Amirkabir Journal of Mechanical Engineering

Amirkabir J. Mech. Eng., 54(9) (2022) 429-432
DOI: 10.22060/mej.2022.21339.7431

Effect of Obstacles Location and Flow Injection on the Mixing of Two-Gaseous Flow in a Microchannel

E. Lekzian* , H. R. Farshi Fasih

Department of Aerospace Engineering, Semnan University, Semnan, Iran

ABSTRACT: In the present study, the direct simulation Monte Carlo method is utilized to investigate the effect of obstacles number, location, and also flow injection on the mixing in a channel with 16 µm length and 1 µm height. A mixing length is defined which is the length at which two species are mixed completely. Eight cases with different blockage ratios are considered to study the obstacle effect on the mixing. The blockage ratio shows the reduced flow cross-section due to the addition of obstacles. In All cases, CO2 and N2 gases enter the domain and are separated by a splitter plate that extends up to 1/3 of the channel. The blockage ratio increasing decreases mixing length up to 10%. Whereas the mass flow rate decreased significantly. Flow injection into the channel is also studied. Four cases are considered: the first case is a simple channel without injection, the second case has cross injection, the third case has inverse injection, and flow is injected vertically through an obstacle in the fourth case. Mixing length is increased by 17% and 5% for cases 2 and 3, respectively. In case 4, the mixing length is decreased 2% due to the obstacle.

Review History:

Received: Apr. 23, 2022
Revised: Jun, 19, 2022
Accepted: Aug. 09, 2022
Available Online: Aug. 13, 2022

Keywords:

Direct simulation Monte Carlo
Mixing length
Obstacle location
Blockage ratio
Flow injection

1- Introduction

Progresses in the fabrication of Micro-Electro-Mechanical-Systems and their superiority to their macro-counterparts, led to more utilization of such devices, especially in mixing applications [1]. The mixing process is slow in micro scale and is mostly due to the diffusion of particles. Gaseous micromixing is almost a non-touching area and is a field of interest. Yan and Farouk [2] investigated the mixing of Oxygen and Hydrogen in a channel. They showed that mixing length is increased by increasing of channel inlet-outlet pressure difference. Wang and Li [3] investigated the mixing of Nitrogen and Carbon-monoxide in a microchannel. Their results show that mixing length is proportional to gas temperature and inverse of the Knudsen number. Le and Hassan [4] simulate the mixing of the two above-mentioned gases in a T-shape micromixer and concluded that higher Knudsen number regimes have smaller mixing lengths. Darbandi and Lekzian [5] also showed that the mixing of Nitrogen and Carbon-monoxide in a straight microchannel is enhanced when inlet pressure ratios are increased. Huang et al. [6] investigated the micromixing of Nitrogen and Oxygen experimentally. They observed that mixing length is increased by the promotion of Reynolds number.

In the present paper, gas mixing in a microchannel with obstacle and flow injection is simulated using the direct simulation Monte Carlo method. The main aims of this research are to find the effects of obstacles location and number, blockage ratio, and flow injection on the mixing length.

2- Methodology

2- 1- Basic equations

In micro scales, the continuity assumptions of flow are not applicable, therefore classical Navier-Stokes equations are invalid. Thus, Boltzmann equations are utilized and the direct simulation Monte Carlo method is used to solve these equations numerically. The Boltzmann equation is as follows:

$$\frac{\partial}{\partial t}(nf)+c.\frac{\partial}{\partial r}(nf)+F.\frac{\partial}{\partial c}(nf)=\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{0}^{4\pi}n^2\left(f^*f_1^*-ff_1\right)c_r\sigma d\Omega dc_1 \quad (1)$$

which f is the velocity distribution function, F is the force between two particles, c is the particle speed, n is particle density, σ is collision cross-section, and c_r is particle relative velocity. For a gas mixture which has s species, a separate distribution function is considered for each species. At such conditions, the Boltzmann equation is a set of s equations and each species is shown by p or q index. For species p, the Boltzmann equation is as follows:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(n_pf_p\right)+c_p.\frac{\partial}{\partial r}\left(n_pf_p\right)+F.\frac{\partial}{\partial c}\left(n_pf_p\right)= \sum_{q=1}^{s}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{0}^{4\pi}n_pn_q\left(f_p^*f_{1q}^*-f_pf_{1q}\right)c_{rpq}\sigma_{pq}d\Omega dc_{1q} \quad (2)$$

*Corresponding author's email: e.lekzian@semnan.ac.ir

Copyrights for this article are retained by the author(s) with publishing rights granted to Amirkabir University Press. The content of this article 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.

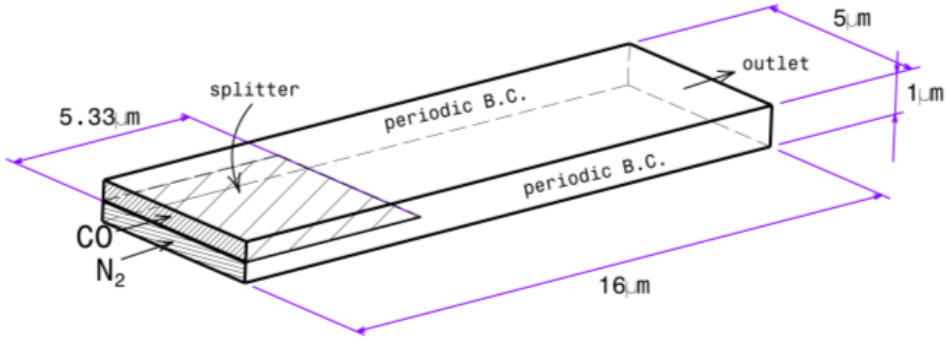


Fig. 1. Domain boundary conditions and dimensions

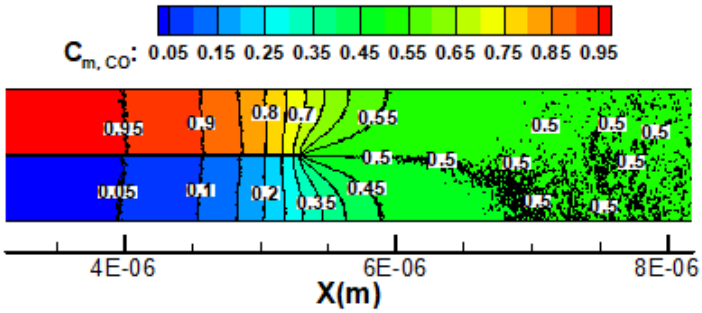


Fig. 2. The mass fraction of CO in the microchannel

In this study, the steady-state condition is considered, and therefore, time derivatives at the left-hand side of Eqs. (1) and (2) are ignored.

2- 2- Boundary conditions

In the present paper, the variable hard sphere model is used to simulate the collision of particles. For all cases, diffuse reflection is considered for upper and lower walls. Side walls are considered periodic which implies a two-dimensional simulation. Inlet boundaries are adapted from Ref. [7] with some modifications:

$$\begin{cases} (u_{in})_j = u_j + \dfrac{P_{in} - P_j}{\rho_j a_j} \\ (v_{in})_j = v_j + \dfrac{P_{in} - P_j}{\rho_j a_j} \\ (w_{in})_j = w_j \end{cases} \tag{3}$$

Outlet boundary conditions are as follows:

$$\begin{cases} (u_e)_j = u_j + \dfrac{P_j - P_e}{\rho_j a_j} \\ (v_{in})_j = v_j \\ (T_e)_j = \dfrac{P_e}{(\rho_e)_j R} \end{cases} \tag{4}$$

3- Results and Discussion

3- 1- Problem definition (benchmark case)

Nitrogen and Carbon Monoxide enters the domain according to Fig. 1.

A splitter plate separates Nitrogen and Oxygen up to 1/3 channel length. The channel length is 16μm. inlet pressure for both species are 100 kPa and the exit pressure is low enough to avoid any reverse flow. Species temperature is 300K. Side walls are periodic. Particle collision to upper and lower walls is a diffuse reflection which is a function of wall temperature. The mass fraction of CO is shown in Fig. 2. When the mass fraction is 0.5, mixing is completed.

For a more precise calculation of mixing, the mixing length is defined as follows:

$$\xi = \frac{\max\left[C_m(i,y) - C_{m,\infty}(i,y)\right]}{C_{m,\infty}(i,y)} \tag{5}$$

Table 1. Mixing length of cases with different blockage ratio

Case \ Col.	No. Obstacles 1	2	3	4	ζ (μm)	b
Case 1	---	---	---	---	7.1	0
Case 2	2	---	---	---	6.9	0.43
Case 3	6	---	---	---	6.3	0.85
Case 4	12	---	---	---	6.35	0.83
Case 5	12	---	---	---	6.8	0.5
Case 6	6	---	---	---	6.25	0.95
Case 7	4	5	---	---	6.35	0.83
Case 8	6	6	6	6	6.28	0.93

where $C_{m,\infty}(i,y)$ is the mass fraction of species i at equilibrium and $C_m(i,y)$ is the mass fraction at an arbitrary section from the channel inlet along the y-axis. When $\zeta < 0.01$ mixing is complete. The mixing length for the benchmark case is 7.1μm.

3- 2- Effect of obstacle number and location on mixing

Eight cases with different obstacle numbers and locations are considered. The blockage ratio is defined as follows:

$$b = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n} A_i}{l \times H}} \tag{6}$$

where A_i is the wet area of the obstacle, l is the total length of obstacles and H is channel height. According to Table 1, it is observed that when the blockage ratio is increased, the mixing process is promoted.

3- 3- Effect of flow injection on mixing

Four cases are considered: the first case is a simple channel without injection, the second case has cross injection, the third case has inverse injection, and flow is injected vertically through an obstacle in the fourth case. Mixing lengths are presented in Table 2.

According to Table 2, flow injection in cases 2 and 3 led to higher mixing length, while in case 4 mixing enhances due to the obstacle effect in the domain.

Table 2. Mixing length of cases with flow injection

	Mass flow (μg/s) inlet	outlet	ζ (μm)
Case 1	32	32	7.1
Case 2	26.8	32.3	8.3
Case 3	26.8	32.3	7.45
Case 4	18	27.1	6.95

4- Conclusion

In the present study, the effect of obstacle on the mixing of two gaseous flows in a microchannel is studied. It was demonstrated that as the blockage ratio increased, the mixing is enhanced. The injection of flow was also studied. It was concluded that injection behaves similarly to obstacles, but the addition of mass flow due to injection increases mixing length.

References

[1] M.A. Moyet, Hossen, M. R., Ward, A., Adams, O., Mason, M. D., Collins, S. D., Smith, R. L., MEMS Micromixer for Ultra Fast Mixing of Fluids, in: 2020 IEEE 33rd International Conference on Micro Electro Mechanical Systems (MEMS), IEEE, China, 2020, pp. 1137-1140.

[2] F. Yan, Farouk, B., Numerical simulation of gas flow and mixing in a microchannel using the direct simulation Monte Carlo method, Microscale thermophysical engineering, 6(3) (2002) 235-251.

[3] M. Wang, Li, Z., Gas mixing in microchannels using the direct simulation Monte Carlo method, International Journal of Heat and Mass Transfer, 49(9-10) (2006) 1696-1702.

[4] M. Le, Hassan, I, DSMC simulation of gas mixing in T-shape micromixer, Applied Thermal Engineering, 27(14-15) (2007) 2370-2377.

[5] M. Darbandi, Lakzian, E., Mixing enhancement of two gases in a microchannel using DSMC, in: Applied Mechanics and Materials, Trans Tech Publ, Dubai, 2013, pp. 166-169.

[6] C.Y. Huang, Wan, S. A., Hu, Y. H., Oxygen and nitrogen gases mixing in T-type micromixers visualized and quantitatively characterized using pressure-sensitive paint, International Journal of Heat and Mass Transfer, 111 (2017) 520-531.

[7] N. Shah, Gavasane, A., Agrawal, A., Bhandarkar, U., Comparison of Various Pressure Based Boundary Conditions for Three-Dimensional Subsonic DSMC Simulation, Journal of Fluids Engineering, 140(3) (2018) 217-233.

HOW TO CITE THIS ARTICLE

E. Lekzian , H. R. Farshi Fasih, Effect of Obstacles Location and Flow Injection on the Mixing of Two-Gaseous Flow in a Microchannel , Amirkabir J. Mech Eng., 54(9) (2022) 429-432.

DOI: 10.22060/mej.2022.21339.7431

نشریه مهندسی مکانیک امیرکبیر

نشریه مهندسی مکانیک امیرکبیر، دوره ۵۴، شماره ۹، سال ۱۴۰۱، صفحات ۲۱۳۹ تا ۲۱۵۶
DOI: 10.22060/mej.2022.21339.7431

اثر موقعیت موانع و تزریق جریان بر اختلاط جریان دوگازی در میکروکانال

الیاس لکزیان*، حمیدرضا فرشی فصیح

دانشکده مهندسی هوافضا، دانشگاه سمنان، سمنان، ایران.

خلاصه: در پژوهش حاضر، به منظور بررسی اثر تعداد، موقعیت موانع و تزریق جریان بر اختلاط جریان در میکروکانال با طول ۱۶ میکرومتر و ارتفاع ۱ میکرومتر از روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو استفاده شده است. از معیار طول اختلاط که برابر با طولی است که در آن دو گونه کاملاً با یکدیگر مخلوط می‌شوند، برای بررسی اختلاط جریان استفاده شده است. هشت نمونه با نسبت انسداد مختلف برای بررسی اثر موانع در نظر گرفته شده است. نسبت انسداد، بیانگر کاهش سطح مقطع عبوری جریان از داخل کانال با اضافه شدن موانع است. در همه موارد دو گونه گازی کربن‌مونواکسید و نیتروژن توسط یک صفحه که تا یک‌سوم طول کانال کشیده شده از هم جدا می‌شوند. با افزایش نسبت انسداد، طول اختلاط تا ۱۰٪ کاهش و دبی جرمی نیز به طور قابل توجهی کاهش می‌یابد. همچنین تزریق جریان به داخل کانال با درنظرگیری چهار نمونه بررسی شد. نمونه‌ها عبارتند از: نمونه اول فاقد تزریق، نمونه دوم با تزریق جریان عرضی، نمونه سوم با تزریق جریان خلاف جهت و نمونه چهارم با تزریق عرضی از داخل مانع. طول اختلاط در نمونه دوم و سوم به ترتیب ۱۷٪ و ۵٪ افزایش یافت. در نمونه چهارم به دلیل وجود مانع، طول اختلاط ۲٪ کاهش یافت.

تاریخچه داوری:
دریافت: ۱۴۰۱/۰۲/۰۳
بازنگری: ۱۴۰۱/۰۳/۲۹
پذیرش: ۱۴۰۱/۰۵/۱۸
ارائه آنلاین: ۱۴۰۱/۰۵/۲۲

کلمات کلیدی:
شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو
طول اختلاط
موقعیت موانع
نسبت انسداد
تزریق جریان

۱- مقدمه

پیشرفت چشمگیر در ساخت ابزارآلات میکروالکترومکانیکی[1] و برتری این ابزارآلات در ابعاد میکرو نسبت به مقیاس بزرگ آنها سبب استفاده از این وسایل به ویژه در زمینه‌هایی چون اختلاط [۴-۱] جریان شده است. به دلیل اینکه اختلاط در ابعاد میکرو به کندی صورت می‌گیرد و بیشتر بر اساس نفوذ[2] ذرات است، تحقیقات زیادی در زمینه ساخت میکرومیکسرهایی شده است که در آن اختلاط جریان در این ابعاد سریعتر انجام شود[۵ و ۶]. به طور کلی اختلاط در ابعاد میکرو به دو دسته کلی تقسیم می‌شود: اختلاط غیرفعال [۹-۷] و اختلاط فعال [۱۰ و ۱۱]. در اختلاط غیر فعال، مخلوط شدن دو جریان از طریق تغییر در ساختار کانال انجام می‌گیرد و در اختلاط فعال، اختلاط از طریق ابزارآلاتی نظیر میکروپمپ تسریع می‌شود [۱۲]. اختلاط جریان می‌تواند به صورت اختلاط جریان‌های گازی در ابعاد میکرو انجام شود که اکنون جزء زمینه‌های جذاب تحقیقاتی است. از جمله مطالعات اولیه در این زمینه در میکرومجاری توسط یان و فاروک [۱۳] انجام شده است. مدل آنها شامل یک کانال است که ورودی آن توسط یک صفحه جداکننده جریان به دو قسمت تقسیم شده است. از بخش بالا جریان گاز اکسیژن و از بخش پایینی جریان گاز هیدروژن وارد می‌شود. صفحه جداکننده تا یک‌سوم طول کانال ادامه یافته و سپس دو جریان با هم ترکیب می‌شوند.یان و فاروک نشان داده‌اند که طول اختلاط با افزایش اختلاف فشار ورود و خروج از کانال، افزایش می‌یابد. ونگ و لی [۱۴] تحقیق مشابهی انجام داده‌اند اما به منظور حذف اثرات تفاوت جرم مولکولی ذرات، از گاز نیتروژن و کربن‌مونواکسید به عنوان گازهای ورودی استفاده نموده‌اند. مشاهدات آنها نشان داده است که طول اختلاط با عکس عدد نادسن و دمای گاز متناسب بوده و با عدد ماخ رابطه مستقیم دارد. مرجع [۱۵] اختلاط گاز نیتروژن و کربن‌مونواکسید را در یک کانال T-شکل بررسی کرده است. نتایج مرجع [۱۵] نشان می‌دهد که در رژیم‌های جریان با

1 Micro-Electro-Mechanical-System (MEMS)
2 Diffusion

* نویسنده عهده‌دار مکاتبات: e.lekzian@semnan.ac.ir

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

عدد نادسن بالاتر، طول اختلاط کاهش یافته و افزایش اختلاف فشار ورودی و خروجی منجر به افزایش طول اختلاط می‌شود. ریحانیان و همکاران [۱۶] اختلاط جریان گاز نیتروژن و کربن‌مونواکسید را در کانالی با صفحه جداکننده و با قرار دادن دو مانع به فاصله ۰/۳ میکرومتر از انتهای صفحه جداکننده بررسی کرده‌اند. آن‌ها نشان داده‌اند که طول اختلاط با افزایش ارتفاع موانع کاسته شده، اما منجر به کاهش ۱۴٪ درصدی دبی جرمی نیز می‌شود. دربندی و صبوری [۱۷] به بررسی اثر کاهش قطر گلوگاه در یک نانوکانال با طول ۲ میکرومتر و عرض ۰/۴ میکرومتر پرداخته‌اند. آن‌ها نشان داده‌اند که با کاهش قطر گلوگاه، طول اختلاط کاهش یافته است. آن‌ها همچنین نشان داده‌اند که کاهش قطر گلوگاه کانال منجر به کاهش دبی جرمی می‌شود، اما اثر کاهش طول اختلاط کمتر از کاهش دبی جرمی است. در تحقیقی دیگر، دربندی و لکزیان [۱۸] اختلاط جریان را در یک کانال بررسی کرده‌اند. آن‌ها نشان داده‌اند که با افزایش اختلاف فشار ورودی و خروجی، طول اختلاط افزایش یافته و همچنین افزایش نسبت فشار گونه‌های ورودی، طول اختلاط را کاهش می‌دهد. دربندی و همکاران به بررسی اثر زوایای ورود جریان و همچنین ارتفاع کانال ورودی گونه‌ها بر اختلاط جریان در یک میکرومیکسر پرداخته‌اند. آن‌ها نشان داده‌اند که با کاهش ارتفاع ورودی کانال، اختلاط تسریع می‌یابد و با افزایش زاویه جریان ورودی، طول اختلاط کاهش می‌یابد. در تحقیقی دیگر، هوآنگ و همکاران [۱۹] به صورت آزمایشگاهی اختلاط جریان نیتروژن و اکسیژن را در یک کانال $T-$ شکل مورد بررسی قرار داده‌اند. آن‌ها مشاهده کرده‌اند که با افزایش عدد رینولدز جریان و همچنین افزایش اختلاف فشار، طول اختلاط افزایش می‌یابد. اخیراً و در تحقیقی دیگر هوآنگ و همکاران [۲۰] به صورت آزمایشگاهی به بررسی اختلاط سه نوع گاز نیتروژن، آرگون و هلیوم با گاز اکسیژن در یک کانال $T-$شکل پرداخته‌اند. مشاهدات آنها نشان داده است که در سرعت‌های پایین‌تر از ۳۰ متر بر ثانیه، اختلاط نیتروژن-اکسیژن سریع‌تر از آرگون-اکسیژن و هلیوم-اکسیژن است و در سرعت‌های بالاتر از ۳۰ متر بر ثانیه اختلاط آرگون-اکسیژن سریع‌تر از نیتروژن-اکسیژن و هلیوم-اکسیژن است.

در پژوهش حاضر با استفاده از زبان برنامه‌نویسی در نرم‌افزار فرترن ۹۰ روش دی‌اس‌ام‌سی پیاده‌سازی شده است و به بررسی اثرات موانع در جریان، به منظور بهبود عملکرد میکسر پرداخته می‌شود. برای شبیه‌سازی‌ها از یک رایانه با ۷ هسته و مقدار رم ۳۲ گیگابایت استفاده شده است و زمان هر یک از شبیه‌سازی‌ها به طور متوسط ۷۲ ساعت می‌باشد. طول اختلاط بر اساس کسر جرمی گونه‌های ورودی تعریف می‌شود و با تعریف پارامتر نسبت انسداد، اثر موقعیت، و تعداد موانع بر اختلاط جریان بررسی می‌شود. همچنین اثر تزریق یک جریان عرضی و معکوس در میکروکانال بر طول اختلاط بررسی می‌شود.

۲- مدل عددی و شرایط مرزی حلگر

۲- ۱- معادلات کلی

رفتار جریان گاز در ابعاد میکرو با رفتار گاز در ابعاد مزو و ابعاد بزرگ کاملاً متفاوت است. در ابعاد میکرو، فرض پیوستگی جریان سیال دیگر معتبر نیست [۲۱]. بنابراین روش‌های معمول مانند سی‌اف‌دی[1] برای تحلیل جریان در این ابعاد به اندازه کافی دقیق به نظر نمی‌رسند. یکی از روش‌های شناخته شده برای چنین ابعادی روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو یا دی‌اس‌ام‌سی[2] است که حل عددی معادلات بولتزمن[3] را ارائه می‌کند. در ابعاد میکرو و نانو، معادلات بولتزمن می‌توانند تحلیل دقیقی از رفتار جریان ارائه دهند. معادله بولتزمن به صورت زیر است:

$$\frac{\partial}{\partial t}(nf)+c.\frac{\partial}{\partial r}(nf)+F.\frac{\partial}{\partial c}(nf)=\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{0}^{4\pi}n^2\left(f^*f_1^*-ff_1\right)c_r\sigma d\Omega dc_1 \quad (۱)$$

که در رابطه فوق، f تابع توزیع سرعت، F نیروی بین دو ذره، و c سرعت ذره است. n چگالی عددی، σ سطح مقطع برخورد و c_r سرعت نسبی بین دو ذره است. سایر پارامترها در بخش علائم توضیح داده شده‌اند. همچنین در یک مخلوط گازی که شامل s گونه مختلف می‌باشد، برای هرگونه، تابع توزیع مجزایی در نظر گرفته می‌شود. در این حالت معادلات بولتزمن به یک سری s معادله‌ای تبدیل می‌شوند و هر یک از گونه‌ها با زیروند p یا q نمایش داده می‌شوند. معادله بولتزمن برای گونه p در یک مخلوط به صورت زیر

1 Computational Fluid Dynamics (CFD)
2 Direct Simulation Monte Carlo (DSMC)
3 Boltzmann

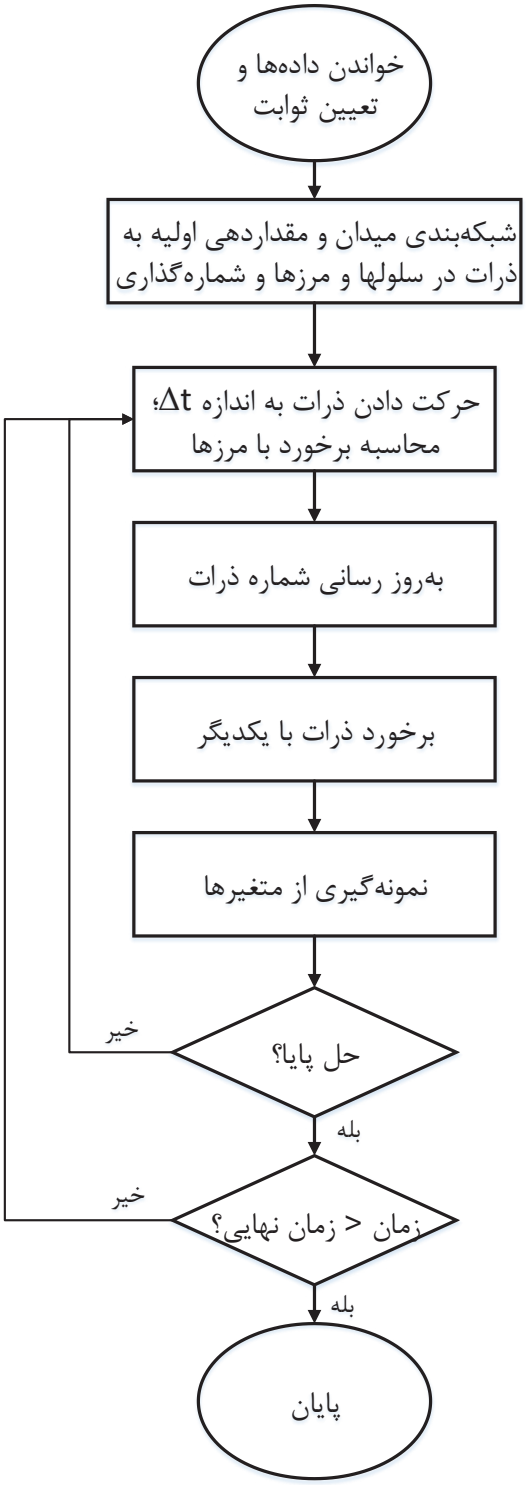
نوشته می‌شود:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(n_p f_p\right)+c_p.\frac{\partial}{\partial r}\left(n_p f_p\right)+F.\frac{\partial}{\partial c}\left(n_p f_p\right)= \sum_{q=1}^{s}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{0}^{4\pi} n_p n_q\left(f_p^* f_{1q}^* - f_p f_{1q}\right)c_{rpq}\sigma_{pq}\, d\Omega dc_{1q} \quad (۲)$$

در این مقاله معادلات به صورت پایا بررسی می‌شوند، لذا جمله مشتق زمانی از سمت چپ معادلات (۱) و (۲) حذف خواهد شد.

۲- ۲- الگوریتم حل روش دی‌اس‌ام‌سی

روش مونت‌کارلو معادلات (۱) و (۲) را به صورت عددی حل می‌کند. پایه روش مونت کارلو بر اساس محاسبه حرکت ذرات و سپس برخورد آنها می‌باشد. به منظور کاهش هزینه محاسباتی، میدان مورد بررسی، توسط یک شبکه به سلول‌هایی تقسیم‌بندی می‌شود. اندازه این سلول‌ها متناسب با متوسط طول پویش آزاد مولکولی انتخاب می‌شود. در هر سلول تعداد مشخصی ذره قرار می‌گیرد. سپس روش مونت کارلو که شامل چهار مرحله اصلی است، اعمال می‌شود: حرکت ذرات، شماره‌گذاری ذرات، شبیه‌سازی برخورد، نمونه‌گیری از متغیرهای ماکروسکوپیک میدان. ذرات در داخل میدان حرکت داده می‌شوند. به هر یک از ذرات شماره‌ای تخصیص داده می‌شود تا موقعیت مکانی و همچنین برخورد آن با دیگر ذرات مشخص باشد. سپس برخورد ذرات با یکدیگر و با دیواره‌های میدان شبیه‌سازی می‌شود. از شرایط مرزی، ذرات ورودی و یا خروجی اخذ و شماره‌گذاری می‌شوند. برخورد ذرات با استفاده از مدل‌های نیرویی (که در این مقاله مدل کره سخت متغیر می‌باشد) شبیه‌سازی می‌شود. در مدل کره سخت متغیر، دو ذره برخوردی به صورت کره در نظر گرفته شده و سطح مقطع برخورد وابسته به دما می‌گردد. پس از برخورد و مشخص نمودن مجدد موقعیت هریک از ذرات، متغیرهای ماکروسکوپیک مانند فشار، دما، و سرعت با استفاده از سرعت ذرات، نمونه‌گیری می‌شوند. نمودار الگوریتم حل این روش در شکل ۱ نمایش داده شده است.



شکل ۱. الگوریتم حل روش دی‌اس‌ام‌سی

Fig. 1. DSMC method solution algorithm

محاسبه می‌شود (k ثابت بولتزمن است) و برابر با $\lambda = ۰/۰۶\mu m$ است. به منظور اجرای یک‌شبیه‌سازی دقیق بایستی اندازه سلول، در راستای گرادیان تغییرات، کمتر از طول پویش آزاد مولکولی در نظر گرفته شود تا جابجایی هر ذره در هر گام زمانی از یک سلول به سلول مجاور درنظر گرفته شود [۲۴]. به منظور اطمینان از دقت شبکه‌بندی، مرجع [۲۵] اندازه مناسب سلول را کمتر از یک‌سوم طول پویش آزاد مولکولی در نظر می‌گیرد و در این مطالعه، این معیار درنظر گرفته می‌شود. بنابراین ۵۰۰ سلول در راستای طول کانال و ۵۰ سلول در راستای ارتفاع کانال درنظر گرفته می‌شود. همچنین به منظور تمایز حرکت از برخورد، گام زمانی کمتر از متوسط زمان برخورد مولکولی انتخاب می‌شود که در این نمونه، متوسط زمان برخورد مولکولی برابر با $۴/۴\times۱۰^{-۹}$ ثانیه است. معیار حداقل تعداد ۲۰ ذره در هر سلول بایستی در نظر گرفته شود تا انتخاب صحیح جفت ذره برخوردی به درستی انجام گیرد [۲۶].

تعاریف مختلفی برای بررسی اختلاط ارائه شده است که از آن جمله می‌توان به راندمان اختلاط و طول اختلاط اشاره نمود [۳۱-۲۷] در این مقاله از یک رابطه ساده و دقیق برای محاسبه طول اختلاط به صورت زیر استفاده می‌شود:

$$\xi = \frac{\max\left[C_m(i,y) - C_{m,\infty}(i,y)\right]}{C_{m,\infty}(i,y)} \qquad (۶)$$

در رابطه فوق، کسر جرمی گونه i در حالت تعادلی و $C_m(i,y)$ کسر جرمی گونه جرمی i در یک مقطع دلخواه از ورودی در راستای y است که معمولاً دورترین نقطه از خط مرکزی کانال است. عبارت کسر جرمی C_m برابر با نسبت زیر است:

$$C_m = \frac{\int (n_p m_p) dA}{\sum_{p=1}^{S} \int (n_p m_p) dA} \qquad (۷)$$

منظور از $\sum_{p=1}^{S} n_p m_p$ چگالی کل گونه‌ها (از گونه اول تا s-اُم است) و منظور از $n_p m_p$ چگالی گونه p-اُم است. به دلیل دوبعدی بودن جریان، انتگرال روی سطح اعمال می‌شود. منظور از n ، چگالی عددی در هر سلول است. منظور از m وزن مولکولی هر ذره است. در صورت کسر، مقدار p فقط شامل یکی از گونه‌هاست (مثلاً $p = ۱$ یعنی گونه اول) و در مخرج کسر p برای تمامی گونه‌ها محاسبه می‌شود. در این مقاله $p = ۱$ یعنی گاز نیتروژن و $p = ۲$ یعنی گار کربن‌مونواکسید. بر اساس رابطه (۶)، هنگامی‌که مقدار $\xi < ۰/۰۲$ شود، جریان کاملاً مخلوط شده در نظر گرفته می‌شود. شکل ۲ تغییرات ξ را در راستای طول کانال نشان داده و با مرجع [۱۶] مقایسه می‌کند. اختلاف ناچیزی در پروفیل تغییرات ξ در مقاله حاضر با نتایج ریحانیان و همکاران دیده می‌شود که اولاً ناشی از تعریف محدوده اختلاط کامل است که توسط ریحانیان و همکاران بر اساس چگالی در نظر گرفته شده است و ثانیاً ناشی از طبیعت آماری روش دی‌اس‌ام‌سی است.

۴- نتایج و بحث

۴- ۱- تعریف مساله (نمونه مبنا)

با استفاده از تعریف طول اختلاط، اختلاط دو جریان نیتروژن و کربن‌مونواکسید برای یک کانال به طول ۱۶ میکرومتر و ارتفاع ۱ میکرومتر مورد بررسی قرار می‌گیرد (شکل ۳). از بخش بالایی کانال، کربن‌مونواکسید و از بخش پایین نیتروژن وارد می‌شود. دو جریان ورودی، توسط یک جداکننده که تا یک‌سوم طول کانال کشیده شده است از هم جدا می‌شوند. صفحه جداکننده در میانه ارتفاع کانال قرار گرفته است. به منظور کاهش اثرات افزایش سرعت جریان در انتهای صفحه اسپلیتر (جلوگیری از ایجاد یک پله جریان)، ضخامت صفحه اسپلیتر ناچیز درنظر گرفته می‌شود. طول کانال نیز برابر با ۱۶ میکرومتر در نظر گرفته می‌شود تا اختلاط دو جریان به طور کامل صورت گیرد. مقدار فشار ورودی برای هر دو گونه ۱۰۰ کیلوپاسکال و فشار خروجی به قدری پایین درنظر گرفته می‌شود که جریان برگشتی در کانال به وجود نیاید. همچنین دمای ورودی هر دو گونه ۳۰۰ کلوین درنظر گرفته می‌شود. اما شرایط مرزی دیواره‌های جانبی پریودیک درنظر گرفته می‌شوند تا در راستای محور z گرادیان تغییرات وجود نداشته باشد و شبیه‌سازی دوبعدی باشد. درنظرگیری راستای محور z به دلیل تأمین تعداد ذرات کافی و افزایش دقت نمونه‌گیری در هر سلول انجام شده است. برخورد ذرات با دیواره‌های بالا و پایین و همچنین صفحه اسپلیتر به صورت دیفیوزیو درنظر گرفته می‌شود که تابعی از دمای سطح برخورد است [۳۲].

۲- ۳- شرایط مرزی

در مقاله حاضر، به منظور شبیه‌سازی سینتیک برخورد ذرات، از مدل کره سخت متغیر استفاده می‌شود. در تمامی موارد، شرط انعکاس دیفیوزیو[1] برای دیواره‌های بالا و پایین در نظر گرفته می‌شوند. در برخورد دیفیوزیو ذره با سطح، ذره با سطح برخورد می‌کند. سپس در یک جهت اتفاقی، با سرعت و انرژی درونی‌ای که تابعی از دمای سطح است منعکس می‌شود. شرایط مرزی برای دیواره‌های جانبی پریودیک[2] درنظر گرفته می‌شود که یک شبیه‌سازی دوبعدی را ایجاد می‌کند. در شرط مرزی پریودیک، هر ذره که وارد دامنه حل می‌شود، ذره‌ای در سمت مخالف و با همان مقدار و جهت سرعت از آن خارج می‌شود. شرط مرزی فشار در ورود و خروج برای یک جریان زیر صوت با انجام اصلاحاتی برگرفته از مرجع [۲۲] است. در شرایط مرزی ورودی، فشار ورودی تنظیم می‌شود و بر اساس آن مقادیر سرعت محاسبه می‌شود:

$$\left(u_{in}\right)_j = u_j + \frac{P_{in} - P_j}{\rho_j a_j} \quad \text{(۳) الف)}$$

$$\left(v_{in}\right)_j = v_j + \frac{P_{in} - P_j}{\rho_j a_j} \quad \text{ب)}$$

$$\left(w_{in}\right)_j = w_j \quad \text{ج)}$$

اگر شرایط مرزی ورودی در راستای محور افقی وجود داشته باشد، از معادله (۳-الف) و (۳-ج) استفاده شده و در راستای محور عمودی شرط $\left(v_{in}\right)_j = v_j$ و اگر شرط مرزی ورودی در راستای عمودی باشد، سرعت ورودی از معادله (۳-ب) و (۳-ج) محاسبه شده و مؤلفه افقی سرعت از رابطه $\left(u_{in}\right)_j = u_j$ محاسبه می‌شود.

با فرض یک توزیع تعادلی ماکسول-بولتزمن، شار ذره در یک راستای معین به صورت زیر محاسبه می‌شود [۲۲ و ۲۳]:

$$\dot{n} = \frac{n\sqrt{2RT}}{2\sqrt{\pi}}\left(\begin{array}{l}\exp\left\{-\left(\frac{U}{\sqrt{2RT}}\right)^2\right\}\cos^2\theta + \\ \sqrt{\pi}\frac{U}{\sqrt{2RT}}\cos\theta\left\{1+erf\left(\frac{U}{\sqrt{2RT}}\cos\theta\right)\right\}\end{array}\right) \quad (۴)$$

شرط مرزی جریان در خروج از میدان تنها با اعمال فشار خروجی حاصل می‌شود. بنابراین چگالی، دما، و سرعت در خروجی میدان به صورت زیر به دست می‌آید. مقدار چگالی خروجی، از شار عددی ذرات در هر سلول قابل محاسبه است.

$$\left(u_e\right)_j = u_j + \frac{P_j - P_e}{\rho_j a_j} \quad \text{(۵) الف)}$$

$$\left(v_{in}\right)_j = v_j \quad \text{ب)}$$

$$\left(T_e\right)_j = \frac{P_e}{\left(\rho_e\right)_j R} \quad \text{ج)}$$

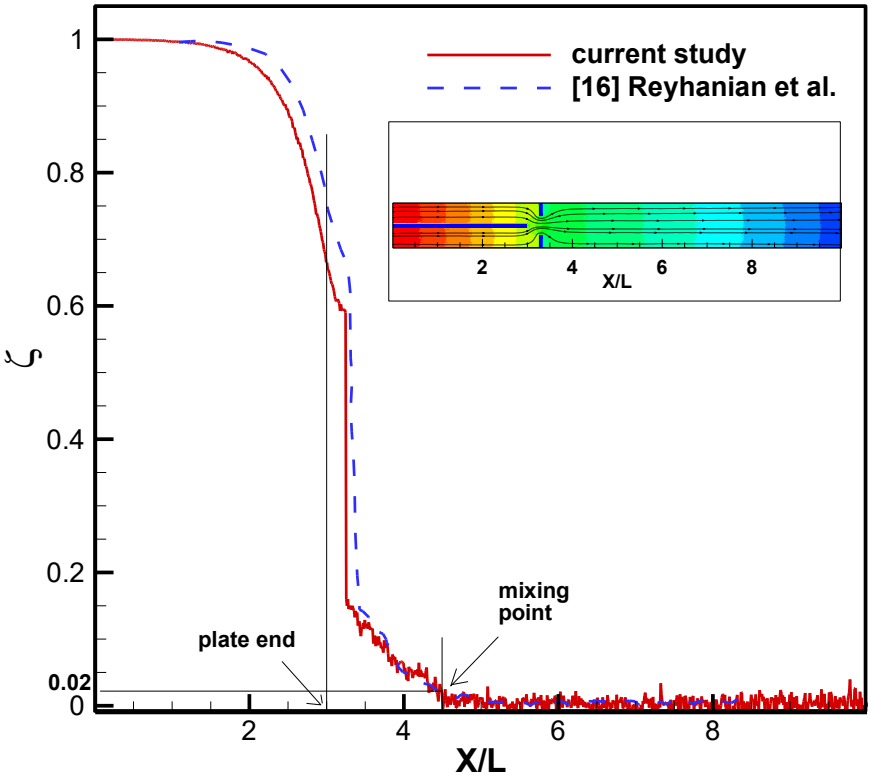
محدوده اعتبار روابط فوق برای رژیم جریان‌های لغزشی و انتقالی است [۲۳].

۳- اعتبارسنجی

میدان مورد بررسی شامل یک کانال است که از دو ورودی مجزا تشکیل شده است. گاز ورودی اول کربن‌مونواکسید و گاز ورودی دوم، نیتروژن است. طول کانال ۱۰ میکرومتر و ارتفاع کانال ۱ میکرومتر است. بیشینه فشار در ورودی میدان اتفاق می‌افتد که مقدار آن $P = ۱۵۰\,\text{kPa}$ است. همچنین دمای ورودی $T = ۳۰۰\,\text{K}$ کلوین درنظر گرفته می‌شود. دو جریان پس از گذشت ۳ میکرومتر از طول کانال با یکدیگر مخلوط می‌شوند. دو مانع به فاصله ۳/۳ میکرومتر از شروع کانال در بالا و پایین کانال قرار دارند و ارتفاع آنها برابر با ۰/۳ میکرومتر است.

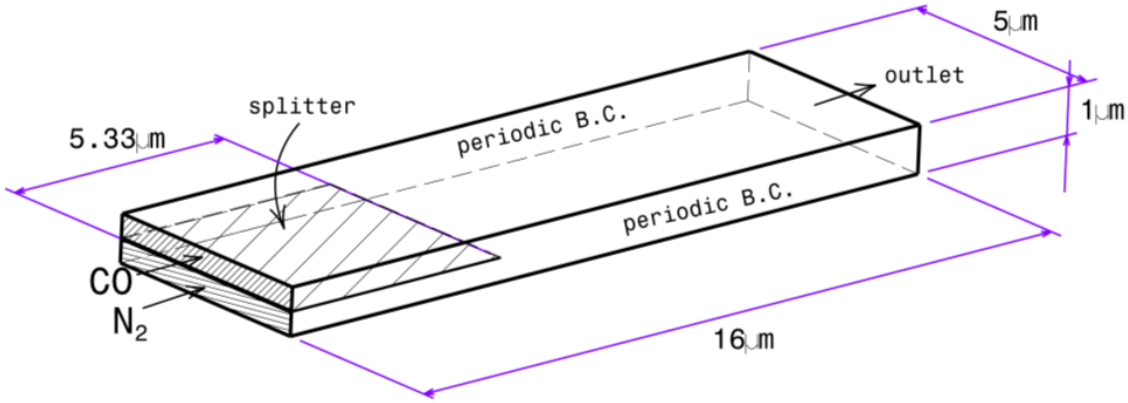
قطر ذرات نیتروژن و کربن‌مونواکسید به ترتیب برابر با $۴/۱۱\times۱۰^{-۱۰}$ و $۴/۱۲\times۱۰^{-۱۰}$ متر است. کمترین طول پویش آزاد مولکولی در شرایطی است که فشار بیشینه باشد (ورودی میدان حل). مقدار طول پویش آزاد مولکولی از رابطه $\lambda = kT / \sqrt{۲}\pi d^۲ P$

1 Diffusive
2 Periodic



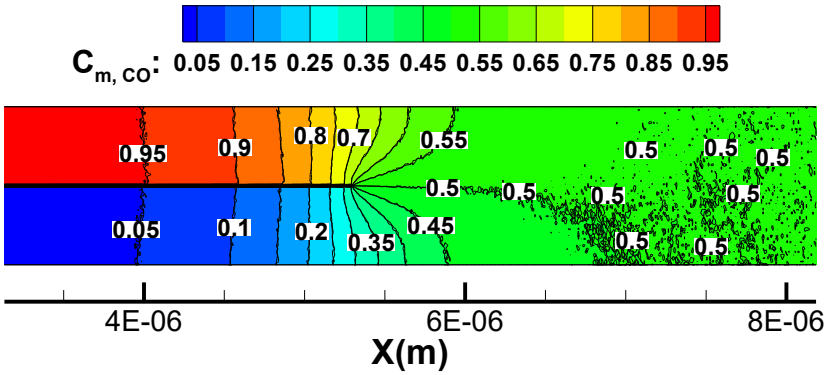
شکل ۲. نحوه محاسبه طول اختلاط

Fig. 2. Mixing length calculation procedure



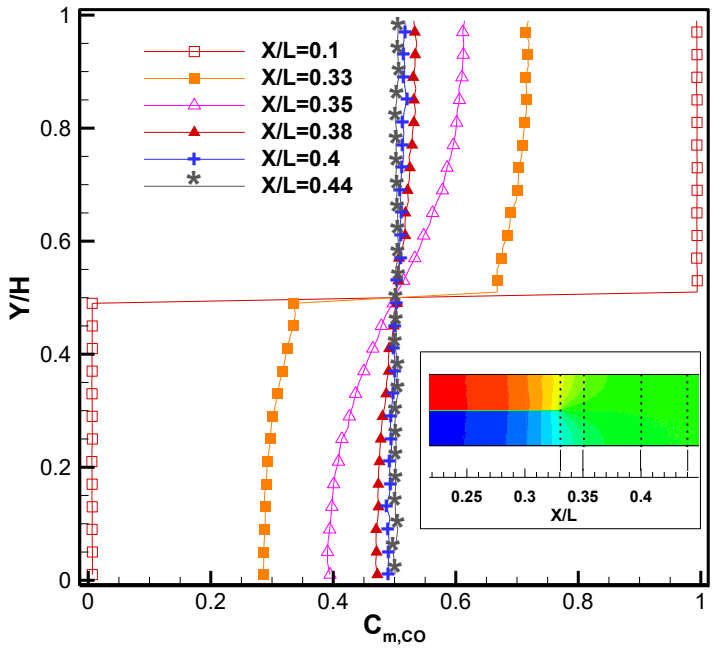
شکل ۳. مشخصات کانال اختلاط جریان

Fig. 3. Specifications of flow mixing channel



الف-کانتورهای کسر جرمی

a) Mass fraction contours



ب-توزیع کسر جرمی در مقاطع مختلف کانال

b) Mass fraction distribution at different sections of channel

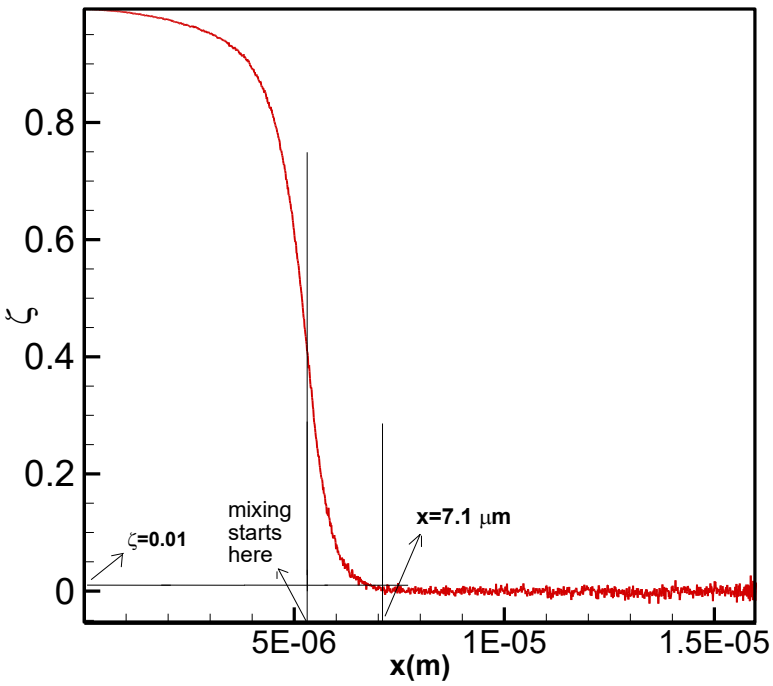
شکل ۴. مقادیر کسر جرمی گونه کربن‌مونواکسید در کانال اختلاط

Fig. 4. Mass fraction of carbon monoxide in mixing channel

۴- ۲- طول اختلاط نمونه مبنا

کانتورهای کسر جرمی گونه کربن‌مونواکسید در شکل ۴-الف نشان داده شده است. همچنین در فواصل مختلف از ورودی کانال، توزیع کسر جرمی گونه کربن‌مونواکسید در راستای عرض کانال نشان داده شده است (شکل ۴-ب). با توجه به شکل ۴-ب در نقاطی که کسر جرمی حول خط مرکزی کانال متقارن می‌شود، اختلاط کامل است. در این شرایط نیمی از کسر جرمی را گونه کربن‌مونواکسید و نیم دیگر را گونه نیتروژن تشکیل می‌دهد ($C_{m,CO} = C_{m,N_2} = ۰/۵$).

برای محاسبه دقیق طول اختلاط از رابطه ضریب اختلاط استفاده می‌شود (رابطه (۶)). مقدار ضریب اختلاط در صورت اختلاط کامل بایستی صفر در نظر گرفته شود اما به دلیل ماهیت آماری روش دی‌اس‌ام‌سی، در این مقاله، هرگاه مقدار این ضریب به ۰/۰۱ برسد، اختلاط کامل درنظر گرفته می‌شود. بر این اساس مقدار طول اختلاط برابر با ۷/۱ میکرومتر محاسبه می‌شود (شکل ۵).



شکل ۵. طول اختلاط (کانال با طول ۱۶ میکرومتر و عرض ۱ میکرومتر)

Fig. 5. Mixing Length (Channel with 16 μm length and 1 μm height)

۴- ۳- اثر تعداد و موقعیت موانع بر اختلاط جریان

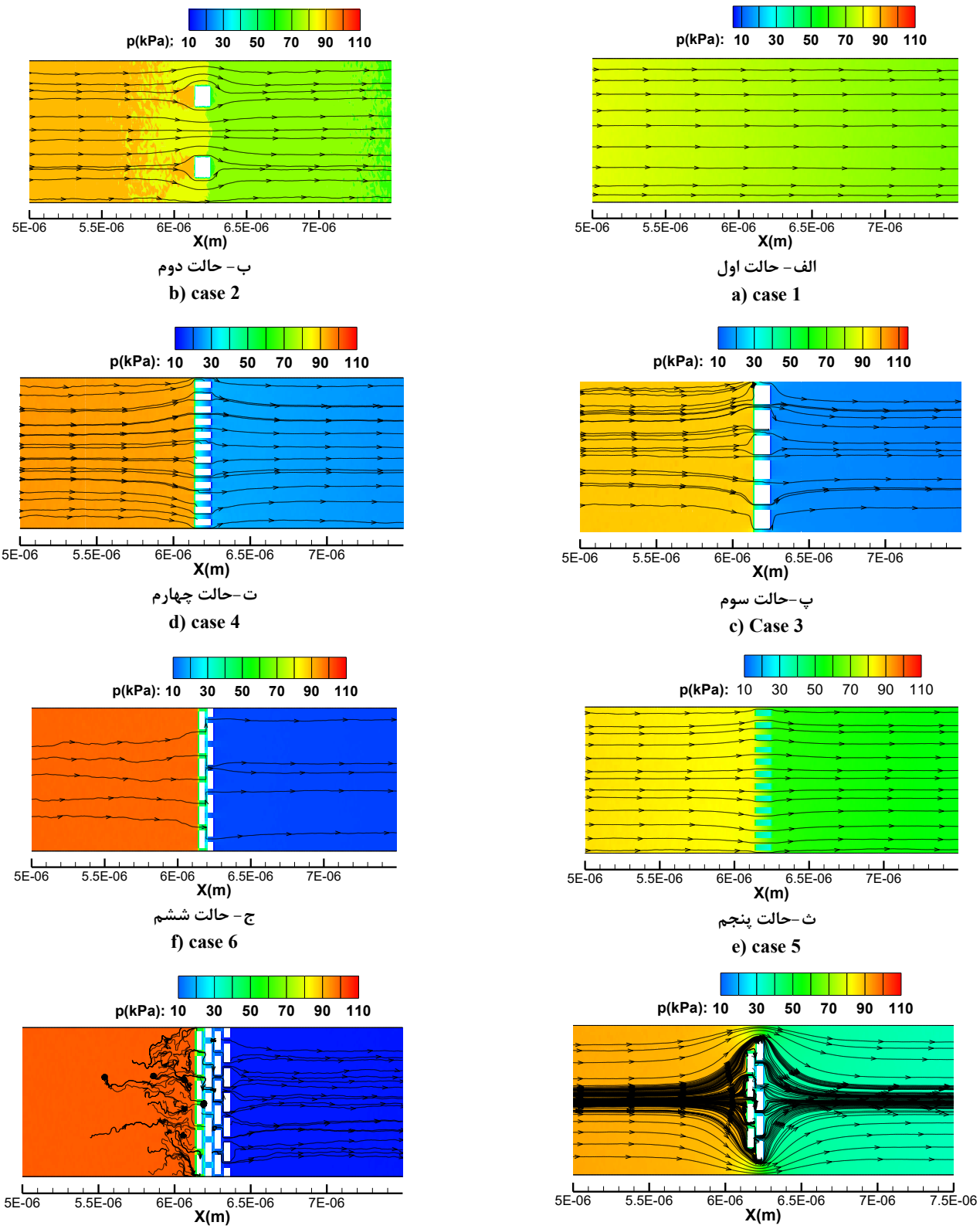
در این بخش اثر تعداد و موقعیت موانع جریان بر طول میکسینگ بررسی می‌شود. همچنین تنظیمات دقت حل شامل اندازه سلول، تعداد ذره در هر سلول و انتخاب گام زمانی با توجه به فرکانس برخورد مولکولی، درنظر گرفته می‌شود تا شبیه‌سازی از دقت بالایی برخوردار باشد. برخورد ذرات با تمام دیواره‌ها و سطوح از نوع دیفیوزیو درنظر گرفته می‌شود. مطابق شکل ۶، هشت حالت مختلف اختلاط در کانال در نظر گرفته می‌شود. حالت اول، کانال اختلاط بدون مانع است. در حالت دوم دو مانع، در حالت سوم ۶ مانع، در حالت چهارم و پنجم ۱۲ مانع به فاصله ۶/۱۵ میکرومتر از ورودی کانال قرار گرفته‌اند. در حالت ششم و هفتم دو ستون مانع و در حالت هشتم چهار ستون مانع به فاصله ۶/۱۵ میکرومتر از ورودی قرار گرفته‌اند. در تمامی حالت‌ها، فشار ورودی ۱۰۰ کیلوپاسکال، دمای ورودی ۳۰۰ کلوین و فشار خروجی تا حد امکان پایین در نظر گرفته می‌شود. برای تمام حالت‌های پیش‌گفته، نسبت انسداد به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$b=\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}A_i}{l\times H}} \qquad (۸)$$

که در رابطه فوق، A_i مساحت هر مانع، l طول کل بخش موانع در هر ردیف و H ارتفاع کانال است.

داده‌های ضریب اختلاط و نسبت انسداد در جدول ۱ لیست شده است. تفاوت قابل ملاحظه‌ای بین حالت سوم و حالت پنجم مشاهده می‌شود. همانطور که انتظار می‌رود با کاهش نسبت انسداد، طول اختلاط در حالت پنجم افزایش قابل ملاحظه‌ای یافته است. افزایش نسبت انسداد اثرات سرعتهای نفوذ را که عامل اصلی اختلاط در ابعاد میکرو هستند افزایش داده و منجر به کاهش طول اختلاط می‌شود. در حالت ششم، بیشترین میزان انسداد و کمترین طول اختلاط اتفاق افتاده است که ناشی از کاهش سرعت‌های انتقالی جریان در اثر افت فشار بالای جریان در محل موانع است.

با توجه به شکل ۶-ح در حالت هشتم، به وضوح اثرات انسداد کامل جریان با مشاهده خطوط جریان‌های برگشتی در بالادست موانع ملاحظه می‌گردد. این مساله اهمیت انتخاب تعداد مناسب موانع به منظور کاهش طول اختلاط را مشخص می‌کند. در حالت ششم (شکل ۶-ج) اگرچه نسبت انسداد جریان بالاتر از حالت هشتم است اما اثرات تداخلی موانع ردیف سوم و چهارم در نمونه هشتم به کلی خطوط جریان را منحرف نموده و جریان بازگشتی به بالادست جریان تا



الف- حالت اول
a) case 1

ب- حالت دوم
b) case 2

پ-حالت سوم
c) Case 3

ت-حالت چهارم
d) case 4

ث-حالت پنجم
e) case 5

ج- حالت ششم
f) case 6

چ- حالت هفتم
g) case 7

ح- حالت هشتم
h) case 8

شکل ۶. حالت‌های مختلف کانال با چیدمانی مختلف موانع

Fig. 6. Different configurations of channel by different layouts of obstacles

جدول ۱. مقادیر ضریب اختلاط و نسبت انسداد

Table 1. Mixing length and blockage ratio values

#	موقعیت مانع $x_b\,(\mu m)$	طول اختلاط $\xi\,(\mu m)$	طول مانع (μm)	تعداد ستون مانع	نسبت انسداد (b)
حالت اول	---	۷/۱	---	---	صفر
حالت دوم	۶/۱۵	۶/۹	۰/۱	۱	۰/۴۳
حالت سوم	۶/۱۵	۶/۳	۰/۱	۱	۰/۸۵
حالت چهارم	۶/۱۵	۶/۳۵	۰/۱	۲	۰/۸۳
حالت پنجم	۶/۱۵	۶/۸	۰/۱	۲	۰/۵
حالت ششم	۶/۱۵	۶/۲۵	۰/۰۴	۲	۰/۹۵
حالت هفتم	۶/۱۵	۶/۳۵	۰/۰۴	۲	۰/۸۳
حالت هشتم	۶/۱۵	۶/۲۸	۰/۰۴	۴	۰/۹۳

ورودی میدان ادامه پیدا کرده است. در حالت ششم، نسبت بالای انسداد، موجب انحنای خطوط جریان شده است اما جریان بازگشتی ملاحظه نمی‌شود.

شکل ۷ نشان می‌دهد که به طور کلی با افزایش نسبت انسداد، طول اختلاط کاهش می‌یابد.

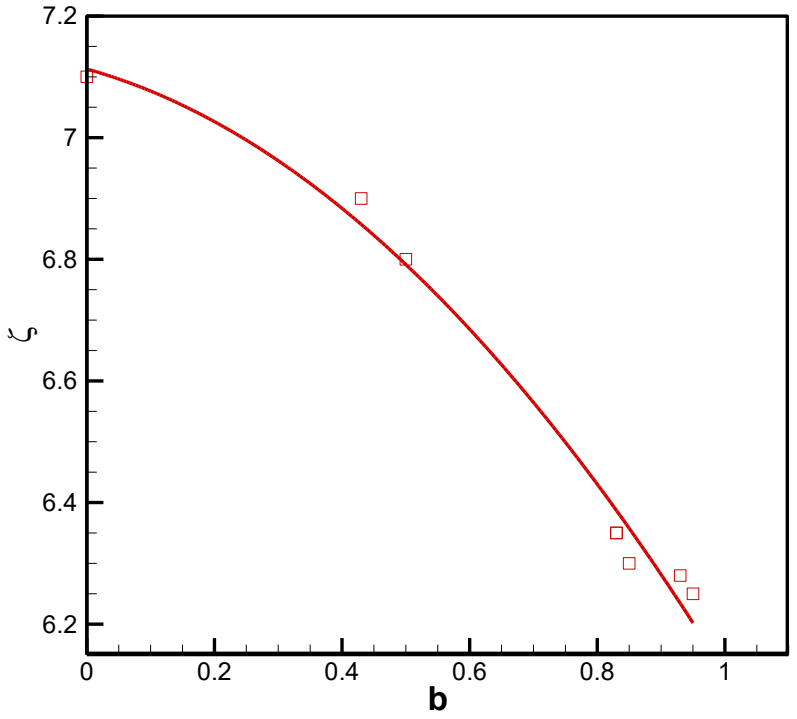
دبی جرمی هر حالت نیز با استفاده از رابطه $\dot{m} = \int_{dA} \rho_i u_i \, dA_i$ محاسبه شده است. مقدار دبی جرمی برای نمونه اول تا هشتم به ترتیب برابر با ۳۲، ۲۹، ۵/۶، ۹/۲، ۲۳/۷، ۲/۳، ۱۳/۸، و ۰/۸ میکروگرم بر ثانیه محاسبه شده است. با افزایش نسبت انسداد، دبی جرمی کاهش یافته و افزایش نسبت انسداد باعث کاهش طول اختلاط می‌شود؛ بنابراین پدیده اختلاط با افزایش نسبت انسداد تسریع یافته درحالیکه دبی جرمی کانال نیز کاهش می‌یابد.

به منظور مطالعه اثرات انتقالی جریان، کانتورهای عدد ماخ برای هشت نمونه بررسی شده‌اند(شکل ۸). در تمامی نمونه‌ها در پایین‌دست هر مانع یک ناحیه با سرعت کم تشکیل می‌شود که اثرات انتقالی را کاهش داده و موجب تقویت نفوذ و اختلاط می‌شود. همچنین با بیشتر شدن نسبت انسداد، سرعت جریان در بالادست موانع، بیشتر کاهش می‌یابد. به عبارت دیگر فشار خروجی کانال، کمتر بر بالادست موانع اثرگذار خواهد بود.

توزیع عدد ماخ در فاصله $X/L = ۰/۴$ (یعنی دقیقاً بعد از موانع) در راستای ارتفاع کانال برای تمامی نمونه‌های فوق در شکل ۹ نشان داده شده است. موانع موجود در کانال، جریان را به کانال‌های باریک‌تری تبدیل می‌کنند که پروفیل سرعت سهموی خود را دارند. همچنین ملاحظه می‌شود که جریان در محل موانع با افزایش سرعت، کاهش دبی جرمی را تا حدی جبران می‌کند. در صورتیکه متوسط عدد ماخ هر مقطع (که در جدول ۲ بیان شده است) بیانگر آن است که (به جز نمونه هفتم)، وجود موانع به طور کلی باعث کاهش عدد ماخ جریان می‌گردد. در واقع موانع کانال باعث کاهش مومنتوم جریان و افزایش اتلافات شده و متوسط عدد ماخ را کاهش می‌دهند.

در نمونه هفتم، عدد ماخ موضعی بالایی که در نزدیکی دیواره رخ داده است، سبب تقویت سرعت‌های لغزشی نزدیک دیواره شده و متوسط عدد ماخ را افزایش می‌دهد. نمونه چهارم و هفتم نسبت انسداد یکسانی دارند، اما تقویت سرعت لغزشی منجر به افزایش دبی جرمی و همچنین طول اختلاط در نمونه هفتم شده است. این مساله نشان می‌دهد که بهتر است چیدمان موانع به نحوی باشد که سرعت‌های لغزشی کناره دیواره‌ها را تقویت نکند.

به منظور بررسی دقیق‌تر جریان، افت فشار در محل موانع نیز مورد بررسی قرار گرفت. ملاحظه می‌شود که جریان در محل موانع، دچار افت فشار موضعی می‌گردد. در نسبت‌های انسداد بالاتر، افت فشار جریان بیشتر است. نمونه سوم، ششم و هشتم، بیشترین افت فشار را دارند. همچنین در نمونه چهارم و هفتم که نسبت انسداد یکسانی دارند، نمونه چهارم، افت فشار بالاتری را تجربه می‌کند. نمونه‌های اول، دوم و پنجم، کمترین افت فشار و کمترین میزان انسداد را دارند



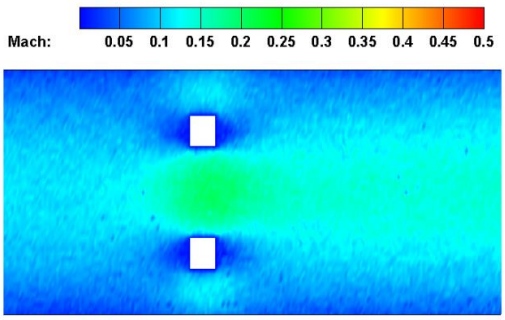
شکل ۷. تغییرات طول اختلاط با نسبت انسداد

Fig. 7. Variation of mixing length with blockage ratio

جدول ۲. مقادیردبی جرمی و متوسط عدد ماخ

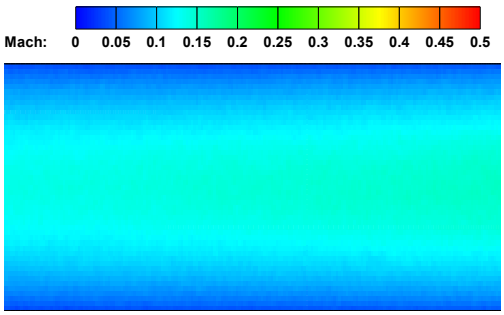
Table 2. Mass flow and average of Mach number values

	تعداد موانع				متوسط عدد ماخ در X/L=۰/۴	دبی جرمی (میکروگرم بر ثانیه)
	ستون اول	ستون دوم	ستون سوم	ستون چهارم		
حالت اول	---	---	---	---	۰/۱	۳۲
حالت دوم	۲	---	---	---	۰/۰۹	۲۹
حالت سوم	۶	---	---	---	۰/۰۸۱	۵/۶
حالت چهارم	۱۲	---	---	---	۰/۰۸۱	۹/۲
حالت پنجم	۱۲	---	---	---	۰/۰۸۹	۲۳/۷
حالت ششم	۶	---	---	---	۰/۰۶۷	۲/۳
حالت هفتم	۴	۵	---	---	۰/۱۲	۱۳/۸
حالت هشتم	۶	۶	۶	۶	۰/۰۷۴	۰/۸



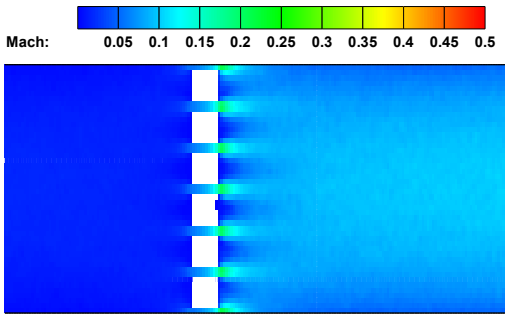
الف- نمونه اول

a) case 1



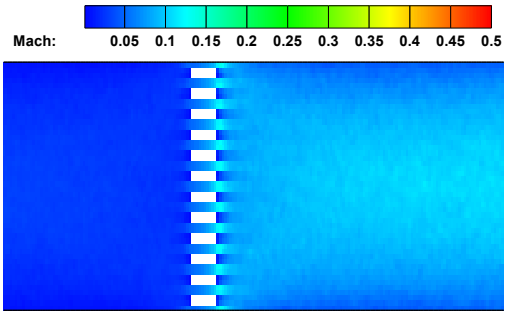
ب-نمونه دوم

b) case 2



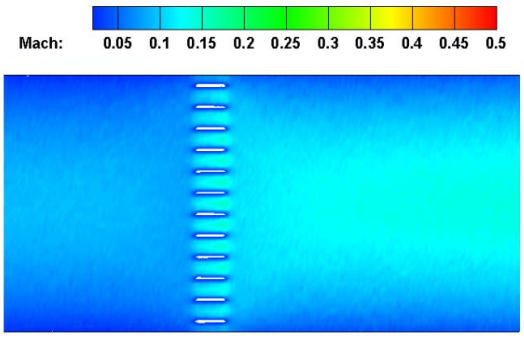
پ-نمونه سوم

c) case 3



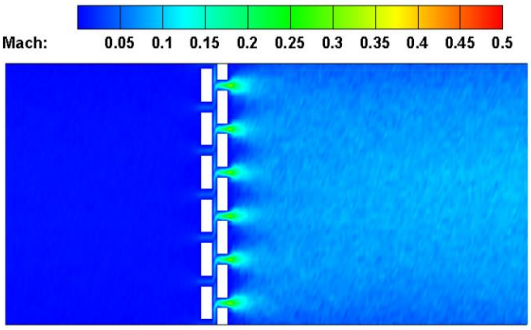
ت-نمونه چهارم

d) case 4



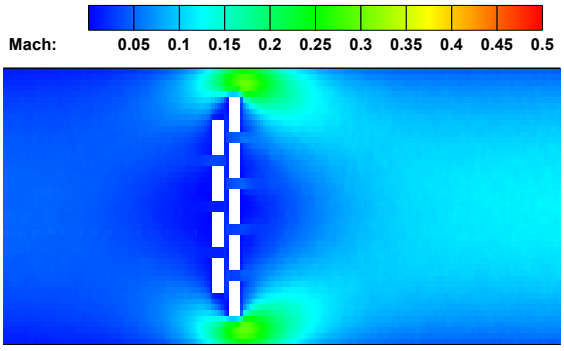
ث-نمونه پنجم

e) case 5



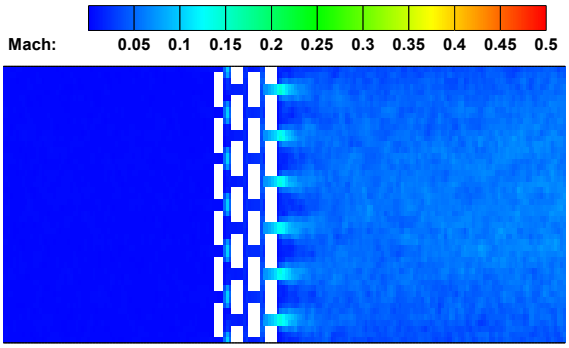
ج-نمونه ششم

f) case 6



چ-نمونه هفتم

g) case 7

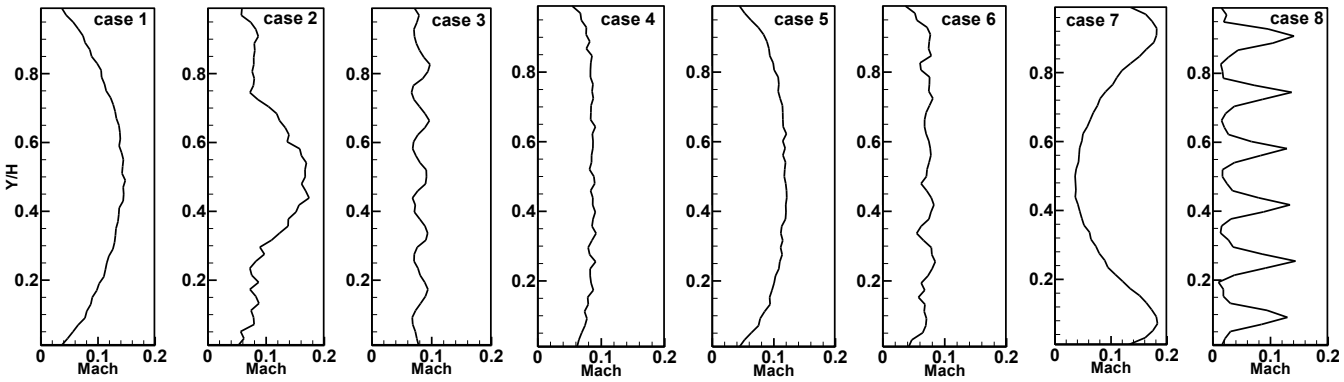


ح-نمونه هشتم

h) case 8

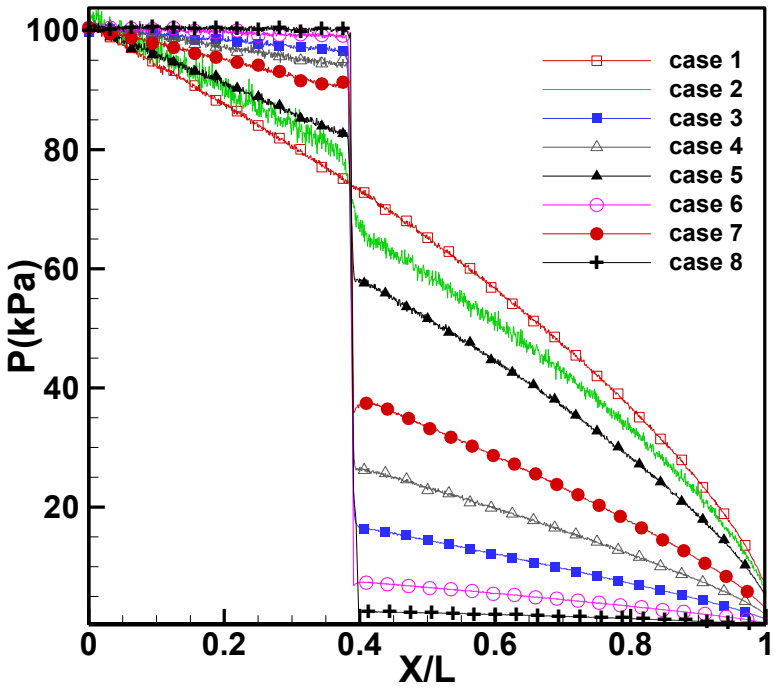
شکل ۸. کانتورهای عدد ماخ برای هشت نمونه مورد بررسی

Fig. 8. Mach number contours for eight case studies



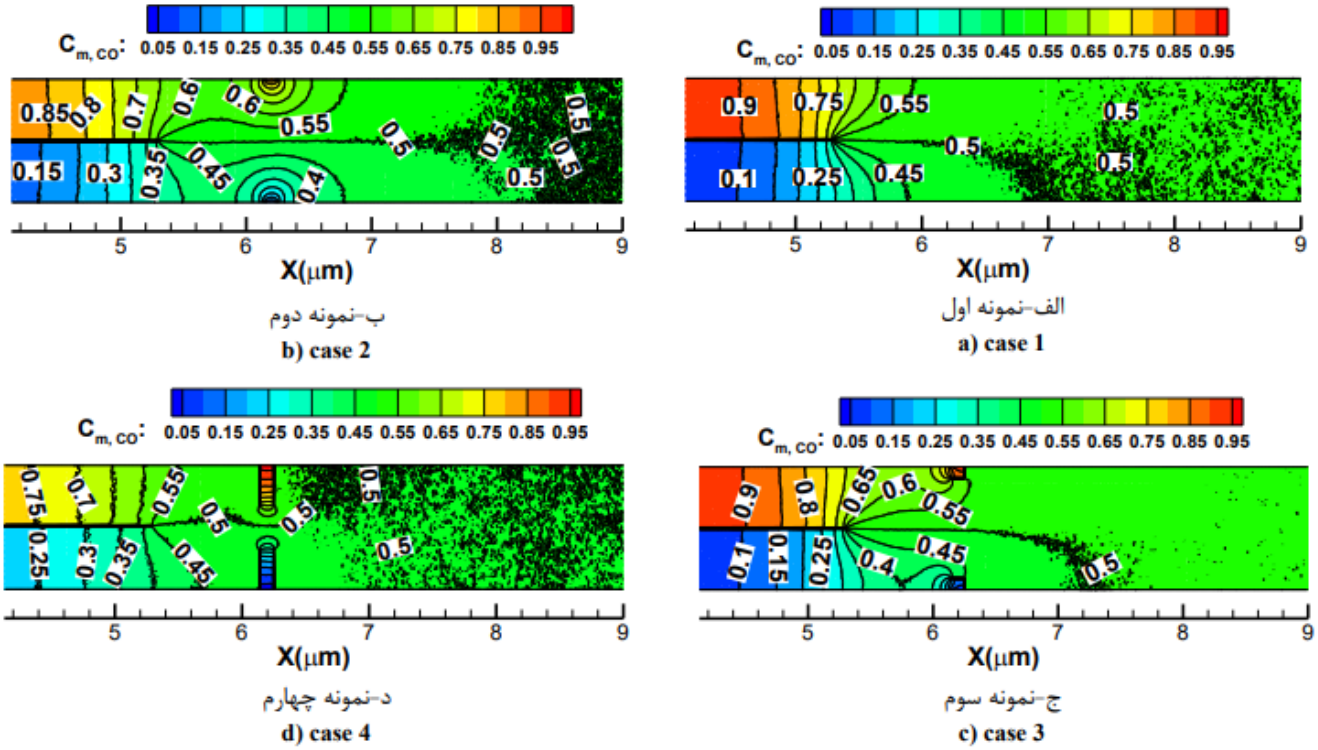
شکل ۹. توزیع عدد ماخ در X/L =۰/۴ در راستای ارتفاع کانال

Fig. 9. Mach number distribution at X/L=0.4 along channel height



شکل ۱۰. افت فشار جریان در راستای طول کانال در امتداد خط مرکزی

Fig. 10. Pressure drop along channel length at centerline



شکل ۱۱. توزیع کسر جرمی کربن‌مونواکسید برای چهار نمونه

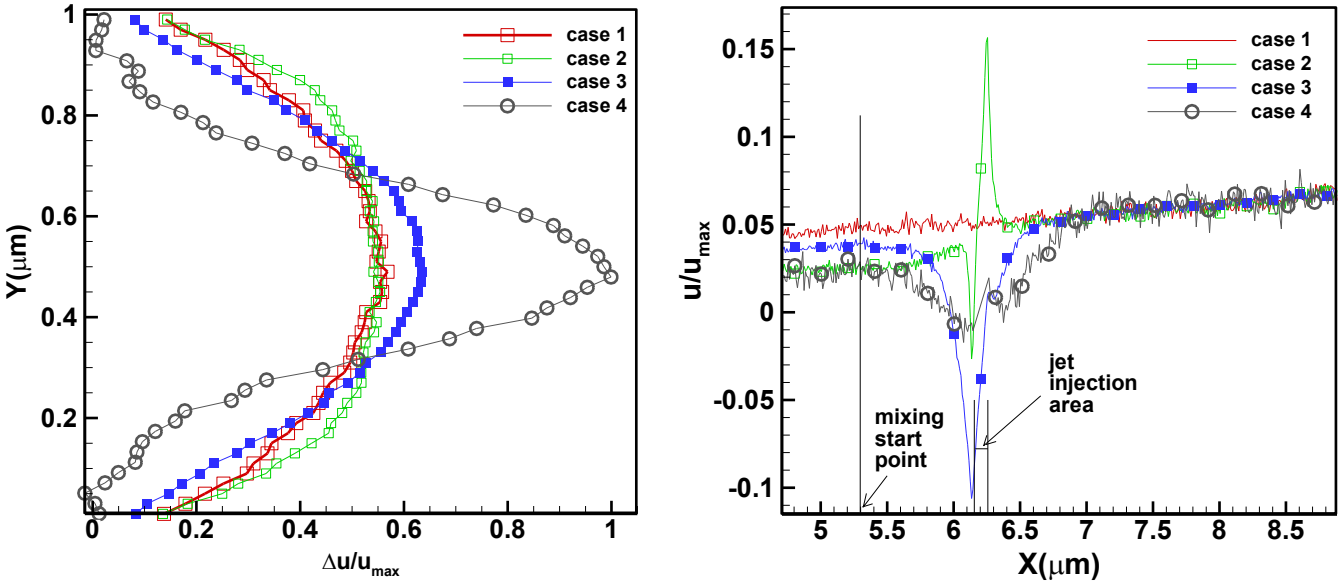
Fig. 11. Carbon Monoxide mass fraction distribution for four cases

۴- ۴- اثر تزریق جریان بر طول اختلاط

در ابعاد ماکرو، تزریق جریان جانبی به دلیل ایجاد گردابه‌های ناشی از اثرات مغشوش شدن جریان، منجر به بهبود اختلاط می‌شود [۳۳ و ۳۴]. در ابعاد میکرو به دلیل عدد رینولدز پایین و در نتیجه جریان لمینار در داخل کانال [۳۵]، تزریق جریان جانبی متفاوت با ابعاد بزرگ بوده و بایستی مورد بررسی قرار گیرد.

چهار نمونه برای این بخش بررسی شده است. نمونه اول، جریان بدون تزریق عرضی می‌باشد (حالت معیار). در نمونه دوم، یک جریان جانبی (عمود بر جهت جریان اصلی)، در نمونه سوم، یک جریان افقی مخالف جهت جریان اصلی از فاصله بی‌بعد ۰/۳۸ ورودی کانال، و در نمونه چهارم یک جریان از داخل یک مانع به صورت عمودی به جریان اصلی کانال تزریق می‌شود. فشار جریان جانبی و معکوس برای همه نمونه‌ها ۱۰۰ کیلوپاسکال و دمای آن ۳۰۰ کلوین است. در نمونه سوم، جریان از داخل یک مجرا با ارتفاع ۰/۱ میکرومتر به داخل میدان و در خلاف جهت تزریق می‌شود. در نمونه چهارم، تزریق عمودی جریان از داخل یک مجرا که ارتفاع آن ۰/۳ میکرومتر و دمای دیواره‌های آن ۳۰۰ کلوین است، به جریان اصلی تزریق می‌گردد. کانتورهای توزیع کسر جرمی برای چهار نمونه فوق در شکل ۱۱ نشان داده شده‌اند. در شرایطی که کسر جرمی هریک از گونه‌ها برابر با ۰/۵ می‌شود، اختلاط به صورت کامل انجام گرفته است. با توجه به شکل ۱۱ مشاهده می‌شود که در نمونه دوم، طول اختلاط افزایش چشمگیری یافته و اختلاط به تأخیر افتاده است.

تغییرات مؤلفه افقی جریان برای نمونه اول تا چهارم در شکل ۱۲ نشان داده شده است. با توجه به شکل ۱۲-الف جریان در محل تزریق در نزدیکی دیواره رفتار پیچیده‌ای دارد. در نمونه دوم تا چهارم در محل تزریق افت مقدار مؤلفه افقی سرعت مشاهده می‌شود. اینگونه به نظر می‌رسد که تزریق جت جریان در هر سه نمونه، شبیه به یک مانع عمل می‌کند. برای هر سه نمونه، پس از ناحیه تزریق جریان، در نزدیکی دیواره افزایش سرعت مشاهده می‌شود که ناشی از تأثیر مومنتوم توده جریان تزریقی در این نقطه است. بر اساس شکل



الف-تغییرات مؤلفه افقی سرعت در راستای طولی در نزدیکی دیواره

a) variation of axial velocity along the channel near the wall

ب-تغییرات مؤلفه افقی سرعت در راستای عرضی به فاصله x/L=۰/۳۸ از ورودی کانال

b) variation of vertical velocity along the channel height at x/L=0.38

شکل ۱۲. تغییرات سرعت افقی و عمودی جریان

Fig. 12. variation of axial and vertical velocity

جدول ۳. مقادیر دبی جرمی و طول اختلاط

Table 3. Mass flow rate and mixing length values

	وضعیت تزریق جریان	دبی جرمی (میکروگرم بر ثانیه)		طول اختلاط (میکرومتر)
		ورودی کانال	خروجی کانال	
نمونه اول	بدون تزریق	۳۲	۳۲	۷/۱
نمونه دوم	تزریق عمودی	۲۶/۸	۳۲/۳	۸/۳
نمونه سوم	تزریق افقی معکوس	۲۶/۸	۳۲/۳	۷/۴۵
نمونه چهارم	تزریق عمودی از داخل مانع	۱۸	۲۷/۱	۶/۹۵

۱۲-ب متوسط اختلاف سرعت افقی بی‌بعد شده قبل و بعد از تزریق، برای نمونه اول، دوم، سوم و چهارم به ترتیب ۰/۳۶، ۰/۳۷، ۰/۳۶ و ۰/۴۸ است. به دلیل تقارن دامنه حل برای نمونه دوم و سوم، تزریق جریان تاثیری بر متوسط اختلاف سرعت و یا به عبارتی اثرات انتقالی نگذاشته است. همچنین ملاحظه می‌شود که سرعت‌های لغزشی بر متوسط اختلاف سرعت تأثیر چندانی ندارند. در نمونه چهارم، به دلیل وجود سیالی که از درون مانع به جریان تزریق می‌شود، سرعت افقی افزایش یافته است.

مقادیر طول اختلاط و دبی جرمی برای چهار نمونه فوق در جدول ۳ محاسبه شده‌اند. نمونه دوم و سوم دبی جرمی یکسانی دارند. متوسط سرعت کل در فاصله ۷/۱ میکرومتر از ورودی کانال، برای نمونه دوم ۳۸ متر بر ثانیه و برای نمونه سوم ۳۴ متر بر ثانیه محاسبه

شده است. بنابراین انرژی جنبشی بالاتر جریان در نمونه دوم، منجر به تأخیر در اختلاط شده است. در نمونه چهارم، کاهش دبی جرمی منجر به کاهش طول اختلاط شده است. بنابراین با وجود متوسط سرعت بالاتر در محل موانع، کاهش دبی جرمی نقش مهم‌تری در کاهش طول اختلاط دارد.

۵- نتیجه‌گیری

در این مقاله، روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو مورد استفاده قرار گرفت. اختلاط دو گونه گازی در داخل یک میکروکانال و اثرات موانع در داخل کانال بررسی شد. هشت پیکربندی از محل موانع در نظر گرفته شد. نمونه اول به عنوان نمونه پایه فاقد موانع در داخل کانال است و معیار قرار گرفت. برای نمونه‌های دوم و سوم به ترتیب دو و شش مانع، در نمونه‌های چهارم و پنجم دوازده مانع با فواصل مختلف، برای نمونه‌های ششم و هفتم دو ستون مانع با فواصل مختلف و در نمونه هشتم چهار ستون مانع در کانال قرار گرفت. پارامتری به نام نسبت انسداد تعریف گردید که میزان کاهش سطح مقطع عبوری جریان را محاسبه می‌کند. با افزایش نسبت انسداد، طولی که در آن دو گونه با یکدیگر مخلوط می‌شوند، تا ۱۰٪ کاهش یافت. افزایش انسداد، سرعت‌های انتقالی جریان را کاهش داده و فرایند اختلاط را تسریع نمود. در نمونه هشتم به دلیل تاثیرات تداخلی چهار ستون مانع، بالادست موانع دچار جریان‌های بازگشتی گردید. با افزایش نسبت انسداد، دبی جرمی جریان نیز به طور قابل توجهی کاهش پیدا کرد.

همچنین تزریق جریان به صورت عرضی و در خلاف جهت جریان اصلی به داخل کانال انجام شد و اثرات آن بر اختلاط مورد بررسی قرار گرفت. چهار نمونه مطالعه گردید. در نمونه اول، کانال بدون تزریق است، در نمونه دوم، جریان به صورت عمودی و در نمونه سوم جریان در خلاف جهت اصلی به کانال تزریق شد. در نمونه چهارم، جریان به صورت عمودی از داخل یک مانع تزریق گردید. نتایج نشان داد که برای همه حالتها، تزریق جریان مانند موانع عمل کرده و دبی جرمی ورودی به کانال کاهش یافت، اما جریان تزریق شده، خود منجر به افزایش دبی خروجی از کانال گردید. اضافه شدن جریان عرضی و خلاف جهت، منجر به افزایش سرعت کل جریان شده و انرژی جنبشی را افزایش می‌دهد. افزایش انرژی جنبشی به ویژه در نمونه دوم باعث افزایش چشمگیر طول اختلاط نسبت به حالت مبنا گردید به طوری که طول اختلاط ۱۴٪ افزایش یافت. در شرایط تزریق خلاف جهت (نمونه سوم) نیز طول اختلاط ۵٪ افزایش یافت.

۶- فهرست علائم

علائم انگلیسی

a	سرعت صوت، ms^{-1}
c	سرعت مولکولی، ms^{-1}
C_m	کسر جرمی
c_r	سرعت مولکولی نسبی، ms^{-1}
d	قطر مولکولی، m
f	تابع توزیع سرعت
H	عرض کانال، m
L	طول کانال، m
n	چگالی عددی، m^{-3}
R_f	مقداری تصادفی بین صفر و یک
s	نسبت سرعت مولکولی
t	زمان، s
T	دما، K
u	سرعت در راستای محور طولی، ms^{-1}
U	متوسط سرعت موضعی در راستای محور طولی، ms^{-1}
v	سرعت در راستای محور عرضی، ms^{-1}
w	سرعت در راستای محور عمق، ms^{-1}

علائم یونانی

λ	طول پویش آزاد مولکولی، m
ζ	طول اختلاط، m
σ	سطح مقطع برخورد مولکولی، m^2
θ	زاویه بین بردار سرعت و عمود بر المان مرزی
ρ	چگالی، kg/m^3

زیرنویس

e	خروجی
i	شماره گونه
in	ورودی
j	شماره سلول
p	گونه p
q	گونه q
∞	حالت تعادلی

بالانویس

*	شرایط پس از برخورد

منابع

[1] M.A. Moyet, Hossen, M. R., Ward, A., Adams, O., Mason, M. D., Collins, S. D., Smith, R. L., MEMS Micromixer for Ultra Fast Mixing of Fluids, in: 2020 IEEE 33rd International Conference on Micro Electro Mechanical Systems (MEMS), IEEE, China, 2020, pp. 1137-1140.

[2] B. Farshchian, Amirsadeghi, A., Choi, J. P., Daniel S., Namwon, P., 3D nanomolding and fluid mixing in micromixers with micro-patterned microchannel walls, Nano Convergence, 4(1) (2017) 1-10.

[3] Y. Su, Chen, G., Kenig, E. Y., An experimental study on the numbering-up of microchannels for liquid mixing, Lab on a Chip, 15(1) (2015) 179-187.

[4] I. Shah, Kim, S. W., Kim, K., Doh, Y. H., Choi, K. H., Experimental and numerical analysis of Y-shaped split and recombination micro-mixer with different mixing units, Chemical Engineering Journal, 358 (2019) 691-706.

[5] H.A. Stone, Kim, S, Microfluidics: basic issues, applications, and challenges, American Institute of Chemical Engineers. AIChE Journal, 47(6) (2001) 1250-1271.

[6] A.D. Stroock, Dertinger, Stephan KW, Ajdari, A., Mezic, I., Stone, H. A., Whitesides, G. M., Chaotic mixer for microchannels, Science, 295(5555) (2002) 647-651.

[7] S.S. Das, Tilekar, S. D., Wangikar, S. S, Patowari, P. K., Numerical and experimental study of passive fluids mixing in micro-channels of different configurations, Microsystem Technologies, 23(12) (2017) 5977-5988.

[8] C.Y. Lee, Wang, W. T., Liu, C. C., Fu, L. M., Passive mixers in microfluidic systems: A review, Chemical Engineering Journal, 288 (2016) 146-160.

[9] X. Shi, S. Huang, L. Wang, F. Li, Numerical analysis of passive micromixer with novel obstacle design, Journal of Dispersion Science and Technology, 42(3) (2021) 440-456.

[10] G. Cai, Xue, L., Zhang, H., Lin, J., A review on micromixers, Micromachines, 8(9) (2017) 274-281.

[11] X. Chen, S. Liu, Y. Chen, S. Wang, A review on species mixing in droplets using passive and active micromixers, International Journal of Environmental Analytical Chemistry, 101(3) (2021) 422-432.

[12] K. Ward, Fan, Z. H., Mixing in microfluidic devices and enhancement methods, Journal of Micromechanics and Microengineering, 25(9) (2015) 094-103.

[13] F. Yan, Farouk, B., Numerical simulation of gas flow and mixing in a microchannel using the direct simulation Monte Carlo method, Microscale thermophysical engineering, 6(3) (2002) 235-251.

[14] M. Wang, Li, Z., Gas mixing in microchannels using the direct simulation Monte Carlo method, International Journal of Heat and Mass Transfer, 49(9-10) (2006) 1696-1702.

[15] M. Le, Hassan, I, DSMC simulation of gas mixing in T-shape micromixer, Applied Thermal Engineering, 27(14-15) (2007) 2370-2377.

[16] M. Reyhanian, Croizet, Cédric, Gatignol, R, Numerical analysis of the mixing of two gases in a microchannel, Mechanics & Industry, 14(6) (2013) 453-460.

[17] M. Darbandi, , Sabouri, M., DSMC Study of Gas Mixing Enhancement in Nanoscales Using Throttling Technology, in: 5th International Conference on Nanostructures, Kish Island, 2014.

[18] M. Darbandi, Lakzian, E., Mixing enhancement of two gases in a microchannel using DSMC, in: Applied Mechanics and Materials, Trans Tech Publ, Dubai, 2013, pp. 166-169.

[19] C.Y. Huang, Wan, S. A., Hu, Y. H., Oxygen and nitrogen gases mixing in T-type micromixers visualized and quantitatively characterized using pressure-sensitive paint, International Journal of Heat and Mass Transfer, 111 (2017) 520-531.

[20] C.Y. Huang, Hu, Y. H., Wan, S. A., Nagai, H., Application of pressure-sensitive paint for the characterization of mixing with various gases in T-type micromixers, International Journal of Heat and Mass Transfer, 156 (2020) 119-131.

[21] G. Karniadakis, Beskok, A., Aluru, N., Microflows

and nanoflows: fundamentals and simulation, Springer Science & Business Media, 2006.

[22] N. Shah, Gavasane, A., Agrawal, A., Bhandarkar, U., Comparison of Various Pressure Based Boundary Conditions for Three-Dimensional Subsonic DSMC Simulation, Journal of Fluids Engineering, 140(3) (2018) 217-233.

[23] M. Wang, Z. Li, Simulations for gas flows in microgeometries using the direct simulation Monte Carlo method, International Journal of Heat and Fluid Flow, 25(6) (2004) 975-985.

[24] E. Lekzian, Ebrahimi, A, Parhizkar, H, Performance analysis of microelectromechanical thrusters using a direct simulation Monte Carlo solver, Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G: Journal of Aerospace Engineering, 232(7) (2018) 1212-1222.

[25] E. Roohi, Stefanov, S., Shoja-Sani, A., Ejraei, H., A generalized form of the Bernoulli Trial collision scheme in DSMC: Derivation and evaluation, Journal of Computational Physics, 354 (2018) 476-492.

[26] M. Shamseddine, Lakkis, I., A novel spatio-temporally adaptive parallel three-dimensional DSMC solver for unsteady rarefied micro/nano gas flows, Computers & Fluids, 186 (2019) 1-14.

[27] D. Bothe, C. Stemich, H.-J. Warnecke, Fluid mixing in a T-shaped micro-mixer, Chemical Engineering Science, 61(9) (2006) 2950-2958.

[28] L.T. Rao, S. Goel, S.K. Dubey, A. Javed, Performance Investigation of T-Shaped Micromixer with Different Obstacles, in: Journal of Physics: Conference Series, IOP Publishing, 2019, pp. 12-21.

[29] C.-Y. Wu, B.-H. Lai, Numerical study of T-shaped micromixers with vortex-inducing obstacles in the inlet channels, Micromachines, 11(12) (2020) 1122.

[30] D. Gobby, P. Angeli, A. Gavriilidis, Mixing characteristics of T-type microfluidic mixers, Journal of Micromechanics and microengineering, 11(2) (2001) 126.

[31] A. Lobasov, A. Minakov, Analyzing mixing quality in a T-shaped micromixer for different fluids properties through numerical simulation, Chemical Engineering and Processing-Process Intensification, 124(4) (2018) 11-23.

[32] C.A. Roseman, Argrow, Brian M, Low-Speed DSMC Simulations of Hotwire Anemometers at High-Altitude Conditions, Fluids, 6(1) (2021) 20-32.

[33] A. Uyanwaththa, Malalasekera, W., Hargrave, G., Dubal, M., Large eddy simulation of scalar mixing in jet in a cross-flow, Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 141(6) (2019) 531-542.

[34] C. Priere, Gicquel, L. Y. M., Kaufmann, P., Krebs, W., Poinsot, T., Large eddy simulation predictions of mixing enhancement for jets in cross-flows, Journal of Turbulence, 5 (2004) 303-313.

[35] X. Chu, Zeng, X., Zheng, T. ,Z., Weihuang, Y., Yifan, Z., Wei, H. Y., Structural design and performance research of methanol steam reforming microchannel for hydrogen production based on mixing effect, International journal of hydrogen energy, 45(41) (2020) 0859-0874.

چگونه به این مقاله ارجاع دهیم

E. Lekzian, H. R. Farshi Fasih, Effect of Obstacles Location and Flow Injection on the Mixing of Two-Gaseous Flow in a Microchannel , Amirkabir J. Mech Eng., 54(9) (2022) 2139-2156.

DOI: 10.22060/mej.2022.21339.7431