

صلى الله عليه وسلم



دانشکده مهندسی مکانیک

تبدیل انرژی

پایان نامه کارشناسی ارشد

بررسی عددی جریان الکترو اسموتیک در کانالهای با ابعاد میکرو با استفاده از روش شبکه

بولتزمن

دانشجو:

سارا هراتی

استاد راهنما:

دکتر محمد حسن کیهانی

استاد مشاور:

دکتر محسن نظری

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

تابستان ۹۳

تقدیم به مهربان فرشتگانی که:

لحظات ناب باور بودن،

لذت و غرور دانستن،

جسارت خواستن،

عظمت رسیدن و تمام تجربه های یکتا و زیبای زندگیِ مدیون حضور سبز آنهاست.

تقدیم به خانواده عزیزم

تشکر و قدردانی

به مصداق «من لم یشکر المخلوق لم یشکر الخالق» بسی شایسته است از استادان فرهیخته و فرزانه ام جناب آقایان دکتر محمد حسن کیهانی و دکتر محسن نظری که با کرامتی چون خورشید ، سرزمین دل را روشنی بخشیدند و گلشن سرای علم و دانش را با راهنمایی های کار ساز و سازنده بارور ساختند، تقدیر و تشکر نمایم و باسپاس فراوان خدمت دوست عزیزم خانم آلاله انارکی که مرا صمیمانه و مشفقانه یاری داده اند.

چکیده:

در این تحقیق به بررسی عددی جریان الکترواسموتیک در کانالهای با ابعاد میکرو و خواص ثابت به روش شبکه بولتزمن پرداخته شده است .

تمام معادلات حاکم بر جریان به روش شبکه بولتزمن حل و تمام مراحل از طریق روش تکرار شبیه سازی شده اند.

معادلات مورد بررسی ، معادلات ناویر استوکس ، پواسون بولتزمن ، و معادله مربوط به توزیع غلظت یونی می باشند. تمام خواص فیزیکی سیال یونی ثابت در نظر گرفته شده است. در تمام مراحل محاسباتی پارامتر دما $T = 273 \text{ }^\circ\text{K}$ نیز ثابت فرض شده است. شرط مرزی برای هندسه مورد مطالعه ، شرط مرزی تناوبی برای معادله جریان و غلظت یونی می باشد.

در این مطالعه پارامترهایی که تغییرات آنها بر خروجی مورد بررسی قرار گرفته اند شامل : ζ ، E ، D_1 ، D_2 ، Z_1 ، Z_2 می باشند.

با تغییر پتانسیل الکتریکی روی دیواره های کانال (ζ) از 50 mV - به 100 mV - مشاهده می شود که با افزایش قدر مطلق ζ مقادیر پتانسیل الکتریکی ذرات داخل شبکه افزایش پیدا می کند. اثر تغییرات مربوط به ضریب پراکندگی یونی ، نسبت غلظت یونی و میدان الکتریکی خارجی بر روی پروفیل پتانسیل الکتریکی قابل چشم پوشی هستند.

ولی تغییر همین پارامترها بر روی پروفیل سرعت تأثیر قابل مشاهده ای دارند. با افزایش میدان الکتریکی خارجی (E) میدان سرعت نیز دچار افزایش می شود. در مورد نسبت غلظت یونی نیز میتوان گفت در میان نسبت های یونی مختلف نسبت ۱:۱ منجر به کوچکترین مقدار سرعت در کانال می شود.

واژگان کلیدی: جریان الکترواسموتیک ، شبکه بولتزمن ، میکرو کانال

فهرست مطالب

فصل ۱: مقدمه

فصل ۲: مروری بر کارهای انجام شده

۱-۲- مقدمه ۸

۲-۲- مطالعات انجام شده برای حل معادله غیر خطی پوآسون به روش شبکه بولترمن ۱۳

۳-۲- مطالعات انجام شده برای بررسی اثرات زبری و تخلخل بر جریان الکترو اسموتیک در میکرو کانال

ها ۱۷

۴-۲- مطالعات انجام شده برای شبیه سازی عددی جریان الکترو اسموتیک در نزدیکی سطح

زمین

..... ۲۴

۵-۲- مطالعات انجام شده برای حل معادلات نادیاوستوکس و پوآسون برای سیالات غیر

نیوتونی

..... ۲۸

فصل ۳: معادلات حاکم و شرایط مرزی

۱-۳- معادلات حاکم ۳۴

۲-۳- شرایط مرزی ۳۷

۳-۳- بیان مساله ۳۹

۴-۳- پارامترهای LBM ۴۰

فصل ۴: روش شبکه بولتزمان

- ۴-۱- روش بولتزمان شبکه ای برای محاسبه سرعت ۴۲
- ۴-۱-۱- ویسکوزیته ۴۸
- ۴-۱-۲- شرایط مرزی ۴۹
- ۴-۱-۲-۱- شرایط مرزی تقارن ۴۹
- ۴-۱-۲-۲- شرایط مرزی پریودیک ۵۰
- ۴-۱-۲-۳- شرایط مرزی با عدم لغزش ۵۱
- ۴-۱-۲-۴- شرایط مرزی سرعت معلوم در مرز ۵۳
- ۴-۱-۲-۵- شرایط مرزی خروجی گرادیان صفر ۵۴
- ۴-۲- روش شبکه بولتزمان برای حل معادله انتقال یون ۵۵
- ۴-۲-۱- شرایط مرزی برای معادله انتقال یون ۵۶
- ۴-۳- روش شبکه بولتزمان برای حل معادله پتانسیل الکتریکی ۵۷
- ۴-۳-۱- شرایط مرزی پتانسیل الکتریکی ۵۹

فصل ۵: نتایج و تفسیر آنها

- ۵-۱- مقدمه ۶۲
- ۵-۲- هندسه مساله مورد مطالعه ۶۲
- ۵-۳- بررسی سرعت و پتانسیل الکتریکی در کانال ۶۳

- ۶۶ ۱-۳-۵- بررسی همگرایی
- ۶۷ ۲-۳-۵- استقلال از شبکه
- ۶۸ ۴-۵- بررسی اثرات ناشی از تغییر پتانسیل الکتریکی روی دیواره های کانال
- ۷۰ ۵-۵- بررسی اثرات ناشی از تغییر میدان الکتریکی خارجی در کانال با بار الکتریکی ناهمگن
- ۷۱ ۱-۵-۵- تغییرات پتانسیل الکتریکی در مقطع C-C
- ۷۲ ۲-۵-۵- تغییرات پتانسیل در مقطع A-A
- ۷۳ ۳-۵-۵- تغییرات سرعت در مقطع A-A
- ۷۴ ۶-۵- بررسی اثرات ناشی از تغییر ضریب پراکندگی یونی
- ۷۵ ۷-۵- بررسی اثرات ناشی از تغییر نسبت غلظت یونی
- ۷۵ ۱-۷-۵- تغییرات سرعت
- ۷۶ ۲-۷-۵- تغییرات پتانسیل الکتریکی

فصل ۶: نتیجه گیری و پیشنهادات

- ۸۰ ۱-۶- نتیجه گیری
- ۸۱ ۲-۶- پیشنهادات
- ۸۲ مراجع

فهرست اشکال

- شکل (۱-۲) هندسه مورد بررسی توسط وانگ و همکارانش [۳۲]..... ۱۳
- شکل (۲-۲) نتایج به دست آمده از مطالعات وانگ و همکارانش برای خروجی پتانسیل الکتریکی ۱۴
- شکل (۳-۲) نتایج به دست آمده از مطالعات وانگ و همکارانش برای خروجی سرعت به ازای E های متفاوت ۱۵
- شکل (۴-۲) نتایج به دست آمده از مطالعات وانگ و همکارانش برای خروجی سرعت به ازای $C \infty$ های متفاوت ۱۶
- شکل (۵-۲) نتایج به دست آمده از مطالعات چن و همکارانش برای کانال صاف ۱۸
- شکل (۶-۲) هندسه مورد بررسی توسط چن و همکارانش برای کانال زبر [۳۴]..... ۱۹
- شکل (۷-۲) نتایج به دست آمده از مطالعات چن و همکارانش برای سرعت در کانال زبر برای h های مختلف ۲۰
- شکل (۸-۲) هندسه مورد بررسی توسط چن و همکارانش برای دبی جریان با تغییر h ۲۱
- شکل (۹-۲) هندسه مورد بررسی توسط چن و همکارانش برای سرعت به ازای Ψ_r های مختلف ۲۲
- شکل (۱۰-۲) هندسه مورد بررسی توسط چن و همکارانش برای کانال متخلخل [۳۴] ۲۳
- شکل (۱۱-۲) هندسه مورد بررسی توسط زو ویان [۳۵] ۲۵
- شکل (۱۲-۲) نتایج به دست آمده در مطالعات زو ویان برای Ψ ۲۶
- شکل (۱۳-۲) نتایج به دست آمده در مطالعات زو ویان برای Φ ۲۷

- شکل (۲-۱۴) نتایج به دست آمده در مطالعات زو ویان برای E ۲۷
- شکل (۲-۱۵) خطوط جریان در مطالعات زو ویان برای u ۲۷
- شکل (۲-۱۶) نتایج به دست آمده از مطالعات زو ویان و همکارانش برای سرعت به ازای n های مختلف
[۳۶] ۲۹
- شکل (۲-۱۷) نتایج به دست آمده از مطالعات زو ویان و همکارانش برای سرعت به ازای C_{inf} های مختلف. ۳۱
- شکل (۴-۱) و (۴-۲) شبکه کارترین [۳۸] ۴۲
- شکل (۴-۳) مدل D_2Q_9 [۳۸] ۴۳
- شکل (۴-۴) مدل شبکه D_1Q_3 در سمت چپ و مدل D_1Q_5 در سمت راست [۳۸] ۴۷
- شکل (۴-۵) مدل شبکه D_3Q_{15} در سمت چپ و مدل D_3Q_{19} در سمت راست [۳۸] ۴۸
- شکل (۴-۶) شرایط مرزی تقارن [۳۷] ۵۰
- شکل (۴-۷) شرایط مرزی پریودیک [۳۸] ۵۱
- شکل (۴-۸) طرح عقب جست کامل ۵۲
- شکل (۵-۱) هندسه مساله ۶۲
- شکل (۵-۲) بررسی اثر پارامتر K بر روی پروفیل سرعت نقاط شبکه در یک مقطع عرضی ۶۳
- شکل (۵-۳) پروفیل سرعت در مقطع عرضی کانال با ثابت در نظر گرفتن پارامترها ۶۴
- شکل (۵-۴) پروفیل پتانسیل الکتریکی در مقطع عرضی کانال با ثابت در نظر گرفتن پارامترها ۶۵
- شکل (۵-۵) بررسی همگرایی پتانسیل الکتریکی در گره (۱۴۰, ۱۰) ۶۶

- شکل (۵-۶) بررسی همگرایی سرعت جریان در گره (۱۴۰، ۱۰) ۶۷
- شکل (۵-۷) پروفیل پتانسیل الکتریکی در مقطع عرضی کانال برای حالت پتانسیل الکتریکی روی دیواره mv ۶۸
- $\zeta = - ۵۰$
- شکل (۵-۸) پروفیل پتانسیل الکتریکی در مقطع عرضی کانال برای حالت پتانسیل الکتریکی روی دیواره mv ۶۹
- $\zeta = - ۱۰۰$
- شکل (۵-۹) میکرو کانال با بار ناهمگن روی دیواره ۷۰
- شکل (۵-۱۰) پروفیل تغییرات پتانسیل الکتریکی کانال در مقطع طولی کانال با بار الکتریکی ناهمگن (c-c) به ازای مقادیر E متفاوت ۷۱
- شکل (۵-۱۱) پروفیل تغییرات پتانسیل الکتریکی کانال در مقطع عرضی کانال با بار الکتریکی ناهمگن (A-A) به ازای مقادیر E متفاوت ۷۲
- شکل (۵-۱۲) پروفیل تغییرات سرعت در مقطع عرضی کانال با بار الکتریکی ناهمگن (A-A) به ازای مقادیر متفاوت E ۷۳
- شکل (۵-۱۳) پروفیل پتانسیل الکتریکی در مقطع عرضی کانال با بار الکتریکی ناهمگن (A-A) و برای ضرایب پراکندگی یونی مختلف ۷۴
- شکل (۵-۱۴) پروفیل سرعت در مقطع عرضی کانال به ازای مقادیر مختلف غلظت یونی در کانال با بار الکتریکی همگن ۷۵
- شکل (۵-۱۵) پروفیل پتانسیل الکتریکی در مقطع عرضی کانال با بار الکتریکی همگن برای مقادیر مختلف غلظت یونی ۷۶

فهرست جداول

جدول (۴-۱) ضرایب وزنی و مربع سرعت صوت مربوط به انواع شبکه مورد استفاده در *LBM*..... ۴۷

جدول (۵-۱) مقدار سرعت و پتانسیل الکتریکی برای گره مرکزی در شبکه هایی با اندازه های متفاوت..... ۶۸

فهرست علائم اختصاری

f_{α}^{eq} تابع توزیع تعادلی چگالی در جهت α

h_{α}^{eq} تابع توزیع تعادلی پتانسیل الکتریکی در جهت α

g_{α}^{eq} تابع توزیع تعادلی غلظت یونی در جهت α

f_{α}^{\sim} تابع توزیع چگالی پس از برخورد در α

f_{α} تابع توزیع چگالی در جهت α

h_{α} تابع توزیع پتانسیل الکتریکی در جهت α

g_{α} تابع توزیع غلظت یونی در جهت α

w_{α} تابع وزنی

ρ چگالی سیال (kg/m^3)

T دمای مطلق ($^{\circ}\text{K}$)

u بردار سرعت

v ویسکوزیته سینماتیکی (m^2/s)

μ ویسکوزیته دینامیکی (mPa/s)

P فشار (Pa)

E میدان الکتریکی خارجی (V/m)

- F چگالی نیروی توده ای (N)
- C_i غلظت یونی (M)
- C_∞ غلظت یونی بالک (M)
- J_i شار اجزاء
- λ_i ثابت واپاشی رادیو اکتیو
- R_i نرخ تولید یا مصرف اجزاء مرتبه i ام
- Z_i ظرفیت جبری یون
- D_i ضریب پراکندگی (m^2/s)
- γ_i ضریب واکنش
- e بار الکتریکی الکترون (C)
- k ثابت بولتزمن (J/K)
- $\epsilon_0 \epsilon_r$ ثابت دی الکتریک ($C^2/J m$)
- ρ_e چگالی خالص بار
- Ψ_{ext} میدان پتانسیل الکتریکی خارجی (V)
- v سرعت در راستای عمودی (m/s)
- u سرعت در راستای افقی (m/s)
- t زمان (s)

- $C_{i,m}$ غلظت یونی در میانه کانال (M)
- Ψ_m پتانسیل الکتریکی در میانه کانال (V)
- ζ پتانسیل الکتریکی روی دیواره (V)
- e_a سرعت گسسته شده شبکه بولترمن
- δ_t مرحله زمانی
- δ_x اندازه شبکه
- τ_v زمان استراحت بی بعد
- τ_{Di} زمان استراحت بی بعد برای انتقال یون i ام
- τ_ψ زمان استراحت بی بعد برای پتانسیل الکتریکی
- C سرعت شبکه
- C_{Di} سرعت پراکنش شبکه برای یون i ام
- C_ψ سرعت الکترو استاتیک شبکه
- $\delta_{t,Di}$ مرحله زمانی در توزیع یونی
- $\delta_{t,\psi}$ مرحله زمانی در معادله پواسون

فصل اول

مقدمه

پیشرفت های اخیر در تکنیک های تولید در مقیاس میکرو که در ارتباط با سیستم های مکانیکی میکروالکتریکی (MEMS) هستند، بهبود بسیاری از روش های کاربردی جامع را باعث شده است و برای این کار از ابزارهای میکرو سیالات در زمینه های زیست شناسی، شیمی و پزشکی نیز استفاده نموده است.

این ابزارها مزیت های مهمی را در مقابل نمونه های ماکرو دارند، مثلاً مصرف مواد واکنشگر را کاهش داده و تحلیل های سریع تر و پیشرفت های مهمتری را در اجرا باعث شده اند اغلب ابزارهای میکرو سیال از میکروکانال هایی استفاده می کنند که در درون آنها سیال ها انتقال یافته، جداسازی شده و یا ترکیب و توزیع می شوند. جریان تحت تاثیر یک نیروی محرک در این میکرو کانالها جاری می شود که این نیروی محرک معمولاً توسط یک میکرو پمپ ایجاد می گردد. با این وجود، این پمپ ها معمولاً تا حدی حجیم بوده و اغلب نیازمند فرآیندهای پیچیده ساخت و تولید می باشند. متعاقباً تلاش های علمی قابل توجهی برای ارتقاء تکنیک هایی که جریان سیال را به روش های الکتریکی تنظیم می کنند صورت گرفته است که برای این کار از پتانسیل الکتریکی خارجی مناسب استفاده می شود. این تکنیک ها یک روش مستقیم را برای کنترل جریان سیالات فراهم آورده اند و این مزیت را نیز دارا می باشند که در برگیرنده هیچ گونه جزء متحرکی نبوده و بنابراین بسیار قابل اعتمادتر هستند.

اعتقاد بر این است که اغلب سطوح جامد دارای بارهای الکترواستاتیکی هستند، بدین معنی که یک بار الکتریکی سطحی در آنها وجود دارد. اگر مایع محتوی تعداد بسیار اندکی یون باشد (برای مثال، یونهای ناشی از ناخالصی ها)، بارهای الکترواستاتیکی موجود در جامد غیرهادی یونهای مخالف موجود در مایع را جذب خواهند نمود. آرایش مجدد بارها بر روی سطح جامد و بارهای متعادل در سیال تحت عنوان لایه

ی دو گانه ی الکتریکی (EDL) شناخته می شود. در اثر فعل و انفعالات الکترواستاتیک، غلظت یا تمرکز یون های مخالف در نزدیکی سطح جامد از غلظت آنها در مکانی بسیار دورتر از سطح جامد به طور قابل ملاحظه ای بیشتر است. بلافاصله بعد از سطح جامد، لایه ای از یونها وجود دارد که به شدت جذب سطح جامد شده اند ولی قادر به حرکت نیستند این لایه را تحت عنوان لایه ی فشرده^۱ می شناسیم که ضخامت آن معمولاً کمتر از ۱ نانومتر است غلظت یونهای مخالف از لایه فشرده تا توده ی یکنواخت مایع بتدریج کاهش یافته تا جایی که با غلظت این یونها در توده ی مایع برابر می شود.

یون های موجود در این ناحیه کمتر تحت تأثیر فعل و انفعالات الکترواستاتیک قرار داشته و متحرک هستند این لایه تحت عنوان لایه ی پراکنده شناخته می شود.

ضخامت لایه ی پراکنده به غلظت یونی توده و ویژگی های الکتریکی مایع بستگی دارد که طیفی را از چند نانومتر برای محلولهای دارای غلظت یونی بالا تا چندین میکرومتر برای آب مقطر و مایعات آلی خالص در بر می گیرد.

مرز بین لایه ی فشرده^۱ و لایه ی پراکنده^۲ عموماً تحت عنوان سطح شکاف^۳ شناخته می شود. اندازه گیری پتانسیل الکتریکی در سطح جامد - مایع کارآسانی نیست این در حالی است که، پتانسیل الکتریکی در سطح شکاف را که پتانسیل زتا (ζ) نام دارد مشخصه ای از هر دوی آنها یعنی جامد و مایع می باشد و می توان آن را به شیوه ی تجربی مورد اندازه گیری قرار داد. زمانی که یک میدان الکتریکی بیرونی در طول میکروکانال اعمال می شود از تعامل آن با پتانسیل زتا (ζ) یک نیروی حجمی در EDL ایجاد می شود که منجر به حرکت محلول آبی در درون EDL می گردد. حرکت

¹ - compact layer

² - diffuse layer

³ - shear plane

این محلول آبی باعث ایجاد اثر کشش ویسکوزی گشته که در نهایت منجر به حرکت حجمی سیال در درون میکروکانال می گردد. این پدیده تحت عنوان جریان الکترو اسمزی (EOF) شناخته می شود.

وقتی که یک مایع توسط اعمال یک فشار هیدرواستاتیک در داخل یک میکرو کانال جریان می یابد، یون های مخالف در لایه ی پراکنده ی EDL (بخش متحرک) به سمت انتهای جریان رو به پایین حمل می شوند که این منجر به ایجاد یک جریان الکتریکی در جهت جریان القا شده توسط فشار می گردد.

این جریان الکتریکی را تحت عنوان جریان الکتریکی ناشی از جریان مایع¹ می شناسیم در ارتباط با این جریان الکتریکی یک پتانسیل الکترو سینتیک وجود دارد که آن را پتانسیل جریان² می نامیم این پتانسیل القاء شده توسط جریان، یک اختلاف پتانسیل است که در طول یک میکرو کانال ایجاد می شود. این پتانسیل جریان حرکت یونهای مخالف در لایه ی پراکنده را در جهت مخالف جریان الکتریکی موجب می شود یعنی در خلاف جهت جریان القاء شده توسط فشار. واضح است که به هنگام حرکت یونها در یک مایع، آنها مولکولهای مایع را در مسیر خود به حرکت وامی دارند بنابراین، جریان رسانش، یک جریان مایع را در خلاف جهت جریان القاء شده توسط فشار ایجاد می کند. برآیند کلی آنها یک کاهش شدت جریان در جهت افت فشار می باشد. اگر میزان افت جریان با شدت جریان پیش بینی شده توسط نظریه ی متداول مکانیک سیالات بدون در نظر گرفتن وجود EDL مقایسه شود، به نظر می رسد که مایع باید ویسکوزیته ی بالاتری داشته باشد این مساله را عموماً تحت عنوان اثر الکترو - ویسکوزی می شناسند.

¹ -streaming current

² - streaming potential

به طور کلی، اثرات EDL برای جریان ماکروکانالی را می توان بدون هیچ مشکلی نادیده گرفت، چرا که ضخامت EDL در مقایسه با اندازه مشخصه های کانال ها بسیار اندک است. با این همه، در مورد محلول های الکترولیت رقیق که در میکرو کانالها جریان دارند، ضخامت EDL ممکن است با مشخصه های کانالهای جریان قابل مقایسه باشد.

بنابراین اثر الکترو- ویسکوزی که در توضیحات قبلی مطرح گردید باید مد نظر قرار داده شود. از آنجا که اثر الکترو - ویسکوزی از میدان EDL منشأ می گیرد، که آن نیز وابسته به مواد موجود در دیواره ی کانال، اندازه و شکل کانال، غلظت یونی، ثابت دی الکتریک و سایر مشخصه های مایع است.

در منابع علمی برخی مدل های نظری وجود دارند که اثرات EDL را بر ویژگی های جریان در میکرو کانال مد نظر قرار داده اند. برگین و نکاش [۱] اثرات پتانسیل سطحی را بر انتقال مایع از طریق شکاف های مویرگی ریز با استفاده از نوعی تخمین که تنها در موارد دارای پتانسیل سطحی پایین کاربرد داشت، مورد مطالعه قرار دارند.

رایس و وایتهد [۲] همین مسئله را در لوله های مویرگی باریک مورد بحث و بررسی قرار دادند. لوین و همکارانش [۳] مدل رایس و وایتهد را در مورد لوله های مویرگی به یک پتانسیل سطحی بالاتر تعمیم دادند و برای این کار یک راه حل تخمینی ابداع نمودند.

فصل دوم

مروری بر کارهای انجام شده

فرآیندهای الکتروشیمیایی در تحقیقات علمی بنیادین و کاربردهای صنعتی حائز اهمیت بسیاری می باشند از پروسه های الکتروشیمیایی در فرآیندهای متعدد ساخت و تولید و جداسازی استفاده می شود. که از آن جمله می توان به آبکاری الکتریکی، برش الکتریکی و پالایش الکتریکی اشاره نمود الکتروشیمی اولین نیروی محرک در باتری ها و سلول های سوختی است علاوه بر این، نقش مهمی در بسیاری از فرآیندهای فرسایش طبیعی و صنعتی دارد.

در سیستم های زیستی نیز اغلب سلولها در یک محیط الکتروشیمیایی زندگی می کنند.

بنابراین مطالعه چنین فرآیندهای مهمی می تواند از اهمیت زیادی برخوردار باشد.

یک سیستم الکتروشیمیایی معمولی متشکل از فرآیندهای پیچیده فیزیکی و شیمیایی بیشماری می باشد. واکنش های شیمیایی، بویژه آن مواردی که در الکترودها رخ می دهند در پروسه های الکتروشیمیایی لازم الاجرا می باشد.

جابه جایی یونها در میدان الکتریکی بین الکترودها، فرآیند دیگری است که در همه جنبه های علم الکتروشیمی قابل مشاهده است در عین حال، در اغلب شرایط، پروسه های الکتروشیمیایی در یک محیط شامل سیال رخ می دهند که انتشار و انتقال گرما نیز نقش مهمی در آن ایفا می کنند علاوه بر این، سطوح جامد در سیستم های الکتروشیمیایی مانند آنچه الکترودها وجود دارد، معمولاً با گذشت زمان تحت تاثیر جابه جایی و فرسایش متحمل تغییرات مورفولوژیکی می گردند.

انتقال مولتی فیزیکی نیز توجه بسیار زیادی را طی سالهای اخیر به خود جلب نموده است که این بخاطر افزایش کاربردهای مهم آن در روش های درمان طبیعی، محیط و مهندسی انرژی می باشد [۴-۶].

جریان الکتروسینتیک که در برگیرنده فرآیندهای متعددی از قبیل جریان سیالات، انتشار گونه ها و حتی انتقال انرژی می باشد، یکی از پدیده های متداول انتقال مولتی فیزیکی است و این بخاطر ماهیت

فراگیر محلول الکترولیت در طبیعت و کاربردهای مهندسی آن است [۸،۷]. اگر چه نظریه ها و مدل های متعددی برای جریان الکتروسینتیک در مقیاس بزرگ در قرن گذشته ارائه شده اند [۹،۷]، اما تنها در

دهه های اخیر بوده است که انتقال الکتروسینتیکی اهمیت خود را برای کاربردهای مختلف پیدا کرده است. علی الخصوص در مقیاس های نانومیکرو. پیش بینی های دقیق جریان الکترواسموتیک در ابزارهای میکروسیال ممکن است باعث روشن تر شدن طرح های بهینه ای برای خطایاب های زیستی - ماکرومولکولی [۱۰،۵-۱۲] و سیستم های انرژی [۵] در مقیاس میکرو، مانند سلول های سوختی میکرو و باتری ها گردد.

مدل پوآسون بولتزن (PB) که برگرفته از یک معادله ناویر - استوکس برای جریان سیالات و یک معادله PB توزیع پتانسیل الکتریکی می باشد، کاربرد گسترده ای برای تحلیل و پیش بینی جریان های الکترو سینتیکی در میکرو کانالها دارد [۱۴، ۷]. فرض توزیع یونی بولتزن در لایه الکترویکی دو گانه (EDL) منجر به تجزیه جریان سیالات و توزیع یونی می شود که این باعث ساده تر شدن پیش بینی ها خواهد شد.

الگوریتم و تحلیل های متعددی براساس مدل PB در جهت درک مکانیک سیالات الکتروسینتیک و بهینه سازی ریز ابزارهای الکتروسینتیکی ارائه گردیده است [۲۰-۱۵]. با این وجود، توزیع بولتزن یک مدل تعادلی بوده و کاربرد آن توسط شرایط اولیه آن محدود شده است کاربرد توزیع بولتزن زمانی که یونها دارای حرکت ماکروسکوپی باشند، سطح به طور ناهمگن باردار شده باشد و یا شرایط مرزی توده محلول در محلی که به اندازه کافی از سطح بار دار دور نیست اشباع نشده باشد، سوال برانگیز خواهد بود [۷].

از آنجا که فرآیندهای انتقال تحت تاثیر یکدیگر قرار دارند، معادلات حاکم بر مدل دینامیک با یکدیگر جفت می شوند که این مسأله باعث بروز چالش بزرگی در راه حل های عددی می گردد.

تلاش های بسیاری در این حیطه علمی به منظور حل عددی معادلات دوتایی در مدل دینامیکی براساس حل کننده های قدیمی PDE صورت گرفته است که از این میان می توان به روش تفاضل محدود (FDM) [۲۲، ۲۱]، روش حجم محدود (FVM) [۲۴، ۲۳] و روش اجزاء محدود (FEM) [۲۵] اشاره نمود.

اخیراً لوو و همکارانش [۲۶] یک چهارچوب هیبریدی را ارائه نموده اند که روش های عنصر محدود و روش های عنصر مرزی را به منظور حل معادله پواسون-نرنست-پلانک (PNP) برای انتشار الکتریکی با یکدیگر ترکیب کرده است. هلوشکو و همکارانش [۲۷] یک روش دوتایی (ترکیبی) شبکه بولتزمن و تفاضل محدود را به منظور حل مدل دینامیکی برای جریان الکترواسموزی در میکروکانال ها پیشنهاد نمودند که در آن روش شبکه بولتزمن (LBM) برای مدلسازی جریان سیال مورد استفاده قرار گرفته بود و سایر معادلات حاکم از طریق FDM حل می شد. این تلاش اقدام بسیاری خوبی در جهت بهره گیری از کارایی و انعطاف پذیری LBM بود. با این وجود، شرایط مرزی بین این دو روش ممکن است برای یک مجموعه از شبکه ها با یکدیگر سازگار نباشد [۲۸]. هی و لی [۲۹] یک روند LBM را برای سیستم های الکتروشیمیایی پیشنهاد نمودند، اما آنها از یک قانون بی اثری موضعی استفاده نمودند تا توزیع پتانسیل الکتریکی که ممکن بود برای کلونیدهای باردار چندان دقیق نباشد را محدود کنند.

هر چند که این روش ها مستلزم محاسبات بسیار زیاد ناشی از ماهیت غیر خطی قوی آن بوده است انتقال فوریه FFM و روش های چند شبکه ای^۱ تا حد زیادی به افزایش دقت راه حل عددی معادله پواسون - بولتزمن کمک کرده اند، با این حال این روش ها بندرت برای هندسه های پیچیده قابل تعمیم هستند.

طی سال های اخیر شاهد گسترش سریع یک ابزار شبیه سازی عددی جدید بوده ایم که آن را تحت عنوان روش شبکه بولتزمن LBM می شناسیم که برای پدیده انتقال کاربرد دارد LBM پدیده انتقال را براساس معادلات سینتیک و فیزیک استاتیک شبیه سازی می کند.

مشاهدات نشان داده اند که LBM یک نامزد جدید برای معادله فرآیندهای الکتروشیمیایی باشد در وهله اول بسیاری از مولفان نشان داده اند که روش LBM یک ابزار دقیق و کارآمد برای شبیه سازی

^۱ -multigrid

طیف گسترده ای از پدیده های انتقال می باشد که شامل جریان های سیال، انتقال و انتشار کمیت های منفعل و واکنش های شیمیایی می باشند.

مهمتر اینکه با توجه به ماهیت سینتیکی LBM پتانسیل هایی برای مدل سازی ویژگی های سینتیکی واکنش های شیمیایی در سطح میکروسکوپی و ماکروسکوپی داشته است.

سایر مزایای روش شبکه بولتزمن عبارتند از ویژگی آن برای محاسبات موازی و سهولت در برنامه ریزی پیشرفت اخیر روش شبکه بولتزمن، یک ابزار شبیه سازی جایگزین را برای دینامیک سیالات محاسباتی ارائه نموده است.

روش LBM، با روش های عددی قدیمی که معادلات ماکروسکوپی متداول حاکم را برای میدان های حفاظت شده مانند میدان جریان حل می نمودند، تفاوت دارد.

روش شبکه بولتزمن به بررسی روند تکامل توابع توزیعی موضعی ذرات محاسباتی پرداخته تا میدان های حفاظت شده را توصیف کند. این مساله باعث کارایی بالای این روش برای محاسبات موازی بسیار بزرگ گردیده است. علی الخصوص در سیستم های پیچیده ای از قبیل واسطه های متخلخل، که معمولاً برای روش های معادله محور زنجیره ای همراه با دشواری هایی می باشد.

علاوه بر این LBM برگرفته از معادلات سینتیکی مروسکوپی بوده و به خودی خود دارای برخی اجزاء فیزیکی میکروسکوپی ضروری می باشد.

این ماهیت سینتیکی، LBM را به روش بسیار مناسبی برای ردیابی اثرات غیر زنجیره ای از قبیل عدم تعادل و پدیده الکتروسینتیک در ابزارهای میکروسیال مبدل ساخته است.

شبیه سازی عددی جریانهای الکترواسموتیک (EOF) در میکرو و نانو کانال ها اخیراً توجه بسیار زیادی را به خود جلب نموده اند. از نقطه نظر ماکروسکوپی EOF ها تحت حاکمیت معادلات ناپیراستوکس برای جریان و معادله پواسون- بولتزمن برای پتانسیل الکتریکی می باشند. روش شبکه بولتزمن یک روش آماري مناسب برای حل این معادلات می باشد چرا که میدان های نیروی خارجی را می توان در مقایسه با معادله ناپیراستوکس بسیار راحت تر به معادله شبکه بولتزمن افزود.

اخيراً گو و همکارانش [۳۰] LBM های ترکیب شده را برای EOF، براساس تعداد اجزاء تشکیل دهنده به دو دسته تقسیم نمودند.

مدل های تک سیال و مدل های چند سیال روش ها را نیز می توان براساس روش حل برای تابع پتانسیل الکتریکی به سه دسته تقسیم نمود که عبارتند از: روش های متداول، روش انتشار گشتاور و روش LBM.

اغلب کارهای قبلی از روش های عددی متداول برای حل معادله پواسون بولتزمن بهره می گرفتند به ویژه در شکل یک بعدی خطی روش چند شبکه ای می تواند کارآیی روش حل تکراری مربوط به معادله غیر خطی پواسون بولتزمن را افزایش دهد اما این تکنیک را نمی توان به آسانی در مورد ویژگی های هندسی پیچیده بکار گرفت.

وارن [۳۱] برای سوسپانسیون های باردار، روش «انتشار گشتاور» را به منظور حل توزیع پتانسیل الکتریکی پیشنهاد داد.

هی ولی [۲۹] یک طرح متفاوت را برای تحلیل فرآیندهای الکتروشیمیایی در یک الکترولیت، که استفاده از یک روش مستقل شبکه بولتزمن برای حل معادله پواسون در انتشار یون بود را پیشنهاد نمودند. چون این روش بر یک فرض خنثی از نظر الکتریکی و موضعی استوار است، بنابراین برای تحلیل دینامیکی سوسپانسیون های باردار مناسب نیست.

گوو و همکارانش روش خود را از طریق حل مستقیم معادله پتانسیل الکتریکی ابداع نمودند و اثر گرمایی ژول جریان الکترو اسمزی را در ابزارهای ریز سیالی مورد بررسی قرار دادند.

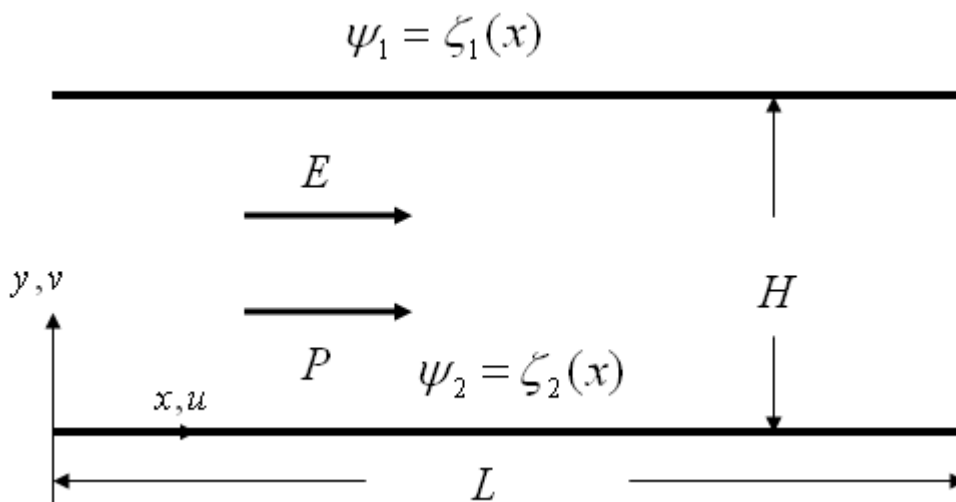
۲-۲- مطالعات انجام شده برای حل معادله غیر خطی پوآسون به روش شبکه بولتزمن

با پیروی از روش آنها، وانگ و همکارانش [۳۲] یک روش شبکه متکامل و سازگار را ارائه دادند که یک راه حل شبکه را برای معادله غیر خطی پوآسون در پتانسیل الکتریکی با یک راه حل شبکه برای معادله BGK در جریان های سیال تراکم ناپذیر با یکدیگر ترکیب می کند. در مورد روش LBM استاندارد، این روند حل قادر است براحتی برای شرایط مرزی پیچیده نیز استفاده شود و می توان آن را به مسائل سه بعدی و محاسبات موازی تعمیم داد.

این روش با یک راه حل تحلیلی تایید می شود و سپس از آن برای شبیه سازی جریان های الکترواستاتوسی در کانال های با مقیاس میکرو و نانو استفاده می شود.

معادلات بکار رفته در تحقیق آنها معادله ناویراستوکس و معادله پتانسیل الکتریکی پوآسون می باشد که هر دو معادله بروش شبکه LBM حل شده اند.

شرایط مرزی اعمال شده به شرح زیر می باشد. شرایط پریودیک در ورودی و خروجی اعمال گردیده است. برای پتانسیل الکتریکی از شرایط مرزی دیریکله در سطوح دیواره ها و شرایط مرزی نیومن در بخش های ورودی و خروجی استفاده نموده است.



شکل (۱-۲) هندسه مورد بررسی توسط وانگ و همکارانش

از LPBM برای شبیه سازی EOF در یک میکروکانال دو بعدی به طریقی که در شکل قبل نشان داده شده، استفاده شد. بارهای موجود بر روی دیواره های کانال یا همگن بوده و یا ناهمگن می باشند. بنابراین توزیع پتانسیل زتا در دیواره های بالایی و پایینی عبارت است از $\psi_1(x)$ و $\psi_2(x)$ و پهنای کانال را با H و درازای آن را با L نشان می دهیم محلول الکترولیت موجود در کانال توسط یک میدان الکتریکی، یا یک میدان فشار و یا هر دوی آنها به حرکت در می آید شرایط مرزی اعمال شده برای این مدل شرایط پریودیک در ورودی و خروجی سیال، برای پتانسیل الکتریکی روی دیواره از شرط مرزی دیریکله و برای پتانسیل در ورودی و خروجی شرط مرزی نیومن می باشند.

شکل (۲-۲) نتایج روش LPM را برای معادله غیر خطی پوآسون- بولتزمن و راه حل های تحلیلی معادله خطی شده آن را به همراه با راه حل های عددی به کمک روش چند شبکه ای مورد مقایسه قرار می دهد.

مقادیر عددی برای پارامترهای معادلات مورد نظر به شرح زیر می باشد:

$$C_{\infty} = 10^{-4} M$$

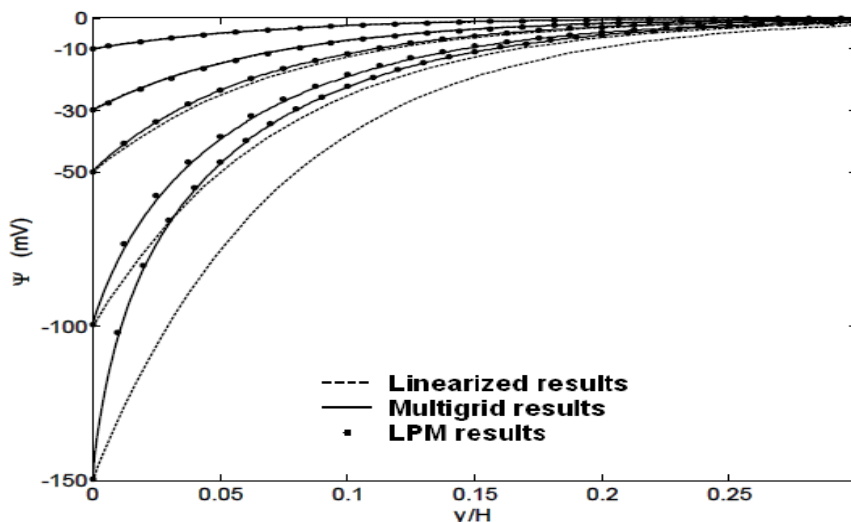
$$Z = 1$$

$$\epsilon\epsilon_0 = 6.95 \times 10^{-10} C^2 / J.m$$

$$T = 273K$$

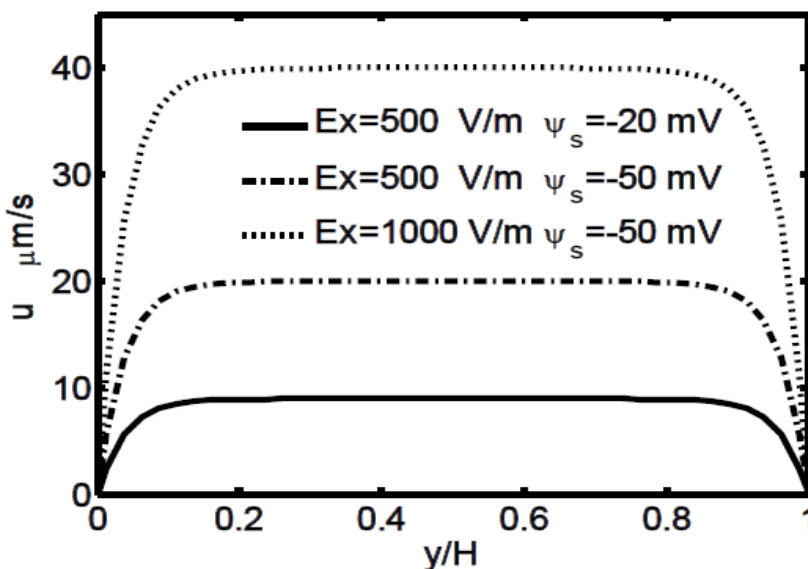
$$\psi_1 = \psi_2 = \psi_s = \text{constant}$$

شکل (۲-۲) نشان می دهد که نتایج LPM تطابق خوبی با روش چند شبکه ای و راه حل های تحلیلی معادلات خطی شده دارد و این زمانی صادق است که مقدار قدر مطلق پتانسیل زتا (ζ) کوچک باشد مثلاً کمتر از ۳۰mv.



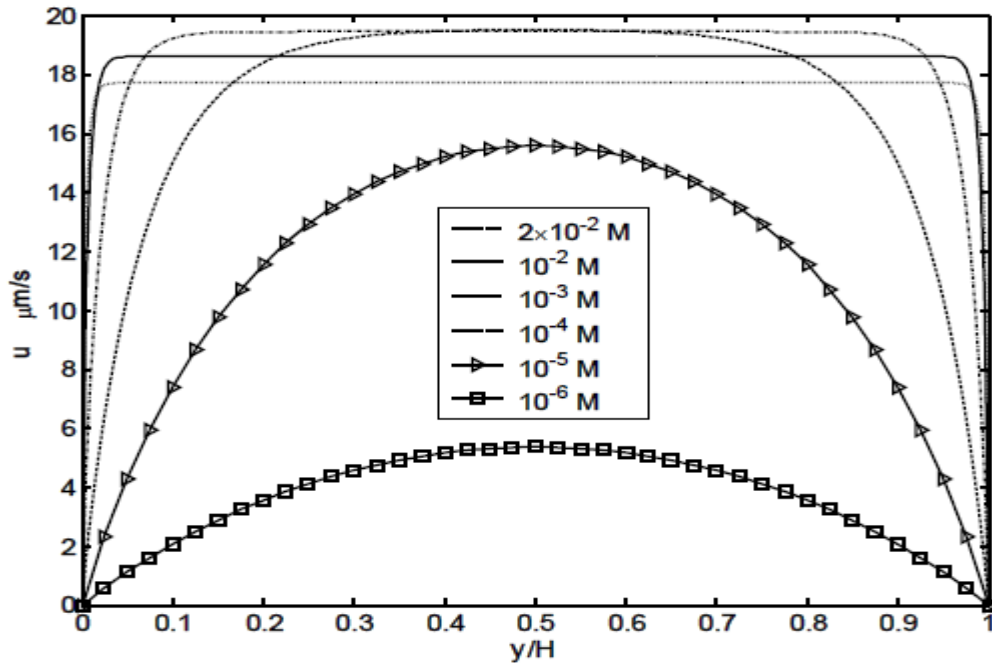
شکل (۲-۲) نتایج بدست آمده از مطالعات وانگ و همکارانش برای خروجی پتانسیل الکتریکی

شکل (۲-۲) سه روش بیان شده را برای مقادیر مختلف پتانسیل زتا روی دیواره با هم مقایسه می کند نتایج بعدی مربوط به پروفیل سرعت در کانال می باشد با همان فرضیات قبلی و اضافه شدن مقدار پارامتر E_x پروفیل سرعت برای حالت های مختلف به شکل زیر می باشد.



شکل (۳-۲) نتایج بدست آمده از مطالعات وانگ و همکارانش برای خروجی سرعت به ازای E های متفاوت

هم چنین پروفیل سرعت برای مقادیر مختلف از غلظت یونی C^∞ نیز رسم شده است.



شکل (۲-۴) نتایج بدست آمده از مطالعات وانگ و همکارانش برای خروجی سرعت به ازای C^∞ های متفاوت

مشخصات سیال همانند مشخصات آب در حالت استاندارد تعیین گردیده است. نتایج، یک غلظت یونی بهینه را نشان می دهند که سرعت متوسط را به حداکثر خود می رساند با کاهش غلظت یونی از یک مقدار زیاد (2×10^{-2})، ضخامت EDL افزایش یافته تا اینکه علی رغم کاهش اندک در نیرو، دامنه نیروی الکتریکی افزایش یافته، بنابراین سرعت متوسط بالا خواهد رفت. غلظت یونی وجود دارد که در آن اثر نیروی الکتریکی می تواند در سرتاسر کانال غالب شده و سرعت متوسط را به حداکثر برساند. هم چنین به بررسی پروفیل سرعت برای مقادیر مختلفی از پهنای کانال نیز پرداخته شده است نتایج حاکی از این است که سرعت متوسط یکنواختی خوبی را با پهنای کانال نشان می دهد برای پهنای بزرگتر در برابر اندازه ضخامت EDL، سرعت بیشینه نسبت با پهنای کانال تغییر می کند با این وجود در مورد پهنای کانال کمتر از دو برابر اندازه EDL، پهنای کانال کوچکتر منجر به کاهش سرعت می گردد.

هی و لی [۳۳] به حل معادله ناپیراستوکس و معادله انتقال یون از طریق افزودن عبارت نیرو به معادله انتقال یون به روش LBM پرداختند هر چند آنها جزئیات سینتیکی واکنش الکترودها را نادیده گرفتند علاوه بر مشکل بیان شده، ایراد دیگری که در این روش وجود دارد این است که حرکت سطوح الکترودی به علت جابه جایی مواد ناپدید گرفته شده است زمانی می توان این جا به جایی را به حساب نیاورد که جا به جایی کلی در مقایسه با اندازه الکتروود کوچک باشد.

۲-۳- مطالعات انجام شده برای بررسی اثرات زبری و تخلخل بر جریان الکتروا سموتیک در

میکروکانالها

چن و همکارانش [۳۴] به بررسی اثر زبری و تخلخل بر EOF در میکروکانالها پرداختند برای دستیابی به اهداف، روش شبکه پوآسون- بولتزمن برای کانالهای زبر یا متخلخل استفاده شده است. شرایط مرزی اعمال شده برای این مدل به شرح زیر می باشد:

شرط مرزی دیریکله برای تابع پتانسیل در روی دیواره ها

شرط مرزی تناوبی برای تابع پتانسیل در ورودی و خروجی

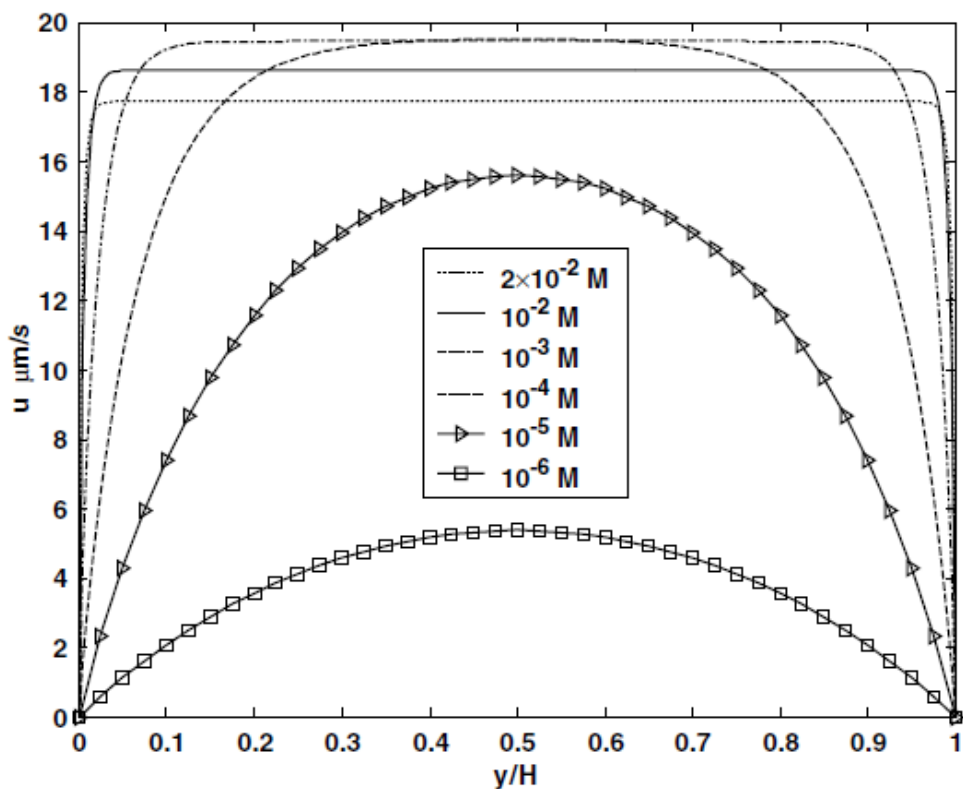
شرط عدم لغزش برای معادله جریان در روی دیواره و شرط مرزی تناوبی برای جریان سیال در ورودی و خروجی

نتایج بدست آمده در این مدل شبیه سازی شده به شرح زیر می باشد:

* کانال صاف:

در این حالت قدرت میدان الکتریکی خارجی، پتانسیل زتای سطح دیواره، غلظت مولار توده یونی و پهنای کانال تغییر داده شده است که مشخص گردید سرعت توده تقریباً متناسب است با قدرت میدان الکتریکی خارجی و همین طور پتانسیل زتای سطحی که متناسب قابل قبولی با داده های تجربی قبلی و نتایج عددی در جریان های نانو کانالها دارد.

شکل (۲-۵) پروفیل سرعت را برای غلظت های یونی مختلف نشان می دهد.



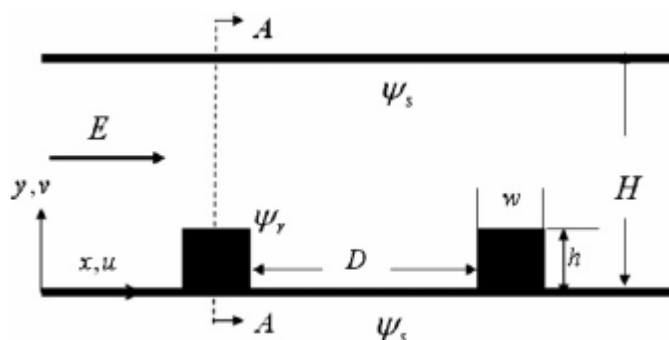
شکل (۵-۲) نتایج بدست آمده از مطالعات چن و همکارانش در کانال صاف

پهنای کانال برابر با $0.4 \mu\text{m}$ ، قدرت میدان الکتریکی خارجی $E = 5 \times 10^2 \text{ V/m}$ و پتانسیل زتای سطحی برای هر دو دیواره $\psi_s = -50$ می باشد. مشخصات سیال برابر با مشخصات آب در حالت استاندارد در نظر گرفته شده است، نتایج یک غلظت یونی بهینه را نشان می دهند که باعث به حداکثر رسیدن سرعت متوسط شده است. با کاهش غلظت یونی از مقدار بالا، ضخامت EDL نیز افزایش یافته تا جایی که اگر چه تا حدی باعث افت نیروی گردد، اما دامنه نیروی الکتریکی و متعاقباً سرعت میانگین افزایش می یابند. با کاهش غلظت یونی (از 10^{-4} تا 10^{-6})، افت نیرو تبدیل به مهمترین فاکتور گشته و سرعت متوسط نیز کاهش می یابد. غلظت های یونی پایین تر نیز منجر به یک پروفیل سرعت سهمی وار می گردند. هم چنین نتایج برای کانال با پهنای مختلف مورد بررسی قرار گرفته است پهنای کانال بین 0.1 تا 1 میکرو متر متغیر است سرعت متوسط یکنواختی خوبی را با پهنای کانال نشان می دهد در مورد پهنای کانال بزرگتر از دو برابر EDL، سرعت بیشینه بندرت با تغییر طول

کانال دستخوش تغییر می شود. با این همه، در مورد پهنای کانال کمتر از دو برابر EDL، کوچکتر بودن پهنای کانال منجر به ایجاد سرعت کمتر می گردد.

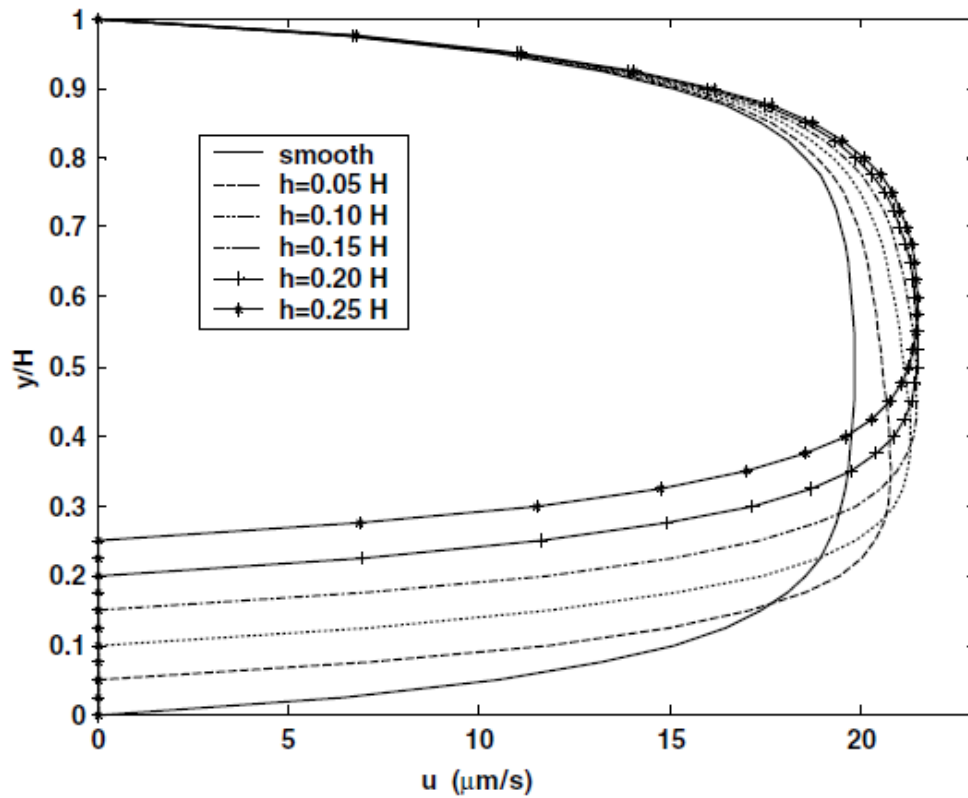
* کانال زبر:

در اینجا زبری به عنوان مجموعه ای از زوایای قائمه در دیواره تحتانی کانال ساده سازی شده اند. که در شکل (۶-۲) نشان داده شده است.



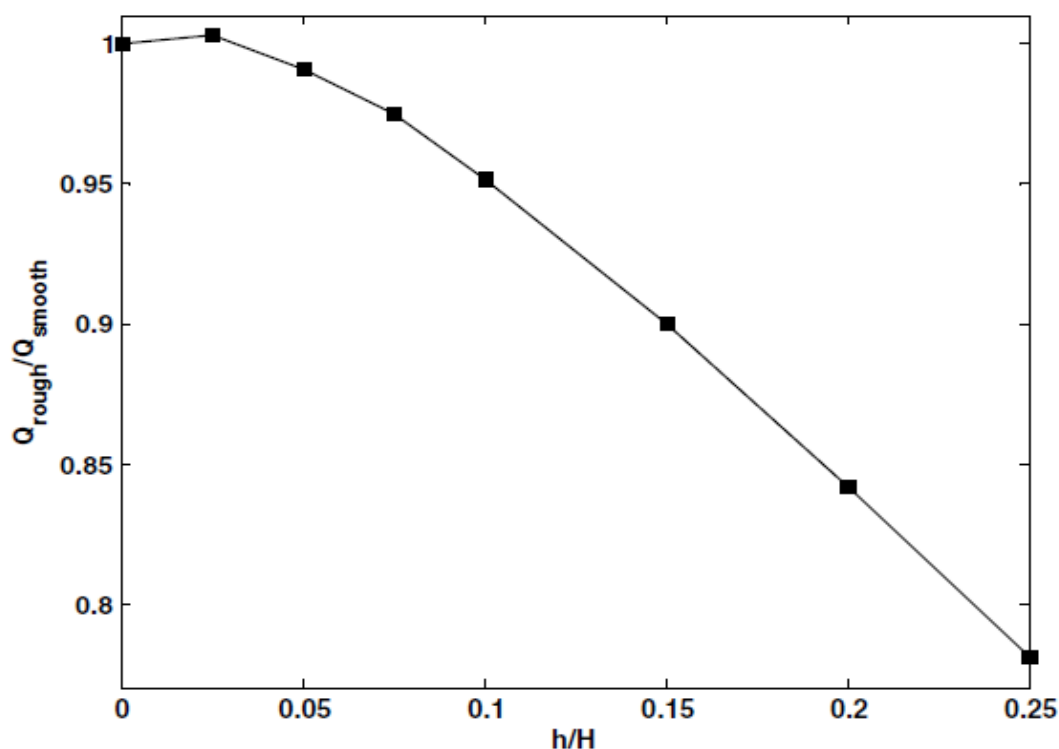
شکل (۶-۲) هندسه مورد بررسی توسط چن و همکارانش برای کانال زبر

پهنای کانال برابر با H و هر دو دیواره از طریق پتانسیل سطحی بار دار شده اند کانال در جهت x ، تناوبی می باشد زبری آن نیز در پهنای کانال با w و ارتفاع آن با h مشخص گردیده است زبری به طور یکنواخت در کانال با فضای داخلی D آرایش یافته است سه سطح بازبری مشخص، توسط یک پتانسیل سطحی ψ_s بار دار گشته اند. محلول الکترولیت نیز با القای یک میدان الکتریکی خارجی به حرکت واداشته شده است مقادیر عددی پارامترها مانند حالت کانال صاف در نظر گرفته شده اند. پروفیل سرعت برای ارتفاعات مختلف زبری (h) شکل (۷-۲) آمده است.



شکل (۷-۲) نتایج بدست آمده از مطالعات چن و همکارانش برای سرعت در کانال زیر برای h های مختلف

نتایج نشان می دهد که سرعت بیشینه با ارتفاع زبری افزایش یافته و پروفیل سرعت متقارن می گردد. دلیل آن این است که زبری تنها منطقه برش عرضی کانال را تغییر نداده بلکه توزیع پتانسیل و به دنبال آن نیروی محرک الکتریکی را نیز در میدان تغییر داده است. شکل (۸-۲) تغییرات دبی جریان را با ارتفاع زبری نشان می دهد.



شکل (۸-۲) نتایج بدست آمده از مطالعات چن و همکارانش برای دبی جریان با تغییر h

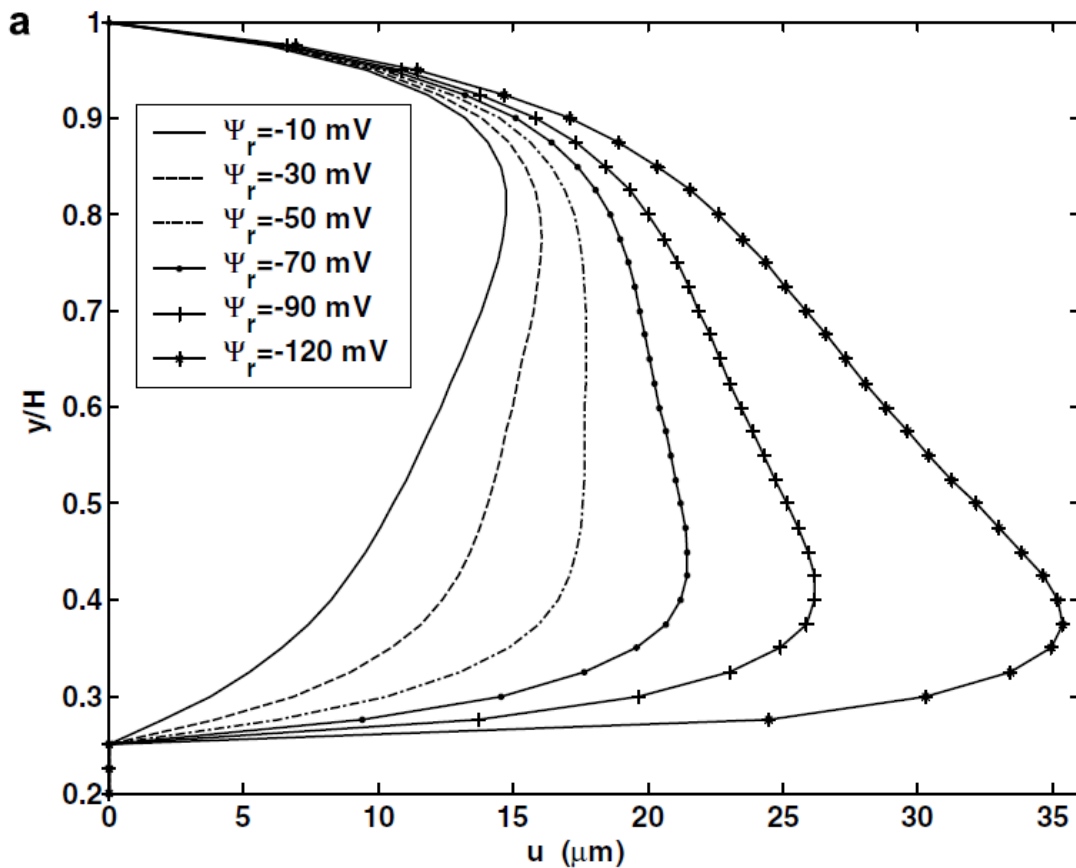
نتایج نشان می دهند که میزان جریان القا شده توسط میدان الکتریکی به آرامی با ارتفاع زبری تغییر کرده و این زمانی رخ می دهد که زبری بسیار کوچک باشد ($h/H < 0.05$) به نظر می رسد یک زبری بسیار کوتاه از نظر ارتفاع ($h/H < 0.25$) نیز می تواند اندکی باعث بهبود دبی جریان گردد. زبری هایی که با پتانسیل الکتریکی بار دار شده اند دو نقش عمده دارند: اول باعث تغییر توزیع میدان الکتریکی شده که ممکن است باعث بهبود نیروی محرک الکتریکی گشته و دوم باعث افزایش مقاومت جریان نیز می گردند.

زمانی که ارتفاع زبری بزرگتر از $10/1$ پهنای کانال باشد، دبی جریان همراه با ارتفاع زبری به سرعت کاهش می یابد.

هم چنین به بررسی دبی جریان تحت تاثیر فضاهاى خالی بین زبری ها نیز پرداخته شده است.

زمانی که حد فاصل زبری ها کوچکتر از دو برابر پهنای زبری باشد، دبی جریان همراه با فضای حد فاصل کاهش می یابد هر چند که، وقتی حد فاصل زبری از دو برابر پهنای آن بزرگتر باشد، یک فضای حد فاصل بزرگتر منجر به افزایش میزان جریان خواهد شد.

و در نهایت با فرض ناهمگن در باردار شدن کانال به بررسی پروفیل سرعت پرداخته شده است پتانسیل الکتریکی روی دیواره های کانال $\psi_s = -50$ و پتانسیل زبری را از $-10 < \psi_r < -120$ تغییر داده اند مرزهای نامتقارن پتانسیل باعث از بین رفتن تقارن جریان گشته که این امر در شکل (۲-۹) به خوبی قابل مشاهده است.



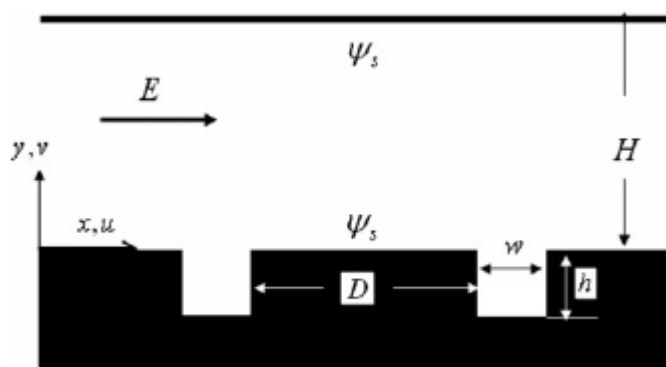
شکل (۲-۹) نتایج بدست آمده از مطالعات چن و همکارانش برای سرعت به ازای ψ_r های مختلف

مقادیر بیشتر پتانسیل سطحی باعث القای سرعت های بیشتر در نزدیکی سطح می گردد. دبی جریان نیز با پتانسیل سطحی زبری به طور فراخطی^۱ افزایش می یابد.

زمانی که پتانسیل سطحی زبری برابر با 120 mV باشد، دبی جریان کانال زبر حتی از کانالهای صاف با بار همگن نیز بیشتر است یک چنین ویژگی هایی را می توان برای ارتقاء دبی جریان در میکرو سیالات از طریق قرار دادن اشیا القا کننده ی پتانسیل سطحی بالا در میکرو کانال بکار گرفت.

* کانال متخلخل:

کانال متخلخل به شکل زیر شبیه سازی شده است.



شکل (۲-۱۰) هندسه مورد بررسی توسط چن و همکارانش برای کانال متخلخل

مشخصات هندسی و مرزها کاملاً شبیه زبری ها می باشند.

در مورد کانال متخلخل به بررسی رابطه بین دبی جریان و عمق حفره ها هنگامی که $w=H/4$ و $D=7H/4$ باشد، پرداخته شده است. زمانی که عمق حفره ها بسیار کم باشد ($h < 3\%H$) دبی جریان تقریباً نسبت به عمق حفره ها بدون تغییر باقی می ماند. با افزایش عمق حفره ها دبی جریان القا شده توسط میدان الکتریکی با سرعت افت می کند. اگر حفره ها به قدر کافی عمیق باشند ($h > 10\%H$) افت دبی جریان آهسته تر شده و دبی جریان حالت مجانب پایدار را پیدا کرده و این زمانی رخ می دهد که حفره ها بسیار عمیق باشند ($h \gg 20\%H$) اثر حفره ها بر دبی جریان به اندازه زبری ها دارای اهمیت نیستند.

۲-۴- مطالعات انجام شده برای شبیه سازی عددی جریان الکترواسموتیک در نزدیکی سطح

زمین

زو ویان [۳۵] به شبیه سازی عددی جریان الکترواسموتیک در نزدیکی سطح خاک در عمقی که کرم خاکی در آن یافت می شود پرداخته اند.

پاسخ مشکلات چسبندگی ابزارهای مهندسی را باید در کرم خاکی جستجو کرد اگر در خاک مرطوب از ماشین آلات استفاده شود، نیروهای چسبندگی بین خاک و ماشین آلات باعث چسبناک شدن خاک می گردند، که این باعث ایجاد مقاومت، افزایش مصرف انرژی و کاهش کیفیت کار می گردد. با این وجود، به نظر می آید که خاک به سطح بدن کرم خاکی نمی چسبد.

سایر سازوکارهای ضد چسبندگی مانند ترشح سطحی در جانوران خاکزی انعطاف پذیری سطح بدن آنها به طور اجمالی توسط زو ویان مورد بررسی قرار گرفته است. یک پدیده ی مهم در کرم های خاکی که در خاکهای مرطوب حرکت می کنند این است که پتانسیل الکتریکی بر روی بافت های بدن کرم خاکی وجود دارد جریان الکترواسموتیک در نزدیکی سطح بدن آنها یک پدیده بنیادین الکتروسینتیک است که فقط به هنگام حرکت کرم در خاک مرطوب اتفاق می افتد.

در لایه ی آبی در اطراف سطح بدن کرم خاکی که قطر آن در حد میکرومتر می باشد، جریانی شکل می گیرد که ناشی از واکنش های لایه ی دو گانه الکتریکی (EDL) است.

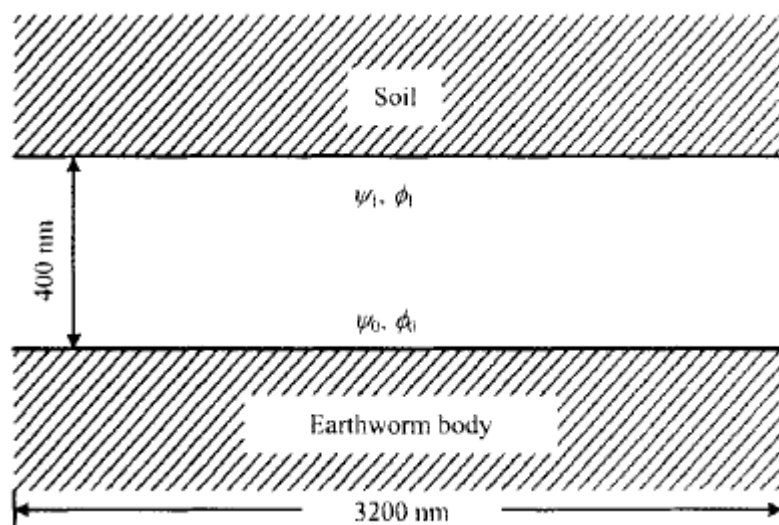
زو ویان جریان الکترواسموتیک در نزدیکی سطح بدن این جانوران را با استفاده از روش LBM به شیوه عددی شبیه سازی کرده اند.

معادلات حاکم بر این نوع جریان که مورد بررسی قرار گرفته اند، معادله ی پوآسون و معادله ی ناویراستوکس می باشند.

شرایط مرزی به شرح زیر است:

شرط مرزی تناوبی برای هر دو معادله در ورودی و خروجی کانال

شرط مرزی دیریکله برای دیواره ها.



شکل (۱۱-۲) هندسه مورد بررسی توسط زو و یان

همان طور که در شکل (۱۱-۲) نشان داده شده است، جریان سیال بین سطح خاک و بدن کرم خاکی تحت عنوان یک جریان الکترواسمزی در یک میکرو کانال قائم الزوایه ی دو بعدی با پهنای ۴۰۰ نانو مترو طول ۳۲۰۰ نانو متر شناخته می شود.

سرعت نسبی بین سطوح بالایی (خاک) و پائینی (کرم خاکی) کانال برابر با 10^6 nm.s^{-1} تعیین می گردد.

برای سهولت کار سرعت در سطح فوقانی و تحتانی به ترتیب 10^6 nm.s^{-1} و 0 nm.s^{-1} در نظر گرفته شده است نوسان پتانسیل الکتریکی در سطح بدن کرم خاکی با زمان بسیار پیچیده است در این مدل، تنها یک سینوس ساده از نوسان پتانسیل الکتریکی به سطح بدن کرم اختصاص داده شده است تا اثرات آن بر جریان سیال مشخص گردد.

پارامترهای استفاده شده در این شبیه سازی به قرار زیر می باشند:

$$C_{\infty} = 10^{-1} \text{ mol.m}^{-3}$$

$$Z = 1$$

$$\epsilon\epsilon_0 = 6.95 \times 10^{-10} \text{ C}^2 / \text{J.m}^{-1}$$

$$T = 293 \text{ K}$$

$$e = 1.6022 \times 10^{-19} \text{ C}$$

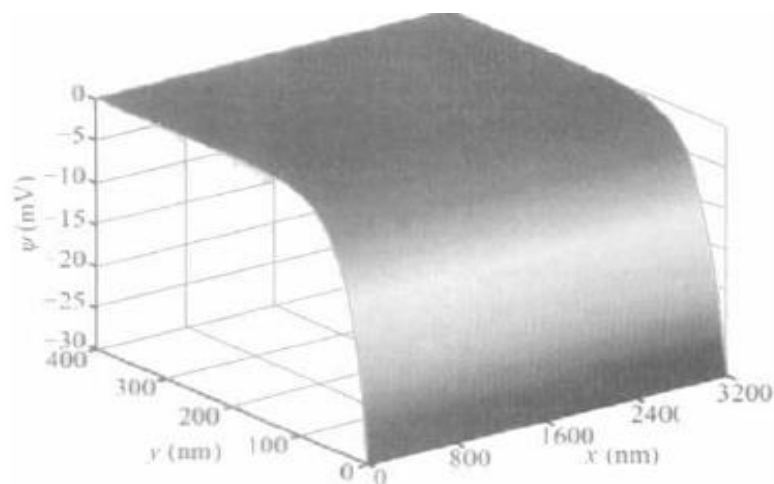
$$k_b = 1.3807 \times 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$$

سیال موجود در کانال مانند آب مقطر فرض شده است .

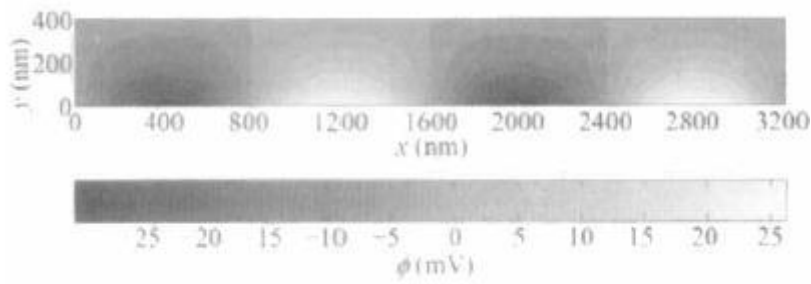
در وهله اول میدان الکتریکی پایدار اولیه با فرض :

$$\phi_0(x,t) = -30 \sin(4\pi x/L), \psi_0(x,t) = -30 \text{ mV}, \psi_1(x,t) = \phi_1(x,t) = 0 \text{ mV}$$

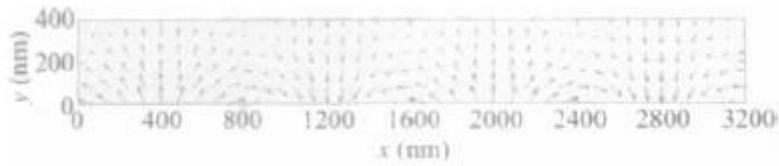
محاسبه گردیده است بدین طریق توابع توزیع E, ψ, ϕ در لحظه $t=0$ بدست آمده و به ترتیب در شکل های (۱۲-۲) و (۱۳-۲) و (۱۴-۲) به تصویر کشیده شده اند.



شکل (۱۲-۲) نتایج بدست آمده از مطالعات زو و یان برای ψ



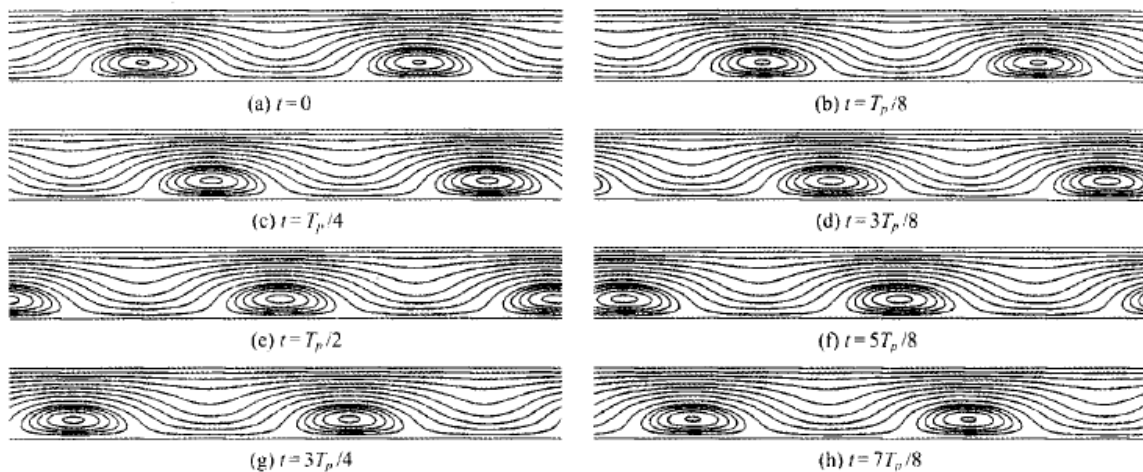
شکل (۲-۱۳) نتایج بدست آمده از مطالعات زو و یان برای ϕ



شکل (۲-۱۴) نتایج بدست آمده از مطالعات زو و یان برای E

شکل (۲-۱۵) خطوط جریان را در میدان جریان در زمان های مختلف نشان می دهد. با دقت در این اشکال می توان دریافت که دو گرداب پایدار با اندازه یکسان به وضوح تشکیل شده اند در $t=0$ نوسانات نیروهای الکتریکی منجر به شکل گیری این دو گرداب شده که متقابلاً در طول سطح بدن کرم خاکی حرکت می کنند.

گرداب های متحرک احتمالاً باعث بهبود اثر ضد چسبندگی خاک می شوند.



شکل (۲-۱۵) خطوط جریان در مطالعات زو و یان

۲-۵- مطالعات انجام شده برای حل معادلات ناویرا ستوکس و پوآسون برای سیالات غیر

نیوتونی

اکثر مطالعات انجام شده در مورد جریان الکترواسمزی، به سیالات نیوتونی محدود می شوند در حالی که رفتار جریان سیالات غیر نیوتونی نیز اهمیت بسیار بالایی در حیطه های علمی و فناوری دارند. درک بنیادین از نقش غیر نیوتونی در انتقال مایعات از طریق میکروکانال ها برای پیش بینی صحیح عملکرد و ویژگی های ابزارهای میکروسیالی اهمیت دارد.

تانگ و همکارانش [۳۶] به مطالعه عددی رفتار جریان سیالات غیر نیوتونی در جریان الکترواسمزی پرداخته و این مهم را با استفاده از روش شبکه بولتزمن LBM به انجام رسانده اند.

ویسکوزیته سیالات غیر نیوتونی با میزان فشار موضعی اعمال شده مرتبط می باشد. ماهیت سینتیکی LBM آن را قادر به محاسبه مؤلفه های موضعی تانسور فشار در جریانات سیال ساخته است و برای این کار نیازی به تخمین گرادیان سرعت نیست. در حالی که در حل کننده ناوراستوکس مشتق گیری از پروفیل سرعت بدست آمده امری اجتناب ناپذیر است.

این ویژگی باعث می شود که LBM دقت مرتبه دوم برای شبیه سازی های انجام شده از جریان های غیر نیوتونی را حفظ کند.

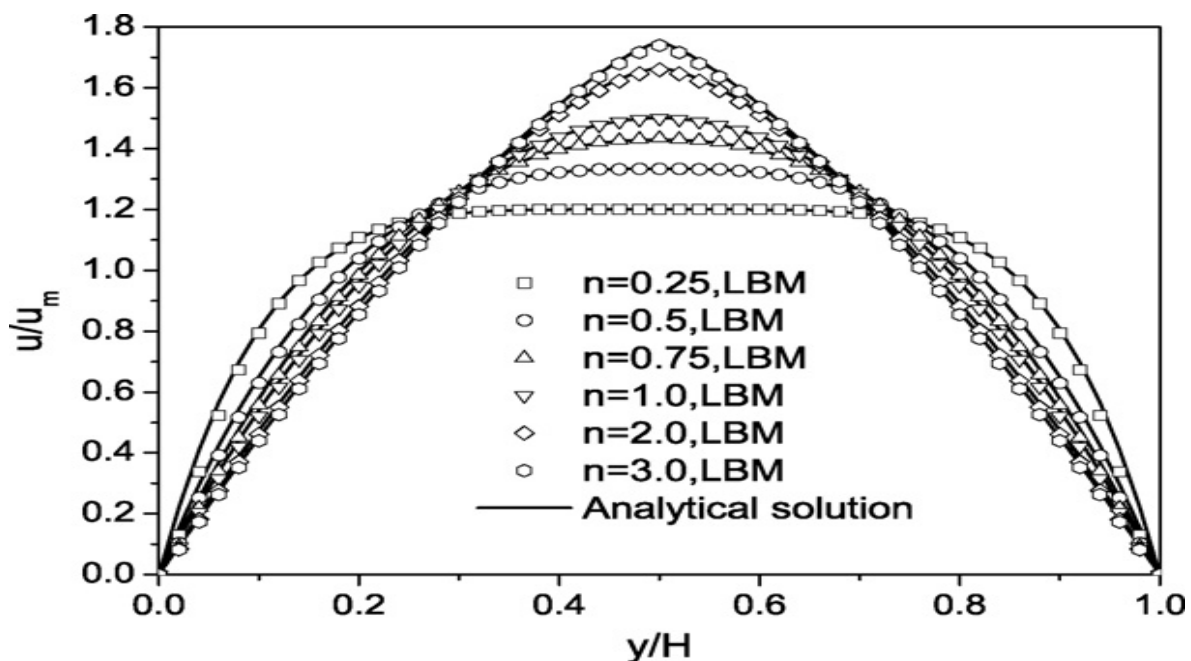
تانگ و همکارانش به حل معادلات ناوراستوکس و پواسون به روش LBM برای سیال غیر نیوتونی پرداخته اند.

شرایط مرزی در نظر گرفته شده به شرح زیر می باشد:

بر روی دیواره های بالایی و پائینی کانال پتانسیل الکتریکی ثابت ϕ_0 در نظر گرفته شده است. شرایط مرزی تناوبی برای پتانسیل الکتریکی در ورودی و خروجی کانال، مرزهای بدون سرعت برای سیال و نیز شرایط مرزی تناوبی برای سرعت سیال در ورودی و خروجی کانال و هم چنین میدان الکتریکی اعمال شده از خارج به سیستم برای ایجاد حرکت در سیال نیز ثابت در نظر گرفته شده است.

شکل (۲-۱۶) پروفیل سرعت را برای n های مختلف نشان می دهد تطابق روش LBM برای هر n با روش حل تحلیلی در حد خوبی به نظر می رسد می توان مشاهده کرد که LBM پروفیل های سرعت قابل قبول را برای جریانهای با $(n < 1)$, $(n > 1)$ و جریانهای نیوتونی ($n=1$) پیش بینی کرده است. در

مقایسه با جریان های نیوتونی که در آنها $n=1$ می باشد، برای $n < 1$ می توانیم یک تسطیح کلی را در پروفیل سرعت مشاهده کنیم که هر چه n کوچکتر باشد به همان نسبت پروفیل های سرعت مسطح تری بدست می آید. در مقابل، پروفیل های سرعت به ازای $n=2,3$ انحنای بیشتری را در اطراف سرعت بیشینه مرکزی نشان می دهند نسبت سرعت بیشینه ی مرکزی به سرعت میانگین کانال با افزایش شاخص n ، افزایش می یابد.



شکل (۲-۱۶) نتایج بدست آمده از مطالعات تانگ و همکارانش برای سرعت به ازای n های مختلف

این دیاگرام مربوط به حالتی است که عامل انتقال سیال در کانال گرادیان فشار باشد حال فرض شده است که عامل انتقال میدان الکتریکی خارجی باشد.

در این حالت مقادیر عددی پارامترهای مورد نظر به شرح زیر می باشد:

$$\varepsilon\varepsilon_0 = 7.79 \times 10^{-10} \text{ C}^2 / (\text{J.m})$$

$$T = 273\text{K}$$

$$e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$$

$$k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J / K}$$

$$\rho = 1000 \text{ kg / m}^3$$

$$Z = 1$$

$$V_0 = 1.789 \times 10^{-6} \text{ m}^2 / \text{s}$$

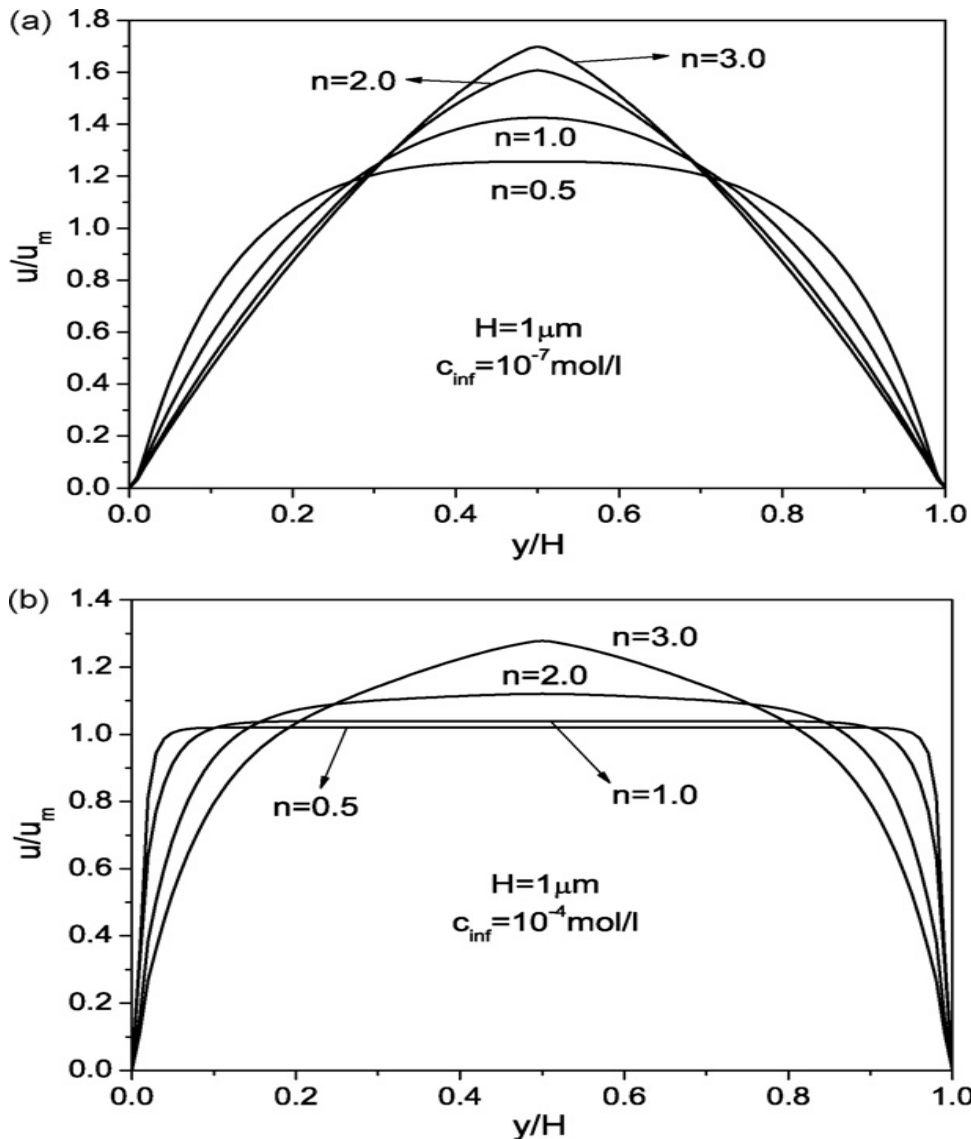
$$\zeta = -100 \text{ mV}$$

$$E = 500 \text{ V / m}$$

شکل (۲-۱۷) در حالت های (a) و (b) پروفیل نرمالیزه سرعت در جهت جریان را در سرتا سر کانال برای مقادیر مختلف C_{inf} نشان می دهد. می توان مشاهده کرد که برای سیال نیوتونی با $n=1$ ، پروفیل سرعت در غلظت های یونی پایین حالتی سهمی وار داشته که مشابه یک جریان معمولی القا شده با فشار می باشد با این وجود، با افزایش غلظت یونی پروفیل سرعت در حالت سهمی وار به حالت دو شاخه تغییر شکل می دهد. پروفیل سرعت برای $n=2, 3$ انحنای تیزی را در اطراف سرعت مرکزی بیشینه نشان می دهند. پروفیل سرعت برای تمام مقادیر n ، در $C_{inf} = 10^{-4}$ در مقایسه با 10^{-7} C_{inf} تسطیح بیشتری را نشان می دهند این پروفیل های جریان متفاوت در اثر نوسانات ایجاد شده در طول دبای^۱ (λ_D)، بوجود آمده اند که از آن برای توصیف ضخامت EDL استفاده می شود.

طول محاسبه شده دمای برای 10^{-4} C_{inf} برابر با 0.2915 میکرو متر است این در حالی است که همین طول برای 10^{-7} C_{inf} برابر با $1/0.1$ میکرو متر می باشد.

^۱ - Debyelength



شکل (۲-۱۷) نتایج بدست آمده از مطالعات تانگ و همکارانش برای سرعت به ازای C_{inf} های مختلف

در جریان الکترواسمزی، یک نیروی محرکه ی ایجاد شده از طریق فعل و انفعال EDL با میدان الکتریکی خارجی درون EDL و درحالی سطوح دیواره وجود دارد. حرکت سیال در خارج EDL توسط سیال داخل EDL جذب می شود متعاقباً، جریان الکترواسمزی دارای قابلیت نگهدارندگی می باشد. با این وجود، در مورد جریان القا شده با فشار، تمام مقطع عرضی کانال متحمل نیروی القا شده با فشار می گردد. بررسی نشان می دهد که پروفیل سرعت به شدت وابسته به رفتار رئولوژیک سیال است.

سیال با $n > 1$ برای تبدیل شدن به یک سیال نیوتونی مناسب تر است تا برای تبدیل به جریان دو شاخه مانند. در مقابل، در مورد سیال $n < 1$ اثر لایه دو گانه EDL محدود به یک ناحیه ی کوچکتر در نزدیکی سطح دیواره بوده و گرایش بیشتری به تبدیل شدن به یک جریان دو شاخه می زند دارد.

تعریف مساله:

تحقیق حاضر به بررسی جریان الکترواسموتیک در میکرو کانال میپردازد. کانال مورد نظر کانالی است با ابعاد $H = 1 \mu\text{m}$ و طول آن با توجه به تعداد گره های شبکه متغیر میباشد. داخل کانال محلولی الکترولیت با توزیع یونی مختص خود جریان دارد. عامل حرکت سیال اعمال میدان الکتریکی خارجی است. روش حل معادلات روش LBM میباشد. پارامترهای مربوط به هر معادله، یعنی معادلات ناویراستوکس، پواسون بولتزمن و معادله توزیع یونی، مقادیر ثابتی در نظر گرفته شده اند که برخی از آنها نیاز داشتند هر یک با ضریبی که از تشابه بدست آمده بود، به اعدادی قابل قبول در شبکه بولتزمن تبدیل شوند. همچنین معادله توزیع یونی در این تحقیق برای محلولی با ترکیب ۲ یون بررسی شده است.

نوآوری مساله:

با توجه به اینکه امروزه جریان در میکرو کانالها از اهمیت بسزایی برخوردار شده است، میتوان مساله مورد نظر را هم از نظر فیزیک مساله و هم از نظر روش حل عددی گسترش داد.

از نظر فیزیک مساله: میتوان معادله توزیع یونی را برای ترکیبی بیشتر از ۲ یون مورد استفاده قرار داد.

از نظر روش حل عددی مساله: استفاده از روش هیبرید در شبکه بولتزمن برای حل معادلات حاکم در میکروکانال.

فصل سوم

معادلات حاکم و شرایط مرزی

۳-۱- معادلات حاکم

در این فصل به بررسی معادلات حاکم بر سیستم و توضیح شرایط مرزی اعمال شده می پردازیم. از آنجا که مقیاس مورد نظر ما بسیار بزرگتر از مقیاس اتمی است، پس معادلات میکروسکوپی هیدرودینامیک و الکتروینامیک همچنان معتبر هستند. برای یک سیال الکترولیتی نیوتونی با خواص ثابت و اجزاء متعدد در که یک میکروکانال بدون منبع جرم جریان دارد، معادلات حاکم برای جریان آرام^۱ عبارتند از:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (۱-۳)$$

و

$$\frac{\partial (\rho u)}{\partial t} + u \cdot \nabla (\rho u) = -\nabla p + \nabla \cdot [v \nabla (\rho u)] + F \quad (۲-۳)$$

که در اینجا ρ معرف چگالی سیال، t زمان، u بردار سرعت، p فشار، v ویسکوزیته سینماتیکی و F همان چگالی نیروی توده ای است که ممکن است مشتمل بر تمام نیروها از قبیل نیروی میدان الکتریکی باشد.

در مورد جریان های تراکم ناپذیر، گرادیان فشار می تواند به خوبی در F منظور گردد. در این تحقیق، سیال تنها با نیروی میدان الکتریکی به حرکت درآمده و گرادیان فشار در سرتاسر دامنه ی محاسباتی برابر صفر است. برای ذرات یونی مرتبه ی i ام در محلول، معادله ی انتقال جرم که توصیف کننده انتقال و واکنش است را می توان به شکل کلی که در صفحه بعد آمده، نوشت:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \nabla \cdot J_i + \lambda_i C_i = R_i \quad (۳-۳)$$

^۱ - Laminar flow

که در اینجا C_i معرف غلظت یونی، J_i شار ذرات، λ_i یک ثابت تخریب رادیواکتیو و R_i میزان تولید یا مصرف ذرات مرتبه i ام از طریق واکنش شیمیایی است. شار J_i به طور کلی در بر گیرندگی تعاملاتی از جریان افقی^۱، انتشار و پراکنش^۲ به همراه یک عبارت مربوط به جابه جایی شیمیایی است. با چشم پوشی از انتشار، شار شکل زیر را خواهد داشت:

$$J_i = -\frac{e z_i D_i}{K T} C_i \nabla \psi - D_i (\nabla C_i + C_i \nabla \ln \gamma_i) + C_i u \quad (4-3)$$

که عبارت اول در سمت راست به جابه جایی الکتروشیمیایی، عبارت دوم به پراکنندگی آبی^۳ و عبارت آخر به انتقال افقی مربوط می شود. این همان معادله ی معروف Nernst-Planck می باشد. در اینجا γ_i, D_i, Z_i به ترتیب معرف ظرفیت جبری یون، ضریب پخش و ضریب واکنش ذرات مرتبه i ام می باشند و T, K, e به ترتیب معرف بار مطلق الکترون، ثابت بولترمن و دمای مطلق می باشند کمیت ψ نشان دهنده ی پتانسیل الکتریکی موضعی ناشی از توزیع یون است، که تحت حاکمیت معادله ی پواسون می باشد:

$$\nabla \cdot (\epsilon_r \epsilon_0 \nabla \psi) = -\rho_e = -\sum_i e z_i C_i \quad (5-3)$$

که در اینجا ϵ_r ثابت موضعی دی الکتریک بدون بعد سیال، ϵ_0 ضریب گذردهی خلا و ρ_e چگالی خالص بار می باشد.

¹ - advection

² - dispersion

³ - aqueous

معادلات ۱-۵ فرآیندهای انتقال هیدرودینامیکی و الکترودینامیکی را در جریانهای الکتروسینتیک تعیین می نمایند. برای سیالات یکنواخت تراکم ناپذیر و ایزوترمال که فاقد قطبیت، تشعشع یا واکنش های شیمیایی هستند. این معادلات را می توان باز هم ساده تر کرد:

$$\nabla \cdot u = 0 \quad (۳-۶)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u = \nu \nabla^2 u + \frac{F}{\rho} \quad (۳-۷)$$

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + u \cdot \nabla c_i = D_i \nabla^2 c_i + \frac{eZ_i D_i}{KT} \nabla \cdot (c_i \nabla \Psi) \quad (۳-۸)$$

$$\nabla^2 \Psi = -\frac{\rho_e}{\epsilon_r \epsilon_0} \quad (۳-۹)$$

F می تواند هر نوعی از نیروی توده ای مؤثر باشد. در این رابطه ما تنها نیروی الکتریکی استاتیک از یک میدان الکتریکی خارجی را مورد نظر قرار می دهیم. شکل کلی نیروی الکتریکی سیالات الکتروسینتیک در مقیاس میکرومتری را می توان به شکل زیر نشان داد:

$$F_E = -\rho_e \nabla \Psi_{ext} \quad (۳-۱۰)$$

که Ψ_{ext} همان میدان پتانسیل الکتریکی خارجی می باشد. از آنجا که سرعت جریان های الکتروسینتیک در میکرو کانال ها بسیار پایین است، حساسیت نسبت به الکترو مغناطیسی قابل چشم پوشی است. وقتی جابجایی یونی^۱ قابل چشم پوشی باشد و پتانسیل الکتریکی نیز دائماً قابل اعمال باشد معادله ی (۳-۸) یک راه حل ساده و همیشگی برای محلول های الکتروولیت رقیق دارد:

^۱ - ionic convection

$$C_i = C_{i,\infty} \exp\left(-\frac{ez_i \Psi}{KT}\right) \quad (11-3)$$

با جایگزینی معادله‌ی (۱۱-۳) در معادله‌ی (۹-۳) معادله‌ی معروف غیر خطی Poisson-Boltzmann حاصل می‌گردد:

$$\nabla^2 \Psi = -\frac{1}{\epsilon_r \epsilon_0} \sum_i ez_i C_{i,\infty} \exp\left(-\frac{ez_i \Psi}{KT}\right) \quad (12-3)$$

مدل PB منجر به تفکیک پراکندگی پتانسیل الکتریکی از جریان سیال می‌گردد، که راه حل بسیار آسانتری را در مقایسه با مدل دینامیک می‌طلبد. مدل PB به طور موفقیت آمیزی از طریق چندین روش عددی حل شده است.

۳-۲- شرایط مرزی

ما یک تناوب فضایی طولی را برای دامنه‌ی محدود مورد نظر فرض می‌کنیم، زیرا طول یک کانال سیال میکرومتری معمولاً در مقایسه با پهنای آن بسیار زیاد است. شرایط مرزی پرئودیک شامل پیوستگی‌های بین ورودی و خروجی می‌باشد:

$$C_{i, \text{inlet}} = C_{i, \text{outlet}} \quad (13-3)$$

$$\mathbf{u}_{\text{inlet}} = \mathbf{u}_{\text{outlet}} \quad (14-3)$$

گرادیان ثابت میدان الکتریکی خارجی برابر است با:

$$\mathbf{E} = -\nabla \Psi_{\text{ext}} \quad (15-3)$$

در سطح جامد - مایع Ω ، عدم لغزش سرعت و شرایط شارنرمال . اعمال می‌شوند:

$$u_{\Omega} = 0 \quad (۱۶-۳)$$

$$(V \cdot J_i)_{\Omega} = 0 \quad (۱۷-۳)$$

که v برابر نرمال واحد عمود بر دیواره می باشد. در مورد واکنش های شیمیایی که در سطح خارجی روی می دهند، شارنرمال با میزان واکنش در ارتباط است. با جایگزینی معادله ی (۳-۴) در (۳-۱۷) خواهیم داشت:

$$\frac{(V \cdot \nabla C)_i_{\Omega}}{c_i} = -\frac{e z_i}{kT} (V \cdot \nabla \Psi)_{\Omega} \quad (۱۸-۳)$$

با انتگرال گیری از هر دو طرف معادله ی (۳-۱۸) در مرز می توان شرایط مرزی را باز هم ساده تر کرد:

$$C_{i,\Omega} = C_{i,m} e^{-\frac{e z_i}{kT} (\zeta - \Psi_m)} \quad (۱۹-۳)$$

که $\Psi_m, C_{i,m}$ معرف غلظت یونی مرتبه ی i ام و پتانسیل الکتریکی در وسط کانال می باشند و ζ همان پتانسیل زتا می باشد بنابراین شرایط مرزی برای غلظت یونی تبدیل به شرایط ساده از نوع دیریکله می گردد.

پتانسیل الکتریکی در سطح را می توان از طریق چگالی بار سطحی σ یا پتانسیل زتا ζ اعمال کرد. مورد اول به شرایط مرزی از نوع نیومن و دیگری منجر به شرایط مرزی از نوع دیریکله می گردد. تحقیقات نشان داده اند که این دو نوع شرایط مرزی با یکدیگر سازگاری دارند اما مورد دوم دارای قابلیت محاسباتی بالاتری است.

بنابراین ما از شرط مرزی دیریکله برای معادله ی پتانسیل الکتریکی استفاده می کنیم:

$$\Psi_{\Omega} = \zeta \quad (20-3)$$

۳-۳- بیان مساله

در ابتدا جریان الکترو اسموزی را در یک میکروکانال که به طور همگن باردار شده است شبیه سازی نمودیم، که پهنای H آن برابر با $1 \mu m$ می باشد. برای این منظور از یک شبکه 20×150 استفاده کردیم. محلول الکتروولیت ۱:۱ در نظر گرفته شده است و غلظت یونی بالک $c_{\infty} = 10^{-5}$ تعیین شده است. پتانسیل زتا برای هر دو دیواره‌ی بالا و پایین برابر با $\xi = -5 mV$ تعیین گردیده است.

سایر مشخصات و پارامترهای فیزیکی نیز عبارتند از:

$$\rho = 999.9 \text{ (kg/m}^3\text{)} \text{ سیال چگالی}$$

$$\epsilon_r \epsilon_0 = 6.95 \times 10^{-10} \text{ (C}^2\text{/jm)} \text{ ثابت دی الکتریک}$$

$$\mu = 0.889 \text{ (mpas)} \text{ ویسکوزیته دینامیکی}$$

$$T = 273 \text{ k دما}$$

$$D_1 = D_2 = 1 \times 10^{-8} \text{ (m}^2\text{/s)} \text{ ضریب پراکندگی برای هر دو یون}$$

$$E = 1 \times 10^3 \text{ (V/m)} \text{ میدان الکتریکی خارجی}$$

۳-۴- پارامترهای LBM

پارامترهای داده شده باید به سیستم LBM تبدیل شوند. با استفاده از تشابه، این

پارامترها را تبدیل به مقادیر جدید در سیستم LBM می کنیم:

$$v_{\text{واقعی}} = \frac{\mu}{\rho} = \frac{0.889 \times 10^{-3}}{999.9} = 8.89 \times 10^{-7} \quad (21-3)$$

$$SC)_{\text{lattice}} = SC)_{\text{actual}} \quad (22-3)$$

$$\frac{0.017}{D_{\text{lattice}}} = \frac{8.89 \times 10^{-7}}{10^{-8}} \rightarrow D_{\text{Lattice}} = 1.91 \times 10^{-4} \quad (23-3)$$

$$\varepsilon_r \varepsilon_0 = 1)_{Lattice} \quad (24-3)$$

$$\frac{ez}{KT} = 1)_{Lattice} \quad (25-3)$$

فصل چهارم

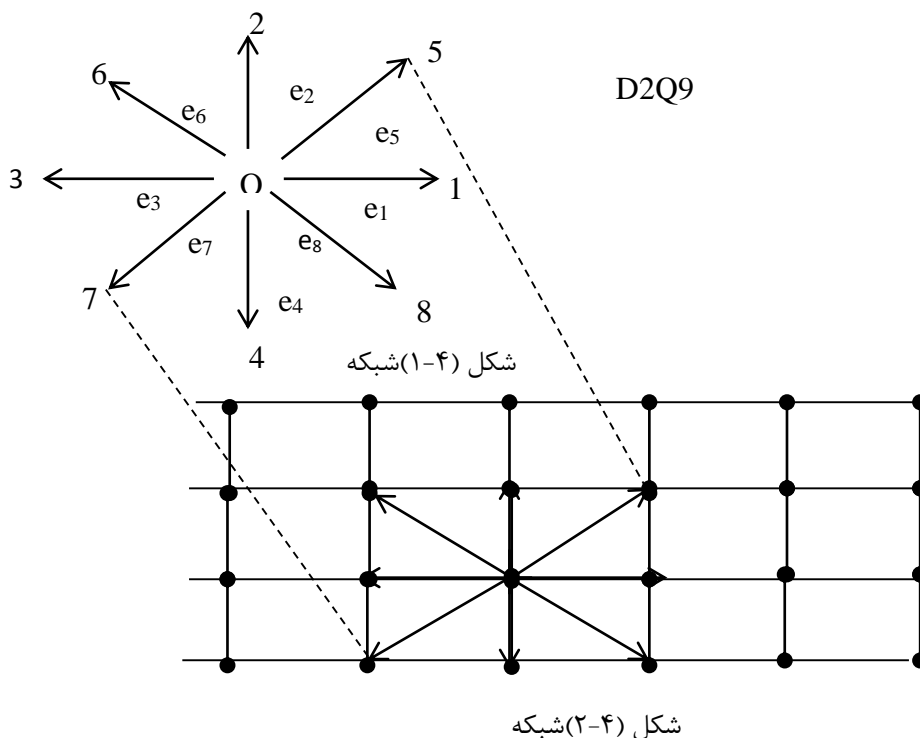
روش شبکه بولترمن

۴-۱- روش شبکه بولتزمن برای محاسبه سرعت

روش حل عددی که ما برای معادلات حاکم بر مساله از آن استفاده کرده ایم روش شبکه بولتزمن می باشد. مدل های شبکه بولتزمن، از طریق کاهش تعداد موقعیت های فضایی (مکانی) ذرات و گشتاورهای میکروسکوپی از حالت پیوسته به گسسته و تقسیم زمان به بخشهای مشخص، دیدگاه مفهومی مدل های شبکه بولتزمن را بسیار ساده کرده اند.

مکان ذرات به گره های موجود در شبکه محدود شده است. نوسانات موجود در گشتاورها که ممکن بود ناشی از تسلسل جهات و شدت سرعت بوده باشد و هم چنین جرم متغیر ذرات، به ۸ جهت، سه شدت متفاوت و یک جرم مشخص برای ذره، محدود شده است.

شکل شماره ی (۴-۱) شبکه کارتیزین را نشان داده و سرعت های e_α زمانی که α برابر با $0, 1, \dots, 8$ باشد، یک ضریب جهت بوده و $e_0=0$ نشان می دهد که ذره در حالت استراحت (آرامش) است.



این مدل تحت عنوان D2Q9 شناخته می شود زیرا دو بعدی بوده و شامل ۹ سرعت می باشد.

این شیوه ی طبقه بندی LBM توسط کیان^۱ [۳۷] و همکارانش مطرح شد و هم اکنون استفاده ی گسترده ای از آن می شود.

از آنجا که جرم ذره یکنواخت می باشد (در واحد حجم)، این گشتاور ها و سرعت های میکروسکوپی همواره برابر با یکدیگر می باشند.

واحد شبکه (Lu) اصلی ترین مقیاس طول در مدل های LBM بوده و پله های زمانی که آن را با (ts) نشان می دهیم نیز واحد زمان در شبکه می باشند.

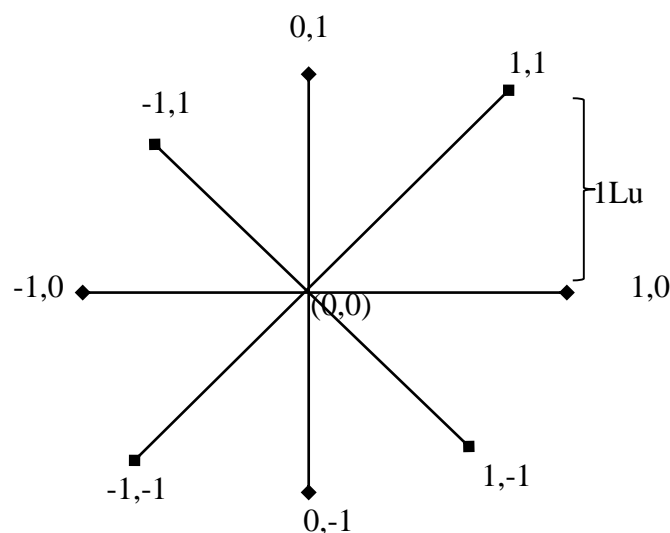
بزرگی سرعت از e_1 تا e_4 برابر با یک واحد شبکه در واحد زمان است ($1Lu\text{ts}^{-1}$) و

بزرگی سرعت از e_5 تا e_8 برابر با $\sqrt{2}Lu\text{ts}^{-1}$ می باشد (اگر چه این رایج ترین شیوه

شاخص گذاری سرعت می باشد اما شیوه های دیگری نیز وجود دارند). کارکردن با

این سرعت ها بسیار راحت بوده زیرا تمامی مولفه های y, x آنها برابر با ۰ یا ± 1 می

باشند.



شکل (۳-۴) مدل D2Q9

^۱-Qian

(۱-۴)

$$e_{\alpha} = \begin{cases} (0,0) & \alpha = 0 \\ (\cos \theta_{\alpha}, \sin \theta_{\alpha})c & \alpha = 1 - 4 \\ \sqrt{2}(\cos \theta_{\alpha}, \sin \theta_{\alpha})c & \alpha = 5 - 8 \end{cases} \quad \begin{cases} \theta_{\alpha} = (\alpha - 1)\pi/2 \\ \theta_{\alpha} = (\alpha - 5)\pi/2 + \pi/4 \end{cases}$$

اولین معادله ای که ما با آن سروکار داریم معادله ی مربوط به تابع توزیع ذره تحت اعمال نیروی خارجی می باشد که این معادله به شرح زیر است:

$$f_{\alpha}(r + e_{\alpha}\delta_t, t + \delta_t) - f_{\alpha}(r, t) = \frac{1}{\tau_v} [f_{\alpha}(r, t) - f_{\alpha}^{eq}(r, t)] + \delta_t f_{\alpha} \quad (۲-۴)$$

که r همان بردار مکان، e_{α} سرعت های گسسته، δ_t مرحله ی زمانی و τ_v زمان استراحت فاقد بعد می باشد.

در معادله ی (۱-۴) C همان سرعت شبکه می باشد که به شکل δ_x/δ_t تعریف می شود که δ_x ثابت شبکه (اندازه شبکه) می باشد. بنابراین تابع توزیع تعادلی چگالی f_{α}^{eq} را می توان به این شکل نشان داد:

$$f_{\alpha}^{eq} = w_{\alpha}\rho \left[1 + 3\frac{e_{\alpha}\cdot u}{c^2} + 9\frac{(e_{\alpha}\cdot u)^2}{2c^4} - \frac{3u^2}{2c^2} \right] \quad (۳-۴)$$

که:

$$w_{\alpha} = \begin{cases} \frac{4}{9} & \alpha = 0 \\ \frac{1}{9} & \alpha = 1 - 4 \\ \frac{1}{36} & \alpha = 5 - 8 \end{cases} \quad (۴-۴)$$

بین زمان استراحت برای جریان سیال و ویسکوزیته‌ی سیال رابطه‌ی زیر برقرار می‌باشد:

$$\tau_v = \frac{3v}{c\delta_x} + 0.5 \quad (۵-۴)$$

نیروی خارجی در معادله‌ی (۴-۲) برای جریان الکتروسینتیک در یک میکرو کانال طویل، که توسط یک میدان الکتریکی خارجی القاء شده باشد بدین شرح است:

$$F_\alpha = \frac{3\rho_e E.(e_\alpha - u)}{\rho c^2} f_\alpha^{eq} \quad (۶-۴)$$

پس چگالی ماکروسکوپی و سرعت را می‌توان با استفاده از فرمول زیر محاسبه کرد:

$$\rho = \sum f_\alpha \quad (۷-۴)$$

$$\rho u = \sum e_\alpha f_\alpha \quad (۸-۴)$$

گام‌های بعدی عبارتند از جریان یافتن^۱ و برخورد^۲ ذرات از طریق تابع توزیع. ساده‌ترین رویکرد از تخمین باتناگار-گراس-کروک برای برخورد استفاده می‌کند. جریان و برخورد (استراحت در برابر تعادل موضعی) بدین شکل می‌باشند:

$$\underbrace{f_\alpha(x + e_\alpha \Delta t, t + \Delta t)}_{streaming} = f_\alpha(x, t) - \underbrace{\frac{f_\alpha(x, t) - f_\alpha^{eq}(x, t)}{\tau}}_{collision} \quad (۹-۴)$$

^۱ - streaming

^۲ - collision

که $f_{\alpha}(x + e_{\alpha}\Delta t, t + \Delta t) = f_{\alpha}(x, t)$ بخش مربوط به جریان و $\frac{f_{\alpha}(x, t) - f_{\alpha}^{eq}(x, t)}{\tau}$ عبارت مربوط به برخورد می باشد.

گر چه می توان این دو را در یک عبارت تک جمله ای مانند معادله ی (۴-۹) ترکیب نمود، اما گام های برخورد و جریان در صورت وجود مرزهای جامد باید جدا نوشته شوند، زیرا شرایط مرزی عقب جست یک برخورد جداگانه می باشد.

* مرحله برخورد:

مرحله برخورد از یک زمان بی نهایت کوچک قبل از برخورد شروع شده و تا یک زمان بی نهایت کوچک پس از برخورد را شامل می شود. در صورتی که از آرایش ذرات قبل از برخورد آگاه باشیم، می توان با استفاده از رابطه ی (۴-۲) آرایش ذرات پس از برخورد را محاسبه نمود. $\tilde{f}_{\alpha}(x, t)$ تابع توزیع پس از برخورد و τ_v زمان استراحت هستند.

$$f_{\alpha}(\vec{x}, t) = f_{\alpha}(\vec{x}, t) - \frac{1}{\tau_v} [f_{\alpha}(\vec{x}, t) - f_{\alpha}^{eq}(\vec{x}, t)] \quad (۴-۱۰)$$

* مرحله جاری شدن:

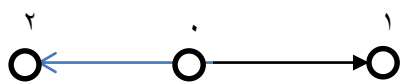
این مرحله بلافاصله بعد از مرحله ی برخورد شروع می شود و تا رسیدن ذرات مجازی به گروهی مجاور ادامه می یابد که در این حالت تابع توزیع از رابطه (۴-۱۱) بدست می آید:

$$f_{\alpha}(\vec{x} + e_{\alpha}\delta_t, t + \delta_t) = f_{\alpha}(\vec{x}, t) \quad (۴-۱۱)$$

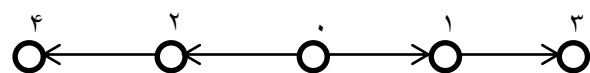
در جدول (۴-۱) ضرایب وزنی و سرعت صوت برای انواع شبکه آورده شده است. شکل (۴-۴) نشان دهنده ی مدل شبکه های $D1Q3$, $D1Q5$ و شکل (۴-۵) نشان دهنده مدل شبکه های $D3Q15$, $D3Q19$ است.

جدول (۴-۱) وزنی و مربع سرعت صوت مربوط به انواع شبکه مورد استفاده در LBM

نوع شبکه	مربع سرعت صوت	ضرایب وزنی	سرعت های شبکه
$D1Q3$	$\frac{1}{3}$	$\frac{4}{6}$	0
		$\frac{1}{6}$	1
		$\frac{1}{6}$	
$D1Q5$	1	$\frac{6}{12}$	0
		$\frac{2}{12}$	1
		$\frac{1}{12}$	2
		$\frac{1}{12}$	
$D2Q9$	$\frac{1}{3}$	$\frac{16}{36}$	0
		$\frac{4}{36}$	1
		$\frac{1}{36}$	$\sqrt{2}$
		$\frac{1}{36}$	
$D3Q15$	$\frac{1}{3}$	$\frac{16}{42}$	0
		$\frac{8}{42}$	1
		$\frac{1}{42}$	$\sqrt{3}$
		$\frac{1}{42}$	
$D3Q19$	$\frac{1}{3}$	$\frac{12}{36}$	0
		$\frac{2}{36}$	1
		$\frac{1}{36}$	$\sqrt{2}$
		$\frac{1}{36}$	
		$\frac{1}{36}$	

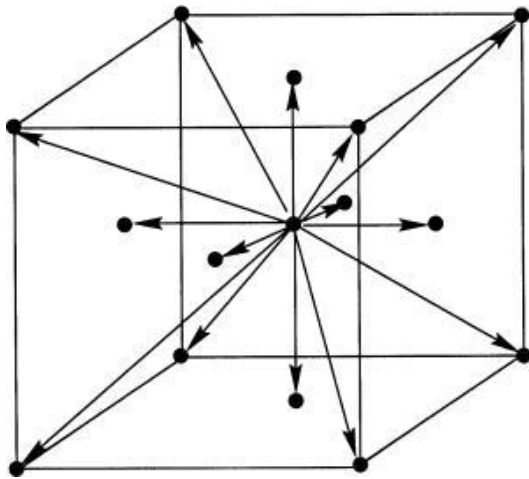


$D1Q3$

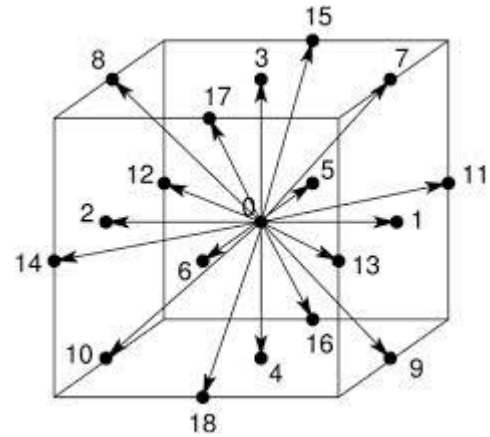


$D1Q5$

شکل (۴-۴) مدل شبکه $D1Q3$ در سمت چپ و مدل $D1Q5$ در سمت راست



$D3Q15$



$D3Q19$

شکل (۴-۵) مدل شبکه $D3Q15$ در سمت چپ و مدل $D3Q19$ در سمت راست

۴-۱-۱- ویسکوزیته:

ویسکوزیته‌ی سینماتیکی سیال v در مدل $D2Q9$ از روش زیر بدست می آید:

$$v = \left(\tau - \frac{1}{2} \right) c_s^2 \quad (۴-۱۲)$$

که در مدل $D2Q9$ مقدار c_s^2 برابر $\frac{1}{3}$ می باشد.

اگر $\zeta > \frac{1}{2}$ در نظر گرفته شود ویسکوزیته مثبت می شود که انتخابی مناسب می باشد.

با نزدیک شدن τ به عدد $\frac{1}{2}$ مشکلاتی در روند حل عددی ایجاد می گردد. بهترین مقدار برای ζ ، زمانی است که $\zeta = 1$ در نظر گرفته شود که برای مدل مورد نظر $v = \frac{1}{6}$ بدست می آید.

۴-۱-۲- شرایط مرزی:

قبل از اینکه بتوانیم هر گونه نتیجه معنا داری را محاسبه کنیم باید شرایط مرزی

مشخص باشند. از اوایل دهه‌ی ۱۹۹۰ میلادی، مقالات بسیاری رفتار شرایط مرزی

متنوع را ارائه نموده و مورد بررسی قرار داده

اند این کار هم چنان نیز ادامه دارد، اگر چه که شرایط مرزی کار آمد برای انواع مختلفی از شبیه سازی ها هم اکنون موجود می باشند در این قسمت ما به بررسی شرایط مرزی پریودیک، تقارن، عدم لغزش و خروجی گرادیان صفر می پردازیم. در واقع اعمال شرایط مرزی و روش شبکه ی بولتزمن به تعیین توابع توزیع مجهول روی مرزها خلاصه می شود.

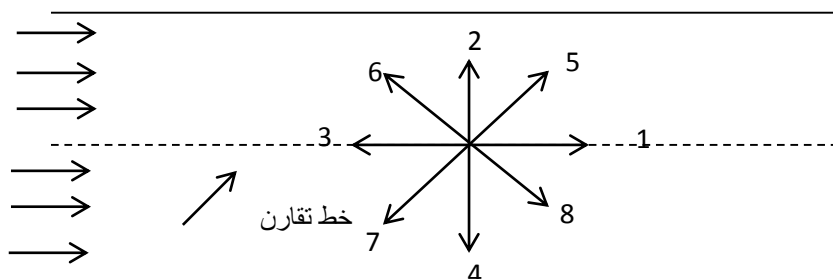
۴-۱-۲-۱- شرط مرزی تقارن: [۳۸]

در بسیاری از شبیه سازی ها، جریان حول یک محور یا خط تقارن دارد، لذا پیدا کردن روش حلی که تنها در نیمی از دامنه حل شود کفایت می کند. به عنوان مثال در شکل (۴-۶) جریان در یک کانال را نشان می دهد که حول خط میانی جریان تقارن دارد. یعنی جریان زیر خط تقارن تصویر جریان بالای آن می باشد. نحوه اعمال شرط مرزی بدین گونه است که مقادیر توابع توزیع مجهول را برابر قرینه ی آنها حول خط تقارن قرار می دهیم. در این صورت:

$$f_2 = f_4$$

$$f_5 = f_7 \quad (۴-۱۳)$$

$$f_6 = f_8$$



شکل (۴-۶) شرط مرزی تقارن

۴-۱-۲-۲- شرط مرزی پریودیک: [۳۸]

زمانی که روند جریان به طور کاملاً مشابه تکرار شود، می توان به جای تحلیل کل جریان، تنها قسمتی از آن را مورد بررسی قرار داد و نتیجه را به کل جریان بسط داد. برای مثال شکل (۷-۴) جریانی را نشان می دهد که از روی تعدادی لوله عبور می کند. اگر فرض کنیم شرایط جریان در بالای خط b و زیر خط a کاملاً مشابه باشد، در این شرایط برای شبیه سازی جریان بین دو خط a, b از شرایط مرزی پریودیک استفاده می شود.

در واقع توابع توزیع f_8, f_7, f_4 روی خط b و توابع توزیع f_6, f_2, f_5 روی خط a مجهول هستند که به صورت زیر محاسبه می شوند.

در طول خط b :

$$f_{4,b} = f_{4,a}$$

$$f_{7,b} = f_{7,a} \quad (۴-۱۴-الف)$$

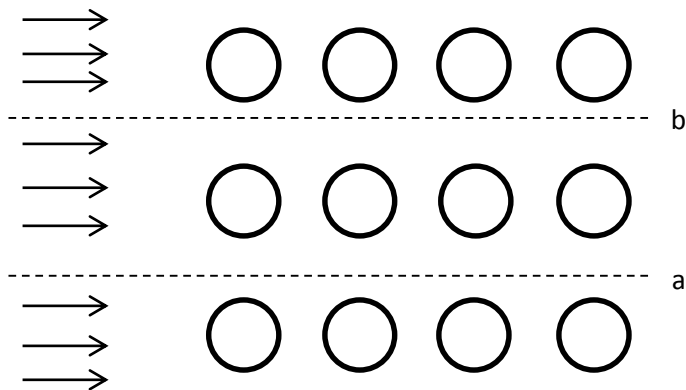
$$f_{8,b} = f_{8,a}$$

در طول خط a :

$$f_{5,a} = f_{5,b}$$

$$f_{6,a} = f_{6,b} \quad (۴-۱۴-ب)$$

$$f_{2,a} = f_{2,b}$$



شکل (۷-۴) شرط مرزی پریودیک

۴-۱-۲-۳- شرط مرزی عدم لغزش: [۳۸]

برای اعمال شرط مرزی عدم لغزش در روش شبکه‌ی بولتزمن معمولاً از طرح عقب جست استفاده می‌شود. نحوه‌ی اعمال این طرح با توجه به موقعیت قرارگیری دیوار نسبت به گره‌های شبکه متفاوت می‌باشد. در صورتی که مرز مورد نظر دقیقاً روی نقاط شبکه‌ی مورد نظر قرار گیرد، از طرح عقب جست کامل و در صورتی که مرز در بین نقاط شبکه قرار داشته باشد از طرح عقب جست دیوار میانی استفاده می‌شود.

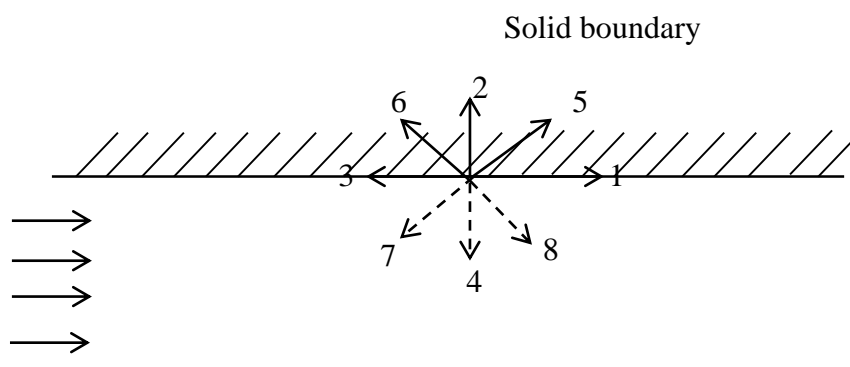
* طرح عقب جست کامل:

براساس این طرح، تابع توزیع ذره که از گره‌ی سیال در امتداد شبکه جریان می‌یابد بعد از برخورد با گره‌ی دیوار در همان امتداد و در جهت مخالف باز می‌گردد. شکل (۸-۴) نشان دهنده‌ی این شرایط مرزی است. در این شکل مرز بالایی با توابع توزیع مجهول f_4, f_7, f_8 به نمایش درآمده است. براساس طرح عقب جست کامل خواهیم داشت:

$$f_4 = f_2$$

$$f_7 = f_5 \quad (۸-۴)$$

$$f_8 = f_6$$



شکل (۸-۴) شرط مرزی عقب جست کامل

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

*طرح عقب جست با دیوار میانی :

همان طور که گفته شد طرح عقب جست کامل دارای دقت مرتبه اول است. لاد [۳۹] پیشنهاد کرد مرز جسم را به جای قرار دادن در روی نقاط شبکه، در بین نقاط شبکه قرار دهیم و ثابت کرد که این روش دارای دقت مرتبه اول دوم می باشد. در این طرح توابع توزیع جاری شده از سیال به سمت دیوار، در دیوار ذخیره می شود و در گام زمانی بعد به سیال بر می گردد، که به صورت ریاضی با فرض انجام محاسبات برای دیوار پائینی شبکه خواهیم داشت.

$$f_{2(x,y)} = f_{4(x,y+1)}$$

$$f_{5(x,y)} = f_{7(x+1,y+1)} \quad (۱۶-۴)$$

$$f_{6(x,y)} = f_{8(x-1,y+1)}$$

که (x,y) بیانگر موقعیت گرهی جامد درون مرز است.

۴-۱-۲-۴- شرط مرزی با سرعت معلوم در مرز:

ما در این قسمت از روشی که زووهی [۴۰] پیشنهاد کرده اند استفاده می کنیم. در اینجا با استفاده از معادلات مربوط به چگالی و سرعت ماکروسکوپیک توابع توزیع مجهول را بدست می آوریم.

این روابط به صورت زیر نوشته می شوند:

$$\left. \begin{aligned} \rho_w &= f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8 \\ u_w \rho_w &= f_1 + f_5 + f_8 - f_3 - f_6 - f_7 \\ V_w \rho_w &= f_2 + f_5 + f_6 - f_4 - f_7 - f_8 \end{aligned} \right\} \quad (۱۷-۴)$$

تا اینجا سه معادله و چهار مجهول داریم بنابراین به یک معادله‌ی دیگر نیاز داریم. زووهی [۴۰] پیشنهاد کردند که معادله‌ی چهارم با فرض تعادل در جهت عمود بر مرز بدست می آید:

$$f_1 - f_1^{eq} = f_3 - f_3^{eq} \quad (۱۸-۴)$$

با جا گذاری f_1^{eq}, f_3^{eq} بدست آمده از رابطه (۳-۳) در معادله (۱۸-۴) داریم:

$$f_1 = f_3 + \frac{2}{3} u_w \rho_w \quad (۱۹-۴)$$

با ترکیب معادلات (۱۷-۴) و معادله‌ی (۱۹-۴) چهار مجهول f_8, f_5, f_1, ρ_w به این صورت محاسبه خواهند شد:

$$\rho_w = \frac{1}{1-u_w} [f_0 + f_2 + f_4 + 2(f_3 + f_6 + f_7)] \quad (۲۰-۴)$$

$$f_5 = f_7 - \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + \frac{1}{6} \rho_w u_w + \frac{1}{2} \rho_w V_w \quad (۲۱-۴)$$

$$f_8 = f_6 - \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + \frac{1}{6} \rho_w u_w - \frac{1}{2} \rho_w V_w \quad (۲۲-۴)$$

با معلوم بودن مقدار ρ_w ، مقدار f_1 از معادله (۴-۱۹) قابل محاسبه است.

۴-۱-۲-۵- شرط مرزی خروجی گرادیان صفر:

برای اعمال این شرط، مجهولات در ستون آخر شبکه برابر مقادیر آن در ستون یکی مانده به آخر قرار داده می شود. یعنی اگر مرز خروجی در محل گره $i=n$ قرار داشته باشد، خواهیم داشت:

$$f_{6,n}=f_{6,n-1} \quad , \quad f_{3,n}=f_{3,n-1} \quad , \quad f_{7,n}=f_{7,n-1} \quad (۴-۲۳)$$

۴-۲- روش شبکه بولتزمن برای حل معادله مربوطه به انتقال یون:

با الهام از فرآیند LBM که برای حل معادله‌ی ناویراستوکس استفاده می شود، افراد مختلف مدل های متعددی را برای حل معادلات انتقال پیشنهاد نموده اند. ما از معادله‌ی زیر برای حل معادله‌ی حاکم بر انتقال یون برای اجزاء یونی مرتبه i ام استفاده می کنیم:

$$g_{\alpha}(r + e_{\alpha}\delta_{tD_i}, t + \delta_{t,D_i}) - g_{\alpha}(r, t) = \frac{-1}{\tau_{D_i}} [g_{\alpha}(r, t) - g_{\alpha}^{eq}(r, t)] \\ + W_{\alpha}\delta_{t,D_i} \left(1 - \frac{0.5}{\tau_{D_i}} \right) \frac{eZ_i D_i}{KT} \nabla \cdot (C_i \nabla \Psi) \quad (۴-۲۴)$$

که در اینجا τ_{D_i} همان زمان استراحت بی بعد برای انتقال یون مرتبه i ام مربوط به ضریب انتشار D_i ، δ_{t,D_i} فاصله‌ی زمانی مربوطه می باشد.

برای یک سیستم شبکه D2Q9 توزیع تعادلی به شرح زیر می باشد:

$$g_{\alpha}^{eq} = \begin{cases} -\frac{2C_i}{3} \frac{u^2}{CD_i^2} & \alpha = 0 \\ \frac{C_i}{9} \left[\frac{3}{2} + \frac{3e_{\alpha} \cdot u}{2C_{D_i}^2} + \frac{9}{2} \frac{e_{\alpha} \cdot u}{C_{D_i}^2} - \frac{3}{2} \frac{u^2}{C_{D_i}^2} \right] & \alpha = 1 - 4 \\ \frac{C_i}{36} \left[3 + 6 \frac{e_{\alpha} \cdot u}{C_{D_i}^2} + \frac{9}{2} \frac{e_{\alpha} \cdot u}{C_{D_i}^2} - \frac{3}{2} \frac{u^2}{C_{D_i}^2} \right] & \alpha = 5 - 8 \end{cases} \quad (25-4)$$

و زمان استراحت بی بعد به روش زیر محاسبه می گردد:

$$C_{D_i} = \frac{3D_i}{2C_{D_i}\delta_x} + 0.5 \quad (26-4)$$

که C_{D_i} معرف سرعت دیفیوژن شبکه برای یون مرتبه i ام می باشد. مقدار C_{D_i} مستقل از c است و می توان هر مقدار مثبتی را به آن اختصاص داده منوط بر اینکه مقدار C_{D_i} در بازه (۰/۵ و ۲) قرار بگیرد. مقادیر مختلف C_{D_i} منجر به فواصل زمانی مختلفی برای سیر تکاملی^۱ انتقال هر یون می گردد زیرا :

$$\delta_{t,D_i} = \frac{\delta_x}{C_{D_i}} \quad (27-4)$$

غلظت یونی نهایی برای یون مرتبه i ام را می توان پس از سیر تکاملی به طریق زیر محاسبه نمود:

$$C_i = (\sum g_{\alpha}) + \frac{\delta_{t,D_i}}{2} \frac{eZ_i D_i}{KT} \nabla \cdot (C_i \nabla \Psi) \quad (28-4)$$

^۱ -evolution

۴-۲-۱- شرایط مرزی برای معادله‌ی انتقال یون

شرایط مرزی برای این معادله شبیه شرایط مرزی برای معادله‌ی سرعت می باشد، با این تفاوت که در شرط مرزی غلظت یونی ثابت روی دیواره ها توابع توزیع مجهول به صورت زیر محاسبه می گردند، که این روش دارای دقت مرتبه دوم بوده و با مدل غیر لغزشی برای جریان سیال سازگاری دارد. برای مثال برای دیواره ی بالایی این توابع مجهول g_4, g_7, g_8 می باشند، که می توان آنها را از طریق تابع توزیع تعادلی $C_{i,0}$ بدست آورد:

$$C_{i,0} = 3C_{i,\Omega} - 3s_g - 1.5\delta_{t,D_i} \sum w_\alpha \frac{e z_i D_i}{KT} \nabla \cdot (C_i \nabla \psi) \quad (۴-۲۹)$$

که s_g مجموع توابع توزیع معلومی است که از نزدیکترین گره درون شبکه به گرهی روی دیواره منتقل شده است:

$$S_g = g_0 + g_1 + g_2 + g_3 + g_5 + g_6 \quad (۴-۳۰)$$

بنابراین توزیع های مجهول عبارتند از:

$$g_4 = \frac{C_{i,0}}{6}$$

$$g_7 = \frac{C_{i,0}}{12} \quad (۴-۳۱)$$

$$g_8 = \frac{C_{i,0}}{12}$$

۳-۴- روش شبکه بولتزمان برای حل معادله مربوطه به تابع پتانسیل الکتریکی:

به منظور حل معادله‌ی مربوطه به تابع پتانسیل الکتریکی، ما این معادله را با افزودن یک عبارت وابسته به زمان بازنویسی می‌کنیم.

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \nabla^2 \Psi + \frac{\rho_e}{\epsilon_r \epsilon_0} \quad (۳۲-۴)$$

معادله‌ی تغییر شکل یافته برای پتانسیل الکتریکی در شبکه گسسته دو بعدی را نیز می‌توان به این شکل بازنویسی کرد:

$$h_\alpha(r + \Delta r, t + \delta_{t,\psi}) - h_\alpha(r, t) = \frac{-1}{\tau_\psi} [h_\alpha(r, t) - h_\alpha^{eq}(r, t)] + \quad (۳۳-۴)$$

$$w_\alpha \delta_{t,\psi} \left(1 - \frac{0.5}{\tau_\psi}\right) \frac{\rho_e}{\epsilon_r \epsilon_0}$$

که τ_ψ همان زمان استراحت بی بعد برای انتقال پتانسیل الکتریکی و $\delta_{t,\psi}$ نیز فاصله زمانی می‌باشد.

باز هم برای یک سیستم شبکه D2Q9 توزیع تعادلی برای تابع پتانسیل الکتریکی، h ، عبارت است از:

$$h_\alpha^{eq} = \begin{cases} 0 & \alpha = 0 \\ \frac{\Psi}{6} & \alpha = 1 - 4 \\ \frac{\Psi}{12} & \alpha = 5 - 8 \end{cases} \quad (۳۴-۴)$$

زمان استراحت بی بعد بدین ترتیب محاسبه می گردد:

$$\tau_{\Psi} = \frac{3}{2C_{\Psi} \delta_x} + 0.5 \quad (35-4)$$

که C_{Ψ} سرعت الکترواستاتیک شبکه می باشد که همانند C_{Di} می تواند هر مقدار مثبتی داشته باشد، با این شرط که زمان استراحت τ_{Ψ} در بازه ی (۰/۵ و ۲) قرار داشته باشد.

فاصله زمانی نیز به شرح زیر محاسبه می گردد:

$$\delta_{t,\Psi} = \frac{\delta_x}{C_{\Psi}} \quad (36-4)$$

در نهایت پتانسیل الکتریکی ماکروسکوپی را می توان با استفاده از معادله ی زیر محاسبه نمود:

$$\Psi = \sum_{\alpha} \left(h_{\alpha} + 0.5 \delta_{t,\Psi} w_{\alpha} \frac{\rho_e}{\epsilon_r \epsilon_0} \right) \quad (37-4)$$

۴-۳-۱- شرایط مرزی برای معادله مربوط به پتانسیل الکتریکی:

نحوه ی اعمال شرایط مرزی برای معادله ی مربوط به تابع پتانسیل الکتریکی نیز کاملاً شبیه به شرایط مرزی دو معادله ی قبلی، یعنی معادلات مربوط به سرعت و تابع انتقال یون می باشد. فقط برای اعمال شرط مرزی پتانسیل الکتریکی ثابت روی دیواره ها از روش زیر برای محاسبه ی توابع توزیع مجهول استفاده می شود:

$$\Psi_0 = 3 \Psi_{\Omega} - 3s_h - 1.5 \delta_{t,\Psi} \sum w_{\alpha} \frac{\rho_e}{\epsilon_r \epsilon_0} \quad (38-4)$$

$$s_h = h_0 + h_1 + h_2 + h_3 + h_5 + h_6 \quad (39-4)$$

در نتیجه:

$$h_4 = \frac{\Psi_0}{6}$$

$$h_7 = \frac{\Psi_0}{12} \quad (4-40)$$

$$h_8 = \frac{\Psi_0}{12}$$

فصل پنجم

نتیج و تفسیر آنها

۵-۱- مقدمه

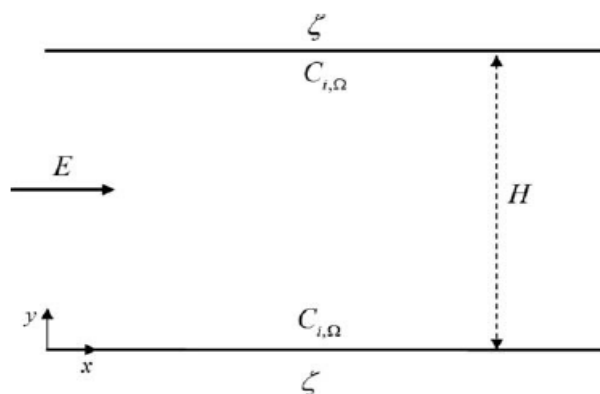
با توجه به مطالب ارائه شده در فصل های قبلی و موفقیت های روز افزون روش شبکه بولتزمن در شبیه سازی جریان های مختلف، اهمیت پرداختن به این روش به عنوان جایگزین مناسب برای روش های مرسوم دینامیک سیالات محاسباتی بر کسی پوشیده نیست.

بررسی جریان در کانال های با ابعاد میکرو کاربردهای بسیری در حال حاضر پیدا کرده اند. همانطور که گفته شد ما در این تحقیق به بررسی جریان الکترواسموتیک در کانال با ابعاد میکرو پرداخته ایم.

در این تحقیق با فرض جریان داشتن یک محلول الکترولیت در داخل کانال با دیواره هایی که دارای پتانسیل الکتریکی ثابت میباشند، با شرایط مرزی تناوبی برای معادله ی جریان و غلظت یونی، به بررسی توابع توزیع سرعت و پتانسیل الکتریکی با مقادیر پارامتری قید شده در فصل ۳، با تغییر دادن بعضی از پارامترهای ورودی و تأثیر آنها بر روی خروجی های مورد نظر پرداخته ایم.

۵-۲- هندسه مسأله مورد مطالعه

در شکل زیر هندسه کانال مورد مطالعه رسم شده است.



شکل (۵-۱) هندسه مسأله

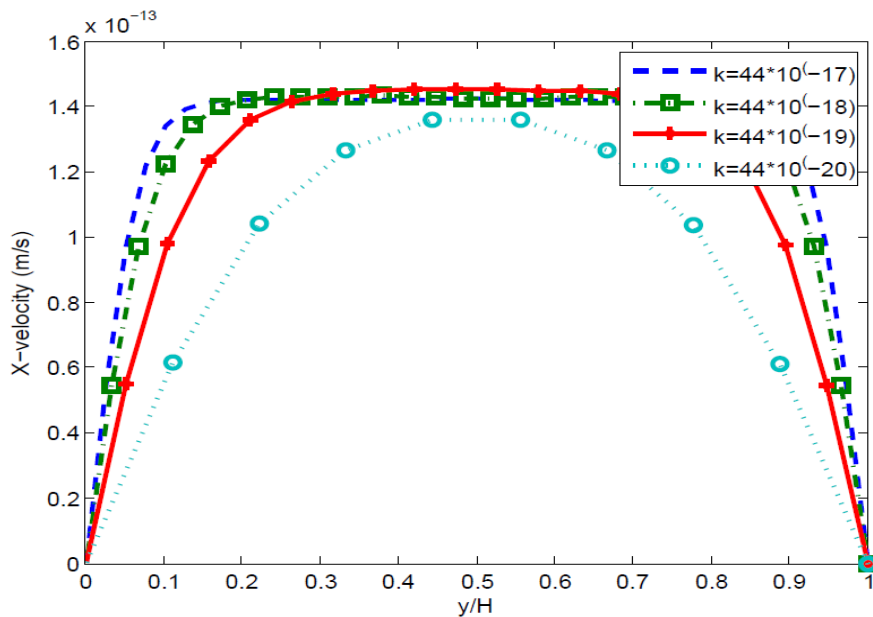
۳-۵- بررسی سرعت و پتانسیل الکتریکی در کانال

در جریانهای الکترواسموتیک در میکرو کانالها پارامتری تحت عنوان K به صورت زیر تعریف میشود:

$$\kappa = KH = H/\lambda$$

$$\lambda = \sqrt{\varepsilon_0 \varepsilon_r KT / 2e^2 Z_i^2 C_\infty}$$

با افزایش مقدار K تاثیر ضخامت EDL بر روی توزیع سرعت داخل کانال بیشتر شده و سرعت در نقاط نزدیک به دیواره با شیب تندی افزایش پیدا میکنند و بعد از آن به مقدار ثابتی میرسد. شکل (۲-۵) این تغییرات را بخوبی نشان میدهد.

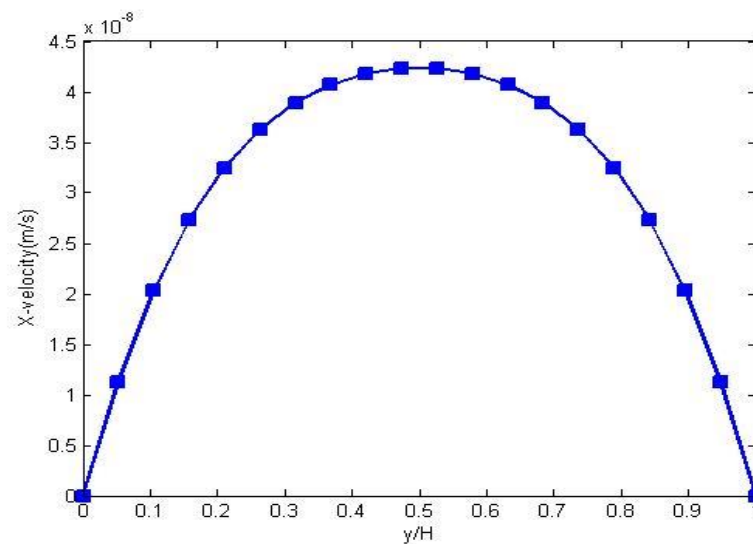


شکل (۲-۵) بررسی اثر پارامتر K بر روی پروفیل سرعت نقاط شبکه در یک مقطع عرضی

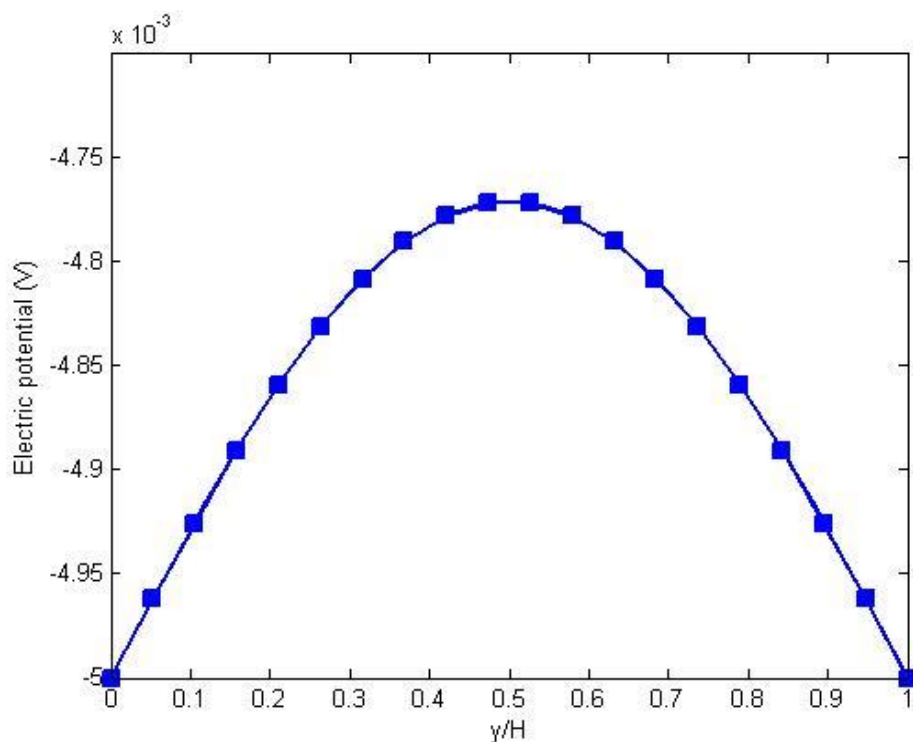
همان طور که انتظار میرفت مشاهده میکنید که با افزایش پارامتر K که نشان دهنده تاثیر ضخامت EDL بر توزیع سرعت داخل کانال میباشد، پروفیل سرعت به سمت تخت شدن پیش میرود.

حال ما برای اینکه تفاوتها در توزیع های بدست آمده در این فصل بخوبی قابل ارزیابی باشند، مقدار K را در حدی بزرگ گرفته ایم که پروفیل های حاصله برای توزیع سرعت سهمی شکل شوند.

با فرض برابر بودن مقدار K در دیواره بالایی و پائینی، $\zeta = -5 \text{ mV}$ و در نظر گرفتن سایر پارامترها همانند مقادیر ذکر شده در بخش ۳-۳ و ۴-۳ (لازم به توضیح است که در مورد تمام دیاگرامها مقادیر عددی پارامترها همان مقادیری است که در بخش ۳-۳ و ۴-۳ قید گردیده است و اگر پارامتری تغییر کرده است در توضیح مربوط به همان نمودار ذکر شده است)، برای سرعت جریان و پتانسیل الکتریکی پروفیل های (۳-۵) و (۴-۵) حاصل شده اند.



شکل (۳-۵) پروفیل سرعت در مقطع عرضی کانال با ثابت در نظر گرفتن پارامترها



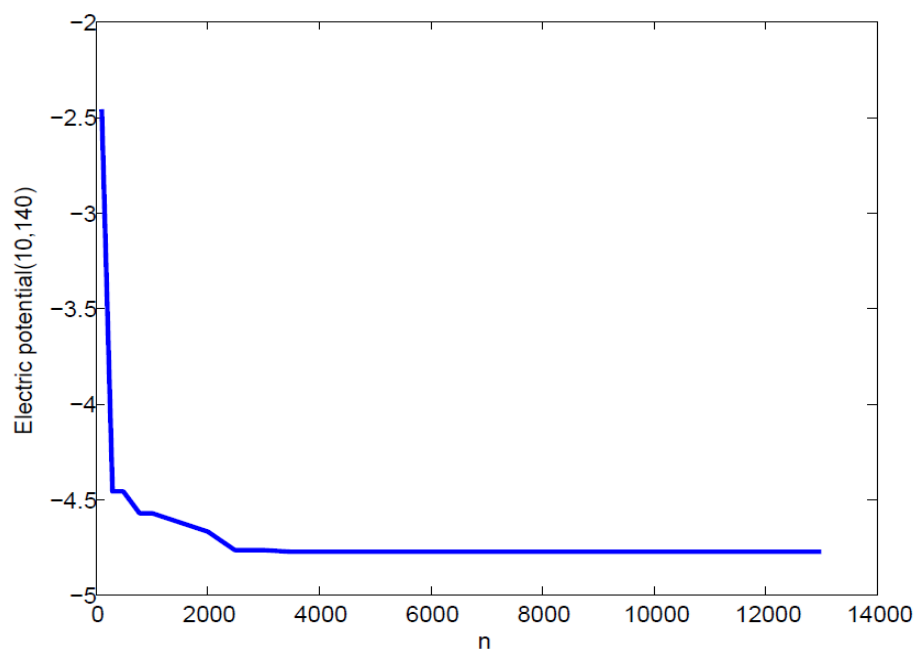
شکل (۴-۵) پروفیل پتانسیل الکتریکی در مقطع عرضی کانال با ثابت در نظر گرفتن پارامترها

برای بررسی حالت بالا از شبکه بندی ۱۵۰*۲۰ استفاده کردیم. همانطور که مشاهده میشود با به حد کافی بزرگ در نظر گرفتن K ، برای توزیع سرعت پروفیل سهمی شکل (۳-۵) بدست آمده است. برای شکل (۴-۵) که مربوط به پروفیل پتانسیل الکتریکی میباشد. با توجه به این که معادله مربوط به پتانسیل الکتریکی یک معادله لاپلاس است کاهش تدریجی پتانسیل الکتریکی نقاط داخل شبکه (از نظر اندازه) با دور شدن از دیواره های کانال کاملاً منطقی به نظر میرسد.

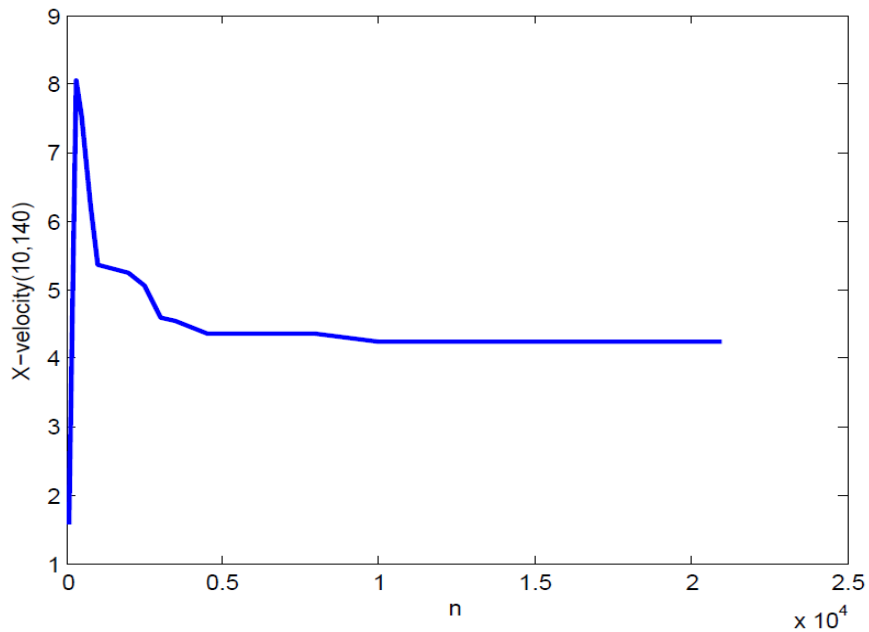
۵-۳-۱ بررسی همگرایی:

به منظور رسیدن به نتیجه مطلوب ، حلقه حل ۲۰۰۰۰ بار تکرار شده است. برای بررسی همگرایی ، اندازه سرعت و مقدار پتانسیل الکتریکی در خط مرکزی کانال و برای گره (۱۰ و ۱۴۰) در برابر تکرارهای حلقه حل رسم شده است.

همانطور که مشاهده می شود ، سرعت و پتانسیل الکتریکی پس از ۱۰۰۰۰ و ۸۰۰۰ بار تکرار حلقه همگرا شده اند.



شکل (۵-۵) بررسی همگرایی پتانسیل الکتریکی در گره (۱۰، ۱۴۰)



شکل (۵-۶) بررسی همگرایی سرعت جریان در گره (۱۴۰، ۱۰)

۵-۳-۲ استقلال از شبکه:

از مهمترین مسائلی که در یک حل عددی باید مورد بررسی قرار گیرد مستقل بودن نتایج حاصله از شبکه بندی است.

باید شبکه بندی میدان حل به گونه ای باشد که ریز تر یا رشت تر کردن شبکه تأثیر قابل توجهی روی نتایج نهایی نداشته باشد.

بررسی اولیه ما روی شبکه ۱۵۰*۲۰ بود. حال به بررسی برای شبکه با درجه درشت تر ۱۰۰*۱۰ و شبکه ریز تر یعنی ۲۰۰*۴۰ نیز می پردازیم.

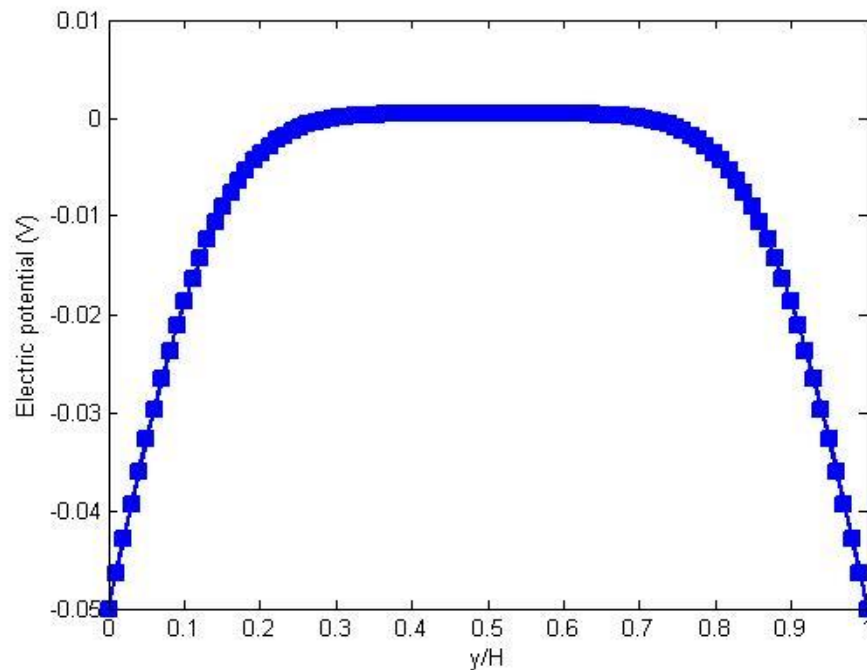
برای مقایسه این شبکه بندی ها ، مقدار سرعت و پتانسیل الکتریکی در همان گره مرکزی مورد بررسی قرار گرفته است.

جدول (۵-۱) مقدار سرعت و پتانسیل الکتریکی برای گره مرکزی در شبکه هایی با اندازه های مختلف

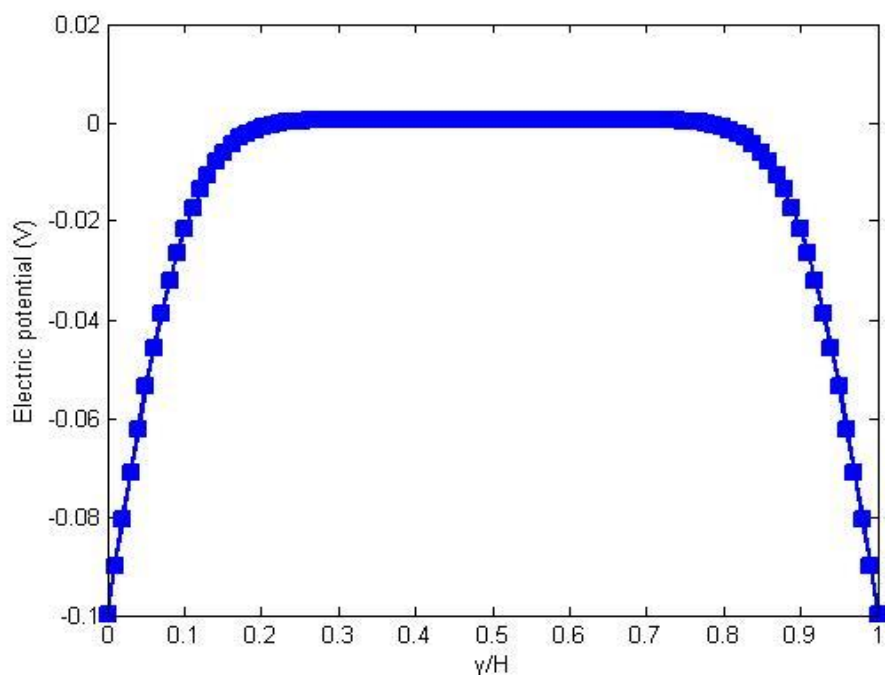
تعداد نقاط شبکه	سرعت در گرهی مرکزی کانال	پتانسیل الکتریکی در گرهی مرکزی کانال	میزان انحراف از شبکه	پتانسیل انتخابی
10*100	4.2499×10^{-8}	-4.7659×10^{-3}	0.2%	0.1%
20*150	4.2501×10^{-8}	-4.7710×10^{-3}		
40*200	4.2521×10^{-8}	-4.7745×10^{-3}	0.047%	0.073%

۴-۵ بررسی اثرات ناشی از تغییر پتانسیل الکتریکی روی دیواره های کانال

حال با تغییر مقدار پتانسیل الکتریکی ζ ، روی دیواره های کانال، پروفیل مربوط به پتانسیل الکتریکی را برای شبکه بندی 100×100 و با ثابت قرار دادن سایر پارامترها رسم کرده ایم.



شکل (۵-۷) پروفیل پتانسیل الکتریکی در مقطع عرضی کانال برای حالت پتانسیل الکتریکی روی دیواره $\zeta = -50 \text{ mV}$



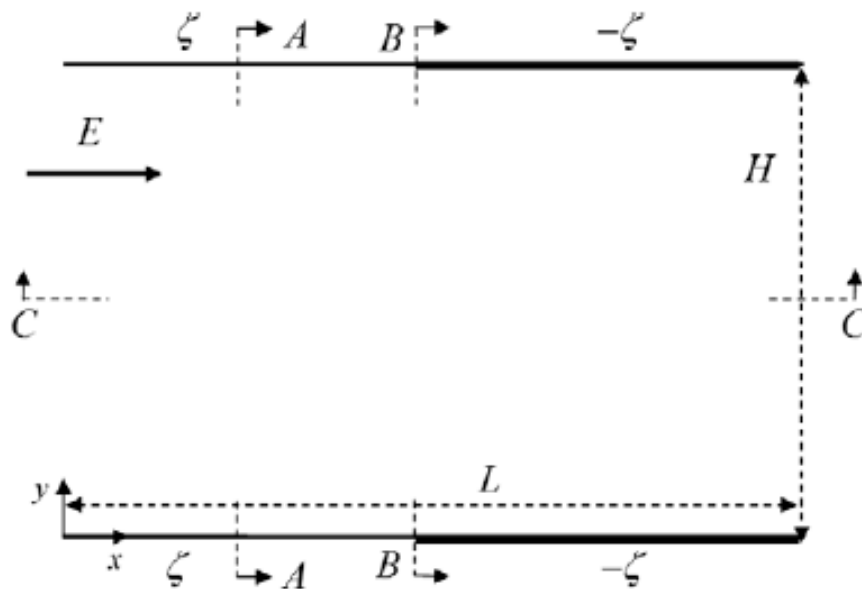
شکل (۸-۵) پروفیل پتانسیل الکتریکی در مقطع عرضی کانال برای حالت پتانسیل الکتریکی روی دیواره $\zeta = -100 \text{ mv}$

همانطور که در دیاگرام ها مشاهده می کنیم با افزایش قدر مطلق ζ از 50 mv به 100 mv مقادیر پتانسیل الکتریکی نقاط شبکه (از نظر بزرگی) افزایش پیدا کرده اند. و این بیانگر این است که پتانسیل الکتریکی دیواره ها تناسب مستقیم با پتانسیل الکتریکی نقاط شبکه دارد. چون معادله مربوط به پتانسیل الکتریکی یک معادله لاپلاس است در نتیجه هر تغییری در شرایط مرزی تاثیر مستقیم در شبکه محاسباتی دارد.

۵-۵- بررسی اثرات ناشی از تغییر میدان الکتریکی خارجی در کانال با بار الکتریکی نا

همگن

در این بخش ما فرض می‌کنیم که کانال بصورت نا همگن مانند شکل (۵-۹) باردار شده است. یعنی نیمی از دیواره با پتانسیل الکتریکی ζ و نیم دیگر با پتانسیل الکتریکی $-\zeta$ باردار شده است.

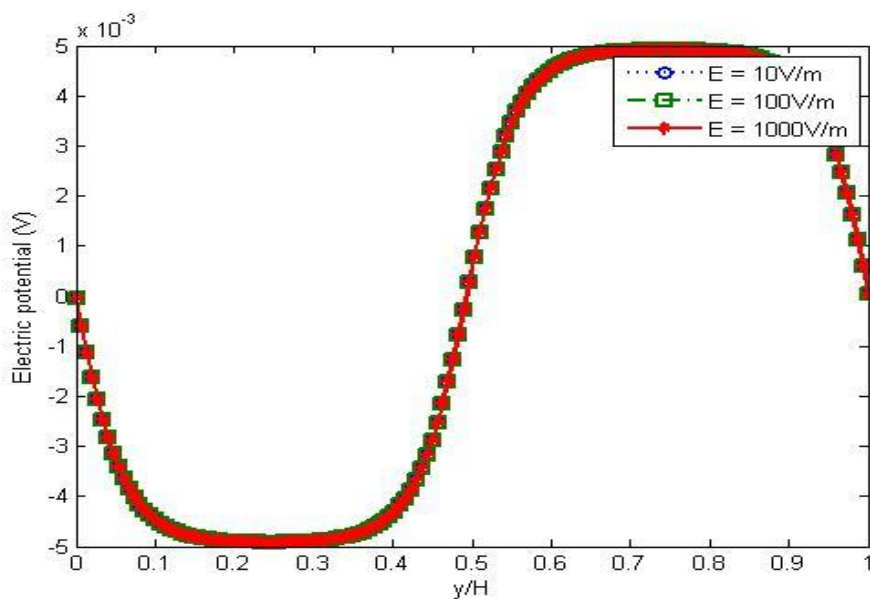


شکل (۵-۹) میکرو کانال با بار الکتریکی نا همگن روی دیواره

حال به بررسی پروفیل پتانسیل الکتریکی در مقطع عرضی A-A و مقطع طولی C-C با تغییر میدان الکتریکی خارجی می‌پردازیم.

۵-۵-۱- تغییرات پتانسیل الکتریکی در مقطع C-C

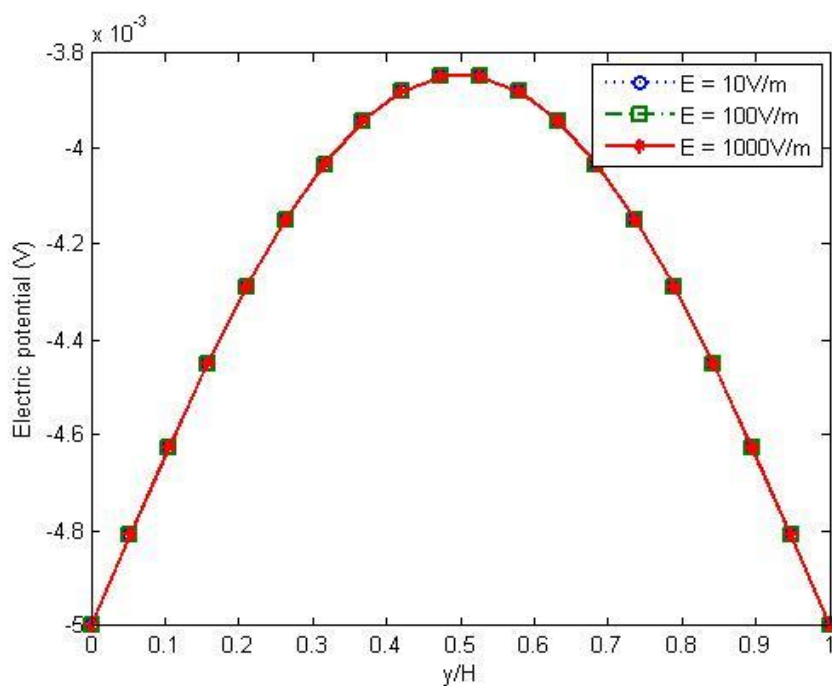
همانگونه که در شکل (۵-۹) مشاهده می شود نیمه دوم نمودار از نظر شماتیک شبیه نمودار (۵-۴) میباشد. اختلاف ظاهری جزئی آن فقط بخاطر متفاوت بودن مقادیر عددی بعضی از پارامتر است. و نیمه اول نمودار معکوس نیمه دوم است و این به دلیل تغییر علامت پتانسیل الکتریکی دیواره ها میباشد. با تغییرات میدان الکتریکی خارجی ، پتانسیل الکتریکی در نقاط مختلف شبکه در مقطع C-C تغییر نمیکند یا این تغییرات آنقدر کوچک است که می توان از آن ها چشم پوشی کرد. یعنی مرتبه میدان الکتریکی در مقایسه با پتانسیل الکتریکی نقاط شبکه آنقدر کوچک است که تغییر میدان الکتریکی باعث ایجاد تغییر قابل ملاحظه ای در پتانسیل الکتریکی نمیشود.



شکل (۵-۱۰) پروفیل تغییرات پتانسیل الکتریکی کانال در مقطع طولی کانال با بار الکتریکی نا همگن (c-c) به ازای مقادیر E متفاوت

۵-۵-۲ - تغییرات پتانسیل الکتریکی در مقطع A-A

شکل (۱۱-۵) تغییرات پتانسیل الکتریکی با تغییر میدان الکتریکی خارجی در مقطع عرضی A-A را نشان می دهد.

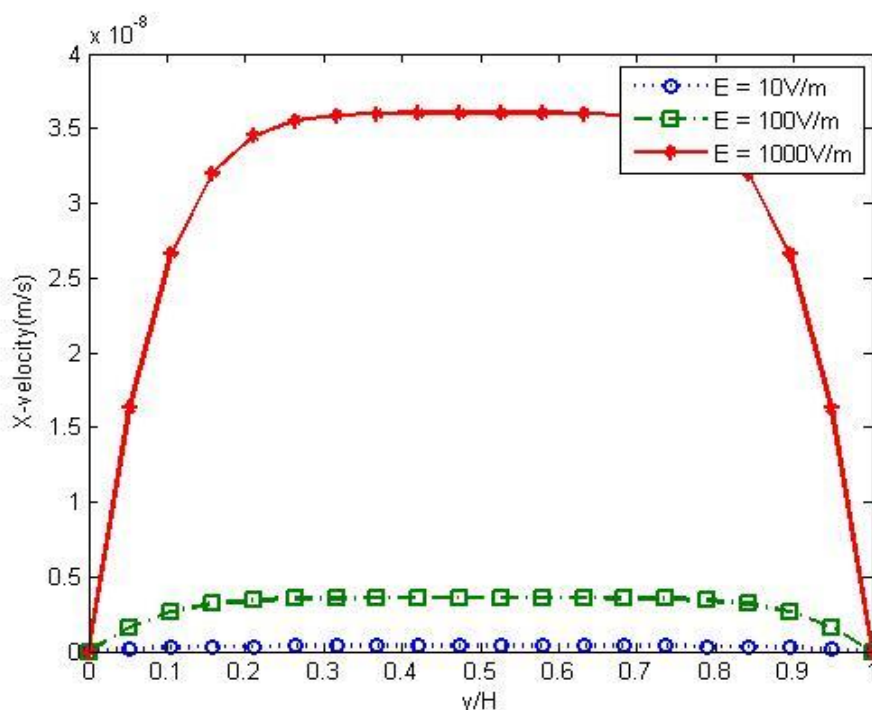


شکل (۱۱-۵) پروفیل تغییرات پتانسیل الکتریکی کانال در مقطع عرضی کانال با بار الکتریکی نا همگن (A-A) به ازای مقادیر E متفاوت

همانگونه که در شکل قابل مشاهده است با تغییر میدان الکتریکی خارجی ، مقدار پتانسیل الکتریکی در مقطع A-A نیز تغییرات قابل مشاهده ای ندارد. در این مقطع نیز مانند مقطع C-C پتانسیل الکتریکی در نقاط مختلف شبکه تغییر نمیکنند یا این تغییرات آنقدر کوچک است که می توان از آن ها چشم پوشی کرد. یعنی مرتبه میدان الکتریکی در مقایسه با پتانسیل الکتریکی نقاط شبکه آنقدر کوچک است که تغییر میدان الکتریکی باعث ایجاد تغییر قابل ملاحظه ای در پتانسیل الکتریکی نمیشود.

۳-۵-۵- تغییرات سرعت در مقطع A-A

شکل (۱۲-۵) مربوط به اثر تغییرات میدان الکتریکی خارجی بر سرعت نقاط مختلف شبکه در مقطع A-A می باشد.



شکل (۱۲-۵) پروفیل تغییرات سرعت در مقطع عرضی کانال با بار الکتریکی نا همگن (A-A) به ازای مقادیر متفاوت E

همانطور که در شکل مشاهده می شود ، با تغییر میدان الکتریکی خارجی تغییراتی در پروفیل سرعت نقاط شبکه در مقطع A-A بوجود آمده است.

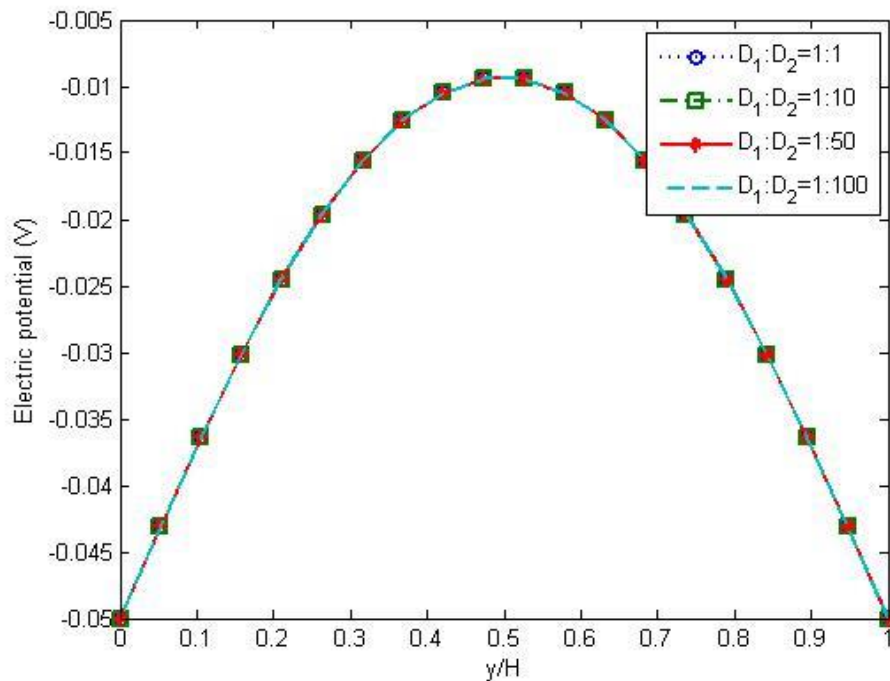
با افزایش میدان الکتریکی خارجی از ۱۰ به ۱۰^۳، میدان سرعت نیز دچار افزایش می شود. یعنی زمانی که قدرت میدان الکتریکی کم باشد ، انتقال افقی یونها ضعیف بوده و قابل چشم پوشی است. با افزایش نیروی محرک ، انتقال افقی یونها قوی تر شده است.

۵-۶- بررسی اثرات ناشی از تغییر ضرایب پراکندگی یونی

از آنجا که توزیع پتانسیل الکتریکی در یک میکرو کانال باردار ناهمگن کاملاً توسعه یافته نیست ، کشف این نکته جالب است که آیا ضرایب پراکندگی یونی و تفاوت های آنها تأثیری بر توزیع پتانسیل الکتریکی دارند یا خیر.

برای میکرو کانال مورد بررسی ، ما ضرایب پراکندگی را تغییر دادیم و نسبت آنها را از ۱:۱ به ۱:۱۰۰ رساندیم. شکل (۵-۱۲) پروفیل های پتانسیل الکتریکی را در مقطع A-A را برای ضرایب پراکندگی یونی مختلف نشان می دهد.

مقدار $\zeta = -50 \text{ mv}$ و مقدار $E = 10^3 \text{ V/m}$ در نظر گرفته شده است. شبکه انتخابی $150 * 20$ می باشد.



شکل (۵-۱۳) پروفیل پتانسیل الکتریکی در مقطع عرضی کانال با بار الکتریکی ناهمگن (A-A) و برای ضرایب پراکندگی یونی مختلف

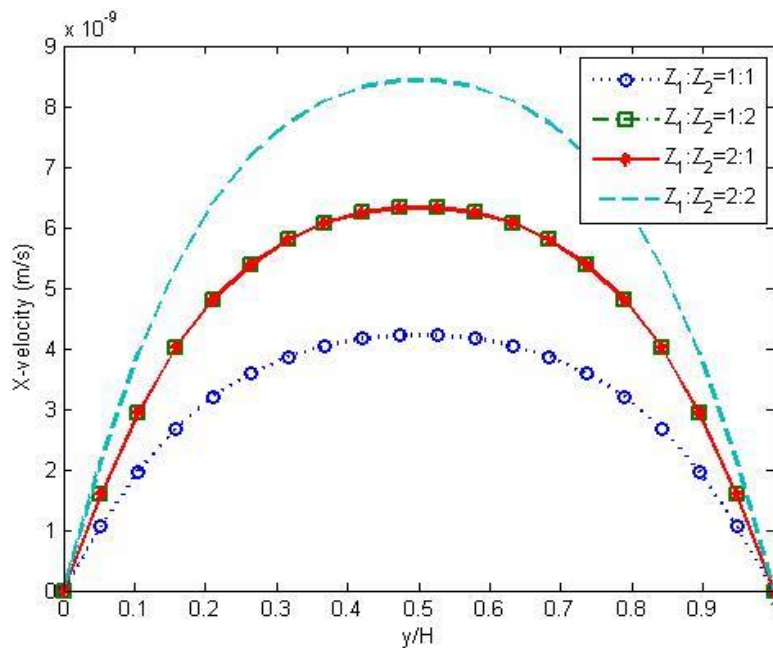
نتایج نشان می دهند که اثر ناشی از ضرایب پراکندگی یونی برای جریانهای الکترواسمزی در میکرو کانالهای طویل قابل چشم پوشی است.

دلیل آن ممکن است این باشد که زمان مشخصه پراکندگی یونی بسیار کوچکتر از زمان لازم برای انتقال افقی یونها می باشد.

۷-۵- بررسی اثرات ناشی از تغییر نسبت غلظت یونی

۱-۷-۵- تغییرات سرعت

در شکل (۵-۱۴) تأثیر تغییرات نسبت غلظت یونی در کانال با بار الکتریکی همگن روی دیواره ها بر روی سرعت نقاط شبکه بخوبی قابل مشاهده است. در این قسمت $E=2 \times 10^6$ در نظر گرفته شده است.



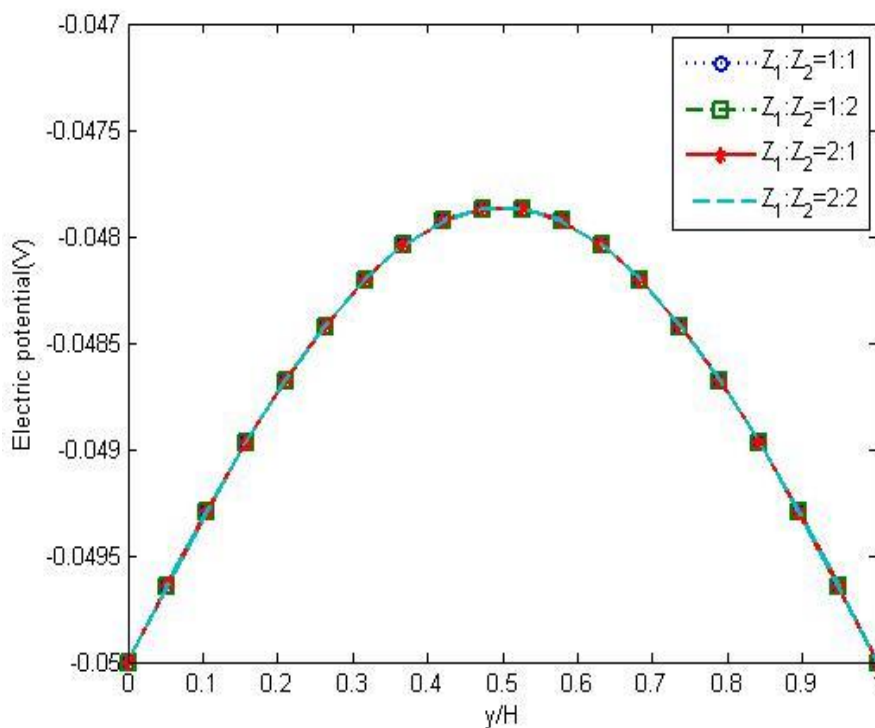
شکل (۵-۱۴) پروفیل سرعت در مقطع عرضی کانال به ازای مقادیر مختلف غلظت یونی در کانال با بار الکتریکی همگن

نتایج نشان می دهد:

- (۱) ظرفیت یونی بر توزیع سرعت جریانهای الکترو اسمزی تأثیر دارد.
- (۲) در میان نسبت های مختلف ظرفیت ، وقتی سایر شرایط یکسان باشند ، مورد ۱:۱ منجر به کوچکترین مقدار سرعت در سرتاسر کانال می شود.

۲-۷-۵ - تغییرات پتانسیل الکتریکی

در شکل (۱۵-۵) تأثیر تغییرات غلظت یونی بر روی پتانسیل الکتریکی نقاط شبکه کاملاً قابل مشاهده است. در این قسمت تنها پارامتر Z تغییر میکند و سایر پارامترها همانند مقادیر ذکر شده در قسمت ۳-۳ و ۴-۳ است.



شکل (۱۵-۵) پروفیل پتانسیل الکتریکی در مقطع عرضی کانال با بار الکتریکی همگن برای مقادیر مختلف غلظت یونی

همانطور که در شکل مشاهده می شود تغییرات غلظت یونی تأثیر بسیار ناچیزی که حتی قابل چشم پوشی می باشد را بر روی پتانسیل الکتریکی ذرات دارد. این بدان معنا میتواند باشد که مرتبه غلظت یونی در مقابل پتانسیل الکتریکی نقاط شبکه آنقدر کوچک است که تغییرات این نسبت تغییر قابل مشاهده ای در پتانسیل الکتریکی ایجاد نمیکند. و ما همواره توزیع یکسانی برای پتانسیل الکتریکی خواهیم داشت.

فصل هشتم

نتیجه گیری و پیشنهادات

۶-۱- نتیجه گیری

در این تحقیق به بررسی جریان الکترواسموتیک در یک کانال با ابعاد میکرو پرداخته شد، که عامل حرکت سیال در داخل کانال میدان الکتریکی خارجی (E) بود.

در ابتدا با در نظر گرفتن پتانسیل الکتریکی ثابت (ζ) روی دیواره ها ، پروفیل سرعت و پتانسیل الکتریکی رسم شدند. که با تقریب خوبی به همگرایی و تقارن نسبت به محور طولی کانال رسیدند.

در مرحله بعد با تغییر پتانسیل الکتریکی روی دیواره ها ، پروفیل پتانسیل الکتریکی بررسی شد که :

- با افزایش قدر مطلق ζ مقادیر پتانسیل الکتریکی نقاط داخل شبکه افزایش می یابد.

سپس با فرض اینکه دیواره کانال به صورت نا همگن باردار شده باشد ، با تغییر میدان الکتریکی خارجی به بررسی پروفیل های سرعت و پتانسیل الکتریکی در مقاطع مختلف کانال پرداخته شد. که :

- با تغییرات میدان الکتریکی خارجی ، پتانسیل الکتریکی در مقطع طولی کانال تغییرات بسیار نا چیزی داشت.

- با تغییر میدان الکتریکی خارجی ، پتانسیل الکتریکی در مقطع عرضی کانال نیز تغییرات قابل مشاهده ای نداشت.

در مرحله بعد به بررسی تغییر ضریب پراکندگی یونی و تأثیر آن بر روی پروفیل پتانسیل الکتریکی در مقطع عرضی کانال پرداخته شد . که :

- اثر ناشی از ضرایب پراکندگی یونی برای جریان های الکترواسموتیک در میکرو کانالهای طویل قابل چشم پوشی هستند.

در نهایت به بررسی اثر تغییرات نسبت غلظت یونی بر روی پروفیل سرعت و پتانسیل الکتریکی شبکه پرداختیم . که :

- ظرفیت یونی بر توزیع سرعت جریان الکترواسموتیک تأثیر دارد.
- در میان نسبت های مختلف ، نسبت ۱:۱ منجر به کوچکترین مقدار سرعت در کانال می شود.
- تغییرات نسبت غلظت یونی ، تأثیر بسیار ناچیزی بر پتانسیل الکتریکی ذرات دارد.

۶-۲- پیشنهادات

با توجه به مراحل طی شده در این پایان نامه ، در نهایت پیشنهادات در رابطه با موضوع تحقیق به صورت زیر قابل ارائه می باشند :

الف) اضافه کردن ترم انتقال گرما به معادلات

ب) در نظر گرفتن واکنش های شیمیایی و فعل و انفعالات در سیال یونی جاری شده داخل کانال

ج) تغییرات در شرایط مرزی کانال

از نظر فیزیک مساله: میتوان معادله توزیع یونی را برای ترکیبی بیشتر از ۲ یون مورد استفاده قرار داد.

از نظر روش حل عددی مساله: استفاده از روش هیبرید در شبکه بولتزمن برای حل معادلات حاکم در

میکروکانال.

مراجع

- [1] D. Burgreen, F.R. Nakache , **J. phys. Chem. 68 (1964) 1084.**
- [2] C. L. Rice , R. Whitehead. **J . phys. Chem. 69 (1965) 4017.**
- [3] S. Levine , J . R . Marriott , G . Neale , N . Epstein . (1975) **J . Colloid Interface Sci . 52 136.**
- [4] W. B. J . Zimmerman . (2006) “ Metaphysics modeling. With finite element method world Scientific Publication” **New Jersey.**
- [5] K. A. Sharp , B. Honig .(1990)“ Electrostatic interactions in macromolecules-Theory and applications , Annual Review of Biophysics Chemistry 19” pp **301-332.**
- [6] D. Q . Li . (2008) “ Encyclopedia of Microfluidics and Nanfluidics” **Springer-Verlag , New York ,.**
- [7] D. Q . Li .(2004) “ Electro kinetics in Microfluidics ” **Academic , oxford.**
- [8] J . H . Link Masliyah .(2006) “ Electrokinetic and Colloid Transport phenomena ” **Wiley – Inter science , Hoboken.**
- [9] W.D. Bancroft .(1926)“ Applied Colloid chemistry General theory” **Mc Graw- Hill Book Company , New York.**
- [10] P . K . Wong , T . H . Wang , J . H . Deval , C . M . Ho .(2004)“ Electro kinetics in micro devices for biotechnology applications ” **IEEE – ASME Transactions on Mechatronics , 9**, pp **366- 376 .**
- [11] H . A . Stone , A . D . Strooch , A . Ajdari .(2004) “ Engineering flows in small devices: Microfluidics toward a lab-on-a- chip” **Annual Review of Fluid Mechanics , 36** , pp **381- 411.**
- [12] T.M . squires , S . R . Quake . (2005) “ Microfluidics : Fluid physics at the nanoliter scale ” **Reviews of Modern Physics , 77** , pp **977- 1026.**
- [13] C . Y . Wang . (2004) “ Fundamental models for Fuel cell engineering ” **Chemical Reviews, 104** , pp **4727-4765.**
- [14] G . Karniadakis , A . Beskok , N . Aluru . (2005) “ Microflows and nano flows fundamentals and simulation ” **Springer , New York .**

- [15] M . Holst , N . Baker , F . Wang .(2000) “ Adaptive multi level Finite element solution of the Poisson- Boltzmann equation I . Algorithms and examples ” **Journal of computational Chemistry** , 21 , pp 1319-1342.
- [16] D . Q . Li .“ Electro- Viscous effects on pressure– driven liquid flow in microchannels ” **Colloids and surfaces A –**
- [17] Z . L . Guo , T . S . zhao Y . Shi . (2005) “ A lattice Boltzmann algorithm for electro-osmotic flows in microfluidic devices ” **Journal of chemical physics** , 122 .
- [18] J . K . Wang , Z . X . Li .(2006) “ Lattice Poisson – Boltzmann simulations of electro-osmotic flows in micro / nano channels” **Journal of Colloid and Interface science** , 296 , pp 729- 736.
- [19] L . Chen , M . J . Holst , J . C . Xu .(2007) “ the Finite element approximation of the nonlinear Poisson – Boltzmann equation ” **SIAM Journal on Numerical Analysis** , 45 , pp 2298-2320.
- [20] Y . Shi , T . S . Zhao , Z . L . Guo .(2008) “ Lattice Boltzmann simulation of thermal electro-osmotic flows in micro/ nano channels ” **Journal of Computational and Theoretical Nanoscience** , 5 , pp 236- 246.
- [21] L . M . Fu , J . Y . Lin , R . J . Yang .(2003) “ Analysis of electro – osmotic flow with step change in zeta potential ” **Journal of Colloid and Interface Science** , 258 , pp 266 – 275.
- [22] R . J . Yang , L . M . Fu , C . C . Hwang .(2001) “ Electro – osmotic entry flow in a microchannel ” **Journal of Colloid and Interface Science** , 244 , pp 173- 179.
- [23] E . Y . K . Ng , S . T . Tan .(2007) “ Study of EDL effect on 3-D developing flow in microchannel with Poisson – Boltzmann and Nernst – Planck models ” **International Journal for Numerical Methods in Engineering** , 71 , pp 818- 836.
- [24] H . M . Park , J . S . Lee , T . W . Kim .(2007) “ Comparison of the Nernst – Planck model and the Poisson – Boltzmann model for electro – osmotic flows in microchannel ” **Journal of Colloid and Interface Science** , 315 , pp 731- 739.

- [25] Z . Chen .(2004) “ Comparison of the mobile charge distribution models in mixed ionic – electronic conductors ” **Journal of the Electro chemical Society** , 151 , pp A 1576 – A 1583.
- [26] B . Z . Lu , Y . C . Zhou , G . A. Huber , S . D . Bond , M . J . Holst , J . A . Mc Cammon .(2007) “ Electro diffusion : a continuum modeling framework for bimolecular system with realistic spatiotemporal resolution ” **Journal of Chemical physics** , 127 , Article no . 135102.
- [27] D . Hlush kou , D . Kandhai , U . Tallarek .(2004) “ Coupled Lattice Boltzmann and Finite- difference simulation of electroosmosis in microfluidic channels ” **International Journal for Numerical Method in fluids** , 46 , pp 507- 532.
- [28] M . Wang , N .Pan , J . K . Wang , S . Y . Chen .(2007) “ Lattice Poisson – Boltzmann Simulation of electro-osmotic flows in charged anisotropic porous media ” **Communications in computational physics** , pp 1055- 1070.
- [29] X . He , N . Li .(2000) “ Lattice Boltzmann Simulation of electro chemical systems ” **Computer physics Communications** , 129 , pp 158- 166 .
- [30] Guo . ZL , Zhao TS , and shi Y.(2005) “ A Lattice Boltzmann algorithm for electro – osmotic flows in microfluidic devices ” **Journal of Chemical physics . (In press)**
- [31] Warren PB . (1997) “ Electroviscous transport Problems via Lattice – Boltzmann ” **International Journal of Modern physics C. 8 (4) : pp 889- 898.**
- [32] Jinku Wang , Morgan Wang and Zhixin Li .(2006) “ Lattice Poisson – Boltzmann Simulations of Electro- osmotic flows in Microchannels ” **Journal of Colloid and Interface Science . 296 . (2) : pp 729 – 736.**
- [34] Morgan Wang , Jinku Wang and Shiyi Chen .(2007) “ Roughness and caviations effects on electro – osmotic flow in rough Micro channels using the Lattice Poisson- Boltzmann methods ” **Journal of computational physics** , 226 , pp 836- 851 .
- [35] Y . Q . Zu . Y . Y . Yan .(2006) “ Numerical Simulation of Electro osmotic flow near Earthworm Surface ” **Journal of Bionic Engineering** , 3 , pp 179-186 .

[36] G . H . Tang , X . F . Li , Y . L . He , W . Q . Tao .(2009) “ Electro osmotic flow of non – Newtonian fluid in Microchannels ” **Journal of Non – Newtonian Fluid Mechanics** , 157 , pp 133- 137.

[37] Qian , Y . H . d Humieres , D . , Lallemand , P.(1992) “ Lattice BGK models for Navier stokes equation ” **Europhys Letter** , Vol 17 , pp 479- 484 .

[38] Mohammad A . A . (2011) “ Lattice Boltzmann Method : fundamental and engineering applications with computer codes ” **Springer** .

[39] Ladd A . J . C . (1993) “ Numerical Simulation of particular Suspensions via a discretized Boltzmann equation . Part I . theoretical Foundation ” **J . Fluid . Mech** , 271 , pp 285 -309 .

Abstract:

In this study , numerical investigation of electro-osmotic flows in micro-scale channels are studied using lattice Boltzmann method for static properties.

The governing equations are solved with lattice-Boltzmann method and every stage is simulated through iteration procedure.

The equations in question are Navier-stokes, Poisson-Boltzmann and ionic density distribution equations. All physical properties for ionic fluid are considered as constants. The temperature is also considered as a constant parameter during the entire procedure (T=273 k). The boundary conditions for geometry at hand are the alternative boundary condition for flow equation and ionic density.

The variation of those parameters which has an effect on the output is considered in this study including: ζ , E, D_1, D_2, Z_1, and Z_2.

With the changes in electrical potential of channel walls (ζ) it can be seen that electrical potential will increase in the negative direction following the increase of absolute amount for (ζ).

Changes associated with ionic distribution coefficient, ionic concentration ratio and external electrical field on electrical potential profile are negligible.

Yet the same variations have significant impact on the velocity profile. Also, the velocity field is increased with the increase of external electrical field. It can be said regarding to ionic concentration ratio that among different ionic ratios 1:1 will result in the minimum velocity in the channel.

Keywords: electro-osmotic flow, lattice Boltzmann, micro channel



**University of Shahrood
Faculty of Mechanical Engineering
Department of Energy Conversion**

**Numerical simulation of Electroosmotic Flow in a
microchannel using lattice Boltzmann Method**

Sara Harati

Supervisor:

Dr. Mohammad Hassan Kayhani

Consulting Advisor:

Dr. Mohsen Nazari

June 2014