۳۶: تولید قطره در سه کانال موازی در فاصله‌های مختلف از مرکز دیسک در زمان‌های مختلف در شبیه-

سازی حاضر (ردیف بالا) و مقایسه با نتایج رن [۳۰۵] در $Bo=0.2$

در سیستم‌های LOD، نیروی محرکه سیال در کانال اصلی، نیروی گریز از مرکز و برای سیال پراکنده در کانال فرعی، نیروی کریولیس می‌باشد. همانطور که معادلات (۴-۵۲) - (۴-۴۹)، نشان می‌دهند، این نیروها وابسته به فرکانس چرخشی هستند. از این رو هرگونه تغییر در فرکانس زاویه‌ای، ω ، منجر به تغییر نیروهای ذکر شده می‌شود. به این ترتیب، مکانیزم تشکیل قطره در این سیستم‌ها را اینگونه می‌توان توضیح داد. نیروی گریز از مرکز باعث رانش سیال در کانال اصلی و نیروی کریولیس باعث رانش سیال در کانال فرعی شده و برهم‌کنش این دو نیرو در محل تقاطع باعث تولید قطره می‌شود. چنانچه نیروی برشی یا فشاری سیال اصلی بر کشش سطحی فاز پراکنده که در کانال فرعی

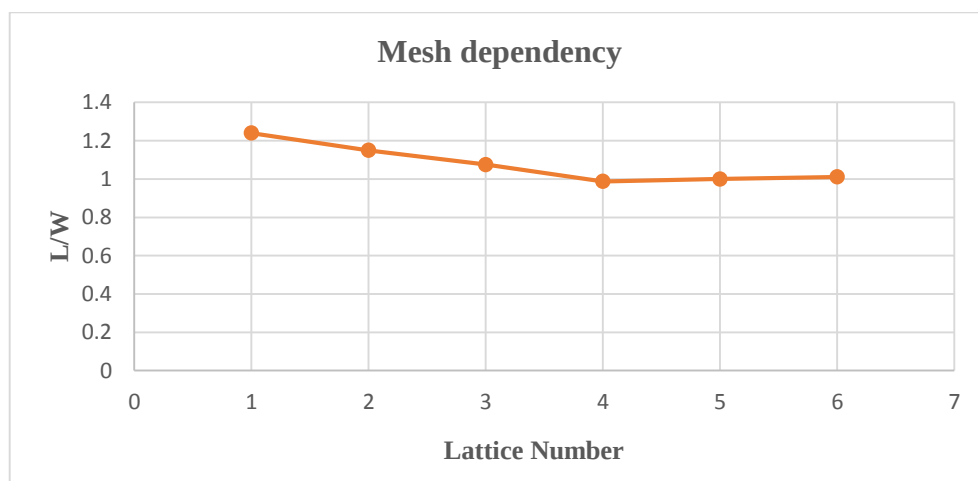
قرار دارد غلبه کند، جداسازی در سیال فرعی اتفاق می‌افتد و به این ترتیب قطره تشکیل می‌گردد. به طور کلی دو سازوکار برای تشکیل قطره در نظر گرفته می‌شود. در حالت اول، فاز پراکنده که بعد از ورود به کانال اصلی، سطح مقطع کانال را کاملاً می‌پوشاند و راه ورود فاز پیوسته را مسدود می‌کند. در واقع آنچه که باعث جدا شدن فاز پراکنده و تشکیل قطره می‌گردد فشاری است که فاز پیوسته در محل تقاطع به آن وارد می‌کند. این مکانیزم به رژیم جریان فشاری^۱ تعلق دارد. در حالت دیگر، فاز پراکنده یا ثانویه وارد کانال اصلی می‌شود و باریکه‌ای از این سیال را در این کانال تشکیل می‌دهد. هنگامی که تنش برشی وارد بر این جریان از طرف فاز پیوسته به نیروی کششی غلبه می‌کند، قطره‌ها این بار در کانال اصلی، با اندازه کوچک‌تر و تعداد بیشتر تشکیل می‌شوند که این فرآیند به رژیم جریان قطره‌ای^۲ معروف است.

بر اساس یافته‌های رن [۳۰۵]، هنگامی که فاصله از مرکز دیسک زیاد می‌شود، نیروهای گریز از مرکز و کریولیس افزایش می‌یابند. نیروهای گریز از مرکز و کریولیس وابسته به فاصله از مرکز دوران هستند. بنابراین با افزایش فاصله، این نیروها افزایش می‌یابند. افزایش این نیروها به معنی وارد شدن نیروی بیشتر بر فازهای اولیه و ثانویه است. بنابراین سرعت جریان سیالات و به طبع برهم‌کنش آنها زیاد می‌شود. به این ترتیب، تعداد قطره‌های تولید شده افزایش یافته در حالی که اندازه قطره‌ها کاهش می‌یابد. در طرح پیشنهادی رن [۳۰۵]، سه میکروکانال به صورت موازی و به فاصله ۲mm از یکدیگر بر روی دیسک‌ها تراشیده شده‌اند و هر سه آنها به یک منبع سیال و به یک میکروکانال اصلی هستند و هر کدام از این کانال‌های موازی دارای یک کانال فرعی که به صورت عمود بر این کانال‌ها طراحی شده و محتوی فاز ثانویه یا پراکنده هستند، می‌باشد. در شکل ۴-۳۶ ردیف‌های بالا نتایج شبیه‌سازی حاضر، ردیف‌های پایین نتایج پژوهش رن و زمان تشکیل قطره‌ها را نشان می‌دهد. کانال‌ها به فاصله متفاوت از مرکز دیسک قرار گرفته‌اند و به همین دلیل نیروهای کریولیس و گریز از مرکز در این کانال

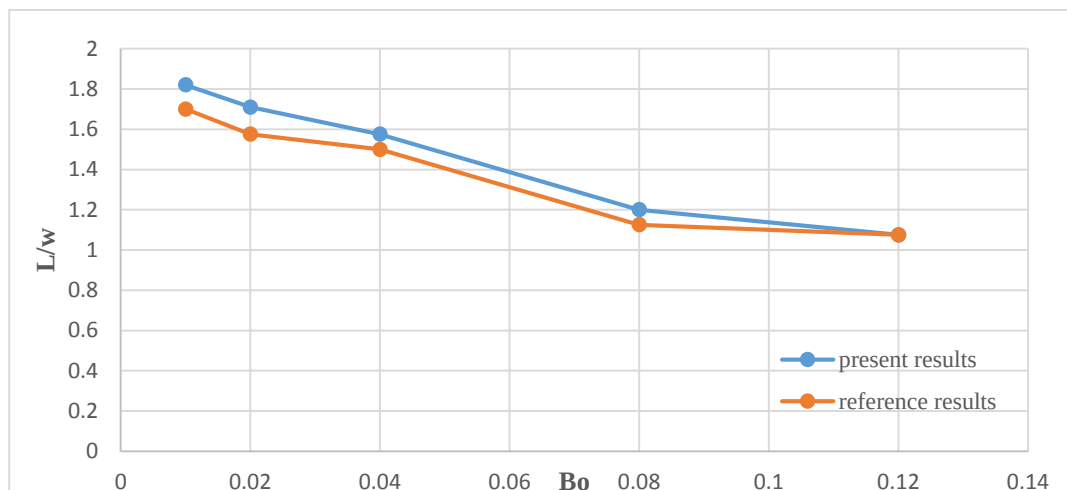
¹ Squeezing

² dripping

ها متفاوت می‌باشد. از این رو در زمان‌های مشخص شده که مربوط به هر سه کانال می‌باشد، تعداد قطره‌های متفاوت تشکیل شده است. همانطور که در شکل ۳۶-۴ دیده می‌شود، شکل ۳۶-۴ الف با شکل ۳۶-۴ ب تفاوت محسوسی در اندازه و شکل قطره‌ها ندارد اما در شکل ۳۶-۴ ج که در فاصله دورتری از مرکز دیسک قرار دارد و بنابراین نیروی گریز از مرکز و کریولیس بیشتری بر آن وارد می‌شود، تعداد قطره‌ها افزایش یافته و طول آن‌ها کاهش می‌یابد. در شکل ۳۷-۴ تعداد لتیس‌های مناسب برای بدست آوردن جواب دقیق‌تر نشان داده شده و برای بررسی کمی‌تر، شکل ۳۸-۴، سطح متوسط بی‌بعد شده قطره‌های تولید شده که در واقع طول بی‌بعد شده آن‌ها می‌باشد را نشان می‌دهد.



شکل ۳۷-۴: بررسی استقلال حل از تعداد شبکه در $Bo=0.12$ در نسبت داسیته ۱ برای تعداد شبکه به ترتیب (۱) 100×7100 (۲) 90×3000 (۳) 90×4100 (۴) 100×5500 (۵) 100×6100 (۶) 100×6700 (۷) 100×7100



شکل ۴-۳۸: تاثیر تغییر عدد بوند بر طول بی بعد شده در شبیه سازی حاضر و مقایسه آن با نتایج رن [۳۰۴]

معمولا در شبیه سازی های عددی، یک عدد بی بعد که بیانگر کمیت های مطرح و تاثیرگذار در فرآیند مورد مطالعه است به عنوان معیاری برای بررسی کمیت مورد نظر، در نظر گرفته می شود. در اینجا عدد بوند (Bo) برای بررسی کمیت نیروی گرانش در نظر گرفته شده که به صورت زیر تعریف می شود:

$$Bo = \frac{\Delta \rho r \omega^2 L^2}{\sigma} \quad (۵۳-۴)$$

این عدد نسبت نیروی گریز از مرکز به نیروی کشش سطحی را نشان می دهد. که در آن $\Delta \rho$ ، ω و r ، به ترتیب اختلاف چگالی دوفاز، فاصله از مرکز دیسک و فرکانس چرخشی را نشان می دهند و معمولا ابعاد نازل به عنوان طول شاخص L و σ به عنوان کشش سطحی در نظر گرفته می شود. بر اساس تعریف رن [۳۰۵]، سطح قطره متوسط بی بعد به صورت زیر تعریف می شود:

$$\tilde{A} = \frac{A_{average}}{WH} \quad (۵۴-۴)$$

که در آن $A_{average}$ با گرفتن میانگین از سطوح قطره های تولید شده در سه کانال موازی بدست می آید و در آن W و H ، به ترتیب، پهنا و عمق کانال هستند و در واقع سطح بی بعد همان طول

متوسط بی بعد شده قطره‌های تولید شده را نشان می‌دهد. در شکل ۴-۳۸ طول متوسط بی بعد شده نسبت به پهنای نازل، W ، نشان داده شده است. همچنان که انتظار می‌رود، با افزایش عدد Bo طول قطره‌ها کاهش می‌یابد.

جدول ۴-۳: کمیت‌های به کار رفته در شبیه‌سازی

Parameter	Symbol	Physical units	Lattice units
Continiouse phase dynamic viscosity	η_C	63.4 (cP)	0.75
Dispersed phase dynamic viscosity	η_D	1.09 (cP)	0.0131
Continiouse phase dynamic density	ρ_C	$909 (kg / m^3)$	0.91
Dispersed phase dynamic density	ρ_D	$1005 (kg / m^3)$	1.
Gravitational constant	g	50(rad/s)- 80(m/s ²)	3.8×10^{-7}
Density ratio	ρ_r	1	1
Viscosity ratio	η_r	57.064	57.064
Bond number	Bo	0.02	0.02
Contact angle	θ	110	110
Interface thickness	D	4	4
Mobility	M	0.03	0.03
Junction surface area	$A=w^2$	$40000 \mu m^2$	1600
Junction width(sim)	d	-	40
Junction width (exp)	w	$200 \mu m$	-

مجموعه‌ای از کمیت‌های استفاده شده در شبیه‌سازی و خواص فیزیکی سیالات مورد استفاده در جدول ۴-۲، در جدول ۴-۳ آورده شده است. از آنجا که شبیه‌سازی حاضر دارای کمیت‌های مشابهی با شبیه‌سازی انجام شده توسط کانینگتون و لی [۲۶۸] است، از بی‌بعدسازی آن الگو گرفته شده است. بر این اساس، L کمیتی برای بی‌بعدسازی طول است که در آن S_L سطح تقاطع در واحد

لتیس و S_p سطح در واحد فیزیکی می‌باشد.

$$L = \sqrt{S_L / S_p} \quad (55-4)$$

بیشترین چگالی در روش بولتزمن شبکه‌ای، $\rho_{hl} = 1$ است و در واحد فیزیکی با ρ_{hp} نشان داده می‌شود. به همین ترتیب می‌توان دیگر کمیت‌های فیزیکی مانند جرم $M = (\rho_{hl} / \rho_{hp}) L^3$ و زمان را نیز، طبق معادله (۴-۷۰) با استفاده از اعداد بی‌بعد محاسبه کرد.

$$T_L / T_p = (\eta_{hp} / \eta_{hl}) (\rho_{hl} / \rho_{hp}) L^2 \quad (56-4)$$

به این دلیل کاربرد گسترده و قابل توجه سیستم‌های میکروفلوئیدیک LOD در زمینه بایومدیکال^۱، بایوداروها^۲، داروسازی و پزشکی است، این سیستم‌ها در دسته سیستم‌های مایع-مایع طبقه‌بندی می‌شوند و عمدتاً دارای نسبت چگالی یک هستند. بر اساس یافته‌های پژوهش حاضر، تاکنون شبیه‌سازی عددی که به طور گسترده رژیم‌های مختلف جریان و تاثیر کمیت‌های موجود را در این سیستم‌ها بررسی کند انجام نشده است زیرا این سیستم‌ها تقریباً بسیار نوظهور هستند. در شبیه‌سازی انجام شده، رژیم‌های مختلف تا نسبت چگالی و لزجت ۱۰ و برای نشان دادن توانایی روش و قابلیت پژوهش انجام شده، تاثیر تغییرات هندسی در نسبت چگالی ۱۰۰ انجام می‌شود.

۶-۸-۴ نسبت چگالی ۱

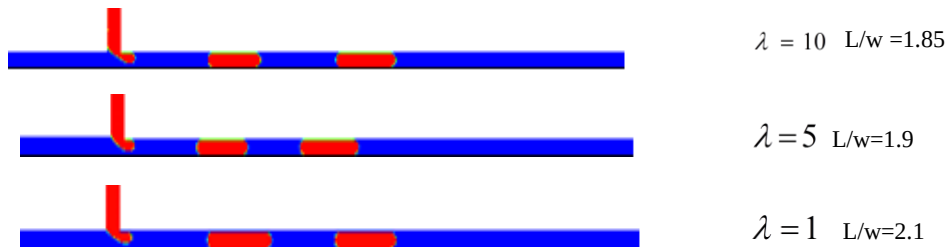
۱-۶-۸-۴ تاثیر نسبت لزجت

در ابتدا، در بررسی رژیم‌های مختلف در نسبت چگالی ۱، لازم است تاثیر تغییر نسبت لزجت بر طول قطره‌های تولید شده بررسی شود. از این رو، در این قسمت ابتدا نسبت لزجت‌های ۱، ۵ و ۱۰ در

¹ Biomedical

² Biomedicine

یک عدد بوند مشخص بر سیستم T - شکل اعمال شده است. همانطور که در شکل ۴-۳۹ دیده می‌شود، تغییر نسبت لزجت تأثیر قابل توجهی بر اندازه قطره‌های تولید شده نداشته است. از این رو، در ادامه، نسبت لزجت ۰/۲ به صورت ثابت در نظر گرفته شده است.

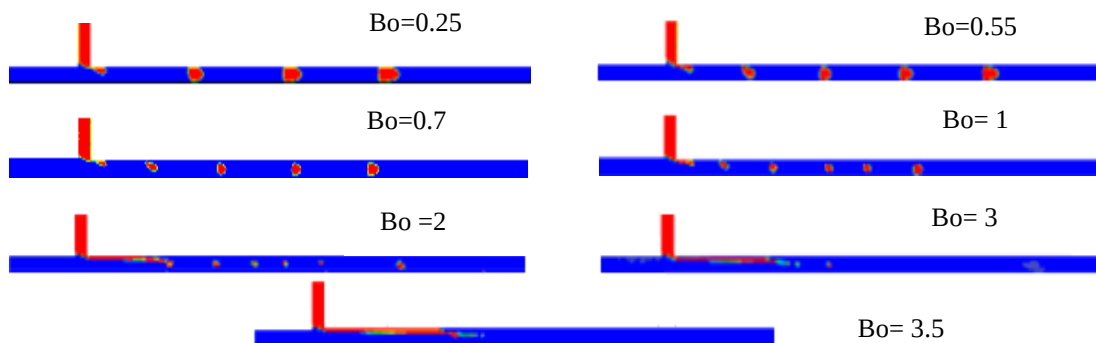


شکل ۴-۳۹: تأثیر نسبت لزجت بر طول قطره بی‌بعد در نسبت چگالی ۱ و $Bo = 0.1$

۴-۸-۶-۱-۱ تأثیر عدد بوند در نسبت چگالی ۱

عدد بوند، به عنوان عدد بی‌بعد مناسب در تحقیقاتی که در آن‌ها شتاب تأثیرگذار است، به عنوان معیار تأثیر تغییر کمیت‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرد. افزایش عدد بوند به معنی افزایش شتاب گریز از مرکز است و بر اساس معادلات (۴-۵۲) - (۴-۴۹)، نیروهای گریز از مرکز و کریولیس تحت تأثیر قرار خواهند گرفت. از این رو، انتظار می‌رود که با افزایش شتاب چرخشی طول قطره‌ها کاهش یافته و تعداد آن‌ها افزایش یابد. همچنین، با افزایش عدد بوند شاهد تغییر رژیم‌های مختلف جریان خواهیم بود. تأثیر تغییر عدد بوند در شکل ۴-۴۰ نمایش داده شده است. همانگونه که در شکل دیده می‌شود، با تغییر عدد بوند از ۰/۲ تا ۱ قطره‌های تولید شده کوچک‌تر شده‌اند و رژیم جریان فشاری است، که در آن جدا شدن فاز پراکنده و تشکیل قطره در محل تقاطع دو کانال اتفاق می‌افتد. می‌توان نتیجه گرفت که در این نسبت چگالی، عدد بوند ۱ به عنوان عدد گذار از رژیم جریان فشاری به قطره‌ای است. در رژیم جریان قطره‌ای، نیروی برشی سیال بر کشش سطحی در داخل کانال اصلی غلبه می‌کند، فاز پراکنده (ثانویه) به صورت یک جریان باریک وارد کانال اصلی می‌شود و جداسازی در رأس این جریان و در کانال اصلی اتفاق می‌افتد. در شکل ۴-۴۰ دیده می‌شود که تا عدد بوند حدود

۳ رژیم جریان قطره‌ای است و در بوند ۳/۵ فاز ثانویه بعد از ورود به کانال اصلی دچار هیچ‌گونه شکستی نشده، قطره تشکیل نمی‌شود و رژیم جریان جتی^۱ خواهد بود.



شکل ۴-۴: تاثیر افزایش عدد بوند بر طول قطره‌های تولید شده و رژیم جریان در نسبت چگالی ۱ و نسبت لزجت

۵

در واقع در اعداد Bo بالا، همانند آنچه در مورد سیستم‌های LOC در مورد رژیم‌های جریان آمده است، نیروی برشی فاز اصلی قادر به غلبه بر نیروی کشش سطحی در محل تقاطع دو فاز نیست و این باعث وارد شدن سیال ثانویه به داخل کانال اصلی و پس از آن تشکیل قطره‌های بیشتر در کانال اصلی اما در سایزهای کوچک‌تر می‌گردد. اما در Bo های در محدوده رژیم جریان فشاری، قطره پس از وارد شدن به کانال اصلی، بخش قابل توجهی از سطح کانال اصلی را مسدود می‌کند و فشاری که در پشت فاز ثانویه از طرف فاز اصلی وارد می‌شود، بر کشش سطحی غلبه کرده و باعث جدایش فاز ثانویه و تشکیل قطره در محل تقاطع دو فاز می‌شود. در رژیم جریان جتی، در اثر تماس و برخورد دو فاز، قطره تشکیل نمی‌شود و سیال ثانویه از کانال جانبی وارد کانال اصلی شده و تنها یک لایه سیال نازک از آن در کانال تشکیل می‌گردد. این مکانیزم تشکیل در نسبت‌های چگالی مورد مطالع صادق است.

¹ Jetting

۷-۸-۴ نسبت چگالی ۵

۱-۷-۸-۴ تاثیر نسبت لزجت

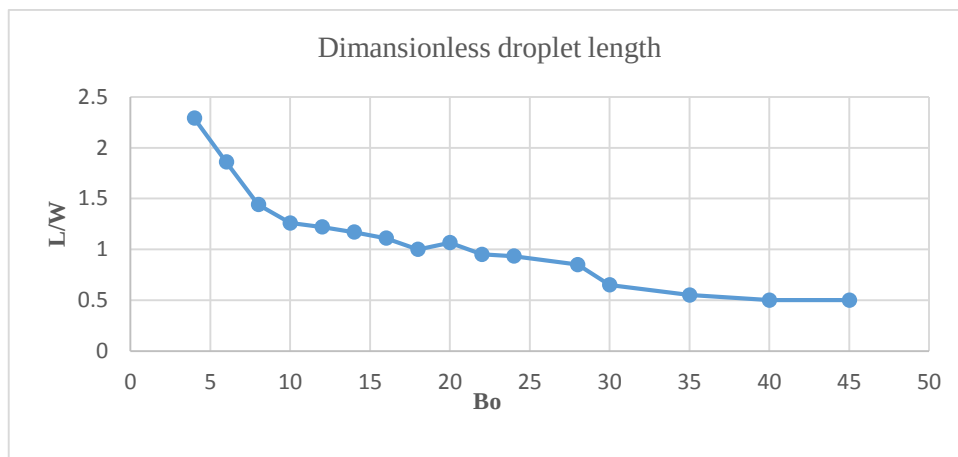
فرآیندی مشابه آنچه در نسبت چگالی ۱ برای بررسی اثر نسبت لزجت انجام شد، برای این نسبت چگالی نیز صورت گرفته است. همانطور که در شکل ۴۱-۴ نشان داده شده، در این نسبت چگالی نیز نسبت‌های لزجت ۱۰ - ۱ تاثیر چشم‌گیری در اندازه و طول قطره‌های تولید شده ندارند.



شکل ۴۱-۴: تاثیر نسبت لزجت بر طول قطره بی‌بعد در نسبت چگالی ۵ و ۴ $Bo =$

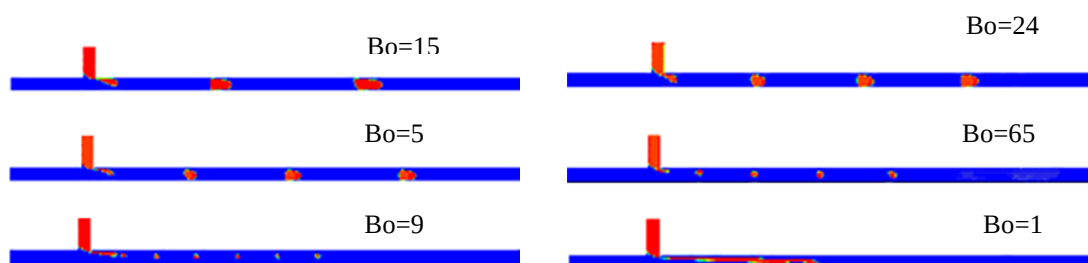
۲-۷-۸-۴ تاثیر عدد بوند

در این نسبت چگالی نیز با افزایش عدد بوند انتظار می‌رود که قطره‌ها دارای طول کوتاه‌تر اما تعداد بیشتری باشند. به این معنی که عدد بوند معیاری است که باعث افزایش نرخ تولید قطره، تغییر رژیم جریان از فشاری به قطره‌ای (همانطور که در تعریف رژیم‌های جریان توضیح داده شد) و در نتیجه کاهش طول قطره‌های تولید شده خواهد شد. در شکل ۴۲-۴ تغییر طول بی‌بعد شده قطره‌های تولید شده با افزایش عدد بوند به تصویر در آمده است. افزایش عدد بوند معیاری برای افزایش سرعت دوران زاویه‌ای و در محدوده $(\text{rad/s}) \frac{1663}{3} - 372$ می‌باشد.



شکل ۴-۴۲: کاهش طول بی‌بعد قطره‌های تولید شده با افزایش عدد بوند در نسبت چگالی و لزجت ۵

در این نسبت چگالی، عدد بوند گذار از رژیم جریان فشاری به قطره‌ای در عدد ۵۰ اتفاق می‌افتد و همانطور که در شکل ۴-۴۳ دیده می‌شود، رژیم جریان جهشی (جتی) در حدود عدد بوند ۱۰۰ مشاهده می‌شود.



شکل ۴-۴۳: تاثیر افزایش عدد بوند بر طول قطره‌های تولید شده و رژیم جریان در نسبت چگالی ۵ و نسبت لزجت

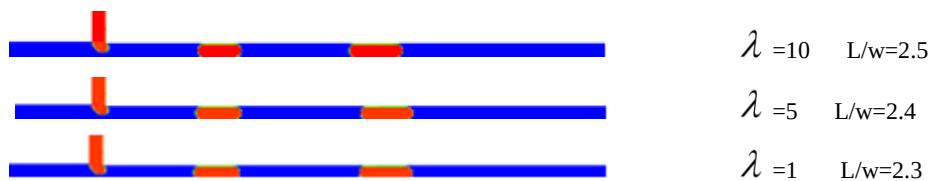
۵

۸-۸-۴ نسبت چگالی ۱۰

۱-۸-۸-۴ تاثیر نسبت لزجت

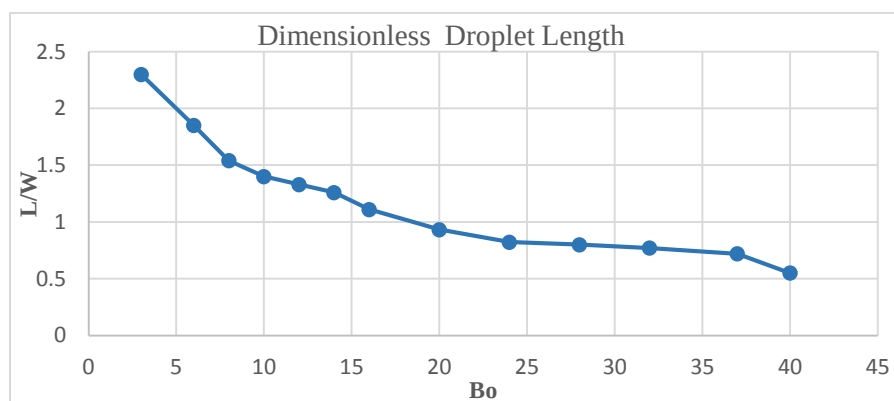
بر اساس نتایج بدست آمده از بخش ۴-۵-۸، انتظار می‌رود که در این نسبت چگالی نیز، تغییر

نسبت لزجت بی‌تاثیر باشد. نتایج نشان داده شده در شکل ۴-۴۴ صحت این مطلب را بیان می‌کند.

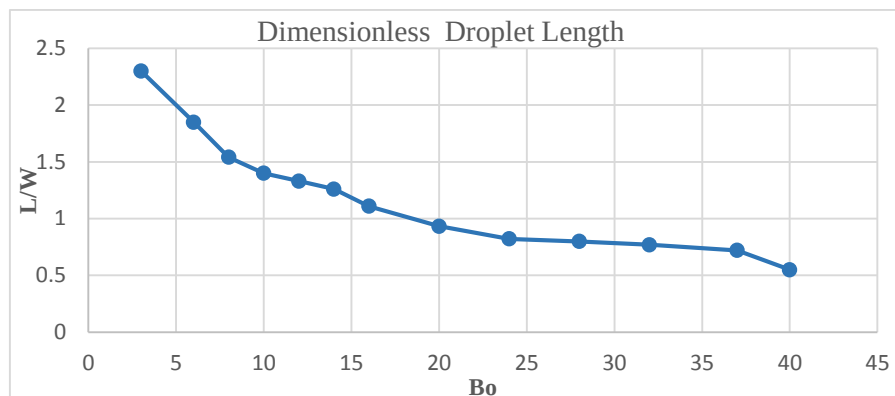


شکل ۴-۴۴: تاثیر نسبت لزجت بر طول قطره بی‌بعد در نسبت چگالی ۱۰ و $Bo = 3$

در این نسبت چگالی، عدد بوند گذار از رژیم جریان فشاری به قطره‌ای، که در شکل ۴-۴۵ دیده می‌شود، در حدود ۹۰ و انتقال از رژیم جریان قطره‌ای به جهشی در عدد بوند ۱۲۰ مشاهده می‌شود. برای این نسبت چگالی نیز تاثیر تغییرات عدد بوند بر طول قطره در شکل ۴-۴۶، در محدوده (rad/s) ۱۷۱۸-۳۵۱، به تصویر در آمده است که کاهش طول بی‌بعد شده را با افزایش عدد بوند تصدیق می‌کند. به این معنی که در هر گام زمانی واقعی $\Delta t = 0.00036$ میزان چرخش دیسک $0.62/0.12$ رادیان می‌باشد. علت تفاوت در اعداد بوند گزارش شده در رژیم‌های مختلف به تعریف عدد بوند باز می‌گردد که بر اساس تفاضل چگالی سیالات (فازهای) مورد استفاده در فرآیند تعریف می‌شود.



شکل ۴-۴۵: تاثیر افزایش عدد بوند بر طول قطره‌های تولید شده و رژیم جریان در نسبت چگالی ۱۰ و نسبت لزجت



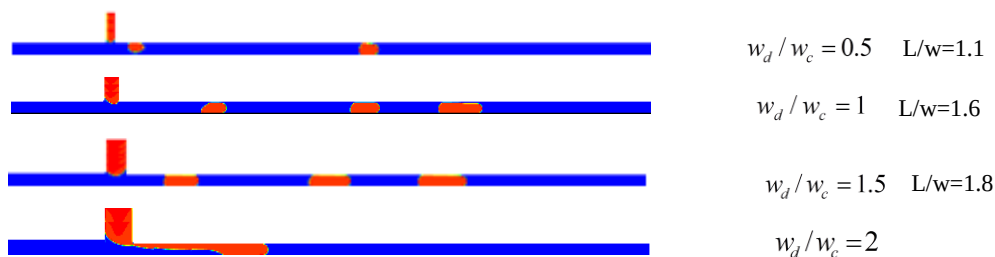
شکل ۴-۴۶: کاهش طول بی بعد قطره‌های تولید شده با افزایش عدد بوند در نسبت چگالی ۱۰ و لزجت ۵

۹-۸-۴ تاثیر هندسه بر فرآیند تولید قطره در نسبت چگالی ۱۰۰

برای نشان دادن توانایی روش و شبیه‌سازی انجام شده در محدوده وسیع‌تری از سیستم‌های میکروفلوئیدیک، نسبت چگالی ۱۰۰ برای بررسی اثر تغییرات هندسه میکروکانال‌ها بر فرآیند تولید قطره انتخاب شده است.

۱۰-۸-۴ تغییر پهنای نازل یا کانال فرعی

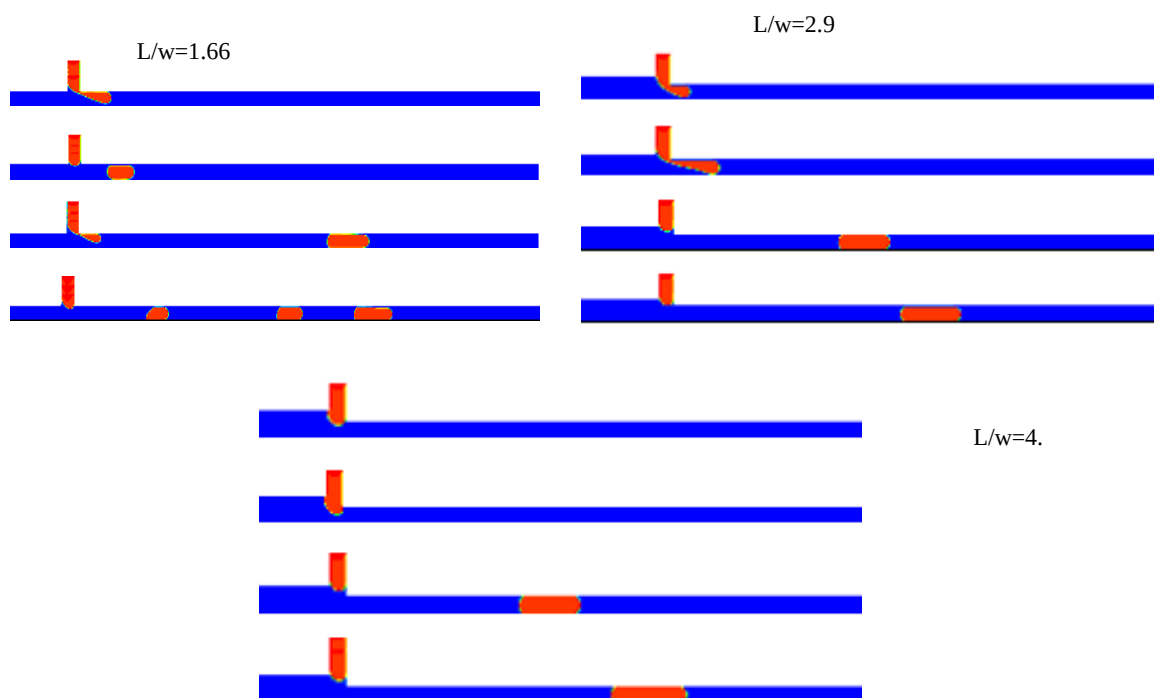
جهت بررسی تاثیر پهنای نازل، اندازه آن به چهار مقدار ۰/۵، ۱، ۱/۵، ۲ برابر پهنای کانال اصلی در نظر گرفته شده و نتایج آن در شکل ۴-۴۷ نشان داده شده است. دیده می‌شود که با کاهش نسبت پهنای کانال فرعی به ۰/۵، تعداد قطره‌های تولید شده و اندازه آن‌ها، در مقایسه با حالتی که $w_d/w_c = 1$ است، کاهش می‌یابد. با افزایش پهنای کانال به ۱/۵، طول قطره‌ها افزایش یافته، قطره‌ها بزرگ‌تر می‌شوند افزایش پهنای کانال فرعی به معنی وارد شدن حجم بیشتری از این فاز در کانال اصلی است. از این رو طول بی بعد قطره‌های تولیدی افزایش بیشتری را نشان می‌دهد. اما تعداد آن‌ها نسبت به حالت $w_d/w_c = 1$ تغییری نداشته است و با افزایش نسبت پهنای دو کانال به ۲ رژیم جریان به جهشی تغییر یافته است.



شکل ۴-۴۷: تشکیل قطره در نسبت‌های مختلف پهنای نازل در $\lambda = 5$ و $Bo = 20$ و $\rho_r = 0.01$

۴-۸-۱۱ تغییر ارتفاع دو طرف تقاطع

برای بررسی تاثیر عدم تقارن در محل تقاطع کانال فرعی و اصلی سه حالت برای آن در نظر گرفته شده است. در حالت‌های زیر H_l ، پهنای کانال سمت چپ تقاطع و H_R پهنای کانال سمت راست تقاطع می‌باشد. در شکل ۴-۴۸ سه حالت مختلف آن بر اساس گام‌های زمانی حل [۲۳۴] نشان داده شده است. در $H_l = 1/5 H_R$ ، فاز ثانویه در هنگام پائین آمدن از کانال فرعی، به دلیل اختلاف ارتفاع، در جهت عکس جریان سیال در کانال اصلی حرکت می‌کند تا این اختلاف ارتفاع را پر کند. که در این مسئله خیس‌شوندگی سطح نیز تاثیرگذار است و باعث جذب و حرکت این فاز به سطح کانال سمت چپ تقاطع می‌شود. این جابجایی منجر به ایجاد تاخیر در ورود به کانال اصلی و همچنین انباشته شدن حجمی از سیال ثانویه در این فضا می‌گردد. واضح است که قطره آزاد شده حجم بیشتری خواهد داشت و از تاخیر ایجاد شده در آزادسازی قطره می‌توان به عنوان یک عملکرد مناسب به عنوان شیر در سیستم‌های LOD نیز بهره برد. همین روند در $H_l = 2 H_R$ و $H_l = 2/5 H_R$ هم دیده می‌شود. با این تفاوت که قطره‌های تولید شده کمی بزرگ‌تر بوده و آزادسازی فاز ثانویه با تاخیر بیشتری انجام می‌گردد. انواع شیرها و عملکرد آن‌ها در بخش‌های ۳-۵-۱ و ۲-۵-۴ توضیح داده شده‌اند.



شکل ۴-۴۸: تاثیر پهنای مختلف کانال در اطراف تقاطع بر طول قطره، تعداد آن و تشکیل آن در گام زمانی ۲۰۰۰۰۰

$$\text{Bo}=20 \quad \rho_r=0.01 \quad \lambda=5 \quad (\text{الف}) \quad H_L=H_R \quad (\text{ب}) \quad H_L=1.5H_R \quad (\text{ج}) \quad H_L=H_{2R}$$

۹-۴ نتیجه گیری

در مرحله نهایی این پژوهش تولید قطره و تاثیر کمیت‌های موثر و رژیم‌های مختلف جریان در محدوده نسبت چگالی و لزجت ۱-۱۰ در سیستم‌های آزمایشگاه بر روی تراشه (Lab-On-Disk) شبیه‌سازی گردید. در هر نسبت چگالی، تغییر لزجت تاثیر چشم‌گیری بر سایز و تعداد قطره‌های تولید شده نداشت. عدد بی‌بعد بوند (Bo)، برای بررسی تاثیر نیروی گریز از مرکز مورد استفاده قرار گرفت. به این ترتیب، هر چه عدد بوند زیاد می‌شود، شتاب گریز از مرکز و تعداد قطره‌های تولید شده نیز افزایش یافته و طول قطره‌ها کاهش می‌یابد. با افزایش عدد بوند، رژیم جریان از فشاری به قطره‌ای و در نهایت به جهشی تغییر می‌یابد. برای نشان دادن توانایی‌های روش، تاثیر تغییرات هندسه در نسبت چگالی ۱۰۰ انجام گرفت. هر چه نسبت پهنای کانال فرعی به اصلی کاهش می‌یابد، تعداد و طول

قطره‌های تولید شده کاهش و با افزایش آن، طول قطره‌ها و تعداد آنها افزایش می‌یابد. با افزایش بیشتر آن رژیم جریان به جهشی تبدیل می‌شود. تغییر در ارتفاع دو سمت تقاطع باعث ایجاد تاخیر در آزادسازی فاز ثانویه و تولید قطره با طول بزرگتر شده و عملکردی مشابه شیر در سیستم‌های میکروفلوئیدیک ارائه می‌کند.

پیشنهاد جهت ادامه مطالعه

- ۱- از آنجا که هندسه‌هایی چون کانال‌های Y-شکل دارای کاربرد در چند زمینه مانند دستکاری قطره و واکنش‌های شیمیایی هستند، بررسی عددی عملکرد دیگر هندسه‌های مورد استفاده در سیستم‌های میکروفلویدیک می‌تواند دست آوردهای قابل توجهی داشته باشد.
- ۲- استفاده از مدل‌های حرارتی در شبیه‌سازی عددی سیستم‌های میکروفلویدیک، مثلاً بررسی فرایندهای مربوط به جداسازی قطره‌ها نیز می‌تواند گام مهمی باشد.
- ۳- بررسی برخورد و ترکیب قطره‌ها در کانال‌های متقاطع و Y-شکل تاکنون صورت نگرفته است. از آنجا که مکانیزم برخورد قطره‌ها مورد توجه محققان است، شبیه‌سازی آن نیز می‌تواند مفید باشد.
- ۴- بررسی اثر نیروهای حرارتی در برخورد و برهم‌کنش قطره‌های معلق در سیال نیز می‌تواند کاربردهایی در زمینه واکنش‌های شیمیایی داشته باشد.

مراجع

- 1- S. Chen and G. D. Doolen, Lattice Boltzmann method for fluid flows. Annual Review of Fluid Mechanics, Vol. 30, 329, 364-1998.
- 2- S. Chen, H. Chen, D. Martinez, and W. Matthaeus, Lattice Boltzmann model for simulation of magneto hydrodynamics, Physical Review Letters, 67, 3776–3779, 1991.
- 3- S. Hou, Q. Zou, S. Chen, G. Doolen, A. C. Cogley, Simulation of cavity flow by the lattice Boltzmann method, Journal of Computational Physics. 118, 329-347, 1995.
- 4- B. Chopard, A. Masselot, Cellular automata and lattice Boltzmann methods: a new approach to computational fluid dynamics and particle transport, Future Generation Computer Systems, 16, 249-257, 1999.
- 5- Y. T. Feng, K. Han, D. R. J. Owen, Coupled lattice Boltzmann method and discrete element modelling of particle transport in turbulent fluid flows, Computational issues. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 72, 1111–1134, 2007.
- 6- U. Frisch, B. Hasslacher, Y. Pomeau, Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation, Physical Review Letters, 56(14), 1505-1508, 1986.
- 7- Y. H. Qian, D. D'Humières, P. Lallemand, Lattice BGK Models for Navier-Stokes Equation, Europhys Letters. 17 479, 2009.
- 8- J. D. Sterling and S. Chen, Stability analysis of lattice boltzmann methods, Journal of Computational Physics, 123(1),196, 206, 1996.
- 9- Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata, G. R. McNamara, G. Zanetti. Physical Review Letters, 61(20):2332-2335, 1988.
- 10- P. A. Skordos, Initial and boundary conditions for the lattice Boltzmann method, Physical Review E, 48(6), 4823-4842, 1993.
- 11- A.J.C. Ladd, Numerical simulations of fluid particulate suspensions via a discretised Boltzmann, equation (Parts I & II), Journal of Fluid Mechanics, 271, 285–339, 1994.
- 12- Q. Zou, X. He, On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model, Physics of Fluids 9, 1591-1598, 1997.
- 13- X. He, L. S. Luo, Lattice Boltzmann Model for the Incompressible Navier–Stokes Equation, Journal of Statistical Physics 88, 927-944, 1997.
- 14- M.C. Sukop, D.T. Thorne, Jr, Springer, Lattice Boltzmann Modeling: An Introduction for Geoscientists and Engineers, Heidelberg, Berlin, New York, 172, 2006.
- 15- X. Shan H. Chen, Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components, Physical Review, E 47, 1815–1819, 1993.
- 16- M. Swift, W. Osbourne, J. Yeomans, Lattice Boltzmann simulations for non-ideal

fluids, Physical Review Letter, 75, 830–833, 1995.

17- M. Latva-Kokko, D. H. Rothman, Diffusion properties of gradient-based lattice Boltzmann models of immiscible fluids, Physical. Review, E 71, 056702, 2005.

18- A. Gunstensen, K. Rothman, H. Daniel, S. Zaleski, Lattice Boltzmann model of immiscible fluids, Physical Review. A, 43, 4320–4327, 1991.

19- R. Guy, McNamara, G. Zanetti, Use of the Boltzmann Equation to Simulate Lattice-Gas Automata, Physical Review. Lett. 61, 2332–2335, 1988.

20- D. H. Rothman, J. M. Keller, Immiscible cellular-automaton fluids, Journal of Statistical Physics, 52, 1119-1127, 1988.

21- J. Tölke, M. Krafczyk, M. Schulz, E. Rank, Lattice Boltzmann Simulations of Binary Fluid Flow through Porous Media. Philosophical Transactions: Mathematical, Philosophical Transactions, Physical and Engineering Sciences, 360, 1792, 2002.

22- T. Reis, T. N. Phillips, Lattice Boltzmann model for simulating immiscible two-phase flows, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 40, 4033, 2007.

23- Ch. E. Brennen, Fundamentals of Multiphase Flow, Cambridge University Press, ISBN 0521848040, 2005.

24- S. Shad, S.P.E. Schlumberger, B.B. Maini, I.D. Gates, Flow Regime Transfer Conditions for Two-Phase Flow in a Fracture, , Canadian Unconventional Resources and International Petroleum Conference, 2010.

25- F.H. Harlow, J.E. Welch, Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow, Physics of Fluids 8, pp. 2182-2189, 1965.

26- M. Ingana, H. De´rand, A. Eckersten, G. Ekstrand, A.K. Honerud, G. Jesson, G. Thorse´n, T. So´derman, P. Andersson, Integrated Sample Preparation, Reaction, and Detection on a High-frequency Centrifugal Microfluidic Platform, Clinical Chemistry, 51, 1985–1987, 2005.

27- S. Haeberle, T. Brenner, H.P. Schlosser, R. Zengerle, J. Ducre´e, Centrifugal Micromixery, Chemical Engineering Technology, 28, 613–616, 2005.

28- M. Inganas, H. De´rand, A. Eckersten, G. Ekstrand, A. K. Honerud, G. Jesson, G. Thorse, T. So derman, P. Andersson, C-reactive protein and interleukin 6 microfluidic immunoassays with on-chip pre-stored reagents and centrifugo-pneumatic liquid control, Clinical Chemistry, 51, 1985–1987, 2005.

29- T. Brenner, H. P. Schlosser, R. Zengerle and J. Ducre´e, Centrifugal Micromixer, S. Haeberle, Chemical Engineering Technology, 28, 613–616, 2005.

30- A. P. Bouchard, D. A. Duford, E. D. Salin, Guided routing on spinning microfluidic platforms, Analytical Chemistry, 82, 8386–8389, 2010.

31- M. Karle, J. Wohrle, F. von Stetten, R. Zengerle, D. Mark, Microfluidic Lab-on-a-

Chip Platforms: Requirements, Characteristics and Applications, Proceedings of Transducers, 1235–1238, 2013.

32- M. C. R. Kong, E. D. Salin, Pneumatically Pumping Fluids Radially Inward On Centrifugal Microfluidic Platforms in Motion, *Analytical Chemistry*, 82, 8039–8041, 2010.

33- M.C. R. Kong, A. P. Bouchard, E.D. Salin, Displacement Pumping of Liquids Radially Inward on Centrifugal Microfluidic Platforms in Motion, *Micromachines*, 3, 1–9, 2012.

34- S. Soroori, L. Kulinsky, H. Kido, M. Madou, Design and implementation of fluidic micro-pulleys for flow control on centrifugal microfluidic platforms, *Microfluid. Nanofluid.*, 16, 1117–1129, 2014.

35- T. H. G. Thio, F. Ibrahim, W. Al-Faqheri, J. Moebius, N. S. Khalid, N. Soin, M. K. B. A. Kahar, M. Madou, Push pull microfluidics on a multi-level 3D CD, *Lab Chip*, 13, 3199, 2013.

36- J. L. Garcia-Cordero, L. Basabe-Desmonts, J. Ducre'e, A. J. Ricco, Liquid recirculation in microfluidic channels by the interplay of capillary and centrifugal forces, *Microfluid. Nanofluid.*, 9, 695–703, 2010.

37- C. Li, X. Dong, J. Qin, B. Lin, Rapid discrimination of single- nucleotide mismatches based on reciprocating flow on a compact disc microfluidic device, *Analytical Chemistry. Acta*, 640, 93–99, 2009.

38- R. Gorkin, L. Clime, M. Madou, H. Kido, Pneumatic pumping in centrifugal microfluidic platforms, *Microfluid. Nanofluid.*, 9, 541–549, 2010.

39- Centrifugo-magnetic generation of gas-liquid microflows, S. Haeberle, N. Schmitt, R. Zengerle and J. Ducre'e, *Sens. Actuators, A*, 135, 28–33, 2007.

40- R. Gorkin, S. Soroori, W. Southard, L. Clime, T. Veres, H. Kido, L. Kulinsky, M. Madou, Suction-enhanced siphon valves for centrifugal microfluidic platforms, *Microfluid. Nanofluid.*, 12, 345–354, 2012.

41- W. Al-Faqheri, F. Ibrahim, T. H. G. Thio, J. Moebius, K. Joseph, H. Arof, M. Madou, Vacuum/compression valving (VCV) using paraffin-wax on a centrifugal microfluidic CD platform, *PLoS One*, 8, 58523, 2013.

42- R. Gorkin, J. Park, J. Siegrist, M. Amasia, B. S. Lee, J. M. Park, J. Kim, H. Kim, M. Madou and Y.-K. Cho, Centrifugal microfluidics for biomedical applications, *Lab Chip*, 10, 1758, 2010.

43- J. L. Garcia-Cordero, D. Kurzbuch, F. Benito-Lopez, D. Diamond, L. P. Lee, A. J. Ricco, optically addressable single-use microfluidic valves by laser printer lithography, *Lab Chip*, 10, 2680, 2010.

- 44 - T. H. Kim, K. Abi-Samra, V. Sunkara, D.-K. Park, M. Amasia, N. Kim, J. Kim, H. Kim, M. Madou, Y. K. Cho, Flow-enhanced electrochemical immunosensors on centrifugal microfluidic platforms, *Lab Chip*, 13, 3747, 2013.
- 45- K. Abi-Samra, R. Hanson, M. Madou, R. A. Gorkin Infrared controlled waxes for liquid handling and storage on a CD-microfluidic platform, *Lab Chip*, 11, 723, 2011.
- 46- A. Kloke, A. R. Fiebach, S. Zhang, L. Drechsel, S. Niekrawietz, M. M. Hoehl, R. Kneusel, K. Panthel, J. Steigert, F. von Stetten, R. Zengerle, N. Paust, The LabTube - a novel microfluidic platform for assay automation in laboratory centrifuges, *Lab Chip*, 14, 1527, 2014.
- 47- M. Focke, F. Stumpf, G. Roth, R. Zengerle, F. von Stetten, Centrifugal microfluidic system for primary amplification and secondary real-time PCR, *Lab Chip*, 10, 3210, 2010.
- 48- M. Focke, F. Stumpf, B. Faltin, P. Reith, D. Bamarni, S. Wadle, C. Müller, H. Reinecke, J. Schrenzel, P. Francois, D. Mark, G. Roth, R. Zengerle, F. von Stetten, Microstructuring of polymer films for sensitive genotyping by real-time PCR on a centrifugal microfluidic platform, *Lab Chip*, 10, 2519, 2010.
- 49- O. Strohmeier, S. Lamann, B. Riedel, D. Mark, G. Roth, M. Werner, R. Zengerle, F. von Stetten, Real-time PCR based detection of a panel of food-borne pathogens on a centrifugal microfluidic “LabDisk” with on-disk quality controls and standards for quantification, *Microchimica Acta*, 181, 1681–1688, 2014.
- 50- M. Rombach, D. Kosse, B. Faltin, S. Wadle, G. Roth, R. Zengerle and F. von Stetten, Real-time stability testing of air-dried primers and fluorogenic hydrolysis probes stabilized by trehalose and xanthan, *BioTechniques*, 57, 151–155, 2014.
- 51- O. Strohmeier, N. Marquart, D. Mark, G. Roth, R. Zengerle and F. von Stetten, Rapid molecular assays for the detection of yellow fever virus in low-resource settings, *Analytical Methods*, 6, 2038, 2014.
- 52- A. La Croix-Fralish, J. Clare, C. D. Skinner and E. D. Salin, A centrifugal microanalysis system for the determination of nitrite and hexavalent chromium, *Talanta*, 80, 670–675, 2009.
- 53- O. Strohmeier, B. Kanat, D. Baër, P. Patel, J. Drexler, M. Weidmann, T. van Oordt, G. Roth, D. Mark, R. Zengerle, F. von Stetten, DNA based sample to answer detection of bacterial pathogens on a centrifugal microfluidic foil cartridge, *Process of mTAS*, 779–881, 2012.
- 54- M.C. R. Kong, A. P. Bouchard, E.D. Salin, Centrifugal step emulsification applied for absolute quantification of nucleic acids by digital droplet RPA, *Micromachines*, 3, 1–9, 2012.

- 55- S. Soroori, L. Kulinsky, H. Kido M. Madou, Design and implementation of fluidic micro-pulleys for flow control on centrifugal microfluidic platforms, *Microfluid. Nanofluid.*, 16, 1117–1129, 2014.
- 56- K. Abi-Samra, L. Clime, L. Kong, R. Gorkin, T.-H. Kim, Y.-K. Cho and M. Madou, Thermo-pneumatic pumping in centrifugal microfluidic platforms, *Microfluid. Nanofluid.*, 11, 643–652, 2011.
- 57- A. LaCroix-Fralish, E. J. Templeton, E. D. Salin, C. D. Skinner, A rapid prototyping technique for valves and filters in centrifugal microfluidic devices, *Lab Chip*, 9, 3151, 2009.
- 58- P. Andersson, G. Jesson, G. Kylberg, G. Ekstrand, G. Thorse´n, Parallel Nanoliter Microfluidic Analysis System, *Analytical Chemistry*, 79, 4022–4030, 2007.
- 59- D. C. Duffy, H. L. Gillis, J. Lin, N. F. Sheppard, G. J. Kellogg, Microfabricated Centrifugal Microfluidic Systems, Characterization and Multiple Enzymatic Assays, *Analytical Chemistry*, 71, 4669–4678, 1999.
- 60- Design of a compact disk-like microfluidic platform for enzyme-linked immunosorbent assay, S. Lai, S. Wang, J. Luo, L. J. Lee, S. T. Yang, M. J. Madou, *Analytical Chemistry*, 76, 1832–1837, 2004.
- 61- A. Kazarine, M. C. R. Kong, E. J. Templeton, E. D. Salin, Automated Liquid–Liquid Extraction by Pneumatic Recirculation on a Centrifugal Microfluidic Platform, *Analytical Chemistry*, 84, 6939–6943, 2012.
- 62- M. Focke, R. Feuerstein, F. Stumpf, D. Mark, T. Metz, R. Zengerle and F. von Stetten, A complete testing environment for the automated parallel performance characterization of biofuel cells: design, validation, and application, *Process of mTAS*, 1397–1399, 2009.
- 63- P. Andersson, G. Jesson, G. Kylberg, G. Ekstrand, G. Thorse´n, Parallel Nanoliter Microfluidic Analysis System, *Anal. Chem.*, 79, 4022–4030, 2007.
- 64- D. Mark, T. Metz, S. Haeberle, S. Lutz, J. Ducre´e, R. Zengerle, F. von Stetten, Centrifugo-pneumatic valve for metering of highly wetting liquids on centrifugal microfluidic platforms, *Lab Chip*, 9, 3599, 2009.
- 64- J. Siegrist, R. Gorkin, M. Bastien, G. Stewart, R. Peytavi, H. Kido, M. Bergeron, M. Madou, Validation of a centrifugal microfluidic sample lysis and homogenization platform for nucleic acid extraction with clinical samples, *Lab Chip*, 10, 363, 2010.
- 65- H. Hwang, H.-H. Kim and Y.K. Cho, Elastomeric membrane valves in a disc, *Lab Chip*, 11, 1434, 2011.
- 66- J. Steigert, T. Brenner, M. Grumann, L. Riegger, S. Lutz, R. Zengerle, J. Ducre´e, Integrated siphon-based metering and sedimentation of whole blood on a hydrophilic lab-on-a-disk, *Biomed. Microdevices*, 9, 675–679, 2007.

- 67- D. Mark, P. Weber, S. Lutz, M. Focke, R. Zengerle and F. Stetten, Aliquoting on the centrifugal microfluidic platform based on centrifugo-pneumatic valves, *Microfluid. Nanofluid.*, 10, 1279–1288 2011.
- 68- J. Steigert, M. Grumann, T. Brenner, L. Riegger, J. Harter, R. Zengerle, J. Ducre'e, Fully integrated whole blood testing by real-time absorption measurement on a centrifugal platform, *Lab Chip*, 6, 1040, 2006.
- 69- S. O. Sundberg, C. T. Wittwer, C. Gao, B. K. Gale, Spinning disk platform for microfluidic digital polymerase chain reaction, *Analytical Chemistry*, 82, 1546–1550, 2010.
- 70- M. Grumann, A. Geipel, L. Riegger, R. Zengerle, J. Ducre'e, Batch-mode mixing on centrifugal microfluidic platforms, *Lab Chip*, 5, 560, 2005.
- 71- M. Boettcher, M. S. Jaeger, L. Riegger, J. Ducre'e, R. Zengerle, C. Duschl, Lab-On-Chip-Based cell separation by combining dielectrophoresis and centrifugation, *Biophysics Review Letter*, 1, 443–451, 2006.
- 72- S. Haeberle, R. Zengerle, J. Ducre'e, Centrifugal generation and manipulation of droplet emulsions, *Microfluid. Nanofluid.*, 3, 65–75, 2007.
- 73- D. Mark, S. Haeberle, R. Zengerle, J. Ducre'e, G. T. Vladisavljevic', Manufacture of chitosan microbeads using centrifugally driven flow of gel-forming solutions through a polymeric micronozzle, *Colloid Interface Science*, 336, 634–641, 2009.
- 74- S. Haeberle, L. Naegerle, R. Burger, F. von Stetten, R. Zengerle, J. Ducre'e, Systems and methods for high-throughput microfluidic bead production, *Journal of Microencapsulation*, 25, 267–274, 2008.
- 75- K. Maeda, H. Onoe, M. Takinoue, S. Takeuchi, Controlled synthesis of 3D multi-compartmental particles with centrifuge-based microdroplet formation from a multi-barrelled capillary, *Advance Material*, 24, 1340–1346, 2012.
- 76- F. Schuler, F. Schwemmer, M. Trotter, S. Wadle, R. Zengerle, F. von Stetten, N. Paust, Centrifugal step emulsification applied for absolute quantification of nucleic acids by digital droplet RPA, *Lab Chip*, 15(13):2759-66, 2015.
- 77- T. van Oordt, Y. Barb, J. Smetana, R. Zengerle, F. von Stetten, Miniature stick-packaging – an industrial technology for pre-storage and release of reagents in lab-on-a-chip systems, *Lab Chip*, 13, 2888–2892, 2013.
- 78- K. Abi-Samra, R. Hanson, M. Madou, R. A. Gorkin, Fluidic Automation of Nitrate and Nitrite Bioassays in Whole Blood by Dissolvable-Film Based Centrifugo-Pneumatic Actuation, *Lab Chip*, 11, 723, 2011.
- 79- A. Kloke, A. R. Fiebach, S. Zhang, L. Drechsel, S. Niekrawietz, M. M. Hoehl, R. Kneusel, K. Panthel, J. Steigert, F. von Stetten, R. Zengerle, N. Paust, The LabTube - a novel microfluidic platform for assay automation in laboratory centrifuges, *Lab Chip*, 14,

1527, 2014.

80- X. Li, D. R. Ballerini, W. Shen, A perspective on paper-based microfluidics: Current status and future trends, *Biomicrofluidics* 6, 011301, 2012.

81- Analysis and experiment of capillary valves for microfluidics on a rotating disk, J. M. Chen, P. Ch. Huang, M. G. Lin, *Microfluid Nanofluid*, 4, 427–437, 2008.

82- S.E. Lin, A novel splitter design for microfluidic biochips using centrifugal driving forces, *Microfluid Nanofluid* 9, 523–532, 2010.

83- Z. Cai, J. Xiang, W. Wang, A pinch-valve for centrifugal microfluidic platforms and its application in sequential valving operation and plasma extraction, *Sensors and Actuators B*, 221, 257–264, 2015.

84- Y. Zhang, H. R. Jiang, A review on continuous-flow microfluidic PCR in droplets: Advances, challenges and future, *Analytica Chimica Acta*, 914, 7e16, 2016.

85- H. Chen, X. J. Li, L. Wang, P. C.H. Li, A rotating microfluidic array chip for staining assays, *Talanta* 81, 1203–1208, 2010.

86- J. Hanzlik, E. Cretekos, K. A. Lamkin-Kennard, Biomimetic Leukocyte Adhesion: A Review of Microfluidic and Computational Approaches and Applications, *Journal of Bionic Engineering* 5, 317–327, 2008.

87- Z. Yu, O. Hemminger, L.S Fan, Experiment and lattice Boltzmann simulation of two-phase gas–liquid flows in microchannels, *Chemical Engineering Science*, 62, 7172 – 7183, 2007.

88- S.M. Li, D.K. Tafti, Near-critical CO₂ liquid–vapor flow in a sub-microchannel. Part I: Mean-field free-energy D2Q9 lattice Boltzmann method, *International Journal of Multiphase Flow*, 35, 725–737, 2009.

89- A. Gupta, R. Kumar, Lattice Boltzmann simulation to study multiple bubble dynamics, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51, 5192–5203, 2008.

90- R. Rzehak, S. Kriebitzsch, Multiphase CFD-simulation of bubbly pipe flow: A code comparison, *International Journal of Multiphase Flow*, 68, 135–152, 2015.

91- R. Rzehak, E. Krepper, CFD modeling of bubble-induced turbulence, *International Journal of Multiphase Flow*, 55, 138–155, 2013.

92- M. R. Kamali, H. E. A. Van den Akker, Simulating Gas–Liquid Flows by Means of a Pseudopotential Lattice Boltzmann Method, *Industrial and Engineering Chemical Research*, 52, 11365–11377, 2013.

93- T. Krebs, C.G.P.H. Schroën b, R.M. Boom, Coalescence kinetics of oil-in-water emulsions studied with microfluidics, *Fuel*, 106, 327–334, 2013.

94- T. Fua, Y. Maa, H. Z. Li, Bubble coalescence in non-Newtonian fluids in a

- microfluidic expansion device, *Chemical Engineering and Processing*, 97, 38–44, 2015.
- 95- R. S. Maier, Boundary conditions for the lattice Boltzmann method, *Physics of Fluids*, 8, 1788, 1996.
- 96- A. Kazemzadeh, P. Ganesana, F. Ibrahim, M. M. Aeinehvandb, L. Kulinskyd, M. J. Madoud, Gating valve on spinning microfluidic platforms: A flowswitch/control concept, *Sensors and Actuators B*, 204, 149–158, 2014.
- 97- A. Gli`ere, C. Delattre, Modeling and fabrication of capillary stop valves for planar microfluidic systems, *Sensors and Actuators A*, 130–131, 601–608, 2006.
- 98- C. X Zhao, Multiphase flow microfluidics for the production of single or multiple emulsions for drug delivery, *Advanced Drug Delivery Reviews*, 65, 1420–1446, 2013.
- 99- F. Fontana, M. P.A. Ferreira, A. Correia, J. Hirvonen, H. A. Santos, Microfluidics as a cutting-edge technique for drug delivery applications, *Journal of Drug Delivery Science and Technology*, 1–37, 2016.
- 100- C. X. Zhao, Multiphase flow microfluidics for the production of single or multiple emulsions for drug delivery, *Advanced Drug Delivery Reviews*, 65, 1420–1446, 2013.
- 101- D.J.E. Harvie, J.J. Cooper White, M.R. Davidson, Deformation of a viscoelastic droplet passing through a microfluidic contraction, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mech.* 155, 67–79, 2008.
- 102- M. Krafczyk, M. Cerrolaza, M. Schulz, E. Rank, Analysis of 3D transient blood flow passing through an artificial aortic valve by Lattice Boltzmann methods, *Journal of Biomechanics*, 31, 453–462, 1998.
- 103- L. L. Munn, M. M. Dupin, Blood Cell Interactions and Segregation in Flow, *Annals of Biomedical Engineering*, 36, 534–544, 2008.
- 104- E. Davydovaa, S. Woutersb, S. Deridderb, G. Desmetb, S. Eeltinkb, P. J. Schoenmakers, Design and evaluation of microfluidic devices for two-dimensional spatial separations, *Journal of Chromatography A, Chroma*, 357196, 9, 2016.
- 105- T. H. Kima, H. wanga, R. Gorkin, M. Madoua, Y. K. Choa, Geometry effects on blood separation rate on a rotating disc, *Sensors and Actuators B*, 178, 648– 655, 2013.
- 106- A. Shamloo, P. Vatankhah, M. A. Bijarchi, Numerical optimization and inverse study of a microfluidic device for blood plasma separation, *European Journal of Mechanics Fluids*, S0997-7546(15)30140-0, 2016.
- 107- W. Xiong, J. Zhang, Shear Stress Variation Induced by Red Blood Cell Motion in Microvessel, *Annals of Biomedical Engineering*, 38, 2649–2659, 2010.
- 108- A. C. Rowata, D. Leea, J. J. Agrestia, A. S. Utadaa, L. Y. Chua, J. W. Kima, A. Fernandez-Nievesa, C. J. Martineza, D. A. Weitz, designer emulsion using microfluidics, Rhutesh K. Shaha, Ho Cheung Shuma, *nMaterialsToday*, 11, 4–18, 2008.

- 109- P. Occhetta, M. Licini, A. Redaelli, M. Rasponi, Design of a microfluidic strategy for trapping and screening single cells, *Medical Engineering and Physics*, 1–8, 2015.
- 110- Y. Kaufmana, R. Kasherb, R. G.H. Lammertink, V. Fregerd, Microfluidic NF/RO separation: Cell design, performance and application, *Journal of Membrane Science*, 396, 67– 73, 2012.
- 111- E. K. Sackmann¹, A. L. Fulton, D. J. Beebe, The present and future role of microfluidics in biomedical research, *Macmillan Publish, Nature*, 5, 181-189, 2014.
- 112- A. Pazouki, D. Negrut, Numerical investigation of microfluidic sorting of Microtissues, , *Computers and Mathematics with Applications*, 72, 251-263, 2016.
- 113- M.A. Hussein a, S. Esterl a, R. Po rtner b, K. Wiegandt b, T. Becker, On the lattice Boltzmann method simulation of a two-phase flow bioreactor for artificially grown cartilage cells, *Journal of Biomechanics*, 41, 3455–3461, 2008.
- 114- L. Y. Yeo, H. C. Chang, P. P. Y. Chan, J. R. Friend, *Microfluidic Devices for Bio applications*, *Biomicrofl uidics*, 7, 1, 12–48, 2011.
- 115- J. D. Adams, H. Tom Soh, Perspectives on Utilizing Unique Features of Microfluidics Technology for Particle and Cell Sorting, *Journal of Biomechanics*, 41, 331-341, 2009.
- 116- H. Bararnia, D.D. Ganji, Breakup and deformation of a falling droplet under high voltage electric Field, *Advanced Powder Technology*, 24, 992-998, 2013.
- 117- A. Gupta, H. S. Matharoo, D. Makkar, R. Kumar, Droplet formation via squeezing mechanism in a microfluidic flow-focusing device, *Computers & Fluids*, 100218–226, 2014.
- 118- E. Kadivar, Droplet trajectories in a flat microfluidic network, *European Journal of Mechanics B/Fluids*,1-22, 2015.
- 119- R.G.M. van der Sman, S. van der Graaf, Emulsion droplet deformation and breakup with Lattice Boltzmann model, *Computer Physics Communications*, 178, 492–504, 2008.
- 120- S. Seiffert, F. Friess, A. Lendlein, C. Wischke, Faster droplet production by delayed surfactant-addition in two-phase microfluidics to form thermo-sensitive microgels, *Journal of Colloid and Interface Science*, 452, 38–42, 2015.
- 121- G. Y. Soh, G. H. Yeoh, V. Timchenko, Numerical investigation on the velocity fields during droplet formation in a microfluidic T-junction, *Chemical Engineering Science*,1-39, 2015.
- 122- L. Hao, P. Cheng, Lattice Boltzmann simulations of liquid droplet dynamic behavior on a hydrophobic surface of a gas flow channel, *Journal of Power Sources*, 190, 435–446, 2009.
- 123- E. van der Zwan, R. van der Sman, K. Schroën, R. Boom, Lattice Boltzmann

simulations of droplet formation during microchannel emulsification, *Journal of Colloid and Interface Science*, 335, 112–122, 2009.

124- W. Wang, Z. Liu, Y. Jin, Y. Cheng, LBM simulation of droplet formation in micro-channels, *Chemical Engineering Journal*, 173, 828– 836, 2011.

125- S. Gong, P. Cheng, Numerical investigation of droplet motion and coalescence by an improved lattice Boltzmann model for phase transitions and multiphase flows, *Computers & Fluids*, 53, 93–104, 2012.

126- Y. Yan, D. Guo, S.Z. Wen, Numerical simulation of junction point pressure during droplet formation in a microfluidic T-junction, *Chemical Engineering Science*, 84, 591–601, 2012.

127- D.J.E. Harvie, M.R. Davidson, J.J. Cooper-White, M. Rudmanc, Aparametric study of droplet deformation through a microfluidic contraction: Lowviscosity Newtonian droplets, *Chemical Engineering Science*, 61, 5149 – 5158, 2006.

128- A. Prosperitti, G. Trygvason, *Computtional methods for multiphase flow*, Cambridge, Cambridge University Press, 2007.

129- M.R. Kamali, J.J. Gillissen, S. Sundaresan, H.E.A. VandenAkker, Contact line motion without slip in lattice Boltzmann simulations, *Chemical Engineering Science*, 66, 3452–3458, 2011.

130- Zhe Li, Julien Favier, U. D’Ortona, S. Ponceta, An immersed boundary-lattice Boltzmann method for single-and multi-component fluid flows, *Journal of Computational Physics*, 304, 424–440, 2016.

131- J. H. Guo, X. Y Wang, Simulation of the two phase flow of droplet impingement on liquid film by the Lattice Boltzmann Method, *Journal of hydrodynamics*, 24(2), 292-297, 2012.

132- H.W. Zheng, C. Shu, Y.T. Chew, A lattice Boltzmann model for multiphase flows with large density ratio, *Journal of Computational Physics*, 218, 353–371, 2006.

133- S. Gokaltun, D. McDaniel, A Lattice Boltzmann Simulation of Gas Bubbles in Multiphase Flows with High Density Ratios, WM2011 Conference, February 27- March 3, Phoenix, AZ, 2011.

134- T. Lee, C. L Lin, A stable discretization of the lattice Boltzmann equation for simulation of incompressible two-phase flows at high density ratio, *Journal of Computational Physics*, 206, 16–47, 2005.

135- S. Bognera, R. Ammera, U. Rude, Boundary Conditions for Free Interfaces with the Lattice Boltzmann Method, *Computers and Mathematics with Applications*, 72, 251-263, 2015.

136- D. P. Ziegler, Boundary Conditions for Boltzmann Simulations, *Journal of Statistical Physics*, 71, Nos. 5/6, 1993.

- 137- S. Chen, D. Martínez, R. Mei, on boundary conditions in lattice Boltzmann methods, *Physics of Fluids* 8, 2527, 1996.
- 138- X. He, Q. Zou, L. S. Luo, M. Dembo, Analytic solutions of simple flows and analysis of nonslip boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model, *Journal of Statistical Physics*, 87, 115–136, 1997.
- 139- S. H. Kim, H. Pitsch, On the lattice Boltzmann method for multiphase flows with large density ratios, *Journal of Computational Physics*, 303, 19–27, 2015.
- 140- S. H. Kim, H. Pitsch, On the lattice Boltzmann method for multiphase Flows, *Center for Turbulence Research Annual Research Briefs*, 377-389, 2009.
- 141- T. Zhang, B. Shi, Z. Guo, Z. Chai, J. Lu, General bounce-back scheme for concentration boundary condition in the Lattice-Boltzmann method, *Physical Review*, 85, 016701, 2012.
- 142- Y. Bill Bao, J. Meskas, Lattice Boltzmann Method for Fluid Simulations, *Phys. Fluids* 12 (6), 1-17, 2011.
- 143- C. Peng, *The Lattice Boltzmann Method for Fluid Dynamics: Theory and Applications*, Laussane University, Department of Mathematics, 2015.
- 144- J. Wu, C. Shu, Particulate Flow Simulation via a Boundary Condition-Enforced Immersed Boundary-Lattice Boltzmann Scheme, *Commun. Comput. Phys*, 7, 793-812, 2010.
- 145- P. Roberto Di Palma, C. Huber, P. Viotti, A new lattice Boltzmann model for interface reactions between immiscible fluids, *Advances in Water Resources*, 1-32, 2015.
- 146- A.P. Hollis, I. Halliday, C.M. Care, An accurate and versatile lattice closure scheme for lattice Boltzmann equation fluids under external forces, *Journal of Computational Physics*, 227, 8065–8082, 2008.
- 147- B. Chopard, A. Masselot, Cellular automata and lattice Boltzmann methods: a new approach to computational fluid dynamics and particle transport, *Future Generation Computer Systems*, 16, 249-257, 1999.
- 148- S. Chen, H. Chen, D. Martinez, and W. Matthaeus, Lattice Boltzmann model for simulation of magneto hydrodynamics, *Physical Review Letters*, 67, 3776–3779, 1991.
- 149- S. Hou, Q. Zou, S. Chen, G. Doolen, A. C. Cogley, Simulation of cavity flow by the lattice Boltzmann method, *Journal of Computational Physics*. 118, 329-347, 1995.
- 150- J. D. Sterling, S. Chen. Stability analysis of lattice Boltzmann methods, *Journal of Computational Physics*, 123(1):196-206, 1996.
- 151- R. Holme, D. H. Rothman, Lattice-Gas and Lattice Boltzmann and Lattice Boltzmann models of immiscible fluid, *Journal of Statistical Physics*, August 1992, 68,

409–429, 1992.

152- Y. T. Feng, K. Han, D. R. J. Owen, Coupled lattice Boltzmann method and discrete element modelling of particle transport in turbulent fluid flows, Computational issues. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 72, 1111–1134, 2007.

153- F. J. Higuera, J. Jimenez, Boltzmann approach to lattice gas simulations, Europhysics Letters, 9(7):663-668, 1989.

154- H. Chen, S. Chen, and W. H. Matthaeus, Recovery of the Navier-stokes equations using a lattice-gas Boltzmann method, Physical Review A, 45(8) R5339-R5342, 1992.

155- S. Chen, H. Chen, D. Martinez, and W. Matthaeus. Lattice Boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics. Physical Review Letters, 67(27), 3776-3779, 1991.

156- P. A. Skordos, boundary conditions for the lattice Boltzmann method, Initial and. Physical Review E, 48(6):4823-4842, 1993.

157- J. Chin, E.S. Boek, P.V. Coveney, Lattice Boltzmann simulation of the flow of binary immiscible fluids with different viscosities using the Shan-Chen microscopic interaction model, Process Royal Society. London. A 360, 547–558, 2002.

158- L. S. Luo, Theory of the lattice Boltzmann method: lattice Boltzmann models for nonideal gases, Physical Review. E 62, 4982–4996, 2000.

159- G.R. McNamara, G. Zanetti, From automata to fluid flow, Comparisons of simulation and theory, Physical Review Letter, 61(20), 2332, 1988.

160- G.R. McNamara, G. Zanetti, Using the Lattice Boltzmann equation to simulate lattice gas automata, Physical Review Letter, 61(20), 2332, 1988.

161- J. Tölke, B Ahrenholz, M Krafczyk, P. Lehmann, Massively parallel single and multi-phase flow in porous media, International Journal of Computational Fluid Dynamics 22(7), 443, 2008.

162- J. D. Anderson, the Basics with Applications, Computational Fluid Dynamics, McGraw Hill, Inc NeyYork, 1995.

163- X. He, X. Shan, G.D. Doolen, A discrete Boltzmann equation model for non-ideal gases, Physical Review E, 57, R13, 1998.

164- N.S. Martys, H. Chen, Simulation of multicomponent fluids in complex three-dimensional geometries by the lattice Boltzmann method, Physical Review E, 53, 743, 1996.

165- X. He, S. Chen, G. D. Doolen, A novel thermal model in Lattice Boltzmann method in incompressible limit, journal of computational physics, 146, 282-300, 1998.

166- Y. Zhang, H. Chen, Lattice Boltzmann Method for simulation of liquid-vapor thermal flows, Physical Review E, 67, 066711, 2003.

- 167- D. Zhang, S. Chen, Q. Kang, Unified Lattice Boltzmann Method for flow in multiscale porous media, *Physical Review E*, 66, 056307, 2002.
- 168- X. He, G.D. Doolen, T. Clark, Comparison of Lattice Boltzmann Method and the artificial compressibility method for Navier-Stokes equations, *Journal of Computational Physics*, 179, 439-451, 2002.
- 169- A. Tennert, P. K. Jain, Rizwan uddin, A lattice Boltzmann framework to simulate boiling water reactor core hydrodynamics, *Computers and Mathematics with Applications*, 58, 975-986, 2009.
- 170- X.D. Niu, T. Munekata, S.A. Hyodo, K. Suga, An Investigation of Water-Gas Transport Processes in the Gas-Diffusion-Layer of a PEM Fuel Cell by a Multiphase Multiple-Relaxation-Time Lattice Boltzmann Model, *Journal of Power Sources*, 172, 542–552, 2007.
- 171- B.J. Palmer, D.R. Rector, Lattice-Boltzmann algorithm for simulating thermal two-phase flow, *Physical Review E*, 61, 5295, 2000.
- 172- T. Inamuro, N. Konishi, F. Ogino, A Galilean invariant model of Lattice Boltzmann Method for multiphase fluid flow using free energy approach, *Computer Physics Communication*, 129, 32-45, 2000.
- 174- H. Liu, Q. Kang, Ch. R. Leonardi, B. D. Jones, S. Schmieschek, A. Narvaez, J. R. Williams, A. J. Valocchi, J. Harting, Multiphase lattice Boltzmann simulations for porous media applications, *physics of fluid dynamics*, 7523, 2014.
- 175- D. Grunau, Sh. Chen, K. Eggert, A Lattice Boltzmann Model for multiphase fluid flows, *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics* 5, 2557, 1993.
- 176- H. Liu, A. J. Valocchi, Three-dimensional Lattice Boltzmann Model for immiscible two-phase flow simulation, *Physical review E* 85, 046309, 2012.
- 177- J. Tölke, G. DePrisco, Y. Mu, A lattice Boltzmann method for immiscible two-phase Stokes flow with a local collision operator, *Computers & Mathematics with Applications*, 65, 864-881, 2013.
- 178- H. Liu, Y. Zhang, Lattice Boltzmann simulation of the trapping of a microdroplet in a well of surface energy, *Computers and Fluids*, 155. 68-75. 0045-7930, 2017.
- 179- L. M. Pismen, Nonlocal diffuse interface theory of thin films and the moving contact line, *Physical Review E*, 64, 021693-1, 2001.
- 180- S. Chen, G.D. Doolen, Lattice Boltzmann method for fluid flows, *Annual Review, Fluid Mechanics*. 30, 329, 1998.
- 181- X. Shan, H. Chen, Simulation of nonideal gases and liquid–gas phase-transition by the lattice Boltzmann-equation, *Physical Review E*, 49, 2941, 1994.

- 182- M.R. Swift, E. Orlandini, W.R. Osborn, J.M. Yeomans, Lattice Boltzmann simulations of liquid–gas and binary fluid systems, *Physical Review E*, 54, 5041, 1996.
- 183- X. He, S. Chen, R. Zhang, A lattice Boltzmann scheme for incompressible multiphase flow and its application in simulation of Rayleigh–Taylor instability, *Journal of Computational Physics*, 152, 642, 1999.
- 184- Y. Ren, W. W.F. Leung, Numerical and experimental investigation on flow and mixing in batch-mode centrifugal microfluidics, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 60, 95–104, 2013.
- 185- X. He, R. Zhang, S. Chen, G.D. Doolen, on the three-dimensional Rayleigh–Taylor instability, *Physics of Fluids*, 11, 1143, 1999.
- 186- R. Zhang, X. He, S. Chen, Interface and surface tension in incompressible lattice Boltzmann multiphase model, *Computational Physics Communication*, 129, 121, 2000.
- 187- R. Zhang, X. He, G. Doolen, S. Chen, Surface tension effects on two-dimensional two-phase Kelvin–Helmholtz instabilities, *Advanced in Water Resour*, 24, 461, 2001.
- 188- X. Nie, G.D. Doolen, S. Chen, Lattice–Boltzmann simulations of fluid flows in MEMS, *Journal of Statistical Physics*, 107, 279, 2002.
- 189- C.Y. Lim, C. Shu, X.D. Niu, Y.T. Chew, Application of lattice Boltzmann method to simulate microchannel flows, *Physics of Fluids*, 14, 2299, 2002.
- 190- S. Succi, Mesoscopic modeling of slip motion at fluid-solid interfaces with heterogeneous catalysis, *Physical Review Letter*, 89, 064502, 2003.
- 191- T. Lee, C. L. Lin, Rarefaction and compressibility effects of the lattice Boltzmann equation method in a gas microchannel, *Physical Review E*, 4, 046706, 2004.
- 192- D. Jamet, O. Lebaigue, N. Coutris, J.M. Delhay, The second gradient method for the direct numerical simulation of liquid– vapor flows with phase change, *Journal of Computational Physics*, 169, 624, 2001.
- 193- T. Lee, C.-L. Lin, A pressure evolution lattice Boltzmann equation method for two-phase flow with phase change, *Physical Review. E*, 67, 056703, 2003.
- 194- X. He, L. Luo, A discrete Boltzmann equation model for non-ideal gases, *Physical Review E*, 55, R6333, 1997.
- 195- D.J. Holdych, D. Rovas, J.G. Georgiadis, R.O. Buckius, An improved hydrodynamics formulation for multiphase flow Lattice Boltzmann models, *International Journal of Modern Physics C*, 9, 1393, 1998.
- 196- B.T. Nadiga, S. Zaleski, Investigations of a two-phase fluid model, *European Journal of Mechanics B: Fluids*, 15, 885, 1996.
- 197- A. Majda, J. Sethian, The derivation and numerical solution of the equations for zero

- Mach number combustion, *Combustion Society Technology*, 42, 185, 1985.
- 198- M.S. Day, J.B. Bell, Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry, *Combustion Theory Modelling*, 4 (4), 535, 2000.
- 199- Y. Chen, S.L. Teng, S. Shukuwa, H. Ohashi, Int. Lattice Boltzmann simulation of two-phase fluid flows, *Journal of Modern Physics C*, 9, 1383, 1998.
- 200- C. Hirsch, *Numerical Computation of Internal and External Flows*, vol. II, John Wiley and Sons, New York, 1990.
- 201- T. Inamuro, T. Ogata, F. Ogino, Lattice Boltzmann Simulation of Bubble Flows, *Computational Science-ICCS2003 LNCS 2657*, Springer-Verlag, Berlin, 1015, 2003.
- 202- T. Inamuro, T. Ogata, S. Tajima, N. Konishi, A lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows with large density differences, *Journal Computational Physics*, 198, 628, 2004.
- 203- Y. H. Qian, S. Y. Chen, Dissipative and dispersive behavior of lattice-based models for hydrodynamics, *Physical Review E*, 61, 2712, 2000.
- 204- D.Y. Hsieh, X.P. Wang, Phase transition in van der Waals fluid, *SIAM J. Applied Mathematics*, 57 (4), 871, 1997.
- 205- D. Jacqmin, An energy approach to the continuum surface method, in *34th Aerospace Sciences Meeting*, Reno, NV 96, 0858, 1996.
- 206- O. Filippova, D. Haanel, A novel lattice BGK approach for low Mach number combustion, *Journal of Computational Physics*, 158, 139, 2000.
- 208- J.S. Rowlinson, B. Widom, *Molecular Theory of Capillary*, Oxford Press, Oxford, 1989.
- 209- J. Lowengrub, L. Truskinovsky, Quasi-incompressible Cahn–Hilliard fluids and topological transitions, *Process Royal Society London A*, 454, 2617, 1998.
- 210- A.D. Angelopoulos, V.N. Paunov, V.N. Burganos, A.C. Payatakes, Lattice Boltzmann simulation of nonideal vapor–liquid flow in porous media, *Physical Review E*, 57 (3), 3237, 1998.
- 211- D.A. Weiss, A.L. Yarin, Single drop impact on liquid films: Neck distortion, jetting, tiny bubble entrainment and crown formation, *Journal of Fluid Mechanics*, 385, 229, 1999.
- 212- H. Y. Kim, Z. Feng, J. H. Chun, Instability of a liquid jet emerging from a droplet upon collision with a solid surface, *Physics of Fluids*, 12, 531, 2000.
- 213- M. Taghilou, M. H. Rahimian, Investigation of two-phase flow in porous media using lattice Boltzmann method, *Computers and Mathematics with Applications*, 67, 424–436, 2014.

214- H. M. Mirzaie Daryan, M. H. Rahimian, Numerical Simulation of Single Bubble Deformation in Straight Duct and 90 degree Bend Using Lattice Boltzmann Method, Journal of Electronics Cooling and Thermal Control, 5, 89-118, 2015.

215- Ahmad Bedram, Ali Moosavi, Droplet breakup in an asymmetric microfluidic T junction, The European physical journal E, 34, 78-86, 2011.

216- Arshia Merdasi, Saman Ebrahimi, Ali Moosavi, Mohammad Behshad Shafii, Farshad Kowsary, Numerical simulation of collision between two droplets in the T-shaped microchannel with lattice, 6(11):115307, November 2016.

217-Eslam Ezzatneshan, Hamed Vaseghnia, Evaluation of equations of state in multiphase lattice Boltzmann method with considering surface wettability effects, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 123258, 2019.

218- Kazem Hejranfar, Eslam Ezzatneshan, Simulation of two-phase liquid-vapor flows using a high-order compact finite-difference lattice Boltzmann method, Physical Review E, 92, 053305, 2015.

219- Eslam Ezzatneshan, Study of surface wettability effect on cavitation inception by implementation of the lattice Boltzmann method, Physics of Fluids, 29, 113304, 2017.

220- Eslam Ezzatneshan, Comparative study of the lattice Boltzmann collision models for simulation of incompressible fluid flows, Mathematics and Computers in Simulation, 156, 158-177, 2018.

۲۲۱- محمدرضا انصاری، نیما سام خانیانی، مطالعه تجربی نمودارهای جریان دوفازی گاز- مایع در شیب های متوالی- یک زانویی بزرگ، مجله پژوهشی دانشگاه تربیت مدرس، شماره ۱۲، ۶۰-۵۳، ۱۳۹۴.

222- K. S. Koppula, R. Rong, R. Kartik, J. Wan, Integrated microfluidic system with simultaneous emulsion generation and concentration, Journal of Colloid and Interface Science, 466, 162-167, 2016.

223- F. Shen, Y. Li, Z. Liu, R. Cao, G. Wang, J. Chin, Advances in Micro-Droplets Coalescence Using Microfluidics, 43(12), 1942-1954, 2015.

224- D.A. Wolf-Gladrow, Lattice Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models, Springer, 2000.

225- A. A Mohamad, Lattice Boltzmann Method, Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes, Springer London Dordrecht Heidelberg, New York, Springer-Verlag London Limited, 2011.

۲۲۶- نیما سام خانیانی، محمدرضا انصاری، مقایسه روش های کاهش جریان پارازیتی در شبیه سازی جریان دوفاز با روش حجم سیال، مجله پژوهشی دانشگاه تربیت مدرس، ۱۲، ۱۳۳-۱۲۵، ۱۳۹۴.

227- L. Chen, Q. Kang, Y. Mu, Y. He, W. Tao, A critical review of the pseudopotential

multiphase lattice Boltzmann model: Methods and applications, International Journal of Heat and Mass Transfer 76, 210–236, 2014.

228- Q. Lou, Z. B. Guo, Evaluation of outflow boundary conditions for two-phase lattice Boltzmann equation, Physical review E 87, 063301, 2013.

229- T. Lee, P.F. Fische, Eliminating parasitic currents in the lattice Boltzmann equation method for nonideal gases, Physical Review E 74, 046709, 2006.

230- T. Lee, Effects of Incompressibility on the Elimination of Parasitic Currents in the Lattice Boltzmann Equation Method for Binary Fluids, Computers & Mathematics with Applications September, 58, 987-997, 2009.

231- T. Lee, L. Liu, Lattice Boltzmann simulations of micron-scale drop impact on dry surfaces, Journal of Computational Physics, 229, 8045-8063, 2010.

۲۳۲- بتول حسین پور گنجارودی، علی سررشته داری، بررسی دینامیک قطره متحرک در کانال افقی همراه با یک مانع مثلی به روش بولتزمن شبکه‌ای، بیست و ششمین همایش سالانه بین المللی مهندسی مکانیک، ISME، ۲۰۱۸.

233- W.D. Deckwer, Bubble column reactors, Wiley, Chichester, 1992.

234- J. Li, H. Liu, N. Ioannou, Y. Zhang, J.M. Reese, Lattice Boltzmann simulations of thermocapillary motion of droplets in microfluidic channels, Communications in computational physics, 17, 1113- 1126, 2015.

235- R. Clift, J.R. Grace, M. Weber, Bubbles, drops, and particles, Academic Press, New York, 1978.

236- F. Arecchi, P. Buah-Bassuah, F. Francini, S. Residori, Fragmentation of a drop as it falls in a lighter miscible fluid, Physical Review E, 54, 331-334, 1996.

237- D. Bhaga, M.E. Weber, Bubbles in viscous liquids: shapes, wakes and velocities, Journal of Fluid Mechanics, 105, 61–85, 1981.

238- J. Han, G. Tryggvason, Secondary breakup of axisymmetric liquid drops I. Acceleration by a constant body force, Physics of Fluids. 11(12), 3650-3667, 1999.

239- M.J. Ni, S. Komori, N.B. Morley, Direct simulation of falling droplet in a closed channel, International Journal of Heat and Mass Transfer. 49, 366–376, 2006.

240- Ch. Zhang, Effective geometric algorithms for immersed boundary method using signed distance field, Journal of fluids engineering, 141(6), 061401, 2018.

241- M. Li, K. Zeng, L. Wonnell, I. A. Bolotnov, Development of A New Contact Angle Control Algorithm for Level-Set Method, Journal of fluids engineering, 141(6): 061301, 2018.

242- M. Mortezaazadeh, K. Hejranfar, Simulation of Incompressible Multiphase Flows Using the Artificial Compressibility Method, Journal of fluids engineering, July 15-20,

Montreal, Quebec, Canada, 2018.

243- A. Ibrahim, B. Hewakandamby, Z. Yang , B. Azzopardi, Effect of Liquid Viscosity on Two-Phase Flow Development in a Vertical Large Diameter Pipe, *Journal of fluids engineering*, 15–20, , 2018.

244- M. Hatami, M. Sheikholeslami, M. Hosseini, D.D. Ganji, Analytical investigation of MHD Nano fluid flow in non-parallel walls, *Journal of Molecular Liquids* 194, 251–259, 2014.

245- M. Hatami, D.D. Ganji, Heat transfer and Nano fluid flow in suction and blowing process between parallel disks in presence of variable magnetic field, *Journal of Molecular Liquids*, 190, 159-168, 2014.

246- M. Hatami, D. Song, D. Jing, Optimization of a circular-wavy cavity filled by Nano fluid under the natural convection heat transfer condition, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 98, 758-767, 2016.

247- H.R. Ashorynejad, B. Hoseinpour, Investigation of different Nano fluids effect on entropy generation on natural convection in a porous cavity, *European Journal of Mechanics B/Fluids*, 62 86–93, 2017.

248- G.H.R. Kefayati, Simulation of natural convection and entropy generation of non-Newtonian Nano fluid in a porous cavity using Buongiorno's mathematical model, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 112, 709-744, 2017.

249- M. Sheikholeslami, H.R. Ashorynejad, P. Rana, Lattice Boltzmann simulation of Nano fluid heat transfer enhancement and entropy generation, *Journal of Molecular Liquids*, 214, 86–95, 2016.

250- H.R. Ashorynejad, K. Javaherdeh, H.E.A Van den Akker, The effect of pulsating pressure on the performance of a PEM fuel cell with a wavy cathode surface, *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(32) 14239–14251, 2016.

251- H.R. Ashorynejad, K. Javaherdeh, Investigation of a waveform cathode channel on the performance of a PEM fuel cell by means of a pore-scale multi-component lattice Boltzmann method, *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*. 66, 126–136, 2016.

252- G.H.R. Kefayati, R.R. Huilgol, Lattice Boltzmann method for the simulation of the steady flow of a Bingham fluid in a pipe of square cross-section, *European Journal of Mechanics-B/Fluids*, 65, 412-422, 2017.

253- G.H.R. Kefayati, Simulation of vertical and horizontal magnetic fields effects on non-Newtonian power-law fluids in an internal flow using FDLBM , *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 45, 1184-1196, 2014.

254- G.H.R. Kefayati, R.R. Huilgol, Lattice Boltzmann Method for simulation of mixed convection of a Bingham fluid in a lid-driven cavity, *International Journal of Heat and*

Mass Transfer, 103, 725-743, 2016.

255- G.H.R. Kefayati, Lattice Boltzmann Simulation of natural convection in partially heated cavities utilizing Kerosene/ Cobalt Ferro fluid, Shiraz University, 37, 107-118, 2013.

256- G.R. Kefayati, Simulation of non-Newtonian molten polymer on natural convection in a sinusoidal heated cavity using FDLBM, Journal of Molecular Liquids, 195, 165–174, 2014.

257- G.R. Kefayati, Mesoscopic simulation of magnetic field effect on double-diffusive mixed convection of shear-thinning fluids in a two sided lid-driven cavity, Journal of Molecular Liquids, 198 ,413–429, 2014.

258- B. Hoseinpour, H.R. Ashorynejad, K. Javaherdeh, Entropy Generation of Nano fluid in a Porous Cavity by Lattice Boltzmann Method, Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 31(1), 1-8, 2016.

259- A. Hasanpour, M. Farhadi, K. Sedighi, H.R. Ashorynejad, Numerical study of Prandtl effect on MHD flow at a lid- driven porous cavity, International Journal for Numerical Methods in Fluids. 70 (7), 886-898, 2012.

260- E. Fattahi, C. Waluga, B. Wohlmuth, U. Rüde, M. Manhart, R. Helmig, Lattice Boltzmann methods in porous media simulations: From laminar to turbulent flow, Computers & Fluids, 140, 247-259, 2016.

261- K. Bamdad, H.R. Ashorynejad, Inverse analysis of a rectangular fin using the lattice Boltzmann method, Energy Conversion and Management, 97, 290–297, 2015.

262- M. Sheikholeslami, M. Gorji-Bandpy, D.D. Ganji, MHD free convection in an eccentric semi-annulus filled with Nano fluid, Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers. 45, 1204–1216, 2014.

263- M. Sheikholeslami, M. Gorji-Bandpy, D.D. Ganji, S. Soleimani, Thermal management for free convection of Nano fluid using two phase model, Journal of Molecular Liquids 194, 179–187, 2014.

264- M. Hatami, M. Sheikholeslami, D.D. Ganji, Nano fluid flow and heat transfer in an asymmetric porous channel with expanding or contracting wall, Journal of Molecular Liquids, 195, 230–239, 2014.

265- G.H.R. Kefayati, Lattice Boltzmann simulation of natural convection in a Nano fluid-filled inclined square cavity at presence of magnetic field, Scientia Iranica, 20, 1517-1527, 2013.

266- A. Fakhari, M.H. Rahimian, Simulation of falling droplet by the lattice Boltzmann method, Commun Nonlinear Sci Numer Simulat. 14, 3046–3055, 2009.

267- L. Amaya-Bower, T. Lee, Single bubble rising dynamics for moderate Reynolds

- number using Lattice Boltzmann Method, *Computers & Fluids*. 39, 1191–1207, 2010.
- 268- K. Connington, T. Lee, Lattice Boltzmann simulations of forced wetting transitions of drops on superhydrophobic surfaces, *Journal of Computational Physics*. 250, 601-615, 2013.
- 269- L. Chen, Q. Kang, Y. Mu, Y.L. He, W.Q. Tao, A critical review of the pseudopotential multiphase lattice Boltzmann model: Methods and applications, *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 76, 210–236, 2014.
- 270- B. Hoseinpour, A. Sarreshtedari, H.R. Ashorynezhad, lattice Boltzmann assessment of falling droplet dynamics in vertical channel with triangle obstacle, *Thermophysics and Heat Transfer*, 1-23, 2019.
- 271- V. Van Steijn, M. T. Kreutzer, C. R. Kleijn, m-PIV study of the formation of segmented flow in microfluidic T-junctions, *Chemical Engineering Science*, 62, 7505–7514, 2007.
- 272- L. Amaya-Boweri, T. Lee, Lattice Boltzmann simulations of bubble formation in a microfluidic T-junction, *Transaction of the Royal Society A*, 369, 2405–2413, 2011.
- 273- X. Xue, M. K. Patel, M. K. Kerhoas, M. P.Y. Desmulliez, C. Bailey, D. Topham, Analysis of fluid separation in microfluidic T-channels, *applied Mathematical Modelling*. 36, 743–755, 2012.
- 274- S. Feng, L. Yi1, Z.M Liu, R.T. Cao, G.R. Wang, Advances in Micro-Droplets Coalescence Using Microfluidics, *China Journal Anal Chem*. 43(12), 1942–1954, 2015.
- 275- S. Panić, S. Loebbecke, T. Tuercke, J. Antes, D. Bošković, Experimental approaches to a better understanding of mixing performance of microfluidic devices, *Chemical Engineering Journal*. 101, 409–419, 2004.
- 276- R. Gorkin, j. park, J. siegrist, M. amasia, B. s. Lee, J. m. Park, J. Kim, H. Kim, M. Madou, Y. k. cho, Centrifugal microfluidics for biomedical applications, *the royal society of chemistry*. 10, 1758-1773, 2010.
- 277- J. Li, H. Liu, N. Ioannou, Y.R. Zhang, Lattice Boltzmann simulations of thermocapillary motion of droplets in microfluidic channels, *Communications in computational physics*. 17, 1113-1126, 2014.
- 278- H. Liu, Y. Zhang, A. J. Valocchi, Modeling and simulation of thermocapillary flows using lattice Boltzmann method, *Journal of Computational Physics*, 23, 4433– 4453, 2012.
- 279- H. Liu, A. J. Valocchi, Y. Zhang, Q. Kang, Lattice Boltzmann phase field modeling of thermocapillary flows in a confined microchannel, *Journal of Computational Physics*. 256, 334–356, 2014.
- 280- Y. Shi, G.H. Tang, H.H. Xia, Lattice Boltzmann simulation of droplet formation in T-junction and flow focusing devices, *Computers & Fluids*. 90, 155–163, 2014.

- 281- A. Riaud, K. Wang, G. lu, A combined lattice Boltzmann method for the simulation of two- phase flows in michrochannel, chemical engineering science. 99, 238- 249, 2013.
- 282- M. De Menech, Modeling of droplet breakup in a microfluidic T-shaped junction with a phase-field model, Physical Review E. 73, 031505, 2006.
- 283- J. Harting, Ch. Christian Kunert, J. Hyva luoma, Lattice Boltzmann simulations in microfluidics: probing the no-slip boundary condition in hydrophobic, rough, and surface nanobubble laden microchannels, Microfluid Nanofluid, 8:1–10, 2010.
- 284- T. Lee, L. liu, Wall boundary conditions in the Lattice Boltzmann Equation method for nonideal gases, Physical review E. 78, 017702, 2008.
- 285- P. Garstecki, M.J. Fuerstman, H.A. Stone, Formation of droplets and bubbles in a microfluidic T-junction-scaling and mechanism of break-up, White sides GM. Lab Chip. 6, 437–66, 2006.
- 286- B. Hoseinpour, A. Sarreshtehdari, H. R. Ashorynezhad, Lattice Boltzmann simulation of droplets manipulation generated in lab-on-chip (LOC) microfluidic T-junction, Moleular Liquid 1-18, 2019.
- 287- O. Strohmeier, M. Keller, F. Schwemmer, S. Zehnel, D. Mark, F. Von Stetten, R. Zengerle, N. Paust, Centrifugal microfluidic platforms: advanced unit operations and applications, The Royal society of chemistry, 1758-1773, 2015.
- 288- M. M. Hoehl, M. Weißert, A. Dannenberg, T. Nesch, N. Paust, F. Stetten, R. Zengerle, A. H. Slocum and J. Steigert, Centrifugal LabTube platform for fully automated DNA purification and LAMP amplification based on an integrated, low-cost heating system, Biomedical Microdevices, 16, 375–385, 2014.
- 289- G. Czilwik, O. Strohmeier, I. Schwarz, N. Paust, S. Zehnle, F. von Stetten and R. Zengerle and D. Mark, Microfluidic vapor-diffusion barrier for pressure reduction in fully closed PCR modules, Process of mTAS, 1607–1609, 2013.
- 290- Y.K. Cho, J.-G. Lee, J.M. Park, B.S. Lee, Y. Lee, C. Ko, One-step pathogen specific DNA extraction from whole blood on a centrifugal microfluidic device. Lab Chip, 7, 565, 2007.
- 291- T. H. Kim, J. Park, C. J. Kim and Y.K. Cho, fully integrated lab-on-a-disc for nucleic acid analysis of food-borne pathogens, Anal. Chem, 86, 3841–3848, 2014.
- 292- S. Lai, S. Wang, J. Luo, L. J. Lee, S.T. Yang, M. J. Madou, Design of a compact disk-like microfluidic platform for enzyme-linked immunosorbent assay, Analytical Chemistry, 76, 1832–1837, 2004.
- 293- R. Burger, M. Kitsara, J. Gaughran, C. Nwankire and J. Ducre´e, Automation of mmunoassays through centrifugal lab-on-a-disc platforms, Future Med, 72–92, 2014.

- 294- H. He, Y. Yuan, W. Wang, N.R. Chiou, A. J. Epstein and L. J. Lee, Design and testing of a microfluidic biochip for cytokine enzyme-linked immunosorbent assay. *Biomicrofluidics*, 3, 22401, 2009.
- 295- P. Andersson, G. Jesson, G. Kylberg, G. Ekstrand and G. Thorsén, Parallel Nanoliter Microfluidic Analysis System, *Analytical Chemistry*, 79, 4022–4030, 2007.
- 296- J. Steigert, T. Brenner, M. Grumann, L. Riegger, S. Lutz, R. Zengerle and J. Ducreé, *Microdevices, Biomed microdivices*, 9, 675–679, 2007.
- 297- D. Mark, T. Metz, S. Haeberle, S. Lutz, J. Ducreé, R. Zengerle, F. von Stetten, Centrifugo-pneumatic valve for metering of highly wetting liquids on centrifugal microfluidic platforms, Centrifugo-pneumatic valve for metering of highly wetting liquids on centrifugal microfluidic platforms, *Lab Chip*, 9, 3599, 2009.
- 298- M. Grumann, A. Geipel, L. Riegger, R. Zengerle and J. Ducreé, Batch-mode mixing on centrifugal microfluidic platforms *Lab Chip*, 5, 560, 2005.
- 299- Y. Ren and W. W.F. Leung, Numerical and experimental investigation on flow and mixing in batch-mode centrifugal microfluidics, *International Journal of Heat Mass Transfer*, 60, 95–104, 2013.
- 300- A. Kazemzadeh, P. Ganesan, F. Ebrahim, Lawrence Kulinsky, M. J. Madou, Gating valve on spinning microfluidic platforms: A flow switch/control concept, *Royal society of chemistry*, 5, 8669-8679, 2015.
- 301- A. Kazemzadeh, P. Ganesan, F. Ebrahim, M. M. Aeinehvand, L. Kulinsky, M. J. Madou, Guided routing on spinning microfluidic platforms, *Sensors and actuators B: Chemical*, 12, 149-158, 2014
- 302 -H. He, Y. Yuan, W. Wang, N.R. Chiou Nan-Rong, A.J. Epstein, L.J. Lee, Design and testing of a microfluidic biochip for cytokine enzyme-linked immunosorbent assay *Biomicrofluidics* 3, 3(2): 022401, 2009.
- 303- T. Brenner, T. Glatzel, R. Zengerle, J. Ucree, Frequeny dependent transversal flow control in centrifugal microfluidics, *Lab On Chip*, 5, 146-150, 2004.
- 304- R. Zengerle, J. Ducree, A flow switch based on Coriolis force, 7th International Conference on miniachrization and biochemical Analysis systems, 2003.
- 305- Y. Ren, W. Woon, F. Leung, Numerical Investigation of Cell Encapsulation for Multiplexing Diagnostic Assays Using Novel Centrifugal Microfluidic Emulsification and Separation Platform, *Micro machines*, 7(2): 17, 2016

Appendix I

The boundary condition for $\nabla^2\mu$ and ∇^2C must be handled carefully, and should only be imposed on terms related to the free energy. Since the boundary condition for the chemical potential is also a no-flux condition, it can be treated as the same as the other physical quantities. The following boundary condition for the composition and it can be shown that it recovers following equation

$$n.\nabla C|_s = \frac{\phi_c}{k}(C_s - C_s^2)$$

Along flat walls, where a flat wall is one that has a clearly defined normal along one of the coordinate direction.

$$\partial e_\alpha.\nabla C = (n.e_\alpha.\partial)\frac{\phi_c}{K}(C(x_s) - C(x_s)^2) \quad \text{for } (n.e_\alpha.\partial) \neq 0.$$

$$n.\nabla C = \frac{1}{C_s^2} \sum_{\alpha \neq 0} t_\alpha (n.e_\alpha) \left[(n.e_\alpha.\partial)\frac{\phi_c}{K}(C(x_s) - C(x_s)^2) \right] = \frac{1}{C_s^2} \frac{\phi_c}{K} (C(x_s) - C(x_s)^2) \sum_{\alpha \neq 0} t_\alpha (n.e_\alpha)^2$$

For flat wall, $n = (\pm 1, 0, 0)$ or $n = (0, \pm 1, 0)$ or $n = (0, 0, \pm 1)$. Since $\sum_{\alpha} t_\alpha e_{\alpha_i} e_{\alpha_j} = C_s^2 \delta_{ij}$ where $i, j = x, y$ or z above equation can be written as

$$n.\nabla C|_s = \frac{\phi_c}{k}(C_s - C_s^2)$$

This boundary condition is applied in following equation replacing any composition located inside the wall

$$\nabla^2 \phi|_{(x)} = \frac{1}{C_s^2 \partial^2} \sum_{\alpha} t_\alpha (\partial e_\alpha \cdot \nabla^2 \phi)^2|_{(x)}$$

Therefore, this equation can be discretized as follows

$$\frac{1}{2} [C(x_s + e_\alpha \partial t) - C(x_s - e_\alpha \partial t)] = (n.e_\alpha) \frac{\phi_c}{k} (C(x_s) - C(x_s)^2)$$

Here either $C(x_s + e_\alpha \partial t)$ or $C(x_s - e_\alpha \partial t)$ is located inside the wall while the other must be in the fluid domain, and therefore known. Where $(n.e_\alpha) = -1$. Using this scheme, only lattice nodes in the fluid domain (either on solid boundary or in the bulk) are utilized and the boundary condition that recovers the contact angle at equilibrium is applied.

At the corner in two dimensions, a traditional normal cannot be defined. As a

heuristic solution, we treat the unknown quantities in the similar manner as in the case of the flat wall. If $x_s + e_\alpha \partial t$ is located in the solid wall, the unknown composition is given by:

$$C(x_s + e_\alpha \partial t) = C(x_s - e_\alpha \partial t) - 2 \frac{\phi_c}{k} (C(x_s) - C(x_s)^2)$$

Where we are effectively assuming that the normal is in the direction e_α , a diagonal direction, pointing away from the solid. This can be thought of as a symmetric way of imposing the boundary conditions, rather than choosing one of the normal defining the flat surfaces that meet at the corner.

In which

$$\cos \theta_{eq} = \frac{(o_{sg} - o_{sl})}{o} = -\Omega_c, \quad \theta_{eq} \text{ is the contact angle and } \Omega_c = \phi_c / \sqrt{2K\beta}.$$

Appendix II

In section 3, implemented equations of LBM proposed by Lee and Liu [] entirely presented in details. In the first equation, F_i , renders the external body forces and the intermolecular ones.

$$\frac{Df_\alpha}{Dt} = \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + e_{i\alpha} \frac{\partial f_\alpha}{\partial x_i} = -\frac{1}{\lambda} (f_\alpha - f_\alpha^{eq}) + \frac{(e_{i\alpha} - u_i) F_i}{p c_s^2} f_\alpha^{eq}$$

$$f_\alpha^{eq} = t_{\alpha\rho} \left[1 + \frac{e_{\alpha i} u_i}{c_s^2} + \frac{e_{\alpha i} e_{\alpha j} - c_s^2 \delta_{ij}}{2 c_s^4} u_i u_j \right]$$

Where intermolecular force can be defined as

$$F_i = \nabla \rho C_s^2 - (\nabla p - C \nabla \mu)$$

Where p is related to the dynamic pressure. Also one can take into account the body force effect by adding the following term to above equation in which F_g can be related to the gravitational force and g is gravitational acceleration. For example, buoyant force:

$$F_g = g(\rho - \rho_l)$$

Where, g can be obtained through involved dimensionless numbers in the simulation such as Bond number (Bo), Eotvos number (Eo) and Ohnesorg number (Oh). In the present thesis, Bo number was used to apply the effects of the centrifugal acceleration as gravitational acceleration ($g = \bar{r} \omega^2$).

Lee [2009], with the definition of another variable, presented his model as follows:

$$g_\alpha = f_\alpha + \left(\frac{p}{c_s^2} - \rho \right) \Pi_\alpha(0)$$

Equilibrium distribution function for g_α could be calculated by

$$g_\alpha^{eq} = t_\alpha \left[\frac{p}{c_s^2} + \rho \left(\frac{e_{\alpha i} u_i}{c_s^2} + \rho \left(\frac{e_{\alpha i} u_i}{c_s^2} + \frac{e_{\alpha i} e_{\alpha j} - c_s^2 \delta_{ij}}{2 c_s^4} u_i u_j \right) \right) \right]$$

In which material derivation of g_α is of the form

$$\frac{Dg_\alpha}{Dt} = \frac{Df_\alpha}{Dt} + \frac{1}{c_s^2} \frac{Dp}{Dt} \Pi_\alpha(0) - \frac{Dp}{Dt} \Pi_\alpha(0) = -\frac{1}{\lambda} (g_\alpha - g_\alpha^{eq}) + \frac{(e_{\alpha i} - u_i) \partial_i (\rho c_s^2 - p)}{c_s^2} [\Pi_\alpha(u) - \Pi_\alpha(0)]$$

$$+ \frac{(e_{\alpha i} - u_i)}{c_s^2} [k \partial_i (\partial_k \rho \partial_k \rho) - k \partial_j (\partial_j \rho - \partial_i \rho)] \Pi_\alpha(u)$$

Distribution function to compute the value of composition C is defined as

$$h_\alpha = \left(\frac{C}{\rho}\right) f_\alpha$$

And its equilibrium state yields $h^{eq} = \left(\frac{C}{\rho}\right) f^{eq}$ and similarly total derivative of h_α

is of the form of

$$\begin{aligned} \frac{Dh_\alpha}{Dt} + e_\alpha \nabla h_\alpha &= \frac{C}{\rho} \left[-\frac{1}{\lambda} (f_\alpha - f_\alpha^{eq}) + \frac{(e_{ai} - u_i) \partial_i (\rho c_s^2 - p) F}{c_s^2} [\Pi_\alpha(u) - \Pi_\alpha(0)] \right] = -\frac{1}{\lambda} (h_\alpha - h_\alpha^{eq}) + f_\alpha \frac{D}{Dt} \left(\frac{C}{\rho} \right) + \frac{C}{\rho} \\ &\quad \frac{(e_{ai} - u_i)}{c_s^2} [\nabla \rho c_s^2 - (\nabla p + C \nabla \mu + F)] \Pi_\alpha(u) \end{aligned}$$

Therefore, distribution functions can be introduced with external force as follows:

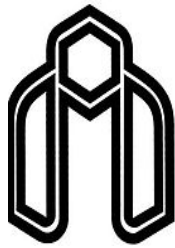
$$\begin{aligned} &\bar{g}_\alpha(x + e_\alpha \delta t, t + \delta t) - \bar{g}_\alpha(x, t) \\ &= -\frac{1}{\tau + 0.5} (\bar{g}_\alpha - \bar{g}_\alpha^{cq})(x, t) + \delta t (e_\alpha - u) \cdot [\nabla \rho c_s^2 (\Gamma_\alpha - \Gamma_\alpha(0)) + (\mu \nabla C + F) \Gamma_\alpha]_{(x,t)}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\bar{h}_\alpha(x + e_\alpha \delta t, t + \delta t) - \bar{h}_\alpha(x, t) \\ &= -\frac{1}{\tau + 0.5} (\bar{h}_\alpha - \bar{h}_\alpha^{eq})(x, t) + \delta t (e_\alpha - u) \cdot \left[\nabla C - \frac{C}{\rho c_s^2} (\nabla p_t - \mu \nabla C + F) \right] \Gamma_\alpha \Big|_{(x,t)} + \delta t \nabla \cdot (M \nabla \mu) \Gamma_\alpha \Big|_{(x,t)}. \end{aligned}$$

Abstract

Since microfluidic systems are of the modern issues and technologies, have attracted researchers' attention. The main purpose of the thesis has been devoted to the investigation of Lab-On-Disk microfluidic systems using Lattice Boltzmann Method which is one of the most robust methods in numerical simulation. This simulation not only provides development of LBM in a new context but also prepare the possibility of comprehensive understanding about the performance of these systems through investigation of influential parameters. Since LBM particularly Lee's method has been employed to simulate the two immiscible phase, the method, its features and its related boundary conditions have been presented in details. In this regard, according to the proposal, in the last section of the thesis, all results in various steps of validation and their purposeful development have been rendered. In section related to droplet dynamic, increase of droplet generation has been assessed through aligning a funnel or triangular obstacle. Both LOD and LOC systems have been inquired. In these sections, not only different flow regimes but also some innovations have been introduced. Hence, some techniques have been represented in order to making delay in second phase releasing known as valving and augmentation of droplet generation rate applicable in Nucleic Acid assays. Furthermore, effects of change in channel geometry, related dimensionless parameters and combination of the influential parameters have been studied.

Key words: microfluidic systems, Lab-On-Disk, two-phase flows, droplet generation, Lattice Boltzmann Method



Shahrood university of technology

Mechanical engineering department
Mechanical Engineering-Energy conversion

Ph.D thesis

Simulation of immiscible fluid LOD microfluidics using Lattice Boltzmann Method

By: Batool Hoseinpour Ganjaroudi

Supervisor:

Dr. Ali Sarreshtehdari

Adviser:

Dr. Hamidreza Ashorinezhad

January, 2019