

Amirkabir Journal of Mechanical Engineering

Amirkabir J. Mech. Eng., 52(7) (2020) 439-442 DOI: 10.22060/mej.2019.15310.6093

Investigation of Flow in Microchannels with Superhydrophobic Surfaces Using Hybrid Direct Simulation Monte Carlo-Navier-Stokes Method with Information Preservation Approach

A. Babakhani and A. Amiri-Jaghargh*

Department of Mechanical Engineering, Razi University, Kermanshah, Iran

ABSTRACT: In recent years, superhydrophobic surfaces have received significant attention due to properties such as drag reduction and self-cleaning. A superhydrophobic surface can be made by grooving the wall. In this case, the flow of gas caught in grooves may represent the rarefied flow. Therefore, particle-based approaches such as direct simulation Monte Carlo should be employed to simulate the flow. In this paper, laminar flow in superhydrophobic microchannels with ribs and cavities aligned perpendicular to the channel axis is investigated using a hybrid direct simulation Monte Carlo-Navier-Stokes method. Also, information preservation technique is employed to reduce statistical fluctuations of the direct simulation Monte Carlo method. The effects of the length of the cavity on the flow parameters such as effective slip length, and velocity slip are investigated and the results are compared with the simplified method of using Navier-Stokes equations with shear-free boundary condition as the gas-liquid interface. It is shown that the differences between the hybrid method and shear-free solution increase as the shear-free fraction increases. However, the difference is less than 6% for cases studied in this work. Therefore, it is acceptable to use the shear-free approach to reduce computational costs. Especially for Fc < 0.2 where the difference is less than 3%.

1. INTRODUCTION

Superhydrophobic surfaces can be made by fabricating micro/nano grooves and cavities on hydrophobic surfaces. When a superhydrophobic surface is in contact with liquid, it will not penetrate the cavities due to its surface tension. Therefore, a two-phase flow occurs over these surfaces including the main liquid flow and a gaseous vortex flow in cavities. For simplicity, most of the researches model the gaseous flow with a simple shear-free boundary condition at the gas-liquid interface. Lauga and Stone [1] solved the Stokes flow in circular pipes considering two different configurations of longitudinal and perpendicular ribs on the wall. They modeled the surface by the periodical distribution of shear-free and no-slip regions. Chen et al. [2] applied the shear-free approach to study the effect of phase shift of grooves on the effective slip length. On the other hand, some investigators solve the gaseous flow as well to achieve more accurate results. In this approach, the equality of velocity and shear stress at the interface is used to couple the liquid flow in the microchannel core and the gaseous flow within cavities. Davies et al. [3] explored the flow in Two-Dimensional (2D) microchannels with superhydrophobic engineered surfaces that exhibit microrib/cavities oriented normal to the flow direction. They reported a maximum deviation of 6% between the results of shear-free and hybrid Accepted: 14/04/2019 Available Online: 19/05/2019 **Keywords:** Hybrid direct simulation Monte Carlo-Navier-Stokes method Direct simulation Monte Carlo Information preservation method Rarefied flow Superhydrophobic surfaces

Review History:

Received: 25/11/2018

Revised: 23/02/2019

approaches. Gaddam et al. [4] studied the effects of the shape of cavities over a superhydrophobic surface on the postponing of the Cassie to Wenzel state transition. They showed that the behavior of trapped vortex in the cavity affects the transition remarkably.

In all the available studies, the gaseous flow is considered a continuum. However, based on the dimensions of microcavities it is expected that the gaseous flow lay in the rarefied flow regime. In this case, it is necessary to use particle-based methods such as Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) and a hybrid NS-DSMC technique should be utilized [5]. It is worth noting to emphasize that the DSMC method should be accompanied with Information Preservation (IP) technique so that it can demonstrate very low-speed vortex flow in the cavities.

In the present work, flow in microchannels with superhydrophobic walls is simulated using a hybrid NS-DSMC technique. The core liquid flow in the channel is solved using continuum based Navier-Stokes solvers while the trapped rarefied gaseous flow in the cavity is solved using DSMC-IP method. Based on the best knowledge of the authors, hybrid NS-DSMC technique is not performed so far to solve the flow over superhydrophobic surfaces. Using DSMC-IP method, the scheme applied in this study is more accurate rather than the available works which consider the gas medium as a continuum.

*Corresponding author's email: amirij@gmail.com



Copyrights for this article are retained by the author(s) with publishing rights granted to Amirkabir University Press. The content of this article \odot is subject to the terms and conditions of the Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY-NC 4.0) License. For more information, please visit https://www.creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/legalcode.

2. METHODOLOGY

The geometry of the problem is shown in Fig. 1. The channel length is prefixed to $L=10\mu$ m, and the cavity aspect ratio Zc=hc/Wc is preset to $Z_c=1$.

The constant property incompressible form of Navier-Stokes Equations is solved for water flow in the channel using Comsol Multiphysics 5.2.a software. The pressure drop along the channel is assumed to be 1 kPa for all cases. For gas-liquid interface, the equality of velocities, and shear stresses are applied. The DSMC-IP method is used to simulate gaseous flow in the cavity. The flow Knudsen number is in the range of 0.0058<*Kn*<0.026. The gas is assumed to be Nitrogen, N₂ at 293K. The hybrid NS-DSMC method algorithm is as follows:

- The procedure starts using an approximate slip length. It can be shown that the solution is independent of the initial guess.
- 2) Liquid flow is solved using NS equations.
- 3) Flow velocity on the gas-liquid interface is calculated.
- Gaseous flow in the cavity is solved using DSMC-IP method with lid velocity from step 3.
- 5) From the DSMC results, the shear stress at the interface, as well as slip length, are calculated.
- 6) Steps 2-5 are repeated until convergence.



Fig. 1. Microchannel with the superhydrophobic wall



Fig. 2. Variation of streamwise velocity profiles of liquid flow for Re=150, $F_c = 0.5$ and $L/D_h = 0.255$

3. RESULTS AND DISCUSSION

Fig. 2 shows the velocity profile for liquid flow over the gas-liquid interface at three positions of $x/W_c = 0$, $x/W_c = 0.5$, and $x/W_c = 0.9$ along with the channel. The normal velocity gradient at the interface varies significantly along with the flow. However, velocity profiles are nearly the same in the core flow. The slip-velocity increases along the interface to reach its maximum after $x/W_c = 0.5$ and then decreases. With the increase of F_c , the position of maximum slip-velocity approaches downstream so that it happens at $x/W_c = 0.53$ and 0.7 for $F_c = 0.2$ and 0.9 respectively.

This manner is also shown in Fig. 3, where the variation of slip velocity along the interface is shown for various F_c at *Re*=150. For greater F_c , the flow has more time to accelerate along with the interface, which leads to a nearly fourfold increase in the maximum value of slip-velocity with the increase of F_c from 0.2 to 0.9.

Variation of effective slip length versus F_c is shown in Fig. 4 for both the hybrid and the shear-free approaches. The effective slip length increases by increasing F_c . The deviation between to approaches is more significant for grater F_c so that it reaches to 5.2% at $F_c=0.9$.



Fig. 3. The effect of the shear-free fraction on the interface velocity distribution at *Re*=150



Fig. 4. The effect of the shear-free fraction on the effective slip length at *Re*=150

4. CONCLUSION

In this study, laminar flow in a 2D microchannel with superhydrophobic walls is investigated. Two approaches are used for the simulation of the flow: a) simultaneous solution of the rarified gas flow in the microcavity by the DSMC-IP method and continuum liquid flow in the microchannel by the finite element method; b) simply, applying the shearfree boundary condition as the gas-liquid interface and just solving the liquid flow. The results show that:

1. The slip velocity at the interface is variable, and its maximum happens around the middle of the interface, which moves downstream by increasing the shear-free fraction. So, it shifts from $x/W_c = 0.53$ to $x/W_c = 0.7$ as F_c increases from 0.2 to 0.9.

2. The velocity at the gas-liquid interface increases with increasing the shear-free fraction. A fourfold increase in the maximum slip velocity is seen as the F_c increases from 0.2 to 0.9.

3. The accuracy of the shear-free approach decreases as the shear-free fraction increases; so that a deviation of 5.2% is seen at F_c =0.9 in comparison with the hybrid approach.

However, to reduce computational costs, the shear-free approach can be employed for small F_c at the cost of losing some accuracy, say 3% at $F_c = 0.2$.

REFERENCES.

- E. Lauga, H.A. Stone, Effective slip in pressure-driven Stokes flow, Journal of Fluid Mechanics, 489 (2003) 55-77.
- [2] Y. Chen, W. Ren, X. Mu, F. Zhang, Y. Xu, Flow inside Micro-Channel Bounded by Superhydrophobic Surface with Eccentric Micro-Grooves, World Academy of Science, Engineering and Technology, International Journal of Mechanical, Aerospace, Industrial, Mechatronic and Manufacturing Engineering, 11(9) (2017) 1567-1572.
- [3] J. Davies, D. Maynes, B. Webb, B. Woolford, Laminar flow in a microchannel with superhydrophobic walls exhibiting transverse ribs, Physics of fluids, 18(8) (2006) 087110.
- [4] A. Gaddam, A. Agrawal, S.S. Joshi, M. Thompson, Utilization of cavity vortex to delay the wetting transition in one-dimensional structured microchannels, Langmuir, 31(49) (2015) 13373-13384.
- [5] D. Hash, H. Hassan, Assessment of schemes for coupling Monte Carlo and Navier-Stokes solution methods, Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 10(2) (1996) 242-249.

This page intentionally left blank

نشریه مهندسی مکانیک امیرکبیر

نشریه مهندسی مکانیک امیرکبیر، دوره ۵۲، شماره ۷، سال ۱۳۹۹، صفحات ۱۷۴۱ تا ۱۷۵۶ DOI: 10.22060/mej.2019.15310.6093



بررسی جریان درون میکروکانالهای با سطوح فوق آبگریز با رهیافت حل ترکیبی معادلات ناویر –استوکس و روش شبیهسازی مستقیم مونتکارلو– نگهداری اطلاعات

علی باباخانی، علی امیری جاغرق* گروه مکانیک، دانشکده فنی مهندسی، دانشگاه رازی، کرمانشاه، ایران

تاریخچه داوری: دریافت: ۰۴–۹۹–۱۳۹۷ بازنگری: ۰۴–۱۲–۱۳۹۷ پذیرش: ۲۵–۱۰–۱۳۹۸ ارائه آنلاین: ۲۹–۲۰–۱۳۹۸

کلمات کلیدی: حل ترکیبی جریان رقیقشده شبیهسازی مستقیم مونتکارلو روش نگهداری اطلاعات سطوح فوق آبگریز خلاصه: استفاده از سطوح فوق آب گریز در میکروکانال ها به واسطه کاهش اثر نیروهای سطحی کاربرد فراوان دارد. جریان گازی درون شیار این سطوح با توجه به فشار گاز و ابعاد میکروحفره ممکن است در محدوده جریان رقیق شده باشد. لذا باید از روش های ذره-مبنا برای حل جریان گازی استفاده شود. در این مقاله با استفاده از حل ترکیبی شبیه سازی مستقیم مونت کارلو و ناویر-استوکس جریان آرام درون میکروکانال فوق آب گریز با شیارهای عمود بر جریان مطالعه شده است. از آنجا که سرعت جریان گازی پایین است، برای کاهش نوسانات حل شبیه سازی مستقیم مونت کارلو، از روش نگهداری اطلاعات استفاده شده است. اثر ابعاد میکروحفره روی پارامترهای جریان مانند طول لغزش موثر، سرعت لغزشی و پروفیل سرعت با استفاده شده است. اثر ابعاد میکروحفره روی پارامترهای جریان مانند طول لغزش موثر، سرعت لغزشی آب-هوا، مقایسه شده است. این بررسی نشان می دهد که هرچند با افزایش کسر برش آزاد اختلاف نتایج دو رهیافت افزایش می یابد، اما این اختلاف در شرایط مورد بررسی در این مطالعه همواره کمتر از ۶ درصد است. بنابراین با هدف کمتر از ۲۰/۲ که میزان اختلاف به کمتر از ۳ درصد کاهش می باید.

۱– مقدمه

با گسترش دانش جریان در ابعاد میکرو و نانو و به دنبال آن توسعه فنآوریهای مورد نیاز در این زمینه، امروزه شاهد پیدایش شاخه جدیدی در علم مکانیک سیالات هستیم که موضوع آن ساخت میکرو/ نانو ابزارها میباشد. جزء اصلی میکرو/نانو ابزارها، میکروکانالها هستند که برقراری جریان در آنها مستلزم اعمال گرادیان فشارهای بالایی است. به همین دلیل تکنیکهای مختلف جهت کاهش این گرادیان فشار، همواره مورد توجه پژوهشگران بوده است. از جمله میتوان به استفاده از سطوح فوق آب گریز اشاره کرد. به لحاظ فنی، سطح فوق آب گریز به سطحی گفته میشود که زاویه تماس استاتیکی آن با مایع بیش تر از ۱۵۰ درجه باشد [۱]. سطوح فوق آب گریز را میتوان با ایجاد زبری و ساختارهای میکرو/نانو بر روی سطح آب گریز با انرژی مطحی پایین ساخت [۲]. این ساختارهای میکرو/نانو در شکلهای مختلفی بر روی سطوح ایجاد میشوند؛ مانند میکروتیرهای مربعی،

* نویسنده عهدهدار مکاتبات: amirij@gmail.com

تراشیده می شوند. اگر قطرهای بر روی سطوح فوق آبگریز قرار بگیرد کشش سطحی مانع از نفوذ قطره به داخل حفرهها می شود. به این حالت، یعنی خیس نشدن حفره، حالت کیسی-بکستر گفته می شود که نمایش شماتیک آن در شکل ۱ (الف) نشان داده شده است. اما اگر فشار مایع به حدی زیاد باشد که بر کشش سطحی غلبه کند، مایع به داخل حفره نفوذ کرده و حفره خیس می شود که به این حالت شرایط ونزل گفته می شود [۲] (شکل ۱ (ب)).

فوق آبگریز کردن سطوح داخلی کانالها و مجاری میتواند هزینه انتقال مایعات را بهطور چشمگیری کاهش دهد. همچنین با فوق آبگریز کردن بدنه شناورها میتوان مصرف سوخت و قدرت مانور آنها را بهبود بخشید. در صورت استفاده از پوششهای فوق آبگریز روی سطوح فلزی، به علت محدود شدن برهمکنش بین سطح فلز و محیط خورنده، میتوان مقاومت فلز در مقابل خوردگی را افزایش داد [۳]. در مناطق سردسیر میتوان با استفاده از پوششهای فوق آبگریز از تجمع آب بروی سطوح و در نتیجه یخزدگی آنها جلوگیری کرد [۴]. همچنین با افزودن پوشش فوق آبگریز به سطوح

Creative Commons License) حقوق مؤلفین به نویسندگان و حقوق ناشر به انتشارات دانشگاه امیرکبیر داده شده است. این مقاله تحت لیسانس آفرینندگی مردمی (Creative Commons License) کی کی در دسترس شما قرار گرفته است. برای جزئیات این لیسانس، از آدرس https://www.creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/legalcode دیدن فرمائید.



شکل ۱: حالتهای خیسشوندگی سطح فوق آبگریز Fig. 1: Wetting states on the superhydrophobic surfacea) Cassie-Baxter model, b) Wenzel model

و یا با مهندسی ریزساختار سطح اجسام میتوان به آنها خاصیت خودتمیزشوندگی داد. چنین سطوحی در بسیاری از صنایع مانند صنعت نساجی، صنعت اتومبیلسازی، صنایع نوری و پوششهای ساختمانی کاربرد دارند.

جریان روی سطوح فوق آبگریز، شامل یک فاز مایع که جریان اصلی است و یک فاز گازی محبوس در شیارها و حفرهها می شود. اکثر یژوهش گران بهجای بررسی جریان دوفاز، برای سادگی اثر فاز گازی را با شرط مرزی برش آزاد (تنش برشی صفر) مدلسازی کردهاند. لاگا و استون [۵] جریان خزشی را در کانال دایروی فوق آب گریز مطالعه کردند. در این مطالعه اثر جهت گیری دندانه و حفرهها در راستای جریان و یا عمود بر آن با اعمال شرط مرزی عدم برش روی دیواره کانال به عنوان سطح مشترک گاز-مایع، بررسی شد. مارتل و همکاران [۶] عملکرد سطوح فوق آبگریز را در جریان آشفته با استفاده از روش شبیهسازی مستقیم عددی ٔ بررسی کردند. در این مطالعه بهجای سطح مشترک گاز-مایع از شرط مرزی برش آزاد استفاده شده است. تئو و خو [۷ و ۸] با مطالعه جریانهای پوازیه و کوئت، اثر انحنای سطح مشترک گاز-مایع را بر رفتار طول لغزش موثر در سطوح فوق آبگریز مطالعه کردند. در این مطالعه نیز سطح مشترک گاز-مایع با شرط مرزی برش آزاد مدل شده است و جهت دندانه و حفرهها در راستای جریان و همچنین عمود بر آن در نظر گرفته شده است. چن و همکاران [۹] در مطالعه جریان درون میکروکانال دارای دندانه و حفرههای عمود بر راستای جریان، با اعمال شرط مرزی برش آزاد برای سطح مشترک گاز-مایع اثر جابهجایی حفرهها را بر اصطکاک جریان بررسی کردند. خراتی-کوپائی و اختری [۱۰] با درنظر گرفتن شار ثابت روی سطح میکروکانال فوق آبگریز و با حل عددی معادلات ناویر استوکس و انرژی و با فرض شرط مرزی

l Direct Numerical Simulation (DNS)

برش آزاد روی سطح تماس گاز-مایع به بررسی عدد پوازیه، عدد ناسلت و عملکرد کلی میکروکانال پرداختند. گدم و همکاران [۱۱] با فرض اینکه وجود آلودگی ناشی از ناخالصی روی سطح تماس گاز-مایع موجب اختلاف نتایج آزمایشگاهی و تئوری میشود، جریان مایع درون میکروکانال را با فرض وجود ذرات جامدی روی سطح تماس گاز-مایع و حل عددی معادلات ناویر-استوکس همراه شرط مرزی برش آزاد روی سطح تماس گاز-مایع مورد بررسی قرار دادند.

اما در برخی مطالعات برای بهبود دقت شبیهسازی، فاز گازی نیز بهصورت همزمان با فاز مایع حل شده است. دیویس و همکاران [۱۲] با حل معادلات ناویر-استوکس، جریان آرام را در میکروکانالهای با ديواره فوق آب گريز بررسي كردند. در اين مطالعه از ساختار دندانه و حفرهای در راستای عمود بر جهت جریان با فرض تکرار شونده بودن هندسه استفاده شده است. جریان در سطح مشترک گاز-مایع به دو روش اعمال شرط مرزی برش آزاد و یا کوپل جریان گاز و مایع مدلسازی شده است. وولفرد و همکاران [۱۳] به صورت تحلیلی و آزمایشگاهی جریان آرام در میکروکانال با سطوح فوق آب گریز شامل دندانه و حفره عمود بر راستای جریان را مورد بررسی قرار دادند و دو حالت خیس شدن و خیس نشدن حفرهها را مقایسه کردند. در بخش تحلیلی این مطالعه نتایج هر دو روش برش آزاد و طول لغزش برای مدلسازی برهمکنش گاز-مایع، از نتایج محققین پیشین گرفته شده و بر اساس آنها عدد یوازیه جریان مورد بحث قرار گرفته است. گدم و همکاران [۱۴] با حل عددی معادلات ناویر ⊣ستوکس برای فاز مایع و گاز و کوپل کردن تنش برشی و سرعت در دو حوزه حل، اثر اشکال مختلف حفره (حفرههای مربعی، ذوزنقهای و U شکل) را در به تأخير انداختن خيس شدن حفره بررسي كردند. آنها نشان دادند که حفرههای ذوزنقهای نسبت به حفرههای با دیواره عمودی عملکرد بهتری در به تأخیر انداختن خیس شدن حفره دارند.

بررسی مقالات در دسترس نشان میدهد در کلیه حالات برای حل جریان گازی از معادلات ناویر-استوکس استفاده شده است که مبتنی بر فرض پیوستگی جریان است. این در حالی است که با توجه به ابعاد بسیار ریز شیارها و حفرهها میتوان نشان داد در فشارهای معمول، ممکن است جریان گازی به صورت رقیقشده باشد. معیار رقت جریان عدد نودسن است که به صورت نسبت مسیر متوسط پویش آزاد مولکولی گاز به طول مشخصه سیستم تعریف میشود.

به این ترتیب برای نودسنهای کوچکتر از ۰/۰۰۱ جریان در رژیم پیوسته قرار داد. در این رژیم معادلات ناویر-استوکس همراه با شرط عدم لغزش به خوبی جریان را مدل می کنند. در محدوده ۱/۱ $<\!K\!n<$ ۲۰۰۱ جریان در رژیم لغزشی، در محدوده ۲۰ $-\!K\!n<$ بریان در رژیم گذار و به ازای Kn < Kn جریان در رژیم آزاد $\cdot/1$ مولکولی قرار می گیرد. در رژیم لغزشی در صورت استفاده از معادلات ناوير استوكس بايد شرط لغزش سرعت در ديوارهها اعمال شود. اما در رژیم گذار و بویژه در رژیم آزاد مولکولی دیگر معادلات ناویر -استوکس قادر به مدلسازی صحیح جریان نیستند و بایستی از معادلات مراتب بالاتر و یا روشهای ذره-مبنا استفاده کرد. یکی از پرکاربردترین روشهای ذره-مبنا که برای حل جریانهای رقیقشده مورد استفاده قرار می گیرد، روش شبیه سازی مستقیم مونت کارلو⁽ (دی اس امسی) است [10]. در این روش، که موفقیت آن بهخوبی تأیید شده است [۱۶]، با مدلسازی حرکت مولکولهای گاز، رفتار جریان شبیهسازی می شود. صحت این روش با استدلال های ریاضی به سختی قابل اثبات است، با این حال تعدادی از محققین [۱۷ و ۱۸] نشان دادهاند که حل از روش شبيهسازى مستقيم مونتكارلو معادل حل معادله بولتزمن برای گازهای تک اتمی با برخوردهای دوتایی است.

در جریان مایع درون کانال فوق آب گریز، جریان مایع در رژیم پیوسته قرار دارد و برای حل آن از معادلات ناویر – ستوکس استفاده میشود؛ در حالیکه جریان گاز محبوس، رقیق شده است و مناسب است با استفاده از روش دی اس امسی حل شود. امیری – جاغرق و باباخانی [۱۹] با استفاده از روش دی اس امسی جریان گاز محبوس در حفره های سطوح فوق آب گریز را مطالعه کردند. در این پژوهش هندسه جریان، حفره ای دارای دیواره متحرک با سرعت از پیش مشخص است و بنابراین به صورت مستقل از جریان مایع حل شده است. آن ها با محاسبه تنش برشی روی دیواره متحرک، پیشنهاد کردند از این مقدار به عنوان شرط مرزی در حل جریان مایع استفاده شود. همان گونه فوق آب گریز حل همزمان جریان مایع و گازی است. به این منظور لازم است تا معادلات ناویر – استوکس و روش شبیه سازی مستقیم مونت کارلو به صورت همزمان به ترتیب برای جریان مایع و گاز حل شوند. استفاده از این نوع حل ترکیبی سابقه ای طولانی دارد. هاش

و حسن [۲۲-۲۰] با استفاده از روشی بر مبنای شار با ترکیب حل دی اس امسی و معادلات ناویر – استوکس^۲، جریان گازی مافوق صوت رقیق شده را مورد بررسی قرار دادند. آکتاس و آلورا [۲۳] موفقیت حل ترکیبی دی اس امسی و ناویر – استوکس را در میکروفیلترها نشان دادند. دربندی و روحی [۲۴] با استفاده از این حل ترکیبی جریان گازی رقیق شده در ابعاد میکرو و نانو اطراف صفحه صاف و سیلندر را مورد بررسی قرار دادند. تیواری و همکاران [۲۵] جریان دوفازی گاز – مایع را برای یک قطره و جریان هوای اطراف آن با ترکیب روش دی اس امسی برای محیط گازی و حل معادلات ناویر – استوکس برای محیط مایع مورد بررسی قرار دادند.

در مدلسازی جریان گازی درون حفرههای سطوح فوق آبگریز، از آنجا که سرعت جریان بسیار پایین است، نتایج روش شبیهسازی مستقيم مونت كارلو همراه با نوسانات آماري قابل توجهي خواهد بود؛ به طوری که ممکن است حتی امکان تشکیل میدان سرعت از نمونه گیری آماری دادههای مولکولی فراهم نشود. برای رفع این مشکل روش نگهداری اطلاعات^۳ پیشنهاد شده است. این روش نخستین بار توسط فن و شن [۲۶] ارائه شد. در این روش به موازات حل دی اس امسی، اطلاعات ماكروسكويي ذرات مدل شده نيز ذخيره مي شود؛ درواقع تمام اطلاعات میکروسکویی ازجمله حرکت و برخورد ذرات با همان روش دىاسامسى مدل مىشود ولى اطلاعات ماكروسكويى با الگوريتم دیگری بهروز میشوند. میدان جریان در این روش با نمونه گیری از اطلاعات ماكروسكوپى بەروز مىشود. لذا پراكندگى آمارى اطلاعات جریانهای کمسرعت به شدت کاهش مییابد. فن و شن [۲۷] این روش را برای جریانهای کم سرعت کوئت، پوازیه و رایلی در رژیمهای لغزش، گذار و آزاد مولکولی اعمال کردند و نشان دادند که روش نگهداری اطلاعات در جریانهای گفتهشده تطبیق بسیار خوبی با حل تحليلى دارد. همچنين نشان دادند كه اين روش هزينه محاسباتى را در مقایسه با روش شبیهسازی مستقیم مونتکارلو چندین مرتبه کاهش میدهد. سان و همکاران [۲۸] با استفاده از حل ترکیبی روش نگهداری اطلاعات و معادلات ناویر -استوکس جریان گازی رقیقشده مادون صوت اطراف صفحه صاف را مورد بررسی قرار دادند.

در این مقاله برای مدلسازی جریان سیال در کانالهای با

¹ Direct Simulation Monte Carlo (DSMC)

² Direct Simulation Monte Carlo- Navier-Stokes (DSMC-NS)

³ Information Preservation (IP)





جریان نیز با توجه به تقارن، نیمی از کانال حل میشود. بنابراین حوزه حل شامل یک کانال مستقیم به طول L و ارتفاع H است که روی دیواره آن شیاری به عرض W_c و ارتفاع h_c ایجاد شده است. طول کانال در کلیه حالات برابر W_r ان $L = 1 \cdot \mu$ در نظر گرفته شده است. فاصله بین دو شیار نیز با W_r مشخص شده است. نسبت ابعادی حفره، $Z_c = h_c/W_c$ مشخص شده است. نسبت با افزایش Z_c به تدریج جریان گازی درون حفره تقویت شده و باعث کاهش تنش برشی وارد شده به جریان مایع در مرز مشترک میشود. Z_c تعییر قابل توجهی در طول لغزش موثر دیده نمی شده به مین علت در این مطلا می در می شیاری درون حفره تقویت شده و باعث تسبت ابعادی موثر دیده به جریان گازی درون حفره تقویت شده و باعث در طول لغزش موثر دیده نمیشود. به همین علت در این مطالعه در مرز مشترک می شود. تمامی موارد Z_c در نظر گرفته شده است.

در این مطالعه سطح مشترک گاز-مایع کاملا صاف فرض شده است در حالیکه به علت کشش سطحی مایع و اختلاف فشار بین دو فاز، این سطح به صورت منحنی خواهد بود. اختلاف فشار مایع و گاز با استفاده از رابطه یانگ-لاپلاس به صورت رابطه (۱) تعریف می شود [۲].

$$\Delta p = \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \tag{1}$$

که در آن σ کشش سطحی، R_1 شعاع انحنای سطح تماس که در آن σ کشش سطحی، R_1 شعاع انحنای سطح تماس گاز-مایع گاز-مایع در صفحه xy میباشند. در سطوح فوق آب گریز با ساختار دندانه و

سطوح فوق آبگریز از ترکیب روشهای دیاسامسی-آییی' و حل معادلات ناویر-استوکس استفاده شده است. جریان مایع درون کانال، که در رژیم جریان پیوسته قرار دارد، با استفاده از معادلات ناویر-استوکس برای جریان آرام تراکمناپذیر مدل شده است. جریان چرخشی گاز محبوس شده در حفرههای روی سطوح نیز، با استفاده از روش دیاسامسی-آیپی و به صورت مولکولی مدلسازی شده است. صفحه تماس گاز-مایع کاملا صاف فرض شده است و در حل جریان مایع، روی این سطح شرط مرزی لغزش اعمال شده است. به این منظور طول لغزش از حل همزمان دی اس امسی-آی پی محاسبه می شود. همچنین در حل جریان گازی، سرعت صفحه تماس از حل همزمان ناویر-استوکس استخراج شده است. بر اساس بهترین بررسیهای نویسندگان، استفاده از این حل ترکیبی در تحلیل سطوح فوق آب گریز تا کنون مورد استفاده قرار نگرفته است. حل انجام شده به روش پیشنهادی در این پژوهش، از یک طرف به علت کوپل کردن حلهای فاز مایع و فاز گازی و از طرف دیگر به علت تحلیل فاز گازی رقیقشده با روش ذره-مبنا، بسیار دقیقتر از حلهای موجود است که همگی مبتنی بر فرض پیوستگی جریان هستند.

۲- مدل ریاضی

طرحواره یک سطح فوق آب گریز با شیارهای مستطیلی در شکل ۲ نشان داده شده است. با توجه به تکراری بودن هندسه، تنها جریان در فاصله بین دو شیار در نظر گرفته می شود. در راستای عمود بر

¹ Direct Simulation Monte Carlo-Information Preservation (DSMC-IP)

حفره عمود بر راستای جریان، در صورتی که طول صفحه در این راستا (عمود بر صفحه کاغذ در شکل ۲) بسیار بلند باشد، میتوان فرض کرد R_2 به سمت بینهایت میل می کند. در این صورت رابطه (۱) به شکل رابطه (۲) در می آید. (۲) $\Delta p = \frac{2\sigma \cos \theta}{W_c}$

که در آن W_c عرض حفره و θ زاویه تماس سطح گاز-مایع با سطح جامد میباشد. لوباتون و سالامون [۳۰] نشان دادند که بیشترین اختلاف فشاری که در ساختار دندانه و حفره میتوان در نظر گرفت که سطح داخلی حفره خیس نشود $\Delta p_{\rm max} = \tau \sigma / W_c$ است که معادل شعاع انحنایی به میزان نصف عرض حفره میباشد. با توجه به رابطه (۲) فرض صاف بودن سطح تماس گاز-مایع که در بسیاری از مطالعات در نظر گرفته شده است، در صورتی به لحاظ فیزیکی برقرار است که اختلاف فشار مایع و گاز برابر صفر شود. اما یبرت و همکاران است که اختلاف فشار مایع و گاز برابر صفر شود. اما یبرت و همکاران نادیده گرفت و سطح را صاف فرض کرد. بنابراین همان گونه که گفته نادیده را با فشار جریان مایع درنظر گرفته شده است. در این صورت شد، در این مطالعه با فرض صاف بودن سطح تماس، فشار گاز درون نظره برابر با فشار جریان مایع درنظر گرفته شده است. در این صورت عدد نودسن جریان گازی از رابطه (۳)، که بر اساس مدل کره سخت تنظیم شده است، محاسبه میشود [۱۵].

$$Kn = \frac{k_B T}{\sqrt{2\pi d^2 p W_c}} \tag{(7)}$$

که در آن r ۱۰-^{$rr} ۱/۳۸× k_B = 1/۳۸× فشار گاز درون حفره، <math>T$ دما و d قطر مولکولی گاز است.</sup>

۳– مدل عددی

با توجه به شکل ۲ محیط محاسباتی شامل دو فاز مایع و گاز است. \overrightarrow{U} در این حل ترکیبی از سرعت جریان در مرز مشترک گاز-مایع، i و تنش برشی روی این سطح، بهعنوان شرط مرزی مشترک در حل جداگانه جریان مایع و گاز استفاده می شود. به این صورت که جریان مایع بالای حفره با استفاده از معادلات ناویر - استوکس و با فرض لغزش روی مرز مشترک حل می شود. سرعت \overrightarrow{U} به دست آمده در سطح تماس گاز-مایع بهعنوان سرعت دیواره بالایی حفره در جریان

گازی استفاده می شود. سپس با استفاده از روش دی اس امسی – آی پی جریان حفره حل شده و از تنش برشی محلی در سطح تماس گاز – مایع برای محاسبه طول لغزش مورد نیاز در حل جریان مایع استفاده شده است. با استفاده از تنش برشی و لغزش به دست آمده جریان مایع دوباره حل شده و این مراحل تا همگرایی نتایج ادامه می یابد.

۱–۳– فاز مایع

حجم کنترل مشخص شده در شکل ۲ قسمتی از یک میدان جریان تکرارشونده است. از آب به عنوان مایع درون میکروکانال استفاده شده است. جریان مایع آرام، پایا و با خواص ثابت است. لذا برای مدلسازی فاز مایع از شکل تراکمناپذیر معادلات ناویر –استوکس با خواص ثابت استفاده شده است.

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \tag{(f)}$$

$$\rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)$$
(Δ)

$$\rho u \frac{\partial v}{\partial x} + \rho v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \tag{(5)}$$

که در آن u و v مولفه های سرعت سیال به ترتیب در جهت های x و χ و χ هستند. p فشار استاتیک، μ لزجت و ρ چگالی سیال است. این معادلات با استفاده از روش المان محدود و توسط نرمافزار تجاری کامسول مولتی فیزیکس نسخه ۵/۲/۵ حل شده است. میدان سرعت با استفاده از المان مرتبه دوم و میدان فشار با استفاده از المان مرتبه سوم منفصل شده است. معادلات گسسته سازی شده با استفاده از روش نیوتون و حل گر موازی مستقیم حل شده است. فرآیند حل آنقدر ادامه داده شد تا مقدار باقیمانده های معادلات پیوستگی و

۱–۱–۳– شرایط مرزی شرایط مرزی استفاده شده در شکل ۳ نشان داده شده است. روی خط مرکزی میکروکانال شرط مرزی تقارن اعمال شده است.

$$v(x,H) = 0, \quad \frac{\partial u(x,H)}{\partial y} = \frac{\partial v(x,H)}{\partial y} = 0$$
 (Y)



شکل ۳ : شبکهبندی حوزه حل و شرایط مرزی سطح فوق آب گریز Fig. 3: Computational domain of the superhydrophobic surface with mesh and boundary condition

در ورودی و خروجی کانال از شرط مرزی پریودیک استفاده شده و افت فشار در طول کانال در کلیه حالات ثابت و برابر $\Delta p =$ ۱ kPa در نظر گرفته شده است.

$$u_{in} = u_{out}, \quad v_{in} = v_{out}, \quad \frac{\partial u}{\partial x_{in}} = \frac{\partial u}{\partial x_{out}}, \quad \frac{\partial u}{\partial y_{in}} = \frac{\partial u}{\partial y_{out}},$$
$$\frac{\partial v}{\partial x_{in}} = \frac{\partial v}{\partial x_{out}}, \quad \frac{\partial v}{\partial y_{in}} = \frac{\partial v}{\partial y_{out}} \qquad (A)$$

روی سطح تماس جامد-مایع شرط عدم لغزش اعمال شده است (رابطه(۹)).

$$u(x,0) = v(x,0) = 0, \quad L - W_c \le x \le L$$
 (9)

و در سطح مشترک گاز-مایع شرط لغزش سرعت در نظر گرفته شده است (رابطه (۱۰)).

$$U_{slip}(x) = b(x) \frac{\partial u(x,0)}{\partial y}$$
 (1.)

در این رابطه b طول لغزش است که از برابری تنش برشی در دو طرف سطح مشترک گاز-مایع (تنش برشی در فاز مایع و گاز)، و بر اساس تنش برشی محلی به دست آمده از حل دی اس امسی، مطابق رابطه زیر محاسبه می شود.

$$b(x) = \frac{\mu c_{slip}(x)}{\tau_{DSMC}(x)}$$
(11)

بدیهی است U_{slip} در رابطه (۱۱) مربوط به اطلاعات تکرار قبل میباشد (بخش ۳–۳ راببینید). همان طور که در رابطه (۱۰) نشان داده شده است، سرعت لغزشی در طول سطح مشترک گاز-مایع متغیر است. به همین دلیل شکل پروفیل سرعت هنگام پیشروی روی حفره به طور مداوم در حال تغییر خواهد بود. بنابراین جملات مومنتوم در معادلات (۵) و (۶) حذف نشده و این معادلات شکل غیر خطی خود را حفظ می کنند. در نتیجه حل این معادلات به صورت عددی انجام می شود.

۲–۳– فاز گازی

فشار متوسط جریان گازی برابر با میانگین فشار استاتیک روی سطح حفره در نظر گرفته شده است. از آنجا که افت فشار در جریان مایع برابر $\Delta p = 1$ kPa است، بسته به عرض حفره مقدار این فشار از حل جریان مایع قابل محاسبه است. به این ترتیب برای حفرههای با عرض T = M و M = P = M مقدار مطلق فشار به ترتیب برابر ۲ اند و ۲ ۱۰۰۵۵۰ به دست میآید (فشار به ترتیب برابر ۲ اند و ۲۰۰۹۰۰ و ۲ سام است). با توجه به این محدوده فشار و با استفاده از رابطه (۳) عدد نودسن جریان گازی در گستره عنوان طول مشخصه جریان استفاده شده است. بنابراین جریان گازی عنوان طول مشخصه جریان استفاده شده است. بانراین جریان گازی



Fig. 4: DSMC-IP flowchart

با دیوارهها از مدل انعکاس نفوذی^۲ استفاده شده است. فرآیند حل آنقدر ادامه داده شده است تا نوسانات آماری موجود در محاسبه خواص ماکروسکوپی به اندازه کافی کوچک شوند.

۲-۲-۳- روش شبیه سازی مستقیم مونت کارلو-نگهداری اطلاعات (دی اس ام سی-آی پی) در روش شبیه سازی مستقیم مونت کارلو مدل سازی جریان در یک دیدگاه ذره - مبنا و از طریق دنبال کردن حرکت مولکول های اطلاعات برای حل آن استفاده شده است. به این منظور روش مذکور توسط نویسندگان به کد عددی DSMC2D که توسط برد^۱ نوشته شده، اضافه شده است [۳۲].

از آنجا که حدود ۷۸ درصد از ترکیب هوا را گاز نیتروژن تشکیل میدهد، برای حل جریان گازی از گاز دو اتمی نیتروژن با جرم مولکولی ۴/۶۵×۱۰^{-۲۶} و قطر ۳^{۰۱-} ۱۰×۴/۱۷ به عنوان سیال درون حفره استفاده شده است. دمای دیوارههای حفره و گاز ثابت و برابر ۲۹۳ K در نظر گرفته شده است و برای مدل سازی برخورد

2 Diffuse Reflection

گاز انجام می شود. ویژگی اصلی این روش، جدا کردن رفتار مولکولی جریان به دو قسمت حرکت آزاد ملکولی و برخورد دوتایی ذرات است. از آنجا که زمان برخورد ذرات در مقایسه با زمان حرکت آنها بسیار ناچیز و قابل صرفنظر کردن است، برخورد ذرات به صورت تغییر آنی بردار سرعت ذرات مدلسازی میشود. به این منظور جفت برخوردی هر ذره بصورت تصادفی از ذرات همجوار انتخاب مى شود لذا براى محدود كردن دامنه انتخاب جفت برخوردى حوزه حل شبکهبندی می شود. این شبکهبندی همچنین برای نمونه گیری اطلاعات میکروسکوپی و به دنبال آن محاسبه خواص ماکروسکوپی جریان مورد استفاده قرار می گیرد. فلوچارت مراحل حل در روش دیاسامسی در شکل ۴ نشان داده شده است. در شروع حل ذرات با استفاده از یک تابع توزیع تصادفی یکنواخت در سلول ها پخش شده و سرعت اولیه ذرات به صورت ضریبی تصادفی از محتمل ترین سرعت ممکن ا تعیین می شود. در هر گام زمانی، ذرات بر اساس قانون دوم نیوتون جابهجا شده و موقعیت جدید آنها مشخص می شود. در این مرحله در صورت عبور ذرات از مرزها، بسته به نوع مرز برهم کنش مربوطه اعمال می شود. پس از تعیین این که هر ذره در کدام سلول قرار دارد، جفتهای برخوردی به صورت تصادفی از ذرات داخل یک سلول انتخاب میشوند. در صورت پذیرش جفت برخوردی توسط مكانيزم رد و قبول، سرعت ذرات بر اساس روابط برخورد الاستيك اصلاح می شود. به این ترتیب یک گام زمانی پایان یافته و این فرآیند تا رسیدن به حالت پایا تکرار می شود. در این بین به ازای هر چند گام زمانی یکبار، اطلاعات میکروسکوپی جریان مانند تعداد ذرات در هر سلول و سرعت ذرات نمونه گیری می شود. در نهایت خواص ماکروسکوپی جریان با میانگین گیری از نمونههای به دست آمده محاسبه می شوند [۳۵-۳۳].

در روش نگهداری اطلاعات علاوه بر اطلاعات میکروسکوپی ذرات، اطلاعات ماکروسکوپی هر سلول نیز نگهداری میشوند. همان طور که در شکل ۴ مشخص است، این روش به موازات حل دی اس امسی انجام میشود و در نتایج آن دخالتی ندارد. در واقع روش نگهداری اطلاعات از دی اس امسی به عنوان یک حامل بهره می گیرد. به این معنی که در طی برخوردهای بین ذرات و یا انعکاس آن ها از دیواره، این روش تاثیری بر محاسبات دی اس امسی ندارد و صرفا به صورت

موازی اطلاعات ماکروسکوپی حفظ شده را بر اساس قوانین بقا و معادله حالت گاز ایدآل (روابط (۱۲) تا (۱۴)) بهروز رسانی میکند [۳۲ و ۳۶].

بقای جرم:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_c) = -\nabla(\rho_c V_c)$$
(۱۲)

بقای مومنتم که پس از سادهسازیهای لازم به صورت زیر در مرآید:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho_c V_i \right) = -\nabla p_c \tag{17}$$

معادله حالت:

$$p_c = \rho_c R T_c \tag{14}$$

زیرنویس *c* و *i* در کلیه روابط بالا به ترتیب نشان دهنده مقدار کمیت مربوط به سلول و ذره است.

۳-۳- روش ترکیبی

با توجه به فرض صاف بودن سطح تماس گاز-مایع مرز محیط پیوسته و رقیقشده مشخص است. جریان مایع بالای سطح تماس با استفاده از معادلات ناویر-استوکس و جریان گازی داخل حفره با استفاده از روش دیاسامسی-آیپی حل میشود. روش ترکیبی شامل مراحل زیر است:

۱) برای سطح مشترک گاز-مایع یک طول لغزش اولیه تقریب
 زده می شود. با بررسی حدس های مختلف مشخص شد که نتایج
 مستقل از حدس اولیه هستند.

۲) جریان مایع با شرط مرزی لغزش در سطح مشترک گاز مایع و با استفاده از معادلات ناویر-استوکس حل می شود.

۳) تابع سرعت سیال روی سطح تماس گاز-مایع مشخص می شود.

۴) جریان گازی با استفاده از روش دی اس امسی-آی پی و با
 اعمال تابع سرعت به دست آمده از مرحله قبل، در مرز مشترک گاز مایع حل می شود.

۵) با توجه به حل دی اس امسی-آی پی تنش برشی و به دنبال
 آن طول لغزش در مرز مشترک گاز-مایع محاسبه می شود.
 ۶) مراحل ۲ تا ۵ تا همگرا شدن حل تکرار می شود.
 نتایج نشان می دهد با ۳ تا ۴ بار تکرار، تغییرات شرایط مرزی در
 مرز مشترک گاز-مایع قابل صرفنظر می شود.

¹ Most Probable Velocity



شکل ۵: اثر اندازه شبکه در میکروکانال بر سرعت روی مرز مشترک گاز–مایع

Fig. 5: Effect of the mesh size on the gas-liquid interface velocity

۴- استقلال از شبکه و اعتبارسنجی
 ۴-۱- استقلال نتایج از شبکه

برای بررسی استقلال نتایج جریان مایع از اندازه شبکه، یک میکروکانال فوق آب گریز با شرط مرزی برش آزاد^۱ روی مرز مشترک \mathcal{D}_c میکروکانال فوق آب گریز با شرط مرزی برش آزاد^۱ روی مرز مشترک $\mathcal{D}_c = W_c / L = -1$ ، در نظر گرفته شده است. شکل ۵ توزیع سرعت روی سطح میکروحفره که با استفاده از سرعت متوسط ورودی میکروکانال بیبعد شده است برای شبکههای سرعت متراکم ۸ در راستای عمود بر جریان (به سمت دیواره) را نشان میدهد.

با توجه به این که نتایج شبکه ۸۰×۸۰ و ۱۴۰×۱۴۰ کاملا بر هم منطبق شدهاند، برای تحلیل کانال از شبکه ۸۰×۸۰ استفاده شده است. برای اطمینان از استقلال نتایج محیط رقیقشده از شبکه، جریان درون میکروحفره برای شبکههای ۲۰×۲۰، ۲۵×۷۵ و ۱۰۰×۱۰۰ مورد بررسی قرار گرفته است. طبق مطالعات الکساندر و همکاران [۳۷] جهت کاهش خطای محاسبات ناشی از بزرگ بودن ابعاد سلول به کمتر از ۱ درصد باید شرط ۳ $\lambda \leq x$ در نظر گرفته شود. که Δx اندازه هر شبکه و λ مسیر متوسط پویش آزاد مولکولی است.

شکل ۶ مؤلفه عمودی و افقی سرعت روش نگهداری اطلاعات را بر روی خط افقی که از وسط میکروحفره، $N/W_c = -1/N$ ، عبور میکند، نشان میدهد. این شکل نشان میدهد نتایج مربوط به شبکه بندی ۲۵×۷۵ و ۲۰۰×۱۰۰ با دقت بسیار مناسبی بر روی هم منطبق



شکل ۶: مؤلفه عمودی و افقی سرعت روش نگهداری اطلاعات بر روی خط تقارن افقی ۵/۹ = y/W_c

Fig. 6: Vertical and horizontal component of DSMC-IP velocity vector on horizontal centerline $y/W_c = 0.5$

 $\Delta x \leq \lambda / 7$ هستند. لازم به ذکر است که در هر دو شبکه شرط ۲ $\lambda > \lambda x$ رعایت شده است. لذا برای جریان درون میکروحفره از شبکه ۷۵×۷۵ استفاده شده است. در شکل ۳ شبکه بندی حوزه حل برای هر دو جریان گاز و مایع نشان داده شده است.

۲-۴- اعتبارسنجی نتایج

جهت اعتبارسنجی و بررسی صحت نتایج، محیط مایع و گاز به صورت جداگانه مورد بررسی قرار گرفته است. به منظور اعتبارسنجی نتایج محیط مایع از رابطه تحلیلی که برای جریان خزشی استوکس با دندانه و حفره عمود بر جهت جریان با فرض عدم برش در سطح تماس آب-هوا توسط لاگا و استون [۵] ارائه شد، استفاده شده است (رابطه (۱۵)).

$$\frac{\lambda}{L} = \frac{1}{2\pi} \ln\left(\sec\left(\frac{F_c\pi}{2}\right)\right) \tag{10}$$

که در این رابطه λ طول لغزش موثر است.

منظور از طول لغزش موثر، طول لغزش متوسطی است که به کل کانال اعمال میشود و اثر آن معادل لغزش در سطح مشترک گاز-مایع و عدم لغزش در قسمت جامد دیواره است. طول لغزش موثر در جریان آرام درون کانال با توجه به فرضیه ناویر که به صورت نسبت لغزش سرعت به نرخ کرنش تعریف میشود، با استفاده از رابطه (۱۶) به دست میآید [۳۸].

¹ Shear Free (SF)



شکل ۸: مقایسه مؤلفه عمودی سرعت در طول محور افقی میکروحفره و مؤلفه افقی سرعت در طول محور عمودی میکروحفره

Fig. 8: Comparison of the vertical component of velocity at the horizontal centerline of the microcavity, and the horizontal component of velocity at the vertical centerline of the microcavity.

 U/U_{lid} میکروحفره، ۵/ w = v/X، و همچنین مؤلفه افقی سرعت، سرعت، ، در طول محور عمودی میکروحفره، ۵/ w = v/X، رسم شده است. همان طور که در شکل مشخص است تطابق قابل قبولی بین نتایج روش نگهداری اطلاعات و حل ناویر –استوکس–فوریه وجود دارد که صحت نتایج به دست آمده از روش حاضر را نشان میدهد.

۵- نتایج

در شکل ۹ میدان مولفه افقی سرعت درون میکروکانال و حفره، $F_c = \cdot/\Delta$ به دست آمده از حل ترکیبی گاز و مایع، برای شرایط Δ/Δ و و ۱۵۰ = Re نشان داده شده است. همچنین در این شکل خطوط جریان نیز ترسیم شده است.

همانطور که شکل ۹ نشان میدهد، اندازه سرعت در حفره بسیار کوچک است؛ به نحوی که نوسانات آماری در روش دیاسامسی آنقدر شدید است که مانع شکلگیری میدان سرعت میشود. به همین دلیل همانگونه که پیشتر توضیح داده شد، برای رفع این مشکل از روش نگهداری اطلاعات استفاده شد. این شکل همچنین نشان میدهد که با توجه به حضور فاز گازی در حفره، سرعت جریان مایع در مرز مشترک گاز-مایع بزرگتر از صفر است. به همین دلیل خطوط جریان در فاز مایع به سمت مرز مشترک منحرف شدهاند. شکل ۱۰ پروفیل سرعت درون میکروکانال و روی سطح تماس



شکل ۷: مقایسه طول لغزش موثر حل تحلیلی و حل عددی با فرض برش آزاد در جریان خزشی

Fig. 7: Comparison of the normalized effective slip length between numerical shear-free solution and analytical solution for creeping flow

$$\lambda = \frac{U_{slip}}{\gamma} = \frac{\mu q L}{2\Delta P H^2} - \frac{H}{3}$$
(19)

که در آن µ لزجت سیال، q نرخ دبی حجمی بر واحد عرض میکروکانال و ΔP اختلاف فشار در طی یک مدول حفره و دندانه است.

شکل ۷ نتایج به دست آمده را برای طول لغزش موثر در جریان خزشی با ۱ $Re = \rho u_{ave}D_h/\mu$) Re = 1 و $D_h = +H$ و کنون میکروکانال، برای مقادیر مختلف کسر برش آزاد F_c نشان میدهد. همانطورکه مشخص است نتایج عددی به دست آمده کاملا بر حل تحلیلی لاگا و استون [۵] منطبق است.

به منظور اعتبارسنجی نتایج محیط گازی و نشان دادن صحت عملکرد کد دی اس امسی – آی پی نتایج با گزارش های جان و همکاران [۳۹] مقایسه شده است. نتایج برای یک میکروحفره مربعی با دیواره بالایی متحرک به عرض ۳ ساس ۲ = w و نودسن ۲۰۵ – Kn برای گاز آرگون ارائه شده است. سرعت دیواره M/s ما U_{hd} و دمای دیواره ها و سیال ۲۷۳ K می باشد. گزارش های جان و همکاران [۳۹] با توجه به عدد نودسن جریان و قرار گرفتن در رژیم لغزش با حل معادلات ناویر – استوکس – فوریه با شرط مرزی لغزش سرعت و پرش دمایی ارائه شده است.

در شکل ۸ مؤلفه عمودی سرعت، V / U_{lid} ، در طول محور افقی



شکل: ۱۰پروفیل سرعت درون میکروکانال روی سطح میکروحفره در $L/D_h = \cdot/۲۵$ و نسبت $F_c = \cdot_l P$ برای سه Re = 10۰ موقعیت جریان (۰/۹، ۵/۰، $x/W_c = \cdot_l \cdot (x/W_c)$



میشود. در این حالت شتاب افزاینده سرعت در فاصله طولانی تری اعمال میشود و در نتیجه سرعت لغزش با افزایش F_c افزایش میابد. با افزایش F_c از ۲/۰ به ۲/۰ موقعیت بیشینه سرعت لغزشی از میابد. با افزایش F_c از ۲/۰ به ۲/۰ موقعیت بیشینه سرعت لغزشی از میاد. با افزایش F_c از ۲/۰ به ۲/۰ موقعیت بیشینه سرعت لغزشی از تر میاد. با افزایش F_c به ۲/۰ میشود. همچنین با آز د مثاهده میشود که موقعیت بیشینه سرعت در حالت برش آزاد مشاهده میشود که موقعیت بیشینه سرعت در حالت برش آزاد مشاهده میشود که موقعیت بیشینه سرعت در حالت برش آزاد مشاهده میشود که موقعیت بیشینه سرعت در حالت برش آزاد در تمام مقادیر F_c به اندازه تقریبا یکسانی نسبت به نتایج حل ترکیبی به سمت انتهای میکروحفره جابهجا میشود. به علت سرعت لغزش بزرگ تر و در نتیجه شتاب بیشتر جریان در حالت برش آزاد نسبت به حل دی اس امسی-ناویر-استوکس، این نتیجه مورد انتظار بود. اختلاف دو رهیافت در موقعیت بیشینه سرعت، حداقل ۸/۰ بود. اختلاف دو رهیافت در موقعیت بیشینه سرعت، حداقل ۸/۰

شکل ۱۲ اندازه سرعت لغزشی بیشینه را به ازای مقادیر مختلف F_c برای حل ترکیبی و همچنین حل مبتنی بر فرض برش آزاد نشان میدهد. همان طور که مشخص است سرعت لغزشی بیشینه با افزایش F_c ، افزایش مییابد که با توجه به گفتههای قبلی ناشی از شتاب افزاینده روی سطح میکروحفره می باشد. با افزایش F_c از T_i و متاب مقدار بیشینه سرعت چهار برابر افزایش مییابد. در هر دو حالت برش آزاد و حل ترکیبی، روند افزایش سرعت لغزشی بیشینه



شکل ۹: میدان مولفه افقی سرعت و خطوط جریان درون میکرکانال و حفره برای حل ترکیبی در ۲٫۵ = ۶ٍ و ۱۵۰ Re =



 $L/D_h = \cdot/100$ ، $F_c = \cdot/2$ ، $K_c = \cdot/2$ ، $K_c = -100$ ، $F_c = -100$ می باشد. پروفیل سرعت در موقعیتهای و جریان آرام (۱۵۰ – Re = 0) می باشد. پروفیل سرعت در موقعیتهای $\cdot M_c = -100$ م $\cdot M_c = -100$ می $W_c = -100$ محم منطبق هرکز میکروکانال پروفیلهای سرعت در مقاطع مختلف بر هم منطبق هستند. همچنین سرعت لغزشی با پیشروی در طول مرز مشترک، ابتدا افزایش یافته و سپس کاهش می یابد. بیشینه سرعت در شرایط مربوط به شکل ۱۰ در -100 مر

شکل ۱۱ موقعیت بیشینه مقدار سرعت را روی مرز مشترک و برای دو حالت حل ترکیبی گاز و مایع و فرض برش آزاد به ازای مقادیر مختلف F_c نشان میدهد. توجه به این نکته ضروری است که با افزایش F_c ، به علت کاهش تنش برشی روی دیواره سرعت متوسط جریان مایع در میکروکانال افزایش مییابد. در این شرایط با کاهش ارتفاع کانال و در نتیجه کاهش D_h عدد رینولدز جریان، در کلیه حالات ثابت و برابر ۱۵۰ Re تنظیم شده است.

همان طور که مشخص است موقعیت بیشینه سرعت لغزشی با افزایش کسر برش آزاد F_c به سمت انتهای سطح مشتر ک جابه جا



شکل ۱۲: اثر کسر برش آزاد بر بیشینه سرعت روی سطح مشترک در Re = ۱۵۰

Fig. 12: Effect of the shear-free fraction on the maximum interface slip velocity at *Re*=150

۵/۲ برش آزاد بیشتر میشود. بیشترین اختلاف در $F_c = \cdot/9$ و برابر F_c و برابر ۲/۵ در میشود. بیشترین اختلاف در F_c های کوچک ناچیز است، به گونهای که در 7/1 = -5 این اختلاف برابر ۳ درصد است. همچنین در این شکل نتایج مربوط به حل دقیق جریان خزشی که با استفاده از رابطه (۱۵) به دست میآید، نشان داده شده است.

همانطور که مشخص است با افزایش عدد رینولدز میزان طول لغزش موثر در F_c های یکسان کاهش یافته است. این کاهش طول لغزش در $F_c = ...$ های بزرگتر جدی تر است به گونه ای که در $F_c = ...$ مقادیر ، طول لغزش موثر ۲۶ درصد کاهش یافته است. در حالی که در مقادیر پایین F_c ، اختلاف طول لغزش موثر کاهش یافته است. این اختلاف طول لغزش موثر در ۲/ $F_c = ...$ برابر ۲/۳ درصد است.

در نتایجی که ارائه شد عدد رینولدز جریان با تغییر نسبت در ادامه با L/D_h ، به صورت مقداری ثابت تنظیم شده است. در ادامه با ثابت نگه داشتن قطر هیدرولیک میکروکانال، ۲۵، – L/D_h ، اثر تغییرات F_c بر عدد رینولدز بررسی میشود. همان گونه که در شکل ۲۵ نشان داده شده است، با افزایش کسر برش آزاد عدد رینولدز جریان افزایش مییابد. با افزایش F_c مقاومت دیواره میکروکانال در مقابل جریان کاهش مییابد. با افزایش مقاومت در مقابل جریان باعث اعث فشار اعمالی بر میکروکانال در در همه حالات یکسان است، کاهش مقاومت در مقابل جریان باعث افزایش سرعت متوسط (دبی جریان) در کانال شده و عدد رینولدز ایش مییابد. نرخ افزایش دبی در F_c های بیشتر، بزرگتر است.



Fig. 11: Effect of the shear-free fraction on the position of maximum interface slip velocity at *Re*=150

مشابه است و اختلاف نتایج حاصله از این دو روش اندک است. در هر صورت اختلاف این دو روش با افزایش F_c افزایش مییابد. این میزان اختلاف در $F_c = \cdot/$ برابر ۲/۷ درصد و در $F_c = \cdot/$ برابر ۵ درصد میباشد.

شکل ۱۳ تغییرات سرعت لغزشی روی سطح میکروحفره را برای مقادیر مختلف F_c نشان میدهد. در این شکل ۱۵۰ Re = ۱۵۰ است و توزیع سرعت برای هردو حالت رسم شده است. محل اتمام هر نمودار روی محور افقی، مقدار F_c مربوطه را نشان میدهد. همان طور که در این شکل هم مشخص است با افزایش F_c توزیع سرعت روی سطح میکروحفره افزایش یافته و بیشینه سرعت در هردو حالت به سمت انتهای سطح میکروحفره جابهجا میشود.

با کاهش F_c اختلاف توزیع سرعت برای حل دی اس امسی-ناویر-استوکس و برش آزاد کاهش مییابد. همچنین در ۲/۲ – $F_c = \cdot/7$ توزیع سرعت روی سطح میکروحفره تقریبا متقارن شده است. که به علت میزان کم اینرسی روی سطح میکروحفره می باشد. در حالی که با افزایش F_c اینرسی سیال افزایش یافته لذا بیشینه سرعت در جهت جریان جابه جا می شود.

شکل ۱۴ تغییرات طول لغزش موثر نسبت به افزایش F_c را نشان میدهد. در این شکل نتایج مربوط به حل ترکیبی و برش آزاد در ۱۵۰ = Re نشان داده شده است. با افزایش کسر برش آزاد، طول لغزش موثر افزایش یافته و میزان اختلاف نتایج حل ترکیبی و

شکل ۱۴: اثر کسر برش آزاد بر طول لغزش موثر میکروکانال در ۱۵۰= *Re* و مقایسه با حل دقیق در جریان خزشی با ۱

شکل ۱۵: اثر کسر برش آزاد بر عدد رینولدز میکروکانال در $L/D_h = */$ ۲۵

Fig. 15: Effect of the shear-free fraction on the microchannel Reynolds number at $L/D_h = 0.25$

۱) سرعت جریان روی سطح تماس متغیر است به نحوی که بیشینه سرعت در میانه سطح مشترک اتفاق میافتد. موقعیت بیشینه سرعت با افزایش کسر برش آزاد به سمت انتهای میکروحفره $F_c = \cdot/7$ استای جریان) جابهجا میشود. بیشینه سرعت در ۲/۲ $r_c = \cdot/7$ در موقعیت ۲۵۳ x/W_c است و با افزایش کسر برش آزاد به

شکل ۱۳: اثر کسر برش آزاد بر توزیع سرعت روی سطح میکروحفره در *Re* = ۱۵۰

Fig.13: The effect of the shear-free fraction on the interface velocity distribution at *Re*=150.

مطابق این شکل در افت فشار ثابت، با افزایش F_c از ۲/۲ به ۲/۹، عدد رینولدز و به طبع آن دبی جریان ۶۰ درصد افزایش مییابد. همچنین در شکل ۱۵ نتایج حل برش آزاد با حل ترکیبی مقایسه شده است. با افزایش F_c دقت مدل برش آزاد اندکی کاهش مییابد به نحوی که اختلاف این حل با حل ترکیبی در ۲/۲ $F_c = -7$ برابر ۲/۲ درصد است و این اختلاف در ۲/۹

۶- نتیجهگیری

در این مقاله جریان آرام درون میکروکانال فوق آب گریز با صفحات موازی بررسی شده است. دندانه و حفرههای درون میکروکانال، عمود بر جهت جریان سیال است. به این منظور دو رهیافت در نظر گرفته شده است: الف) حل همزمان جریان رقیق شده گازی درون میکرو حفره به روش دی اس امسی و جریان پیوسته مایع درون میکروکانال به روش المان محدود (نرمافزار کامسول)؛ ب) مدل سازی اثر میکرو حفره به صورت شرط مرزی برش آزاد روی دیواره میکروکانال. چون سرعت جریان در میکرو حفره بسیار پایین است، به علت نوسانات آماری بسیار بزرگ روش دی اس امسی به تنهایی قادر به حل این جریان نیست. به همین علت از روش دی اس امسی – آی پی استفاده شده است. بررسی نتایچ به دست آمده نشان می دهد:

موقعیت بیشینه سرعت به ۲/۷ موقعیت بیشینه سرعت به $x/W_c = \cdot/۹$ افزایش می یابد. $F_c = \cdot/۹$

۲) مقدار بیشینه سرعت و توزیع سرعت روی سطح میکروحفره با افزایش کسر برش آزاد افزایش مییابد. با افزایش F_c از ۲/۲ به $^{-0.1}$ ، مقدار بیشینه سرعت چهار برابر افزایش مییابد.

۳) بررسی عدد رینولدز نشان میدهد که با فرض ثابت بودن $(T_{A}, L/D_{h})$ با افزایش کسر برش آزاد، عدد رینولدز جریان نیز افزایش مییابد. به گونهای که با افزایش F_{c} از ۲/۰ به ۹/۰، عدد رینولدز و به تبع آن دبی جریان ۶۰ درصد افزایش مییابد. که به علت کاهش مقاومت دیواره میکروکانال در مقابل جریان میباشد.

۴) با افزایش نسبت برش آزاد اختلاف نتایج دو رهیافت در نظر گرفته شده افزایش نسبت برش آزاد اختلاف در نتایج ارائه شده از این دو رهیافت در $F_c = \cdot/9$ برابر ۵/۲ درصد است. در حالی که با کاهش نسبت برش آزاد اختلاف نتایج دو رهیافت کاهش مییابد. بیشترین اختلاف در نتایج ارائه شده در $F_c = \cdot/9$ برابر ۳ درصد است. لذا جهت کاهش هزینههای محاسباتی میتوان در نسبتهای پایین کسر برش آزاد از حل برش آزاد استفاده کرد.

فهرست علائم

علائم انگلیسی

b	طول لغزش، m
d	قطر مولکول گاز، m
D_h	قطر هیدرولیک کانال، m
F_{c}	کسر برش آزاد
Н	ارتفاع میکروکانال، m
h_{c}	ارتفاع حفره، m
$k_{\scriptscriptstyle B}$	ثابت بولتزمن، J/K
Kn	عدد نودسن
р	فشار، Pa
Δp	اختلاف فشار،Pa
q	نرخ دبی حجمی بر واحد عرض میکروکانال، m³/(m.s)
R	شعاع انحنای سطح تماس گاز-مایع، ثابت گازها، J/(kg.K) ،m
Re	عدد رينولدز
Т	دما، K

$$t$$
 زمان، S

 m/s
 مؤلفه سرعت در راستای افقی، w
 m/s
 u
 w
 u
 m/s
 u
 u
 M/s
 u
 u
 m/s
 u
 w
 m/s
 u
 W_c
 m/s
 u
 U
 m/s
 u
 u
 u

منابع

τ

- K.-Y. Law, Definitions for Hydrophilicity, Hydrophobicity, and Superhydrophobicity: Getting the Basics Right, The Journal of Physical Chemistry Letters, 5(4) (2014) 686-688.
- [2] K.A. Stevens, J. Crockett, D.R. Maynes, B.D. Iverson, Two-phase flow pressure drop in superhydrophobic channels, International Journal of Heat and Mass Transfer, 110 (2017) 515-522.
- [3] D. Sebastian, C.-W. Yao, I. Lian, Mechanical durability of engineered superhydrophobic surfaces for anticorrosion, Coatings, 8(5) (2018) 162.
- [4] D.K. Sarkar, M. Farzaneh, Superhydrophobic Coatings with Reduced Ice Adhesion, Journal of Adhesion Science and Technology, 23(9) (2009) 1215-1237.
- [5] E. Lauga, H.A. Stone, Effective slip in pressure-driven Stokes flow, Journal of Fluid Mechanics, 489 (2003)

wetting transition in one-dimensional structured microchannels, Langmuir, 31(49) (2015) 13373-13384.

- [15] G.A. Bird, Molecular gas dynamics, NASA STI/ Recon Technical Report A, 76 (1976).
- [16] G. Bird, Molecular gas dynamics and the direct simulation monte carlo of gas flows, Clarendon, Oxford, 508 (1994) 128.
- [17] W. Wagner, A convergence proof for Bird's direct simulation Monte Carlo method for the Boltzmann equation, Journal of Statistical Physics, 66(3) (1992) 1011-1044.
- [18] K. Nanbu, Direct simulation scheme derived from the Boltzmann equation. I. Monocomponent gases, Journal of the Physical Society of Japan, 49(5) (1980) 2042-2049.
- [19] A. Amiri-Jaghargh, A. Babakhani, Investigation of shear stress on superhydrophobic surfaces considering gaseous flow in microcavities using DSMC-IP method, in: 17th Conference on Fluid Dynamics (FD2017), Shahrood University of Technology, 2017. (In Persian)
- [20] D. Hash, H. Hassan, A decoupled DSMC/Navier-Stokes analysis of a transitional flow experiment, in: 34th aerospace sciences meeting and exhibit, 1996, pp. 353.
- [21] D. Hash, H. Hassan, Assessment of schemes for coupling Monte Carlo and Navier-Stokes solution methods, Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 10(2) (1996) 242-249.
- [22] D. Hash, H. Hassan, D. Hash, H. Hassan, Twodimensional coupling issues of hybrid DSMC/Navier-Stokes solvers, in: 32nd thermophysics conference, 1997, pp. 2507.
- [23] O. Aktas, N. Aluru, A combined continuum/DSMC technique for multiscale analysis of microfluidic filters, Journal of Computational Physics, 178(2) (2002) 342-372.
- [24] M. Darbandi, E. Roohi, A hybrid DSMC/Navier-Stokes frame to solve mixed rarefied/nonrarefied

55-77.

- [6] M.B. Martell, J.B. Perot, J.P. Rothstein, Direct numerical simulations of turbulent flows over superhydrophobic surfaces, Journal of Fluid Mechanics, 620 (2009) 31-41.
- [7] C. Teo, B. Khoo, Flow past superhydrophobic surfaces containing longitudinal grooves: effects of interface curvature, Microfluidics and Nanofluidics, 9(2-3) (2010) 499-511.
- [8] C. Teo, B. Khoo, Effects of interface curvature on Poiseuille flow through microchannels and microtubes containing superhydrophobic surfaces with transverse grooves and ribs, Microfluidics and nanofluidics, 17(5) (2014) 891-905.
- [9] Y. Chen, W. Ren, X. Mu, F. Zhang, Y. Xu, Flow inside Micro-Channel Bounded by Superhydrophobic Surface with Eccentric Micro-Grooves, World Academy of Science, Engineering and Technology, International Journal of Mechanical, Aerospace, Industrial, Mechatronic and Manufacturing Engineering, 11(9) (2017) 1567-1572.
- [10] M. Kharati-Koopaee, M.R. Akhtari, Numerical study of fluid flow and heat transfer phenomenon within microchannels comprising different superhydrophobic structures, International Journal of Thermal Sciences, 124 (2018) 536-546.
- [11] A. Gaddam, A. Agrawal, S.S. Joshi, M.C. Thompson, Slippage on a particle-laden liquid-gas interface in textured microchannels, Physics of Fluids, 30(3) (2018) 032101.
- [12] J. Davies, D. Maynes, B. Webb, B. Woolford, Laminar flow in a microchannel with superhydrophobic walls exhibiting transverse ribs, Physics of fluids, 18(8) (2006) 087110.
- [13] B. Woolford, D. Maynes, B. Webb, Liquid flow through microchannels with grooved walls under wetting and superhydrophobic conditions, Microfluidics and nanofluidics, 7(1) (2009) 121-135.
- [14] A. Gaddam, A. Agrawal, S.S. Joshi, M. Thompson, Utilization of cavity vortex to delay the

simulation of rarefied flow in lid-driven micro/ nano cavities using IP method, Master thesis, Razi University, 2018. (In Persian)

- [33] A. Amiri-Jaghargh, Numerical Investigation of Rarefied Gas Flows in Micro/Nano Geometries using Navier-Stokes Equations and DSMC Approach, PhD thesis, Ferdowsi University of Mashhad, 2014. (In Persian)
- [34] A. Amiri-Jaghargh, E. Roohi, S. Stefanov, H. Nami, H. Niazmand, DSMC simulation of micro/nano flows using SBT–TAS technique, Computers & Fluids, 102 (2014) 266-276.
- [35] A. Amiri-Jaghargh, E. Roohi, H. Niazmand, S. Stefanov, DSMC simulation of low knudsen micro/ nanoflows using small number of particles per cells, Journal of Heat Transfer, 135(10) (2013) 101008.
- [36] Q. Sun, Information preservation methods for modeling micro-scale gas flows, PhD thesis, University of Michigan, 2003.
- [37] F.J. Alexander, A.L. Garcia, B.J. Alder, Cell size dependence of transport coefficients in stochastic particle algorithms, Physics of Fluids, 10(6) (1998) 1540-1542.
- [38] C.-H. Choi, K.J.A. Westin, K.S. Breuer, Apparent slip flows in hydrophilic and hydrophobic microchannels, Physics of fluids, 15(10) (2003) 2897-2902.
- [39] B. John, X.-J. Gu, D.R. Emerson, Investigation of heat and mass transfer in a lid-driven cavity under nonequilibrium flow conditions, Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals, 58(5) (2010) 287-303.

hypersonic flows over nano-plate and micro-cylinder, Internationa Journal for Numerical Methods in Fluids, 72(9) (2013) 937-966.

- [25] S. Tiwari, A. Klar, S. Hardt, A. Donkov, Coupled solution of the Boltzmann and Navier–Stokes equations in gas–liquid two phase flow, Computers & Fluids, 71 (2013) 283-296.
- [26] J. Fan, C. Shen, Statistical simulation of low-speed unidirectional flows in transition regime, in: International symposium on rarefied gas dynamics, 1999.
- [27] J. Fan, C. Shen, Statistical simulation of low-speed rarefied gas flows, Journal of Computational Physics, 167(2) (2001) 393-412.
- [28] Q. Sun, I.D. Boyd, G.V. Candler, A hybrid continuum/ particle approach for modeling subsonic, rarefied gas flows, Journal of Computational Physics, 194(1) (2004) 256-277.
- [29] B. Gruncell, Superhydrophobic surfaces and their potential application to hydrodynamic drag reduction, PhD thesis, University of Southampton, 2014.
- [30] E. Lobaton, T. Salamon, Computation of constant mean curvature surfaces: Application to the gas–liquid interface of a pressurized fluid on a superhydrophobic surface, Journal of colloid and interface science, 314(1) (2007) 184-198.
- [31] C. Ybert, C. Barentin, C. Cottin-Bizonne, P. Joseph, L. Bocquet, Achieving large slip with superhydrophobic surfaces: Scaling laws for generic geometries, Physics of fluids, 19(12) (2007) 123601.
- [32] A. Babakhani, Developing a DSMC code for