



شبیه‌سازی نفوذ قطره دو بعدی در داخل محیط متخلخل با استفاده از روش بولتزمن شبکه‌ای

محمد تقیلو^۱، محمد حسن رحیمیان^{۲*}

۱- دانشجوی دکتری مکانیک، دانشگاه تبریز، تبریز

۲- دانشیار مهندسی مکانیک، دانشگاه تهران، تهران

* تهران، صندوق پستی ۱۴۳۷۸۳۴۴۱۱، rahimyan@ut.ac.ir

چکیده- شبیه‌سازی جریان دوفازی موضوع تحقیقات بسیاری بوده است. با این حال بررسی آن در داخل محیط متخلخل به علت پیچیدگی مضاعف آن کمتر مورد مطالعه قرار گرفته است. در این مقاله جریان دوفازی با نسبت چگالی و لزجت یک در داخل محیط متخلخل به روش شان و چن شبیه‌سازی شده است. به علت محدودیت ذاتی این روش و ضعف آن در کنترل مستقل کشش سطحی، تأثیر پارامترهایی نظیر عدد رینولدز و وبر قابل ارزیابی نمی‌باشد. اما با این حال می‌توان با تغییر میدان متخلخل و زاویه تماس تأثیر پارامترهای مربوط به محیط متخلخل از قبیل عدد دارسی و زاویه تماس را مطالعه نمود. رقابت میان نیروی مخالف در برابر حرکت قطره اثر موئینگی در اثر حضور ذرات محیط متخلخل، به کمک عدد دارسی توصیف شده است. همچنین تأثیر زاویه تماس میان فازهای مایع-گاز و سطح جامد بر میزان نفوذ قطره در داخل محیط متخلخل ارزیابی گردیده است.

کلیدواژگان: محیط متخلخل، جریان دوفازی، نفوذ، روش بولتزمن شبکه‌ای، مدل شان و چن.

Simulation of 2D droplet penetration in porous media using lattice Boltzmann method

M. Taghilou¹, M. H. Rahimian^{2*}

1- PhD Student, Faculty of Mech. Eng., Tabriz Univ., Tabriz, Iran

1- Assoc. Prof., Faculty of Mech. Eng., Tehran Univ., Tehran, Iran

* P.O.B. 1437834411 Tehran, Iran. rahimyan@ut.ac.ir

Abstract- Two-phase flow modeling has been the subject of many investigations. However, few studies are corresponded for two-phase flow within a porous medium, because of additional complications. In this paper, two-phase flow with the density and viscosity ratio of 1, within a porous medium is simulated by Shan and Chen model. Due to inherent limitations and weaknesses of this approach in an independent control of surface tension, investigation of parameters such as Reynolds number, Froude and Weber is not applicable. However, porous medium parameters such as Darcy number and contact angle could be studied by changing the porous medium and contact angle. Competition between opposing forces against the drop and the capillary effect because of increasing the number of particles in the porous media is described using the Darcy number. Also the effect of the contact angle between liquid-gas phases and the solid surface is evaluated on the droplet penetration inside the porous medium.

Keywords: Porous Media, Two-Phase Flow, Penetration, Lattice Boltzmann Method, Shan and Chen Model.

۱- مقدمه

در سال‌های اخیر روش بولتزمن شبکه‌ای^۱ در شبیه‌سازی جریان سیال و تئوری‌های انتقال جایگاه ویژه‌ای بدست آورده است. برخلاف روش‌های رایج CFD که بر اساس گسسته‌سازی معادلات ماکروسکوپیکی پیوستگی بنا نهاده شده‌اند، روش LBM بر اساس مدل‌های میکروسکوپیکی^۲ و معادله سینتیک موزوسکوپیکی^۳ می‌باشد که در آن رفتار مجموعه‌ای از ذرات سیستم برای شبیه‌سازی جریان استفاده می‌شود. این روش به‌ویژه در مسائلی که دارای شرایط مرزی پیچیده و یا سطوح مشترک متحرک مانند جریان‌های دو فاز می‌باشند، کارآمد می‌باشد [۱].

تعدادی مطالعات تجربی در خصوص دینامیک قطره در سطح متخلخل وجود دارد. شرایط لازم جهت بازگشت قطره از سطح پلیمر متخلخل سوپرهیدروفوبیک توسط ریبو و همکاران به کمک دوربین‌های با سرعت بالا، مطالعه شده است [۲]. هنگامی که قطره در برخورد با سطح متخلخل به صورت جزئی یا کلی در آن نفوذ کند، بدست آوردن اطلاعات مربوط به شکل قطره مشکل می‌گردد. در این شرایط استفاده از روش تصویربرداری به کمک رزونانس مغناطیسی می‌تواند در مشاهده قطره در داخل محیط متخلخل کمک نماید [۳، ۴]. با این وجود هم‌چنان تصویربرداری از حالت گذرای برخورد که در بازه زمانی چند میلی ثانیه رخ می‌دهد با این روش دشوار است. لذا این روش تنها برای بررسی شکل نهایی قطره یا بررسی فرایند تبخیر آرام مورد استفاده قرار می‌گیرد و نمی‌تواند دقت کافی را در زمان برخورد فراهم کند.

اغلب مطالعات عددی گذشته که به بررسی قطره و لایه متخلخل پرداخته‌اند، از مقیاس ماکروسکوپیکی برای لایه متخلخل استفاده نموده‌اند که این لایه نیز توسط پارامترهای اندکی مانند اندازه حفره‌ها و منافذ توصیف شده است. به خاطر فرض ساده کننده مورد استفاده در این مطالعات، این روش‌ها تنها رفتار خاصی از قطره نظیر نشست یا جذب جزئی را نشان می‌دهند. برای مثال ریس و همکاران [۳، ۴] از یک مدل دو بعدی برای مطالعه برخورد

قطره مایع با سطح متخلخل که تا حدودی در آن جذب شده، استفاده کرده‌اند. نتایج محاسبات با تصاویر MRI به خوبی تطابق داشته و تأثیر پارامترهای مختلف بر رفتار جریان بررسی شده است. آلام و همکاران [۵] با استفاده از روش VOF برخورد، رفتار جذب - پخش قطرات ریز (با قطر ۵۰ میکرومتر) را در سطحی با حفره‌های بی‌نظم بررسی کرده‌اند. آبرون و همکاران [۶، ۷] پخش و جذب قطره را بر روی سطح متخلخل بررسی نموده‌اند. ژائو و همکاران [۸] تبخیر قطره به هنگام برخورد با سطح متخلخل داغ را بررسی کرده‌اند.

در این مقاله برای شبیه‌سازی برخورد قطره با سطح متخلخل از روش بولتزمن شبکه‌ای و مدل شان و چن استفاده شده است. مدل پتانسیل بین مولکولی (شان و چن) شرایطی را فراهم می‌کند که با یک فرایند یک‌پارچه، فصل مشترک گاز و مایع، خیس شدن سطح جامد و نیز حرکت خط مربوط به فاز میانی در هندسه‌های پیچیده با ظرافت و سهولت بیشتری نسبت به روش‌هایی نظیر دنبال کردن سطح مشترک یا روش‌های تصویری نظیر دنبال کردن جبهه، VOF یا مجموعه سطوح، بررسی شود. محیط متخلخل ایجاد شده در کار حاضر به صورت توزیع تصادفی مجموعه‌ای از ذرات جامد در نظر گرفته شده است که می‌تواند مقادیر مختلفی از تخلخل را اختیار کند. تفاوت عمده کار حاضر با موارد ذکر شده، در آن است که در کار حاضر، برخلاف روش‌های رایج در CFD، محیط متخلخل به صورت مستقیم و با هندسه‌ای کاملاً پیچیده وارد محاسبات شده است. قابل ذکر است که پایداری مطلوب روش مورد استفاده در مقاله حاضر نیز از امتیازات آن محسوب می‌شود.

نتایج حاصل از این مدل در تخلخل‌های مختلف و با زوایای تماس متفاوت مورد ارزیابی قرار گرفته و میزان نفوذ در شرایط مختلف با هم مقایسه شده‌اند.

۲- معادله بولتزمن با تقریب BGK

معادله بولتزمن شبکه‌ای که در این مقاله از آن استفاده شده است، به کمک رابطه (۱) بیان می‌شود [۱].

$$f_i(\vec{x} + \vec{e}_i \delta t, t + \delta t) - f_i(\vec{x}, t) = \Omega_i \quad (1)$$

1. Lattice Boltzmann Method (LBM)
2. Microscopic
3. Mesoscopic kinetic equations

معادله (۶) از دو بخش تشکیل می‌شود. نخست قسمت مربوط به جاری شدن و سپس مرحله مربوط به برخورد. بر این اساس برای مرحله جاری شدن رابطه (۷) نوشته می‌شود.

$$f_i(\vec{x} + \vec{e}_i \delta t, t + \delta t) = \tilde{f}_i(\vec{x}, t + \delta t) \quad (7)$$

رابطه (۷) مقادیر f_i ها را در یک لحظه بعد از جاری شدن و در نقاط مجاور بدست می‌دهد. ترم برخورد نیز مطابق رابطه (۶) محاسبه می‌شود. یادآور می‌شود که ترتیب عملیات جاری شدن و برخورد اهمیتی نداشته و تنها توالی این دو دارای اهمیت است.

لزجت سیال به کمک زمان رهاسازی و سرعت صوت شبکه، مطابق رابطه (۸) محاسبه می‌شود.

$$\nu = \frac{\tau - 0.5}{3} \quad (8)$$

برای آن که لزجت سیال مثبت باشد، نیاز است که زمان رهاسازی بزرگتر از 0.5 باشد. البته ضرورت پایداری ایجاب می‌کند که مقدار τ از این مقدار نیز بیشتر باشد. مقادیر سرعت‌های ماکروسکوپی و چگالی در هر نقطه نیز با استفاده از تابع توزیع، قابل محاسبه خواهند بود.

$$\rho = \sum_i f_i = \sum_i f_i^{eq} \quad (9)$$

$$\rho \vec{u} = \sum_i \vec{e}_i f_i = \sum_i \vec{e}_i f_i^{eq} \quad (10)$$

۳- مدل شان و چن

۳-۱- سیستم‌های چند فاز تک مؤلفه‌ای

برای اعمال نیروهای بین مولکولی در روش LBM برای جریاندو فاز تک مؤلفه‌ای به روش شان و چن، سوکاپ و تورن [۱۱] نیروهای بین مولکولی بین ذرات سیال را مطابق رابطه (۱۱) تعریف نمودند.

$$\vec{F}(\vec{x}, t) = -G \psi(\vec{x}, t) \sum_{i=1}^8 w_i \psi(\vec{x} + \vec{e}_i \delta t) \vec{e}_i \quad (11)$$

که در آن G مقدار ثابتی است که قدرت تعامل بین مولکولی را نشان می‌دهد. مقدار منفی برای G ، مقادیر مثبت نیرو را ایجاد می‌کند که نشان دهنده نیروی جاذبه است. حال آن که مقادیر مثبت G نیروی منفی ایجاد می‌کند که بیانگر نیروی دافعه بین ذرات است. w نیز ضرایب وزنی است. تابع پتانسیل ψ ، پتانسیل تعامل بین مولکولی است که تابعی از چگالی موضعی می‌باشد و روابط

که در آن f_i تابع توزیع ذرات برای ذرات گسسته‌ای است که دارای سرعت میکروسکوپی c_i می‌باشند. ترم سمت راست معادله (۱) ترم برخورد است که برای محاسبه آن در این مقاله از تقریب باتانگار-گراس-کروک (BGK) مطابق رابطه (۲) استفاده می‌شود.

$$\Omega_i = -\frac{f_i - f_i^{eq}}{\tau} + \delta_i \vec{F}_i \quad (2)$$

در معادله (۲) τ زمان رهاسازی، f_i^{eq} تابع توزیع تعادلی و $\delta_i \vec{F}_i$ میدان نیروهای خارجی می‌باشد. تابع توزیع تعادلی با استفاده از رابطه (۳) محاسبه می‌شود [۱].

$$f_i^{eq} = \rho w_i \left[1 + 3 \vec{e}_i \cdot \vec{u} + \frac{9}{2} (\vec{e}_i \cdot \vec{u})^2 - \frac{3}{2} \vec{u} \cdot \vec{u} \right] \quad (3)$$

در معادله (۳) ρ و $\vec{u}$ به ترتیب کمیت‌های سرعت و چگالی ماکروسکوپی هستند و مقادیر w_i و $\vec{e}_i$ به ترتیب ضرایب وزنی و سرعت‌های گسسته می‌باشند که برای شبکه D2Q9 با از رابطه (۴) بدست می‌آیند.

$$w_i = \begin{cases} \frac{4}{9} & , i=0 \\ \frac{1}{9} & , i=1,2,3,4 \\ \frac{1}{36} & , i=5,6,7,8 \end{cases} \quad (4)$$

$$c_0 = 0$$

$$c_i = \left[\cos\left((i-1)\frac{\pi}{2}\right), \sin\left((i-1)\frac{\pi}{2}\right) \right]$$

$$c_i = \sqrt{2} \left[\cos\left((2i-1)\frac{\pi}{4}\right), \sin\left((2i-1)\frac{\pi}{4}\right) \right] \quad (5)$$

$i=1,2,3,4$

بسط چاپمن-انسکاگ^۱ برای تابع توزیع نشان می‌دهد که معادله بولتزمن شبکه‌ای معادلات پیوستگی و مومنتم را ارضا می‌کنند. برای آگاهی از جزئیات به [۹، ۱۰] رجوع شود. با جاگذاری رابطه (۲) در رابطه (۱)، معادله (۶) بدست می‌آید.

$$\tilde{f}_i(\vec{x}, t + \delta t) = f_i(\vec{x}, t) - \frac{f_i(\vec{x}, t) - f_i^{eq}(\vec{x}, t)}{\tau} \quad (6)$$

1. Chapman-Enskog Expansion

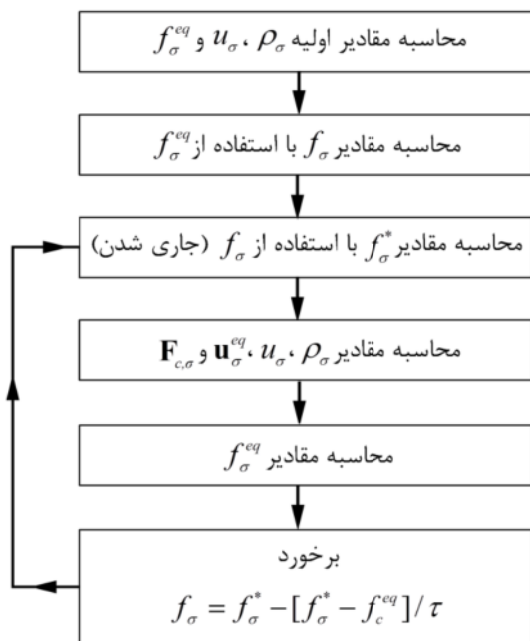
در رابطه (۱۶) $\vec{F}_\sigma = \vec{F}_{c,\sigma} + \vec{F}_{ads,\sigma} + \vec{F}_{body,\sigma}$ کل نیروی وارد بر سیال مولفه σ ام است. $\vec{F}_{c,\sigma}$ نیروی مربوط به اندر کنش داخلی دو سیال، $\vec{F}_{ads,\sigma}$ نیروی بین سیال و جسم جامد و $\vec{F}_{body,\sigma}$ نیروهای حجمی می‌باشد. مقادیر $\vec{F}_{c,\sigma}$ و فشار نیز به کمک روابط (۱۷) و (۱۸) بدست می‌آیند [۱۳].

$$\vec{F}_{c,\sigma} = -G_c \rho_\sigma(\vec{x}, t) \sum_i w_i \rho_\sigma^-(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta t, t) \vec{e}_i \quad (17)$$

$$P(x) = \frac{\rho_1(x) + \rho_2(x)}{3} + \frac{G_c \rho_1(x) \rho_2(x)}{3} \quad (18)$$

در رابطه ۱۷ ρ_σ^- چگالی فاز مخالف است.

قبل از آن که به بررسی نتایج پرداخته شود، مراحل شبیه‌سازی و حل عددی جریان دوفاز به کمک مدل شان و چن دو مؤلفه‌ای به صورت طرح‌واره در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱ طرح‌واره شبیه‌سازی جریان به کمک مدل شان و چن دو مؤلفه‌ای

مقدار f_σ^* مقدار تابع توزیع مؤلفه σ ام بعد از مرحله جاری شدن است.

۴- قانون لاپلاس

در ادامه از مقادیر $G_c = 0.1$ ، $G_c = 0.5$ و $G_c = 0.9$ ،

متعددی برای آن پیشنهاد شده است. هی و دولن نشان داده‌اند [۱۲] که با افزودن ترم نیرو به معادله (۲)، برای معادله حالت رابطه (۱۲) بدست می‌آید.

$$P = \rho RT + \frac{GRT}{2} \psi^2(\rho) \quad (12)$$

ترم دوم در سمت راست معادله (۱۲) بیانگر قسمت غیر ایده‌ال معادله حالت است که نشان دهنده نیروهای بین مولکولی است. در شبکه D2Q9 مقدار $RT = 1/3$ می‌باشد.

۳-۲- سیستم‌های دو فاز دو مؤلفه‌ای

در این قسمت مدل دو فازی-دو مؤلفه‌ای شان و چن معرفی می‌شود. در این مدل برای هر فاز تابع توزیع مجزایی تعریف می‌شود.

$$f_i^\sigma(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^\sigma(\vec{x}, t) - \frac{f_i^\sigma(\vec{x}, t) - f_i^{\sigma,eq}(\vec{x}, t)}{\tau_\sigma} \quad (13)$$

در رابطه (۱۳) $f_i^\sigma(x, t)$ تابع توزیع مؤلفه σ ام در جهت i ام می‌باشد. σ می‌تواند مقادیر یک یا دو را اختیار کند. τ_σ زمان رهاسازی منفرد مؤلفه σ ام می‌باشد که توسط رابطه $v_\sigma = (\tau_\sigma - 0.5)/3$ به لزجت سینماتیکی مرتبط می‌شود. تابع توزیع تعادلی $f_i^{\sigma,eq}(x, t)$ از رابطه (۱۴) مشابه حالت تک مؤلفه‌ای بدست می‌آید.

$$f_i^{\sigma,eq}(\vec{x}, t) = w_i \rho_\sigma [1 + 3\vec{e}_i \cdot \vec{u}_\sigma^{eq} + \frac{9}{2}(\vec{e}_i \cdot \vec{u}_\sigma^{eq})^2 - \frac{3}{2}\vec{u}_\sigma^{eq} \cdot \vec{u}_\sigma^{eq}] \quad (14)$$

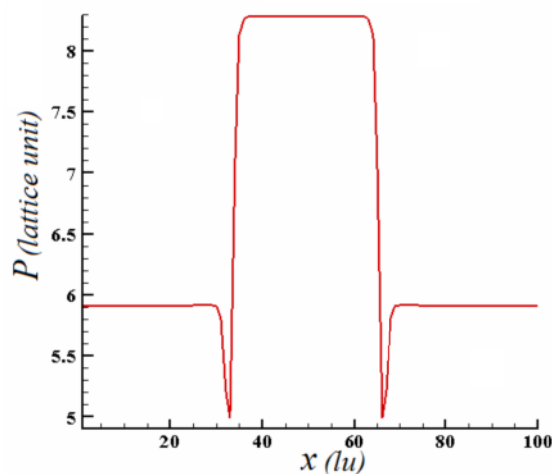
در رابطه (۱۴) ρ_σ چگالی مولفه σ ام است که توسط رابطه $\rho_\sigma = \sum_i f_i^\sigma$ محاسبه می‌شود.

برای بدست آوردن سرعت ماکروسکوپی، سرعت ترکیبی مطابق رابطه (۱۵) تعریف می‌شود.

$$\vec{u}' = \frac{\sum_i (\sum_j \frac{f_j^\sigma \vec{e}_j}{\tau_\sigma})}{\sum_\sigma \frac{\rho_\sigma}{\tau_\sigma}} \quad (15)$$

حال سرعت ماکروسکوپی $\vec{u}_\sigma^{eq}$ به کمک معادله (۱۶) محاسبه خواهد شد.

$$\vec{u}_\sigma^{eq} = \vec{u}' + \frac{\tau_\sigma \vec{F}_\sigma}{\rho_\sigma} \quad (16)$$



شکل ۳ تغییرات فشار در روی خط گذرنده از مرکز قطره و در کل میدان محاسباتی

در این شکل تغییرات فشار در روی خط گذرنده از مرکز قطره و در کل میدان محاسباتی برای حالتی که $G_c=0.1$ ، قطر قطره معادل ۱۵ واحد و چگالی هر دو فاز برابر ۱۸ می‌باشد، نشان داده شده است. همان‌طور که اشاره شد و در این شکل نیز دیده می‌شود، برای محاسبه مقادیر فشار نمی‌توان از مقادیر در نزدیکی فصل مشترک استفاده کرد. نکته دیگری که باید به آن اشاره کرد، آن است که پارامترهایی نظیر سرعت، چگالی، فشار و کشش سطحی که در روش بولتزمن شبکه‌ای محاسبه و یا مورد استفاده قرار می‌گیرند، دارای واحدهایی در شبکه بولتزمن هستند. به عنوان مثال واحد سرعت در این شبکه lu/sec است. از این رو راه ایجاد ارتباط میان واحدهای فیزیکی و شبکه بولتزمن، استفاده از اعداد بی بعد خواهد بود. به عنوان مثال از مقدار کشش سطحی محاسبه شده در نمودار شکل ۲ می‌توان برای محاسبه مقدار عدد وبر استفاده کرد.

در مدل شان و چن دو فازی پارامتر G_c که مقدار کشش میان دو سیال یک و دو را کنترل می‌کند، دارای مقدار بحرانی $G_c = 1/(\rho_2 - \rho_1)$ است که به ازای مقادیر بیشتر از آن جدایش میان دو سیال اتفاق می‌افتد و به ازای مقادیر کمتر، دو سیال در هم ادغام می‌شوند. دقت شود که رابطه $G_c = 1/(\rho_2 - \rho_1)$ در یک نقطه نوشته شده است. این بدان معناست که در هر نقطه مقادیری از هر دو فاز وجود دارد. برای توضیح بیشتر، شکل ۴ که توزیع چگالی برای قطره مورد اشاره در شکل ۳ می‌باشد، آورده شده

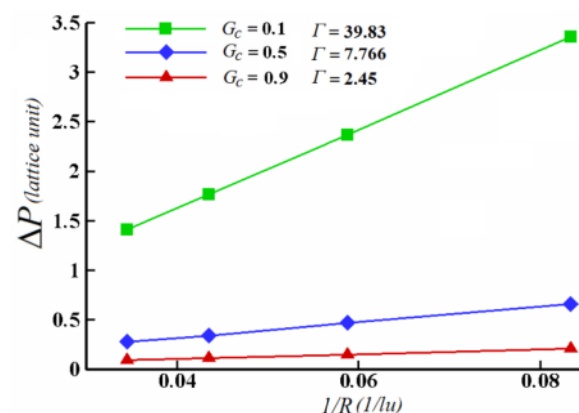
متناظر با مقادیر $\rho_1 = \rho_2 = 18$ ، $\rho_1 = \rho_2 = 3.6$ و $\rho_1 = \rho_2 = 2$ و $\tau_1 = \tau_2 = 1$ برای شبیه‌سازی‌ها استفاده شده است.

مطابق قانون لاپلاس اختلاف فشار میان داخل و خارج در یک قطره دایره‌ای شکل با رابطه (۱۹) محاسبه می‌شود.

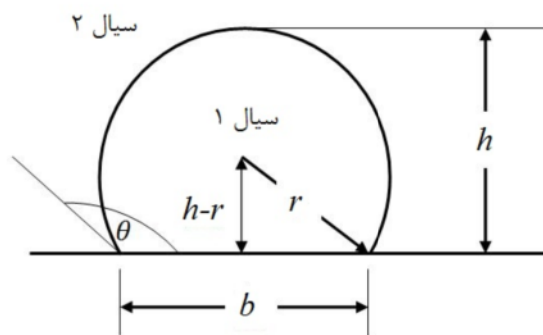
$$\Delta P = \frac{\Gamma}{R} \quad (19)$$

در رابطه (۱۹) ΔP اختلاف فشار داخل و خارج قطره، Γ کشش سطحی و R شعاع قطره می‌باشد. برای بدست آوردن کشش سطحی، قطره‌ای به ازای مقادیر معین G_c ، در مرکز یک میدان محاسباتی به ابعاد 100×100 قرار داده می‌شود. بعد از آن که قطره به حالت تعادل رسید، اختلاف فشار میان داخل و خارج آن را محاسبه کرده و بدین صورت اختلاف فشار متناظر با شعاع بدست می‌آید. این کار را برای مقادیر متفاوتی از شعاع‌ها تکرار خواهد شد. با وصل کردن نقاط حاصل خط راستی بدست می‌آید که شیب آن بیانگر کشش سطحی قطره می‌باشد. همان‌طور که در شکل ۲ قابل ملاحظه است با افزایش مقدار G_c کشش سطحی کاهش می‌یابد که این امر به کاهش نیروی جاذبه بین مولکولی است.

توجه به این نکته ضروری است که برای محاسبه مقادیر فشار باید به اندازه کافی از فصل مشترک میان دو فاز فاصله گرفت. چرا که به علت حضور سرعت‌های موضعی ناخواسته در فصل مشترک، مقادیر فشار در این ناحیه دچار تغییر می‌شوند. برای روشن‌تر شدن موضوع به شکل ۳ توجه شود.



شکل ۲ آزمایش لاپلاس جهت محاسبه کشش سطحی قطره



شکل ۵ طرح‌واره زاویه تماس میان قطره و سطح جامد

هانگ و همکاران [۱۳] رابطه‌ای بر اساس پارامتر کنش داخلی (G_c)، ضریب چگالی $G_c(\rho_2 - \rho_1)/2$ و پارامترهای مربوط به کشش میان سیال و سطح $G_{ads,1}$ و $G_{ads,2}$ مطابق رابطه (۲۱) ارائه نموده‌اند.

$$\cos(\theta) = \frac{G_{ads,2} - G_{ads,1}}{G_c \frac{\rho_2 - \rho_1}{2}} \quad (21)$$

در رابطه (۲۱) مقدار چگالی در حالت تعادل فاز اول و ρ_2 مقدار چگالی ناچیز فاز دوم است که در موضع فاز اول باقی مانده است.

نیروی بین سیال و سطح جامد نیز مطابق رابطه (۲۲) پیشنهاد شده است.

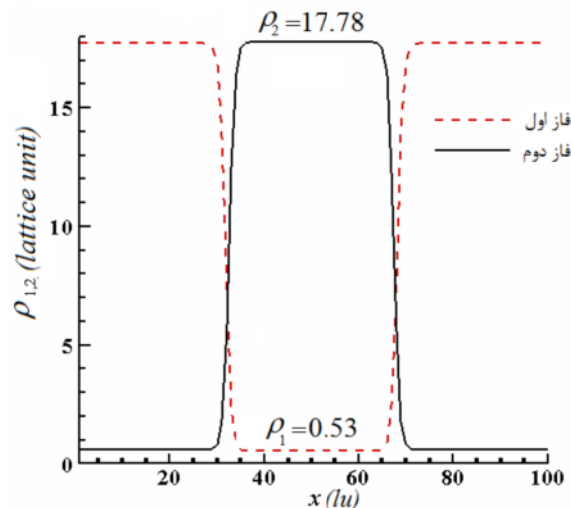
$$\vec{F}_{ads,\sigma} = -G_{ads} \rho(\vec{x}, t) \sum_i w_i s(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta t) \vec{e}_i \quad (22)$$

در رابطه (۲۲) مقدار پارامتر $s(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta t)$ هنگامی که در روی سطح جامد قرار گیرد، برابر با یک، و هنگامی که در سیال باشد برابر با صفر خواهد بود. پارامتر G_{ads} نیز بیانگر قدرت چسبندگی میان سطح جامد و سیال است.

۶- اندازه‌گیری زاویه تماس

برای اندازه‌گیری زاویه تماس میان قطره و دیواره جامد، قطره‌ای با قطر ۲۰ واحد را در داخل میدان محاسباتی به ابعاد 60×200 به صورت مماس بر دیواره پایینی قرار داده می‌شود. با در نظر گرفتن مقدار معینی برای G_{ads} و بعد از حدود ۲۰۰۰ مرحله که میدان به حالت پایا در آمد، مقدار زاویه تماس محاسبه خواهد شد. در روی دیواره پایینی و بالایی شرط مرزی بازگشت به عقب در روی

است. همان طور که در این شکل دیده می‌شود، اندکی از هر دو فاز، در فاز مخالف باقی مانده است.



شکل ۴ نمایش توزیع فازها در روی خط گذرنده از مرکز قطره

هانگ و همکاران [۱۳] نشان داده‌اند که به ازای مقادیر $0 \leq G_c \rho_i \leq 1$ که در آن $\rho_i = \rho_1 + \rho_2$ می‌باشد، جدایش اتفاق نخواهد افتاد و دو سیال در هم نفوذ خواهند کرد. همچنین یاد آوری می‌شود که رابطه $\rho_i = \rho_1 + \rho_2$ در یک نقطه نوشته شده است. لازم به ذکر است که شرط پایداری در این روش $1.6 \leq G_c \rho_i \leq 2$ است [۱۳].

۵- زاویه تماس

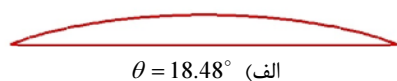
زمانی که یک قطره انحلال ناپذیر^۱ در تماس با یک جامد قرار می‌گیرد، آنگاه میان سیال تر کننده^۲، سیال تر نشونده^۳ و سطح جامد خط تماسی ایجاد می‌شود (شکل ۵). برای پیش‌بینی میزان زاویه تماس می‌توان از معادله یانگ به شکل رابطه (۲۰) استفاده کرد [۱۳].

در رابطه (۲۰) σ_{s1} و σ_{s2} به ترتیب میزان کشش میان سیال یک و سیال دو را با سطح جامد نشان می‌دهد. همچنین σ_{12} نیز مقدار کشش سطحی میان سیال ۱ و ۲ را تعیین می‌کند.

$$\cos(\theta_1) = \frac{\sigma_{s2} - \sigma_{s1}}{\sigma_{12}} \quad (20)$$

1. Immiscible
2. Wetting
3. Non Wetting

ویر $We = \rho U_0^2 D / \Gamma$ که در آن‌ها U_0 سرعت اولیه قطره ($U_0 = 0.3 \text{ lu/sec}$) قطر اولیه قطره می‌باشد، پارامترهای مربوط به محیط متخلخل به شرح زیر وارد مسأله خواهند شد.

الف) $\theta = 18.48^\circ$ ب) $\theta = 40.41^\circ$ ج) $\theta = 60.23^\circ$ د) $\theta = 75.93^\circ$ ه) $\theta = 91.05^\circ$ و) $\theta = 104.92^\circ$ ز) $\theta = 119.46^\circ$ ح) $\theta = 138.49^\circ$ ط) $\theta = 168.17^\circ$

شکل ۶ زاویه‌های تماس مختلف بر حسب درجه

نقاط^۱، و در دیواره‌های جانبی از شرط مرزی تناوبی^۲ استفاده شده است.

زاویه تماس میان قطره و سطح جامد را می‌توان به کمک پارامترهای هندسی مسأله محاسبه کرد. برای این منظور از رابطه (۲۳) استفاده می‌شود [۱۴].

$$\theta = \pi - \arctan\left[\frac{b}{2(r-h)}\right] \quad (23)$$

در این رابطه مقدار $r = h/2 + b^2/8h$ خواهد بود. مسأله اصلی در اندازه‌گیری پارامترهای هندسی فوق، تعیین موقعیت فصل مشترک می‌باشد، چرا که در واقع فصل مشترک ایجاد شده در مسئله دارای ضخامتی در حد چند واحد است. در مقاله حاضر موقعیت فصل مشترک محلی قرار داده می‌شود که چگالی برابر نصف چگالی قطره و محیط اطرافش شود.

برای ایجاد زوایای تماس مختلف اقدام به تغییر پارامترهای $G_{ads,1}$ و $G_{ads,2}$ می‌شود. همچنین برای سادگی از فرض $G_{ads,1} = -G_{ads,2}$ استفاده می‌شود. در این قسمت از مقادیر $\rho_2 = \rho_1 = 2$ ، $G_c = 0.9$ و $R_i = 20$ که در آن شعاع اولیه قطره می‌باشد، استفاده شده است.

شکل ۶ نتایج حالت پایا، حاصل از برخورد قطره با سطح جامد را در زوایای تماس مختلف نشان می‌دهد. مقادیر مختلف $G_{ads,2}$ و زوایای تماس متناظر در جدول ۱ آمده است. نتایج مربوط به جدول ۱ در شکل ۷ نیز آورده شده است. همان طور که در این شکل نیز دیده می‌شود مقادیر تئوری و عددی هم‌خوانی خوبی دارند. تنها نکته قابل ذکر در این جا افزایش خطا میان نتایج عددی و تئوری در زاویه‌های بزرگ‌تر از 160° درجه می‌باشد. افزایش خطا در زوایای بزرگ را می‌توان به وجود ضخامت در فصل مشترک نسبت داد.

۷- برخورد با محیط متخلخل

در مسأله برخورد قطره با سطح متخلخل، علاوه بر پارامترهای جریان نظیر اعداد رینولدز $Re = U_0 D_a / \nu$ و

1. On Node Bounce Back
2. Periodic Boundary Fcondition

جدول ۱ زاویه‌های تماس مختلف به ازای مقادیر مختلف $G_{ads,2}$ ($G_c = 0.9$)

درصد خطا %	زاویه تماس اندازه‌گیری شده از رابطه (۲۳) (درجه)	زاویه تماس بدست آمده از رابطه (۲۱) (درجه)	$G_{ads,2}$
۳/۸	۱۸/۴۸	۱۹/۲۱	-۰/۴۰
۷/۶	۴۰/۴۱	۴۳/۷۵	-۰/۳۰
۱/۶	۶۰/۲۳	۶۱/۲۱	-۰/۲۰
۰/۲۵	۷۵/۹۲	۷۶/۱۱	-۰/۱۰
۱/۱۶	۹۱/۰۵	۹۰	۰
۰/۹۹	۱۰۴/۹۲	۱۰۳/۸۹	۰/۱
۱/۱۷	۱۱۹/۴۶	۱۱۸/۰۷	۰/۲
۲/۱	۱۳۸/۴۹	۱۳۵/۶۵	۰/۳
۴/۹۶	۱۶۸/۱۷	۱۶۰/۲۲	۰/۴

گرفته خواهند شد. برنامه‌ای که از آن برای ایجاد این محیط استفاده شده است، دارای سه ویژگی اصلی است.

۱- توزیع ذرات به صورت کاملاً تصادفی و دوبعدی است.
۲- میزان تخلخل به صورت ورودی و به صورت دلخواه می‌باشد.

۳- ذرات به صورت مربعی شکل می‌باشند.
نمونه‌ای از محیط متخلخل ایجاد شده، در شکل ۸ نشان داده شده است.

برای نشان دادن زمان، از پارامتر زمان بی بعد $t^* = TU_0/D_d$ استفاده می‌شود. در این رابطه T تعداد مرحله زمانی است.

در ادامه برخی مفاهیم فیزیکی موجود در مسأله حاضر توضیح داده خواهند شد.

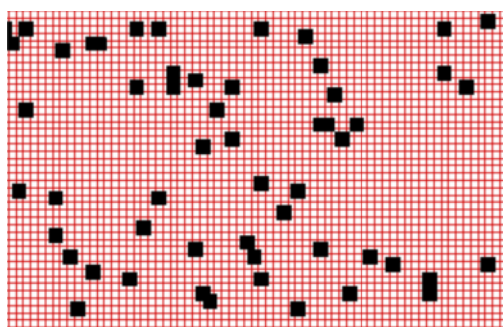
۷-۱- نفوذپذیری سیستم

برای بدست آوردن میزان نفوذپذیری^۱ میدان متخلخل در مقاله حاضر از نتایج موجود در مقاله نبوتی و سوسا [۱۵] استفاده شده است.

پارامتر شعاع هیدرولیکی مطابق رابطه (۲۴) تعریف می‌شود.

$$R_0 = \frac{DA_0}{P_0} \quad (24)$$

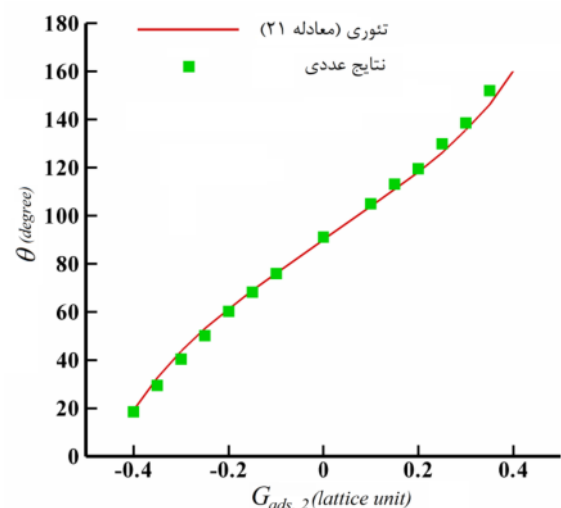
در رابطه (۲۴) A_0 ، P_0 و D به ترتیب مساحت ذره، محیط ذره و تعداد ابعاد مسأله می‌باشد. مقادیر بدست آمده از [۱۵] در جدول ۲ آورده شده‌اند.



شکل ۸ نمونه‌ای از محیط متخلخل ایجاد شده با $\varepsilon = 0.93$

۷-۲- فشار مؤینگی

فشار مؤینگی به ابعاد باریکه‌ها^۲ و زاویه تماس سطح و



شکل ۷ مقایسه نتایج عددی با مقادیر تئوری در محاسبه زاویه تماس $G_{ads,2}$ ($G_c = 0.9$)

عدد تخلخل ($\varepsilon = V_{pores}/V_{total}$)، عدد دارسی ($Da = K/R_i^2$)، ویژگی ساختار محیط متخلخل ($\alpha = R_{pores}/R_0$) و زاویه تماس (θ). در پارامترهای فوق V_{pores} حجم خالی در داخل محیط متخلخل، V_{total} حجم کل محیط متخلخل و R_{pores} شعاع معادل حفره‌ها می‌باشد. همچنین K نفوذپذیری محیط می‌باشد. از آنجا که الگوی خاصی برای ایجاد محیط متخلخل به کار گرفته نشده است، لذا در این مقاله از روش تصادفی برای ایجاد محیط متخلخل استفاده گردید. ویژگی اصلی این روش، انتخاب تصادفی نقاطی است که به عنوان ذره جامد در نظر

سیال بستگی دارد. بر این اساس فشار موئینگی طبق رابطه (۲۵) قابل محاسبه می‌باشد [۴].

$$P_c = -4 \frac{\gamma \cos(\theta)}{d_{pores}} \quad (25)$$

جدول ۲ اندازه‌گیری مقادیر K/R_0^2 از منبع [۱۵]

تخلخل	۰/۷۰	۰/۸۰	۰/۹۰	۰/۹۸
نبوتی [۱۵]	۰/۳۵	۰/۹۷۷۴	۳/۹۲۹۶	۹۵

هنگامی که زاویه تماس کوچک‌تر از ۹۰ درجه باشد، شکل سیال در داخل حفره به صورت مقعر خواهد بود و لذا مقدار فشار موئینگی منفی خواهد شد که این امر موجب ایجاد اختلاف فشاری می‌شود که خیس شدگی سطح را در پی دارد. به عبارت دیگر در این حالت فشار موئینگی موجب تزریق سیال در داخل محیط متخلخل می‌گردد. از طرف دیگر اگر زاویه تماس بیش از ۹۰ درجه باشد، شکل سیال در داخل حفره به صورت تحدب خواهد بود و لذا فشار موئینگی مثبت خواهد شد و در برابر نفوذ قطره داخل محیط متخلخل مقاومت خواهد کرد. ریس و همکاران [۴] رابطه‌ای برای فشار موئینگی بی‌بعد برای حالتی که محیط متخلخل توسط ذرات کروی ساخته شود، مطابق رابطه (۲۶) استخراج کرده‌اند.

$$PR = \frac{c_3}{\alpha} \frac{\cos(\theta)}{We} \frac{\varepsilon^{3/2}}{(1-\varepsilon)Da^{1/2}} \quad (26)$$

که در آن $c_3 = 0.327$ است. اهمیت رابطه (۲۶) در این است که نشان می‌دهد فشار موئینگی با α ، ε ، Da ، We و زاویه تماس در ارتباط است.

۷-۳- تأثیر عدد دارسی

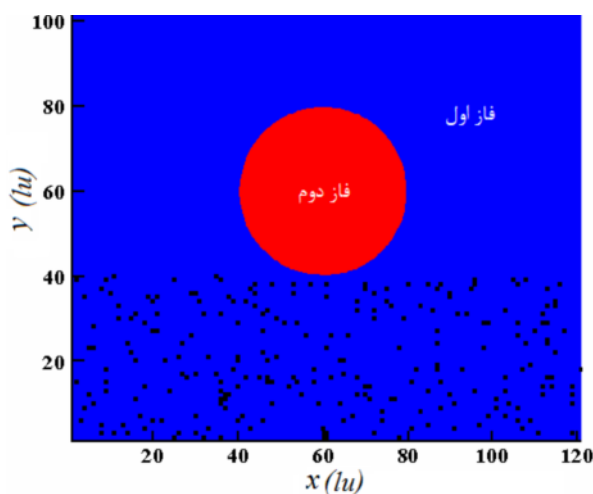
عدد دارسی به طور تقریبی بیانگر توانایی اتلاف مومنتم در اثر حضور تخلخل می‌باشد [۴]. ریس و همکاران نشان داده‌اند که کل نیروی مخالف وارد بر قطره با عکس دارسی ارتباط دارد. همچنین عدد دارسی همان طور که در رابطه (۲۶) بیان شده است، در میزان فشار موئینگی دخالت دارد، از این رو می‌توان گفت تأثیر عدد دارسی از دو جهت قابل بررسی است. اول آن که کاهش عدد دارسی، با افزایش

نیروی مخالف در برابر نفوذ قطره از جانب سطح محیط متخلخل همراه است. دوم آنکه کاهش عدد دارسی به معنای افزایش میزان عملکرد فشار موئینگی به سبب افزایش باریکه‌ها است.

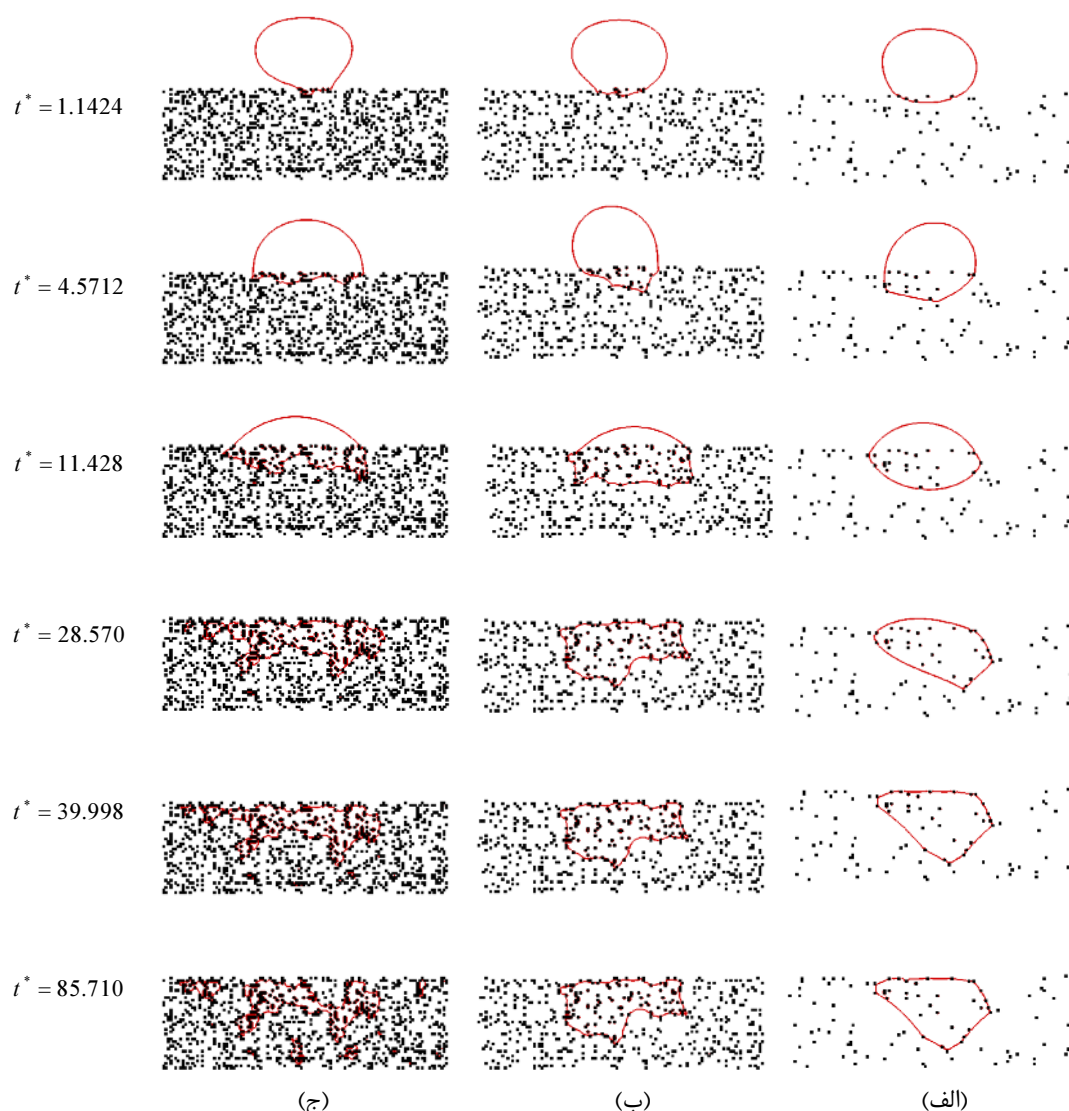
برای نشان دادن این موضوع، مطابق شکل ۹ ابتدا قطره‌ای در نظر گرفته می‌شود که به صورت مماس بر یک محیط متخلخل قرار داده شده است. قطر این قطره ۲۰ واحد و ابعاد محیط محاسباتی 100×120 و ابعاد محیط متخلخل 40×120 در نظر گرفته شده است. در هر چهار دیواره شرط مرزی تناوبی و در روی ذرات جامد شرط مرزی بازگشت به عقب اعمال شده است.

شکل ۹ لحظه اولیه برخورد قطره با محیط متخلخل را نشان می‌دهد. مطابق این شکل کل میدان محاسباتی به همراه محیط متخلخل در لحظه اولیه توسط فاز اول اشغال شده‌اند. در شکل ۱۰ تأثیر تغییرات عدد دارسی در محدوده 0.0006109 تا 0.05938 نشان داده شده است.

دو نوع تأثیرگذاری ذکر شده برای عدد دارسی در شکل‌های ۱۰-الف، ب و ج نشان داده شده است. مقایسه شکل‌های ۱۰ الف و ب به روشنی نشان می‌دهد که با کاهش تخلخل محیط، و به موازات آن افزایش باریکه‌ها، تأثیر فشار موئینگی موجب سریع تر شدن نفوذ قطره می‌گردد. نکته مهم آن است که در شکل ۱۰-ب تأثیر افزایش اثر موئینگی بر افزایش نیروی مقاوم محیط متخلخل غالب می‌باشد.



شکل ۹ لحظه اولیه برخورد قطره با محیط متخلخل



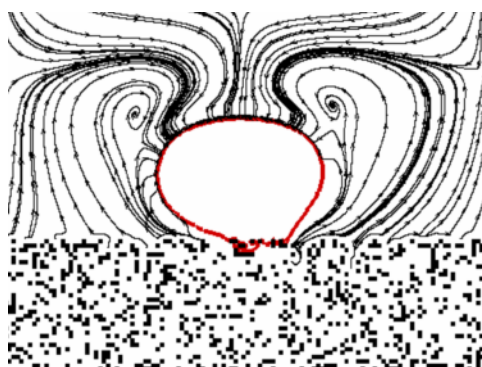
شکل ۱۰ تأثیرات داری بر رفتار قطره $We=5.12$, $\theta = 18^\circ$ - الف - $Da=0.05938$ - ب - $Da=0.002458$ - ج - $Da=0.0006109$

این درحالی است در شکل ۱۰- ج با کاهش بیشتر تخلخل و با وجود افزایش اثر موئینگی به علت افزایش بیشتر نیروی مقاوم محیط، سرعت نفوذ کاهش می‌یابد.

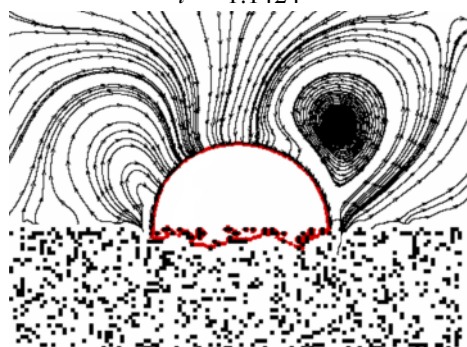
نکته دیگری که باید به آن اشاره کرد آن است که کاهش تخلخل محیط، و افزایش نیروی مقاوم سطح، گرایش قطره به حرکت جانبی را افزایش می‌دهد. توجه به شکل‌های ۱۰- ب و ج این موضوع را مشخص می‌کند. شکل ۱۱ تأثیرات گفته شده عدد داری بر رفتار قطره را به خوبی نشان می‌دهد. توجه شود که در این شکل، R شعاع اولیه قطره و h ارتفاع لحظه‌ای قطره بر روی سطح متخلخل است. با افزایش عدد داری از مقدار

۰/۰۰۰۲۱۸۲ تا ۰/۰۰۱۱۷۱ به علت افزایش اثر موئینگی سرعت نفوذ در محیط متخلخل افزایش می‌یابد. اما با افزایش بیشتر داری و به علت غالب شدن اثر مقاومت محیط در برابر نفوذ، سرعت نفوذ کاهش می‌یابد. تنها نکته قابل ذکر آن است که در مقاله حاضر تغییرات عدد داری با تغییرات مقدار تخلخل محیط صورت پذیرفته است و از آنجا که خود عدد تخلخل به عنوان پارامتری مستقل در پدیده نفوذ تأثیر دارد، لذا تغییرات عدد داری همراه با تغییرات تخلخل خواهد بود و این مسأله می‌تواند در رفتار قطره تأثیر بگذارد.

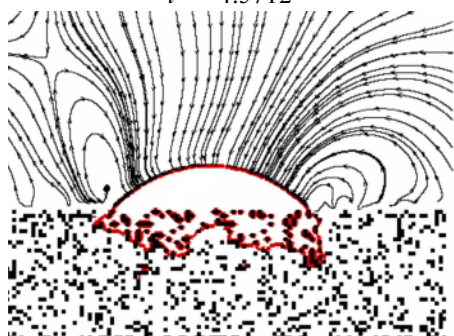
(۲۶) فشار موئینگی افزایش می‌یابد که این امر موجب افزایش سرعت نفوذ در محیط متخلخل خواهد شد. شکل ۱۳ به بررسی این موضوع می‌پردازد.



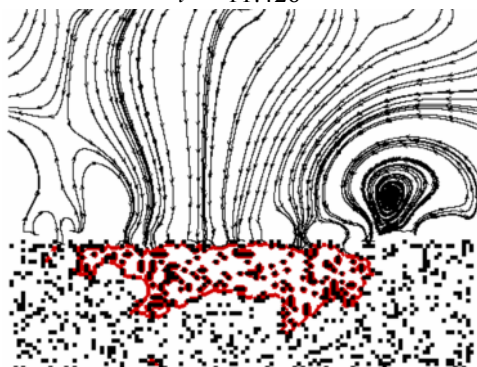
$t^* = 1.1424$



$t^* = 4.5712$

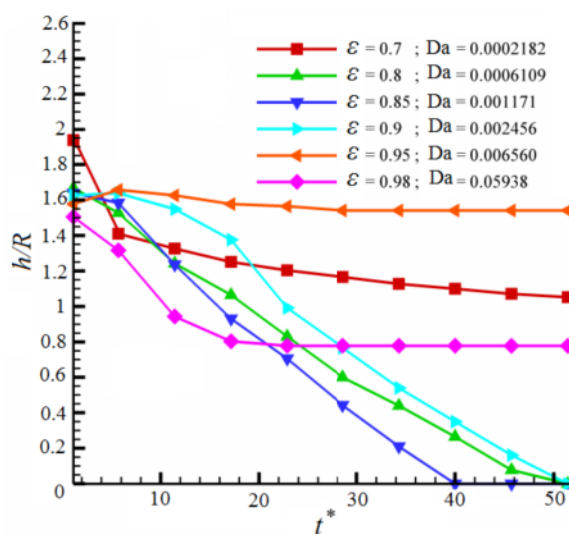


$t^* = 11.428$



$t^* = 28.570$

شکل ۱۲ نمایش خطوط جریان برای حالت ج شکل ۱۰



شکل ۱۱ نمایش میزان نفوذ قطره بر حسب تغییرات دارسی

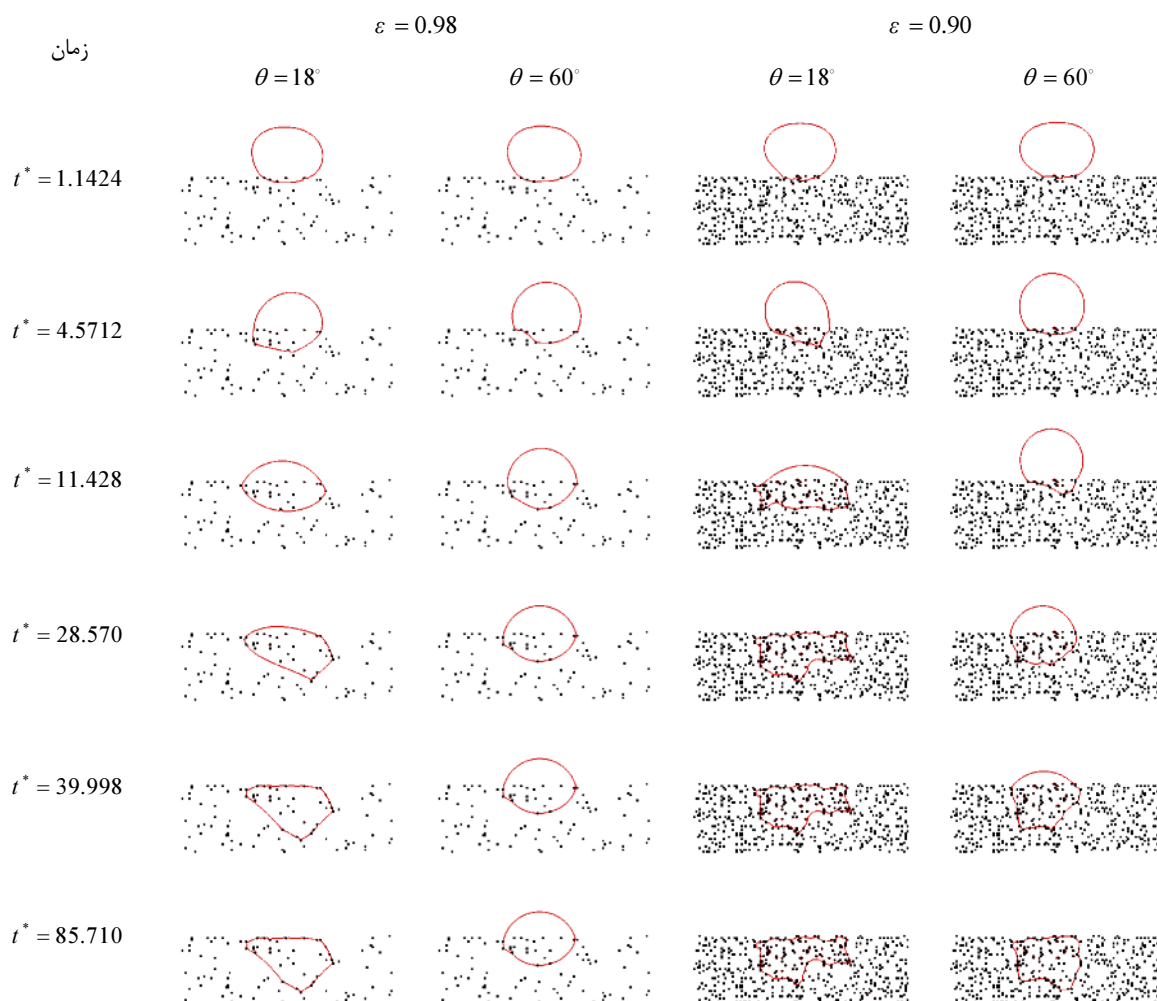
با دقت در شکل ۱۱ و در حالت $Da=0.05938$ این تأثیر دیده می‌شود. چرا که با افزایش میزان تخلخل و فضای خالی برای نفوذ قطره بیشتر خواهد بود و قطره در لحظه برخورد با سرعت بیشتری در محیط متخلخل نفوذ خواهد کرد. اما بعد از آن دوباره به علت بروز تأثیر افزایش عدد دارسی سرعت نفوذ آن کاهش خواهد یافت (به شیب کم آن در شکل توجه شود).

قبل از آن که به بررسی تأثیر تغییرات زاویه تماس پرداخته شود، خطوط جریان در حالت ج شکل ۱۰ در شکل ۱۲ نمایش داده شده که برای این کار چهار زمان مختلف انتخاب شده است.

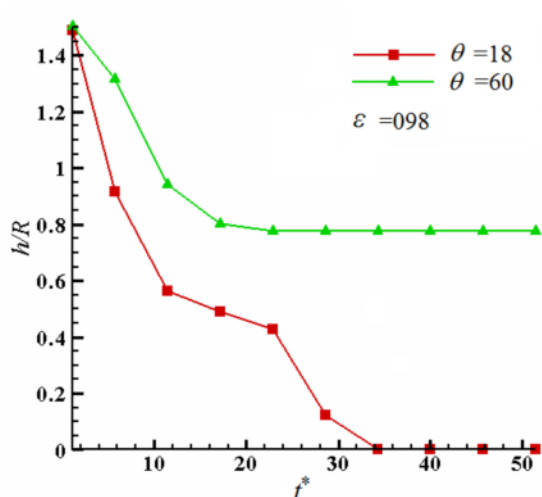
از آنجا که سیال داخل محیط متخلخل کاملاً ساکن می‌باشد و سرعت حرکت قطره نیز زیاد نیست، از این رو خطوط جریان تنها در خارج از محیط متخلخل و در فاز اول بوجود خواهند آمد. همان طور که انتظار می‌رود، خطوط جریان از طرف دیواره‌های اطراف، که در آنجا سرعت نسبت به قطره کمتر است، (در لحظه اول سرعت کل میدان صفر و تنها قطره دارای سرعت اولیه می‌باشد) به سمت قطره امتداد می‌یابند.

۷-۴- تأثیر زاویه تماس

زاویه تماس میان دو سیال و جسم جامد، بیانگر میزان نیروی چسبندگی میان آن‌ها و سطح می‌باشد. این موضوع بیان می‌کند که هر چه این نیرو زیاد باشد، زاویه تماس کاهش خواهد یافت. با کاهش زاویه تماس و مطابق با رابطه



شکل ۱۳ نمایش رفتار برخورد قطره با محیط متخلخل در دو تخلخل ۰/۹۸ و ۰/۹۰ و دو زاویه تماس ۱۸ و ۶۰ درجه



شکل ۱۴ مقایسه میزان نفوذ قطره با دو زاویه تماس ۱۸ و ۶۰ درجه با محیط متخلخل با $\varepsilon = 0.98$

به طوری که با افزایش زاویه تماس از ۱۸ درجه به ۶۰ درجه، سرعت نفوذ کاهش پیدا می‌کند. همچنین دیده می‌شود که با افزایش تخلخل محیط از ۰/۹۰ به ۰/۹۸ به علت کاهش اثرات موئینگی در زاویه تماس ۶۰ درجه علی‌رغم کاهش مقاومت محیط در برابر نفوذ، قطره در داخل محیط متخلخل نفوذ نکرده است. برای بررسی بیشتر تأثیر زاویه تماس در میزان و سرعت نفوذ، نمودار شکل‌های ۱۴، ۱۵ و ۱۶ ارائه شده است. در هر سه شکل مورد اشاره با کاهش زاویه تماس، سرعت نفوذ افزایش می‌یابد.

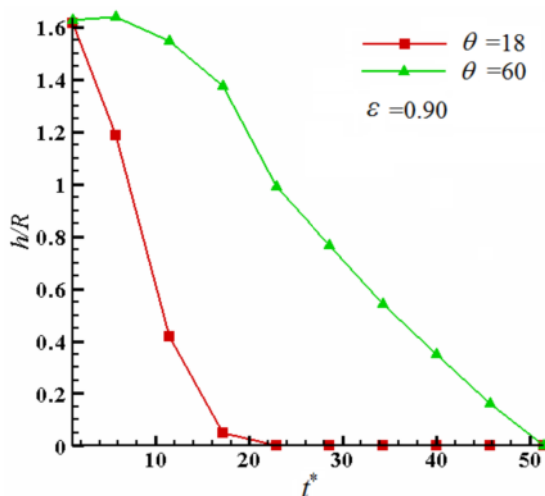
همچنان که در شکل ۱۴ دیده می‌شود، در حالتی که میزان تخلخل محیط ۰/۹۸ و زاویه تماس ۱۸ درجه باشد، نفوذ کامل رخ خواهد داد. اما زمانی که زاویه تماس به ۶۰ درجه افزایش می‌یابد، به علت تضعیف اثر موئینگی نفوذ کامل رخ نمی‌دهد.

۸- نتیجه‌گیری

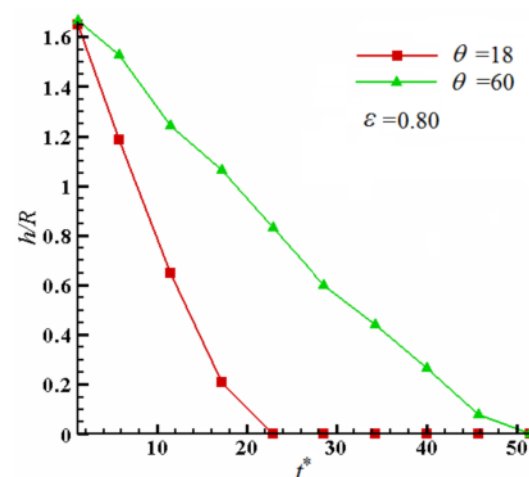
در مقاله حاضر نفوذ قطره در داخل میدان متخلخل مورد ارزیابی قرار گرفت. بدین منظور برخورد یک قطره دوبعدی با سطح متخلخل به کمک مدل شان و چن در قالب روش بولتزمن شبکه‌ای شبیه‌سازی گردید. در مقاله حاضر بر خلاف تحقیقات مرسوم در CFD که در آن‌ها تأثیر محیط متخلخل به صورت ترم چشمه در معادلات ناویر-استوکس ظاهر می‌شود، محیط متخلخل به صورت توزیع تصادفی ذرات مربعی شکل در داخل میدان محاسباتی ایجاد شد. از میان تمام پارامترهای موجود در مسأله، تأثیر دو پارامتر عدد دارسی و زاویه تماس بررسی گردید. رقابت میان نیروی مخالف در برابر حرکت قطره، در اثر حضور ذرات محیط متخلخل و افزایش اثر موئینگی مورد بررسی قرار گرفت. همچنین تأثیر زاویه تماس میان فازهای مایع-گاز و سطح جامد بر میزان نفوذ قطره در داخل محیط متخلخل ارزیابی گردید.

۹- مراجع

- [1] Zhao Y., *A Novel Lattice Boltzmann Method for Direct Numerical Simulation of Multiphase Flows*, Phd Thesis, The Ohio State University, 2009.
- [2] Rioboo R., Voue' M., Vaillant A., De Coninck J., "DropImpacton PorousSuperhydrophobic Polymer Surfaces", *Langmuir*, Vol. 24, No. 24, 2008, pp. 14074-14077.
- [3] Reis N.C. Jr., Griffiths R.F., Santos J.M., "Numerical simulation of the impact of liquid droplets on porous surfaces", *Journal of Computational Physics*, 2004, Vol. 198, No. 2, pp. 747-770.
- [4] Reis N.C.Jr., Griffiths R.F., Santos J.M., "Parametric study of liquid droplets impinging on porous surfaces", *Applied Mathematical Modeling*, 2008, Vol. 32, No. 3, pp. 341-361.
- [5] Alam P., Toivakka M., Backfolk K., Sirviö P., "Impact spreading and absorption of Newtonian droplets on topographically irregular porous materials", *Chemical Engineering Science*, 2007, Vol. 62, No. 12, pp. 3142-3158.
- [6] Alleborn N., Raszillier H., "Spreading and sorption of a droplet on a porous substrate", *Chemical Engineering Science*, 2004, Vol. 59, No 10, pp.2071-2088.
- [7] Alleborn N., Raszillier H., "Spreading and



شکل ۱۵ مقایسه میزان نفوذ قطره با دو زاویه تماس ۱۸ و ۶۰ درجه با محیط متخلخل با $\varepsilon = 0.90$



شکل ۱۶ مقایسه میزان نفوذ قطره با دو زاویه تماس ۱۸ و ۶۰ درجه با محیط متخلخل با $\varepsilon = 0.80$

از سوی دیگر با کاهش تخلخل محیط و افزایش نیروی مخالف در برابر حرکت قطره، از سرعت نفوذ در لحظات اولیه کاسته خواهد شد (به تحدب موجود در نمودار شکل ۱۵ و زاویه ۶۰ درجه توجه شود). ولی به سبب افزایش اثر موئینگی، نفوذ کامل روی می‌دهد.

شکل ۱۶ نیز میزان نفوذ در محیطی با $\varepsilon = 0.80$ را نشان می‌دهد. در این شکل برخلاف شکل ۱۵ تحدبی در نمودار مربوط به زاویه تماس ۶۰ درجه دیده نمی‌شود. که این مسأله به علت غالب شدن اثر موئینگی بر نیروی مخالف در جهت حرکت قطره، خواهد بود.

- [12] He X., Doole G.D., "Thermodynamic foundations of kinetic theory and lattice Boltzmann models for multiphase flows", *Journal of Statistical Physics*, 2002, Vol. 107, Nos. 1-2, pp. 309-328.
- [13] Huang H., Thorne Jr D.T., Schaap M.G., Sukop M.C., "Proposed approximation for contact angles in Shan-and-Chen-type multicomponent multiphase lattice Boltzmann models", *Physical Review E*, 2007, Vol. 76, No 6, 066701.
- [14] Schmieschek S., Harting J., "Contact Angle Determination in Multicomponent Lattice Boltzmann Simulations", *Communications in Computational Physics*, 2011, Vol. 9, No. 5, pp. 1165-1178.
- [15] Nabovati A., Sousa A. C. M., "Fluid flow simulation in random porous media at pore level using the lattice Boltzmann method", *Journal of Engineering Science and Technology*, 2007, Vol. 2, No. 3, pp. 226- 237.
- sorption of droplets on layered porous substrates", *Journal of Colloid and Interface Science*, 2004, Vol. 280, No. 2, pp. 449-464.
- [8] Zhao Y., Wang F., Fan L.-S., "Experimental and Numerical Studies of Water Droplet Impact on a Porous Surface in the Film-Boiling Regime", *Ind. Eng. Chem*, 2008, Vol. 47, No. 23, pp. 9174-9182.
- [9] Luo L.-S., "Unified theory of lattice Boltzmann models for none ideal gases", *Physical review letters*, 1998 Vol. 81, No. 8, pp. 1618-1621.
- [10] Bhatnagar P.L., Gross E.P., Krook M., "A model for collision processes in gases.I. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems", *Physical review*, 1954, Vol. 94, No. 3, pp. 511-525.
- [11] Sukop M.C., Thorne, Jr. D.T., *Lattice Boltzmann Modeling*, Berlin Heidelberg New York, Springer-Verlag, 2007.