



شبیه سازی جریان های الکترواسموتیک موازی به روش لیس بولتزمن

امید رضا محمدی پور^۱، حمید نیازمند^{۲*}، سید علی میربزرگی^۳

۱- دانشجوی دکترای مهندسی مکانیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

۲- استاد مهندسی مکانیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

۳- استادیار مهندسی مکانیک، دانشگاه بیرجند، بیرجند

* مشهد، صندوق پستی ۹۱۷۷۵-۱۱۱۱، niazmand@um.ac.ir

چکیده- در این مقاله با ارائه دو مدل جدید و مناسب از معادلات پواسن و ارنست-پلانک در روش لیس بولتزمن، جریان الکترواسموتیک در یک ریزمجرای تخت با توزیع غیریکنواخت بار سطحی دیوار مورد بررسی قرار گرفته است. حل معادلات ارنست - پلانک در تعیین توزیع یون ها از آن جهت حائز اهمیت است که بر خلاف توزیع بولتزمن، اثر مکانیزم مهم جابجایی نیز در توزیع یون ها لحاظ می شود. ارزیابی صحت مدل به کمک شبیه سازی تغییرات پتانسیل الکتریکی و جریان الکترواسموتیک در یک ریزمجرای تخت با بار سطحی یکنواخت که حل تحلیلی و عددی آن نیز موجود است، صورت گرفته است. در نهایت جریان الکترواسموتیک در یک مجرا با بار سطحی غیریکنواخت (موضعی) در دو حالت منفرد و موازی شبیه سازی و مورد بررسی قرار می گیرد.

کلیدواژگان: جریان الکترواسموتیک، لیس بولتزمن، معادله ارنست-پلانک، معادله پواسن، ریزمجرا.

Simulation of parallel electroosmotic flows with lattice Boltzmann method

O. R. Mohammadipoor¹, H. Niazmand^{2*}, S. A. Mirbozorgi³

1- PhD Student, Mech. Eng., Ferdowsi Univ. of Mashhad, Mashhad, Iran

2- Prof., Mech. Eng., Ferdowsi Univ. of Mashhad, Mashhad, Iran

3- Assist. Prof., Mech. Eng., Birjand Univ., Birjand, Iran

* P.O.B. 91775-1111 Mashhad, Iran. niazmand@um.ac.ir

Abstract- In the present work a new lattice Boltzmann (LB) framework has been developed to study the electroosmotic flows in a 2-D flat microchannel. The governing equations are presented in the continuum model, while a set of equivalent equations in LB model is introduced and solved numerically. In particular, the Poisson and the Nernst-Planck (NP) equations are solved by two new lattice evolution methods. In the analysis of electroosmotic flows, when the convective effects are not negligible or the Electric Double Layers (EDLs) have overlap, the NP equations must be employed to determine the ionic distribution throughout the microchannel. The results of these new models have been validated by available analytical and numerical results. The new framework has also been used to examine the electroosmotic flows in single and parallel heterogeneous microchannels.

Keywords: Electroosmotic Flow, Lattice Boltzmann Method, Nernst-Planck Equation, Poisson Equation.

۱- مقدمه

به کارگیری روش های مؤثر به منظور انتقال سیال بیش از پیش مورد توجه قرار گرفته است. در این راستا استفاده از میکروپمپ های مکانیکی به علت مسائل مربوط به کنترل،

امروزه با افزایش به کارگیری میکروسیستم ها در زمینه هایی از قبیل بیولوژی، پیل های سوختی و تراشه های آزمایشگاهی، لزوم

ساخت و آب بندی با مشکلات زیادی روبرو است. این در حالی است که جریان‌های خاصی نظیر جریان الکترواسموتیک بدون نیاز به سیستم‌های مکانیکی و تنها با استفاده از یک میدان الکتریکی خارجی، امکان انتقال سیال را در ریزمجرها فراهم می‌آورد. یکی از معایب عمده در طرح‌های رایج میکروپمپ‌های الکترواسموتیک، نیاز به ولتاژهای بسیار بالا به منظور راه‌اندازی این پمپ‌ها می‌باشد. تاکامورا و همکارانش [۱] در یک طرح ابتکاری مجموعه‌ای از میکروپمپ‌های ولتاژ پایین را به طور آبشاری به یکدیگر متصل نمودند تا با ولتاژ کمتر به جریان مورد نیاز دست یابند. مهم‌ترین بخش طراحی میکروپمپ‌های ولتاژ پایین، جریان‌های الکترواسموتیک موازی است که به واسطه قرارگیری چند صفحه باردار در کنار یکدیگر، شکل می‌گیرند. براسک و همکارانش [۲] به طور تحلیلی و عددی ایده تاکامورا را مورد بررسی قرار دادند. در این بررسی که مبتنی بر توزیع بولتزمن می‌باشد از اثر دیوارهای جداکننده مجراها بر جریان الکترواسموتیک صرف‌نظر شده است.

دهه گذشته شاهد شکل‌گیری روشی قدرتمند در زمینه تحلیل جریان‌ها به نام روش لیتیس بولتزمن می‌باشد که به علت دارا بودن قابلیت‌های بسیار، به سرعت جایگاه خود را در تحلیل جریان‌های پیچیده و ریز جریان‌ها تثبیت نموده است. در همین راستا تلاش‌هایی نیز به منظور تحلیل جریان الکترواسموتیک با روش لیتیس بولتزمن صورت پذیرفته است [۳-۱۱]. از میان تحقیقات صورت گرفته در زمینه شبیه‌سازی جریان الکترواسموتیک به روش لیتیس بولتزمن، تنها وانگ و کانگ [۱۱] به جای توزیع بولتزمن، از معادله ارنست-پلانک، برای تعیین دقیق توزیع یون‌ها استفاده نموده‌اند. این در حالی است که توزیع یونی بولتزمن تنها زمانی معتبر است که جریان از نظر توزیع یونی کاملاً توسعه یافته باشد. بنابراین به هنگام تغییر در میزان بار سطحی که مانع از توسعه‌یافتگی جریان از منظر غلظت یونی می‌شود، نتایج مبتنی بر توزیع بولتزمن با خطا همراه خواهد بود [۱۲]. در چنین شرایطی محاسبه دقیق توزیع یون‌ها نیازمند استفاده از معادلات عمومی ارنست-پلانک می‌باشد.

مطالعه تحقیقات صورت گرفته در زمینه جریان الکترواسموتیک نشان دهنده تعداد محدود کارهای صورت گرفته در زمینه حل معادله ارنست-پلانک به روش لیتیس

بولتزمن بوده که در حال حاضر تنها محدود به یک کار می‌باشد [۱۱]. لازم به توضیح است که با در نظر گرفتن اثرات جریان بر توزیع یون‌ها آن گونه که در معادله ارنست-پلانک بیان شده است، شبیه‌سازی جریان الکترواسموتیک نیازمند حل همزمان معادلات ارنست-پلانک و ناویر - استوکس خواهد بود. از آنجایی که مدل‌های متفاوت لیتیس بولتزمن برای حل معادلات حاکم الزام‌داری گام‌های زمانی یکسانی نخواهد بود، شبیه‌سازی جریان الکترواسموتیک آن گونه که در تحقیقات وانگ و کانگ [۱۱] نیز بدان اشاره شده است، نیازمند همگام‌سازی حل معادلات حاکم ناویر - استوکس و ارنست-پلانک با انجام تکرارهای نابرابر برای مدل‌های متفاوت لیتیس بولتزمن می‌باشد تا در نهایت حل معادلات حاکم به صورت همزمان به پیش رود.

هدف این مقاله در مرحله اول، ارائه مدل‌های جدید و انعطاف‌پذیری از معادلات لیتیس بولتزمن برای حل معادلات پواسن و ارنست-پلانک خواهد بود بگونه‌ای که امکان برابر سازی گام زمانی معادله ارنست-پلانک و ناویر-استوکس، بدون نیاز به تکرارهای نابرابر فراهم آید. این ویژگی خصوصاً زمانی که حل گذرای جریان الکترواسموتیک مورد نیاز باشد می‌تواند حجم محاسبات را به طور قابل ملاحظه‌ای کاهش دهد. از آنجایی که مطالعه تحقیقات پیشین حاکی از عدم وجود تحلیل جریان الکترواسموتیک در مجراهای موازی بدون صرف‌نظر از اثرات دیوارهای جداکننده جریان‌ها و مبتنی بر حل معادله ارنست-پلانک می‌باشد،

در این مقاله با اتکا به مدل‌های جدید معرفی شده، جریان‌های الکترواسموتیک در دو حالت مجرای منفرد و مجراهای موازی شبیه‌سازی خواهد شد و آثار موازی‌سازی مجراها بر شرایط جریان خصوصاً دبی عبوری هر یک از مجراها مورد بررسی قرار خواهد گرفت. در ادامه، معادلات حاکم بر پدیده الکترواسموتیک معرفی می‌شود. سپس به روابط لیتیس بولتزمن لازم برای حل عددی معادلات حاکم پرداخته خواهد شد که شامل دو مدل جدید از معادلات لیتیس بولتزمن برای حل معادله پواسن و ارنست-پلانک می‌باشد. در نهایت پس از اعتبارسنجی مدل‌های معرفی شده، جریان‌های الکترواسموتیک در یک ریزمجرای تخت به صورت منفرد و موازی مورد بررسی و ارزیابی قرار می‌گیرد.

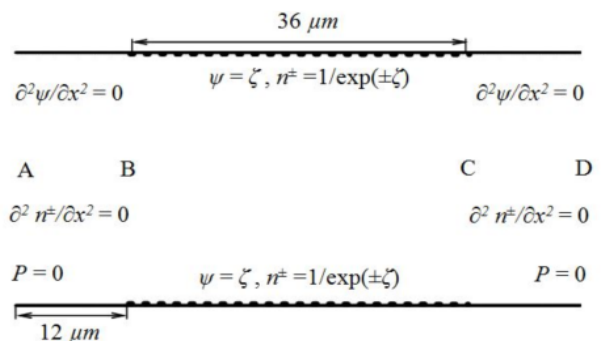
۲- معادلات ماکروسکوپی حاکم

یک ریزمجرای تخت به ضخامت $h=12\mu\text{m}$ و طول $L=60\mu\text{m}$ مطابق شکل ۱ در نظر گرفته می‌شود که در مجاورت الکترولیت، به واسطه ساخته شدن از دو جنس متفاوت دارای بخش میانی باردار و بخش‌های ابتدایی و انتهایی بدون بار می‌باشد. این مجرا در مجاورت الکترولیتی با غلظت توده‌ای یونی برابر با n_0 و ثابت دی الکتریک نسبی ϵ_r قرار می‌گیرد.

وجود بار سطحی در دیواره‌های ریز مجرا، موجب تغییر در چیدمان یون‌ها در الکترولیت و پیدایش لایه دوگانه الکتریکی و نهایتاً یک میدان الکتریکی در مجاورت دیواره‌ها می‌شود. بر اساس تئوری میدان‌های الکتریکی، توزیع پتانسیل الکتریکی (ψ) به وجود آمده در الکترولیت مجاور دیوار از طریق یک معادله پواسن به چگالی بار خالص الکتریکی ρ_e ، مرتبط می‌باشد [۱۳]. با معرفی کمیات بی بعد $x^* = x/h$ و $y^* = y/h$ ، $\psi^* = ze\psi/(k_B T)$ ، $\rho_e^* = \rho_e/(zen_0)$ پس از حذف بالانویس (*) برای اختصار، معادله بی‌بعد شده پواسن حاکم بر پتانسیل الکتریکی داخلی به صورت رابطه (۱) خواهد بود [۱۴].

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\frac{k^2 \rho_e}{2} \quad (1)$$

که در آن $k = Kh$ پارامتر بی بعد ضخامت لایه دوگانه الکتریکی و $K = \sqrt{2ze^2 n_0 / (\epsilon_r \epsilon_0 k_B T)}$ پارامتر دبای-هوکل^۱ می‌باشد. شرایط مرزی این معادله در حوزه حل آن گونه که در شکل ۱ نشان داده شده است، مقادیر معلوم $\zeta = \psi$ در بخش میانی دیوارها و تغییرات ناچیز گرادیان $\partial^2 \psi / \partial x^2 = 0$ در ورودی و خروجی مجرا می‌باشد.



شکل ۱ هندسه و شرایط مرزی جریان الکترواسموتیک

چگالی بار خالص الکتریکی بی‌بعد شده در یک الکترولیت

1. Debye-Huckel Parameter

مقارن متناسب با اختلاف غلظت عددی یون‌های مثبت و منفی می‌باشد ($\rho_e = n^+ - n^-$) که تعیین این غلظت‌ها نیازمند حل معادله (۲)، رابطه ارنست-پلانک خواهد بود [۱۳].

$$\left[\frac{\partial n^\pm}{\partial t} + \frac{\partial(n^\pm u)}{\partial x} + \frac{\partial(n^\pm v)}{\partial y} \right] = \frac{1}{\text{ReSc}^\pm} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial n^\pm}{\partial x} \pm n^\pm \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} + A \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right] + \frac{1}{\text{ReSc}^\pm} \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial n^\pm}{\partial y} \pm n^\pm \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} + A \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right] \quad (2)$$

در معادله (۲)، $\text{Sc}^\pm = \mu / (\rho D^\pm)$ عدد اشمیت، $\text{Re} = \rho U_{\text{ref}} h / \mu$ عدد رینولدز، $U_{\text{ref}} = -\epsilon_r \epsilon_0 E \zeta / \mu$ سرعت مرجع، E شدت میدان الکتریکی خارجی و $A = Ehze / (k_B T)$ نسبت ولتاژ اعمال شده خارجی به ولتاژ مبنا می‌باشد. شرایط مرزی این معادله به صورت مقدار اولیه و تعادلی $n^\pm = 1$ در ورودی و تغییرات طولی ناچیز در گرادیان غلظت $\partial^2 n^\pm / \partial x^2 = 0$ در انتهای مجرا است. با فرض وجود تعادل ترمودینامیکی در مجاورت دیوارها، شرط مرزی به صورت $n_{\text{wall}}^\pm = \exp(\mp \zeta)$ خواهد بود. در معادله ارنست-پلانک، ϕ پتانسیل الکتریکی خارجی بی بعد شده $\phi^* = \phi / (Eh)$ ناشی از اعمال میدان الکتریکی خارجی در دو سر ریز مجرا است که پس از حذف بالانویس (*) برای اختصار، از معادله لاپلاس (۳) پیروی می‌کند [۱۳].

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \quad (3)$$

شرایط مرزی پتانسیل الکتریکی خارجی به صورت مقادیر ثابت $\phi_{\text{Right}} = 0$ و $\phi_{\text{Left}} = EL$ در دو انتهای مجرا و گرادیان نرمال صفر $\partial \phi / \partial n = 0$ در دیوارها خواهد بود. اعمال میدان الکتریکی خارجی در ریز مجرا موجب می‌شود تا به واسطه تجمع یون‌ها در مجاورت دیوار باردار، به سیال نیرو وارد شود. اعمال این نیروی حجمی در معادله ممنوم منجر به تعمیم معادله ناویر - استوکس به صورت رابطه (۴) خواهد شد [۱۴].

$$\frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(vu)}{\partial y} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) - B \rho_e \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} + A \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)$$

$$\frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial(vv)}{\partial y} = -\frac{\partial P}{\partial y}$$

ذرات و δx فاصله شبکه می‌باشد. در شبکه D2Q9 تابع توزیعی تعادلی و ضرایب وزنی مربوط به آن به صورت روابط (۸-الف و ب) بیان می‌شوند [۱۹].

$$f_i^{\text{eq}} = w_i \rho \left[1 + \frac{c_i \cdot U}{c_s^2} + \frac{(c_i \cdot U)^2}{2c_s^4} - \frac{U^2}{2c_s^2} \right] \quad (۸-الف)$$

$$\begin{cases} w_i = \frac{4}{9} & i = 0 \\ w_i = \frac{1}{9} & i = 1-4 \\ w_i = \frac{1}{36} & i = 5-8 \end{cases} \quad (۸-ب)$$

در معادله (۸)، بردار سرعت ماکروسکوپی، $U = ui + vj$ چگالی سیال و $c_s = c/\sqrt{3}$ سرعت صوت مدل می‌باشد. کمیت‌های ماکروسکوپی جریان از قبیل چگالی و سرعت را می‌توان از روابط (۹) و (۱۰)، بر حسب توابع توزیع محاسبه نمود [۱۹]:

$$\rho = \sum_i f_i \quad (۹)$$

$$U = \frac{1}{\rho} \sum_i f_i c_i \quad (۱۰)$$

در شبیه‌سازی جریان سیال تراکم ناپذیر در رینولدزهای پایین، فشار از معادله حالت گاز ایده‌آل، $p = \rho c_s^2$ قابل محاسبه خواهد بود. تحلیل چاپمن-انسکاگ^۲ نشان می‌دهد که در صورت تعریف ثابت تخفیف زمانی و بردار نیروی حجمی به صورت روابط (۱۱) و (۱۲)، معادله ماکروسکوپی هم ارز با معادله (۵)، همان معادلات ناویر-استوکس بی بعد شده (۴) خواهد بود [۲۰].

$$\frac{1}{\text{Re}} = (\tau_f - 0.5) c_s^2 \delta t \quad (۱۱)$$

$$F_i = \frac{-B \rho_e w_i}{c_s^2} \cdot \left[\left(\frac{\partial \psi}{\partial x} + A \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) i + \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} + A \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) j \right] \quad (۱۲)$$

برای حل معادله لاپلاس (۳) بر مبنای مدل گینزبورگ [۱۶]، شکل جدیدی از تابع توزیع به نام g_i معرفی می‌شود که نشان‌دهنده توزیع مقدار ϕ در جهت i می‌باشد $(\sum_{i=0}^8 g_i = \phi)$. معادله حاکم بر این تابع توزیع، معادله عمومی لئیس بولتزمن و مبتنی بر تقریب BGK می‌باشد که به

$$+ \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) - B \rho_e \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} + A \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \quad (۴)$$

که در آن $B = n_0 k_B T / (\rho U_{\text{ref}}^2)$ نسبت فشار یونی به فشار دینامیکی است. در دیوارها شرط عدم لغزش برقرار است و فشار در دو انتهای مجرا مطابق با شرایط کاری اکثر تراشه‌های آزمایشگاهی برابر با صفر در نظر گرفته شده است [۱۵].

۳- حل عددی

هدف ما در این مقاله حل تمامی معادلات (۴-۱) با روش لئیس بولتزمن است. برای این منظور از چهار مدل لئیس بولتزمن استفاده شده است: مدل BGK استاندارد برای حل معادله ناویر - استوکس و پیوستگی، مدل لئیس بولتزمن معرفی شده توسط گینزبورگ^۱ [۱۶] برای حل معادله لاپلاس و در نهایت دو مدل جدید به منظور حل معادلات پواسن و ارنست - پلانک که در ادامه به اختصار معرفی خواهند شد. معادله لئیس بولتزمن هم ارز با معادله ناویر - استوکس تعمیم‌یافته به صورت رابطه (۵) بیان می‌شود.

$$f_i(r + c_i \delta t, t + \delta t) - f_i(r, t) = \Omega_i + \delta t F_i \quad (۵)$$

در معادله (۵)، δt گام زمانی حل، f_i تابع توزیعی چگالی جرم ذرات و اندیس i معرف جهات مشخصه حرکت این ذرات با بردارهای سرعت میکروسکوپی c_i در مکان r و در زمان t می‌باشد. F_i نیروی حجمی و Ω_i عملگر برخورد می‌باشد که در مدل BGK از رابطه (۶) تعریف می‌گردد [۱۷].

$$\Omega_i = \frac{1}{\tau_f} (f_i^{\text{eq}}(r, t) - f_i(r, t)) \quad (۶)$$

که در آن τ_f ثابت تخفیف زمانی و f_i^{eq} تابع توزیعی تعادلی ماکسول-بولتزمن خواهد بود. در یک شبکه دوبعدی با ۹ جهت مشخصه برای حرکت ذرات (D2Q9) سرعت‌های میکروسکوپی به کمک معادله (۷) تعریف می‌شود [۱۸].

$$\begin{cases} c_0 = (0, 0) \\ c_i = (\cos \theta, \sin \theta) c, \quad \theta = \frac{(i-1)\pi}{2}, \quad i = 1-4 \\ c_i = \frac{(\cos \theta, \sin \theta) c}{1/\sqrt{2}}, \quad \theta = \frac{(i-1)\pi}{2} + \frac{\pi}{4}, \quad i = 5-8 \end{cases} \quad (۷)$$

در رابطه (۷)، $c = \delta x / \delta t$ اندازه سرعت میکروسکوپی

$$\tau_h = k_h \frac{\delta t}{\delta x^2} + \frac{1}{2} \quad (19)$$

در این روابط k_h یک ثابت عددی دلخواه می‌باشد که با توجه به محدودیت عددی ثابت تخفیف زمانی τ_h انتخاب می‌شود و مقدار ماکروسکوپی ψ از رابطه $\psi = \sum_i h_i + \delta t k^2 \rho_e / 4$ محاسبه خواهد شد.

برای حل معادله ارنست-پلانک نیز در این مقاله مدل جدید دیگری به صورت معادله (۲۰) طراحی و معرفی شده است:

$$l_i^\pm(r + c_i \delta t, t + \delta t) = l_i^\pm(r, t) + \frac{1}{\tau_1} (l_i^{\text{eq}(\pm)}(r, t) - l_i^\pm(r, t)) \quad (20)$$

که در آن $l_i^\pm$ تابع توزیع چگالی یون‌های مثبت و منفی، و $l_i^{\text{eq}(\pm)}$ تابع توزیعی تعادلی یونی است که به کمک معادله (۲۱) تعریف می‌شود.

$$l_i^{\text{eq}(\pm)} = \begin{cases} \frac{n^\pm w_i'}{c^2} \left[\frac{c^2}{k_1} + (Z^\pm \cdot c_i) + \frac{3(Z^\pm \cdot c_i)^2}{2c^2} - \frac{(Z^\pm \cdot Z^\pm)}{2} \right] & i > 0 \\ n^\pm - \sum_{i \neq 0} l_i^{\text{eq}(\pm)} & i = 0 \end{cases} \quad (21)$$

با تعریف مقادیر ماکروسکوپی، ثابت تخفیف زمانی و بردار Z به صورت روابط (۲۲-۲۴) و استفاده از تحلیل چاپمن-انسکاگ می‌توان نشان داد که معادله (۲۱) هم ارز با معادلات ارنست - پلانک بی بعد شده (۲) می‌باشد.

$$n^\pm = \sum_i l_i^\pm \quad (22)$$

$$Z^\pm = \mp \frac{\left[(A \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial x} + u) \mathbf{i} + (A \frac{\partial \phi}{\partial y} + \frac{\partial \psi}{\partial y} + v) \mathbf{j} \right]}{\text{Re} \cdot \text{Sc}^\pm} \quad (23)$$

$$\tau_1 = \left(\frac{k_1}{\text{ReSc}^\pm} \right) \left(\frac{\delta t}{\delta x^2} \right) + \frac{1}{2} \quad (24)$$

در این روابط k_1 یک پارامتر عددی جهت تطابق گام زمانی در حل معادلات ارنست-پلانک و ناویر-استوکس می‌باشد.

۴- الگوریتم حل

پس از معرفی مدل‌های لیس بولتزمن مورد نیاز برای حل معادلات حاکم، به چگونگی استفاده از آن‌ها در غالب یک الگوریتم حل اشاره می‌گردد. اولین قدم در حل معادلات تعیین

صورت رابطه (۱۳) بیان خواهد شد [۱۶].

$$g_i(r + c_i \delta t, t + \delta t) = g_i(r, t) + \frac{1}{\tau_\phi} (g_i^{\text{eq}}(r, t) - g_i(r, t)) \quad (13)$$

به کمک بسط چاپمن-انسکاگ می‌توان نشان داد که اگر شکل تعادلی تابع توزیع g و ثابت تخفیف زمانی متناسب با آن به صورت معادلات (۱۴) و (۱۵) تعریف شوند، حل معادله (۱۳) معادل با حل معادله لاپلاس (۳) خواهد بود.

$$g_i^{\text{eq}} = \begin{cases} \frac{\phi w_i'}{k_g} & i > 0 \\ \phi - \sum_{i \neq 0} g_i^{\text{eq}} & i = 0 \end{cases} \quad (14)$$

$$\tau_\phi = k_g \frac{\delta t}{\delta x^2} + \frac{1}{2} \quad (15)$$

در روابط فوق k_g یک ثابت عددی دلخواه می‌باشد که متناسب با محدودیت‌های ثابت تخفیف زمانی انتخاب می‌شود و w_i' ضرایب وزنی مرتبط با شبکه سرعت می‌باشد که در شبکه دو بعدی و نه سرعت D2Q9 به کمک رابطه (۱۶) تعریف می‌شود [۱۶]:

$$w_i' = \begin{cases} \frac{1}{3} & i = 1-4 \\ \frac{1}{12} & i = 5-8 \end{cases} \quad (16)$$

تا به امروز مدل‌های متفاوتی از معادلات لیس بولتزمن برای حل معادله پواسن ارائه شده است [۳، ۷، ۲۱]. در این مقاله نیز با الهام از مدل توزیع تعادلی دو رابطه‌ای معرفی شده توسط گینزبورگ [۱۶]، مدلی جدیدی از معادلات لیس بولتزمن به منظور حل معادله پواسن حاکم بر پتانسیل الکتریکی داخلی ψ به صورت معادله (۱۷) ارائه شده است:

$$h_i(r + c_i \delta t, t + \delta t) = h_i(r, t) + \frac{(h_i^{\text{eq}}(r, t) - h_i(r, t))}{\tau_h} + \frac{\delta t w_i (2\tau_h - 1) k^2 \rho_e}{4\tau_h} \quad (17)$$

در رابطه (۱۷) تابع توزیعی تعادلی h_i^{eq} و ثابت تخفیف زمانی τ_h به کمک معادلات (۱۸) و (۱۹) تعریف خواهند شد.

$$h_i^{\text{eq}} = \begin{cases} \frac{\psi w_i'}{k_h} & i > 0 \\ \psi - \sum_{i \neq 0} h_i^{\text{eq}} & i = 0 \end{cases} \quad (18)$$

اول^۱ و نوع دوم^۲ تقسیم می‌شود. شرط مرزی نوع دوم به راحتی و به کمک تفکیک شرط مرزی قابل تبدیل به نوع اول می‌باشد. لذا در اینجا تنها به بیان چگونگی اعمال شرایط مرزی نوع اول اشاره می‌شود. در این مقاله اعمال شرط مرزی فشار در دو سر مجرا و شرط عدم لغزش در دیوارها به ترتیب به کمک مدل زو-هی [۲۲] و محمدی پور و همکاران [۲۳] صورت گرفته است. برای اعمال شرط مرزی در سایر معادلات از تعریف کمیت ماکروسکوپی استفاده شده است. به طور مثال برای اختصاص دادن ψ_{wall} به گره مرزی واقع در دیوار فوقانی مجرا، استفاده از تعریف ψ منتهی به رابطه (۲۵) خواهد شد.

$$\begin{cases} h_4 = \frac{2}{3}(\psi_{\text{wall}} - \delta t(\frac{k^2 \rho_e}{4}) - \sum_j h_j) \\ h_{7,8} = \frac{1}{6}(\psi_{\text{wall}} - \delta t(\frac{k^2 \rho_e}{4}) - \sum_j h_j) \end{cases} \quad (25)$$

که در آن زیرنویس j بیانگر توابع توزیع معلوم در گره مرزی است. به طور مشابه استفاده از تعریف کمیت ماکروسکوپی ϕ و $n^\pm$ منجر به روابط (۲۶) و (۲۷) برای اعمال شرط مرزی در دیوار فوقانی در حل معادلات لاپلاس و ارنست-پلانک می‌شود.

$$\begin{cases} g_4 = \frac{2}{3}(\phi_{\text{wall}} - \sum_j g_j) \\ g_{7,8} = \frac{1}{6}(\phi_{\text{wall}} - \sum_j g_j) \end{cases} \quad (26)$$

$$\begin{cases} l_4 = \frac{2}{3}(n_{\text{wall}}^\pm - \sum_j l_j) \\ l_{7,8} = \frac{1}{6}(n_{\text{wall}}^\pm - \sum_j l_j) \end{cases} \quad (27)$$

در حل تمامی معادلات حاکم برای شبیه‌سازی مرزهای منحنی در ابتدا و انتهای دیوار باردار میانی از روش برونیایی تک معادله‌ای محمدی پور و همکاران [۲۳] استفاده شده است.

۵- اعتبارسنجی

به منظور اعتبارسنجی شبیه‌سازی صورت گرفته ابتدا به بررسی صحت مدل جدید معرفی شده (معادلات ۱۹-۱۷) به منظور حل معادله پواسن پرداخته می‌شود. برای این منظور یک

شبکه گرهی است. نتایج عددی نشان داده است که لازمه یک حل دقیق (خطای نسبی کمتر از ۰/۵٪)، تعداد کافی نقاط گرهی در مدلسازی لایه دوگانه الکتریکی است به گونه ای که ضخامت مشخصه لایه دوگانه الکتریکی (K^{-1}) در شبکه گرهی دارای سه گام مکانی ($3\delta x$) باشد. در این مقاله برای اطمینان از دقت نتایج ضخامت مشخصه لایه دوگانه الکتریکی با $4\delta x$ مدل سازی گردیده است. پس از تعیین گام مکانی نوبت به تعیین گام زمانی می‌رسد. از میان معادلات حاکم معادلات پواسن (۱) و لاپلاس (۳) فاقد ترم‌های زمانی هستند بنابراین حل پایدار آن‌ها می‌بایست در الگوریتم حل مورد استفاده قرار گیرد. از آنجا که معادله لاپلاس تأثیری از سایر معادلات نمی‌پذیرد، ابتدا حل می‌شود و نتایج آن در حل همزمان معادلات مورد استفاده قرار می‌گیرد. این در حالی است که معادله پواسن از طریق غلظت یونی به معادله ارنست-پلانک وابسته است. اگر حل گذرا جریان مورد نظر باشد در هر بار تکرار الگوریتم حل، لازم است تا معادله لتیس بولتزمن مرتبط با معادله پواسن (۱۷) به طور مجزا تکرار شود تا حل پایدار در آن مرحله زمانی حاصل و نتیجه آن در معادله ارنست-پلانک بکار گرفته شود. از آنجا که در مقاله حاضر حل پایدار جریان مورد بحث قرار گرفته است نیازی به تکرارهای مجزا در هر مقطع زمانی برای معادله (۱۷) نمی‌باشد. در مقابل این معادله با انتخاب k_1 مناسب، با سرعت شبکه کوچک‌تر نسبت به معادله ارنست-پلانک حل می‌شود تا در هر بار تکرار الگوریتم حل با سرعت بیشتری نسبت به معادله ارنست-پلانک به حل پایدار خود نزدیک شود. معادله ارنست-پلانک به علت وجود اثرات جابجایی (سرعت جریان) به معادله ناویر - استوکس وابسته است و می‌بایست حل آن به طور همزمان با معادله ناویر - استوکس در زمان به پیش رود. وجود پارامتر k_1 در مدل جدید معرفی شده این امکان را فراهم می‌آورد تا حل همزمان معادله ارنست-پلانک و ناویر - استوکس، فارغ از انجام تکرارهای مستقل به طور همزمان و با گام زمانی یکسان میسر گردد. گام زمانی معادله ناویر-استوکس نیز پس از انتخاب ثابت تخفیف زمانی که در این مقاله برای تمامی مدل‌ها برابر با $\tau = 1/5$ انتخاب شده است، از معادله (۱۱) قابل محاسبه خواهد بود. شرایط مرزی مورد استفاده در هندسه جریان به دو دسته نوع

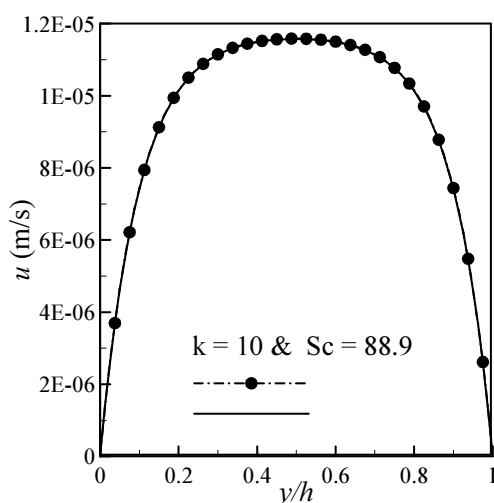
1. Dirichlet
2. Neumann

باشد؛ معادله ارنست-پلانک به توزیع بولتزمن ساده شده و در نهایت حل معادلات حاکم منتهی به پروفیل سرعت تحلیلی به صورت رابطه (۲۸) خواهد شد [۱۴].

$$u(y) = -\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r E \zeta}{\mu} \left(1 - \frac{\cosh(ky - 0.5kh)}{\cosh(0.5kh)} \right) \quad (28)$$

شکل ۳ نشان‌دهنده نتایج حاصل از شبیه‌سازی عددی به همراه حل تحلیلی جریان می‌باشد. عدد اشمیت در این شبیه‌سازی برابر با $Sc = 88.9$ و پارامتر بی بعد ضخامت لایه دوگانه الکتریکی برابر با $k = 10$ انتخاب شده است. به این ترتیب لایه‌های دوگانه الکتریکی در دو سوی مجرا تنها حدود ۲۰٪ از عرض مجرا را اشغال می‌سازند و هیچ‌گونه تداخلی بین آن‌ها به وجود نخواهد آمد. تطبیق بسیار خوب نتایج مویده صحت شبیه‌سازی به خصوص مدل جدید معرفی شده برای حل معادله ارنست-پلانک می‌باشد.

با حفظ شرایط جریان و تغییر پارامتر بی بعد ضخامت لایه دوگانه الکتریکی به $k = 0.34$ ضخامت لایه دوگانه الکتریکی در هر طرف مجرا به حدود $29/4$ برابر عرض مجرا خواهد رسید. در چنین شرایطی تداخل لایه‌های دوگانه الکتریکی در دو سوی مجرا مانع از اعتبار توزیع بولتزمن و به تبع آن رابطه تحلیلی (۲۸) خواهد بود. در این صورت تعیین توزیع یونی نیازمند حل کامل معادله ارنست-پلانک خواهد بود. همان‌طور که پیش از این نیز اشاره شد، وانگ و کانگ [۱۱] مدلی از معادلات لتیس بولتزمن را برای حل معادله ارنست-پلانک پیشنهاد کرده‌اند.

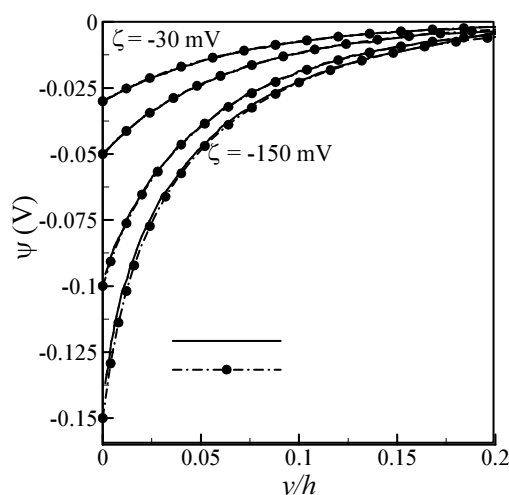


شکل ۳ پروفیل سرعت به دست آمده از شبیه‌سازی عددی به همراه حل تحلیلی

الکترولیت متقارن با غلظت یونی $n_0 = 6/0.22 \times 10^{22}$ (ions/m³)، دمای $T = 273K$ و ثابت نسبی دی الکتریک برابر با $\varepsilon_r = 78/5$ بین دو صفحه موازی در نظر گرفته می‌شود. در دو سر مجرا شرط مرزی تناوبی اعمال می‌گردد و بار سطحی دیوارها به صورت یکنواخت انتخاب می‌شود. شکل ۲ نتایج به دست آمده از مدل جدید را در کنار نتایج وانگ و همکارانش [۲۱] نشان می‌دهد. تطبیق کامل نتایج عددی به دست آمده مؤید صحت مدل معرفی شده (معادلات ۱۷-۱۹) در این مقاله است.

برای بررسی صحت مدل جدیدی از معادلات لتیس بولتزمن (معادلات ۲۰-۲۴) که برای حل معادله ارنست-پلانک معرفی شده است، دو حالت متفاوت در نظر گرفته می‌شود که در یکی از آن‌ها معادله ارنست-پلانک به توزیع بولتزمن ساده شده و دارای حل تحلیلی است و دیگری حالتی که در آن امکان ساده‌سازی معادله ارنست-پلانک وجود نداشته، حل آن مستلزم شبیه‌سازی عددی است.

در حالت اول یک جریان الکترواسموتیک در بین دو صفحه موازی کاملاً باردار در نظر گرفته می‌شود که در آن جریان از نظر غلظت یون‌ها، سرعت و پتانسیل الکتریکی کاملاً توسعه‌یافته بوده و لایه‌های دوگانه الکتریکی در دو طرف ریزمجرا هیچ‌گونه تداخلی با یکدیگر نداشته باشند.



شکل ۲ توزیع پتانسیل الکتریکی داخلی ناشی از بار سطحی دیوار به ازای مقادیر متفاوت بار سطحی (-۱۵۰ mV، -۱۰۰ mV، -۵۰ mV، -۳۰ mV)

اگر بار سطحی دیوارها در طول ریزمجرا یکنواخت و پتانسیل الکتریکی متناظر با آن کوچک‌تر از ۳۰ میلی‌ولت

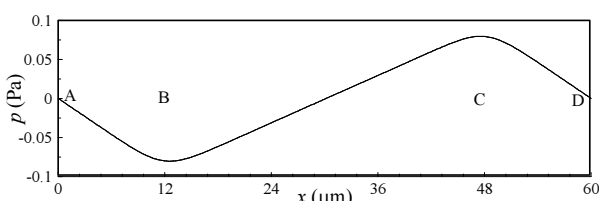
تغییرات پله‌ای بار سطحی مانند آنچه در شکل ۱ نشان داده شده است، مورد بررسی قرار می‌گیرد. پارامترها و خواص سیالی که در این شبیه‌سازی مورد استفاده قرار گرفته‌اند، در جدول ۱ ذکر شده است.

شکل‌گیری جریان الکترواسموتیک در ابتدا از مجاورت دیوارهای باردار آغاز می‌شود. جایی که نیروی اعمالی از سوی میدان الکتریکی خارجی بر تجمع یون‌ها، سیال را به حرکت در می‌آورد. حرکت سیال در بخش میانی مجرا ($B < x < C$) موجب کاهش فشار محلی در ابتدای منطقه باردار ($x = B$) و در مقابل افزایش فشار در انتهای بخش باردار ($x = C$) خواهد شد به گونه‌ای که اختلاف فشار در دو مقطع B و C برابر با $\Delta p_{BC} = 0.19158 \text{ Pa}$ خواهد بود. شکل ۵ تغییرات فشار در طول خط مرکزی مجرا را نشان می‌دهد.

با توجه به شکل ۵، دو گرادیان فشار موافق جریان در بخش‌های ابتدایی و انتهایی مجرا شکل می‌گیرد و از آنجا که دیوار مجرا در این مناطق بدون بار هستند، این گرادیان‌های فشار تنها عامل شکل‌گیری جریان خواهند بود. اما در بخش میانی مجرا گرادیان فشاری مثبت، شکل گرفته است که با جریان الکترواسموتیک مخالفت می‌کند.

جدول ۱ ثوابت خواص سیال در شبیه‌سازی جریان الکترواسموتیک

پارامتر	مقدار (واحد)
h	$12 \times 10^{-6} \text{ (m)}$
D	$2 \times 10^{-9} \text{ (m}^2/\text{s)}$
n_0	$8.7248 \times 10^{+19} \text{ (ion/m}^3\text{)}$
ε_r	۸۰
ρ	$1000 \text{ (kg/m}^3\text{)}$
μ	$0.01 \text{ (Pa}\cdot\text{s)}$
ζ	-25 mV
E	10 (V/mm)



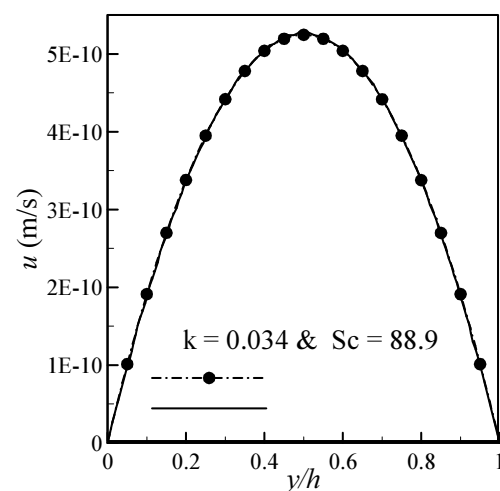
شکل ۵ تغییرات فشار نسبی در خط مرکزی مجرا

در مسأله حاضر اثر پدیده الکترواسموتیک آن گونه که در

شکل ۴ نشان‌دهنده نتایج گزارش شده این جریان توسط کانگ و وانگ [۱۱] به همراه نتایج حاصله از مدل جدید معرفی شده در این مقاله می‌باشد. تطبیق نتایج، تایید دیگری بر صحت شبیه‌سازی صورت گرفته در این مقاله خواهد بود.

۶- شبیه‌سازی جریان الکترواسموتیک

پس از اطمینان از صحت مدل‌های معرفی شده، جریان الکترواسموتیک در دو حالت "منفرد" و "موازی" شبیه‌سازی می‌شود. در بخش جریان الکترواسموتیک منفرد، هندسه جریان مانند آنچه در شکل ۱ نشان داده شده است، یک مجرای تخت با پتانسیل سطحی غیریکنواخت خواهد بود. از قرارگیری دو جریان منفرد در مجاورت یکدیگر به گونه‌ای که دو جریان در بخش ورودی و خروجی با یکدیگر مشترک باشند، جریان الکترواسموتیک موازی شکل خواهد گرفت که بررسی آن موضوع دیگر این بخش خواهد بود. بررسی جریان الکترواسموتیک در حالت موازی از دو منظر صورت خواهد گرفت. ابتدا دبی عبوری هر یک از مجراها در حالت منفرد و موازی مورد بررسی قرار می‌گیرد تا اثر موازی‌سازی مجراها بر شرایط جریان مورد ارزیابی قرار گیرد. سپس دبی کل عبوری از مجموعه موازی در حالت وجود یا عدم وجود دیوار باردار میانی بررسی خواهد شد.



شکل ۴ پروفیل گزارش شده توسط وانگ و کانگ [۱۱] به همراه نتایج شبیه‌سازی عددی حاصل از مدل جدید

۶-۱- شبیه‌سازی جریان الکترواسموتیک منفرد

در این بخش جریان الکترواسموتیک در یک ریزمجرای تخت با

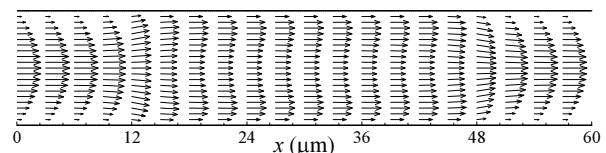
به این ترتیب جریان الکترواسموتیک مورد بحث توسعه‌یافته هیدرودینامیکی نخواهد بود عدم توسعه‌یافتگی جریان طبیعتاً می‌تواند توزیع یون‌های مثبت و منفی را نیز متأثر سازد. شکل ۶- ج توزیع غلظت یون‌های مثبت را که تحت تأثیر میدان سرعت قرار گرفته است، نشان می‌دهد.

یک از مشخصات اصلی این جریان به عنوان یک میکرو پمپ، دبی عبوری از مجرا می‌باشد. در صورت یکنواخت بودن بار سطحی و با فرض ناچیز بودن ضخامت لایه دوگانه الکتریکی در مقابل با عرض مجرا، رابطه هلمهولتز-اسمولوچوسکی^[۱۳] دبی حداکثری عبوری از مجرای تخت را به صورت $Q_{H-S} = -\varepsilon_0 \varepsilon_r E_x \zeta h / \mu$ تقریب می‌زند. اما گرادیان فشاری مثبت شکل‌گرفته در بخش میانی مجرا که ناشی از عدم یکنواختی بار سطحی در مسأله حاضر می‌باشد، موجب کاهش جریان عبوری از مجرا خواهد شد به گونه‌ای که دبی جریان در این هندسه تنها به نیمی از مقدار بیشینه خود یعنی $Q = 0.52 \cdot Q_{H-S}$ خواهد رسید. از این پس و در ادامه مقاله برای ارزیابی جریان عبوری از مقدار بی بعد شده دبی $Q^* = Q / Q_{H-S}$ استفاده خواهد شد که در آن Q_{H-S} تقریب هلمهولتز-اسمولوچوسکی به ازای $h = 12 \mu\text{m}$ می‌باشد.

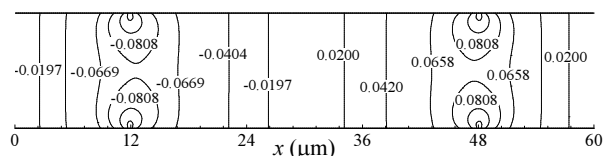
۶-۲- شبیه‌سازی جریان الکترواسموتیک موازی

موضوع مورد بررسی در این بخش دو جریان الکترواسموتیک منفرد مطابق با مشخصات ذکرشده در جدول ۱ می‌باشند که به طور موازی با یکدیگر قرار گرفته‌اند. هندسه جریان آن گونه که در شکل ۷ نشان داده شده است از دو مجرا با عرض $12 \mu\text{m}$ تشکیل شده است که به صورت موازی و به فاصله $4 \mu\text{m}$ از یکدیگر قرار گرفته‌اند. طول این دو مجرا مطابق با طول دیوار باردار معرفی شده در بخش جریان منفرد، برابر با $36 \mu\text{m}$ انتخاب شده است. برای قسمت بدون بار ابتدایی و انتهایی مجرا، معرفی شده در بخش جریان منفرد، از دو ناحیه مستطیلی شکل به ابعاد $12 \mu\text{m} \times 28 \mu\text{m}$ استفاده شده است که به صورت منطقه ورودی و خروجی مشترک در دو طرف مجراها قرار گرفته است. به این ترتیب طول مجموعه حاصله به $60 \mu\text{m}$ خواهد رسید که برابر با طول مجرای منفرد بررسی‌شده در بخش قبل می‌باشد.

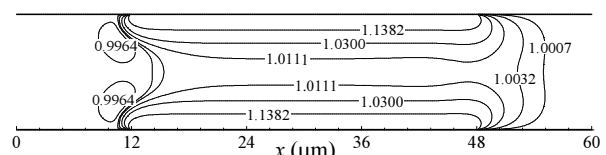
شکل ۶ نشان داده شده است، بر گرادیان فشار مخالف جریان غلبه می‌کند و در نتیجه حرکت سیال در مجموع به سمت راست خواهد بود. با این حال در مناطقی که نیروی ناشی از میدان الکتریکی خارجی به حداقل مقدار خود می‌رسد یعنی مناطق مرکزی مجرا، پروفیل سرعت، برخلاف رابطه (۲۸) دارای یک فرورفتگی خواهد بود. تغییرات شدید پروفیل سرعت در مجرا را می‌توان به کمک شکل ۶ به طور واضح‌تر مشاهده نمود. در بخش میانی مجرا آن گونه که در شکل ۶- الف نشان داده شده است، حداکثر سرعت در مجاورت دیوارها رخ می‌دهد. جایی که نیروی الکتریکی عامل حرکت، حداکثر غلبه را بر عوامل بازدارنده حرکت دارد. این در حالی است که به علت فرض عدم لغزش سیال بر روی دیوارها سرعت سیال روی دیوارها صفر است و در مناطق مرکزی گرادیان فشار مثبت حرکت سیال را کند کرده است. خطوط هم تراز فشار که در شکل ۶- ب آمده است نشان می‌دهد که در محل‌های شروع و خاتمه بار درست در مجاورت دیوار یک کاهش و افزایش شدید فشار رخ می‌دهد این امر موجب می‌شود تا در محل شروع بار سطحی سیال از مناطق مرکزی به سمت هر دو دیوار بالا و پایین حرکت کند درحالی‌که در محل خاتمه بار دیوار، سیال از هر دو دیوار به سمت مناطق مرکزی جاری خواهد شد.



الف- بردارهای سرعت



ب- خطوط هم تراز فشار

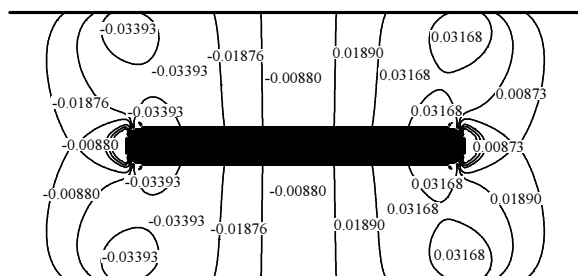


ج- خطوط هم تراز غلظت یون مثبت

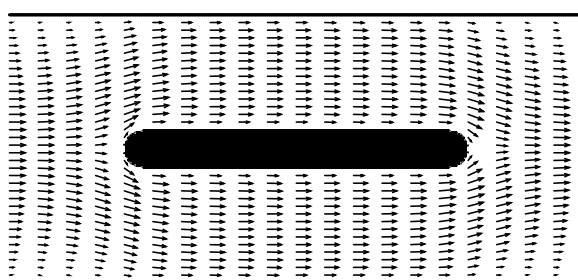
شکل ۶ نتایج شبیه‌سازی عددی جریان الکترواسموتیک

در ریزمجرای تخت

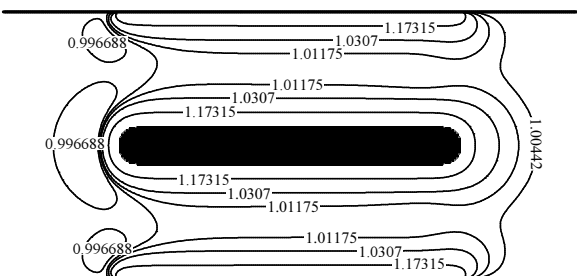
خواهد شد.



شکل ۷ هندسه و شرایط مرزی جریان الکترواسموتیک در شرایط مجراهای موازی



ب- بردارهای سرعت



ج- خطوط هم تراز غلظت یون مثبت

شکل ۸ نتایج شبیه‌سازی عددی جریان الکترواسموتیک در

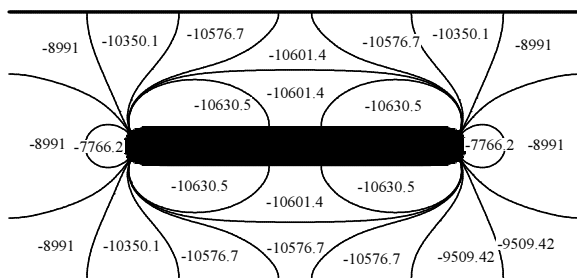
ریزمجرای تخت در شرایط مجراهای موازی

به این ترتیب تغییر در سرعت جریان و تغییرات فشار ناشی از آن، گرادیان فشار مثبت ناشی از جریان الکترواسموتیک را تقویت می‌کند. عامل سوم حضور دیوار جداکننده مجراهای موازی در مسیر جریان است. برخورد سیال و متوقف شدن آن در مقابل دیوار یک منطقه پرفشار در ابتدای مجراهای موازی به وجود می‌آورد. به همین ترتیب در خروجی مجراهای موازی جایی که سیال از شرایط سکون در انتهای دیوار جداکننده سرعت می‌گیرد موجب پیدایش منطقه‌ای کم فشار در انتهای مجراها خواهد شد. از این رو اثر فشاری عامل سوم در تقابل با

دیوار میانی که گوشه‌های آن به شعاع $2\mu\text{m}$ پخ زده شده‌اند به همراه $36\mu\text{m}$ میانی مجموعه دارای بار سطحی برابر با $\zeta = -25\text{mV}$ می‌باشد و شرایط مرزی در آن دقیقاً مطابق با جریان الکترواسموتیک منفرد اعمال شده است. در ادامه مقاله برای تمایز بین کمیات مربوط به مجراها در شرایط منفرد و موازی، به ترتیب از زیرنویس "s" و "p" استفاده خواهد شد. شکل‌گیری جریان الکترواسموتیک از دو مجرای موازی شروع شده و آن گونه که در بخش جریان الکترواسموتیک منفرد نیز مورد بحث قرار گرفت، موجب افزایش فشار در بخش انتهایی و کاهش فشار در بخش ابتدایی مجراها خواهد شد. در مقایسه هندسه این جریان با هندسه مورد اشاره در جریان الکترواسموتیک منفرد، تفاوت تنها در بخش‌های بدون بار جریان است که در هندسه حاضر برای دو جریان موازی به صورت مشترک می‌باشند. نتایج شبیه‌سازی شامل توزیع فشار، سرعت و غلظت یونی در شکل ۸ نشان داده شده است.

همان‌طور که در شکل ۸- الف مشاهده می‌شود ابتدا و انتهای مجراهای موازی شاهد تغییرات شدید فشار می‌باشد. این تغییرات فشار ناشی از سه عامل خواهند بود: اولین عامل ناشی از تغییر در بار سطحی دیوار است که موجب شکل‌گیری گرادیان فشار مثبت در طول مجرا می‌شود و به تفصیل در بخش جریان منفرد مورد بحث قرار گرفته است. عامل دوم تغییر در سطح مقطع جریان در ابتدا و انتهای مجراهای موازی است. به هنگام عبور جریان از منطقه ورودی به ابتدا مجراهای موازی، سطح مقطع جریان کاهش می‌یابد این کاهش سطح مقطع، موجب افزایش سرعت و در نهایت کاهش فشار در ابتدای مجراها خواهد شد. به همین ترتیب خروج سیال از مجراها به منطقه انتهایی با افزایش سطح مقطع همراه است و موجب کاهش سرعت و افزایش فشار در بخش انتهایی مجراها

این گرادیان فشار مثبت خواهد داشت.



شکل ۹ خطوط هم تراز شدت میدان الکتریکی خارجی در مجراهای موازی

علاوه بر این تغییرات فشار ناشی از عامل اول یعنی جریان الکترواسموتیک در حالت مجراهای موازی ضعیف تر از مجرای منفرد خواهد بود چرا که با مشترک سازی مناطق بدون بار مجراها، تعداد سطوح اصطکاکی و بدون بار از چهار سطح (دو سطح بدون بار در ابتدا و دو سطح در انتهای مجرا) برای هر مجرای منفرد به دو سطح (یک سطح بدون بار در ابتدا و یک سطح در انتها مجرا) در طرفین هر مجرای موازی کاهش یافته است. اثر متقابل تمامی عوامل ذکر شده موجب می‌شود تا اختلاف فشار به وجود آمده در دو سوی هر یک از مجراهای موازی در مسأله حاضر برابر با $\Delta p_{BC} = 0.0689 \text{ Pa}$ باشد که به طور قابل ملاحظه‌ای (حدود ۶۴٪) کمتر از اختلاف فشار به دست آمده از دو سر مجرای منفرد در شرایط مشابه می‌باشد.

با توجه به توزیع کاملاً دوبعدی فشار در ابتدا و انتهای مجراهای موازی، اختلاف فشار دو سر هر مجرا بر مبنای میانگین فشار در دهانه‌های ابتدایی و انتهایی هر یک از مجراها محاسبه شده است. به این ترتیب موازی‌سازی جریان‌های الکترواسموتیک با کاهش گرادیان فشار مثبت دو سوی مجراها موجب افزایش دبی عبوری از مجراها خواهد شد. در ادامه به بررسی اثر شدت جریان الکترواسموتیک و ضخامت دیوار جداکننده مجراها در میزان افزایش دبی جریان‌های موازی نسبت به جریان منفرد پرداخته می‌شود. شدت جریان الکترواسموتیک تابعی از بار سطحی و شدت میدان الکتریکی خارجی است. برای بررسی اثر شدت میدان الکتریکی خارجی، با حفظ هندسه و پارامترهای جریان آن گونه که در شکل‌های ۱، ۷ و جدول ۱ ذکر شده است، جریان الکترواسموتیک به ازای مقادیر متفاوت شدت میدان الکتریکی شبیه‌سازی شده است.

تغییرات فشار ناشی از جریان الکترواسموتیک عمل کرده و سعی در کاهش گرادیان فشار مثبت به وجود آمده در طول مجراهای موازی خواهد داشت. تغییرات فشار در ابتدا و انتهای مجراهای موازی موجب می‌شود تا توزیع سرعت در این مناطق کاملاً دوبعدی باشد. توزیع میدان سرعت نشان داده‌شده در شکل ۸- ب موید این امر خواهد بود. توزیع غلظت‌های یونی نشان داده‌شده در شکل ۸- ج نیز به تبعیت از توزیع سرعت تغییرات قابل ملاحظه‌ای را در ابتدا و انتهای مجراهای موازی تجربه می‌کند. اما تغییر پارامتری که بیشتر از هر کمیت دیگری مورد نظر است، دبی عبوری از مجراهای موازی است.

در ابتدا به مقایسه دبی جریان عبوری هر یک از مجراها در حالات منفرد و موازی پرداخته می‌شود. همان طور که پیش از این نیز اشاره شد، دبی عبوری از مجرای منفرد تحت شرایط مرزی نشان داده شده در شکل ۱ برابر با $Q^* = 0.520$ می‌باشد. نتایج شبیه‌سازی حاکی از دبی عبوری به میزان $Q^* = 1.522$ از مجموعه مجراهای موازی نشان داده‌شده در شکل ۷ می‌باشد. به این ترتیب دبی عبوری هر یک از مجراها برابر با $Q^* = 0.761$ خواهد بود که به طور قابل ملاحظه‌ای (حدود ۴۶٪) بیشتر از جریان عبوری از مجرای منفرد است. این افزایش دبی نشان‌دهنده اثر دیوار جداکننده مجراها و مناطق مشترک ورودی و خروجی بر شرایط جریان می‌باشد.

در حوزه نیروی محرکه جریان الکترواسموتیک یعنی شدت میدان الکتریکی خارجی، توزیع نشان داده‌شده در شکل ۹ حاکی از تقویت حدود ۶٪ درصدی شدت میدان الکتریکی در طول مجراهای موازی نسبت به مقدار اسمی آن (10 V/mm) می‌باشد. این افزایش شدت میدان ناشی از تغییر مقطع مجرا در بخش‌های ابتدایی و انتهایی متصل به مجراهای موازی است. طبیعی است افزایش شدت میدان موجب تقویت دبی عبور از مجراها خواهد شد اما نمی‌تواند به تنهایی عامل ۴۶٪ افزایش دبی در مجراها باشد. مهم‌ترین عاملی که موجب افزایش دبی در مجراهای موازی می‌گردد تغییر در توزیع فشار خصوصاً گرادیان فشار مثبت در طول مجراها است. همان طور که پیش از این اشاره شد در هندسه جریان‌های موازی سه عامل در تغییرات فشار دو انتهای مجراها نقش دارند. که دو عامل آن یعنی جریان الکترواسموتیک و تغییر سطح مقطع جریان به دنبال ایجاد گرادیان فشار مثبت در جریان بوده و عامل سوم یعنی حضور دیوار جداکننده در مسیر جریان سعی در کاهش

جدول ۴ اختلاف فشار و دبی مجراها در حالت منفرد و موازی به ازای ضخامت‌های متفاوت دیوار جداکننده

Q_p^*/Q_s^*	Q_p^*	Q_s^*	E_p/E	$\Delta p_p/\Delta p_s$	(μm)
۱/۴۶۳۴	۰/۷۶۱	۰/۵۲۰	۱/۰۵۶	۰/۳۵۹۷	۴
۱/۴۹۲۳	۰/۷۷۶	۰/۵۲۰	۱/۰۷۴	۰/۳۶۳۴	۶
۱/۵۱۱۵	۰/۷۸۶	۰/۵۲۰	۱/۰۸۸	۰/۳۶۷۱	۸

تغییرات ناچیز نسبت فشار نشان داده‌شده در جدول ۴ نیز گواه تأثیر ناچیز ضخامت دیواره بر تغییرات اختلاف فشار مثبت میانی مجراها است. اما از سوی دیگر با تغییر در نسبت سطح مقطع، ناشی از افزایش ضخامت دیوار جداکننده، تقویت شدت میدان الکتریکی خارجی در طول مجرا از ۵/۶٪ به ۷/۴٪ و ۸/۸٪ افزایش می‌یابد. به این ترتیب با افزایش ضخامت دیوار جداکننده، نسبت دبی جریان موازی شده به دبی جریان منفرد نیز افزایش می‌یابد. مشاهده می‌شود که موازی‌سازی جریان‌های الکترواسموتیک در یک مجموعه از کانال‌های موازی موجب بهبود جریان عبوری هر یک از مجراها خواهد شد. در چنین شرایطی تعمیم نتایج شبیه‌سازی جریان الکترواسموتیک منفرد به مجموعه موازی از مجراها آن گونه که در [۲] مطرح شده است با خطا همراه خواهد بود. جریان‌های موازی را می‌توان از منظر دیگری نیز مورد ارزیابی قرارداد.

در ادامه مبنای مقایسه دبی جریان عبوری از هندسه نشان داده‌شده در شکل ۷، در صورت حضور و عدم حضور دیوار باردار میانی قرار می‌گیرد. در صورت عدم وجود دیوار باردار میانی هندسی جریان متشکل از مجرای تخت به ضخامت $28\mu m$ و طول $60\mu m$ خواهد بود که $36\mu m$ میانی آن دارای بار سطحی $25mV$ می‌باشد و در معرض میدان الکتریکی خارجی به شدت $10V/mm$ قرار گرفته است. با ثابت نگاه‌داشتن مبنای بی بعد سازی دبی که همان تقریب هلمهولتز - اسملوچوسکی به ازای $h = 12\mu m$ می‌باشد، دبی عبوری از مجرا، بدون حضور دیوار باردار میانی برابر با $Q^* = 1/319$ بوده و اختلاف فشار معادل با $\Delta p_{BC} = 0/0522Pa$ را به همراه خواهد داشت. حضور دیوار باردار میانی به ضخامت $4\mu m$ آن گونه که پیش از این نیز اشاره شد منجر به عبور جریان با دبی $Q^* = 1/522$ خواهد شد که به معنای افزایش $15/39\%$ درصدی در جریان عبوری می‌باشد. این در حالی است که اختلاف فشار مثبت بین دو نقطه B و C در حضور دیوار میانی به مقدار متوسط

جدول ۲ نشان‌دهنده نسبت اختلاف فشار میانی و دبی در دو حالت مجرای منفرد و موازی می‌باشد. به طریق مشابه به ازای شدت میدان الکتریکی $10V/mm$ - نتایج شبیه‌سازی جریان به ازای مقادیر متفاوت بار سطحی در جدول ۳ ذکر شده است.

نتایج جدول ۲ و ۳ نشان می‌دهد که افزایش شدت جریان الکترواسموتیک (حاصله از افزایش بار سطحی و یا شدت میدان الکتریکی) اگرچه تأثیر ناچیزی بر نسبت گرادیان فشار مثبت میانی مجرا می‌گذارد ولی در نهایت نسبت افزایش دبی حاصله از موازی‌سازی تغییری نخواهد داشت. با توجه به نقش عوامل سه‌گانه مطرح‌شده در تعیین اختلاف فشار دو سوی مجراها، افزایش شدت جریان الکترواسموتیک اثرات افزایشی و کاهش‌ی ناشی از عوامل دوم و سوم را به طور هم‌زمان تقویت می‌کند از این رو آن گونه که در جدول ۲ و ۳ نشان داده شده است تغییر در بار سطحی و شدت میدان الکتریکی خارجی تأثیری بر نسبت دبی مجرای موازی شده به مجرای منفرد نخواهد داشت. برای بررسی تأثیر ضخامت دیوار جداکننده مجراها، با ثابت نگاه‌داشتن شدت میدان الکتریکی در $10V/mm$ و بار سطحی در $25mV$ ، ضخامت دیوار جداکننده به ترتیب برابر با $4\mu m$ ، $6\mu m$ و $8\mu m$ اختیار شده و با ثابت نگاه‌داشتن سایر پارامترها، جریان الکترواسموتیک شبیه‌سازی شده است. نتایج حاصل از شبیه‌سازی در جدول ۴ نشان داده شده است.

با افزایش ضخامت دیوار جداکننده، اختلاف فشار مثبت میانی به واسطه گسترش منطقه پرفشار و کم فشار دو انتهای دیوار کاهش می‌یابد و از سوی دیگر با افزایش نسبت سطح مقطع تغییرات سرعت افزایش یافته و کاهش اختلاف فشار مثبت میانی را جبران می‌نماید.

جدول ۲ اختلاف فشار و دبی مجراها در حالت منفرد و موازی

به ازای مقادیر متفاوت شدت میدان الکتریکی				
Q_p^*/Q_s^*	Q_p^*	Q_s^*	$\Delta p_p/\Delta p_s$	$E(V/mm)$
۱/۴۶۳۴	۰/۷۶۱	۰/۵۲۰	۰/۳۶۳۴	-۵
۱/۴۶۳۴	۰/۷۶۱	۰/۵۲۰	۰/۳۵۴۲	-۱۰
۱/۴۶۳۴	۰/۷۶۱	۰/۵۲۰	۰/۳۵۳۷	-۱۵

جدول ۳ اختلاف فشار و دبی مجراها در حالت منفرد و موازی

به ازای مقادیر متفاوت شدت بار سطحی				
Q_p^*/Q_s^*	Q_p^*	Q_s^*	$\Delta p_p/\Delta p_s$	$\zeta(mV)$
۱/۴۶۳۴	۰/۷۶۱	۰/۵۲۰	۰/۳۶۱۱	-۱۵
۱/۴۶۳۴	۰/۷۶۱	۰/۵۲۰	۰/۳۵۹۷	-۲۵
۱/۴۶۳۴	۰/۷۶۱	۰/۵۲۰	۰/۳۵۸۱	-۳۵

جدول ۵ دبی مجراها در حضور دیوار باردار میانیبه ازای ضخامت‌های $4\mu\text{m}$ ، $6\mu\text{m}$ و $8\mu\text{m}$

$Q^*/(1/319)$	Q^*	$E/10(V/mm)$	(μm)
۱/۱۵۳۹	۱/۵۲۲	۱/۰۵۶	۴
۱/۰۷۹۶	۱/۴۲۴	۱/۰۸۱	۶
۰/۹۹۸۴	۱/۳۱۷	۱/۱۰۴	۸

بنابراین محدودیتی در عرض هندسه وجود نخواهد داشت و با افزایش ضخامت دیوار جداکننده، عرض هندسه نیز افزایش می‌یابد تا ضخامت هر یک از مجراهای موازی در $12\mu\text{m}$ ، ثابت باقی بماند. اما زمانی که در جدول ۵ مقایسه بین حضور و عدم حضور دیوار باردار صورت می‌پذیرد، عرض هندسه می‌بایست در $28\mu\text{m}$ ثابت نگاه داشته شود. در چنین شرایطی افزایش ضخامت دیوار به معنای کاهش سطح مقطع جریان خواهد بود که می‌تواند حتی اثرات منفی بر میزان دبی مجرا به دنبال داشته باشد.

۷- جمع‌بندی

در این مقاله، دو مدل جدید از معادلات لیتیس بولتزمن به منظور حل معادلات پواسن و ارنست-پلانک معرفی گردید و به واسطه آن جریان الکترواسموتیک به همراه تمامی معادلات حاکم بر آن به روش لیتیس بولتزمن شبیه‌سازی شد. مزیت اصلی مدل‌های معرفی شده در این مقاله در مقایسه با تحقیقات گذشته، انعطاف‌پذیری آن‌ها در انتخاب گام زمانی است که در صورت نیاز به حل گذرای معادلات، می‌تواند حجم محاسبات را به طور مؤثری کاهش دهد. با اتکا به مدل‌های معرفی شده در این مقاله، جریان الکترواسموتیک در یک ریزمجرا با بار سطحی غیریکنواخت در دو حالت منفرد و موازی مورد بررسی و ارزیابی قرار گرفت. عدم یکنواختی بار سطحی در طول مجرای منفرد باعث پیدایش گرادیان فشار مثبت در طول مجرا خواهد شد که با جریان سیال مخالفت می‌کند. در چنین شرایطی موازی‌سازی جریان‌های منفرد می‌تواند به طور قابل‌ملاحظه‌ای از اثرات منفی گرادیان فشار مثبت بکاهد و شدت میدان الکتریکی را در طول جریان الکترواسموتیک به طور نسبی تقویت نماید. به این ترتیب موازی‌سازی جریان‌های منفرد الکترواسموتیک می‌تواند افزایش چشم‌گیری در دبی عبوری از هر مجرا به همراه داشته باشد. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد این افزایش بیشتر تابع

$\Delta p_{BC} = 0/0384\text{Pa}$ برای کل عرض مجرا رسیده است. لازم به ذکر است این اختلاف فشار بر مبنای فشار میانگین در کل عرض مجرا به دست آمده است و طبیعتاً متفاوت با میانگین فشار در دهانه هر کدام از جریان‌های موازی میانی خواهد بود که پیش از این مورد بحث قرار گرفته است. اصولاً زمانی که کل مجموعه مورد بررسی قرار می‌گیرد اثر فشار به علت توزیع کاملاً دوبعدی فشار در مناطق ابتدایی و انتهایی منطقه باردار که با تغییرات شدید در عرض مجرا نیز روبرو است، نمی‌تواند به خوبی در غالب مقادیر میانگین مورد بحث قرار گیرد. اثر مهم دیوار باردار میانی بر شرایط جریان، افزایش نیروی حجمی وارد بر سیال می‌باشد. این اثر به همراه تقویت شدت میدان الکتریکی خارجی در قسمت میانی مجرا که پیش از نیز مورد بحث قرار گرفته است به دنبال افزایش میزان دبی عبوری خواهد بود. اما از سوی دیگر اضافه کردن دیوار باردار میانی از سطح مقطع جریان می‌کاهد و علاوه بر آن موجب افزایش سطوح اصطکاکی در مسیر جریان خواهد شد.

در هندسه مورد بررسی (شکل ۷)، اثرات افزایشی حضور دیوار باردار بر میزان جریان عبوری بیش از اثرات کاهشی آن بوده که منتهی به $15/39\%$ افزایش دبی خواهد شد. از آنجایی که مقادیر دبی نسبت به تقریب هلمهولتز-اسملوچوسکی بی بعد شده‌اند، بدیهی است که تغییر در بار سطحی و یا شدت میدان الکتریکی آن گونه که پیش از این نیز در جداول ۲ و ۳ مورد بحث قرار گرفته است، تأثیر چندانی بر میزان Q^* نخواهد داشت. برای بررسی اثر ضخامت دیوار باردار میانی بر دبی جریان، شبیه‌سازی جریان الکترواسموتیک در حضور دیوار باردار میانی به ضخامت $4\mu\text{m}$ ، $6\mu\text{m}$ و $8\mu\text{m}$ صورت گرفته است که نتایج آن در جدول ۵ ذکر شده است. همان طور که از نتایج جدول ۵ مشاهده می‌شود، افزایش ضخامت دیوار باردار میانی به علت افزایش نسبت سطح مقطع در ابتدا و انتهای دیوار، تقویت شدت میدان الکتریکی را در پی خواهد داشت. اما از سوی دیگر اضافه نمودن دیوار موجب کاهش سطح مقطع جریان الکترواسموتیک خواهد شد. بنابراین طبق نتایج جدول ۵ هرچه ضخامت دیوار میانی کمتر باشد اثر افزایشی جریان بیشتر خواهد بود. این نتیجه دقیقاً عکس آن چیزی است که از جدول ۴ به دست آمد علت تفاوت به این موضوع بر می‌گردد که در جدول ۴، مقایسه بین جریان یک مجرا در حالت منفرد و موازی صورت می‌پذیرد.

- "Electrokinetic pumping effects of charged porous media in microchannels using the lattice Poisson-Boltzmann method", *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 304, No. 1, 2006, pp. 246-253.
- [7] Chai Z., and Shi B., "Simulation of electro-osmotic flow in microchannel with lattice Boltzmann method", *Physics Letters A*, Vol. 364, No. 3-4, 2007, pp. 183-188.
- [8] Wang J., Wang M., and Li Z., "Lattice Poisson-Boltzmann simulations of electro-osmotic flows in microchannels", *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 296, No. 2, 2006, pp. 729-736.
- [9] Wang D., Summers J. L., and Gaskell P. H., "Modelling of electrokinetically driven mixing flow in microchannels with patterned blocks", *Computers & Mathematics with Applications*, Vol. 55, No. 7, 2008, pp. 1601-1610.
- [10] Wang M., Wang J., and Chen S., "Roughness and cavitations effects on electro-osmotic flows in rough microchannels using the lattice Poisson-Boltzmann methods", *Journal of Computational Physics*, Vol. 226, No. 1, 2007, pp. 836-851.
- [11] Wang M., and Kang Q., "Modeling electrokinetic flows in microchannels using coupled lattice Boltzmann methods", *Journal of Computational Physics*, Vol. 229, No. 3, 2010, pp. 728-744.
- [12] Park H. M., Lee J. S., and Kim T. W., "Comparison of the Nernst-Planck model and the Poisson-Boltzmann model for electroosmotic flows in microchannels", *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 315, No. 2, 2007, pp. 731-739.
- [13] Probstein R. F., *Physicochemical hydrodynamics: an introduction*, Wiley, New York, 1994.
- [14] Mirbozorgi S. A., Niazmand H., and Renksizbulut M., "Electro-Osmotic Flow in Reservoir-Connected Flat Microchannels With Non-Uniform Zeta Potential", *Journal of Fluids Engineering*, Vol. 128, No. 6, 2006, p. 1133.
- [15] Dutta P., Beskok A., and Warburton T. C., "Numerical Simulation of Mixed Electroosmotic / Pressure Driven Microflows", *Numerical Heat Transfer Applications*, Vol. 41, No. 2, 2002, pp. 131-148.
- [16] Ginzburg I., "Equilibrium-type and link-type lattice Boltzmann models for generic advection and anisotropic-dispersion equation", *Advances in Water Resources*, Vol. 28, No. 11, 2005, pp. 1171-1195.
- [17] Bhatnagar P., Gross E., and Krook M., "A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems", *Physical Review E*, Vol. 94, No. 3, 1954, pp. 511-525.
- [18] Guo Z., Shi B., and Wang N., "Lattice BGK Model for Incompressible Navier-Stokes Equation", *Journal of Computational Physics*, Vol. 165, No. 1,
- هندسه جریان می‌باشد به گونه‌ای که افزایش ضخامت دیوار جداکننده موجب افزایش نسبت دبی جریان موازی به جریان منفرد خواهد شد. از طرف دیگر نتایج عددی حاکی از آن است که افزایش شدت جریان الکترواسموتیک ناشی از تقویت بار سطحی و یا شدت میدان الکتریکی خارجی تأثیر چندانی بر نسبت دبی جریان موازی بر دبی جریان منفرد نخواهد داشت. با توجه به اثر متقابل جریان‌های موازی بر یکدیگر، تعمیم نتایج تحلیل یک جریان منفرد به مجموعه جریان‌های موازی با شرایط مرزی یکسان، می‌تواند خطای قابل‌ملاحظه‌ای را به همراه داشته باشد. از سوی دیگر می‌توان نتایج جریان موازی را وسیله‌ای برای مقایسه جریان الکترواسموتیک در یک ریزمجرای تخت، در صورت حضور و عدم حضور دیوار باردار میانی قرارداد. از این منظر اضافه کردن دیوار باردار میانی به علت افزایش نیروی حجمی وارد بر سیال موجب تقویت جریان خواهد شد. اما این تقویت با ضخامت دیوار رابطه معکوس دارد به گونه‌ای که با افزایش ضخامت دیوار میزان افزایش جریان کاهش می‌یابد و حتی می‌تواند به علت کاهش سطح مقطع جریان اثر کاهشی بر دبی جریان داشته باشد.

۸- مراجع

- [1] Takamura Y., Onoda H., Inokuchi H., Adachi S., Oki A., and Horiike Y., "Low-voltage electroosmosis pump for stand-alone microfluidics devices", *Electrophoresis*, Vol. 24, No. 1-2, 2003, pp. 185-192.
- [2] Brask A., Goranović G., and Bruus H., "Theoretical analysis of the low-voltage cascade electro-osmotic pump", *Sensors and Actuators B: Chemical*, Vol. 92, No. 1-2, 2003, pp. 127-132.
- [3] Tang G. H., Li Z., Wang J. K., He Y. L., and Tao W. Q., "Electroosmotic flow and mixing in microchannels with the lattice Boltzmann method", *Journal of Applied Physics*, Vol. 100, No. 9, 2006, p. 094908.
- [4] Tang G. H., Ye P. X., and Tao W. Q., "Pressure-driven and electroosmotic non-Newtonian flows through microporous media via lattice Boltzmann method", *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, Vol. 165, No. 21-22, 2010, pp. 1536-1542.
- [5] Wang M., and Chen S., "Electroosmosis in homogeneously charged micro- and nanoscale random porous media", *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 314, No. 1, 2007, pp. 264-273.
- [6] Wang M., Wang J., Chen S., and Pan N.,

- equation in confined domains”, *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, Vol. 13, No. 3, 2008, pp. 575-583.
- [22] Zou Q., and He X., “On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model”, *Physics of Fluids*, Vol. 9, No. 6, 1997, p. 1591.
- [23] Mohammadipoor O. R., Niazmand H., Mirbozorgi S. A., “A new curved boundary treatment for the lattice Boltzmann method”, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 13, No. 8, 2013, pp. 28-41. (In Persian)
- 2000, pp. 288-306.
- [19] He X., and Luo L.-S., “Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation”, *Physical Review E*, Vol. 56, No. 6, 1997, pp. 6811-6817.
- [20] Llewellyn E. W., “LBflow: An extensible lattice Boltzmann framework for the simulation of geophysical flows. Part I: theory and implementation”, *Computers & Geosciences*, Vol. 36, No. 2, 2010, pp. 115-122.
- [21] Wang J., Wang M., and Li Z., “Lattice evolution solution for the nonlinear Poisson–Boltzmann