



## بررسی جریان درون میکروکانال‌های با سطوح فوق آب‌گریز با رهیافت حل ترکیبی معادلات ناویر-استوکس و روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو - نگره‌داری اطلاعات

علی باباخانی، علی امیری جاغرق\*

گروه مکانیک، دانشکده فنی مهندسی، دانشگاه رازی، کرمانشاه، ایران

### تاریخچه داوری:

دریافت: ۱۳۹۷-۰۹-۰۴  
بازنگری: ۱۳۹۷-۱۲-۰۴  
پذیرش: ۱۳۹۸-۰۱-۲۵  
ارائه آنلاین: ۱۳۹۸-۰۲-۲۹

### کلمات کلیدی:

حل ترکیبی  
جریان رقیق‌شده  
شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو  
روش نگره‌داری اطلاعات  
سطوح فوق آب‌گریز

**خلاصه:** استفاده از سطوح فوق آب‌گریز در میکروکانال‌ها 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 رقیق‌شده باشد. لذا باید از روش‌های ذره-مبنا برای حل جریان گازی استفاده شود. در این مقاله با استفاده از حل ترکیبی شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو و ناویر-استوکس جریان آرام درون میکروکانال فوق آب‌گریز با شیارهای عمود بر جریان مطالعه شده است. از آنجا که سرعت جریان گازی پایین است، برای کاهش نوسانات حل شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو، از روش نگره‌داری اطلاعات استفاده شده است. اثر ابعاد میکروحفره روی پارامترهای جریان مانند طول لغزش موثر، سرعت لغزشی و پروفیل سرعت با استفاده از حل ترکیبی مذکور بررسی و نتایج با حل ساده‌سازی شده برش آزاد روی سطح تماس آب-هوا، مقایسه شده است. این بررسی نشان می‌دهد که هرچند با افزایش کسر برش آزاد اختلاف نتایج دو رهیافت افزایش می‌یابد، اما این اختلاف در شرایط مورد بررسی در این مطالعه همواره کمتر از ۶ درصد است. بنابراین با هدف کاهش هزینه‌های محاسباتی، می‌توان با دقت قابل قبولی از حل برش آزاد استفاده کرد. به‌ویژه در نسبت کسر برش آزاد کم‌تر از ۰/۲ که میزان اختلاف به کمتر از ۳ درصد کاهش می‌یابد.

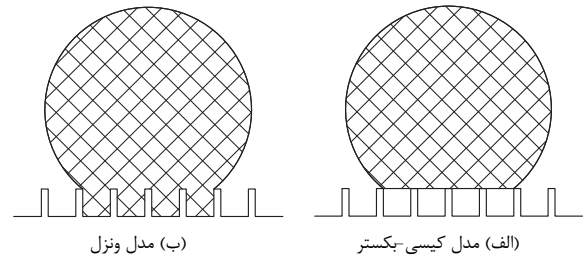
### ۱- مقدمه

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 آب‌گریز اشاره کرد. به لحاظ فنی، سطح فوق آب‌گریز به سطحی گفته می‌شود که زاویه تماس استاتیکی آن با مایع بیش‌تر از ۱۵۰ درجه باشد [۱]. سطوح فوق آب‌گریز را می‌توان با ایجاد زبری و ساختارهای میکرو/نانو بر روی سطح آب‌گریز با انرژی سطحی پایین ساخت [۲]. این ساختارهای میکرو/نانو در شکل‌های مختلفی بر روی سطوح ایجاد می‌شوند؛ مانند میکروتیرهای مربعی، دایره‌ای، دندان-حفره‌ای و غیره که در راستای جریان و یا عمود بر آن

تراشیده می‌شوند. اگر قطره‌ای بر روی سطوح فوق آب‌گریز قرار بگیرد کشش سطحی مانع از نفوذ قطره به داخل حفره‌ها می‌شود. به این حالت، یعنی خیس نشدن حفره، حالت کیسی-بکستر گفته می‌شود 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 می‌شود که به این حالت شرایط ونزل گفته می‌شود [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

\* نویسنده عهده‌دار مکاتبات: amirij@gmail.com



شکل ۱: حالت‌های خیس‌شوندگی سطح فوق آب‌گریز  
**Fig. 1: Wetting states on the superhydrophobic surface (a) 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 می‌شود. اکثر پژوهش‌گران 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 آب‌گریز مطالعه کردند. در این مطالعه اثر جهت‌گیری دندان‌ها 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<sup>۱</sup> 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 پوزایه 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 دندان‌ها 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 دندان‌ها 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 در نظر گرفتن شار ثابت روی سطح میکروکانال فوق آب‌گریز و با حل عددی معادلات ناویر-استوکس و انرژی و با فرض شرط مرزی

1 Direct Numerical Simulation (DNS)

برش آزاد روی سطح تماس گاز-مایع به بررسی عدد پوزایه، 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 دیواره فوق آب‌گریز بررسی کردند. در این مطالعه از ساختار دندان‌ها 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 آب‌گریز شامل دندان‌ها 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 پوزایه جریان مورد بحث قرار گرفته است. گدم و همکاران [۱۴] با حل عددی معادلات ناویر-استوکس برای فاز مایع و گاز و کوپل کردن تنش برشی و سرعت در دو حوزه حل، اثر اشکال مختلف حفره (حفره‌های مربعی، دوزنقه‌ای و U شکل) را در به تأخیر انداختن خیس شدن حفره بررسی کردند. آن‌ها نشان دادند که حفره‌های دوزنقه‌ای 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 رقیق شده باشد. معیار رقت جریان عدد نودسن است که به صورت نسبت مسیر متوسط پویس آزاد مولکولی گاز به طول مشخصه سیستم تعریف می‌شود.

و حسن [۲۲-۲۰] با استفاده از روشی بر مبنای شار با ترکیب حل دی‌اس‌ام‌سی و معادلات ناویر-استوکس<sup>۲</sup>، جریان گازی مافوق صوت رقیق شده را مورد بررسی قرار دادند. آکتاس و آلورا [۲۳] موفقیت حل ترکیبی دی‌اس‌ام‌سی 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 دی‌اس‌ام‌سی 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 مستقیم مونت‌کارلو همراه با نوسانات آماری قابل توجهی خواهد بود؛ به طوری که ممکن است حتی امکان تشکیل میدان سرعت از نمونه‌گیری آماری داده‌های مولکولی فراهم نشود. برای رفع این مشکل روش نگهداری اطلاعات<sup>۳</sup> پیشنهاد شده است. این روش نخستین بار توسط فن و شن [۲۶] ارائه شد. در این روش به موازات حل دی‌اس‌ام‌سی، اطلاعات ماکروسکوپی ذرات مدل شده نیز ذخیره می‌شود؛ در واقع تمام اطلاعات میکروسکوپی از جمله حرکت و برخورد ذرات با همان روش دی‌اس‌ام‌سی مدل می‌شود ولی اطلاعات ماکروسکوپی با الگوریتم دیگری به‌روز می‌شوند. میدان جریان در این روش با نمونه‌گیری از اطلاعات ماکروسکوپی به‌روز می‌شود. لذا پراکندگی آماری اطلاعات جریان‌های کم‌سرعت به شدت کاهش می‌یابد. فن و شن [۲۷] این روش را برای جریان‌های کم‌سرعت 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 تحلیلی دارد. همچنین نشان دادند که این روش هزینه محاسباتی 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 رقیق شده مادون صوت اطراف صفحه صاف را مورد بررسی قرار دادند.

در این مقاله برای مدل‌سازی جریان سیال در کانال‌های با

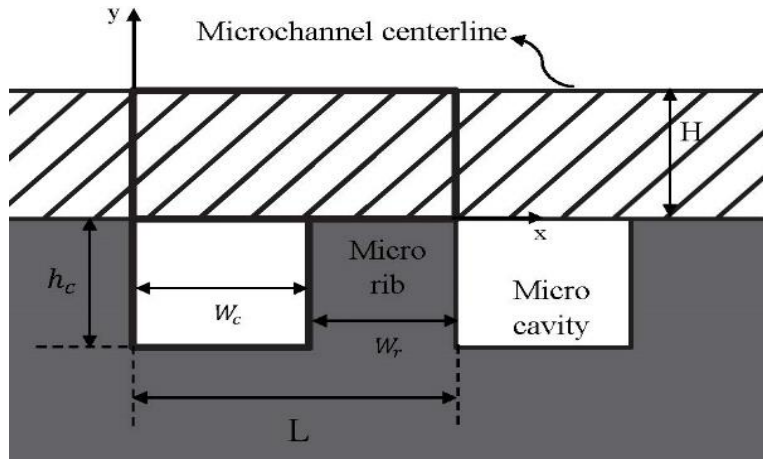
به این ترتیب برای نودسن‌های کوچکتر از  $0.01$  جریان در رژیم پیوسته قرار داد. در این رژیم معادلات ناویر-استوکس همراه با شرط عدم لغزش به خوبی جریان را مدل می‌کنند. در محدوده  $0.1 < Kn < 10$  جریان در رژیم لغزشی، در محدوده  $0.1 < Kn < 10$  جریان در رژیم گذار و به ازای  $Kn > 10$  جریان در رژیم آزاد مولکولی قرار می‌گیرد. در رژیم لغزشی در صورت استفاده از معادلات ناویر-استوکس باید شرط لغزش سرعت در دیواره‌ها 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 رقیق شده مورد استفاده قرار می‌گیرد، روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو<sup>۱</sup> (دی‌اس‌ام‌سی) است [۱۵]. در این روش، که موفقیت آن به خوبی تأیید شده است [۱۶]، با مدل‌سازی حرکت مولکول‌های گاز، رفتار جریان شبیه‌سازی می‌شود. صحت این روش با استدلال‌های ریاضی به سختی قابل اثبات است، با این حال تعدادی از محققین [۱۷ و ۱۸] نشان داده‌اند که حل از روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو معادل حل معادله بولتزمن برای گازهای تک اتمی با برخوردهای دوتایی است.

در جریان مایع درون کانال فوق آب‌گریز، جریان مایع در رژیم پیوسته قرار دارد و برای حل آن از معادلات ناویر-استوکس استفاده می‌شود؛ در حالی که جریان گاز محبوس، رقیق شده است و مناسب است با استفاده از روش دی‌اس‌ام‌سی حل شود. امیری-جاغرق و باباخانی [۱۹] با استفاده از روش دی‌اس‌ام‌سی جریان گاز محبوس در حفره‌های سطوح فوق آب‌گریز را مطالعه کردند. در این پژوهش هندسه جریان، حفره‌ای دارای دیواره متحرک با سرعت از پیش مشخص است و بنابراین به صورت مستقل از جریان مایع حل شده است. آن‌ها با محاسبه تنش برشی روی دیواره متحرک، پیشنهاد کردند از این مقدار به عنوان شرط مرزی در حل جریان مایع استفاده شود. همان‌گونه که پیشتر گفته شد، رهیافت دقیق‌تر برای حل جریان روی سطوح فوق آب‌گریز حل همزمان جریان مایع و گازی است. به این منظور لازم است تا معادلات ناویر-استوکس و روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو به صورت همزمان به ترتیب برای جریان مایع و گاز حل شوند. استفاده از این نوع حل ترکیبی سابقه‌ای طولانی دارد. هاش

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

3 Information Preservation (IP)

1 Direct Simulation Monte Carlo (DSMC)



شکل ۲: طرحواره سطح فوق آب‌گریز شیاردار

Fig. 2: Microchannel with the superhydrophobic wall

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  $L = 10 \mu\text{m}$  در نظر گرفته شده است. فاصله بین دو شیار نیز با  $W_r$  مشخص شده است. نسبت ابعادی حفره،  $Z_c = h_c/W_c$ ، در الگوی جریان گازی موثر است. نسبت ابعادی صفر به معنای آن است که شیاری روی سطح نباشد. 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. گرانسل [۲۹] نشان داد به ازای مقادیر  $Z_c \geq 1$  تغییر قابل توجهی در طول لغزش موثر دیده نمی‌شود. به همین علت در این مطالعه در تمامی موارد  $Z_c = 1$  در نظر گرفته شده است.

در این مطالعه سطح مشترک گاز-مایع کاملاً صاف فرض شده است در حالی که 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 می‌شود [۲].

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

که در آن  $\sigma$  کشش سطحی،  $R_1$  شعاع انحنای سطح تماس گاز-مایع در صفحه  $xy$  و  $R_2$  شعاع انحنای سطح تماس گاز-مایع در صفحه  $yz$  می‌باشند. در سطوح فوق آب‌گریز با ساختار دندانه و

سطوح فوق آب‌گریز از ترکیب روش‌های دی‌اس‌ام‌سی-آی‌پی<sup>۱</sup> 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 کاملاً 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 دی‌اس‌ام‌سی-آی‌پی محاسبه می‌شود. 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 آب‌گریز 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 آب‌گریز 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 می‌شود. در راستای عمود بر

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

گازی استفاده می‌شود. سپس با استفاده از روش دی‌اس‌ام‌سی-آی‌پی 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 می‌یابد.

### 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.

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (4)$$

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

$$\rho u \frac{\partial v}{\partial x} + \rho v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \quad (6)$$

که در آن  $u$  و  $v$  مولفه‌های سرعت سیال به ترتیب در جهت‌های  $x$  و  $y$  هستند.  $p$  فشار استاتیک،  $\mu$  لزجت و  $\rho$  چگالی سیال است. این معادلات با استفاده از روش المان محدود و توسط نرم‌افزار تجاری کامسول مولتی فیزیکس نسخه ۵/۲/a حل شده است. میدان سرعت با استفاده از المان مرتبه دوم و میدان فشار با استفاده از المان مرتبه سوم منفصل شده است. معادلات گسسته‌سازی شده با استفاده از روش نیوتون و حل گر موازی مستقیم حل شده است. فرآیند حل آن‌قدر ادامه داده شد تا مقدار باقیمانده‌های معادلات پیوستگی و مومنوم به کمتر از ۰/۰۰۱ برسد.

### 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.

$$v(x, H) = 0, \quad \frac{\partial u(x, H)}{\partial y} = \frac{\partial v(x, H)}{\partial x} = 0 \quad (7)$$

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 می‌کند. در این صورت رابطه (۱) به شکل رابطه (۲) در می‌آید.

$$\Delta p = \frac{2\sigma \cos \theta}{W_c} \quad (2)$$

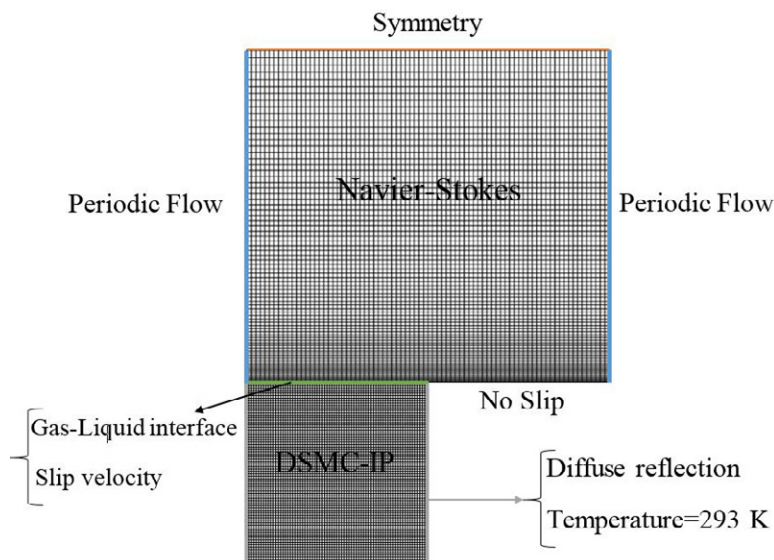
که در آن  $W_c$  عرض حفره و  $\theta$  زاویه تماس سطح گاز-مایع با سطح جامد می‌باشد. لوباتون و سالامون [۳۰] نشان دادند که بیشترین اختلاف فشاری که در ساختار دندان‌ه و حفره می‌توان در نظر گرفت که سطح داخلی حفره خیس نشود  $\Delta p_{\max} = 2\sigma/W_c$  است که معادل شعاع انحنایی به میزان نصف عرض حفره می‌باشد. با توجه به رابطه (۲) فرض صاف بودن سطح تماس گاز-مایع که در بسیاری از مطالعات در نظر گرفته شده است، در صورتی که لحاظ فیزیکی برقرار است که اختلاف فشار مایع و گاز برابر صفر شود. اما ایرت و همکاران [۳۱] نشان دادند که میزان انحنای سطح تماس را تا حدی می‌توان نادیده گرفت و سطح را صاف فرض کرد. بنابراین همان‌گونه که گفته شد، در این مطالعه با فرض صاف بودن سطح تماس، فشار گاز درون حفره برابر با فشار جریان مایع در نظر 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].

$$Kn = \frac{k_B T}{\sqrt{2\pi d^2 p W_c}} \quad (3)$$

که در آن  $k_B = 1/38 \times 10^{-23}$  ثابت بولتزمن،  $p$  فشار گاز درون حفره،  $T$  دما و  $d$  قطر مولکولی گاز است.

### ۳- مدل عددی

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



شکل ۳: شبکه‌بندی حوزه حل و شرایط مرزی سطح فوق آب‌گریز

Fig. 3: Computational domain of the superhydrophobic surface with mesh and boundary condition

بدیهی است  $U_{slip}$  در رابطه (۱۱) مربوط به اطلاعات تکرار قبل می‌باشد (بخش ۳-۳ رابینید). همان‌طور 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 غیرخطی خود را حفظ می‌کنند. در نتیجه حل این معادلات به صورت عددی انجام می‌شود.

### 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  $\Delta p = 1 \text{ kPa}$  است، بسته به عرض حفره مقدار این فشار از حل جریان مایع قابل محاسبه است. به این ترتیب برای حفره‌های با عرض  $W_c = 2 \mu\text{m}$  و  $W_c = 9 \mu\text{m}$  مقدار مطلق فشار به ترتیب برابر  $100900 \text{ Pa}$  و  $100550 \text{ Pa}$  به دست می‌آید (فشار اتمسفر  $100 \text{ kPa}$  در نظر گرفته شده است). با توجه به این محدوده فشار و با استفاده از رابطه (۳) عدد نودسن جریان گازی در گستره  $0.10058 \leq Kn \leq 0.26$  قرار می‌گیرد که در آن از عرض حفره به عنوان طول مشخصه جریان استفاده شده است. بنابراین جریان گازی رقیق شده است و با توجه به سرعت پایین جریان از روش نگه‌داری

در ورودی و خروجی کانال از شرط مرزی پریودیک استفاده شده و افت فشار در طول کانال در کلیه حالات ثابت و برابر  $\Delta p = 1 \text{ kPa}$  در نظر گرفته شده است.

$$u_{in} = u_{out}, \quad v_{in} = v_{out}, \quad \frac{\partial u}{\partial x_{in}} = \frac{\partial u}{\partial x_{out}}, \quad \frac{\partial u}{\partial y_{in}} = \frac{\partial u}{\partial y_{out}},$$

$$\frac{\partial v}{\partial x_{in}} = \frac{\partial v}{\partial x_{out}}, \quad \frac{\partial v}{\partial y_{in}} = \frac{\partial v}{\partial y_{out}} \quad (8)$$

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

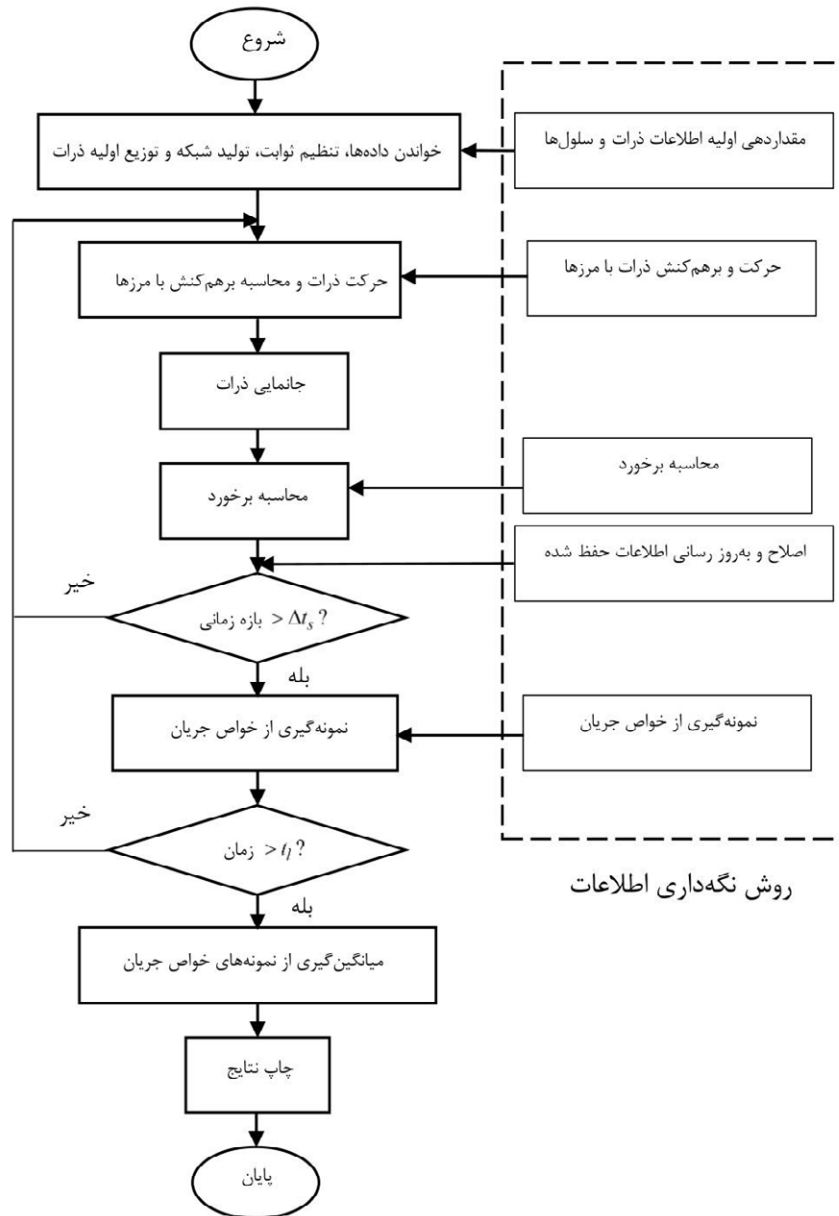
$$u(x, 0) = v(x, 0) = 0, \quad L - W_c \leq x \leq L \quad (9)$$

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

$$U_{slip}(x) = b(x) \frac{\partial u(x, 0)}{\partial y} \quad (10)$$

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 دی‌اس‌ام‌سی، مطابق رابطه زیر محاسبه می‌شود.

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



شکل ۴: الگوریتم روش دی‌اس‌ام‌سی-آی‌پی

Fig. 4: DSMC-IP flowchart

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

۱-۲-۳- روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو-نگهداری اطلاعات (دی‌اس‌ام‌سی-آی‌پی)

در روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو مدل‌سازی جریان در یک دیدگاه ذره-مبنا و از طریق دنبال کردن حرکت مولکول‌های

اطلاعات برای حل آن استفاده شده است. به این منظور روش مذکور توسط نویسندگان به کد عددی DSMC2D که توسط برد<sup>۱</sup> 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  $4.65 \times 10^{-26}$  kg و قطر  $4.17 \times 10^{-10}$  m 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 مدل‌سازی برخورد

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

بقای جرم:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_c) = -\nabla(\rho_c V_c) \quad (12)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_c V_i) = -\nabla p_c \quad (13)$$

معادله حالت:

$$p_c = \rho_c RT_c \quad (14)$$

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 می‌شود. با بررسی حدس‌های 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 می‌شود.

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

۴) جریان گازی با استفاده از روش دی‌اس‌ام‌سی-آی‌پی و با اعمال تابع سرعت به دست آمده از مرحله قبل، در مرز مشترک گاز-مایع حل می‌شود.

۵) با توجه به حل دی‌اس‌ام‌سی-آی‌پی تنش برشی و به دنبال آن طول لغزش در مرز مشترک گاز-مایع محاسبه می‌شود.

۶) مراحل ۲ تا ۵ تا همگرا شدن حل تکرار می‌شود.

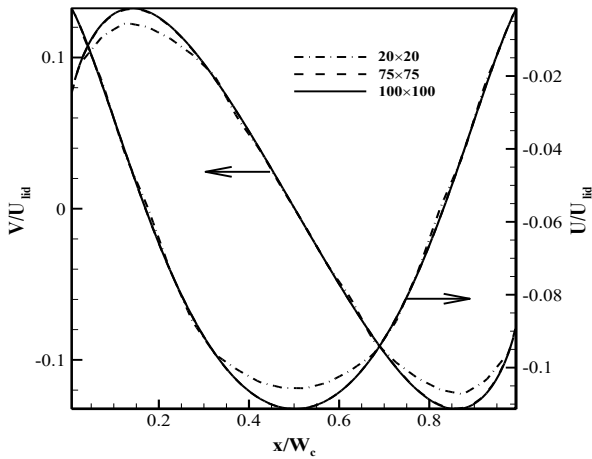
نتایج نشان می‌دهد با ۳ تا ۴ بار تکرار، تغییرات شرایط مرزی در مرز مشترک گاز-مایع قابل صرف نظر می‌شود.

گاز انجام می‌شود. 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 صرف نظر 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 می‌شود لذا برای محدود کردن دامنه انتخاب جفت برخوردی حوزه حل شبکه‌بندی می‌شود. این شبکه‌بندی همچنین برای نمونه‌گیری اطلاعات میکروسکوپی و به دنبال آن محاسبه خواص ماکروسکوپی جریان مورد استفاده قرار می‌گیرد. فلوجارت 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 سلول‌ها پخش شده و سرعت اولیه ذرات به صورت ضربی تصادفی از محتمل‌ترین سرعت ممکن<sup>۱</sup> تعیین می‌شود. در هر گام زمانی، ذرات بر اساس قانون دوم نیوتون جابه‌جا شده و موقعیت جدید آن‌ها مشخص می‌شود. در این مرحله در صورت عبور ذرات از مرزها، بسته به نوع مرز برهم‌کنش مربوطه اعمال می‌شود. پس از تعیین این‌که 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 مکانیزم رد و قبول، سرعت ذرات بر اساس روابط برخورد الاستیک اصلاح می‌شود. به این ترتیب یک گام زمانی پایان یافته و این فرآیند تا رسیدن به حالت پایا تکرار می‌شود. در این بین به ازای هر چند گام زمانی یک‌بار، اطلاعات میکروسکوپی جریان مانند تعداد ذرات در هر سلول و سرعت ذرات نمونه‌گیری می‌شود. در نهایت خواص ماکروسکوپی جریان با میانگین‌گیری از نمونه‌های به دست آمده محاسبه می‌شوند [۳۳-۳۵].

در روش نگهداری اطلاعات علاوه بر اطلاعات میکروسکوپی ذرات، اطلاعات ماکروسکوپی هر سلول نیز نگهداری می‌شوند. همان‌طور که در شکل ۴ مشخص است، این روش به موازات حل دی‌اس‌ام‌سی انجام می‌شود و در نتایج آن دخالتی ندارد. در واقع روش نگهداری اطلاعات از دی‌اس‌ام‌سی به عنوان یک حامل بهره می‌گیرد. به این معنی که در طی برخوردهای بین ذرات و یا انعکاس آن‌ها از دیواره، این روش تاثیری بر محاسبات دی‌اس‌ام‌سی ندارد و صرفاً به صورت

1 Most Probable Velocity





شکل ۶: مؤلفه عمودی و افقی سرعت روش نگهداری اطلاعات بر روی خط تقارن افقی  $y/W_c = 0.5$

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

هستند. لازم به ذکر است که در هر دو شبکه شرط  $\Delta x \leq \lambda/3$  رعایت شده است. لذا برای جریان درون میکروحفرة از شبکه  $75 \times 75$  استفاده شده است. در شکل ۳ شبکه بندی حوزه حل برای هر دو جریان گاز و مایع نشان داده شده است.

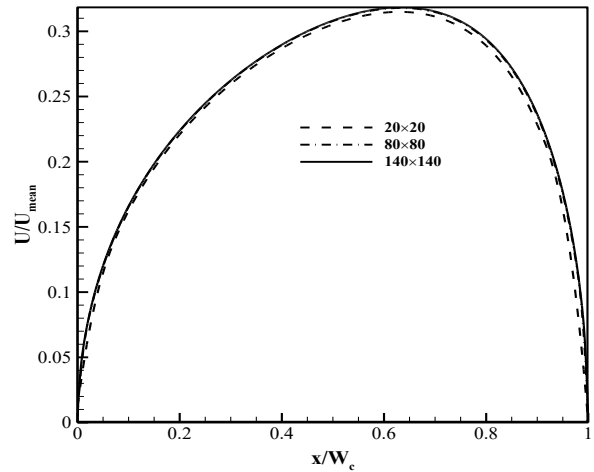
#### ۴-۲- اعتبارسنجی نتایج

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 حفرة 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)).

$$\frac{\lambda}{L} = \frac{1}{2\pi} \ln \left( \sec \left( \frac{F_c \pi}{2} \right) \right) \quad (15)$$

که در این رابطه  $\lambda$  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].



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

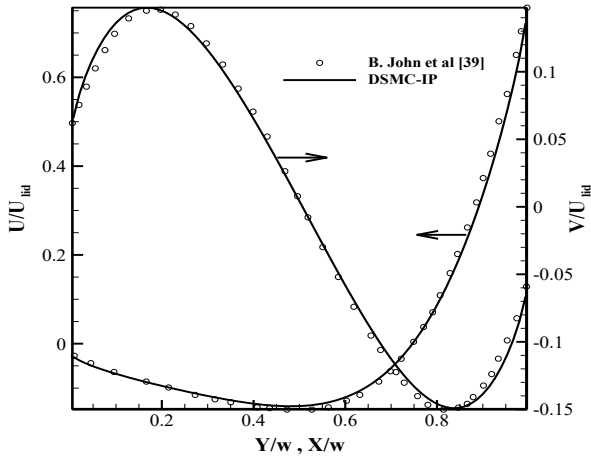
Fig. 5: Effect of the mesh size on the gas-liquid interface velocity

#### ۴- استقلال از شبکه و اعتبارسنجی

##### ۴-۱- استقلال نتایج از شبکه

برای بررسی استقلال نتایج جریان مایع از اندازه شبکه، یک میکروکانال فوق آب‌گریز با شرط مرزی برش آزاد روی مرز مشترک گاز-مایع و کسر برش آزاد  $F_c = W_c/L = 0.5$ ، در نظر گرفته شده است. شکل ۵ توزیع سرعت روی سطح میکروحفرة که با استفاده از سرعت متوسط ورودی میکروکانال بی‌بعد شده است برای شبکه‌های  $20 \times 20$ ،  $80 \times 80$  و  $140 \times 140$  با نسبت تراکم ۸ در راستای عمود بر جریان (به سمت دیواره) را نشان می‌دهد.

با توجه به این که نتایج شبکه  $80 \times 80$  و  $140 \times 140$  کاملاً بر هم منطبق شده‌اند، برای تحلیل کانال از شبکه  $80 \times 80$  استفاده شده است. برای اطمینان از استقلال نتایج محیط رقیق شده از شبکه، جریان درون میکروحفرة برای شبکه‌های  $20 \times 20$ ،  $75 \times 75$  و  $100 \times 100$  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  $\Delta x \leq \lambda/3$  در نظر گرفته شود. که  $\Delta x$  اندازه هر شبکه و  $\lambda$  مسیر متوسط پوشش آزاد مولکولی است. شکل ۶ مؤلفه عمودی و افقی سرعت روش نگهداری اطلاعات را بر روی خط افقی که از وسط میکروحفرة،  $y/W_c = 0.5$  عبور می‌کند، نشان می‌دهد. این شکل نشان می‌دهد نتایج مربوط به شبکه بندی  $75 \times 75$  و  $100 \times 100$  با دقت بسیار مناسبی بر روی هم منطبق



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

**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.**

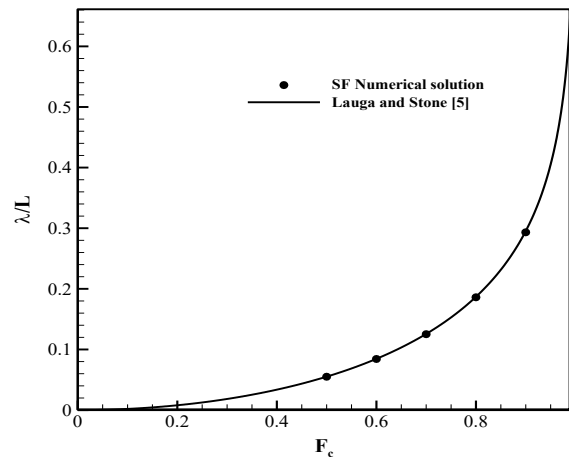
میکرو حفره،  $Y/w = 0.5$ ، و همچنین مؤلفه افقی سرعت،  $U/U_{lid}$ ، در طول محور عمودی میکرو حفره،  $X/w = 0.5$ ، رسم شده است. همان طور که در شکل مشخص است تطابق قابل قبولی بین نتایج روش نگه‌داری اطلاعات و حل نایر-استوکس-فوریه وجود دارد که صحت نتایج به دست آمده از روش حاضر را نشان می‌دهد.

#### ۵- نتایج

در شکل ۹ میدان مؤلفه افقی سرعت درون میکرو کانال و حفره، به دست آمده از حل ترکیبی گاز و مایع، برای شرایط  $F_c = 0.5$  و  $Re = 150$  نشان داده شده است. همچنین در این شکل خطوط جریان نیز ترسیم شده است.

همان طور که شکل ۹ نشان می‌دهد، اندازه سرعت در حفره بسیار کوچک است؛ به نحوی که نوسانات آماری در روش دی‌اس‌ام‌سی آن قدر 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 میکرو کانال و روی سطح تماس



شکل ۷: مقایسه طول لغزش مؤثر 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**

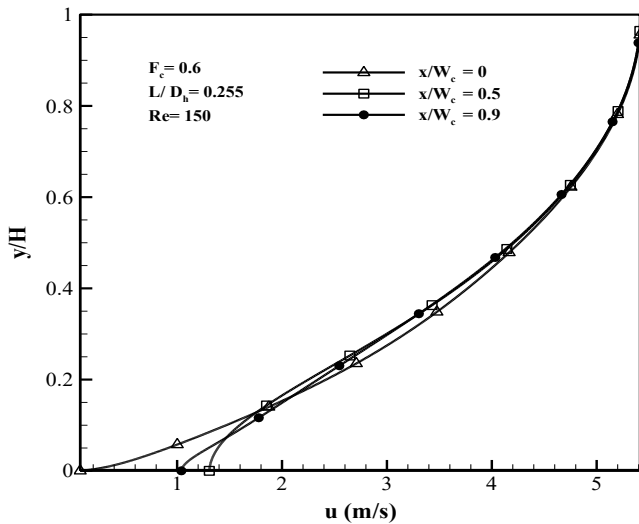
$$\lambda = \frac{U_{slip}}{\dot{\gamma}} = \frac{\mu q L}{2 \Delta P H^2} - \frac{H}{3} \quad (16)$$

که در آن  $\mu$  لزجت سیال،  $q$  نرخ دبی حجمی بر واحد عرض میکرو کانال و  $\Delta P$  اختلاف فشار در طی یک مدول حفره و دندان است.

شکل ۷ نتایج به دست آمده را برای طول لغزش مؤثر در جریان خزشی با  $Re = 1$  ( $Re = \rho u_{ave} D_h / \mu$  و  $D_h = 4H$ ) درون میکرو کانال، برای مقادیر مختلف کسر برش آزاد  $F_c$  نشان می‌دهد. همان طور که مشخص است نتایج عددی به دست آمده کاملاً بر حل تحلیلی لاگا و استون [۵] منطبق است.

به منظور اعتبارسنجی نتایج محیط گازی و نشان دادن صحت عملکرد کد دی‌اس‌ام‌سی-آی‌پی نتایج با گزارش‌های جان و همکاران [۳۹] مقایسه شده است. نتایج برای یک میکرو حفره مربعی با دیواره بالایی متحرک به عرض  $w = 1 \mu m$  و نودسن  $Kn = 0.05$  برای گاز آرگون ارائه شده است. سرعت دیواره  $U_{lid} = 50 \text{ m/s}$  و دمای دیواره‌ها و سیال  $273 \text{ K}$  می‌باشد. گزارش‌های جان و همکاران [۳۹] با توجه به عدد نودسن جریان و قرار گرفتن در رژیم لغزش با حل معادلات نایر-استوکس-فوریه با شرط مرزی لغزش سرعت و پرش دمایی ارائه شده است.

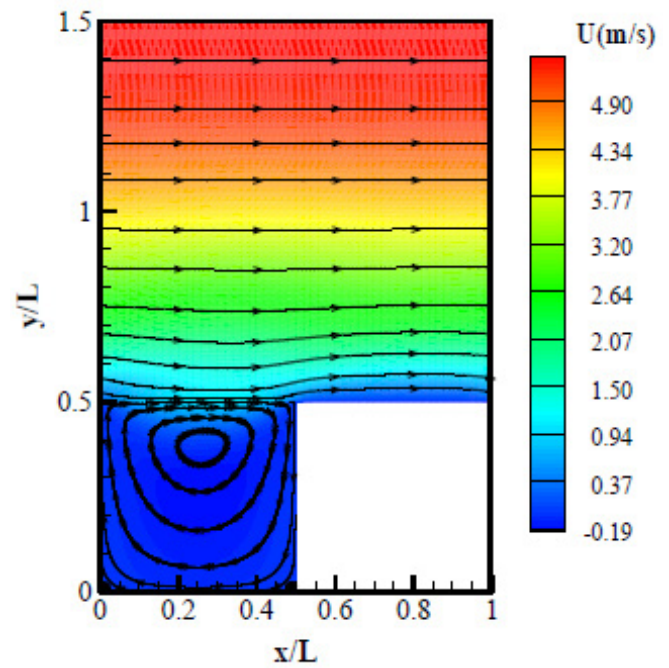
در شکل ۸ مؤلفه عمودی سرعت،  $V/U_{lid}$ ، در طول محور افقی



شکل ۱۰: پروفیل سرعت درون میکروکانال روی سطح میکروحفره در  $Re = 150$ ، کسر برش آزاد  $F_c = 0.6$  و نسبت  $L/D_h = 0.255$  برای سه موقعیت جریان  $(x/W_c = 0, 0.5, 0.9)$

**Fig. 10: Variation of streamwise velocity profiles of liquid flow for  $Re=150$ ,  $F_c = 0.5$  and  $L/D_h = 0.255$**

می‌شود. در این حالت شتاب افزایش سرعت در فاصله طولانی‌تری اعمال می‌شود و در نتیجه سرعت لغزش با افزایش  $F_c$  افزایش می‌یابد. با افزایش  $F_c$  از  $0.2$  به  $0.9$ ، موقعیت بیشینه سرعت لغزشی از  $x/W_c = 0.53$  به  $x/W_c = 0.17$  جابجا می‌شود. همچنین با مقایسه نتایج حل ترکیبی گاز و مایع و روش مبتنی بر فرض برش آزاد مشاهده می‌شود که موقعیت بیشینه سرعت در حالت برش آزاد در تمام مقادیر  $F_c$  به اندازه تقریباً یکسانی نسبت به نتایج حل ترکیبی به سمت انتهای میکروحفره جابه‌جا می‌شود. به علت سرعت لغزش بزرگ‌تر و در نتیجه شتاب بیشتر جریان در حالت برش آزاد نسبت به حل دی‌اس‌ام‌سی-ناویر-استوکس، این نتیجه مورد انتظار بود. اختلاف دو رهیافت در موقعیت بیشینه سرعت، حداقل  $0.8$  درصد در  $F_c = 0.5$  و حداکثر  $1/5$  درصد در  $F_c = 0.9$  می‌باشد. 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. همان‌طور که مشخص است سرعت لغزشی بیشینه با افزایش  $F_c$ ، افزایش می‌یابد که با توجه به گفته‌های قبلی ناشی از شتاب افزایش روی سطح میکروحفره می‌باشد. با افزایش  $F_c$  از  $0.2$  به  $0.9$ ، مقدار بیشینه سرعت چهار برابر افزایش می‌یابد. در هر دو حالت برش آزاد و حل ترکیبی، روند افزایش سرعت لغزشی بیشینه



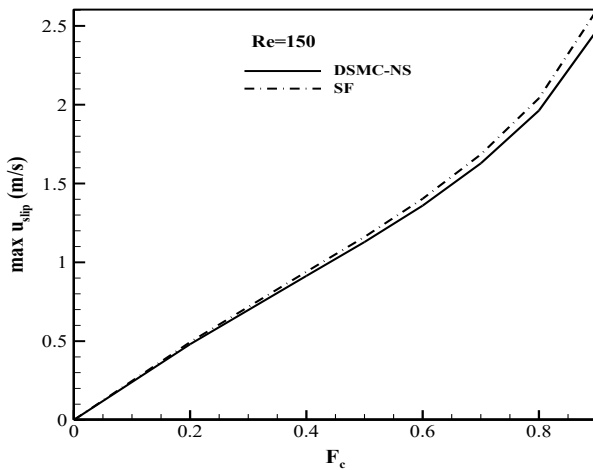
شکل ۹: میدان مولفه افقی سرعت و خطوط جریان درون میکروکانال و حفره برای حل ترکیبی در  $F_c = 0.5$  و  $Re = 150$

**Fig. 9: Horizontal velocity field and streamlines in microchannel and cavity for the hybrid solution at  $F_c = 0.5$  and  $Re=150$ .**

گاز-مایع را نشان می‌دهد. در این شکل  $F_c = 0.6$ ،  $L/D_h = 0.255$  و جریان آرام ( $Re = 150$ ) می‌باشد. پروفیل سرعت در موقعیت‌های  $x/W_c = 0$ ،  $x/W_c = 0.5$  و  $x/W_c = 0.9$  رسم شده است. همان‌طور که در شکل مشخص است در نزدیکی مرکز 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 می‌یابد. بیشینه سرعت در شرایط مربوط به شکل ۱۰ در  $0.9 \leq x/W_c \leq 0.5$  قرار دارد.

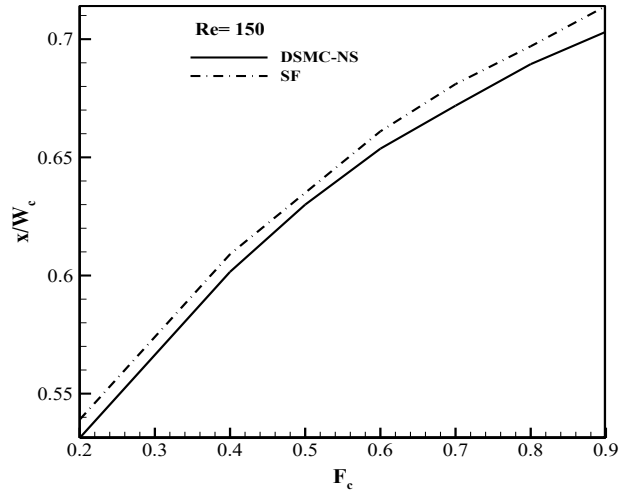
شکل ۱۱ موقعیت بیشینه مقدار سرعت را روی مرز مشترک و برای دو حالت حل ترکیبی گاز و مایع و فرض برش آزاد به ازای مقادیر مختلف  $F_c$  نشان می‌دهد. توجه به این نکته ضروری است که با افزایش  $F_c$ ، به علت کاهش تنش برشی روی دیواره سرعت متوسط جریان مایع در میکروکانال افزایش می‌یابد. در این شرایط با کاهش ارتفاع کانال و در نتیجه کاهش  $D_h$  عدد رینولدز جریان، در کلیه حالات ثابت و برابر  $Re = 150$  تنظیم شده است.

همان‌طور که مشخص است موقعیت بیشینه سرعت لغزشی با افزایش کسر برش آزاد  $F_c$  به سمت انتهای سطح مشترک جابه‌جا



شکل ۱۲: اثر کسر برش آزاد بر بیشینه سرعت روی سطح مشترک در  $Re = 150$

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



شکل ۱۱: اثر کسر برش آزاد بر موقعیت بیشینه سرعت روی سطح مشترک در  $Re = 150$

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

برش آزاد بیشتر می‌شود. بیشترین اختلاف در  $F_c = 0.9$  و برابر  $5/2$  درصد است. این اختلاف در  $F_c$  های کوچک ناچیز است، به گونه‌ای که در  $F_c = 0.2$  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 جدی‌تر است به گونه‌ای که در  $F_c = 0.9$  ، 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  $F_c = 0.2$  برابر  $8/3$  درصد است.

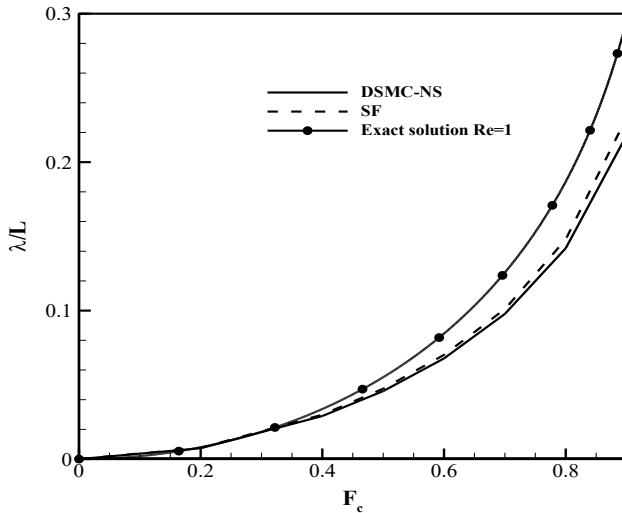
در نتایجی که ارائه شد عدد رینولدز جریان با تغییر نسبت  $L/D_h$ ، به صورت مقداری ثابت تنظیم شده است. در ادامه با ثابت نگه داشتن قطر هیدرولیک میکروکانال،  $L/D_h = 0.25$ ، اثر تغییرات  $F_c$  بر عدد رینولدز بررسی می‌شود. همان‌گونه که در شکل ۱۵ نشان داده شده است، با افزایش کسر برش آزاد عدد رینولدز جریان افزایش می‌یابد. با افزایش  $F_c$  مقاومت دیواره میکروکانال مقابل جریان کاهش می‌یابد. چون افت فشار اعمالی بر میکروکانال در همه حالات یکسان است، کاهش مقاومت در مقابل جریان باعث افزایش سرعت متوسط (دبی جریان) در کانال شده و عدد رینولدز افزایش می‌یابد. نرخ افزایش دبی در  $F_c$  های بیشتر، بزرگتر است.

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  $F_c = 0.2$  برابر  $2/7$  درصد و در  $F_c = 0.9$  برابر ۵ درصد می‌باشد.

شکل ۱۳ تغییرات سرعت لغزشی روی سطح میکرووحفره را برای مقادیر مختلف  $F_c$  نشان می‌دهد. در این شکل  $Re = 150$  است و توزیع سرعت برای هر دو حالت رسم شده است. محل اتمام هر نمودار روی محور افقی، مقدار  $F_c$  مربوطه را نشان می‌دهد. همان‌طور که در این شکل هم مشخص است با افزایش  $F_c$  توزیع سرعت روی سطح میکرووحفره افزایش یافته و بیشینه سرعت در هر دو حالت به سمت انتهای سطح میکرووحفره جابه‌جا می‌شود.

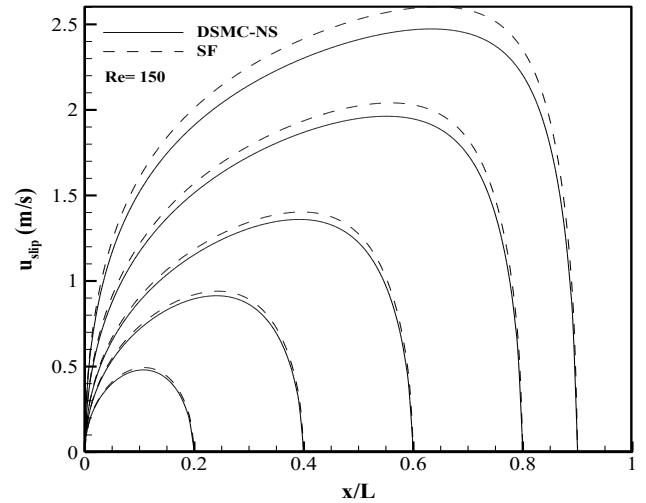
با کاهش  $F_c$ ، اختلاف توزیع سرعت برای حل دی‌اس‌اس‌سی-ناویر-استوکس و برش آزاد کاهش می‌یابد. همچنین در  $F_c = 0.2$  توزیع سرعت روی سطح میکرووحفره تقریباً متقارن شده است. که به علت میزان کم اینرسی روی سطح میکرووحفره می‌باشد. در حالی که با افزایش  $F_c$  اینرسی سیال افزایش یافته لذا بیشینه سرعت در جهت جریان جابه‌جا می‌شود.

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  $Re = 150$  نشان داده شده است. با افزایش کسر برش آزاد، طول لغزش موثر افزایش یافته و میزان اختلاف نتایج حل ترکیبی و



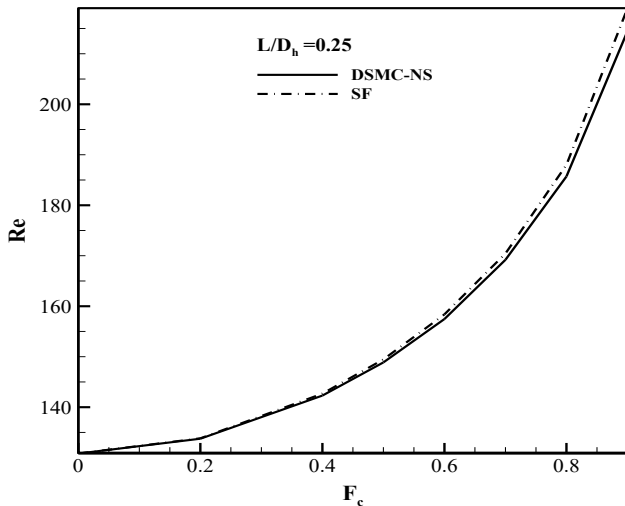
شکل ۱۴: اثر کسر برش آزاد بر طول لغزش موثر میکروکانال در  $Re=150$  و مقایسه با حل دقیق در جریان خزشی با  $Re=1$

**Fig. 14: The effect of the shear-free fraction on the effective slip length at  $Re=150$ .**



شکل ۱۳: اثر کسر برش آزاد بر توزیع سرعت روی سطح میکروحفرة در  $Re=150$

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



شکل ۱۵: اثر کسر برش آزاد بر عدد رینولدز میکروکانال در  $L/D_h = 0.25$

**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 میکروحفرة (در راستای جریان) جابه‌جا می‌شود. بیشینه سرعت در  $F_c = 0.2$  در موقعیت  $x/W_c = 0.53$  است و با افزایش کسر برش آزاد به

مطابق این شکل در افت فشار ثابت، با افزایش  $F_c$  از  $0.2$  به  $0.9$ ، 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  $F_c = 0.2$  برابر ۰.۲ درصد است و این اختلاف در  $F_c = 0.9$  برابر ۲ درصد است.

#### ۶- نتیجه‌گیری

در این مقاله جریان آرام درون میکروکانال فوق آب‌گریز 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 رقیق‌شده گازی درون میکروحفرة به روش دی‌اس‌ام‌سی و جریان پیوسته مایع درون میکروکانال به روش المان محدود (نرم‌افزار کامسول)؛ ب) مدل‌سازی اثر میکروحفرة به صورت شرط مرزی برش آزاد روی دیواره میکروکانال. چون سرعت جریان در میکروحفرة بسیار پایین است، به علت نوسانات آماری بسیار بزرگ روش دی‌اس‌ام‌سی به تنهایی قادر به حل این جریان نیست. به همین علت از روش دی‌اس‌ام‌سی-آی‌پی استفاده شده است. بررسی نتایج به دست آمده نشان می‌دهد:

زمان، s	$t$	$F_c = 0.19$ موقعیت بیشینه سرعت به $x/W_c = 0.17$ افزایش می‌یابد.
مؤلفه سرعت در راستای افقی، m/s	$u$	(۲) مقدار بیشینه سرعت و توزیع سرعت روی سطح میکروحفره
سرعت جریان در مرز مشترک گاز-مایع، m/s	$\bar{U}$	با افزایش کسر برش آزاد افزایش می‌یابد. با افزایش $F_c$ از ۰/۲ به ۰/۹،
سرعت دیواره بالایی در حفره m/s	$U_{lid}$	مقدار بیشینه سرعت چهار برابر افزایش می‌یابد.
مؤلفه سرعت در راستای عمودی، m/s	$v$	(۳) بررسی عدد رینولدز نشان می‌دهد که با فرض ثابت بودن
مؤلفه سرعت در هر سلول، m/s	$V_c$	اختلاف فشار و نسبت $L/D_h$ ، با افزایش کسر برش آزاد، عدد رینولدز
مؤلفه سرعت ذره، m/s	$V_i$	جریان نیز افزایش می‌یابد. به گونه‌ای که با افزایش $F_c$ از ۰/۲ به ۰/۹،
عرض حفره، m	$W_c$	عدد رینولدز و به تبع آن دبی جریان ۶۰ درصد افزایش می‌یابد. که به
فاصله بین دو شیار، m	$W_r$	علت کاهش مقاومت دیواره میکروکانال در مقابل جریان می‌باشد.
نسبت ابعادی حفره	$Z_c$	(۴) با افزایش نسبت برش آزاد اختلاف نتایج دو رهیافت در
	<b>علائم یونانی</b>	نظر گرفته شده افزایش می‌یابد. بیشترین اختلاف در نتایج ارائه شده
نرخ کرنش، 1/s	$\dot{\gamma}$	از این دو رهیافت در $F_c = 0.19$ برابر ۵/۲ درصد است. در حالی که
زاویه تماس سطح گاز-مایع	$\theta$	با کاهش نسبت برش آزاد اختلاف نتایج دو رهیافت کاهش می‌یابد.
مسیر متوسط پویش آزاد مولکولی، طول لغزش مؤثر، m	$\lambda$	بیشترین اختلاف در نتایج ارائه شده در $F_c = 0.19$ برابر ۳ درصد
لزجت، Pa.s	$\mu$	است. لذا جهت کاهش هزینه‌های محاسباتی می‌توان در نسبت‌های
چگالی، kg/m <sup>3</sup>	$\rho$	پایین کسر برش آزاد از حل برش آزاد استفاده کرد.
کشش سطحی، N/m	$\sigma$	
تنش برشی Pa	$\tau$	

### فهرست علائم

### علائم انگلیسی

	$b$	طول لغزش، m
	$d$	قطر مولکول گاز، m
	$D_h$	قطر هیدرولیک کانال، m
	$F_c$	کسر برش آزاد
	$H$	ارتفاع میکروکانال، m
	$h_c$	ارتفاع حفره، m
	$k_B$	ثابت بولتزمن، J/K
	$Kn$	عدد نودسن
	$p$	فشار، Pa
	$\Delta p$	اختلاف فشار، Pa
	$q$	نرخ دبی حجمی بر واحد عرض میکروکانال، m <sup>3</sup> /(m.s)
	$R$	شعاع انحنای سطح تماس گاز-مایع، ثابت گازها، J/(kg.K) .m
	$Re$	عدد رینولدز
	$T$	دما، K

### منابع

- [1] 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 anti-corrosion, 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, Two-dimensional 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-Koopae, 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, *International 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