

به نام خدا
دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران مرکزی



جریانهای میکرو و نانو (آموزش مجازی) جلسه اول

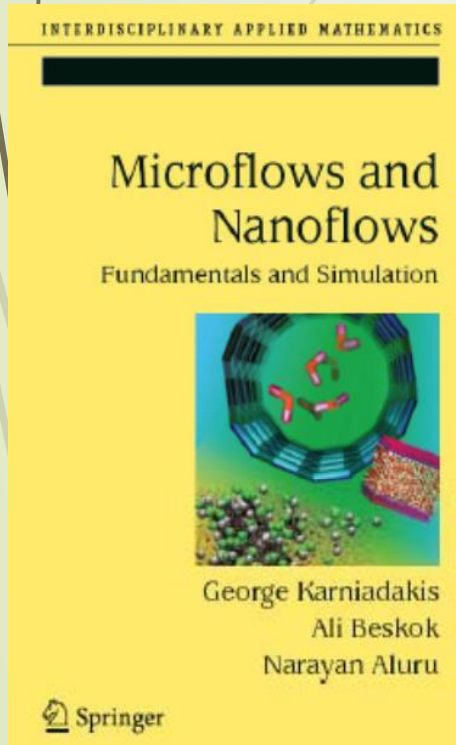
مدرس: محمد وهابی

ترم اول سال تحصیلی ۱۴۰۱-۱۴۰۰

منابع و راه ارتباطی

- **Microflows and NanoFlows: Fundamentals and Simulation by George Karniadakis, Ali Beskok, Narayan Aluru.**

➤ این کتاب سه بخش دارد: فصول دوم تا ششم به جریانهای گازی، فصول هفتم تا سیزدهم به جریانهای مایعات و فصول چهاردهم تا هجدهم به تکنیک شبیه سازی اختصاص دارد.



➤ صورت تمرینات و پروژه داخل کانال تلگرام قرار می گیرد.

➤ ایمیل: mohammadvahabi@gmail.com

➤ کانال در تلگرام: @IAU_Vahabi

➤ حتما در موضوع (subject) ایمیل لغت "جریانهای میکرو و نانو" ذکر شود.

سرفصلها

سرفصلها: ▶

- ▶ فصل اول : مفاهیم مقدماتی.
- ▶ فصل دوم: معادلات حاکم و مدل‌های لغزشی.
- ▶ فصل سوم: جریانهای برشی (ناشی از حرکت دیواره) (Shear-Driven Flows).
- ▶ فصل چهارم: جریانهای با نیروی محرکه فشاری (ناشی از اختلاف فشار دو سر کانال) (Pressure-Driven Flows).
- ▶ فصل پنجم: اثرات حرارتی در مقیاس میکرو.
- ▶ فصل ششم (فصل ۷ کتاب): جریانهای الکتروکینتیکی.
- ▶ فصل هفتم (فصل ۸ کتاب): جریانهای با نیروی محرکه کشش سطحی.
- ▶ فصل هشتم: (فصل ۱۵ و ۱۶ کتاب): مدل‌سازی چند مقیاسه جریانهای گازی و مایعات.

سرفصلهای وزارت علوم

نام درس و تعداد واحد (نظری)	جریان های میکرو و نانو (ME2128) Microflows and nano flows	۳ واحد ۴۸ ساعت
روش ارزشیابی	آزمون نهایی، آزمون نوشتاری	

سرفصل

ردیف	مباحث	تعداد جلسات
۱	۱. مقدمه و معادلات حاکم	
	۱.۱ - مقدمه ای بر جریان های میکرو و نانو	
	۲.۱ - رژیم های جدید جریانی در میکرو سیستم ها	
	۳.۱ - مشخصه های جریان میکرونانو	
۲	۴.۱ - فرض پیوستگی	
	۲. مدلسازی چند مقیاسی در جریان های میکرو و نانو	
	۱.۲ - روش دینامیک ملکولی	
	۲.۲ - روش مونت کارلو شبیه سازی مستقیم	
۳	۳.۲ - روش شبکه بولتزمن	
	۴.۲ - روش دینامیک ذره استهلاکی	
	۳. معادلات حاکم و مدل های لغزشی	
	۱.۳ - معادلات پایه در دینامیک سیال	
۴	۲.۳ - جریان تراکم پذیر	
	۳.۳ - روش های مرتبه بالا	
	۴. جریان های با نیروی محرکه برشی	
	۱.۴ - جریان کوئت: رژیم جریان لغزشی	
۵	۲.۴ - جریان کوئت: رژیم گذرا و مولکول آزاد	
	۳.۴ - جریان حفره	
	۵. جریان های با نیروی محرکه فشار	
	۱.۵ - رژیم جریان لغزشی	
۶	۲.۵ - رژیم گذرا و مولکول آزاد	
	۶. انتقال حرارت در جریان های میکرو و نانو	
	۱.۶ - انتقال حرارت در جریان پوازیل میکرو	
	۲.۶ - انتقال حرارت در جریان کوئت میکرو	

۳.۶ - انتقال حرارت نانو سیال	
۷. جریان های الکتروسینتیک	۷
۱.۷ - مقدمه ای بر الکترو دینامیک	
۲.۷ - معادلات حاکم در جریان های الکتروسینتیک	
۳.۷ - جریان های الکترواسمز	
۴.۷ - الکتروفورس	
۵.۷ - دیپالکتروفورس	
۸. جریان های با نیروی محرکه کشش سطحی	۸
۱.۸ - مفاهیم پایه و معادلات حاکم	
۲.۸ - پمپاژ موینگی حرارتی	
۳.۸ - موینگی الکتریکی	
۴.۸ - انتقال حباب در لوله های موینه	

منابع

ردیف	عنوان
۱	K. arniadakis, G., Beskok, A. and Aluru, N., 2005, Microflows and nano flows, Fundamentals and simulation, Springer, 808p
۲	Kandlikar, S.G., Garimella, S., Li, D., Colin, S. And King, M.R., 2005, Heat transfer and fluid flow in minichannels and microchannels, Elsevier, 450 p
۳	Tabeling, P., 2005, Introduction to microfluidics, Oxford University Press
۴	Rapaport, D.C., 2004, The art of molecular dynamics simulation, Cambridge University Press
۵	Succi, S., 2001, The Lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond, Clarendon Press, 288 p



نمره دهی

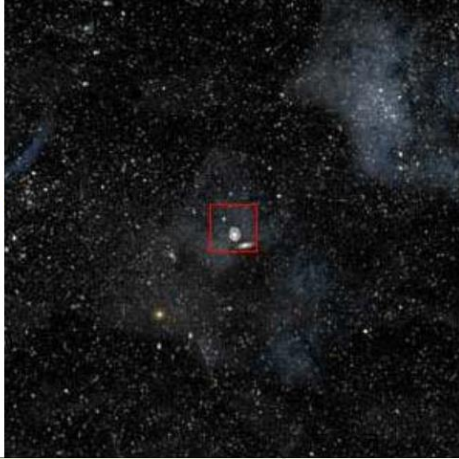
- ▶ **تمرین:** ۱ نمره.
- ▶ **حضور و غیاب:** کمتر از ۳ جلسه غیبت، ۱ نمره.
- ▶ **پروژه:** ۳ نمره (برنامه نویسی).
- ▶ **پایان ترم:** ۱۵ نمره.
- ▶ در صورت حضوری شدن کلاس، ارائه مقاله در ازای کم شدن بارم نمره پایان ترم.

تبصره: ممکن است موارد بالا به دلیل سیستم آموزش مجازی تغییر کند.

فصل اول - مفاهیم مقدماتی

در چه ابعادی صحبت می کنیم!؟

10 million light years (10^{23} m)
the distance to galaxy
Milky-Way



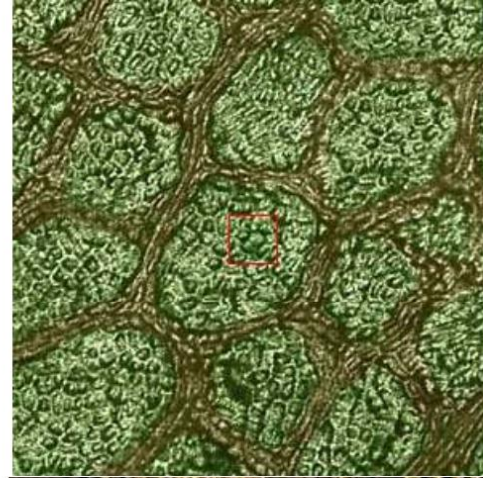
100 m (10^2 m)
An ordinary
view from an
helicopter.



1 million light
years (10^{22} m)
The disc
becomes visible.



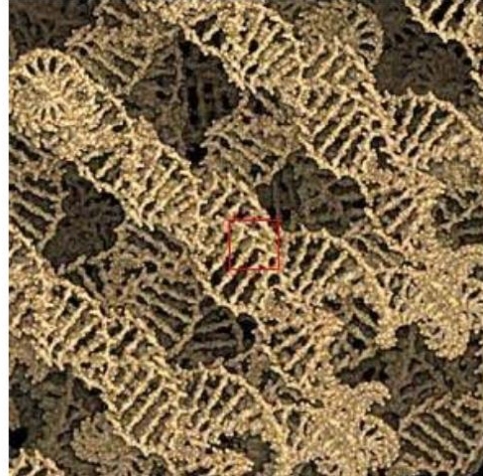
100 micron
(10^{-4} m)
you can see
the cells.



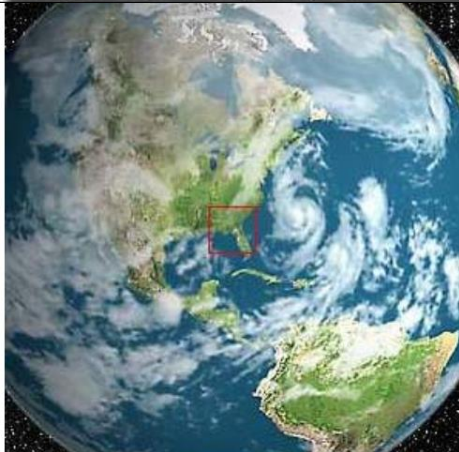
1 cm
(10^{-2} m)
You can
see the
structure of
a leaf.



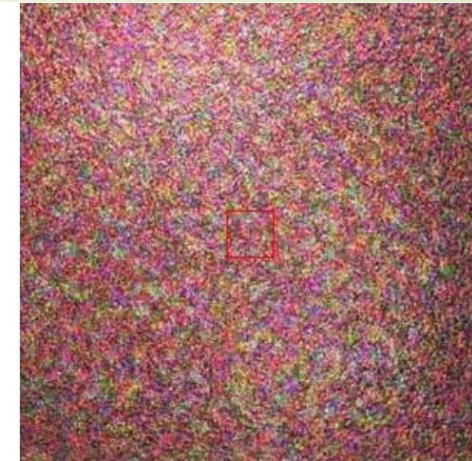
100
angstrom
(10^{-8} m)
You can see
the DNA
chain.



10,000
Km(10^7 m)
The northern
hemisphere of
Earth.



1 Fermi
(10^{-15} m)
The surface
of a
neutron.



مقدار بر حسب متر	علامت اختصاری	آحاد
10^{16}	Light year	سال نوری
10^3	Km	کیلومتر
10^{-3}	mm	میلی متر
10^{-6}	μ m	میکرو متر (میکرون)
10^{-9}	nm	نانومتر
10^{-10}	Å	انگسترم
10^{-12}	Pico meter	پیکو متر
10^{-15}	Fermi	فرمی
10^{-18}	Atom meter	اتم متر

فصل اول - مفاهیم مقدماتی

تفاوت عمده جریان سیال در ابعاد میکرو با ماکرو:

۱- اثرات غیر پیوسته بودن محیط.

۲- اثرات سطحی.

۳- اثرات رینولدز پایین.

۴- اثرات چندمقیاسه و چند فیزیکی بودن مسئله.

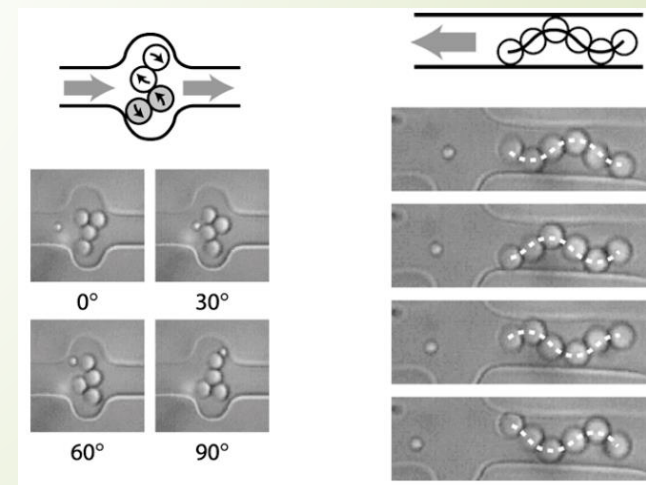
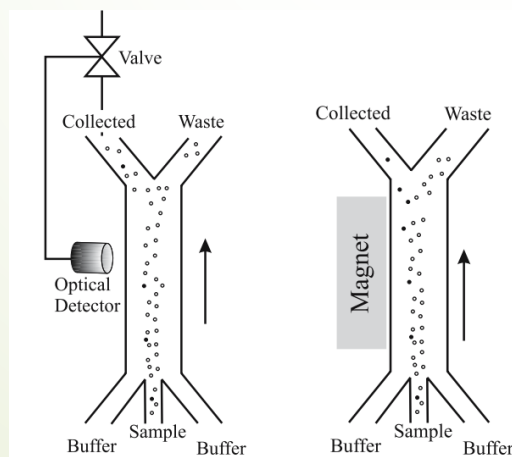
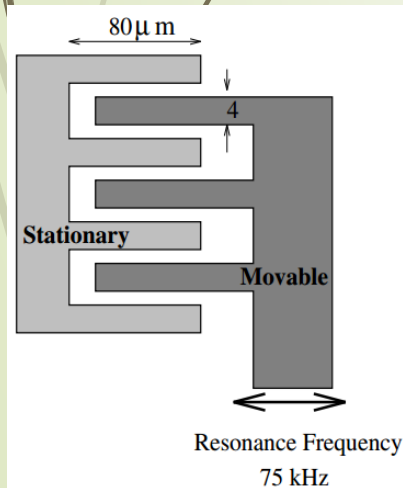
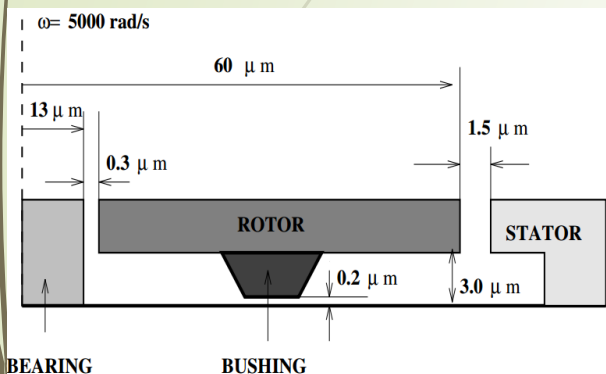
نکته مهم: نیروهای حجمی در مقابل نیروهای سطحی بسیار کم اهمیت تر هستند پس اینرسی در مقابل کشش سطحی، اصطکاک، نیروهای الکترواستاتیکی، ویسکوز غالب نیست. چون طبق قانون **مربع به مکعب**، کمیتی که تابع سطح هستند آرامتر کاهش می یابند تا خواصی که تابع حجم هستند:

$$\frac{p_1(A)}{p_2(V)} \propto \frac{L^2}{L^3} \propto \frac{1}{L}$$

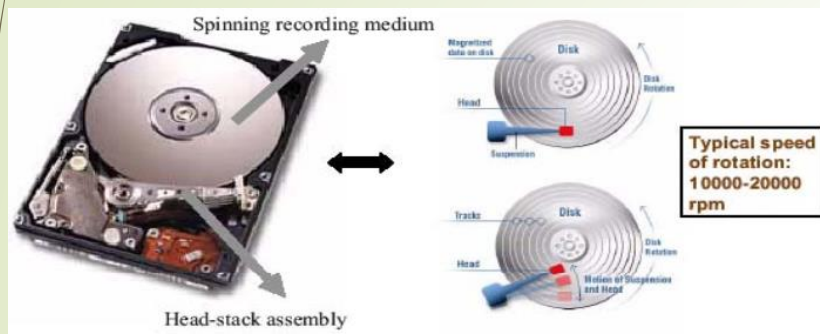
فصل اول - مفاهیم مقدماتی

کاربردها:

- هارد دیسک وینچستر (فاصله هد تا صفحه چرخان از مرتبه بزرگی 50nm است. هر چقدر فاصله کمتر، ظرفیت ضبط افزایش می یابد).
- سیستمهای میکرو الکترومکانیکال (MEMS) نظیر میکروموتورها و میکرودرایو شانه ای الکتروستاتیک.
- میکرو شتاب سنجهای ایربگهای خودرو.
- سنسورهای فشار بسیار کوچک سر ابزارهای جراحی و لوله های پزشکی (کثر).
- جداکننده ذرات (لوله 100 μm و ذرات 5-10 μm).
- میکروپمپها (ایجاد سرعت 2-4 $\mu\text{m/s}$ مطابق با دبی 0.25nL/h) و میکروشیرها.

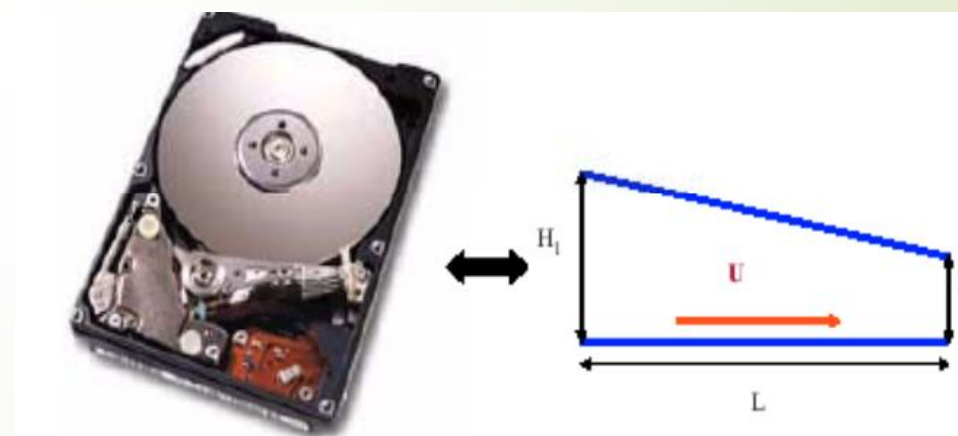
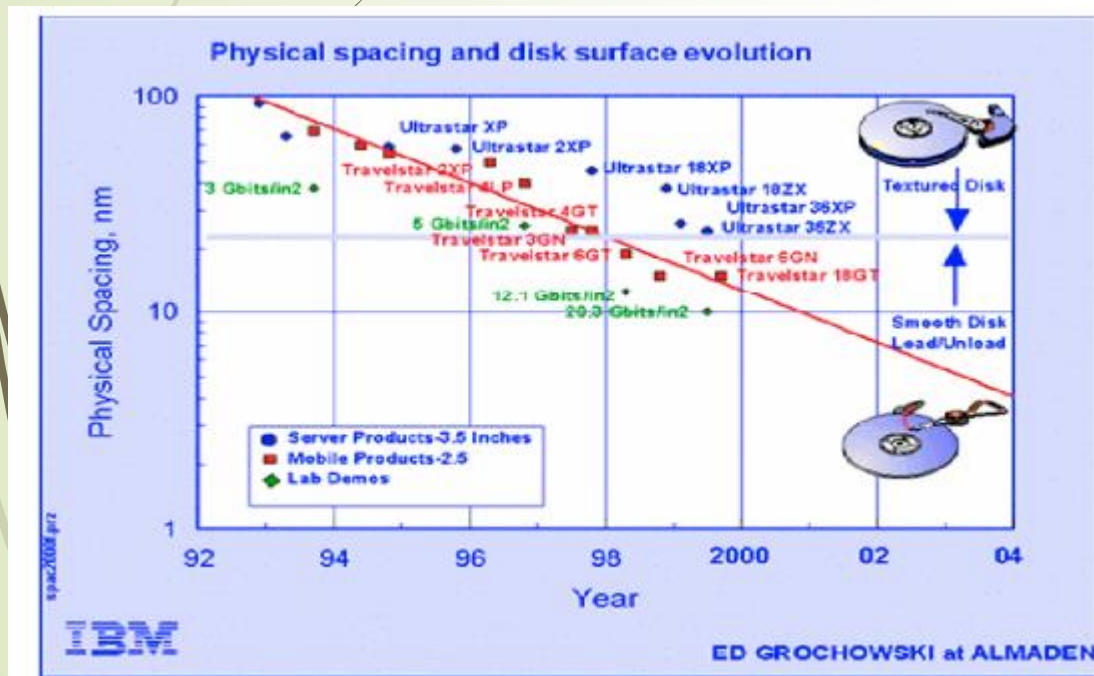


فصل اول - مفاهیم مقدماتی



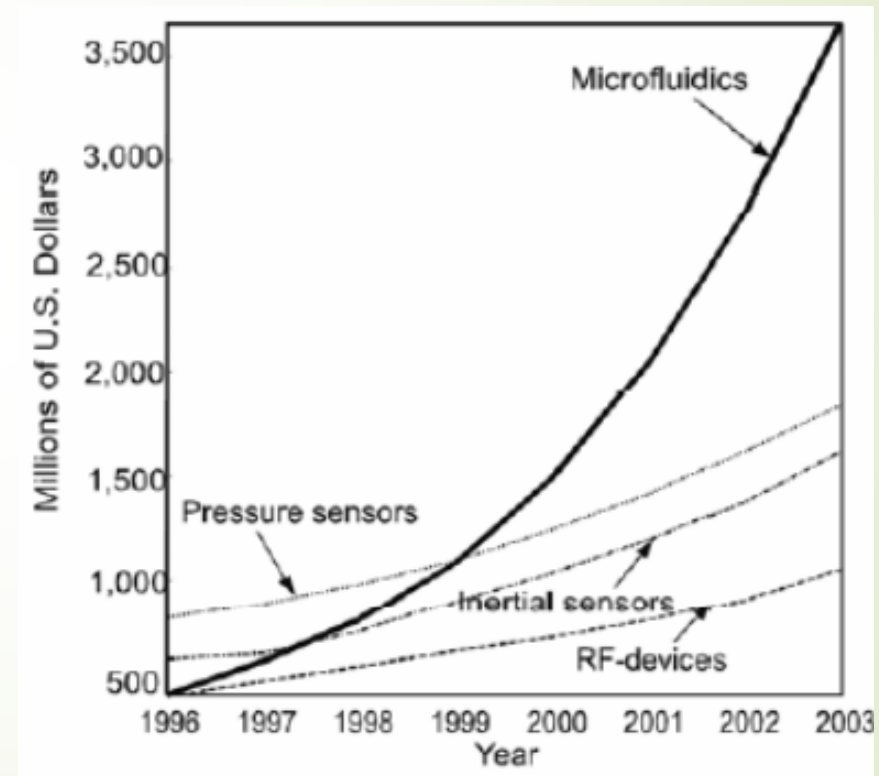
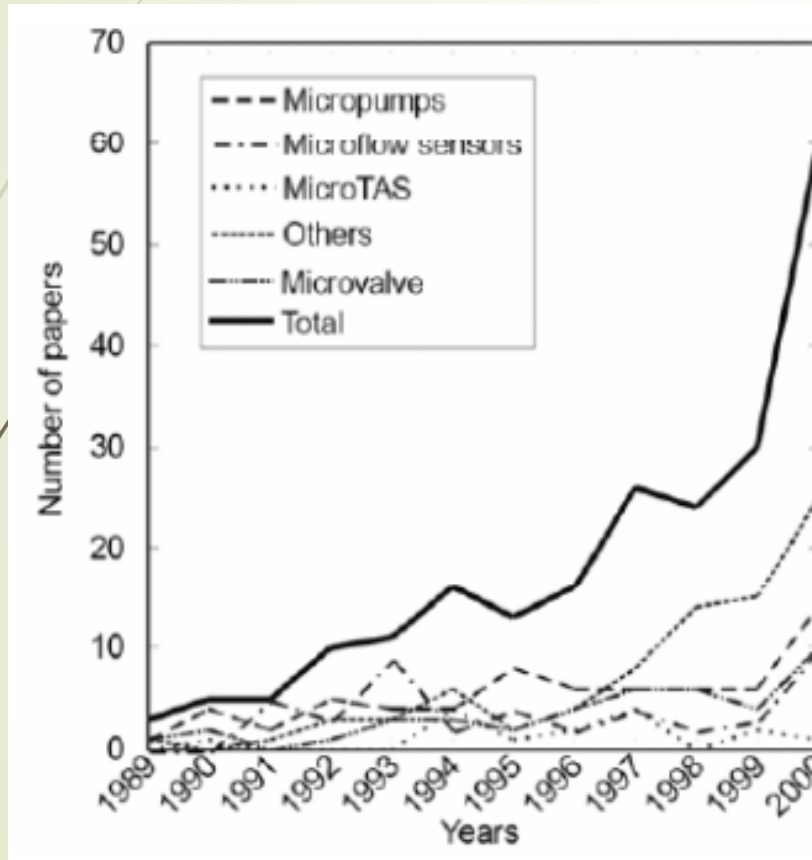
کاربردها:

هارد دیسک: مدل‌سازی با جریان روغنکاری.



فصل اول - مفاهیم مقدماتی

جایگاه اقتصادی و علمی: ▶



فصل اول - مفاهیم مقدماتی

- در میکروماشینها فرضیه محیط پیوسته دیگر صادق نیست (برای مایعات جریان دانه دانه و برای گازها جریان رقیق).
- در میکروسیستمها اندرکنش با دیواره کاملا متفاوت است. می توان با روش دینامیک مولکولی (MD) اندرکنشهای مولکولی را به صورت پتانسیل انرژی مدل سازی می شود.

ساده ترین پتانسیل، پتانسیل لnard-جونز (LJ) است:

$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{r}{\sigma}\right)^{-12} - \left(\frac{r}{\sigma}\right)^{-6} \right]$$

- که σ قطر فرضی مولکول و r فاصله دو مولکول است.
- با مشتق گیری نسبت به r نیروی بین دو ذره محاسبه می شود.

عدد آووگادرو: تعداد مولکولها در یک مول ماده: $6.02 \times 10^{23} / \text{mole}$

حجم اشغالی توسط یک مول گاز (مستقل از ترکیبش) در دما و فشار معین، ثابت است. در نتیجه رابطه گاز کامل برای گازهای رقیق: $p = nk_B T$

که n چگالی تعداد مولکولها و k_B ثابت بولتزمان ($k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$)

فصل اول - مفاهیم مقدماتی

در فشار اتمسفر و دمای 0°C ، چگالی تعداد مولکولها برابر است با: $n \approx 2.69 \times 10^{25} \frac{\text{تعداد}}{\text{m}^3}$

با فرض توزیع یکنواخت مولکولها، فاصله متوسط مولکولی (δ): $\delta \propto n^{-1/3}$ پس در فشار اتمسفر و دمای 0°C : $\delta \approx 3.3 \times 10^{-9} \text{m}$

قطر ملکولی متوسط (d) برای گازهای معمولی از مرتبه 10^{-10}m

$\delta/d \gg 1$ که گاز رقیق (dilute) می نامیم، برخوردهای بین مولکولی دو به دو است و از معادله انتقال بولتزمان (فصل ۱۵) استفاده می کنیم. برای مایعات و گازهای چگال (dense) برخوردهای بین مولکولی چندتایی بوده و پیچیده تر است. برخوردهای بین مولکولی باعث انتقال انرژی و ممنتوم و رسیدن به تعادل ترمودینامیکی می شود.

طول مسیر آزاد میانگین (فاصله ای که بطور متوسط بین دو برخورد طی می کند) برای یک گاز ساده با مولکول کروی سخت در تعادل

$$\lambda = (2^{1/2} \pi d^2 n)^{-1}$$

ترمودینامیکی:

مولکولهای گاز با سرعتی متناسب با سرعت صورت حرکت می کنند. سرعت مولکولی میانگین مربعی:

$$\bar{c} = \sqrt{\frac{3p}{\rho}} = \sqrt{3RT}$$

مقیاس زمانی برخوردهای بین مولکولی:

$$t_c = \frac{\lambda}{\bar{c}} \Rightarrow \text{برای هوا شرایط استاندارد } t_c \approx 10^{-10} \text{ s}$$

جریانهای میکرو و نانو- مدرس: محمد وهابی

atmospheric conditions (298 K and 1 atm)

Gas	Density [kg/m ³]	Dynamic Viscosity [kg/(m s)]	Thermal Con- ductivity [W/(m K)]	Thermal Diffusivity [m ² /s]	Specific Heat [J/(kg K)]	Mean Free Path [m]
Air	1.293	1.85E-5	0.0261	2.01E-5	1004.5	6.111E-8
N ₂	1.251	1.80E-5	0.0260	2.00E-5	1038.3	6.044E-8
CO ₂	1.965	1.50E-5	0.0166	1.00E-5	845.7	4.019E-8
O ₂	1.429	2.07E-5	0.0267	2.04E-5	916.9	6.503E-8
He	0.179	1.99E-5	0.150	1.60E-4	5233.5	17.651E-8
Ar	1.783	2.29E-5	0.0177	1.93E-5	515.0	6.441E-8

فصل اول - مفاهیم مقدماتی

در کاربردهای عادی اثرات مولکولی رویهم رفته در کمیات ماکروسکوپیک محیط پیوسته که به صورت متوسط حجمی (فضایی) هستند، تجمیع شده است. حجم معیار حداقل باید شامل ۱۰۰۰۰ مولکول باشد تا نوسانات خواص ماکروسکوپیک زیر ۱٪ باشد.

$$Kn = \frac{\lambda}{L} = \frac{\text{طول مسیر آزاد میانگین}}{\text{طول مشخصه}}$$

تقسیم بندی جریانهای میکرو و نانو، بر اساس **عدد بدون بعد نادسن** است:

رژیم جریان طبق تقسیم بندی کتاب:

محیط پیوسته: $Kn \leq 0.01$

جریان لغزشی: $0.01 \leq Kn \leq 0.1$

جریان گذار (transition): $0.1 \leq Kn \leq 10$

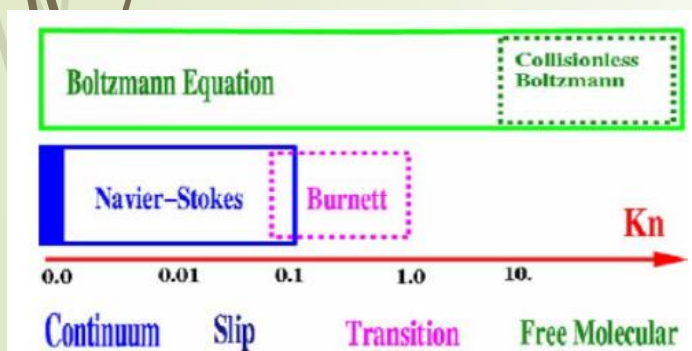
جریان آزاد مولکولی: $10 \leq Kn$

در دو رژیم جریان اول می توان از معادلات ناویر-استوکس استفاده کرد (برای جریان لغزشی با در نظر گرفتن لغزش روی دیواره ها).

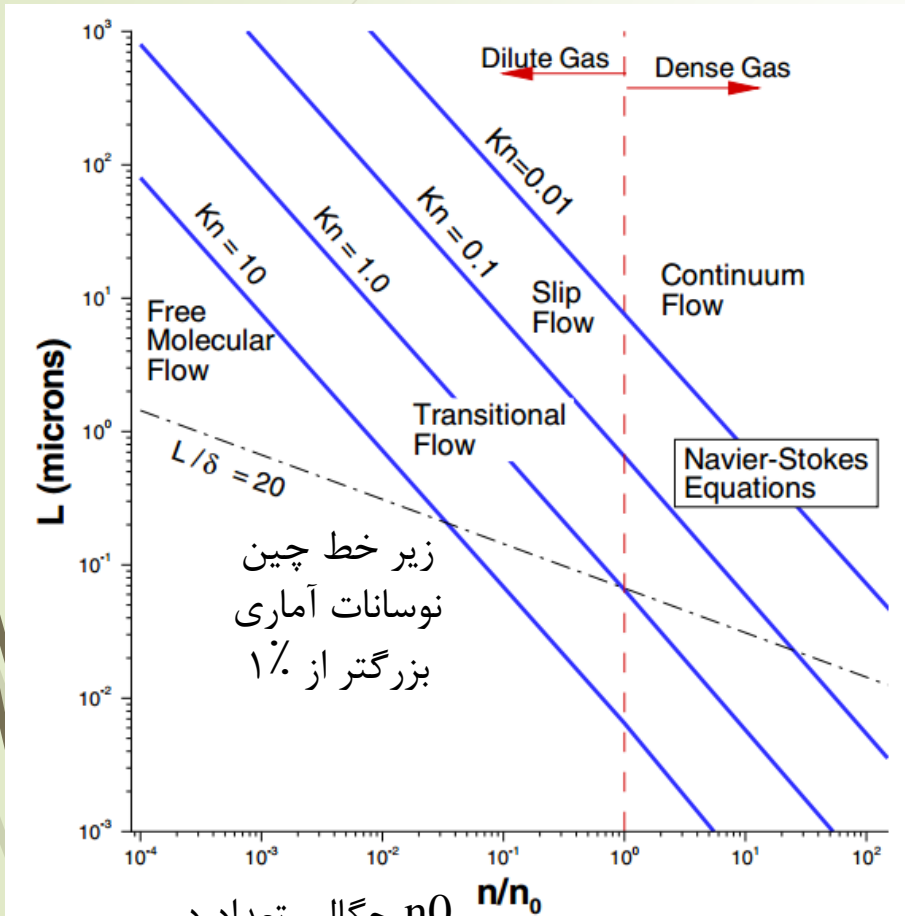
می توان نشان داد:

$$Kn = \sqrt{\frac{\gamma \pi}{2}} \frac{M}{Re}$$

جریانهای میکرو و نانو - مدرس: محمد وهابی

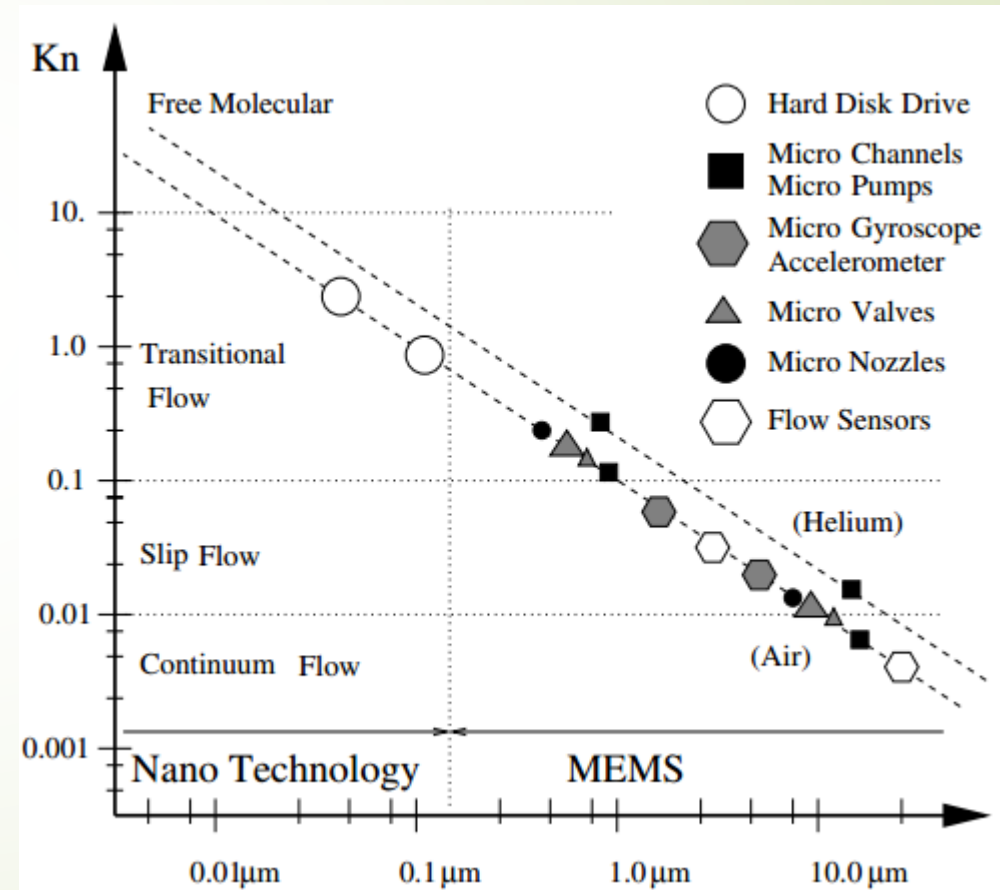


فصل اول - مفاهیم مقدماتی

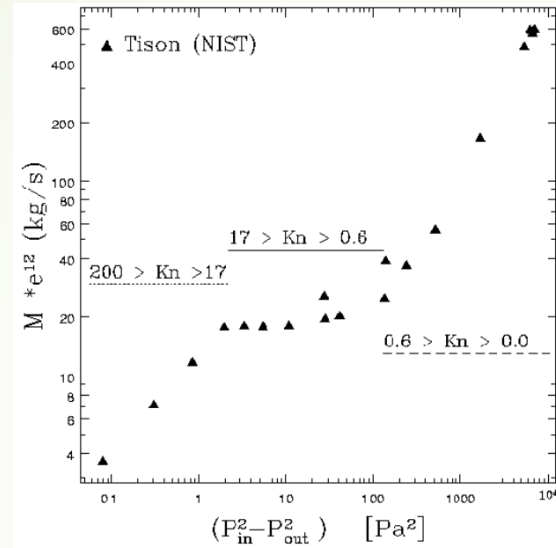
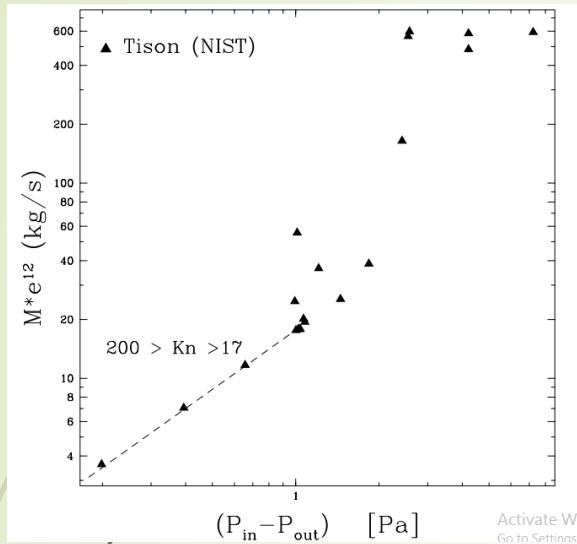


زیر خط چین
 نوسانات آماری
 بزرگتر از ۱٪

n_0 چگالی تعداد در
 شرایط اتمسفریک



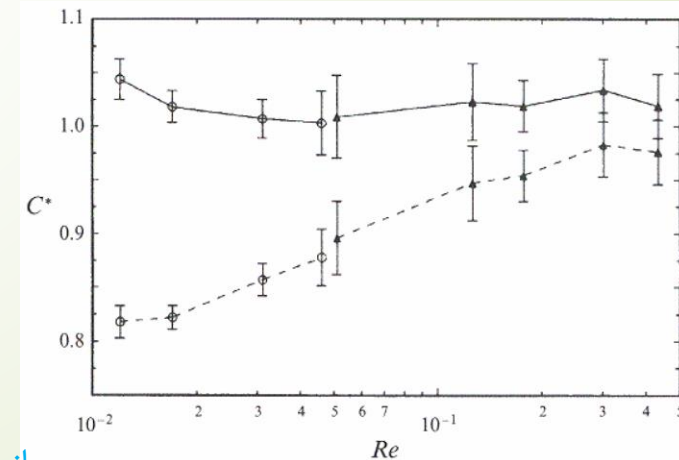
فصل اول - مفاهیم مقدماتی



چند مشاهده تجربی:

آزمایش Tison در لوله به قطر 2mm و طول 200mm:

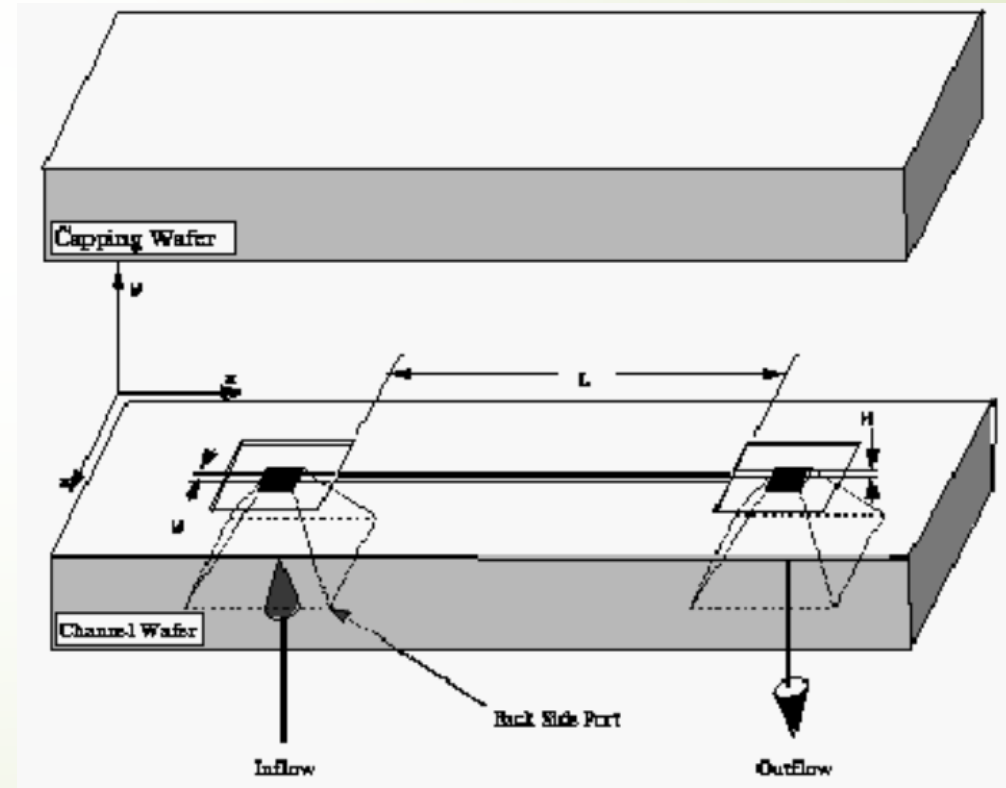
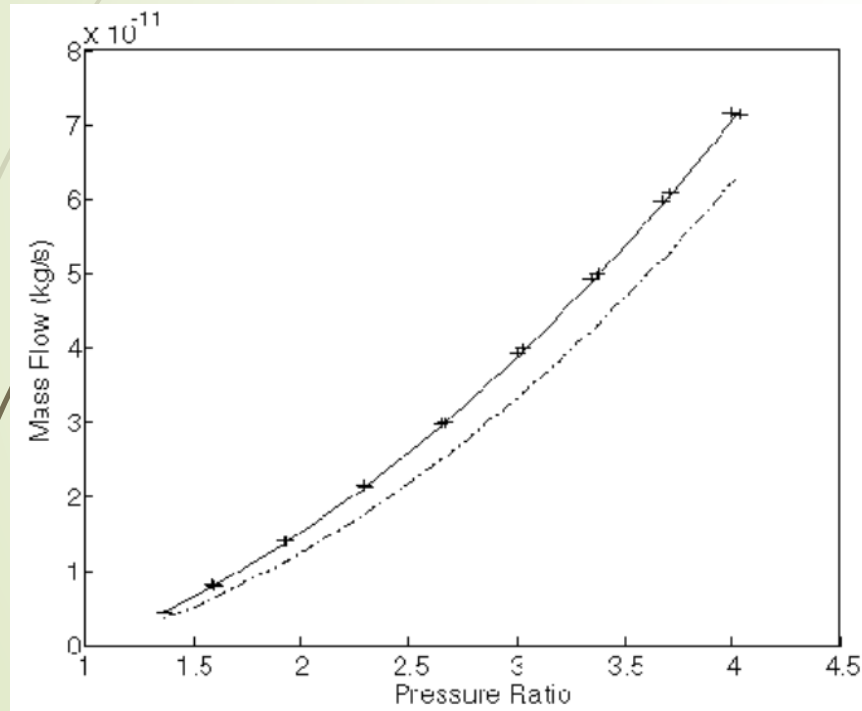
آزمایش Pfahler: نسبت عدد پوازی آزمایشگاهی به تئوری با فرض لغزش به ۱ نزدیکتر است.



جریانهای میکرو و نانو- مدرس: محمد وهابی

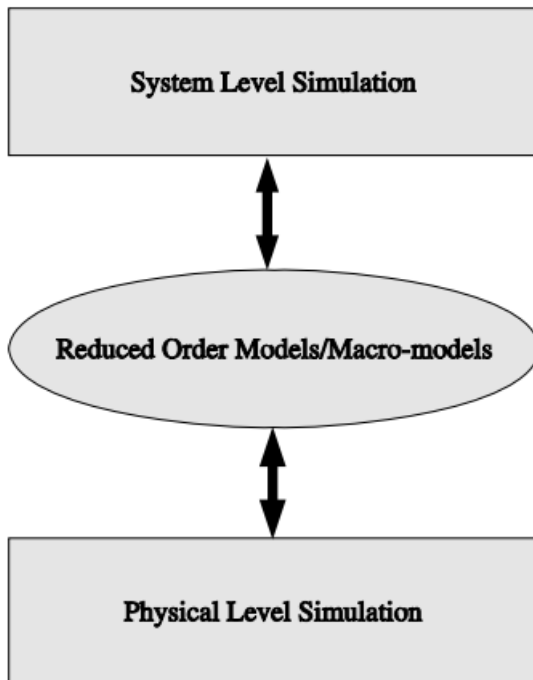
فصل اول - مفاهیم مقدماتی

► آزمایش Breuer و Arkilic: اندازه گیری دبی آرگون عبوری از میکروکانال به طول 7.5mm ، ارتفاع $1.33\mu\text{m}$ و عرض $52.25\mu\text{m}$. اندازه گیری دبی جرمی با شرط لغزشی بسیار به نتایج آزمایشگاهی نزدیکتر است.



فصل اول - مفاهیم مقدماتی

- ▶ برای مدل‌سازی جریان میکرو گازی چهار عامل موثر را باید در نظر داشت: رقیق شدن (rarefaction)، تراکم پذیری، گرمایش ناشی از ویسکوزیته و خزش حرارتی.
- ▶ برای مدل‌سازی جریان میکرو مایعات علاوه بر اثر لغزش، باید اثرات ترکنندگی، جذب سطحی و الکتروکینتیکی را هم مد نظر داشت.
- ▶ مطالعه جریانهای نانو به دلایل متعدد با جریانهای ماکرو و میکرو متفاوت است:
 - ▶ خیلی بزرگ بودن نسبت سطح به حجم.
 - ▶ برابری بعد هندسی بحرانی با ابعاد مولکول سیال مورد بررسی.
 - ▶ اهمیت نوسانات چگالی در فواصل بین اتمی.
 - ▶ چگونگی تعریف خواص انتقال نظیر ضریب پخش و ویسکوزیته.
 - ▶ اندرکنش مولکولهای سیال با مولکولهای دیواره جامد.
 - ▶ عدم درک و ابهام در شرایط مرزی.
 - ▶ رفتارهای غیرعادی و بعضاً متناقض در جریانهای نانو.
- ▶ برای مطالعه سیستمها میکرو می توان از سطح فیزیکی (دقیق ولی بسیار پیچیده) یا سطح سیستمی استفاده کرد.



فصل اول - مفاهیم مقدماتی

مثال ۱) جریان هوا از درون یک میکرو لوله به قطر $D=2\mu\text{m}$ با دمای 50°C و فشار 150kpa عبور می کند، رژیم جریان را تعیین کنید. قطر مولکولهای هوا را همان قطر مولکولها در شرایط استاندارد در نظر بگیرید.

حل) ابتدا با کمک معادله حالت گاز ایده آل، چگالی تعداد مولکولهای هوا را محاسبه می کنیم:

$$p = nk_B T \Rightarrow n = \frac{150 \times 10^3 \text{ pa}}{1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K} \times (273.15 + 50) \text{ K}} = 3.36 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}$$

سپس طول مسیر آزاد میانگین برای هوا در این شرایط محاسبه می گردد:

$$\left. \begin{array}{l} \lambda = (2^{1/2} \pi d^2 n)^{-1} \\ d = 3.7 \times 10^{-10} \text{ m} \end{array} \right\} \Rightarrow \lambda = \frac{1}{\sqrt{2} \times \pi \times 13.69 \times 10^{-20} \times 3.36 \times 10^{25}} = 4.89 \times 10^{-8} \text{ m}$$

و در نهایت عدد نادسن:

$$\text{Kn} = \frac{\lambda}{L} = \frac{4.89 \times 10^{-8}}{2 \times 10^{-6}} = 0.02445$$

پس رژیم جریان لغزشی است.

فصل دوم- معادلات حاکم و مدل‌های لغزشی

➤ معادلات پایه مکانیک سیالات: می‌دانیم معادلات حاکم بر جریان سیالات با در نظر گرفتن یک حجم کنترل دیفرانسیلی به شکل مکعب مستطیل بر اساس قوانین اساسی فیزیکی به صورت نوشته می‌شوند:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V}) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{V}) + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V} \vec{V}) = \vec{\nabla} \cdot \vec{\sigma} + \vec{f} \Rightarrow \text{با نظر در گرفتن پیوستگی} \Rightarrow \rho \frac{D\vec{V}}{Dt} = -\vec{\nabla} p + \vec{\nabla} \cdot \vec{\tau} + \vec{f}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} E + \vec{\nabla} \cdot (E \vec{V}) = \vec{\nabla} \cdot (\vec{\sigma} \cdot \vec{V}) - \vec{\nabla} \cdot \vec{q} + \vec{f} \cdot \vec{V} \Rightarrow \text{با نظر در گرفتن پیوستگی} \Rightarrow \rho \frac{Du}{Dt} = -p \vec{\nabla} \cdot \vec{V} - \vec{\nabla} \cdot \vec{q} + \Phi$$

کل نیروهای حجمی
به ازای واحد حجم

که E مجموع انرژی داخلی و انرژی جنبشی به ازای واحد حجم است و D/Dt عملگر مشتق مادی است:

$$E = \rho \left(u + \frac{1}{2} \vec{V} \cdot \vec{V} \right) \Rightarrow \text{برای گاز ایده آل} \Rightarrow E = \rho \left(C_v T + \frac{1}{2} \vec{V} \cdot \vec{V} \right) \quad \text{مشتق مادی: } \frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{V} \cdot \vec{\nabla}$$

معادلات بالا همراه با معادلات بردار شار حرارتی، تانسور تنش و معادله حالت گاز ایده آل حل می‌شوند:

$$\vec{q} = -k \nabla T, \vec{\sigma} = -p \vec{I} + \vec{\tau}, p = \rho R T$$

$$\vec{\tau} = \mu \left(\vec{\nabla} \vec{V} + (\vec{\nabla} \vec{V})^T \right) + \zeta (\vec{\nabla} \cdot \vec{V}) \vec{I}$$

تانسور تنش انحرافی (تنش ویسکوز یا اضافی) برای سیال نیوتنی:

$$\Phi = \vec{\tau} \cdot \vec{\nabla} \vec{V} \quad \text{و اتلاف ویسکوز (dissipation function) است:}$$

➤ معادلات بالا برای محیط پیوسته و جریان رقیق (rarefied flows) معتبر هستند.

فصل دوم- معادلات حاکم و مدل‌های لغزشی

➤ **معادلات اولر:** اگر سیال غیرویسکوز باشد به معادلات اولر ساده می‌شوند که با صرفنظر از نیروهای حجمی و منبع حرارتی به شکل زیر نوشته می‌شوند:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V}) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{V}) + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V} \vec{V}) = -\vec{\nabla} p$$

$$\frac{\partial}{\partial t} E + \vec{\nabla} \cdot (E \vec{V}) = -\vec{\nabla} \cdot (p \vec{V})$$

➤ اگر سیال تراکم ناپذیر باشد معادلات برای سیال نیوتنی به شکل زیر نوشته می‌شوند:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{V} = 0$$

$$\rho \frac{D\vec{V}}{Dt} = -\vec{\nabla} p + \vec{\nabla} \cdot [\mu (\vec{\nabla} \vec{V} + (\vec{\nabla} \vec{V})^T)] + \vec{f}$$

➤ برای سیال تراکم ناپذیر با تعریف ورتیسیتته، می‌توان معادله بقای ممنتم را به شکل مقابل نوشت:

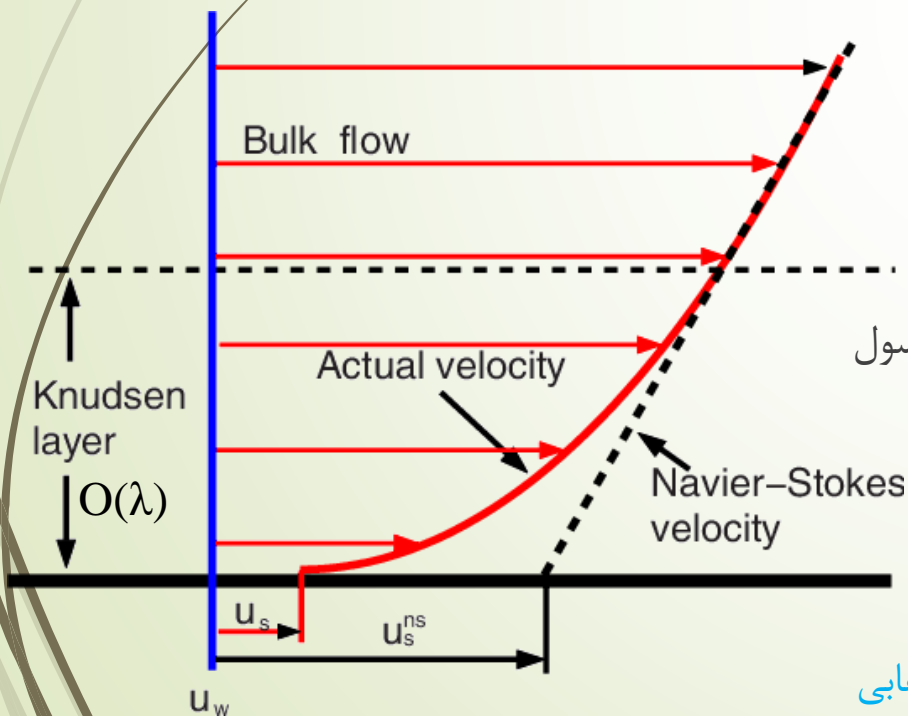
$$\vec{\omega} = \vec{\nabla} \times \vec{V} \quad \rightarrow \quad \rho \frac{D\vec{\omega}}{Dt} = (\vec{\omega} \cdot \vec{\nabla}) \vec{V} + \mu \nabla^2 \vec{\omega}$$

➤ برای جریان تراکم ناپذیر برای رینولدزهای بسیار کوچک (جریان خزشی) از معادلات استوکس غیردائمی می‌توان استفاده کرد:

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} = -\frac{\vec{\nabla} p}{\rho} + \nu \nabla^2 \vec{V} + \vec{f}$$

فصل دوم- معادلات حاکم و مدل‌های لغزشی

- گفته شد برای $\text{Kn} < 0.01$ رژیم پیوسته داریم و از معادلات ناویر-استوکس با شرایط مرزی عدم لغزش می‌توان استفاده کرد.
- برای رژیم لغزشی ($0.01 \leq \text{Kn} \leq 0.1$) شرط عدم لغزش دیگر برقرار نمی‌باشد و در زیرلایه ای از مرتبه بزرگی طول مسیر آزاد میانگین ما بین دیواره و جریان کلی سیال غالب است که به آن لایه ناسن می‌گویند.
- جریان داخل لایه ناسن از معادلات ناویر-استوکس پیروی نمی‌کند و برای این ناحیه حل خاصی از معادلات بولتزمان صادق است.



- برای $\text{Kn} \leq 0.1$ لایه ناسن کمتر از 10% از عرض کانال را در بر می‌گیرد. بنابراین می‌توان از آن صرف‌نظر کرد و پروفیل سرعت در جریان کلی را به آن ناحیه هم تعمیم داد که منجر به یک سرعت لغزشی محدود روی دیواره می‌شود.

- در رژیم لغزشی جریان با معادلات ناویر-استوکس با شرایط مرزی سرعت لغزشی ماکسول و پرش دمایی اسملوکوفسکی مدل می‌شود.

فصل دوم- معادلات حاکم و مدل‌های لغزشی

► برای $0.1 \leq Kn$ (رژیم گذار) معادلات متشکله که طبق آنها تانسور تنش و بردار شار حرارتی تعریف شده بود دیگر صادق نیستند.

► بکارگرفتن تصحیحات مرتبه بالاتر برای معادلات متشکله به معادلات برنت (Burnett) یا وودز (Woods) منجر می شود.

► معادلات برنت یا وودز را می توان از معادلات بولتزمان (Boltzmann) بر اساس بسط چپمن-انسکوگ (Chapman-Enskog) تابع توزیع سرعت (f) با در نظر گرفتن ترمهای تا مرتبه دوم عدد نادسن بدست آورد.

$$f = f_0(1 + aKn + bKn^2)$$

در رابطه بالا a و b تابعی از چگالی گاز، دما و بردار سرعت ماکروسکوپیک هستند. ضمناً f_0 تابع توزیع تعادل (ماکسولی) می باشد که خود بر اساس جرم مولکول (m) و سرعت مولکولی متوسط (v) نوشته می شود:

$$f_0 = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \times e^{(-mv^2/2k_B T)}$$

► حل مرتبه صفرم بسط بالا یعنی همان حل تعادل به دلیل اینکه گرادیانهای جریان و در نتیجه تنش و شار حرارتی ندارد، معادلات اولر را بدست می دهد.

► از حل مرتبه اول بسط بالا به معادلات ناویر-استوکس و از حل مرتبه دوم آن به معادلات برنت می توان رسید.

فصل دوم- معادلات حاکم و مدل‌های لغزشی

مدلهای مرتبه اول: منظور تقریب معادله بولتزمان تا $O(\mathbf{Kn})$ است یعنی همان معادلات ناویر-استوکس تراکم پذیر. برای جریان دوبعدی-دوجهته با مولفه های سرعت (u_1, u_2) و سیستم مختصات (x_1, x_2) بدون نیروی خارجی (همان معادلات ابتدای فصل):

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ E \end{pmatrix} + \frac{\partial}{\partial x_1} \begin{pmatrix} \rho u_1 \\ \rho u_1^2 + p - \tau_{11} \\ \rho u_1 u_2 - \tau_{12} \\ (E + p - \tau_{11}) \cdot u_1 - \tau_{12} \cdot u_2 + q_1 \end{pmatrix} + \frac{\partial}{\partial x_2} \begin{pmatrix} \rho u_2 \\ \rho u_1 u_2 - \tau_{21} \\ \rho u_2^2 + p - \tau_{22} \\ (E + p - \tau_{22}) \cdot u_2 - \tau_{21} \cdot u_1 + q_2 \end{pmatrix} = 0$$

ترم تنشهای حرارتی $\delta_{ij} \frac{\partial^2 T}{\partial x_i \partial x_j} - \frac{1}{3} \frac{\partial^2 T}{\partial x_k^2}$ در بقای ممنتوم و ترم $\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2}$ که در قانون فوریه وجود ندارد- در معادله انرژی نیامده اند. لازم به ذکر است برای رینولدزهای بزرگ یا تغییرات دمایی زیاد این ترمها باید در مدلسازی جریانهای رقیق لحاظ شوند.

ضریب تطبیق
ممنتوم مماسی

مرتبط با خزش

حرارتی

در رژیم لغزشی معادلات بالا باید با شرایط مرزی زیر یعنی سرعت لغزشی (ماکسول) و پرش دمایی (اسملوکفسکی) حل شوند:

$$\left. \begin{aligned} u_s - u_{Wall} &= \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \frac{1}{\rho(2R T_{Wall}/\pi)^{0.5}} \tau_s + \frac{3 Pr(\gamma - 1)}{4 \gamma \rho R T_{Wall}} (-q_s) \\ T_s - T_{Wall} &= \frac{2 - \sigma_T}{\sigma_T} \frac{2(\gamma - 1)}{(\gamma + 1)} \frac{1}{R \rho(2R T_{Wall}/\pi)^{0.5}} (-q_n) \end{aligned} \right\} \text{بی بعد سازی} \rightarrow \begin{cases} U_s - U_{Wall} = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \mathbf{Kn} \frac{\partial U_s}{\partial n} + \frac{3}{2\pi} \frac{(\gamma - 1) \mathbf{Kn}^2 \mathbf{Re}}{\gamma} \frac{\mathbf{Ec}}{\mathbf{Ec}} \frac{\partial T}{\partial s} \\ T_s - T_{Wall} = \frac{2 - \sigma_T}{\sigma_T} \frac{2\gamma}{(\gamma + 1)} \frac{\mathbf{Kn}}{\mathbf{Pr}} \frac{\partial T}{\partial n} \end{cases}$$

عدد Eckert

$$\mathbf{Ec} = \frac{V^2}{C_p \Delta T} = (\gamma - 1) \frac{T_0}{\Delta T} \mathbf{M}^2 = (\gamma - 1) \frac{T_0}{\Delta T} \left(\sqrt{\frac{2}{\pi \gamma}} \mathbf{Kn Re} \right)^2$$

ضریب تطبیق انرژی

فصل دوم- معادلات حاکم و مدل‌های لغزشی

انتقال ممنتم و انرژی بین گاز و سطح به مشخصات اندرکنشهای بین مولکولهای گاز برخورد کننده و سطح بستگی دارد. بجای تحلیل دقیق پیچیده، از پارامترهای میانگین گیری شده استفاده می کنیم.

ضرایب تطبیق که به دمای گاز و سطح، فشار موضعی، سرعت و جهت میانگین جریان محلی بستگی دارند.

ضریب تطبیق انرژی:

$$\sigma_T = \frac{dE_i - dE_r}{dE_i - dE_w}$$

dE_i و dE_r به ترتیب نرخ زمانی شار انرژی مولکول ورودی و بازتابیده هستند.

dE_w شار انرژی که اگر تمامی مولکولها با شار انرژی متناسب با دمای دیواره بازتابیده می شدند، می باشد.

برای تبادل انرژی کامل: $\sigma_T = 1$

Gas	Surface	σ_T	σ_v
Air	Al	0.87–0.97	0.87–0.97
He	Al	0.073	
Air	Iron	0.87–0.96	0.87–0.93
H ₂	Iron	0.31–0.55	
Air	Bronze		0.88–0.95

فصل دوم- معادلات حاکم و مدل‌های لغزشی

$$\sigma_v = \frac{\tau_i - \tau_r}{\tau_i - \tau_w} \quad \text{ضریب تطبیق ممّنتم مماسی:}$$

➤ τ_i و τ_r به ترتیب ممّنتم مماسی مولکول ورودی و بازتابیده هستند.

➤ و τ_w ممّنتم مماسی مولکول بازتابیده متناسب با ممّنتم دیواره می باشد (برای سطوح ساکن $\tau_w=0$ است).

$$\sigma_v = 0 \quad \text{بازتاب آینه ای (specular):}$$

سرعت مماسی مولکول بازتابیده از دیوار بدون تغییر می ماند در حالیکه مولفه عمودی سرعتش عکس می شود. تبادل ممّنتم مماسی

نداریم پس اصطکاک پوسته ای صفر است که منطبق با جریان غیرلزج و معادلات اولر است. $\frac{\partial V_s}{\partial n} \rightarrow 0$

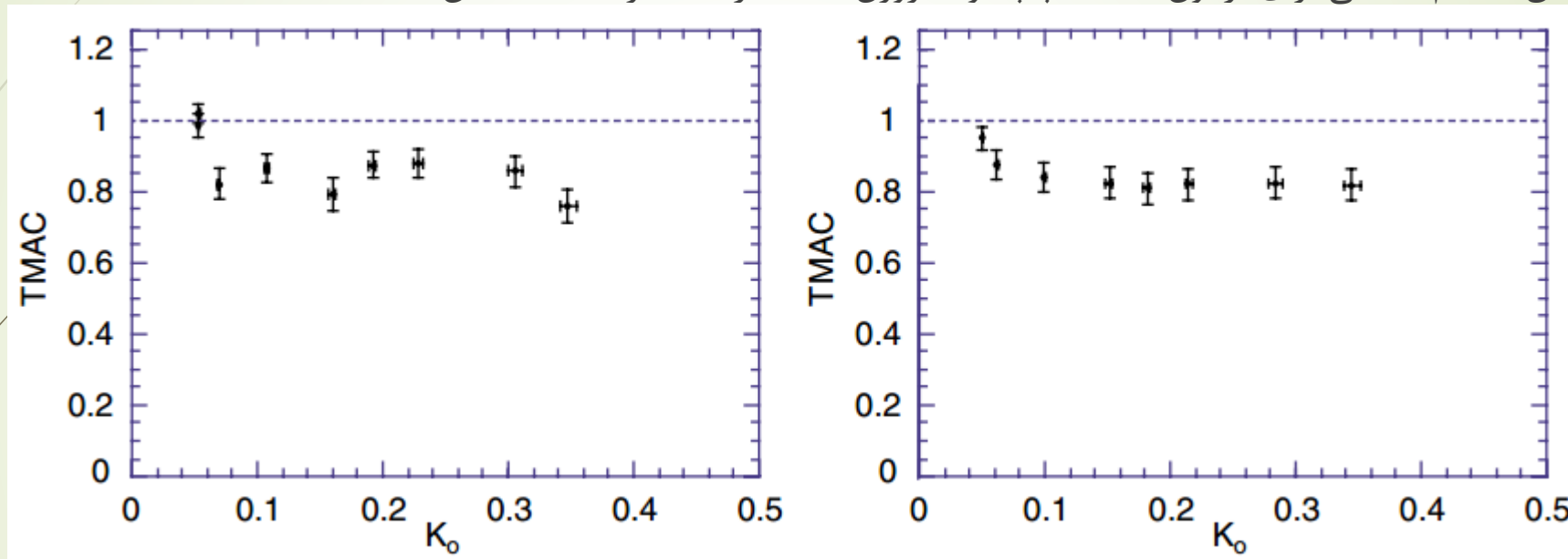
$$\sigma_v = 1 \quad \text{بازتاب دیفیوز (پراکنده):}$$

➤ مولکولها با سرعت مماسی متوسط صفر از دیواره ها بازتابیده می شوند.

➤ مقادیر بسیار اندک ضریب تطبیق ممّنتم مماسی - حتی برای اعداد نادسن کوچک- سبب افزایش لغزش می شود.

فصل دوم- معادلات حاکم و مدل‌های لغزشی

ضریب تطبیق ممنتم مماسی برای آرگون (سمت چپ) و نیتروژن (سمت راست) بر حسب نادسن.



زبری سطوح در مقیاس میکرو بسیار مهم هستند. بررسی تحلیلی یا عددی اثرات آن بسیار پیچیده است. نتایج مدل‌سازی MD:

برای جریان داخل میکروکانال با دیواره‌های از لحاظ اتمی صاف، اگر عدد نادسن کلی (λ/h) کمتر از 0.01 باشد، شرط عدم لغزش صحیح است.

برای جریان داخل میکروکانال با دیواره‌های از لحاظ اتمی زبر با ارتفاع A ، اگر عدد نادسن محلی (λ/A) از مرتبه 1 باشد، شرط عدم لغزش صحیح است.

در غیر دو حالت بالا، برای دیوار صاف یا زبر، لغزش سرعت روی دیوار داریم.

فصل دوم- معادلات حاکم و مدل‌های لغزشی

مدلهای مرتبه بالا: معادلات حاکم همچنان معتبر هستند ولی روابط تانسور تنش (و بردار شار حرارتی) برای لحاظ کردن اثرات رقت مرتبه بالا باید تصحیح شوند.

تانسور تنش در سطح معادلات برنت:

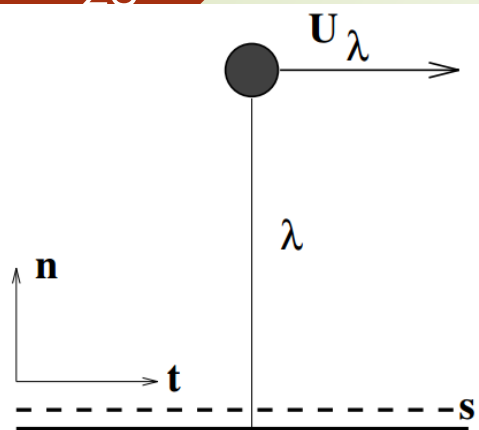
$$\tau_{ij}^B = 2\mu \frac{\overline{\partial u_i}}{\partial x_j} - \frac{\mu^2}{p} \left[\omega_1 \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \frac{\overline{\partial u_i}}{\partial x_j} + \omega_2 \left(\frac{D}{Dt} \frac{\overline{\partial u_i}}{\partial x_j} - 2 \frac{\overline{\partial u_i}}{\partial x_k} \frac{\overline{\partial u_k}}{\partial x_j} \right) + \omega_3 R \frac{\overline{\partial^2 T}}{\partial x_i \partial x_j} + \omega_4 \frac{1}{\rho T} \frac{\overline{\partial p}}{\partial x_i} \frac{\overline{\partial T}}{\partial x_j} + \omega_5 \frac{R}{T} \frac{\overline{\partial T}}{\partial x_i} \frac{\overline{\partial T}}{\partial x_j} + \omega_6 \frac{\overline{\partial u_i}}{\partial x_j} \frac{\overline{\partial u_k}}{\partial x_j} \right]$$

که منظور از علامت خط بالای تنسور:

$$\overline{f_{ij}} = \frac{f_{ij} + f_{ji}}{2} - \frac{\delta_{ij} f_{mm}}{3}$$

معادلات برنت با بسط چپمن-انسکوگ تا مرتبه دوم نسبت به نادسن بدست آمده، پس نیاز به شرط لغزشی مرتبه دوم دارد.

فصل دوم- معادلات حاکم و مدل‌های لغزشی



بدست آوردن مدل‌های لغزش مرتبه بالا: (با فرض شرایط دما ثابت یعنی صرفنظر از خزش حرارتی)

سرعت در سطح S که در نزدیکی دیواره در نظر گرفته شده همان سرعت لغزشی است.

با در نظر گرفتن شار ممتمهای مماسی می توان نشان داد: $u_s = \frac{1}{2}(u_\lambda + (1 - \sigma_v)u_\lambda + \sigma_v u_{wall})$

اندیس λ برای کمیات در سطح با فاصله λ از دیواره به کار رفته است (یعنی یک طول مسیر آزاد میانگین از دیواره فاصله دارد).

با بسط تیلور u_λ حول u_s :

$$u_s = \frac{1}{2} \left(u_s + \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial n} \right)_s + \frac{\lambda^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial n^2} \right)_s + \dots \right) + \frac{1}{2} \left((1 - \sigma_v) \left(u_s + \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial n} \right)_s + \frac{\lambda^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial n^2} \right)_s + \dots \right) + \sigma_v u_{wall} \right)$$

ساده سازی:

$$u_s - u_{wall} = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \left(\lambda \left(\frac{\partial u}{\partial n} \right)_s + \frac{\lambda^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial n^2} \right)_s + \dots \right)$$

بی بعد سازی با طول مرجع و سرعت معیار:

$$U = \frac{u}{U_0}, n^* = \frac{n}{L} \Rightarrow U_s - U_{wall} = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \left(\mathbf{Kn} \left(\frac{\partial U}{\partial n^*} \right)_s + \frac{\mathbf{Kn}^2}{2} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial n^{*2}} \right)_s + \dots \right)$$

فصل دوم- معادلات حاکم و مدل‌های لغزشی

اگر سرعت بدست آمده از حل معادلات ناویر-استوکس با شرط عدم لغزش U_0 باشد، می توان میدان سرعت اصلاح شده بخاطر لغزش را بصورت بسط حول همین جواب بر حسب عدد نادسن در نظر گرفت:

$$U = U_0 + \mathbf{Kn}U_1 + \mathbf{Kn}^2U_2 + \mathbf{Kn}^3U_3 + O(\mathbf{Kn}^4)$$

می توان با کمک بسط بالا معادلات ناویر-استوکس را با شرایط مرزی با نادسنهای یکسان، مرتبه به مرتبه حل کرد.

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(1) : \quad & \frac{\partial \mathbf{U}_0}{\partial t} + (\mathbf{U}_0 \cdot \nabla) \mathbf{U}_0 = -\nabla P_0 + \text{Re}^{-1} \nabla^2 \mathbf{U}_0; \\ \mathcal{O}(\mathbf{Kn}) : \quad & \frac{\partial \mathbf{U}_1}{\partial t} + (\mathbf{U}_1 \cdot \nabla) \mathbf{U}_0 + (\mathbf{U}_0 \cdot \nabla) \mathbf{U}_1 = -\nabla P_1 + \text{Re}^{-1} \nabla^2 \mathbf{U}_1; \\ \mathcal{O}(\mathbf{Kn}^2) : \quad & \frac{\partial \mathbf{U}_2}{\partial t} + (\mathbf{U}_0 \cdot \nabla) \mathbf{U}_2 + (\mathbf{U}_2 \cdot \nabla) \mathbf{U}_0 + (\mathbf{U}_1 \cdot \nabla) \mathbf{U}_1 \\ & = -\nabla P_2 + \text{Re}^{-1} \nabla^2 \mathbf{U}_2; \\ \mathcal{O}(\mathbf{Kn}^3) : \quad & \frac{\partial \mathbf{U}_3}{\partial t} + (\mathbf{U}_0 \cdot \nabla) \mathbf{U}_3 + (\mathbf{U}_3 \cdot \nabla) \mathbf{U}_0 + (\mathbf{U}_2 \cdot \nabla) \mathbf{U}_1 \\ & + (\mathbf{U}_1 \cdot \nabla) \mathbf{U}_2 = -\nabla P_3 + \text{Re}^{-1} \nabla^2 \mathbf{U}_3. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(1) : \quad & U_0|_s = U_w, \\ \mathcal{O}(\mathbf{Kn}) : \quad & U_1|_s = \frac{2-\sigma}{\sigma} (U_0')|_s, \\ \mathcal{O}(\mathbf{Kn}^2) : \quad & U_2|_s = \frac{2-\sigma}{\sigma} \left(\frac{1}{2} U_0'' + U_1' \right)|_s, \\ \mathcal{O}(\mathbf{Kn}^3) : \quad & U_3|_s = \frac{2-\sigma}{\sigma} \left(U_2' + \frac{1}{2} U_1'' + \frac{1}{6} U_0''' \right)|_s, \end{aligned}$$

روش جایگزین: معرفی شرط مرزی لغزشی جدید:

$$U_s - U_{wall} = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \frac{\mathbf{Kn}}{1 - B(\mathbf{Kn})\mathbf{Kn}} \left(\frac{\partial U}{\partial n} \right)_s$$

فصل دوم- معادلات حاکم و مدل‌های لغزشی

با نوشتن پارامتر $B(\text{Kn})$ بصورت بسط تیلور حول $\text{Kn}=0$:

$$B(\text{Kn}) = B|_0 + \left. \frac{dB}{d\text{Kn}} \right|_0 \text{Kn} + \dots = b + \text{Kn} c + \dots$$

و در نظر گرفتن بسط تیلور میدان سرعت و مقایسه با شرایط مرزی:

$$\mathcal{O}(1) : U_0|_s = U_w;$$

$$\mathcal{O}(\text{Kn}) : U_1|_s = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} (U'_0)|_s;$$

$$\mathcal{O}(\text{Kn}^2) : U_2|_s = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} (bU'_0 + U'_1)|_s;$$

$$\mathcal{O}(\text{Kn}^3) : U_3|_s = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} (U'_2 + bU'_1 + (b^2 + c)U'_0)|_s$$



$$b = \left(\frac{1}{2} \frac{U''_0}{U'_0} \right)_s = \frac{1}{2} \left[\frac{\left(\frac{\partial \omega}{\partial n} \right)_0}{\omega_0} \right]_s$$

$$c = \frac{1}{U'_0} \left(\frac{1}{2} U''_1 + \frac{1}{6} U'''_0 - b^2 - bU'_1 \right)$$

در نهایت (معادله 2-43):

$$U_s - U_w = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \frac{\text{Kn}}{1 - B \text{Kn}} \frac{\partial U}{\partial n} = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \frac{\text{Kn}}{1 - b \text{Kn}} \frac{\partial U}{\partial n} + \mathcal{O}(\text{Kn}^3)$$

فصل دوم- معادلات حاکم و مدل‌های لغزشی

مقایسه مدل‌های لغزشی:

برای جریان هم‌دما با ضریب تطبیق ممنتم مماسی 1، شرط مرزی لغزشی مرتبه دوم کلی:

$$U_s - U_{wall} = C_1 \mathbf{Kn} \left(\frac{\partial U}{\partial n} \right)_s - C_2 \mathbf{Kn}^2 \left(\frac{\partial^2 U}{\partial n^2} \right)_s$$

ضرایب لغزش طبق جدول.

Author	C_1	C_2
Cercignani (Cercignani and Daneri, 1963)	1.1466	0.9756
Cercignani (Hadjiconstantinou, 2003a)	1.1466	0.647
Deissler (Deissler, 1964)	1.0	9/8
Schamberg (Schamberg, 1947)	1.0	5π/12
Hsia and Domoto (Hsia and Domoto, 1983)	1.0	0.5
Maxwell (Kennard, 1938)	1.0	0.0
Equation (2.29)	1.0	-0.5

شرط لغزشی مرتبه اول
حداکثر تا $\mathbf{Kn} \approx 0.15$
معتبر است.

فصل دوم- معادلات حاکم و مدل‌های لغزشی

مقایسه مدل‌های لغزشی:

- نکته ۱: از شرط مرزی لغزشی مرتبه اول (مدل ماکسول) فقط برای $Kn \leq 0.1$ کاربرد دارد.
- نکته ۲: در فصل چهارم برای جریان پوازی خواهیم دید که تمامی مدل‌ها غیر از مدل معادله 2-29 دبی حجمی را بزرگتر از مقدار واقعی تخمین می‌زنند. برای تخمین درست همزمان پروفیل سرعت و دبی باید ضریب تصحیح بخاطر رقیق شدن در نظر گرفت. خواهیم دید شرط مرزی لغزشی تنظیم شده (معادله 2-43) با پارامتر تصحیح رقت، پروفیل سرعت، دبی و توزیع فشار صحیح را در تمام رژیم‌های نادسن در جریانهای با نیروی محرکه فشاری بدست می‌دهد.
- نکته ۳: با توجه به اینکه در جریان کوئت صفحه ای دائمی پروفیل سرعت خطی است مشتق دوم سرعت نسبت به جهت عمود بر دیواره صفر می‌شود و اثرات مرتبه بالاتر لغزش می‌شود. در فصل سوم مدل لغزشی کلی (معادله 2-43) که تا $Kn \leq 12$ معتبر می‌باشد، معرفی می‌گردد.

فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

Shear-Driven Flows = جریان ناشی از برش = جریان با نیروی محرکه برشی = جریان ناشی از حرکت دیواره ها.

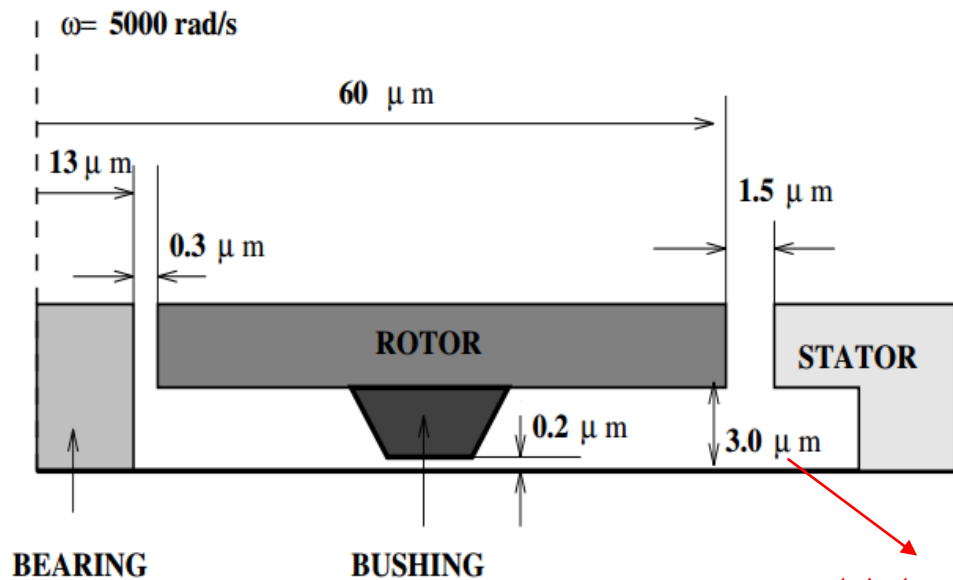
هدف (میکروجریانهای برشی یعنی بررسی جریان در میکروسیستمهایی نظیر):

جریان ما بین روتور و صفحه پایه یک میکروموتور.

جریان ما بین بازوهای ثابت و متحرک مکانیزم شانه ای.

جریان در میکرو حفره (با درپوش متحرک).

جریان در میکروکانال تراشیده.



با طول مشخصه $3\mu\text{m}$ و فرض شرایط اتمسفر عادی، $Kn=0.022$ می باشد.

تمرکز بر جریان کوئت خطی به عنوان جریان نمونه.

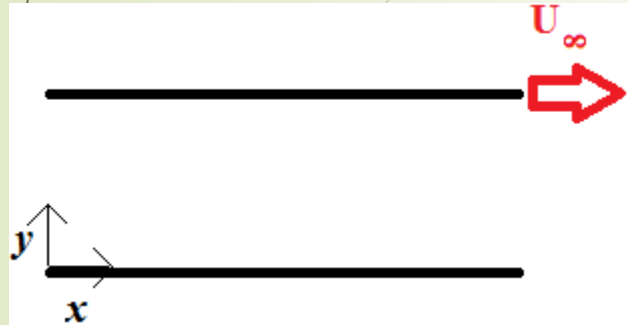
جریان کوئت خطی در رژیم لغزشی: القای حرکت توسط یک صفحه متحرک است. پس تغییر فشار در راستای جریان نداریم، بنابراین اثرات تراکم پذیری

فقط در دماهای بالا یا سرعتهای بالا مهم می شود. بنابراین ابتدا جریان کوئت با لغزش برای سیال تراکم ناپذیر را تحلیل می کنیم.

فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

معادلات حاکم بر جریان کوئت خطی (صفحه ای): فرض کنید سیال تراکم ناپذیر ما بین دو صفحه بینهایت بزرگ موازی با فاصله h قرار دارد که صفحه پایینی ساکن و صفحه بالایی با سرعت ثابت U_∞ به سمت راست حرکت می کند. معادلات حاکم با فرض جریان دائمی و توسعه یافته به صورت زیر است. گرادیان

فشار (تحمیلی) در راستای جریان نداریم. ضمناً از اثرات نیروهای حجمی (مثلاً جاذبه) هم صرفنظر می شود.



جریان دائمی $\frac{\partial}{\partial t}(\cdot) = 0$ و توسعه یافته است: $\frac{\partial \vec{V}}{\partial x} = 0 \Rightarrow \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial w}{\partial x} = 0$

گرادیان فشار در راستای جریان نداریم: $\frac{\partial p}{\partial x} = 0$ نیروهای حجمی صرفنظر: $\vec{f} = 0$

در راستای عمق صفحات که بینهایت بزرگ هستند عاملی برای ایجاد حرکت سیال نداریم و تغییرات هم نداریم: $w = 0, \frac{\partial}{\partial z}(\cdot) = 0$

پس مسئله را دو بعدی-دوجهته می توان در نظر گرفت. طبق پیوستگی دائمی تراکم ناپذیر، v نمی تواند تابع جهت y باشد: $\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \Rightarrow \frac{\partial v}{\partial y} = 0$

طبق سایر فرضهای قبلی، v تابع x, t یا z هم نمی تواند باشد. پس یک عدد ثابت است: $v = C_1$

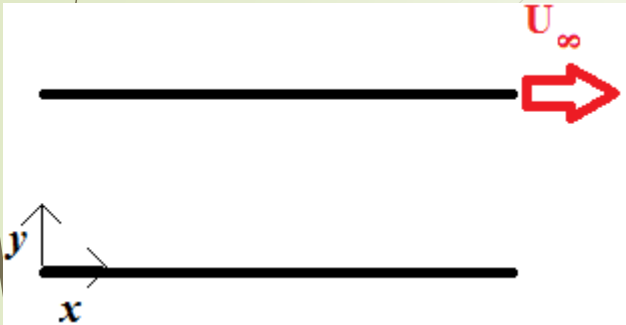
به دلیل شرط نفوذ ناپذیری دیواره ها، عدد ثابت برابر صفر است پس در همه جا $v=0$ است: $@y = 0, h \rightarrow v = 0 \Rightarrow C_1 = 0 \rightarrow v = 0$

پس فقط مولفه u سرعت غیر صفر است و آنهم فقط تابع جهت y می باشد: $u = u(y)$

فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

حال با نوشتن معادله بقای ممنتوم (ناویر-استوکس) تراکم ناپذیر در راستای X برای مسئله دوبعدی، داریم:

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + f_x \Rightarrow \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$



$$\Rightarrow \frac{\partial u}{\partial y} = A \Rightarrow u = Ay + B$$

با دو بار انتگرالگیری نسبت به جهت y:

نکته: با توجه به پروفیل سرعت خطی، استفاده از شرط مرزی لغزشی مرتبه بالاتر وارد شوند چون: $\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$ مثلا برای دیوار با بازتاب دیفیوز:

$$U_s - U_{wall} = C_1 \text{Kn} \left(\frac{\partial U}{\partial n} \right)_s - C_2 \text{Kn}^2 \left(\frac{\partial^2 U}{\partial n^2} \right)_s$$

به شکل بدون بعد:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0, U = \frac{u}{U_\infty}, Y = \frac{y}{h} \Rightarrow \frac{U_\infty}{h^2} \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2} = 0 \Rightarrow \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2} = 0 \Rightarrow \frac{\partial U}{\partial Y} = A_1 \Rightarrow U = A_1 Y + B_1 \Rightarrow \frac{u}{U_\infty} = A_1 \frac{y}{h} + B_1$$

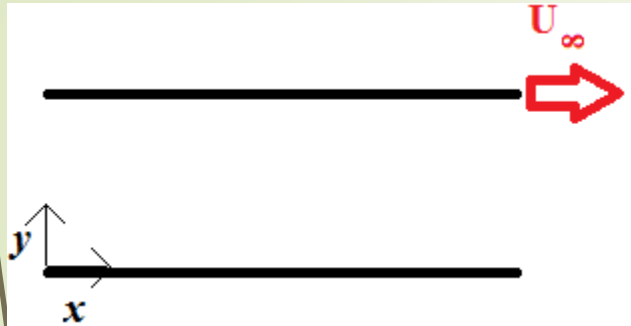
استفاده از شرط مرزی (شرط مرزی مرتبه اول با C1 دلخواه - اگر C1=1 همان شرط لغزش ماکسول):

$$|U_s - U_{Wall}| = C_1 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \text{Kn} \left. \frac{\partial U_s}{\partial Y} \right|_{wall} - C_2 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \text{Kn}^2 \left. \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2} \right|_{wall} + \frac{3}{2\pi} \frac{(\gamma - 1) \text{Kn}^2 \text{Re}}{\text{Ec}} \left. \frac{\partial T}{\partial X} \right|_{wall}$$

اثر خزش حرارتی (فصل ۵)

فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

اعمال شرایط مرزی (ترم مربوط به اثرات حرارتی را برای سادگی نمی نویسیم و در انتها اضافه می کنیم: \blacktriangleright



$$@Y = 0 \rightarrow U_s - 0 = C_1 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \mathbf{Kn} \frac{\partial U_s}{\partial Y} \quad \text{برای دیواره پایینی:}$$

$$\Rightarrow A_1 \times 0 + B_1 = C_1 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \mathbf{Kn} \times A_1 \Rightarrow B_1 = C_1 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \mathbf{Kn} \times A_1$$

برای صفحه بالایی: $@Y = 1 \rightarrow -\left(U_s - \frac{U_\infty}{1}\right) = C_1 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \mathbf{Kn} \frac{\partial U_s}{\partial Y} \Rightarrow 1 - (A_1 \times 1 + B_1) = C_1 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \mathbf{Kn} \times A_1$

$$\Rightarrow 1 - \left(A_1 \times 1 + C_1 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \mathbf{Kn} \times A_1\right) = C_1 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \mathbf{Kn} \times A_1 \Rightarrow 1 = A_1 + 2 \times C_1 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \mathbf{Kn} \times A_1$$

$$\Rightarrow A_1 = \frac{1}{1 + 2 \times C_1 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \mathbf{Kn}} \Rightarrow U = \frac{1}{1 + 2 \times C_1 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \mathbf{Kn}} Y + \frac{1}{1 + 2 \times C_1 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \mathbf{Kn}} \times C_1 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \mathbf{Kn} = \frac{Y + C_1 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \mathbf{Kn}}{1 + 2 \times C_1 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \mathbf{Kn}}$$

$$\Rightarrow \frac{u}{U_\infty} = \frac{\frac{y}{h} + C_1 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \mathbf{Kn}}{1 + 2 \times C_1 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \mathbf{Kn}} + \frac{3}{2\pi} \frac{(\gamma - 1) \mathbf{Kn}^2 \mathbf{Re}}{\gamma \mathbf{Ec}} \frac{\partial T_s}{\partial X}$$

فصل دوم- معادلات حاکم و مدل‌های لغزشی

نکته: پس تنها راه حل مدل کردن اثرات رقیق شدن مرتبه اینست که C_1 تابعی از Kn باشد.

با روش تحلیلی بر مبنای معادله بولتزمن خطی شده و با فرض مولکولهای به شکل کره سخت، نتیجه گرفته شده برای جریان کوئت خطی:

$$Kn \leq 0.1 \Rightarrow C_1 = 1.111$$

دبی حجمی به ازای واحد عمق (عرض) کانال با در نظر گرفتن شرط مرزی مرتبه اول (ماکسول) یعنی $C_1=1$ (در کتاب برای دبی حجمی بالای Q داده‌ها گذاشته در سایر کتب با Q نشان می‌دهند):

$$\dot{Q} = \int_0^h u dy = \int_0^h (Ay + B) dy \Rightarrow \frac{\dot{Q}}{U_\infty h} = \frac{1}{2} + \frac{3}{2\pi} \frac{(\gamma - 1) Kn^2 Re}{\gamma} \frac{\partial T_s}{Ec \partial X}$$

در این حالت وابستگی دبی حجمی به عدد نادسن فقط از طریق اثرات حرارتی می‌باشد.

($C_1=C_2=0$) در شرط مرزی یعنی شرط عدم لغزش)

فصل دوم- معادلات حاکم و مدل‌های لغزشی

مقایسه ضریب اصطکاک پوسته ای برای جریان لغزشی و بدون لغزش با فرض دبی یکسان (یعنی صرفنظر از اثرات حرارتی):

$$\tau_w = \mu \frac{\partial u}{\partial y} = \mu A = \mu \frac{A_1 U_\infty}{h} \Rightarrow \frac{\tau_{w,slip}}{\tau_{w,no-slip}} = \frac{\mu \frac{1}{h} U_\infty}{\mu \frac{1}{h} U_\infty} = \frac{1}{1 + 2C_1 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \text{Kn}}$$

$$C_f \equiv \frac{\tau_w}{\frac{1}{2} \rho U_\infty^2} \Rightarrow \frac{C_{f,slip}}{C_{f,no-slip}} = \frac{1}{1 + 2 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \text{Kn}} : \text{ با فرض } C_1 = 1$$

اگر بخواهیم اثرات خزش حرارتی را هم لحاظ کنیم باید U_∞ طوری اصلاح شود که دبی برای جریان لغزشی و بدون لغزش یکسان شود.

برای جریان تراکم پذیر برشی (باید شرایط مرزی دمایی هم مشخص شود): حالت صفحه پایینی آدیاباتیک و صفحه بالایی دما ثابت T_∞ و با فرض اینکه تغییرات لزجت و ضریب هدایت حرارتی بر حسب دما خطی باشد و برای عدد پرانتل ثابت، ضریب اصطکاک با شرط عدم لغزش

$$C_{f,no-slip} = 2 \frac{1 + \text{Pr} \frac{\gamma - 1}{3} \text{M}_\infty^2}{\text{Re}} \quad (\text{M}_\infty \text{ بر حسب سرعت و دمای صفحه بالایی و رینولدز بر حسب فاصله دو صفحه}):$$

فصل دوم- معادلات حاکم و مدل‌های لغزشی

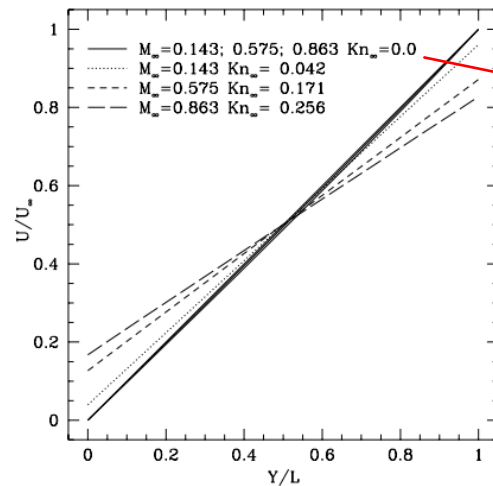
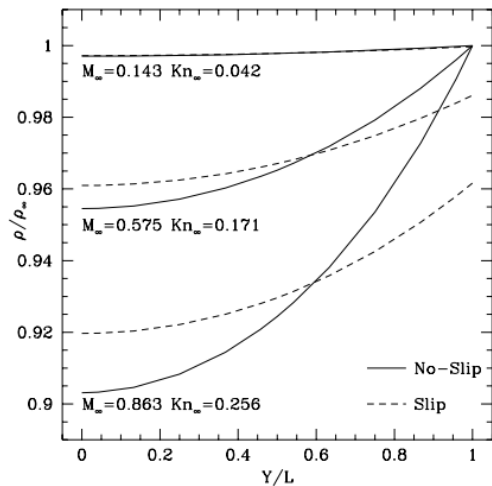
جریان تراکم پذیر برشی لغزشی:

مقایسه نتایج حل تحلیلی با نتایج کد μ FLOW (کد نوشته شده بر اساس Spectral Elements که در شکل نتایجش با سیمبل نشان داده شده) در شکل

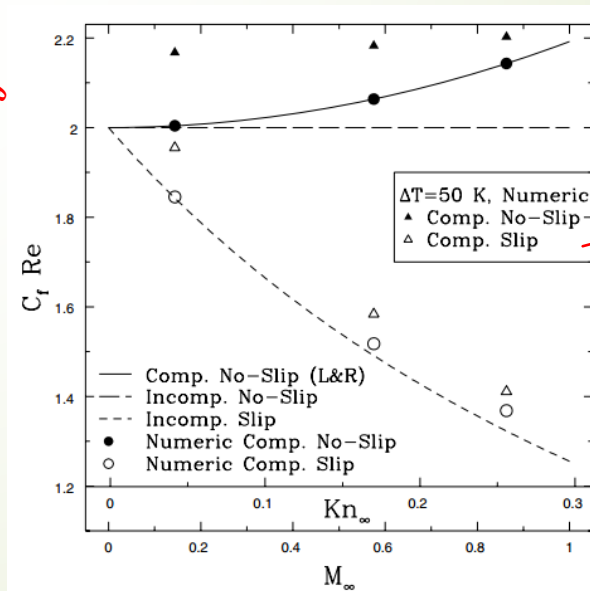
سمت راست: نتایج تراکم پذیر لغزشی تفاوت چندانی با نتایج تراکم ناپذیر لغزشی ندارد. البته اختلاف با افزایش M_∞ (یا همان افزایش Kn) افزایش می یابد.

در شرایط عدم لغزش، تغییر چگالی برای تراکم پذیر بیشتر است. علت کاهش تغییرات چگالی در جریان لغزشی: ۱- تنش برشی در اثر لغزش کم شده بنابراین کار

انجام شده بخاطر تنش برشی کم شده. ۲- روی دیواره بالایی پرش دمایی داریم ولی روی دیواره پایینی به دلیل آدیاباتیک بودن پرش دمایی نداریم.



همان پروفیل سرعت با
شرط عدم لغزش است



نمادهای مثلث برای حل کد
 μ FLOW برای مسئله دو دیواره
دما ثابت با اختلاف دما است.

FIGURE 3.2. Couette flow: Density variation (left) and velocity variation (right) across the channel for various values of Mach number M and Knudsen number Kn ; $L = h$ is the height of the channel ($Re = 5$, $T_\infty = 300$ K).

$$Kn_\infty = \sqrt{\frac{\gamma \pi}{2}} \frac{M_\infty}{Re}$$

فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

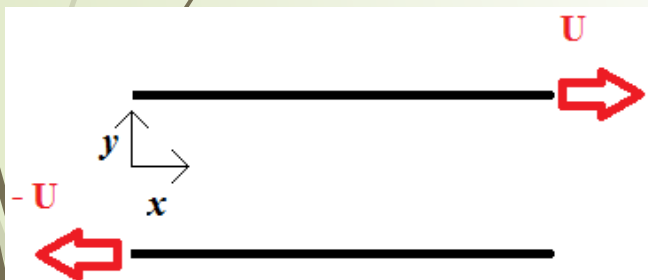
جریان کوئت خطی برای رژیمهای جریان گذار و آزاد مولکولی: (بررسی توزیع سرعت و تنش برشی)

جریان رقیق شده ما بین دو صفحه بینهایت بزرگ موازی با فاصله L را در نظر بگیرید. دمای دو صفحه یکسان T_w و اندازه سرعتشان یکسان در جهت خلاف $(\pm U)$ می باشد. جریان تک جهته دائمی کوئت صفحه ای القا شده را با فرضهای زیر بررسی می کنیم:

۱- مولکولهای گاز کره سخت با اندازه یکسان بوده و از سطح به شکل دیفیوز بازتابیده می شوند $(\sigma_v=1)$.

۲- سرعت صفحات در مقایسه با سرعت حرارتی متوسط کوچک است پس اثرات تراکم پذیری، نوسانات دمایی و اثرات گرمایش لزج قابل صرفنظر هستند.

پروفیل سرعت برای رژیم لغزشی (محور X بین دو صفحه فرض شده):



$$\text{Kn} = \frac{\lambda}{L}, Y = \frac{y}{L} \Rightarrow u_c(Y) = \frac{2UY}{1 + 2C_1 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \text{Kn}}$$

(رابطه با $c_1=1.111$ تا $\text{Kn} \leq 0.25$ معتبر است)

محاسبه جریان دائمی با استفاده از معادله بولتزمان خطی شده نشان می دهد پروفیل سرعت بالک جریان برای تمام نادرسیها خطی است. در حالیکه برای رژیم گذار، در کنار دیواره ها در لایه ای به ضخامت از مرتبه λ ، توزیع سرعت و خواص فیزیکی دچار تغییرات عمده ای می شوند که فقط با حل معادله بولتزمان قابل پیش بینی است. به این لایه، لایه نادرسی می گوییم.

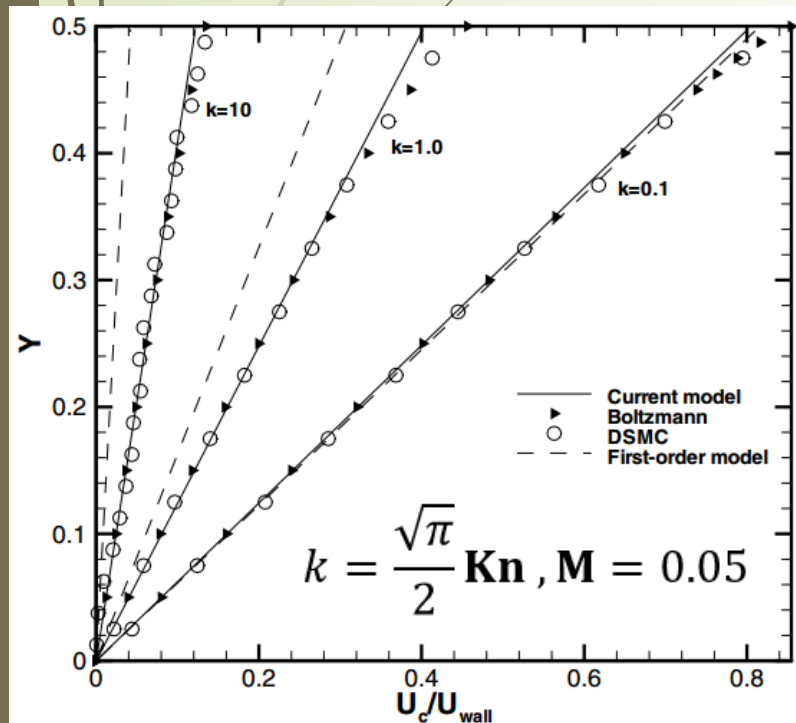
فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

جریان کوئت خطی برای رژیمهای جریان گذار و آزاد مولکولی:

نتایج حل با روش شبیه سازی مستقیم مونت کارلو (DSMC) با حل بولتزمان خطی شده تطابق دارد. هر دو نشان می دهند در قسمت عمده کلی وسط جریان (جریان بالک) توزیع سرعت خطی است و با افزایش نادسن، اثرات لغزش روی دیواره زیاد می شود. ضمناً لایه نادسن دیده می شود.

مدل لغزشی مرتبه اول با $C_1=1.111$ تا $Kn \leq 0.1$ منطقی است. حل معادلات جریان کوئت تراکم ناپذیر با فرض شرط لغزشی مرتبه بالاتر هم نمی تواند به پیش بینی بهتر لغزش صحیح کمک کند.

پروفیل سرعت در نیمه بالایی کانال



مدل معرفی شده توسط Bahukudumbi, Park, and Beskok, 2003:

$$C_1 = \beta_0 + \beta_1 \tan^{-1}(\beta_2 Kn^{\beta_3})$$

که β ها ضرایب تجربی هستند که از مقایسه شیب پروفیل سرعت بدست آمده از پروفیل اسلاید قبل و حل بولتزمان خطی

$$\beta_0 = 1.2977, \beta_1 = 0.7185, \beta_2 = -1.1749, \beta_3 = 0.5864$$

شده بدست می آیند:

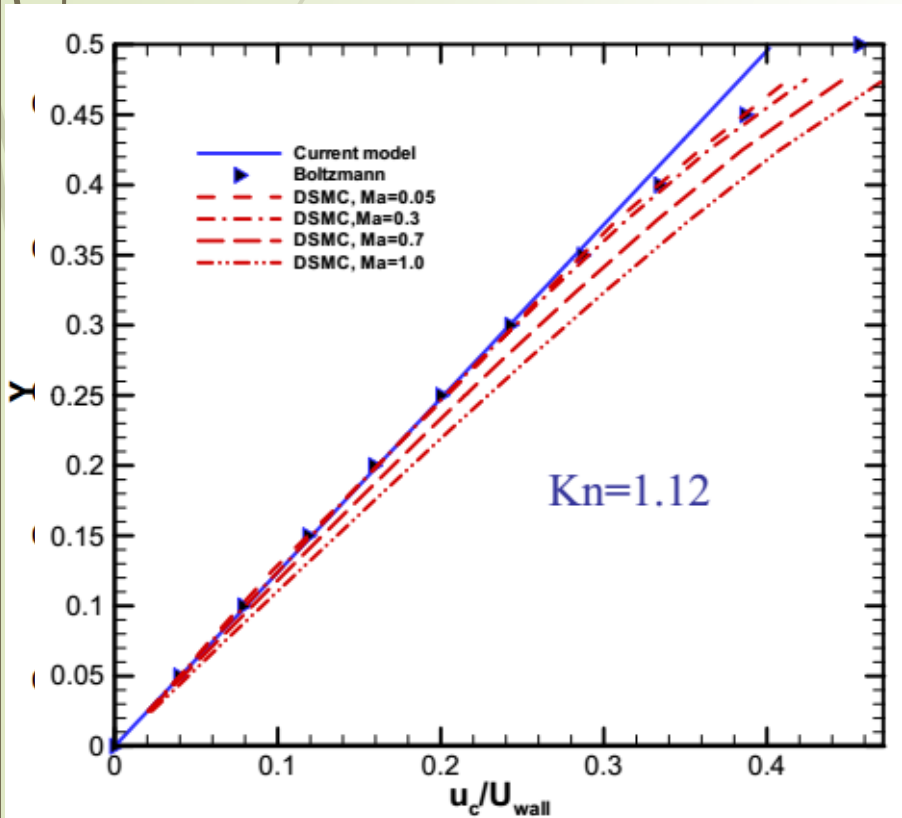
پروفیل جریان بالک بدست آمده از این مدل برای تمام اعداد نادسن مطابقت دارد اما چون بر پایه معادلات ناویر-استوکس

است، همچنان از تخمین لایه نادسن عاجز است (برای $Kn < 0.1$ با برونمایی جریان بالک، لایه نادسن قابل صرفنظر است).

فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

جریان کوئت خطی برای رژیمهای جریان گذار و آزاد مولکولی:

پروفیل جریان بالک بدست آمده از مدل اخیر برای تمام اعداد نادسن با حل معادله بولتزمان خطی شده مطابقت دارد اما چون بر پایه معادلات ناویر-استوکس است، همچنان از تخمین لایه نادسن عاجز است! (برای $Kn < 0.1$ با برونمایی جریان بالک، لایه نادسن قابل صرفنظر است ولی برای $Kn > 1$ کل کانال را اشغال می کند).



اثرات تراکم پذیری و اتلاف ویسکوز برای دیواره های غیر همدمای یا جریانهای با سرعت بالا مهم می شود.

برای ماخ بزرگتر 0.3، اثرات تراکم پذیری سبب اختلاف حل مدل اخیر و بولتزمان خطی شده با حل شبیه

سازی مستقیم مونت کارلو می شود.

مدل اخیر برای $M < 0.3$ معتبر است.

خطای مدل اخیر برای $M=0.5$ ، 7% و برای $M=1$ ، 14% است.

$k=1$ → $Kn=1.12$

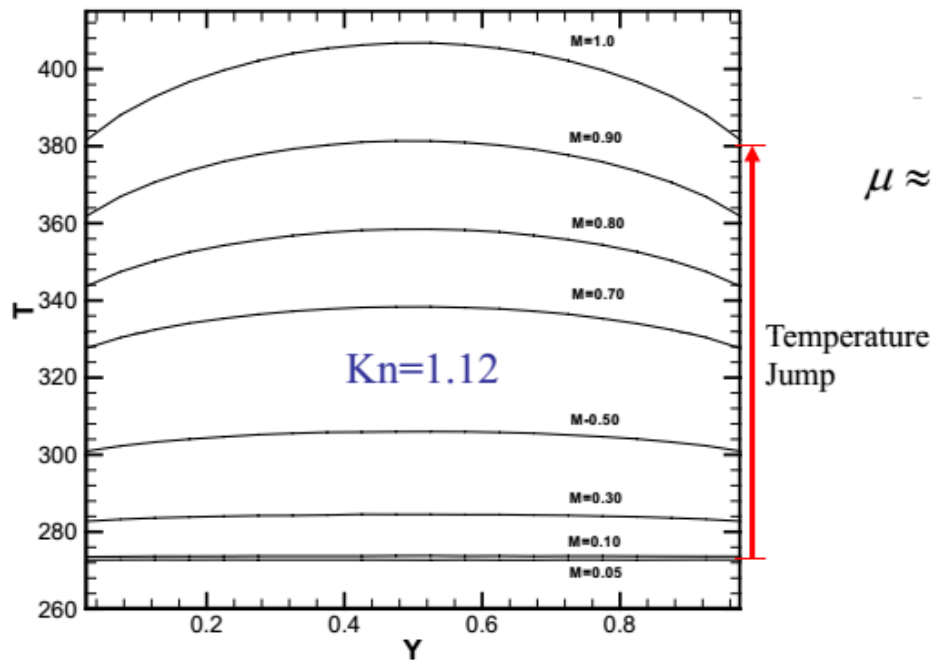
فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

جریان کوئت خطی برای رژیمهای جریان گذار و آزاد مولکولی:

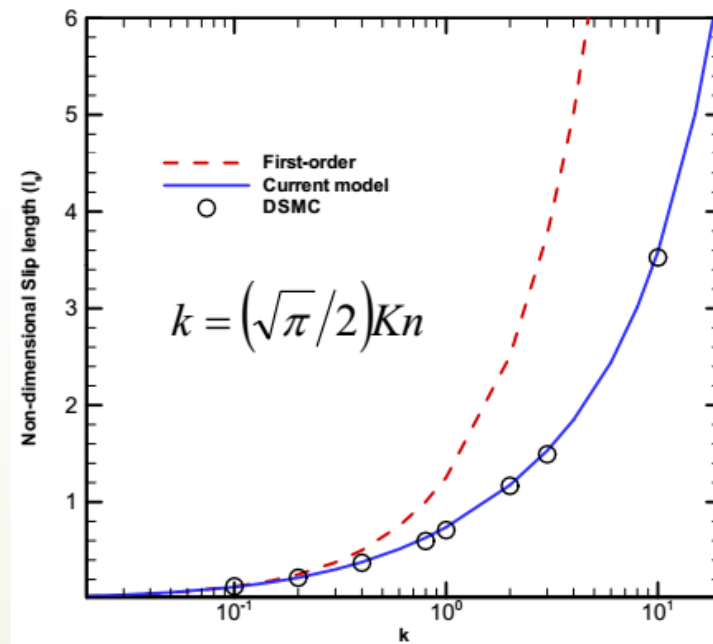
دمای متوسط با افزایش عدد ماخ افزایش می یابد که نشان دهنده غالب بودن اثرات گرمایش لزج (viscous heating) است (شکل چپ).

طول لغزش (ls): فاصله از دیواره که جریان بالک برونمایی شده برابر با سرعت دیواره می شود.

در شکل سمت راست طول لغزشی بی بعد شده بر حسب عدد نادسن مقیاس شده ارائه شده است.

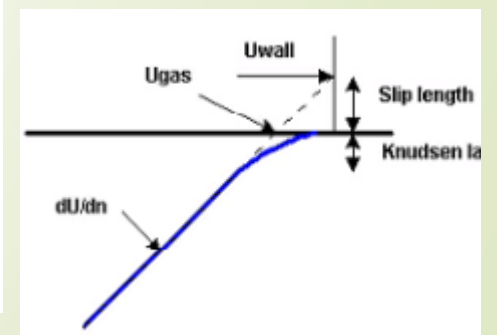


$$\mu \approx \mu_o \left(\frac{T}{T_o} \right)^{1/2}$$



$$l_s \propto Kn$$

$$l_s = \frac{u \left(y = \frac{L}{2} \right) - U}{L \times \frac{\partial u}{\partial y}}$$



فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

مدل تنش برشی برای جریان کوئت خطی:

برای رژیم محیط پیوسته (که برای رژیم لغزشی هم معتبر است):

$$\tau_{cont.} = \mu \frac{du}{dy} = -\mu \frac{2U}{L}$$

برای رژیم آزاد مولکولی: تنش برشی برای رژیم آزاد مولکولی ناشی از تبادل ممنتم مماسی بین صفحات است که این اندرکنشها از طریق مولکولهای

برخوردکننده و بازتابنده می باشد (پس مستقل از گرادیان سرعت است):

$$\tau_{\infty} = \tau_{Kn \rightarrow \infty} = -\rho_0 U \sqrt{\left(\frac{2RT_w}{\pi}\right)}$$

ویسکوزیته دینامیکی (تابعیت فشار که خیلی ضعیف است، لحاظ نشده):

$$\mu = \sqrt{\left(\frac{2RT_w}{\pi}\right)} \rho_0 \lambda$$

رابطه تحلیلی پیشنهادی Cercignani و همکارانش (۱۹۶۳) برای تنش برشی بی بعد شده (ضرایب برای حالت مولکولها به شکل کره سخت):

$$\pi_{xy} = \frac{\tau}{\tau_{\infty}} = -\frac{a_1 Kn^2 + a_2 Kn}{a_1 Kn^2 + a_3 Kn + a_4},$$

$$a_1 = 1.3056, \quad a_2 = 2\pi, \quad a_3 = 7.5939, \quad a_4 = \pi,$$

فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

مدل تنش برشی برای جریان کوئت خطی:

رابطه تحلیلی پیشنهادی Stone و همکارانش (۱۹۹۰): $C_1 = 1.111$, $\gamma_1 = 1.270042$, $\pi_{xy} = -\frac{\gamma_1 \pi \text{Kn}}{2(1 + 2C_1 \text{Kn})}$

رابطه تحلیلی پیشنهادی Bahukudumbi و Beskok (۲۰۰۳): رابطه مشابه رابطه Cercignani ولی ضرایب از برازش منحنی با روش حداقل مربعات به حل بولترمان خطی شده.

$$\pi_{xy} = -\frac{a \text{Kn}^2 + 2b \text{Kn}}{a \text{Kn}^2 + c \text{Kn} + b},$$

$$a = 0.5297, \quad b = 0.6030, \quad c = 1.6277,$$

$$\frac{\tau}{\tau_\infty} = \pi_{xy} = 1 + \frac{2b-c}{a} \frac{1}{\text{Kn}} + \frac{-b - (\frac{2b-c}{a})c}{a} \frac{1}{\text{Kn}^2} + O(\text{Kn}^{-3})$$

as $\text{Kn} \rightarrow \infty$,

بسط تیلور مدل اخیر:

$$\frac{\tau}{\tau_{\text{cont}}} = \pi_{xy} = 1 + \frac{a-2c}{2b} \text{Kn} + \frac{(\frac{2c-a}{b})c - 2a}{2b} \text{Kn}^2 + O(\text{Kn}^3)$$

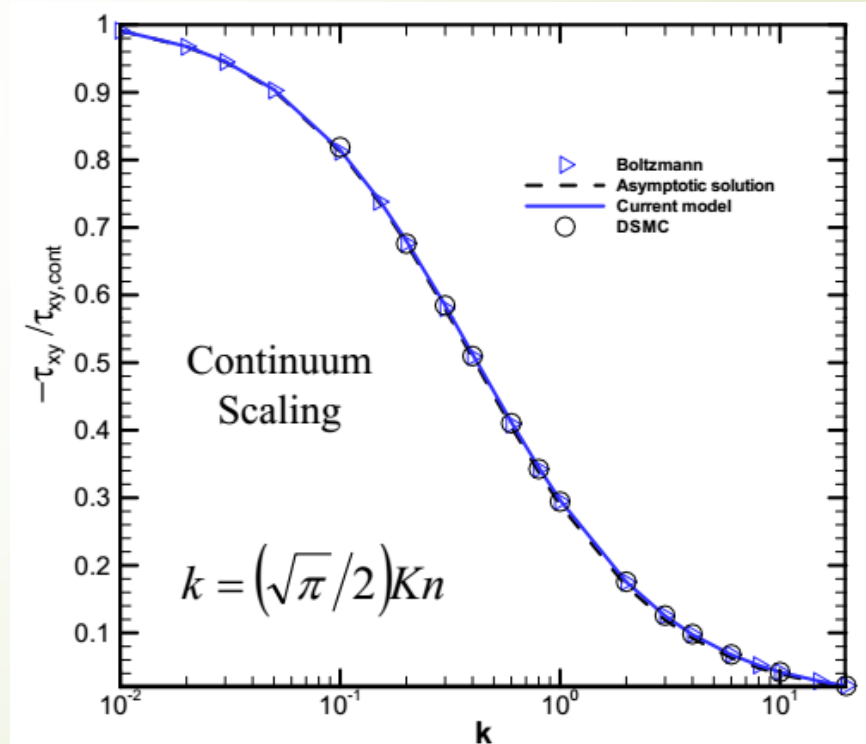
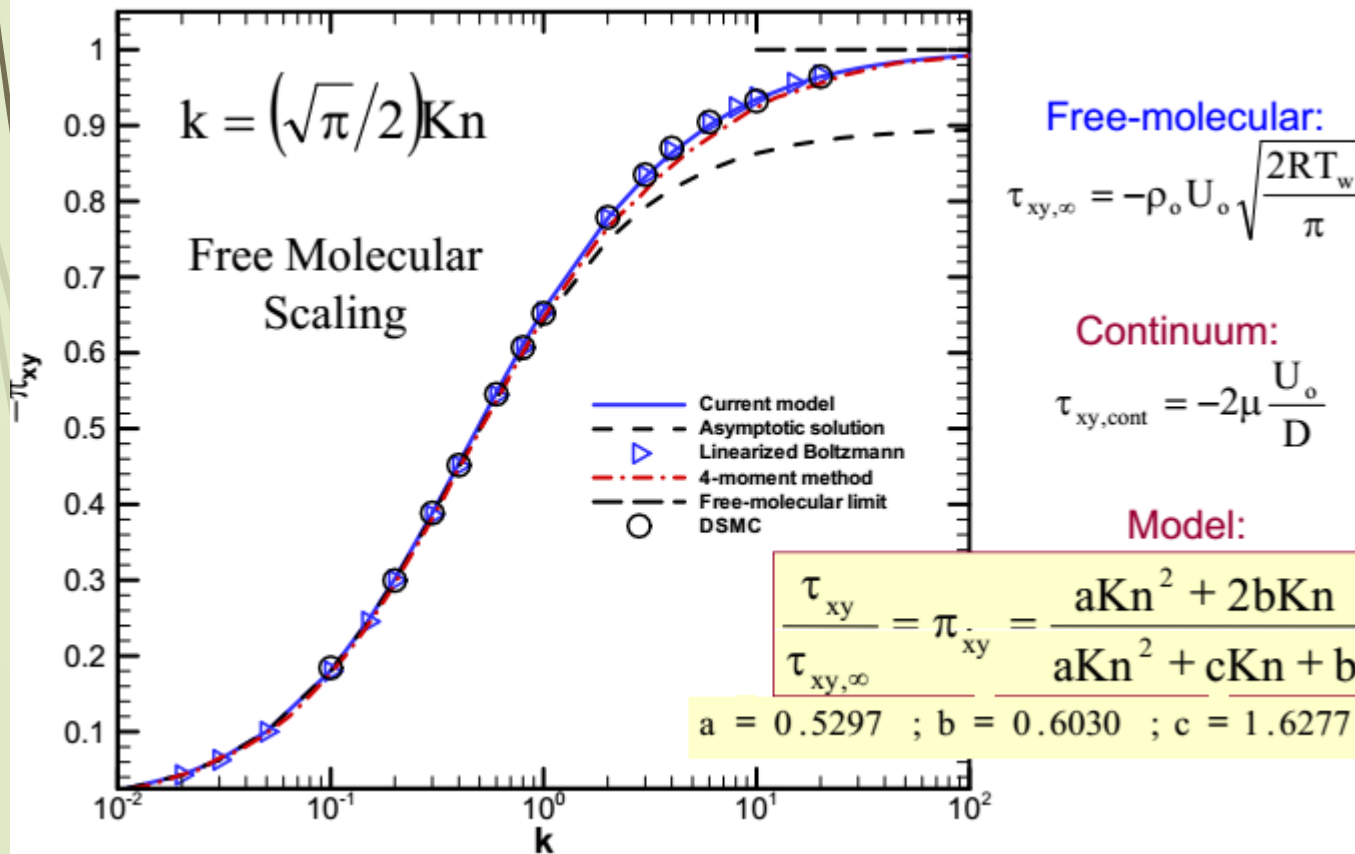
as $\text{Kn} \rightarrow 0$,

$$\frac{a-2c}{2b} = -2.2601 \approx -2C_1 = 2.222$$

فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

➤ مدل تنش برشی برای جریان کوئت خطی:

➤ مقایسه تنش برشی نرمالایز شده روشهای مختلف بر حسب عدد نادسن مقیاس شده: خطای مدل اخیر برای $M=0.05$ کمتر از 0.3% است. خطا با افزایش عدد ماخ افزایش می یابد.

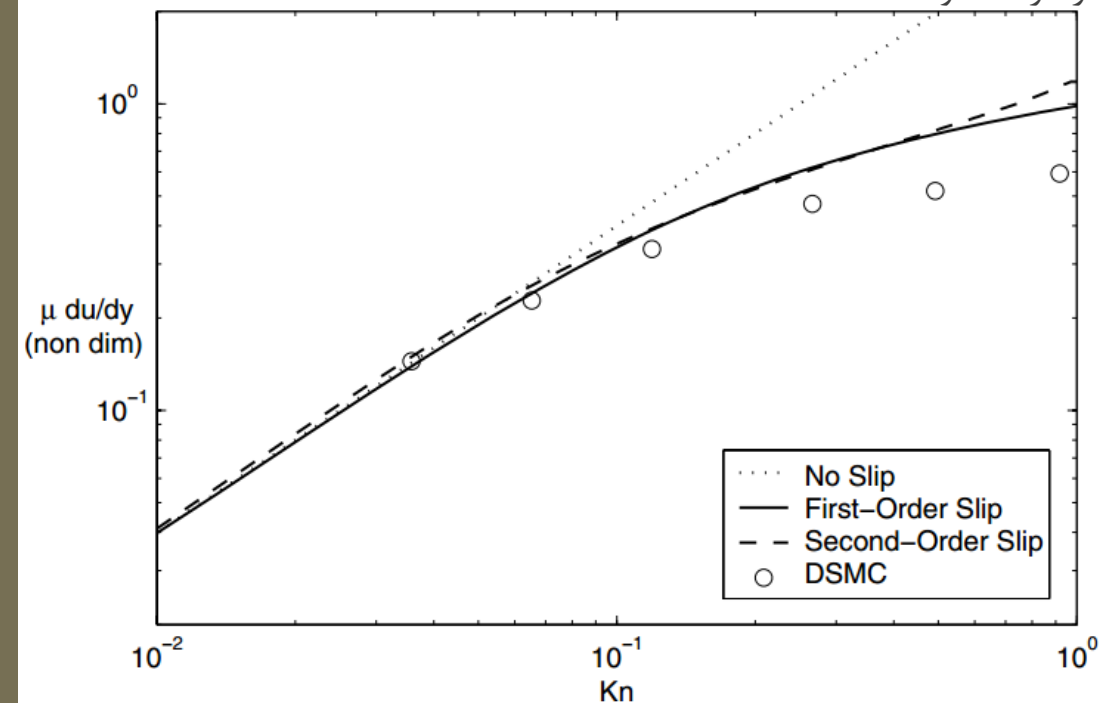


فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

➤ مدل تنش برشی برای جریان کوئت خطی:

➤ مقایسه نتایج حل معادله برنت (با شرایط مرزی مختلف) و شبیه سازی مستقیم مونت کارلو برای تنش برشی نرمالایز شده بر حسب عدد نادسن به ازای $M=3$: لغزش مرتبه دوم نسبت به مرتبه اول تاثیر بیشتری ندارد.

➤ جمع بندی: مدل ارائه شده توسط گروه آقای Beskok برای پروفیل سرعت تا $Kn \leq 12$ و مدل تنش برشی برای تمام نادسنها معتبر است مشروط بر آنکه جریان با $M \leq 0.3$ و تقریباً همدمای برای گازهای تک اتمی رقیق با شکل مولکول کره سخت در نظر گرفته شود.



فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

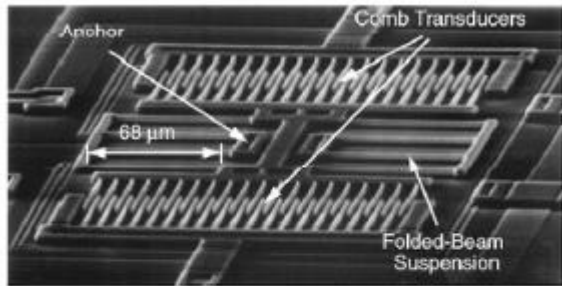
جریان کوئت نوسانی (مشابه مسئله دوم استوکس):

با جریانهای گازی ناشی از برش تناوبی نسبت به زمان در بسیاری از میکروسیستمها مواجه می شویم.

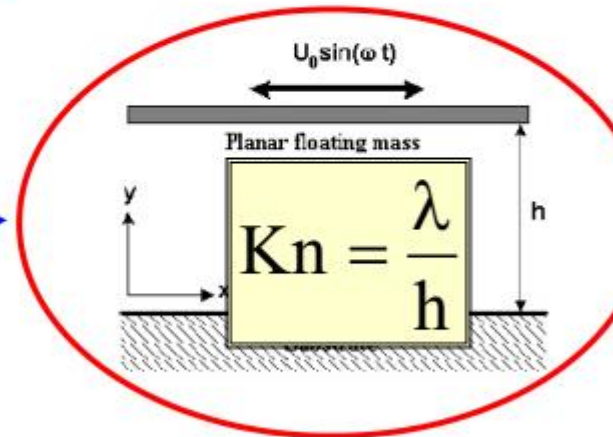
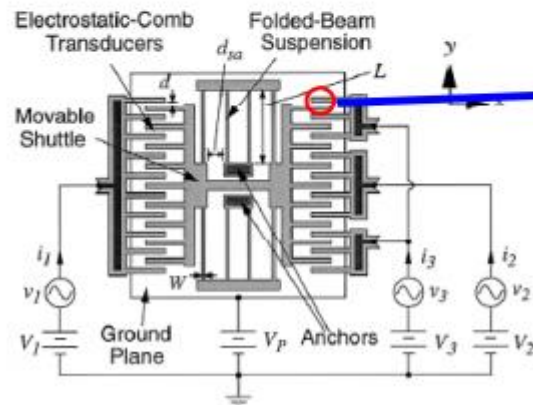
برای کاربردهایی نظیر میکروتشدید کننده ها و مخازن خلاء، تحلیل

جریان در تمام نادنسها و برای تمام فرکانسها ضروری است.

Nguyen and Howe (1999): Comb-micro-resonator



SEM of a 100-KHz folded-beam, comb-micro-resonator



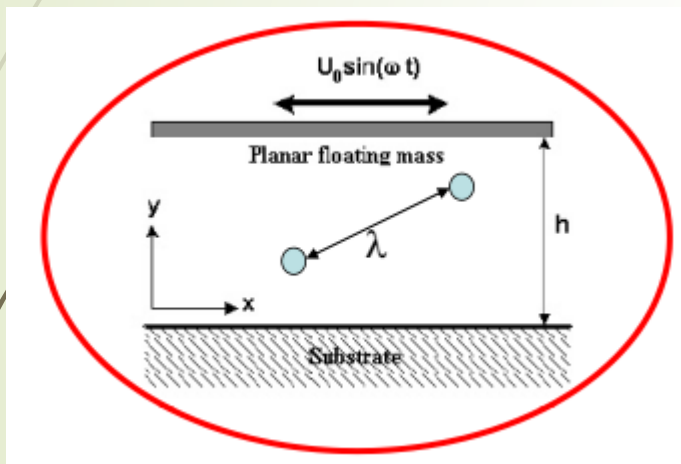
Oscillatory Couette Flow

فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

جریان کوئت نوسانی (مشابه مسئله دوم استوکس):

جریان گاز رقیق ما بین دو صفحه بینهایت بزرگ موازی با فاصله L (یا h) که صفحه پایینی ساکن و صفحه بالایی با فرکانس ω در راستای خود صفحه حرکت نوسانی دارد.

معادله حاکم برای محیط پیوسته (با ساده سازی معادلات ناویر-استوکس):

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$$


پارامترهای فیزیکی: ω , ν , λ و L (یا h)

پارامترهای بدون بعد:

$$\text{Kn} = \frac{\lambda}{L}, \quad \beta = \sqrt{\frac{L^2 \omega}{\nu}}$$

شرایط مرزی:

$$@y = 0, L : u - U_{Wall} = C_1 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \lambda \frac{\partial u}{\partial y}$$

فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

➤ کوئت نوسانی - جریان شبه دائمی:

➤ توزیع سرعت خطی بوده و همواره $(y/L, u/u_0) = (0.5, 0.5)$ عبور می کند که باعث لغزش یکسان روی دو دیواره می شود. این شرایط برای $\beta \leq 0.25$ قابل استحصال است.

➤ برای بدست آوردن پروفیل سرعت - با فرض حرکت سینوسی صفحه بالایی - پاسخ به فرم زیر در نظر بگیرید:

$$u(y, t) = \text{Im}\{V(y) \exp(j\omega t)\}$$

➤ با جایگذاری در معادله حاکم و بدست آوردن حل عمومی:

$$j\omega V(y) = \nu \frac{\partial^2 V(y)}{\partial y^2} \longrightarrow V(y) = C_1 \sinh(\sqrt{j}\beta Y) + C_2 \cosh(\sqrt{j}\beta Y)$$

➤ اعمال شرایط مرزی (αm) همان C_1 :

$$u(y, t) = \text{Im}\left\{ U_0 \frac{\sinh(\sqrt{j}\beta Y) + \sqrt{j}\beta \alpha_m \text{Kn} \cosh(\sqrt{j}\beta Y)}{(1 + j\beta^2 \alpha_m^2 \text{Kn}^2) \sinh(\sqrt{j}\beta) + 2\sqrt{j}\beta \alpha_m \text{Kn} \cosh(\sqrt{j}\beta)} \exp(j\omega t) \right\}$$

$$j \text{ یا } i = \sqrt{-1}$$

$$\psi = \sqrt{\frac{j\omega}{\nu}}$$

فرکانس
مختلط

$$\begin{cases} Y=0 \rightarrow A_1 \sinh(\alpha) + A_2 \cosh(\alpha) = 0 = \frac{2-\sigma_v}{\sigma_v} c_1 k_n \frac{\partial V}{\partial y} \\ Y=1 \rightarrow A_1 \sinh(\sqrt{j} \beta) + A_2 \cosh(\sqrt{j} \beta) - U_0 = -\frac{2-\sigma_v}{\sigma_v} c_1 k_n \frac{\partial V}{\partial y} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \sinh(\alpha) = 0, \cosh(\alpha) = 1 \\ (\sinh x)' = \cosh x, (\cosh x)' = \sinh x \rightarrow \left[\frac{\partial V}{\partial y} = A_1 \sqrt{j} \beta \cosh(\sqrt{j} \beta Y) + A_2 \sqrt{j} \beta \sinh(\sqrt{j} \beta Y) \right] \\ \sinh x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}, \cosh x = \frac{e^x + e^{-x}}{2} \end{aligned}$$

$$Y = \frac{z}{L} \rightarrow V(y, Y) = A_1 \sinh(\sqrt{j} \beta Y) + A_2 \cosh(\sqrt{j} \beta Y)$$

$$\rightarrow \begin{cases} Y=0 \rightarrow A_1 \times 0 + A_2 \times 1 = \frac{2-\sigma_v}{\sigma_v} k_n c_1 \sqrt{j} \beta (A_1 \times 1 + A_2 \times 0) \\ Y=1 \rightarrow A_1 \sinh(\sqrt{j} \beta) + A_2 \cosh(\sqrt{j} \beta) - U_0 = -\frac{2-\sigma_v}{\sigma_v} k_n c_1 \sqrt{j} \beta [A_1 \cosh(\sqrt{j} \beta) + A_2 \sinh(\sqrt{j} \beta)] \end{cases}$$

$$\Rightarrow A_1 \left[\sinh(\sqrt{j} \beta) + \frac{2-\sigma_v}{\sigma_v} k_n c_1 \sqrt{j} \beta \cosh(\sqrt{j} \beta) \right] - U_0 = -\frac{2-\sigma_v}{\sigma_v} k_n c_1 \sqrt{j} \beta A_1 \left[\cosh(\sqrt{j} \beta) + \frac{2-\sigma_v}{\sigma_v} k_n c_1 \sqrt{j} \beta \sinh(\sqrt{j} \beta) \right]$$

أخر $\sigma_v = 1$ (ضيق تطبيق)

$$A_1 \left[\sinh(\sqrt{j} \beta) + c_1 k_n \sqrt{j} \beta \cosh(\sqrt{j} \beta) \right] + c_1 k_n \sqrt{j} \beta A_1 \left[\cosh(\sqrt{j} \beta) + \sinh(\sqrt{j} \beta) \right] = U_0$$

$$\Rightarrow A_1 = \frac{U_0}{\left[\sinh(\sqrt{j} \beta) + c_1 k_n \sqrt{j} \beta \cosh(\sqrt{j} \beta) \right] + c_1 k_n \sqrt{j} \beta \left[\cosh(\sqrt{j} \beta) + \sinh(\sqrt{j} \beta) \right]}$$

$$, A_2 = c_1 k_n \sqrt{j} \beta A_1 \Rightarrow V(Y) = A_1 \left[\sinh(\sqrt{j} \beta Y) + c_1 k_n \sqrt{j} \beta \cosh(\sqrt{j} \beta Y) \right]$$

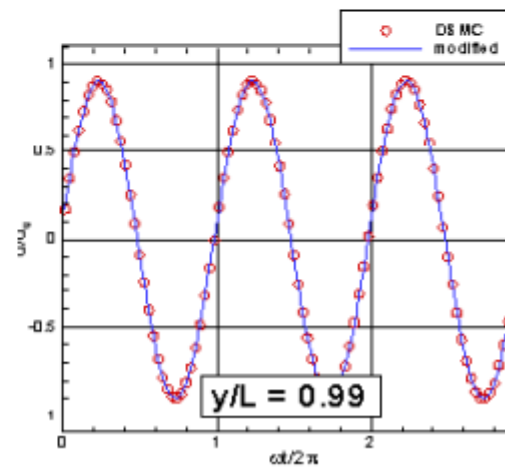
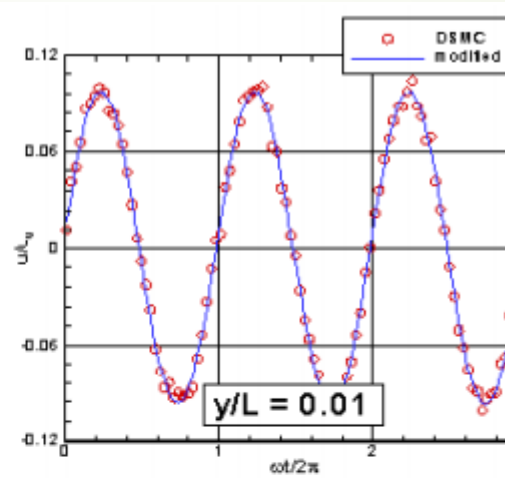
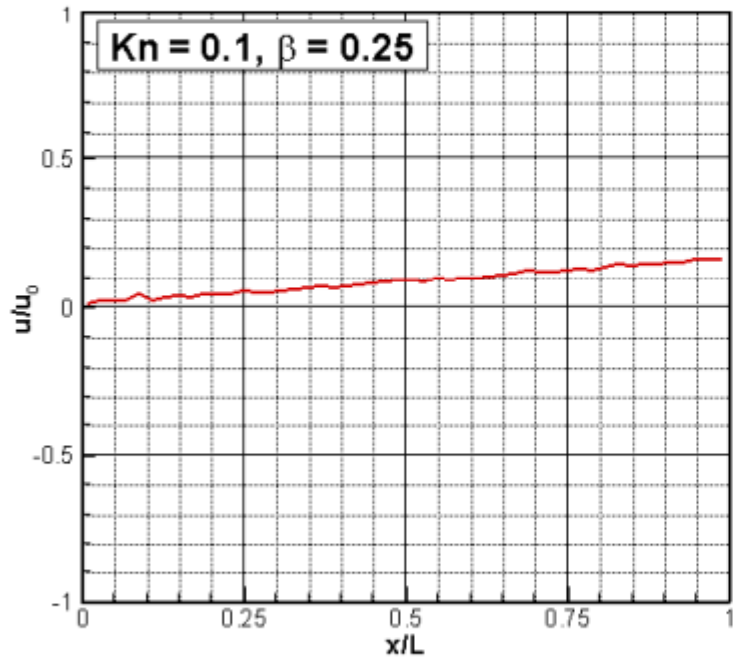
$$\Rightarrow V(Y) = \frac{U_0 \left[\sinh(\sqrt{j} \beta Y) + c_1 k_n \sqrt{j} \beta \cosh(\sqrt{j} \beta Y) \right]}{\sinh(\sqrt{j} \beta) \left[1 + c_1^2 k_n^2 j \beta^2 \right] + \cosh(\sqrt{j} \beta) \left[\frac{c_1 k_n \sqrt{j} \beta + c_1 k_n \sqrt{j} \beta}{2 c_1 k_n \sqrt{j} \beta} \right]}$$

$$u(y, t) = V(y) \sin(\omega t) = \text{Im} \left\{ V(y) \exp(j\omega t) \right\}$$

فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

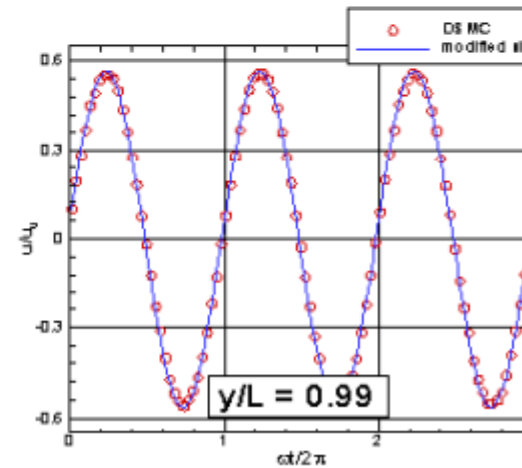
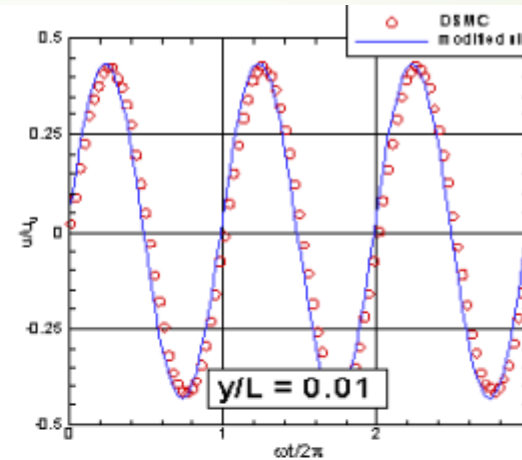
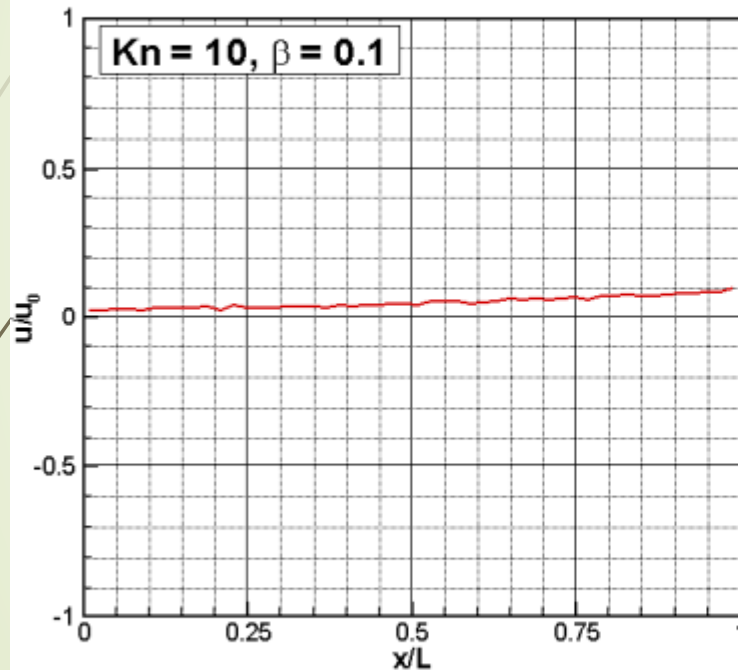
کوئت نوسانی - جریان شبه دائمی:

Quasi-Steady Flow: $Kn=0.1, \beta=0.25$



فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

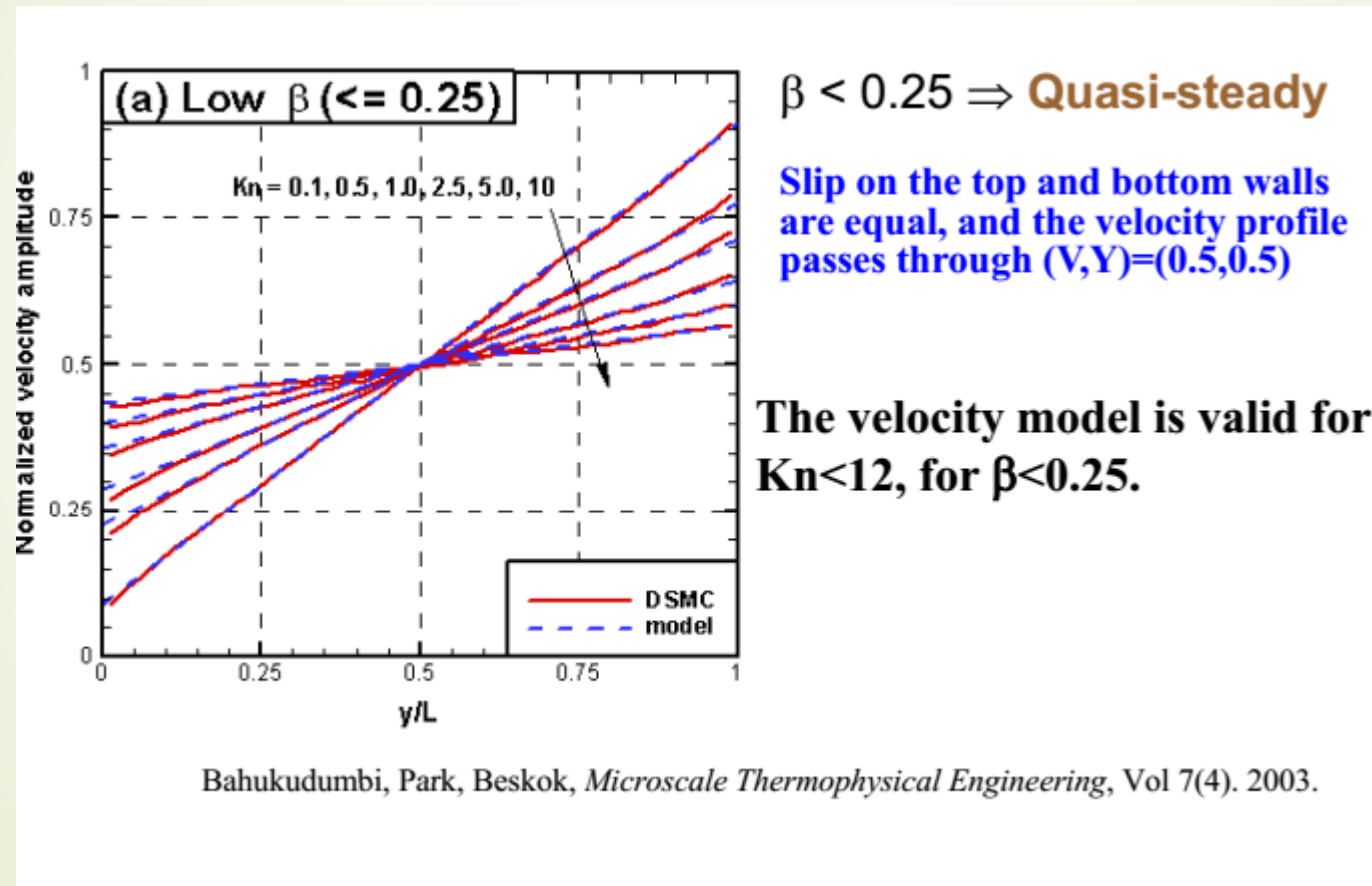
Quasi-Steady Flow: $Kn=10, \beta=0.1$



کونت نوسانی - جریان شبه دائمی:

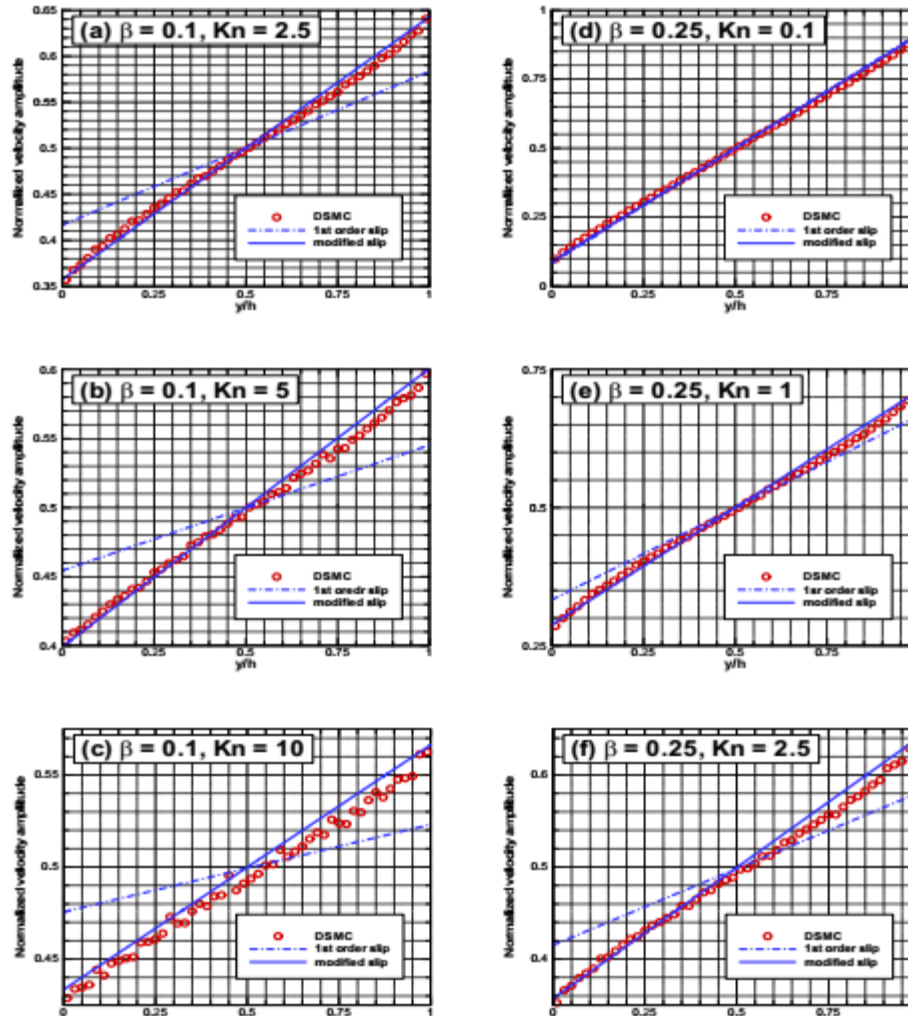
فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

کوئنت نوسانی - جریان شبه دائمی:



فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

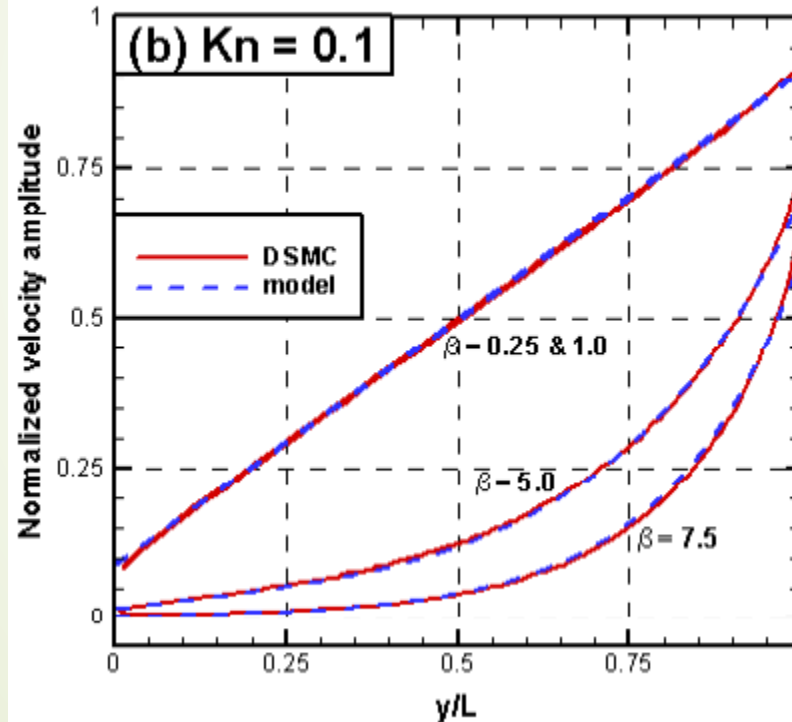
کوئت نوسانی - جریان شبه دائمی: ▶



فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

نوسانی با فرکانس بالا در رژیم جریان لغزشی: ▶

Model Summary for High Frequency Slip Flows ($Kn \leq 0.1$ & $\beta \geq 0.25$)



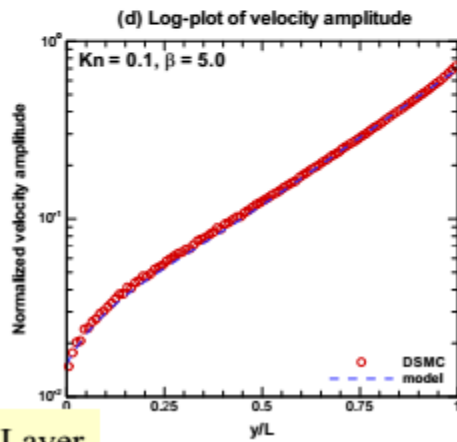
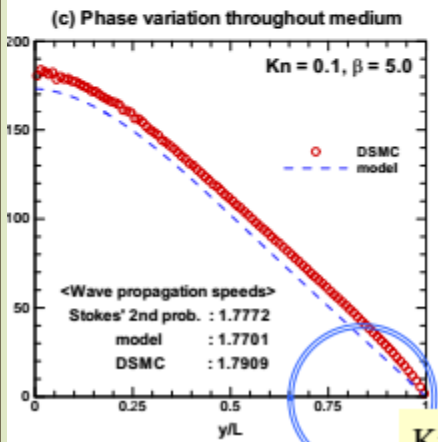
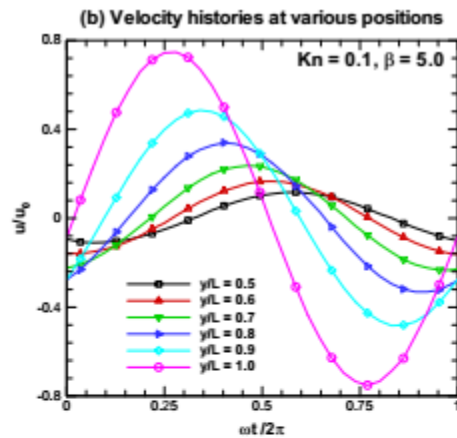
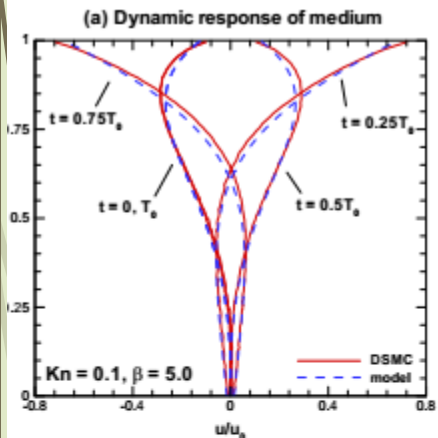
The velocity model is also valid for $Kn < 0.1$, for $\beta > 0.25$
→ High frequency slip flow.

For $\beta > 5.0$, we observe bounded Stokes layers in the slip flow regime.

فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

نوسانی با فرکانس بالا در رژیم جریان لغزشی:

حل مدل با DSMC تطابق دارند. فقط "اختلاف فاز" را با خطای اندکی پیش بینی می کند (شکل C).



Slip Flow Regime

- Exponential decay of velocity amplitude
- Constant wave speed and linearly varying phase angle in most of the domain.
- Interactions between two surfaces result in variations of the wave speed deeper in the domain
- All predicted by the analytical model.

$$u(Y, t) = u_0 \sin(\omega t + \Psi)$$

$$u(Y, t) = u_0 [\sin(\omega t) \cos \Psi + \cos(\omega t) \sin \Psi] \\ = A(Y) \sin(\omega t) + B(Y) \cos(\omega t),$$

$$\Psi(Y) = \tan^{-1} \left[\frac{B(Y)}{A(Y)} \right]$$

فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

➤ مدل تنش برشی:

➤ می خواهیم تنش برشی روی دیوار نوسان کننده را تخمین بزنیم.

➤ فرض اساسی: رفتار جریان نوسانی شبه دائمی به جریان کوئت دائمی شباهت دارد. بنابراین می توان یک ویسکوزیته موثر بر اساس حل کوئت دائمی تعریف و در مدل شبه دائمی استفاده کرد، یعنی (a, b و c از اسلاید ۴۵):

$$\mu_e = \frac{\tau_c}{\frac{du_c}{dy}} = \frac{\mu_0}{2} \frac{a Kn + 2b}{a Kn^2 + c Kn + b} (1 + 2C_1 Kn)$$

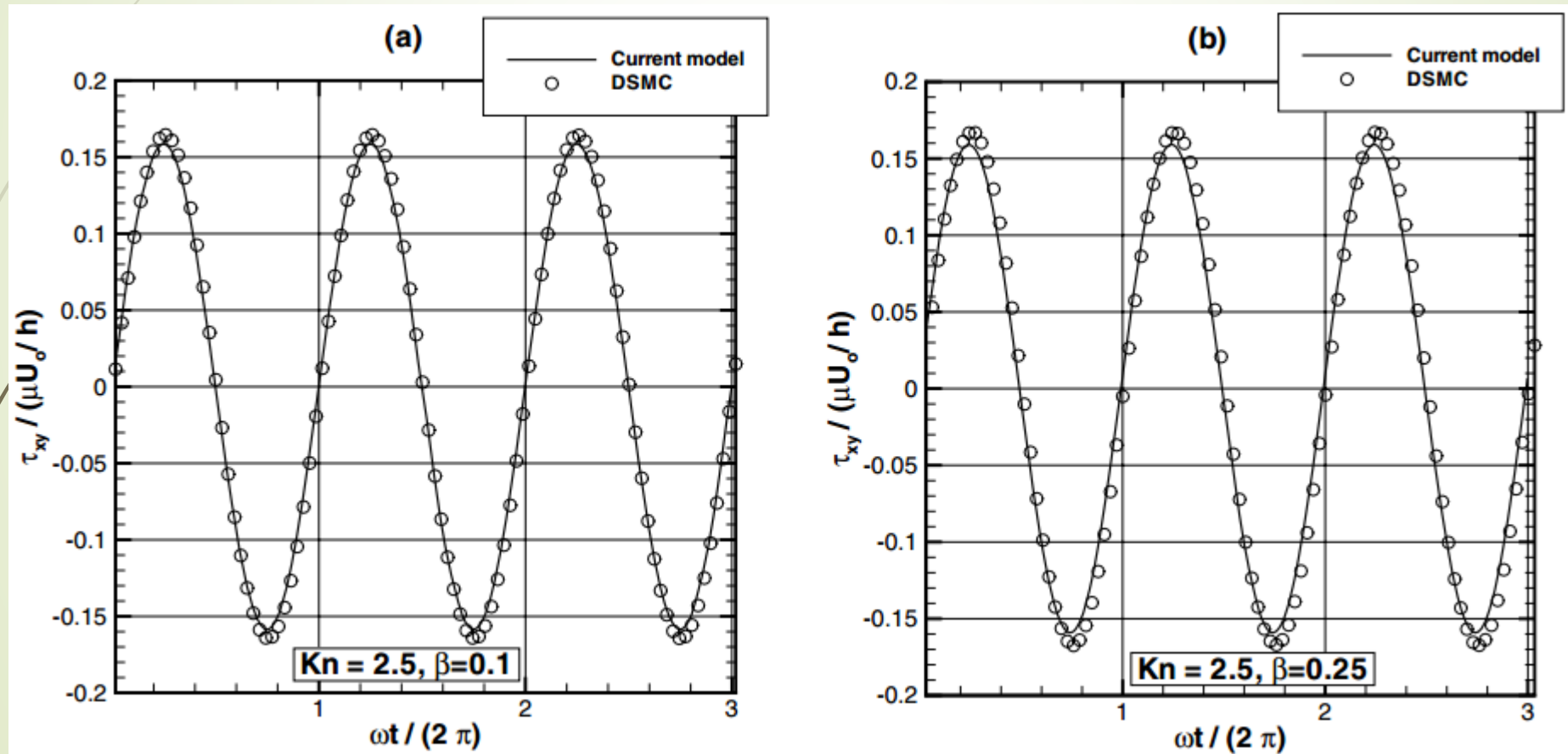
➤ تنش برشی جریان نوسانی شبه دائمی:

$$(\tau)_{qs} = \mu_e \left. \frac{du(y, t)}{dy} \right|_{y=L} = \frac{\mu_0 U_0}{2h} \frac{a Kn + 2b}{a Kn^2 + c Kn + b} (1 + 2C_1 Kn)$$

$$\times \Im \left[\left(\sqrt{j} \beta \left(\frac{\cosh(\sqrt{j} \beta) + \sqrt{j} \beta C_m Kn \sinh(\sqrt{j} \beta)}{(1 + j \beta^2 C_m^2 Kn^2) \sinh(\sqrt{j} \beta) + 2 \sqrt{j} \beta C_m Kn \cosh(\sqrt{j} \beta)} \right) \right) \exp(j \omega t) \right]$$

فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

مدل تنش برشی: مدل با حل DSMC تطابق خوبی دارد. ▶



فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

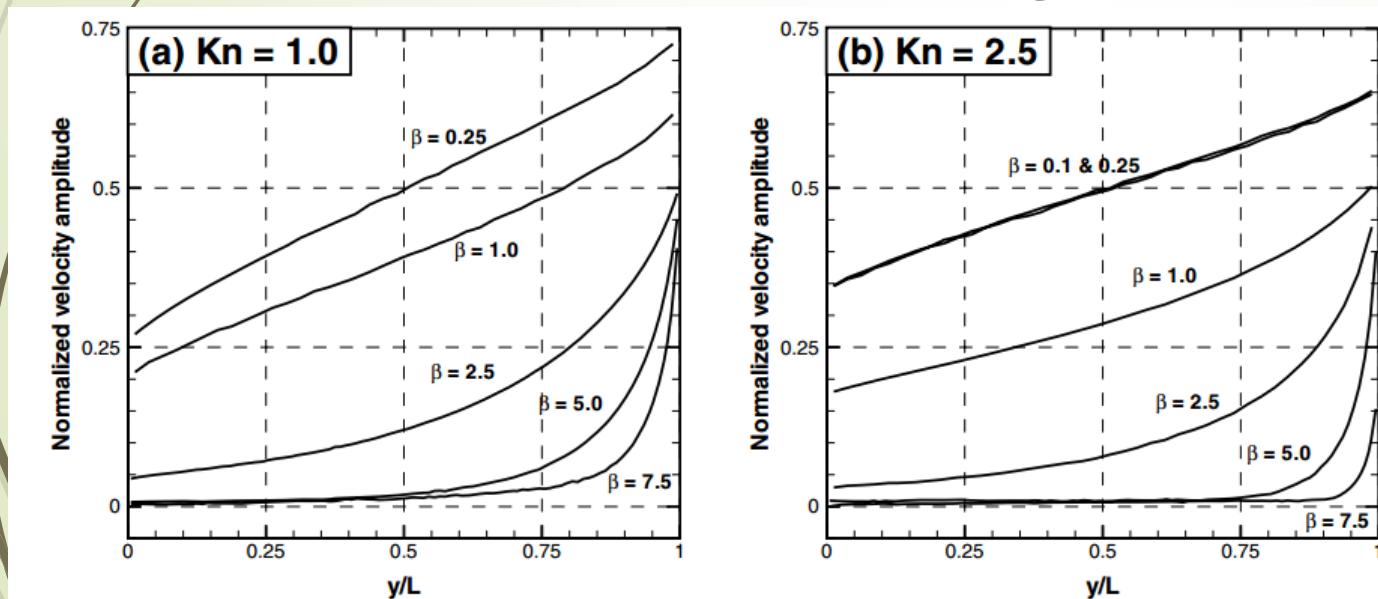
جریان نوسانی با فرکانس بالا در رژیم گذار:

در یک ناسن ثابت، سرعت لغزشی با افزایش β افزایش می یابد.

برای $\beta \geq 5$ رفتار از نوع لایه استوکس محدود شده مشاهده می شود.

سرعت لغزشی با افزایش Kn در β ثابت افزایش می یابد.

برای یک عدد ناسن ثابت، ضخامت لایه استوکس با افزایش β کاهش می یابد.



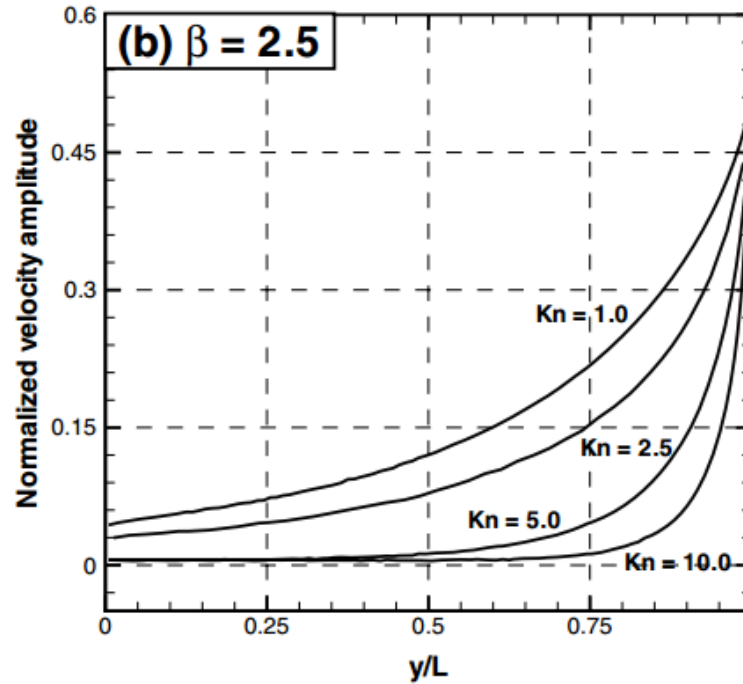
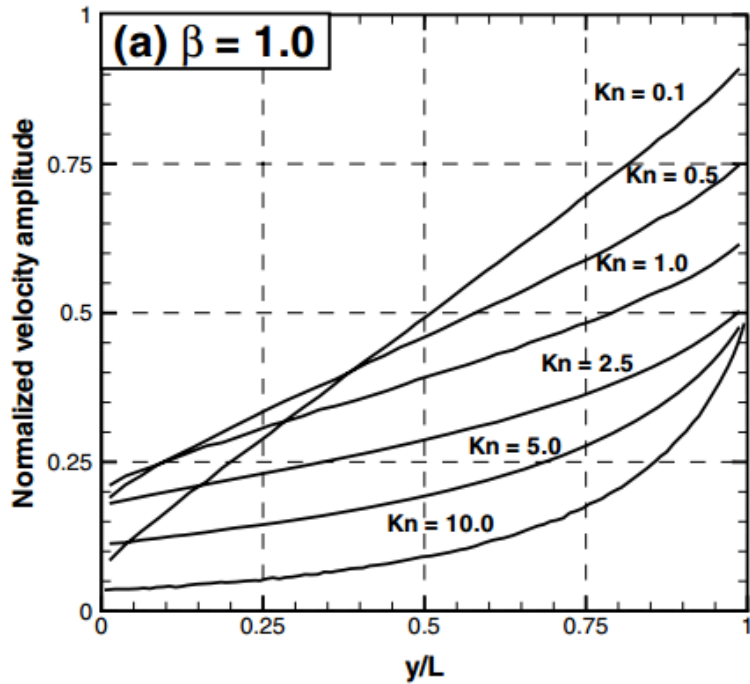
فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

جریان نوسانی با فرکانس بالا در رژیم گذار:

سرعت لغزشی با افزایش Kn در β ثابت افزایش می یابد.

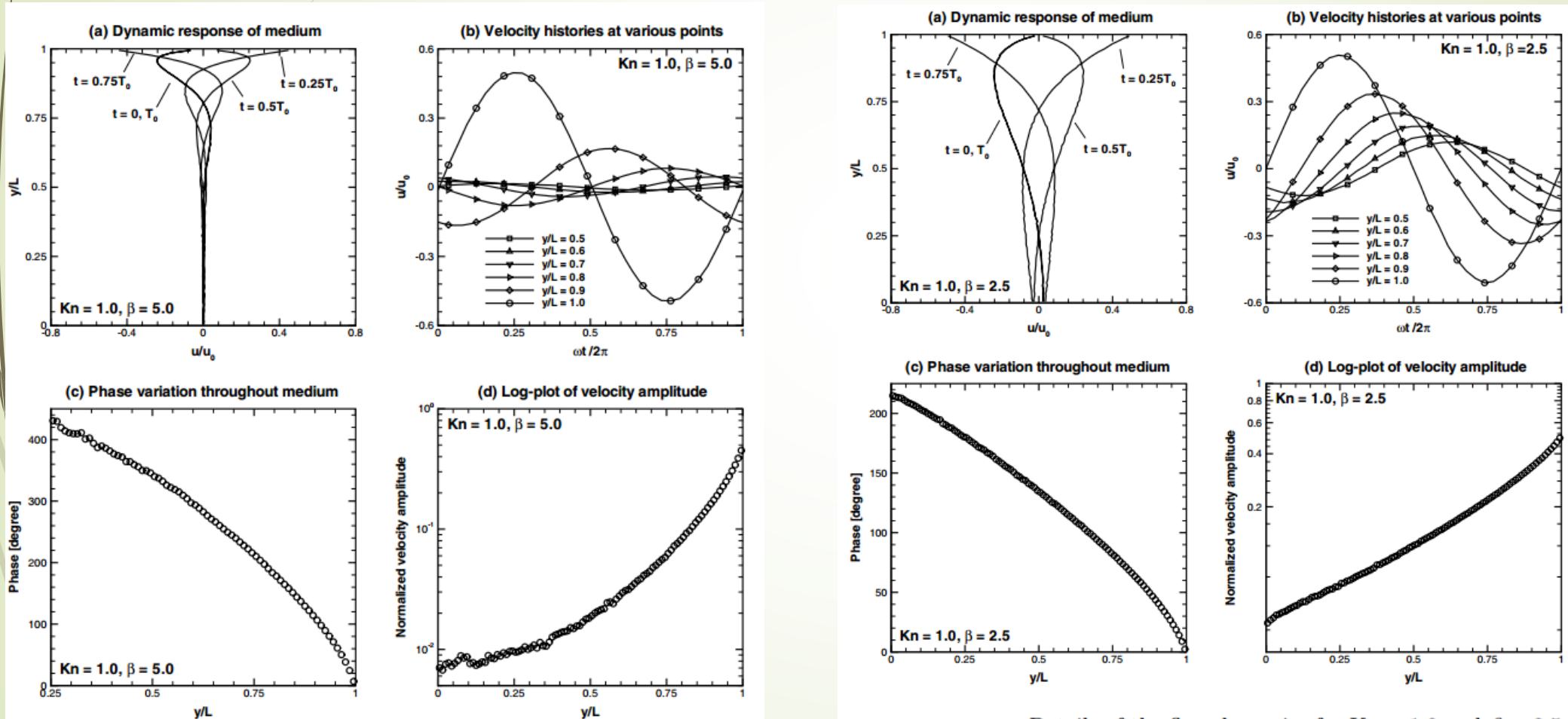
برای $\beta=1$ ، جریان شبه دائمی برای $Kn=0.1$ برقرار است. پس فرض جریان شبه دائمی به عدد نادسن هم بستگی دارد!

با افزایش Kn ، لایه رقیق محدود شده ظاهر می شود یعنی رفتار جریان فقط مربوط به اثرات رقت است (با β ربط ندارد).



فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

جریان نوسانی با فرکانس بالا در رژیم گذار: (از مقایسه قسمت الف دو شکل: با افزایش β لایه استوکس شدیدتری شکل می گیرد)



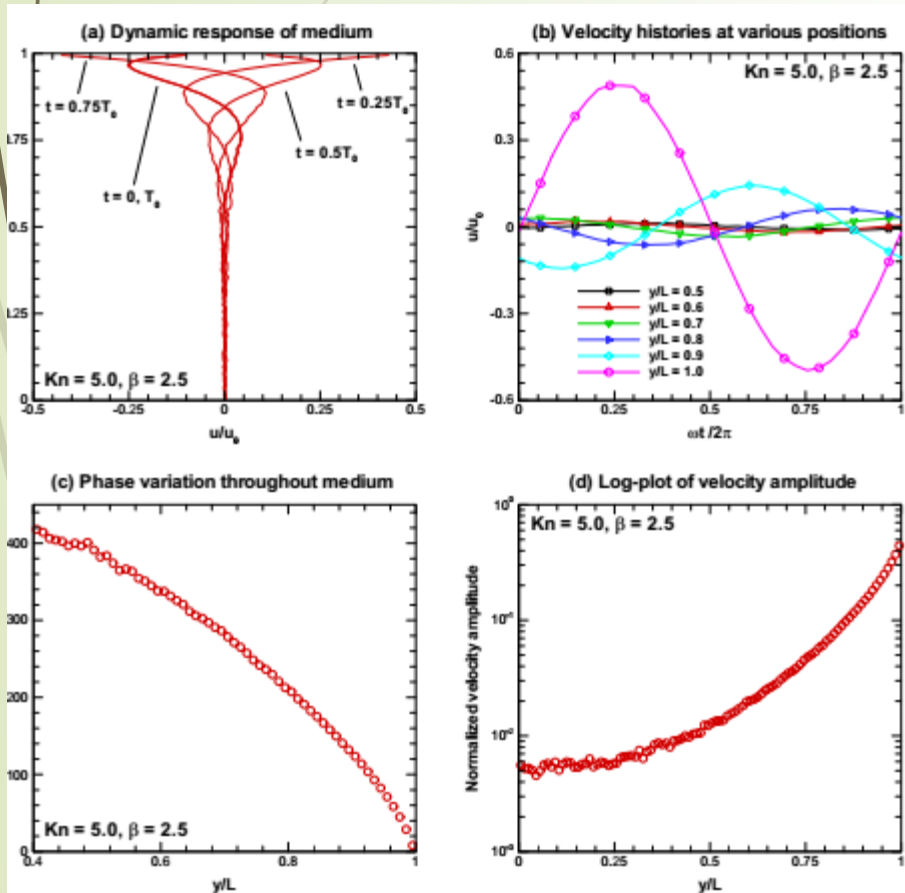
Details of the flow dynamics for $Kn = 1.0$ and $\beta = 5.0$.

Details of the flow dynamics for $Kn = 1.0$ and $\beta = 2.5$.

فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

جریان نوسانی با فرکانس بالا در رژیم گذار: ▶

با مقایسه این شکل با شکل سمت راست اسلاید قبلی مشاهده می شود که با افزایش نادن لایه رقیق محدود شده تشدید می شود. ▶



فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

جریان نوسانی با فرکانس بالا در رژیم آزاد مولکولی:

با افزایش عدد نادسن ($Kn \geq 10$) برخوردهای بین مولکولی در مقایسه با برخورد مولکولها به سطح قابل صرفنظر هستند. پس از معادله بولتزمان بدون ترم برخورد می توان استفاده کرد (f تابع توزیع سرعت و η مولفه عمود بر جهت جریان (جهت y) سرعت مولکولی است):

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \eta \frac{\partial f}{\partial y} = 0$$

نیروی خارجی نداریم.

هر دو دیواره دیفیوز و دیواره بالایی ($y=L$) تحریک سینوسی می شود.

$$f(y=0) = f_0 = \frac{\kappa^3}{\pi^{3/2}} \exp[-\kappa^2 (\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2)]; \quad \eta > 0$$

شرایط مرزی:

$$f(y=L; u_w) = \frac{\kappa^3}{\pi^{3/2}} \exp[-\kappa^2 (\xi^2 + (\eta - u_w)^2 + \zeta^2)]; \quad \eta < 0$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{m}{2k_B T_e}}$$

که توابع ξ و ζ مولفه در جهت جریان و η spanwise سرعت مولکولی هستند.
جریانهای میکرو و نانو- مدرس: محمد وهابی

فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

جریان نوسانی با فرکانس بالا در رژیم آزاد مولکولی:

با فرض اینکه دامنه نوسانات سرعت کمتر از سرعت صوت است. پس بولتزمان بدون برخورد را خطی سازی می کنیم.

تابع توزیع سرعت به دو بخش تعادلی و نوسانی تجزیه می شود:

$$f = f_0 (1 + \phi)$$

که ϕ نوسان نرمالیزه شده (normalized fluctuation) است. با جایگذاری در معادلات اسلاید قبلی و صرفنظر از ترمهای مرتبه بالا:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \eta \frac{\partial \phi}{\partial y} = 0,$$

$$\phi_0 = \phi(y=0) = 0; \quad \eta > 0,$$

$$\phi_L = \phi(y=L) = 2\kappa^2 \xi u_w; \quad \eta < 0.$$

$$u = \int \xi \phi f_0 d\xi d\eta d\varsigma,$$

$$\tau = \rho_0 \int \xi \eta \phi f_0 d\xi d\eta d\varsigma$$

که ρ_0 حاصلضرب جرم مولکولی در چگالی تعداد مولکولها در حالت تعادل است.

فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

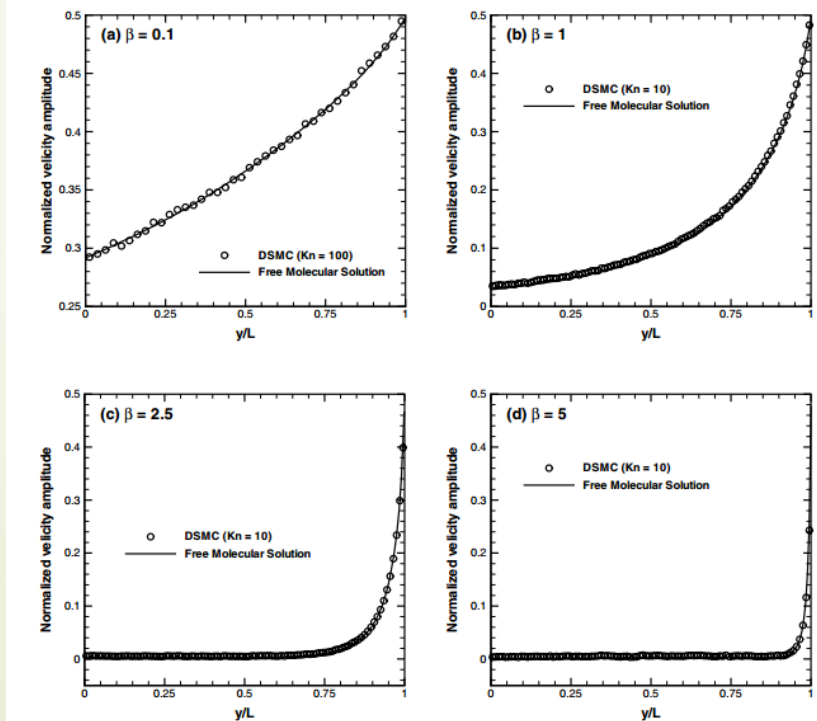
جریان نوسانی با فرکانس بالا در رژیم آزاد مولکولی:

$$u(y, t) = \frac{u_0}{\sqrt{\pi}} \int_{\frac{\kappa(L-y)}{t}}^{\infty} \sin \left[t - \frac{\kappa(L-y)}{\eta'} \right] \exp(-\eta'^2) d\eta',$$

با کمک تبدیل لاپلاس مسئله حل می شود.

$$\tau(y, t) = \frac{\rho_0 u_0}{\sqrt{\pi}} \int_{\frac{\kappa(L-y)}{t}}^{\infty} \eta' \sin \left[t - \frac{\kappa(L-y)}{\eta'} \right] \exp(-\eta'^2) d\eta'.$$

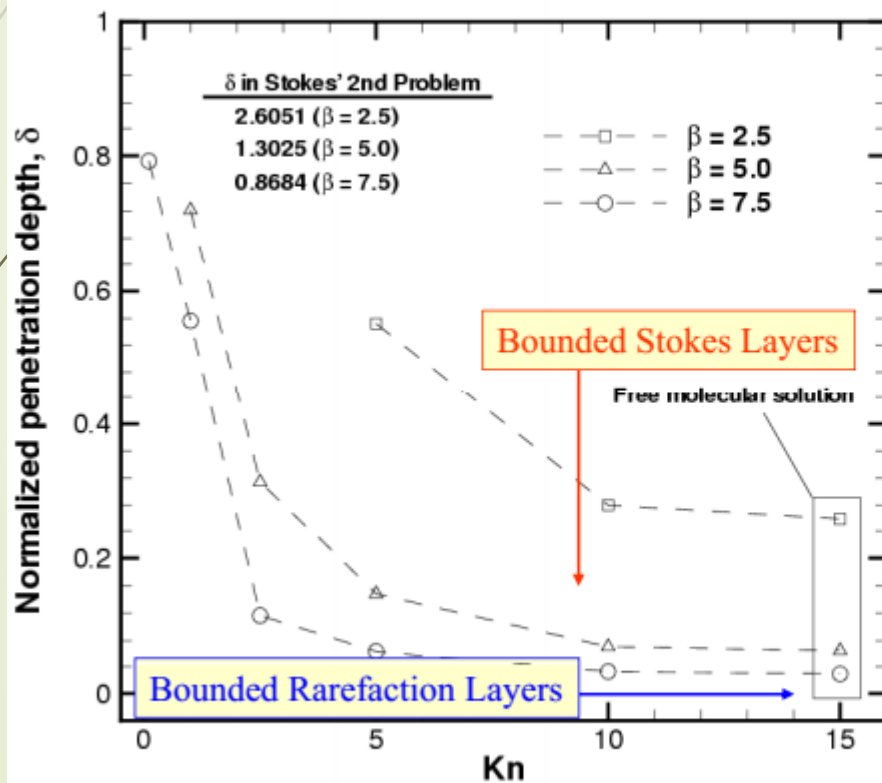
برای جریان کوئت نوسانی، مقدار سرعت گاز و تنش برشی روی صفحه نوسان کننده به همان مقدار حدی حالت دائمی وقتی $kn \rightarrow \infty$ میل می کند.



فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

جریان نوسانی با فرکانس بالا در رژیم آزاد مولکولی:

Penetration Depth Variation for Bounded Layers



δ is the distance, where

$$\frac{|U|}{U_0} = 0.01.$$

δ values are smaller than that of the continuum flows.

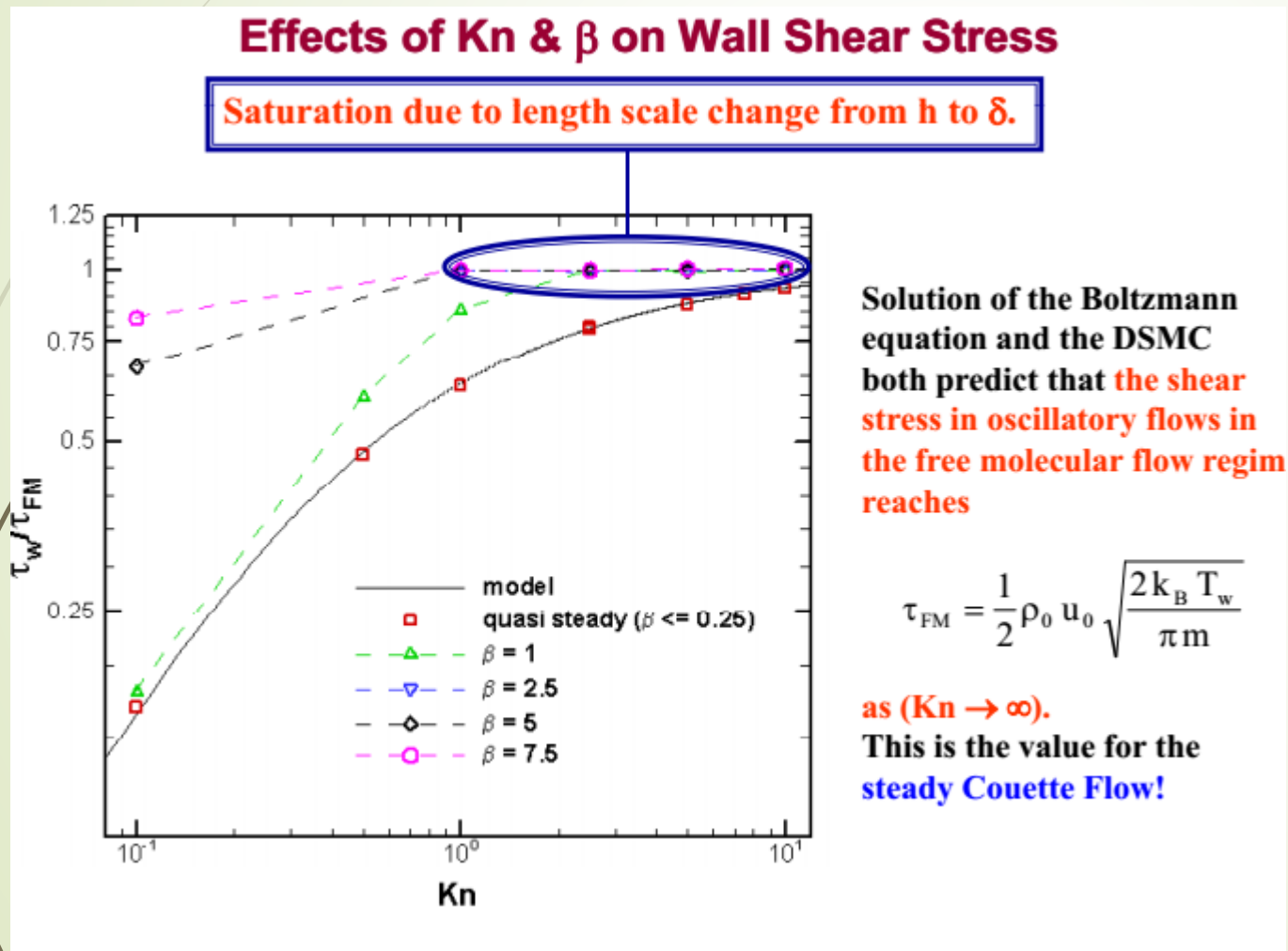
For fixed Kn , δ is reduced by increasing β .

For fixed β , δ is reduced by increasing Kn .

Introduction of δ requires length scale change for redefinition of Kn .

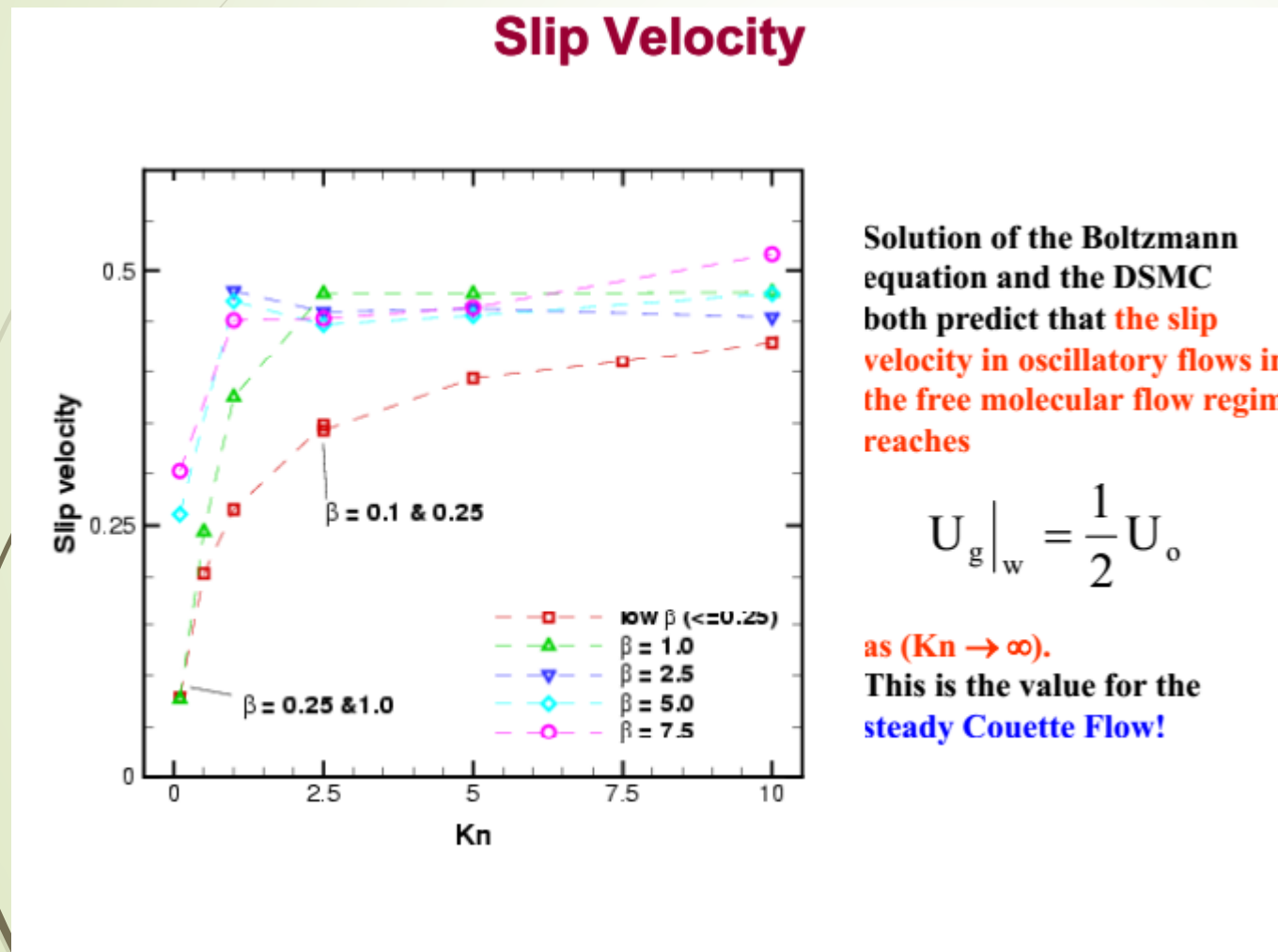
فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

جریان نوسانی با فرکانس بالا در رژیم آزاد مولکولی:



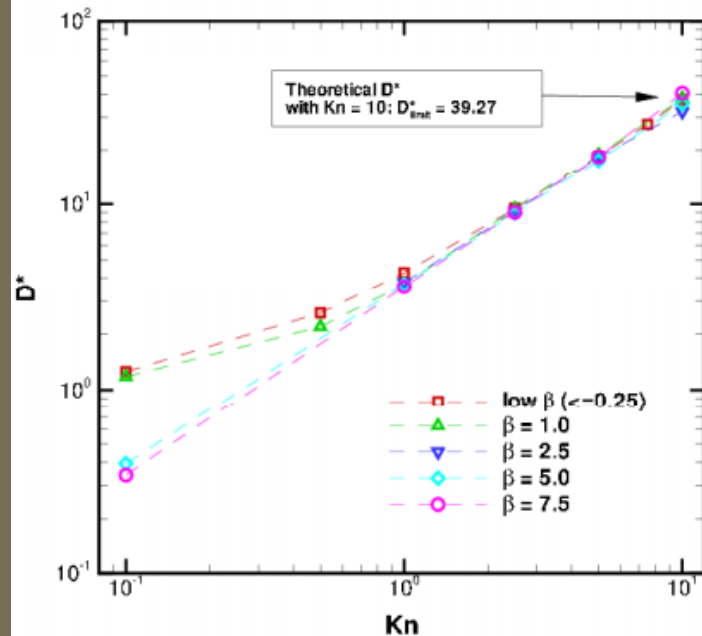
فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

جریان نوسانی با فرکانس بالا در رژیم آزاد مولکولی:



فصل سوم- جریانهای با نیروی محرکه برشی

جریان نوسانی با فرکانس بالا در رژیم آزاد مولکولی: اتلاف ویسکوز



• D^* increases with increased Kn

• D^* increases with decreased β

At $Kn=10$

$$D^* = \frac{5\pi}{16} Kn = 39.27$$

□ Viscous dissipation : $D = \frac{1}{\omega} \int_0^{2\pi} \tau_g(\omega t) u_g(\omega t) d(\omega t)$

□ Dimensionless Dissipation : $D^* = \frac{D_{cd}}{D}$

$$D_{cd} = \frac{\pi}{\omega} u_0^2 \left(\frac{\mu_0}{L} \right)$$

μ_0 : absolute viscosity of fluid

D_{cd} is from steady Couette Flow

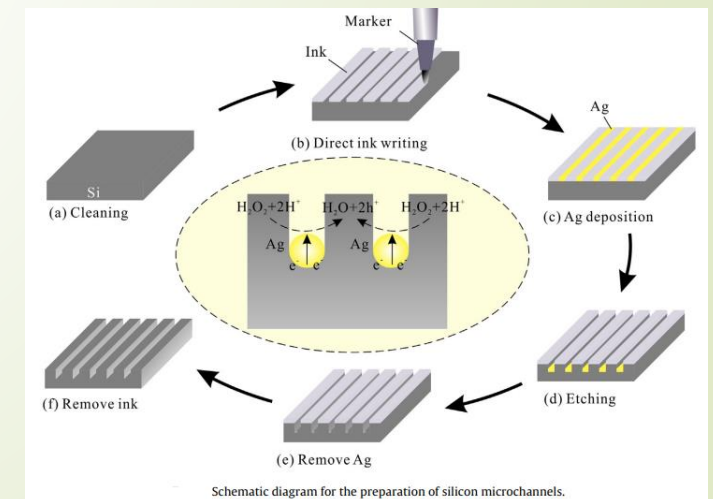
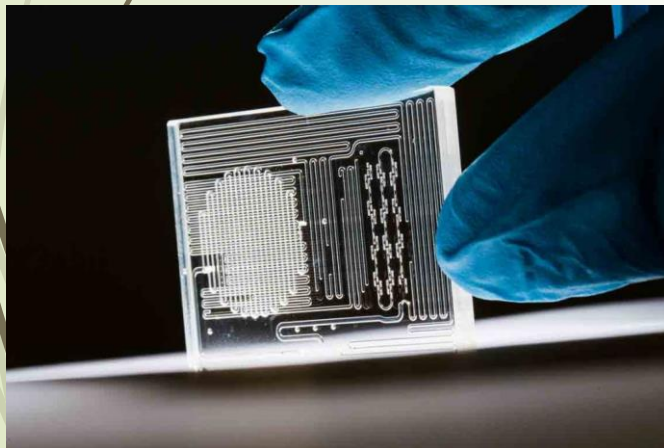
In the free molecular flow limit $\tau_{FM} = \frac{1}{2} \rho_0 u_0 \sqrt{\frac{2k_B T_w}{\pi m}}$

$$U_g|_w = \frac{1}{2} U_0$$

This gives: $D^* = \frac{5\pi}{16} Kn$ as $Kn \rightarrow \infty$

فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

- Pressure-Driven Flows = عامل جریان سیال اختلاف فشار است.
- هدف بررسی جریان در میکرولوله ها، میکروپایپها و میکروکانالها است که در مهندسی کاربرد دارند.
- به دلیل ساده بودن هندسه معمولا حل تحلیلی دارند.
- از رژیم لغزشی شروع می کنیم و سپس به رژیم گذار و آزاد مولکولی هم می رسیم.
- به دنبال مدل یکپارچه ای هستیم که بتواند با دقت مناسب دبی حجمی، پروفیل سرعت و توزیع فشار را برای لوله ها و کانالها در تمامی ناسننها پیش بینی کند.



فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

➤ رژیم جریان لغزشی: (با فرض جریان همدم / آدیاباتیک)

➤ جریان دوبعدی دائمی همدم ما بین دو صفحه موازی به طول L و فاصله h که به دلیل اختلاف فشار $\Delta P = P_i - P_o$ ایجاد شده را در نظر بگیرد ($h \ll L$).

➤ بقای جرم انتگرالی دائمی (سطح مقطع ثابت):

$$\rho_i u_i = \rho_o u_o$$

➤ بقای ممنتوم انتگرالی دائمی به ازای واحد عرض صفحه:

$$(P_i - P_o)h \times 1 - 2L \times 1 \times \tau = \dot{m}(u_o - u_i) \Rightarrow (P_i - P_o)h - 2L\tau = \dot{M}(u_o - u_i)$$

$$\Rightarrow \frac{\Delta P}{P_o} = 2 \frac{L \tau}{h P_o} + \frac{\dot{M}(u_o - u_i)}{h P_o} \quad \text{تقسیم رابطه بالا بر } h P_o$$

➤ که دبی جرمی به ازای واحد عرض صفحه: $\dot{M} = \rho_o u_o h = \rho_i u_i h$ و داریم: $\frac{\rho_i}{\rho_o} = \frac{P_i}{P_o} \Rightarrow u_o = u_i \frac{P_i}{P_o}$ گاز ایده آل دما ثابت

$$\Rightarrow \frac{\Delta P}{P_o} = 2 \frac{L \tau}{h P_o} + \frac{\rho_o u_o u_i \left(\frac{P_i}{P_o} - 1 \right)}{P_o} \Rightarrow \frac{\Delta P}{P_o} = 2 \frac{L \tau}{h P_o} + \frac{\rho_o u_o u_i \frac{\Delta P}{P_o}}{P_o}$$

بنابراین:

فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

با کمک تعریف عدد ماخ (سرعت صوت جذر γRT است پس برای ورود و خروج یکسان است):

$$\Rightarrow \frac{\Delta P}{P_o} = 2 \frac{L \tau}{h P_o} + \frac{u_o u_i \frac{\Delta P}{P_o}}{RT} \Rightarrow \frac{\Delta P}{P_o} = 2 \frac{L \tau}{h P_o} + \frac{u_o u_i \frac{\Delta P}{P_o}}{\frac{c_s^2}{\gamma}} \Rightarrow \frac{\Delta P}{P_o} = 2 \frac{L \tau}{h P_o} + \gamma \mathbf{M}_o \mathbf{M}_i \frac{\Delta P}{P_o}$$

$$\Rightarrow \frac{\Delta P}{P_o} (1 - \gamma \mathbf{M}_o \mathbf{M}_i) = 2 \frac{L \tau}{h P_o}$$

برای جریان در میکروکانالها (غیر از میکرونازلها) معمولاً عدد ماخ کوچک بوده و عملاً ترمهای اینرسی قابل صرفنظر هستند و در اینصورت برای نسبت منطری بزرگ ($L/h \gg 1$) میتوان افت فشار زیاد داشت.

برای اعداد ماخ کوچک روابط نیمه تحلیلی مبتنی بر تعادل افت فشار و نیروی درگ اصطکاکی قابل قبول است.

با ساده کردن ترم پخشی با تقریب اصطکاک دیواره $\tau = \mu u/h$ و $\mu/P_o = \lambda/c_s$ می توان به اهمیت اثرات تراکم پذیری در رژیم جریان

$$\frac{\Delta P}{P_o} (1 - \gamma \mathbf{M}_o \mathbf{M}_i) \approx 2 \frac{L \mu \frac{u}{h}}{h \mu \frac{c_s}{\lambda}} \Rightarrow \frac{\Delta P}{P_o} (1 - \gamma \mathbf{M}_o \mathbf{M}_i) \approx 2 \frac{L}{h} \mathbf{M}_o \mathbf{Kn}_o$$

لغزشی پی برد.

فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

مقایسه مرتبه بزرگی ترم اینرسی و پخشی:

$$\frac{\rho u \frac{\partial u}{\partial x}}{\mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}} \approx \frac{\rho u^2 / L}{\mu u / h^2} = \frac{\rho u h}{\mu} \times \frac{h}{L} = \frac{h}{L} \times \mathbf{Re}$$

پس برای رینولدزهای کوچک ($Re \leq O(1)$) در کانالهای با نسبت منطری بزرگ ($L/h \gg 1$) اثرات اینرسی در بقای ممنتم قابل صرفنظر است. پس می توان بقای ممنتم در راستای جریان را ساده تر نوشت:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + u \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + v \frac{\partial(\rho u)}{\partial y} = - \frac{dP}{dx} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \Rightarrow \frac{dP}{dx} = \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \text{عدد ثابت}$$

حداکثر تابع y حداکثر تابع x

$$\Rightarrow \frac{du}{dy} = \frac{1}{\mu} \frac{dP}{dx} y + A_1 \Rightarrow u = \frac{1}{\mu} \frac{dP}{dx} \frac{y^2}{2} + A_1 y + A_2$$

با دو بار انتگرالگیری نسبت به y پروفیل سرعت بدست می آید:

با اعمال شرط مرزی لغزشی در دیواره پایینی و شرط تقارن در وسط کانال (سرعت دیواره صفر است):

$$\begin{cases} y = 0 : u|_{y=0} - u_{wall} = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \left(\lambda \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\lambda^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \Big|_{y=0} \\ y = \frac{h}{2} : \frac{du}{dy} = 0 \Rightarrow 0 = \frac{1}{\mu} \frac{dP}{dx} \frac{h}{2} + A_1 \Rightarrow A_1 = - \frac{1}{\mu} \frac{dP}{dx} \frac{h}{2} \end{cases}$$

فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

با جایگذاری A1 بدست آمده در پروفیل سرعت در شرط مرزی بالایی، A2 هم محاسبه می شود:

$$\Rightarrow \frac{1}{\mu} \frac{dP}{dx} \times 0 + A_1 \times 0 + A_2 - 0 = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \left(\lambda \left(\frac{1}{\mu} \frac{dP}{dx} \times 0 - \frac{1}{\mu} \frac{dP}{dx} \frac{h}{2} \right) + \frac{\lambda^2}{2} \frac{1}{\mu} \frac{dP}{dx} \right)$$

$$\Rightarrow A_2 = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \frac{1}{\mu} \frac{dP}{dx} \left(-\frac{\lambda h}{2} + \frac{\lambda^2}{2} \right) \Rightarrow A_2 = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \frac{h^2}{2\mu} \frac{dP}{dx} (\text{Kn}^2 - \text{Kn})$$

با جایگذاری ثوابت A1 و A2 در پروفیل سرعت:

$$\Rightarrow u = \frac{1}{\mu} \frac{dP}{dx} \frac{y^2}{2} - \frac{1}{\mu} \frac{dP}{dx} \frac{h}{2} \times y + \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \frac{h^2}{2\mu} \frac{dP}{dx} (\text{Kn}^2 - \text{Kn})$$

نهایتاً:

$$\Rightarrow u = \frac{h^2}{2\mu} \frac{dP}{dx} \left[\frac{y^2}{h^2} - \frac{y}{h} + \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} (\text{Kn}^2 - \text{Kn}) \right]$$

علامت ترم نادسن به توان دو (که در نادسنهای بالا مهم می شود) بر عکس توان اول نادسن است.

فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

$$\dot{M} = \rho \int_0^h u dy = \frac{P}{RT} \int_0^h u dy$$

دبی جرمی بر واحد عرض در یک مقطع دلخواه:

با جایگذاری پروفیل سرعت و انتگرالگیری:

$$\Rightarrow \dot{M} = \frac{P}{RT} \frac{h^2}{2\mu} \frac{dP}{dx} \left[\frac{h^3}{3h^2} - \frac{h^2}{2h} + \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} (\mathbf{Kn}^2 - \mathbf{Kn}) h \right] = \frac{P}{RT} \frac{h^3}{2\mu} \frac{dP}{dx} \left[-\frac{1}{6} + \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} (\mathbf{Kn}^2 - \mathbf{Kn}) \right]$$

افت فشار ثابت خطی: $-\frac{dP}{dx} = \frac{P_i - P_o}{L}$ و تعریف می کنیم: $\Pi = \frac{P_i}{P_o}$ ضمناً می توان نوشت: $\mathbf{Kn} = \mathbf{Kn}_o \times \frac{P_o}{P}$

پس داریم (در ترم اول داخل براکت بجای P میانگین فشار دو سمت قرار گرفته است):

$$\Rightarrow \dot{M} = \frac{1}{RT} \frac{h^3}{2\mu} \frac{P_i - P_o}{L} \left[\frac{P}{6} + P \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} (\mathbf{Kn} - \mathbf{Kn}^2) \right] = \frac{1}{RT} \frac{h^3}{2\mu} \frac{P_i - P_o}{L} \left[\frac{P_i + P_o}{12} + \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \left(\mathbf{Kn}_o \times P_o - P \left(\frac{P_o}{P} \right)^2 \mathbf{Kn}_o^2 \right) \right]$$

$$\Rightarrow \dot{M} = \frac{h^3 P_o^2}{24RT\mu L} \left[(\Pi^2 - 1) + 12 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \left(\mathbf{Kn}_o (\Pi - 1) - \frac{P_i - P_o}{P} \mathbf{Kn}_o^2 \right) \right]$$

فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

رابطه کتاب برای دبی جرمی بر واحد عرض در یک مقطع دلخواه (ترم آخر سمت راست تفاوت دارد):

$$\dot{M} = \frac{h^3 P_o^2}{24\mu RTL} [(\Pi^2 - 1) + 12 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} (\text{Kn}_o (\Pi - 1) - \text{Kn}_o^2 \log_e \Pi)]$$

با فرض رقیق نبودن جریان (عدم لغزش):

$$\dot{M}_{ns} = \frac{h^3 P_o^2}{24\mu RTL} (\Pi^2 - 1)$$

بنابراین:

$$\frac{\dot{M}}{\dot{M}_{ns}} = 1 + 12 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \frac{\text{Kn}_o}{\Pi + 1} - 12 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \text{Kn}_o^2 \frac{\log_e \Pi}{\Pi^2 - 1}$$

فرمول بدست آمده با نتایج آزمایشگاهی اصلا همخوانی ندارد! در واقعیت در رژیم گذار دبی جرمی بیش از پیش بینی لغزش مرتبه اول است.

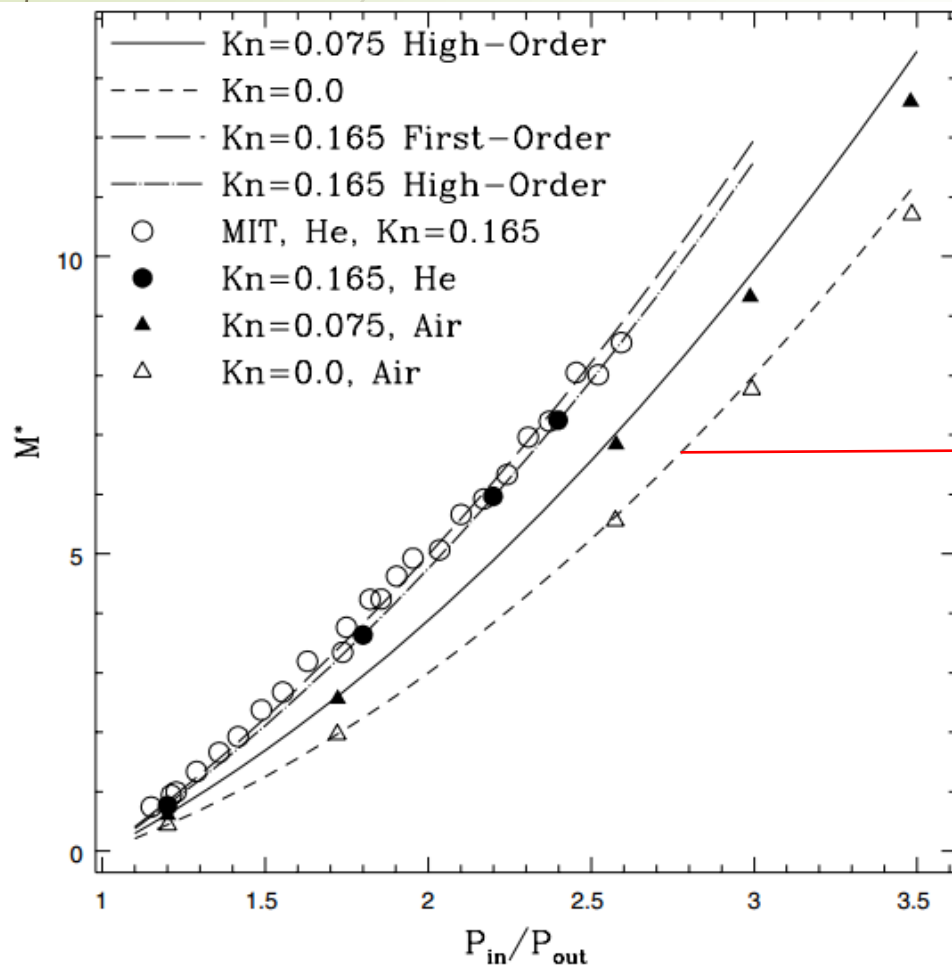
توزیع فشار:

$$1 - \tilde{P}^2 + 12 \frac{1 - \sigma_v}{\sigma_v} \text{Kn}_o (1 - \tilde{P}) + 12 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \text{Kn}_o^2 \log_e (\tilde{P}) = B(L - x)$$

B یک ثابت است به نحوی که $\tilde{P}(0) = \Pi$ و ضمناً $\tilde{P} = P/P_o$

فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

مقایسه دبی جرمی با نتایج آزمایشگاهی Arkilic و همکارانش (۱۹۹۷) (در شکل با دایره توخالی نشان داده شده) و نتایج شبیه سازی با کد μFlow از طریق ترسیم دبی جرمی نرمالایز شده (M^*) بر حسب نسبت فشار (II):



$$M^* = \frac{\dot{M} 24 \mu R T L}{h^3 P_o^2}$$

با افزایش اثرات رقت (افزایش Kn)، دبی جرمی زیاد شده است.

دبی جرمی با فرض
عدم لغزش (\dot{M}_{ns}) طبق
فرمول اسلاید قبلی

روابط اسلاید قبلی (خطوط) با نتایج شبیه سازی (ناویر-استوکس تراکم پذیر کامل)

همخوانی دارد.

فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

برای بررسی بهتر تفاوتها، نسبت دبی جرمی لغزشی به دبی جرمی بدون لغزش بر حسب نسبت فشار بررسی می گردد: (مجدداً نتایج

$$\frac{\dot{M}}{\dot{M}_{ns}} = 1 + 12 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \frac{Kn_0}{\Pi + 1} - 12 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} Kn_0^2 \frac{\log_e \Pi}{\Pi^2 - 1}$$

آزمایشگاهی Arkilic و همکارانش (۱۹۹۷) در شکل با دایره نشان داده شده است)

نتایج آزمایشگاهی برای هلیوم حداکثر ۱۰٪ با منحنی فرمول مرتبه اول دارد که خطا برای

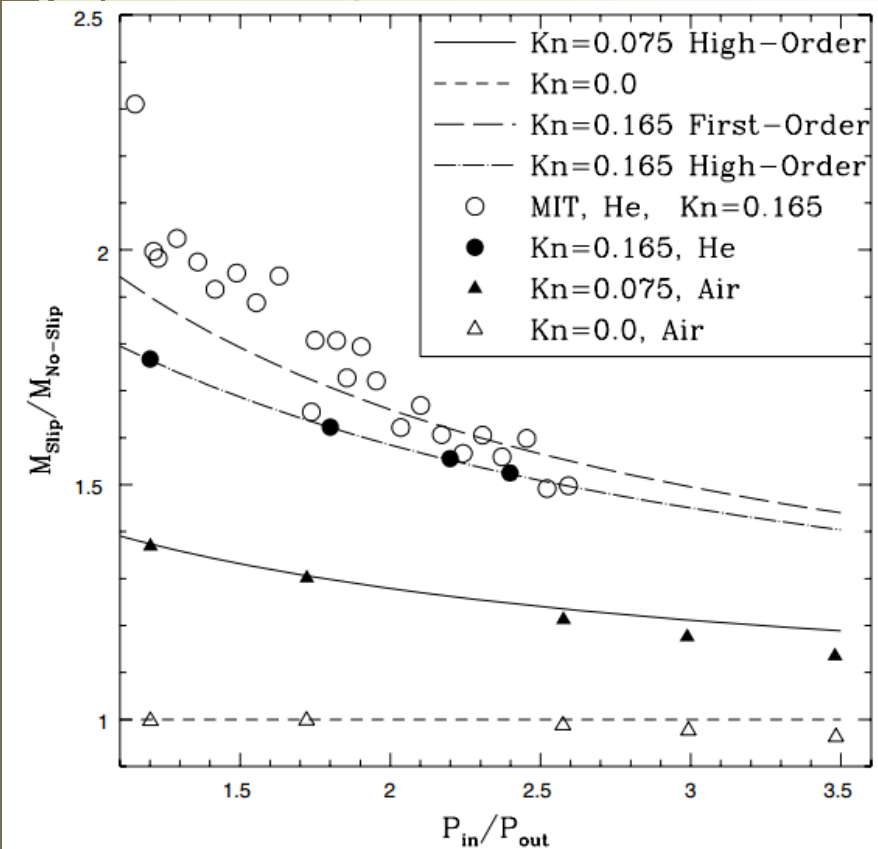
نسبتهای فشار کمتر، بیشتر است.

افزایش دبی ناشی از اثرات لغزش با افزایش نسبت فشار، کاهش می یابد.

اختلاف منحنی فرمول مرتبه اول و دوم حداکثر ۸٪ است که با افزایش نسبت فشار، کاهش می یابد.

نتایج شبیه سازی برای هلیوم (دایره توپر) با منحنی فرمول مرتبه دوم تطابق دارد، در حالیکه برای

هوا اختلاف دارند علی الخصوص در نسبت فشارهای بالا (چون در فرمول اثرات تراکم پذیری لحاظ نشده).

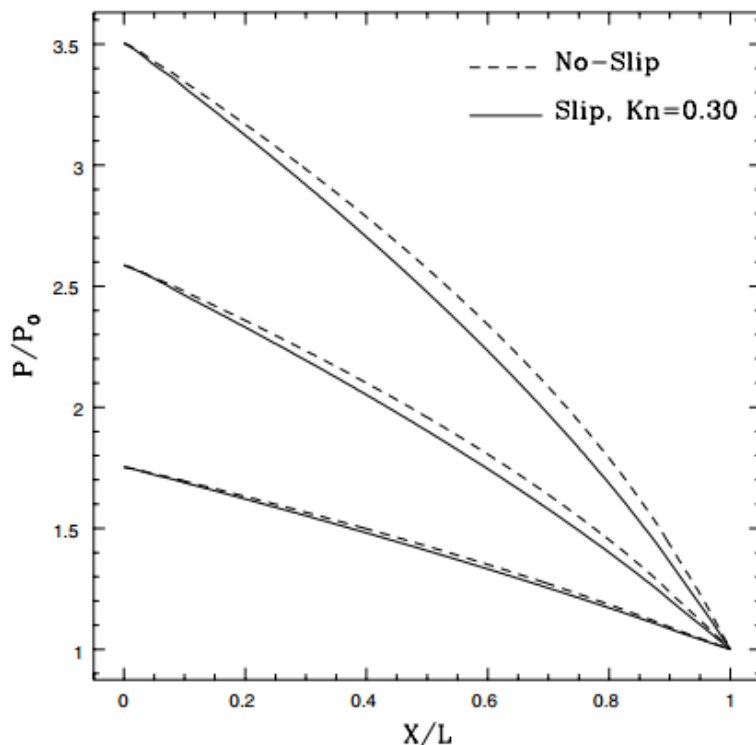


فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

توزیع فشار در کانال:

آزمایشات Liu و همکارانش و همچنین آزمایشات Pong و همکارانش نشان داده که توزیع فشار در میکروکانالها غیرخطی است.

نتایج شبیه سازی برای توزیع فشار برای جریان هوا در طول کانال برای سه نسبت فشار مختلف در شکل دیده می شود که با نتایج جریان تراکم پذیر غیرلغزشی مقایسه شده است.



انحنای حل غیرلغزشی تراکم پذیر بیشتر است یعنی اثرات رقت، انحنای توزیع فشار را کاهش داده است.

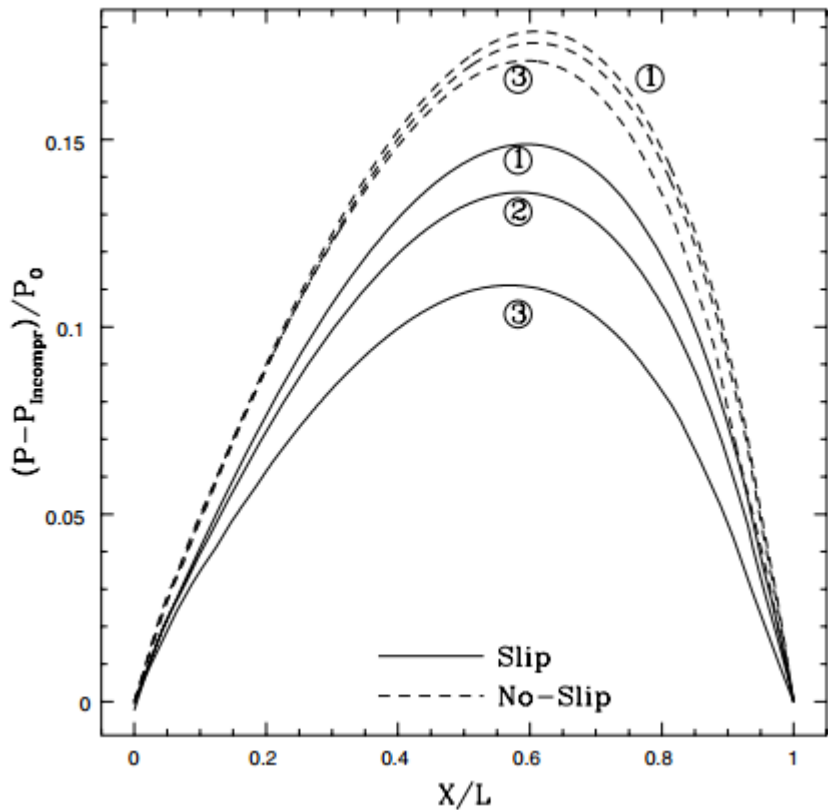
برای جریان هوای رقیق شده ($Kn=0.3$)، انحنای توزیع فشار برای نسبت فشارهای بالاتر، بیشتر است.

برای نسبت فشار کمتر از 1.2، توزیع فشار عملاً خطی شده است (مشابه جریان تراکم ناپذیر).

فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

توزیع فشار در کانال:

تاثیر رقت بر انحراف از افت فشار خطی برای نسبت فشار $\Pi=2.58$ برای سه عرض کانال مختلف بررسی شده است (افت فشار خطی مربوط به جریان تراکم ناپذیر است). (فشار خروجی اتمسفریک فرض شده)



Case	$h(\mu\text{m})$	Re	Kn_o	Π	M_i	M_o
1	0.923	3.367	0.0	2.574	0.091	0.247
	0.923	4.144	0.075	2.576	0.116	0.279
2	0.615	1.522	0.0	2.583	0.064	0.168
	0.615	2.036	0.110	2.585	0.083	0.198
3	0.226	0.208	0.0	2.587	0.026	0.063
	0.226	0.378	0.300	2.586	0.041	0.093

نتایج شبیه سازی نشان می دهد با افزایش رقت (Kn)، اختلاف با افت فشار خطی کم شده است که

با نتایج آزمایشگاهی Pong و همکارانش (که برای هلیوم و نیتروژن بوده) تناقض دارد!

بر اساس نتایج شبیه سازی با افزایش رقت، محل وقوع ماکزیمم انحراف به ورودی نزدیکتر می شود.

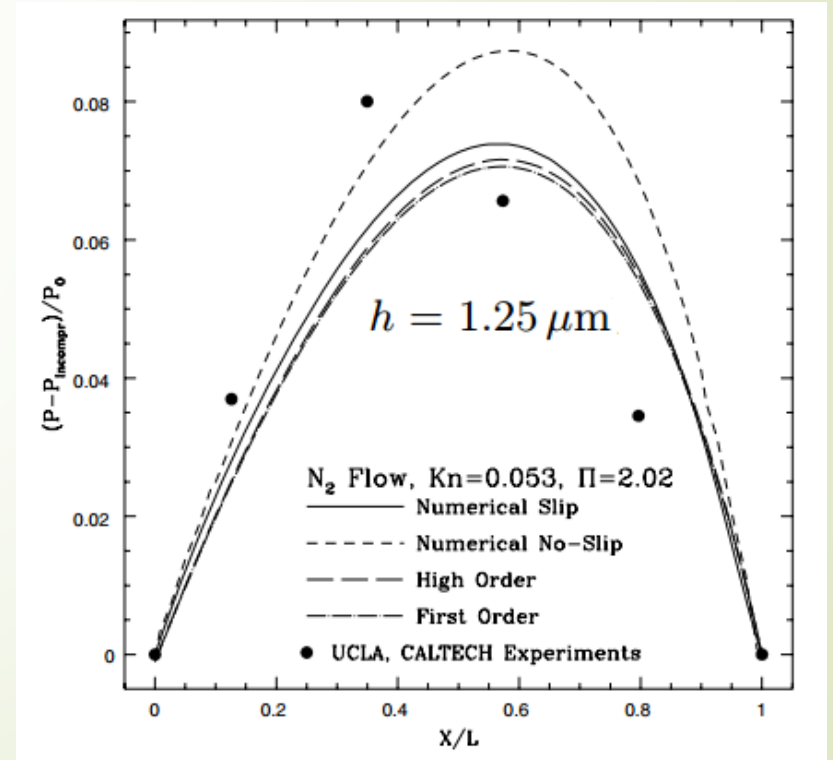
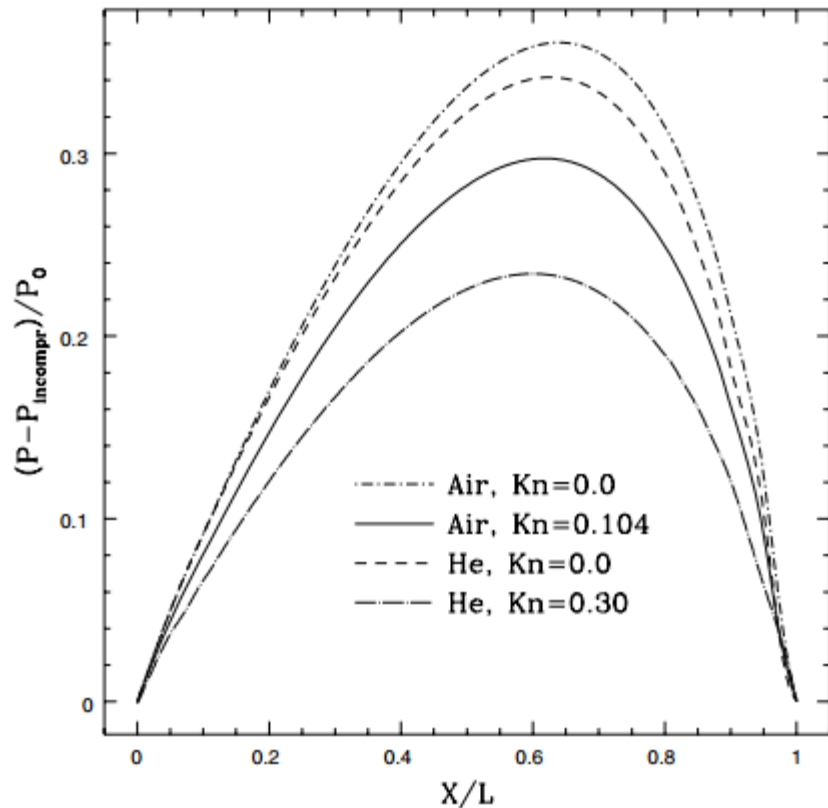
فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

انحراف از افت فشار خطی:

طبق نمودار سمت چپ (نتایج شبیه سازی برای هلیوم و هوا)، اثر رقت بر عکس تراکم پذیری است.

طبق نمودار راست، ماکزیمم انحراف برا نتایج آزمایشگاهی به ورودی نزدیکتر است.

$h = 0.65 \mu\text{m}$, $\Pi = P_i/P_o = 3.5$, $P_o = 1 \text{ atm}$



فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

مقایسه لغزش سرعت روی دیواره ها (نرمالایز شده با سرعت در مرکز کانال در ورودی):

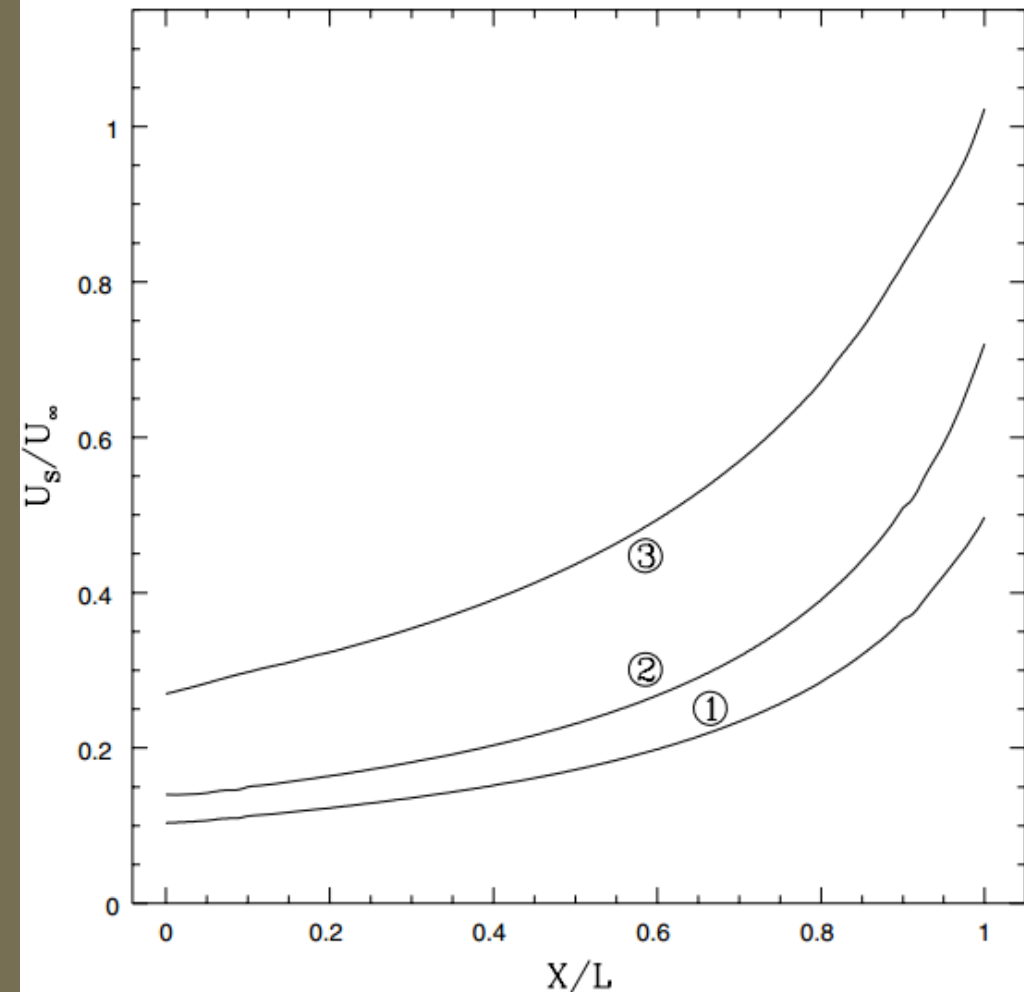
جریان هوا در سه حالت زیر:

Case	$h(\mu\text{m})$	Re	Kn_o	Π	M_i	M_o
1						
	0.923	4.144	0.075	2.576	0.116	0.279
2						
	0.615	2.036	0.110	2.585	0.083	0.198
3						
	0.226	0.378	0.300	2.586	0.041	0.093

در طول کانال افت فشار داریم که سبب افزایش λ و در نتیجه نادسن موضعی می شود.

در طول کانال چگالی کم می شود پس برای بقای جرم، سرعت متوسط زیاد می شود.

دو عامل بالا سبب افزایش سرعت لغزشی شده است.



فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

- نکات و محدودیتهای روابط اسلاید ۷۷:
- در رژیم جریان لغزشی، اصلاحات مرتبه دوم در دبی و توزیع فشار قابل صرفنظر است و فرمول معادل مرتبه اول به سادگی با صرفنظر از ترم Kn^2 بدست می آید.
- در استحصال روابط فرض شده بود که در هر مقطع عرضی فشار و چگالی ثابت است (از تغییرات در راستای عمود بر جریان صرفنظر شده).
- اثرات حرارتی لحاظ نشده اند.
- پس روابط تحلیلی بدست آمده برای جریان با ماخ پایین ($Mo \leq 0.1$) قابل اعمال است.
- میزان اختلاف نتایج شبیه سازی (با معادلات ناویر-استوکس کامل با در نظر گرفتن تغییرات عرضی چگالی) با نتایج روابط تحلیلی تقریباً 20% می باشد.
- در روابط تحلیلی اثرات ورودی هم لحاظ نشد (اثرات ورودی در میکروفیلترها و کانالهای کوتاه مهم است).

فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

جریانهای تراکم پذیر آدیاباتیک (تئوری Fanno):

ماده اصلی اغلب اجزای میکروسیستمها سیلیکون است که هادی خوبی برای گرما می باشد. بنابراین فرض جریان همدم (دما ثابت) برای میکروسیستمهای سیلیکونی منطقی است. در حالیکه برای مواد عایق حرارتی نظیر شیشه، فرض جریان آدیاباتیک کاربرد دارد.

تئوری فانو یک بعدی برای کانال با مقطع ثابت است. تغییرات عدد ماخ:
$$\frac{dM^2}{dx} = \frac{\gamma M^4 (1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2)}{1 - M^2} \frac{4f}{D}$$

با دانستن عدد ماخ در طول کانال، تغییرات نسبت فشار و چگالی هم معلوم می شوند:

$$\frac{P}{P_{in}} = \frac{M_{in}}{M} \left[\frac{(1 + \frac{\gamma-1}{2} M_{in}^2)}{(1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2)} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\frac{\rho}{\rho_{in}} = \frac{M_{in}}{M} \left[\frac{(1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2)}{(1 + \frac{\gamma-1}{2} M_{in}^2)} \right]^{\frac{1}{2}}$$

اختلاف با نتایج تجربی: اثرات تراکم پذیری، اثرات رقت و اثرات دو بعدی بودن.

فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

مقایسه مدل‌های لغزشی با نتایج DSMC (دیواره‌ها دیفیوز):

پیشتر نتایج مدل‌های لغزشی مبتنی بر تئوری محیط پیوسته با نتایج آزمایشگاهی مقایسه شد. به دلیل نتایج آزمایشگاهی ناکافی، برای بررسی

بیشتر مدلها از نتایج شبیه سازی مستقیم مونت کارلو استفاده می کنیم. مقایسه برای $L/h=20$ با نادسن خروجی 0.2 انجام می شود.

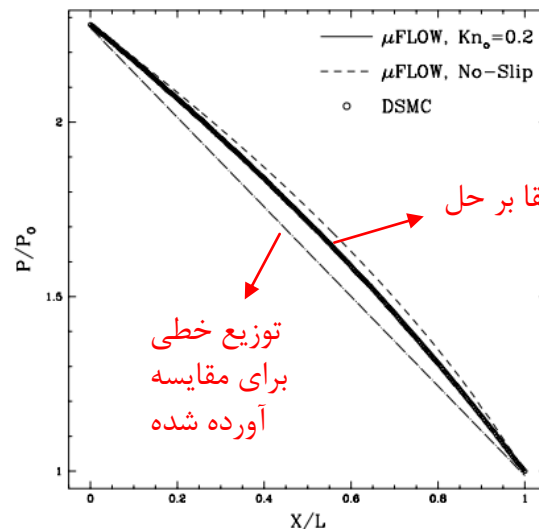
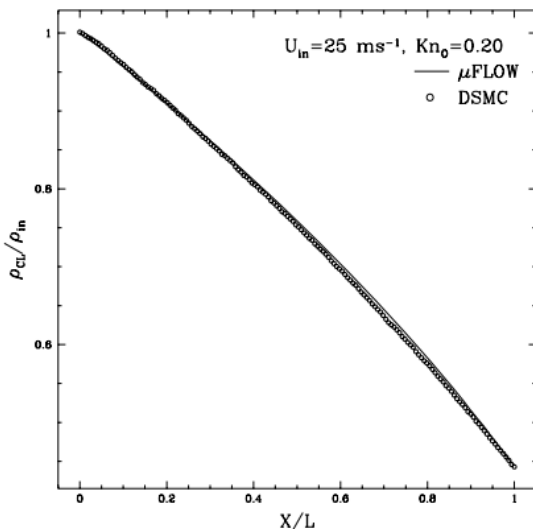
نتایج شبیه سازی با کد μFlow (روش المان طیفی) به عنوان یک روش ماکروسکوپیک با نتایج روش DSMC (به عنوان روشی

میکروسکوپیک) برای تغییرات چگالی و فشار در راستای کانال انطباق دارد.

$$\Pi=2.28$$

توزیع فشار غیرخطی است.

رقت بر انحنای توزیع فشار تاثیر معکوس دارند.



حل μFlow لغزشی دقیقاً بر حل
DSMC منطبق شده

توزیع خطی
برای مقایسه
آورده شده

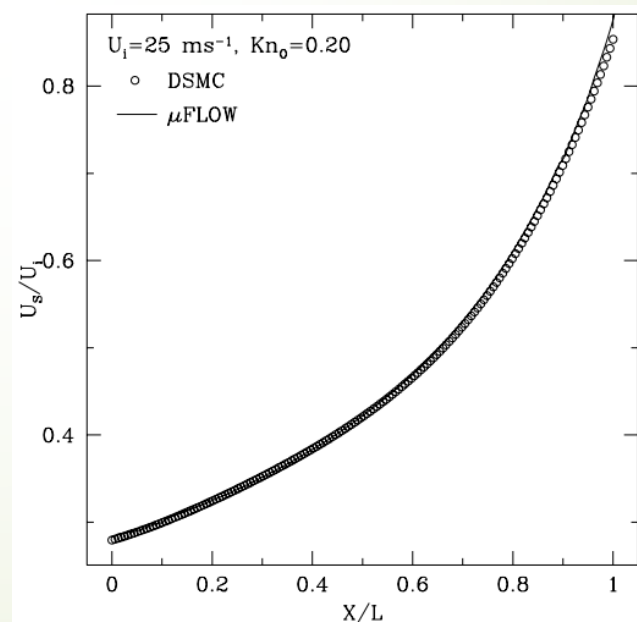
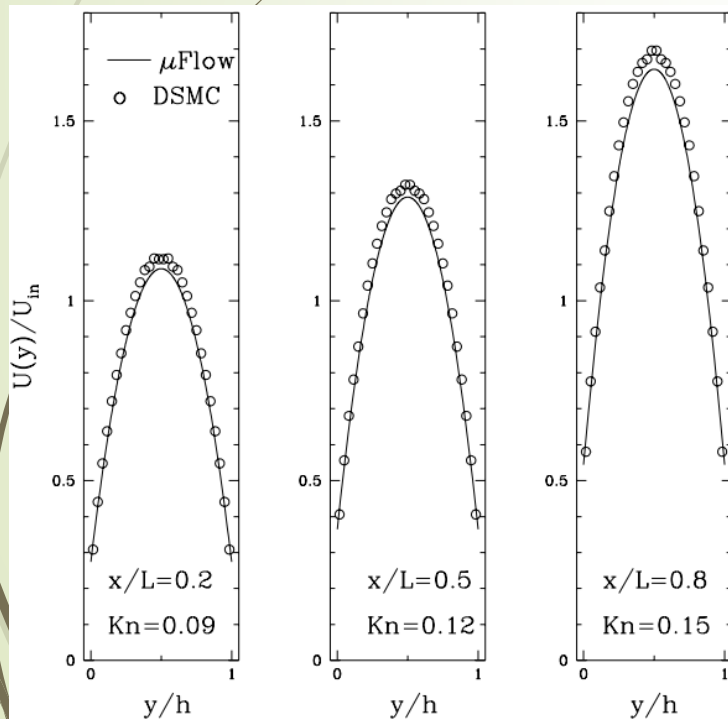
فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

مقایسه مدل‌های لغزشی با نتایج DSMC برای نسبت فشار $\Pi=2.28$

پروفیل سرعت بی بعد شده با سرعت ورودی مرجع در سه مقطع در طول کانال مقایسه شده است که نتایج همخوانی دارند (شکل چپ).

پروفیل سرعت بدست آمده از هر دو روش سهموی می باشند.

سرعت لغزشی (شکل سمت راست) بدست آمده از هر دو روش هم تطابق دارد.



فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

نتایج DSMC با معادله بولتزمن خطی شده (Ohwada و همکارانش ۱۹۸۹) برای $Kn=0.1$ (رژیم لغزشی) تطابق دارد.

مقایسه حل‌های تحلیلی با در نظر گرفتن شرایط مرزی لغزشی مختلف:

$$U_s - U_{wall} = C_1 Kn \left(\frac{\partial U}{\partial n} \right)_s - C_2 Kn^2 \left(\frac{\partial^2 U}{\partial n^2} \right)_s$$

توزیع سرعت داخل کانال طویل برای جریان همدم با فرض دیواره دیفیوز:

$$U(x, y) = -\frac{h^2}{2\mu} \frac{dP}{dx} \left[-\frac{y^2}{h^2} + \frac{y}{h} + (C_1 Kn + 2C_2 Kn^2) \right]$$

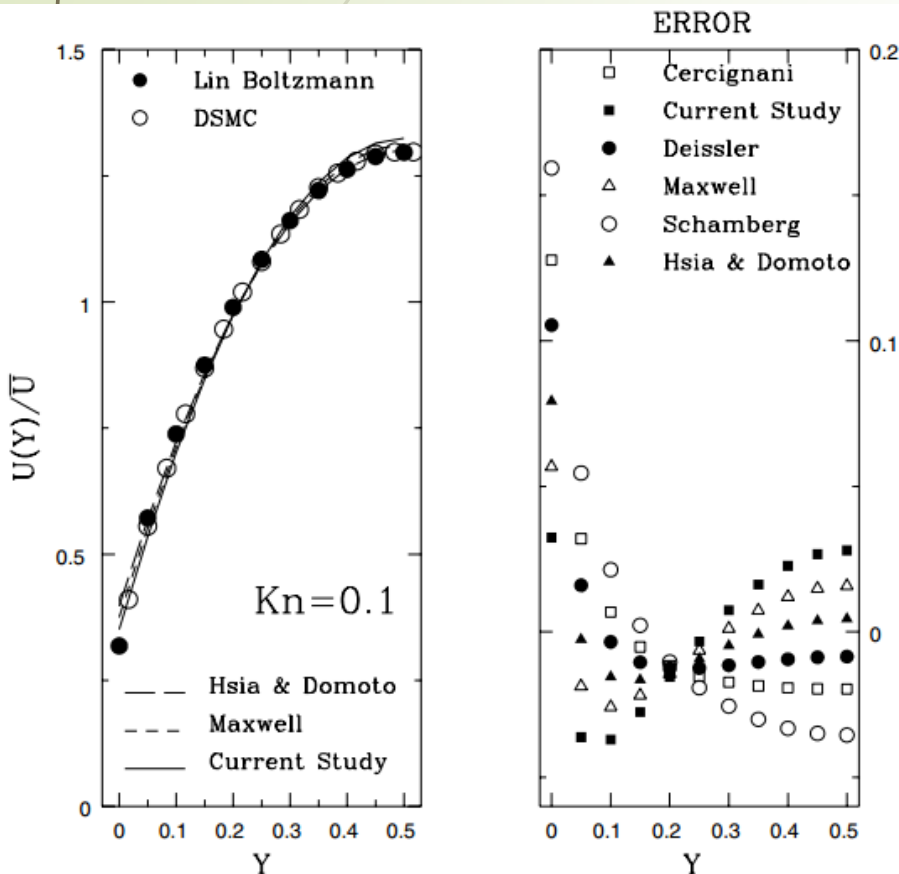
چون نادسن در طول کانال تغییر می کند پس پروفیل سرعت تابع X هم هست.

دبی حجمی (چون چگالی از ورود تا خروج کاهش می یابد، Q در طول کانال افزایش می یابد):

$$\dot{Q} \text{ یا } Q(x) = -\frac{h^3}{2\mu} \frac{dP}{dx} \left[\frac{1}{6} + C_1 Kn + 2C_2 Kn^2 \right]$$

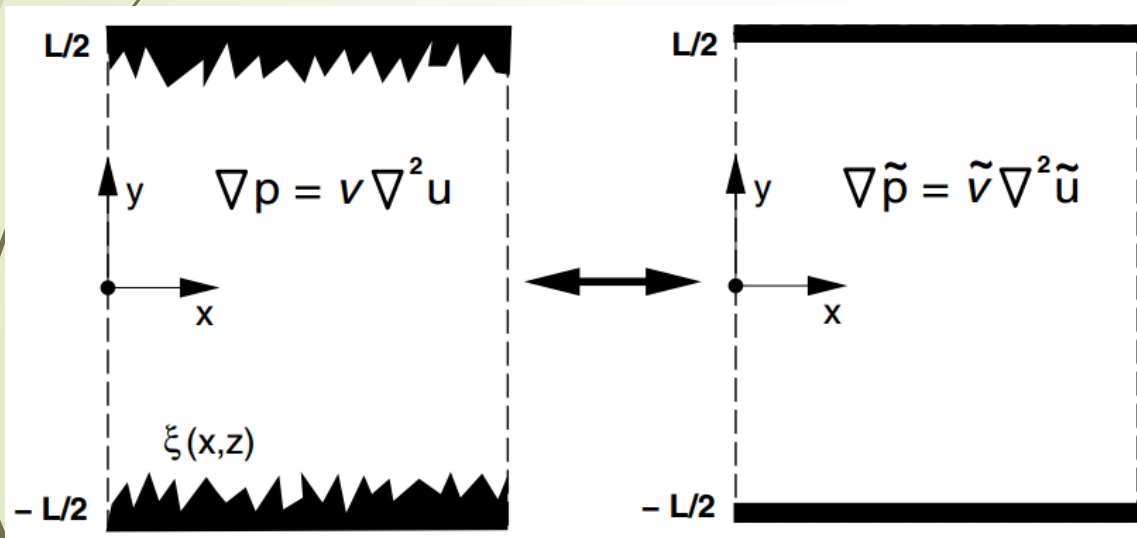
سرعت نرمالایز شده:

$$U^*(y, Kn) \equiv \frac{U(x, y)}{\bar{U}(x)} = \frac{\left[-\frac{y^2}{h^2} + \frac{y}{h} + (C_1 Kn + 2C_2 Kn^2) \right]}{\frac{1}{6} + C_1 Kn + 2C_2 Kn^2}$$



فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

- بهترین پیش بینی از لحاظ تخمین سرعت لغزشی و توزیع سرعت متعلق به مدل $C1 = 1$ و $C2 = -0.5$ است.
- این مدل در تخمین دبی حجمی با آزمایشات تناقض دارد چون $C2$ منفی است.
- سایر مدل‌های مرتبه دوم (چون $C2$ مثبت دارند)، دبی را بهتر تخمین می‌زنند، در حالیکه در پیش بینی پروفیل سرعت مشکل دارند.
- تاثیر زبری سطح با افزایش نادسن اهمیت بیشتری می‌یابد چون هندسه بر مسیر ذرات تاثیر بیشتری می‌گذارد. یک روش برای لحاظ کردن اثرات زبری سطح، انتقال غیرخطی دستگاه مختصات است.



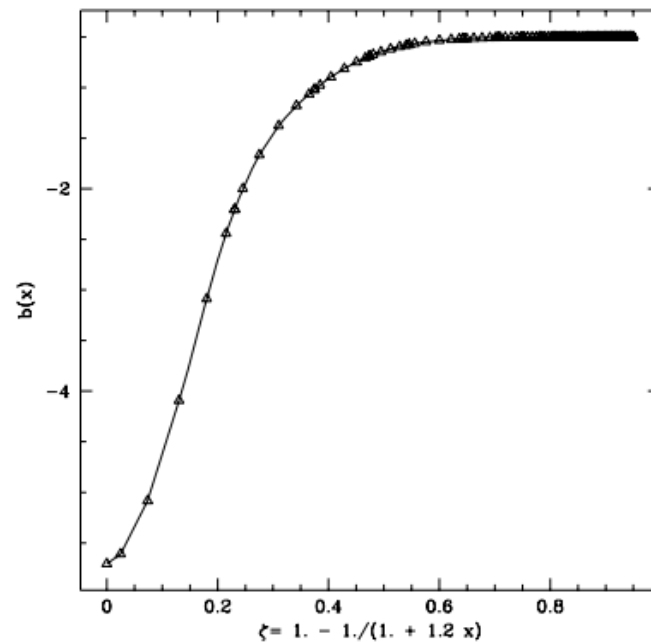
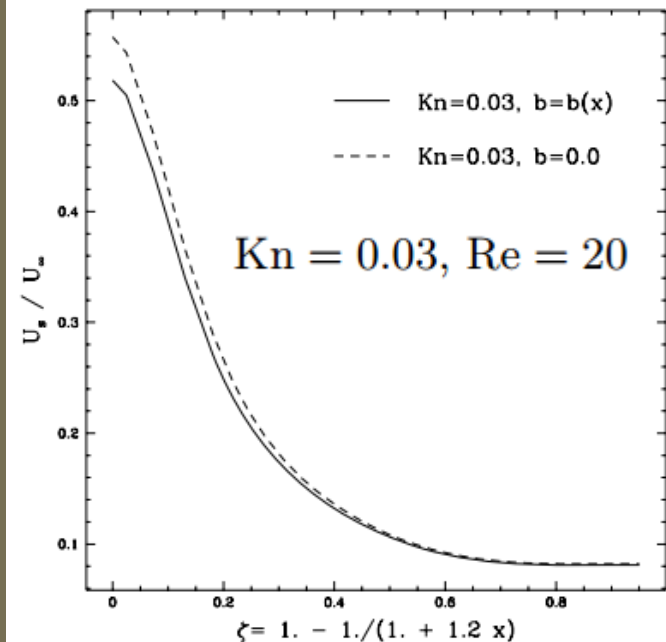
فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

جریان ورودی:

جریان در ابتدای دو صفحه موازی ساکن را به عنوان نمونه ای از جریانهای در حال توسعه در نظر بگیرید. اثرات تراکم پذیری صرف نظر شده و فقط اثرات رقت بر جریان در حال توسعه بررسی می گردد (پروفیل سرعت یکنواخت در ورودی در نظر گرفته می شود).

برای هر دو مدل مرتبه اول و مرتبه بالاتر سرعت لغزشی حدود 50% سرعت یکنواخت ورودی است یعنی اثرات رقت در ورودی کانال بسیار غالب است.

برای جریان توسعه یافته سرعت لغزشی به زیر 10% می رسد.

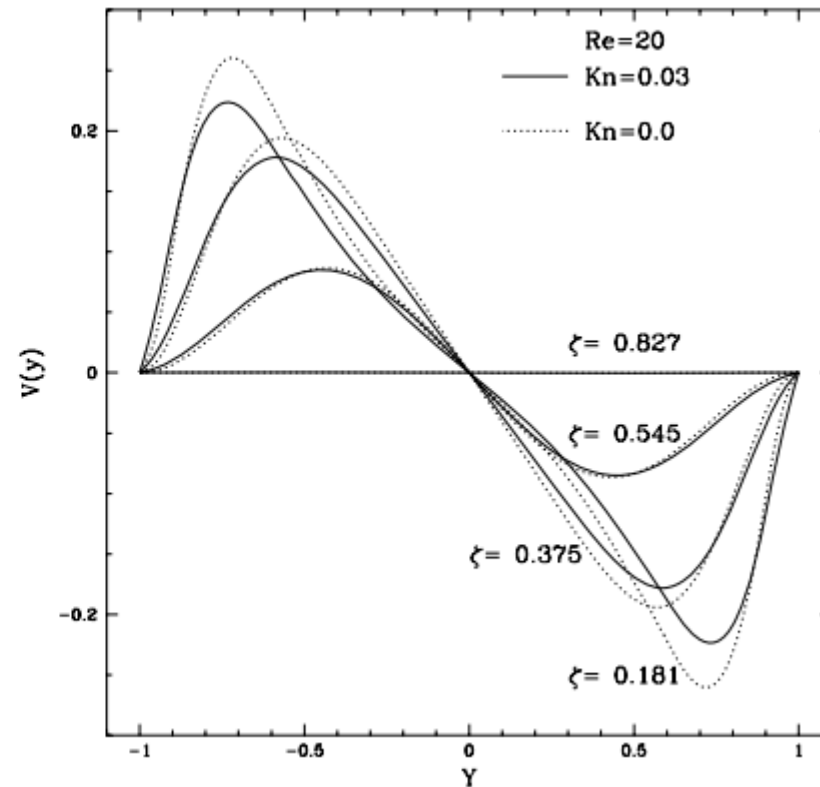
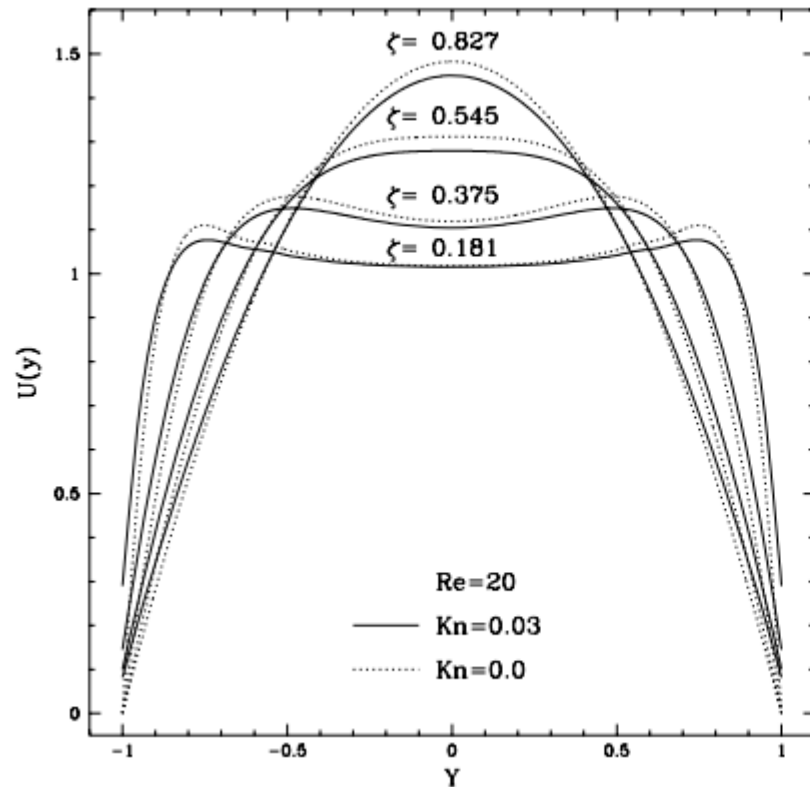


$$\zeta = 1 - \frac{1}{1 + 1.2\bar{x}}$$

فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

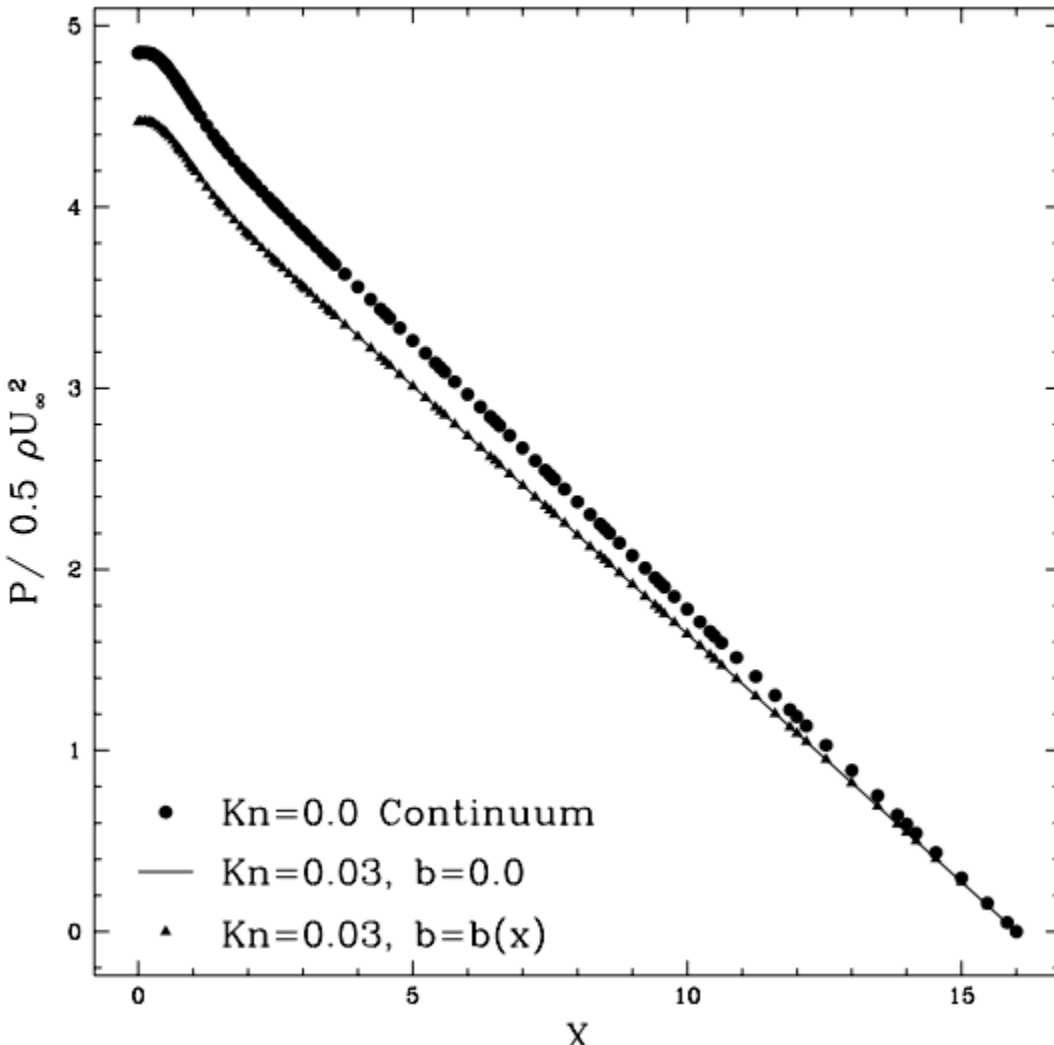
در ابتدای لوله (قسمت توسعه نیافته) سرعت ماکزیمم در وسط کانال نیست.

مقدار سرعت ماکزیمم با شرط لغزشی کمتر از حالت غیرلغزشی است.



فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

توزیع فشار در طول خط مرکزی کانال ($X=x/h$):



افت فشار در خط تقارن کانال در نزدیکی ورودی سهموی است.

افت فشار برای جریان لغزشی و بدون لغزش از $X=0.25$ خطی می شود.

شرط مرزی لغزشی مرتبه بالا تاثیری در توزیع فشار در خط مرکزی کانال ندارد.

(مشاهده می شود $b=0$ و $b=b(x)$ منطبق اند)

افت فشار برای جریان لغزشی (برای شرایط با دبی جرمی یکسان) کمتر است.

فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

مثال) جریان هوا از فاصله اندک $h=0.003\text{mm}$ ما بین دو صفحه نسبتاً بزرگ ساکن به طول $L=1\text{cm}$ عبور می کند. فشار دو سمت 200kpa و 101kpa می باشد. دبی جرمی عبوری به ازای واحد عرض را بیابید (دما را 20°C فرض کنید و قطر مولکولهای هوا را همان قطر مولکولها در شرایط استاندارد در نظر بگیرید).

حل) بدیهی است که جریان از قسمت پر فشار به سمت کم فشار ایجاد می شود. پس فشار خروجی 101kpa است. حال با کمک معادله حالت گاز ایده آل، چگالی تعداد مولکولهای هوا در خروجی را محاسبه می کنیم:

$$p_0 = n_0 k_B T \Rightarrow n_0 = \frac{101 \times 10^3 \text{ pa}}{1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K} \times (273.15 + 20) \text{ K}} = 2.5 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}$$

سپس طول مسیر آزاد میانگین برای هوا و از روی آن عدد نادسن در خروجی در این شرایط محاسبه می گردد (طول مشخصه فاصله صفحات است):

$$\left. \begin{array}{l} \lambda_0 = (2^{1/2} \pi d^2 n_0)^{-1} \\ d = 3.7 \times 10^{-10} \text{ m} \end{array} \right\} \Rightarrow \lambda_0 = \frac{1}{\sqrt{2} \times \pi \times 13.69 \times 10^{-20} \times 2.5 \times 10^{25}} = 6.6 \times 10^{-8} \text{ m}$$

$$\Rightarrow \text{Kn}_0 = \frac{\lambda_0}{h} = \frac{6.6 \times 10^{-8} \text{ m}}{3 \times 10^{-6} \text{ m}} = 0.022$$

پس رژیم جریان لغزشی است و از فرمول اسلاید ۷۷ می توان استفاده کرد.

فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

ادامه حل) از فرمول اسلاید ۷۷ می توان دبی جرمی بر واحد عرض (عمق) صفحات را با فرض دیواره دیفیوز ($\sigma_v=1$) تخمین زد:

$$\dot{M} = \frac{h^3 P_0^2}{24RT\mu L} \left[(\Pi^2 - 1) + 12 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} (\text{Kn}_o (\Pi - 1) - \text{Ln}\Pi \times \text{Kn}_o^2) \right], \Pi = \frac{P_i}{P_o} = 1.98$$

نهایتاً عددگذاری:

$$\Rightarrow \dot{M} = \frac{(3 \times 10^{-6})^3 \times 101000^2}{24 \times 287 \times 293.15 \times 1.8 \times 10^{-5} \times 0.01} \left[(1.98^2 - 1) + 12 \frac{2 - 1}{1} (0.022 \times (1.98 - 1) - \text{Ln}1.98 \times 0.022^2) \right] = 2.41 \times 10^{-6} \text{ kg/m.s}$$

فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

➤ رژیم گذار و رژیم آزاد مولکولی:

➤ به دنبال مدل یکپارچه ای هستیم که بتوان با آن جریانهای با نیروی محرکه فشاری در لوله ها و کانالها در رژیمهای گذار و آزاد مولکولی را مدلسازی کرد.

➤ دبی جرمی مطابق با روابط بدست آمده در شرایط عدم لغزش و لغزشی با معرفی و در نظر گرفتن ضریب رقت (rarefaction coefficient) اصلاح می شوند (Beskok & Karniadakis, 1999).

➤ تحقیقات زیادی در زمینه حل نیمه تحلیلی و عددی معادلات بولتزمان خطی شده برای رژیم گذار و آزاد مولکولی انجام شده که در آنها انتگرال برخورد بر اساس مدل BGK (Bhatnagar) و همکارانش (۱۹۵۴) یا مدل کره سخت و مدلهای ماکسولی (Huang) و همکارانش (۱۹۹۷) ساده سازی شده اند.

➤ برای بررسی اعتبار روشهای لغزشی بر مبنای محیط پیوسته در رژیم گذار، دو مدل در نظر می گیریم:

$$\begin{cases} \text{Model A: } U_s - U_{wall} = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \left(\mathbf{Kn} \left(\frac{\partial U}{\partial n} \right)_s + \frac{\mathbf{Kn}^2}{2} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial n^2} \right)_s \right) : C_1 = 1.0, C_2 = -0.5 \\ \text{Model B: } U_s - U_{wall} = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \frac{\mathbf{Kn}}{1 - b\mathbf{Kn}} \left(\frac{\partial U}{\partial n} \right)_s \end{cases}$$

فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

بررسی اعتبار روشهای لغزشی مختلف در رژیم گذار در $Kn=0.6$:

از لحاظ توزیع سرعت:

مقایسه پروفیل سرعت با حل DSMC و بولتزمان خطی شده.

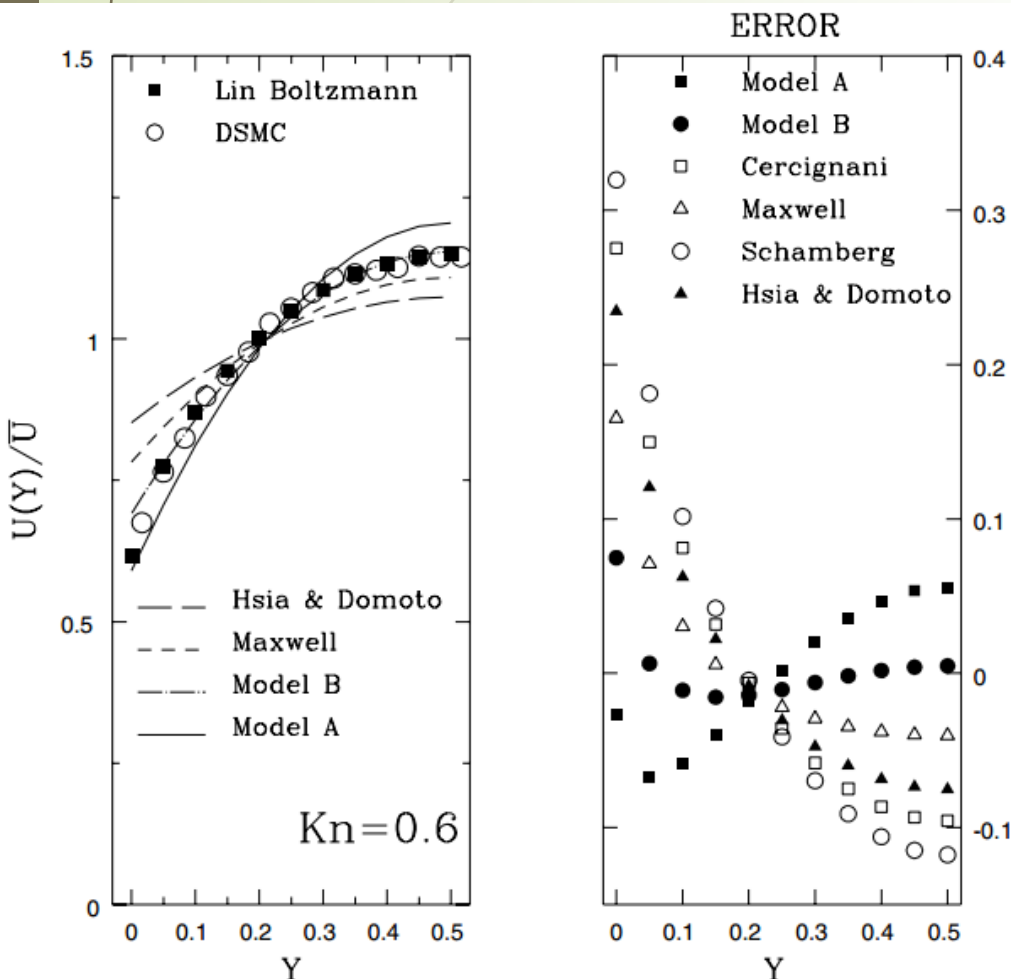
خطای روش ماکسول و خطای سایر روشها از مدل A و B بیشتر است.

مدل B در مرکز کانال بهترین جواب را می دهد در حالیکه در مجاورت دیواره انحراف دارد.

مدل A در کنار دیواره جواب بهتری می دهد.

$$U_s - U_{wall} = C_1 Kn \left(\frac{\partial U}{\partial n} \right)_s - C_2 Kn^2 \left(\frac{\partial^2 U}{\partial n^2} \right)_s$$

Author	C_1	C_2
Cercignani (Cercignani and Daneri, 1963)	1.1466	0.9756
Cercignani (Hadjiconstantinou, 2003a)	1.1466	0.647
Deissler (Deissler, 1964)	1.0	9/8
Schamberg (Schamberg, 1947)	1.0	$5\pi/12$
Hsia and Domoto (Hsia and Domoto, 1983)	1.0	0.5
Maxwell (Kennard, 1938)	1.0	0.0
Equation (2.29)	1.0	-0.5



فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

- با بررسی دبی در میکرولوله ها در رژیم گذار و آزاد مولکولی، معلوم می شود که یک مینیمم دبی برای لوله و کانال به ترتیب به ازای $Kn \approx 1$ تا $Kn \approx 3$ اتفاق می افتد. به این پدیده مینیمم ناسن نامبر می گویند.
- ناسن نشان داد که در رژیم آزاد مولکولی فرآیند انتقال پخشی متناسب با گرادیان فشار و مستقل از چگالی مشاهده می شود.

- دبی جرمی در رژیم آزاد مولکولی در لوله ای به قطر $2a$ و طول L (Kennard 1938):

$$\dot{M}_{FM} = \frac{4}{3} a^3 \frac{\Delta P}{L} \sqrt{\frac{2\pi}{RT}}$$

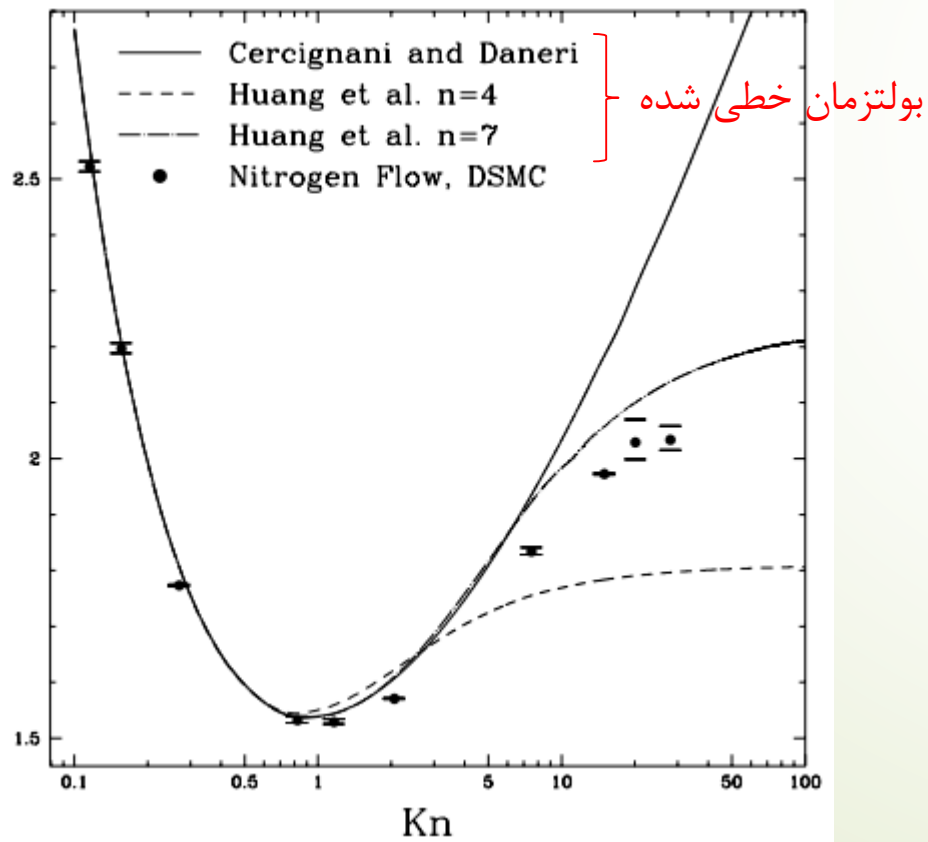
که برای میکرولوله های کوتاه با ضریب $1 - Ca/L$ باید اصلاح شود.

- برای کانالهای دوبعدی بلند، دبی بصورت مجانبی افزایش می یابد تا مقداری متناسب با:

$$\sqrt{\frac{1}{\pi} \times LnKn}$$

- دبی بدون بعد شده (بر مبنای میانگین فشار ورودی و خروجی):

$$\bar{Q} = \frac{\dot{Q}P}{\frac{-dP}{dx} h^2 (RT_0)^{\frac{1}{2}}}$$



فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

➤ معادلات برنت (Burnett Equations):

➤ در رژیم گذار معادلات برنت بر پدیده های انتقال سیالاتی-حرارتی حاکم هستند.

➤ تانسور تنش برای کانال بسیار بلند ($\epsilon=h/L \ll 1$) ساده می شوند. ضمناً از گرادیان دما داخل گاز صرفنظر می شود.

$$P_x \left[1 - \left(\frac{\omega_2}{3} + \frac{\omega_6}{12} \right) \frac{\gamma\pi}{2} \text{Kn}_0^2 M_0^2 \left(\frac{p_0}{p} \right) (U_y)^2 \right] = U_{yy}$$

$$+ \epsilon \left[\sqrt{\frac{\gamma\pi}{2}} M_0 \text{Kn}_0 \left(\frac{p_0}{p} \right) \left(\left(\frac{\omega_1}{2} - \frac{7\omega_2}{3} + \frac{\omega_6}{3} \right) U_y U_{yx} + \left(\frac{\omega_1}{2} - \frac{7\omega_2}{2} + \frac{\omega_6}{6} \right) U_x U_{yy} \right) \right]$$

$$+ \epsilon \left[\sqrt{\frac{\gamma\pi}{2}} M_0 \text{Kn}_0 \left(\frac{p_0}{p} \right) \left(\left(\frac{\omega_1}{2} - \frac{\omega_2}{6} + \frac{\omega_6}{6} \right) U_y V_{yy} + \left(\frac{\omega_1}{2} + \frac{\omega_2}{2} + \frac{\omega_6}{6} \right) V_y U_{yy} \right) \right]$$

$$+ \epsilon \left[\sqrt{\frac{\gamma\pi}{2}} M_0 \text{Kn}_0 \left(\frac{p_0}{p} \right) \left(\frac{\omega_2}{2} U U_{xy} + \frac{\omega_2}{2} V U_{yy} \right) - \text{Re}(\rho U U)_x - \text{Re}(\rho U V)_y \right]$$

$$- \epsilon \left[\frac{\gamma\pi}{2} \text{Kn}_0^2 M_0^2 \left(\frac{p_0}{p} \right)^2 \left(\left(\frac{\omega_1}{2} - \frac{7\omega_2}{2} + \frac{\omega_6}{6} \right) P_y U_x U_y + \frac{\omega_2}{2} P_y U U_{yx} + \frac{\omega_2}{2} P_y V U_{yy} \right) \right]$$

➤ معادلات برنت شامل ترمهای تا توان پنجم ϵ می باشد.

➤ مولفه در راستای جریان معادله ممنتم برنت برای کانال طویل تا ترم مرتبه اول ϵ :

فصل چهارم- جریانهای با نیروی محرکه فشاری

➤ معادلات برنت (Burnett Equations):

➤ مولفه در راستای عمود جریان معادله ممنتم برنت برای کانال طویل تا ترم مرتبه اول ϵ :

$$\begin{aligned}
 P_y & \left[1 + \left(\frac{\omega_6}{12} - \frac{2\omega_2}{3} \right) \frac{\gamma\pi}{2} Kn_0^2 M_0^2 \left(\frac{p_0}{p} \right)^2 (U_y)^2 \right] \\
 & = \left(\frac{\omega_6}{6} - \frac{4\omega_2}{3} \right) \sqrt{\frac{\gamma\pi}{2}} M_0 Kn_0 \left(\frac{p_0}{p} \right) U_y U_{yy} \\
 & + \epsilon \left[-\sqrt{\frac{\gamma\pi}{2}} M_0 Kn_0 \left(\frac{p_0}{p} \right) \left(\frac{\omega_2}{2} \right) (UU_{yx})_y + U_{xy} + V_{yy} \right] \\
 & - \epsilon \left[\frac{\gamma\pi}{2} Kn_0^2 M_0^2 \left(\frac{p_0}{p} \right)^2 \left(\left(\frac{\omega_2}{2} \right) (P_x V U_{yy} + P_x U U_{xy}) \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. + \left(\frac{\omega_1}{2} - \frac{\omega_2}{6} + \frac{\omega_6}{6} \right) P_x V_y U_y \right) \right] \\
 & + \epsilon \left[\frac{\gamma\pi}{2} Kn_0^2 M_0^2 \left(\frac{p_0}{p} \right)^2 \left(\frac{\omega_2}{3} \right) P_y U U_{xy} \right]
 \end{aligned}$$

فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

➤ معادلات برنت (Burnett Equations):

➤ ساده سازی با صرفنظر از ترمهای $O(\epsilon)$:

$$\frac{\partial p}{\partial x} \left[1 - (\omega_2/3 + \omega_6/12) \frac{\mu^2}{p^2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 \right] = \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + O(\epsilon)$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} + (\omega_6/12 - 2\omega_2/3) \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\mu^2}{p} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 \right] = O(\epsilon)$$

➤ با فرض گاز ماکسولی یعنی: $(\omega_1, \omega_2, \omega_6) = (10/3, 2, 8)$

➤ معادلات بی بعد شده (فشار با فشار خروجی بی بعد شده):

$$P_x \left[1 - 2/3 \gamma \pi \text{Kn}_0^2 M_0^2 \left(\frac{p_0}{p} \right)^2 U_y^2 \right] = U_{yy} + O(\epsilon)$$

$$P_y \left[1 + \frac{\gamma \pi}{3} \text{Kn}_0^2 M_0^2 \left(\frac{p_0}{p} \right)^2 U_y^2 \right] = \frac{4}{3} \sqrt{\gamma \pi / 2} M_0 \text{Kn}_0 \left(\frac{p_0}{p} \right) U_y U_{yy} + O(\epsilon)$$

➤ ترم دوم داخل براکتها برای جریانهای با ماخ پایین و ابتدای رژیم گذار کوچک هستند (پس براکتها تقریباً 1 هستند). برای چنین حالتی با فرض کانال طویل، معادلات برنت ساده می شوند (معادله راستای جریان ساده شده، همان معادله ناویر-استوکس ابتدای فصل است):

$$P_x = U_{yy}$$

$$P_y = \frac{4}{3} \sqrt{\frac{\gamma \pi}{2}} \text{Kn}_0 M_0 \left(\frac{p_0}{p} \right) U_y U_{yy}$$

نتیجه: پروفیل سرعت سهموی

فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

➤ مدل یکپارچه برای جریان در تمامی اعداد نادسن:

➤ دنبال مدل یکپارچه ای برای جریان هستیم که بتواند پروفیل سرعت، افت فشار و دبی جرمی را برای رژیمهای مختلف نادسن در کانالها و لوله

ها تخمین بزند. برای بدست آوردن چنین مدلی، ابتدا پروفیل سرعت بدون بعد و سپس اندازه میانگین سرعت (در نتیجه دبی) بررسی می شود.

➤ مقیاس کردن سرعت: با توجه به نتایج حل DSMC و بولتزمان خطی شده، پروفیل سرعت در بازه وسیعی از نادسنها تقریباً سهموی باقی می

ماند که یعنی پروفیل با تحلیل بر پایه معادلات ناویر-استوکس و برنت در کانالهای بلند همخوانی دارد. توزیع سرعت ما بین دو صفحه موازی با

فاصله h را در تمامی نادسنها سهموی با شرایط لغزشی مناسب به صورت مقابل در نظر می گیریم (دما فرضاً ثابت):

$$U(x, y) = \mathcal{F} \left(\frac{dP}{dx}, \mu_0, h, \lambda \right) \times \left[- \left(\frac{y}{h} \right)^2 + \left(\frac{y}{h} \right) + U_s \right]$$

➤ با در نظر گرفتن شرط مرزی لغزشی به فرم معادله 2-43 و با فرض اینکه دیواره کانال ساکن باشد:

$$U_s - U_{wall} = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \left[\frac{\mathbf{Kn}}{1 - b\mathbf{Kn}} \left(\frac{\partial U}{\partial n} \right)_s \right], U_{wall} = 0 \Rightarrow U(x, y) = \mathcal{F} \left(\frac{dP}{dx}, \mu_0, h, \lambda \right) \left[- \left(\frac{y}{h} \right)^2 + \left(\frac{y}{h} \right) + \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \frac{\mathbf{Kn}}{1 - b\mathbf{Kn}} \right]$$

فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

مدل یکپارچه جریان:

سرعت متوسط در یک مقطع کانال:

$$\bar{U}(x) \text{ یا } \frac{\dot{Q}}{h} = \mathcal{F} \left(\frac{dP}{dx}, \mu_0, h, \lambda \right) \left[\frac{1}{6} + \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \frac{\text{Kn}}{1 - b\text{Kn}} \right]$$

سرعت بدون بعد با فرض $\sigma_v = 1$ (تابع عدد نادسن و Y):

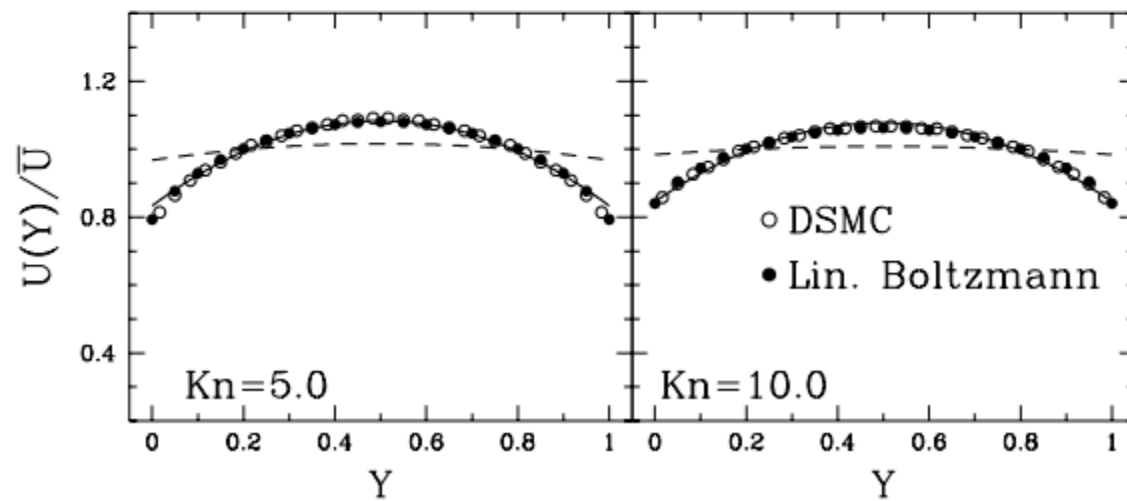
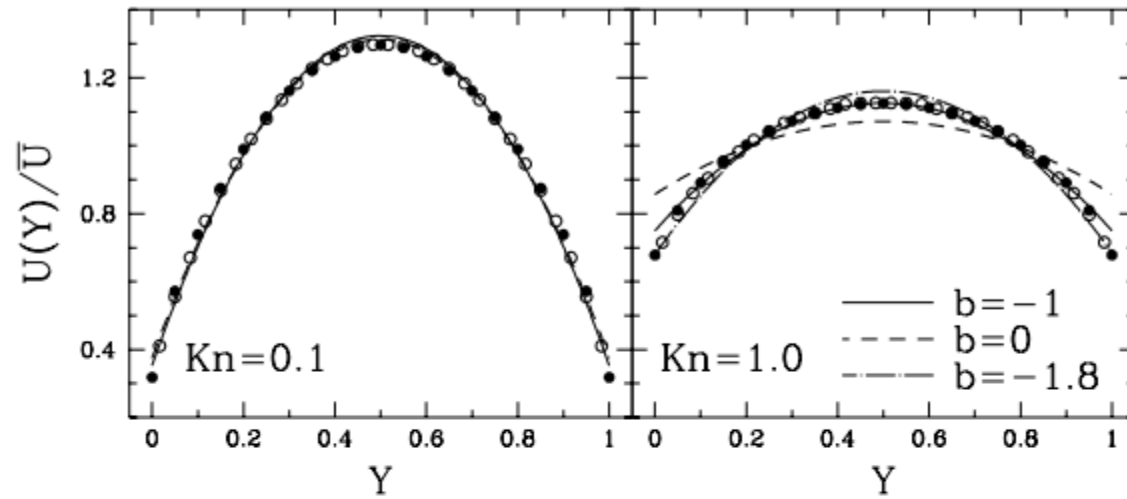
$$U^*(y, \text{Kn}) = \frac{U(x, y)}{\bar{U}(x)} = \left[\frac{-\left(\frac{y}{h}\right)^2 + \left(\frac{y}{h}\right) + \frac{\text{Kn}}{1 - b\text{Kn}}}{\frac{1}{6} + \frac{\text{Kn}}{1 - b\text{Kn}}} \right]$$

برای $b = -1$ توزیع سرعت برای بازه وسیعی از نادسناها دقیق بدست می دهد البته

برای $\text{Kn} = 1$ لغزش اندکی بالاتر تخمین زده می شود.

با تغییر پارامتر b (مثلا $b = -1.8$) در $\text{Kn} = 1$ شاید بتوان لغزش سرعت کنار دیواره

را بهتر گرفت اما دقت مدل در داخل کانال از بین می رود.



فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

➤ مدل یکپارچه جریان:

➤ مقایسه مقادیر سرعت در خط مرکزی و در کنار دیواره برای مدل و حل DSMC (برای گازهای مختلف) و حل بولتزمان خطی شده نشان می دهد که مدل مرتبه اول ماکسول ($b=0$) برای نادسنهای بزرگ سرعت بدون بعد یکنواخت پیش بینی می کند که طبیعتاً غلط است! می توان گفت که تئوری جریان لغزشی با فرض لغزش مرتبه اول برای سرعت کنار دیواره تا $Kn=0.1$ و برای سرعت در خط مرکز تا $Kn=0.4$ اعتبار دارد.

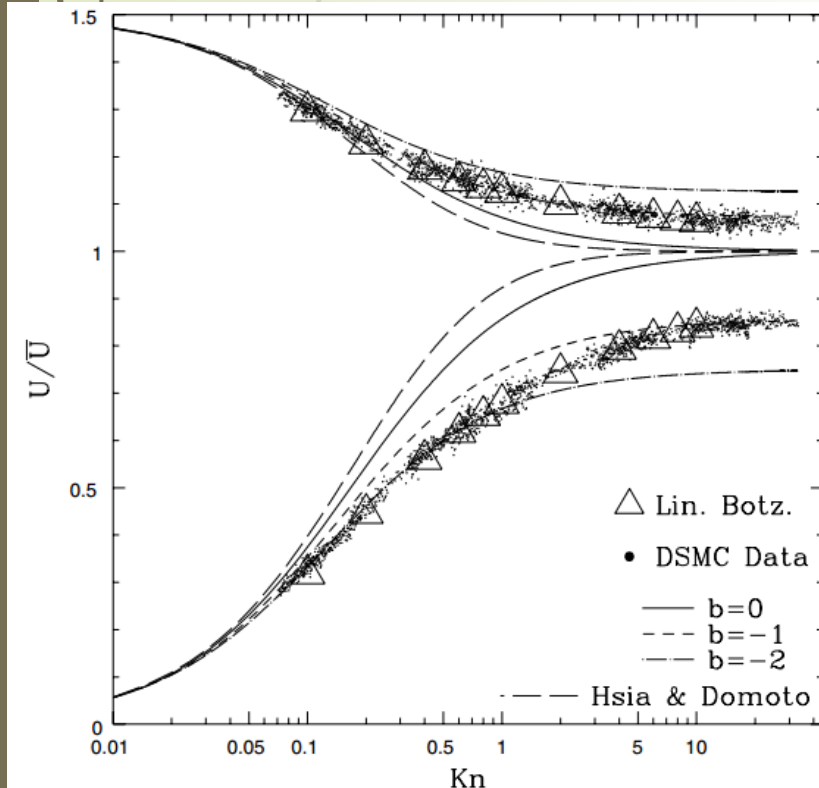
➤ تخمین سرعت در خط مرکزی با مدل پیشنهادی با $b = -1$ برای تمام نادسناها کاملاً با DSMC و

بولتزمان خطی شده همخوانی دارد در حالیکه در تخمین سرعت لغزشی در نادسناها میانی (بین 0.1 و 5)

با حل DSMC اختلاف دارد (مثلاً در $Kn=1$ ، 10% خطا دارد). علت خطا در نادسناها میانی وجود همزمان

لایه مرزی (ناشی از لزجت) و لایه نادسن است و فرض سهموی بودن پروفیل، لایه نادسن را در نظر نمی گیرد.

➤ سایر مدل‌های لغزشی برای نادسن 0.1 و بزرگتر بی ارزش هستند و حتی از مدل مرتبه اول هم بدترند.



فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

➤ مدل یکپارچه جریان:

➤ مقیاس کردن دبی: دبی حجمی (به ازای واحد عرض) در یک کانال تابع ابعاد هندسی، خواص سیال و افت فشار است: $\dot{Q} = g\left(\frac{dP}{dx}, \mu_0, h, \lambda\right)$

➤ حل ناویر-استوکس با شرط مرزی لغزشی کلی: $\dot{Q} = -\frac{h^3}{12\mu_0} \frac{dP}{dx} \left[1 + \frac{6Kn}{1 - bKn}\right]$

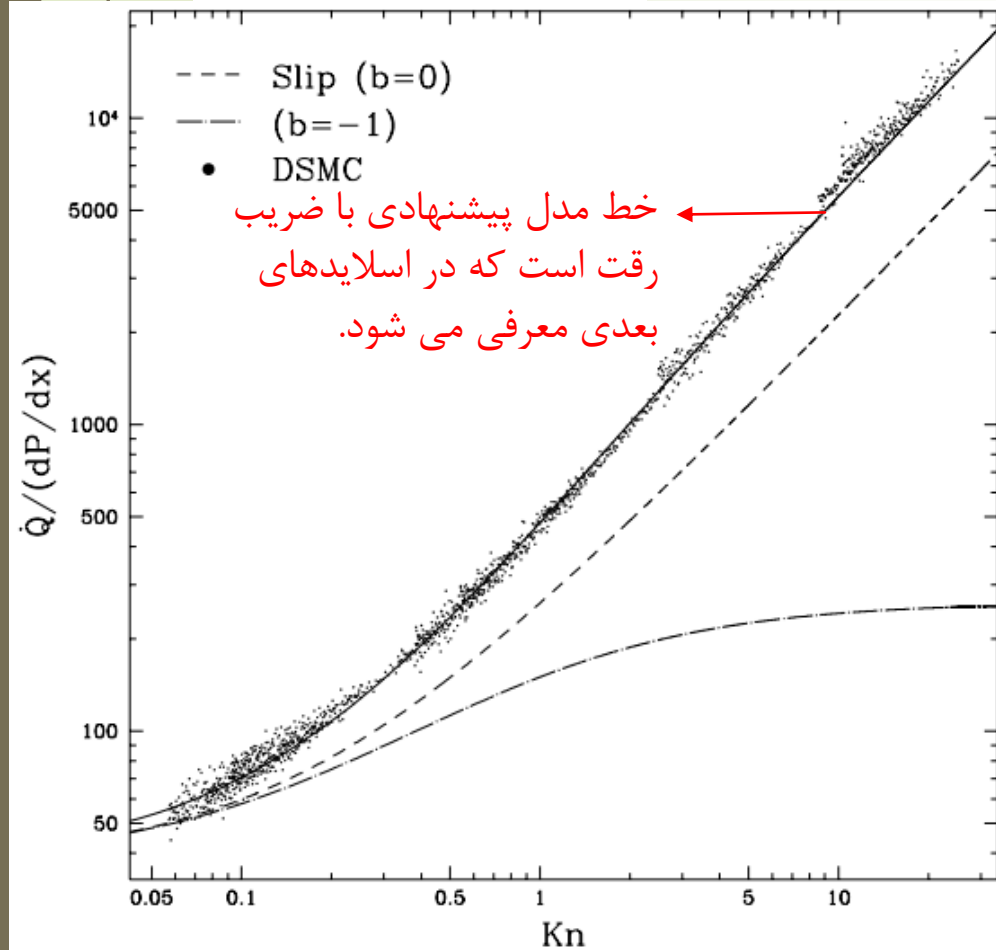
➤ Kennard نشان داده که دبی هم برای رژیم محیط پیوسته و هم برای رژیم آزاد مولکولی

تابع خطی از dP/dx است. ترسیم دبی تقسیم شده بر گرادیان فشار نشان می دهد که شرط

مرزی لغزشی کلی بدترین جواب را بدست می دهد.

➤ برای بهبود دقت باید ویسکوزیته دینامیکی طوری اصلاح شود که اثرات افزایش رقت را لحاظ

کند.



فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

مدل یکپارچه جریان:

برای نادسنهای کوچک ($\text{Kn} \ll 1$) که برخوردهای بین مولکولی بخش غالب تبادل ممنت در سیال هستند، ویسکوزیته دینامیکی سیال بر

اساس تئوری جنبشی گازها بر حسب طول مسیر آزاد میانگین تعریف می شود (رژیم لغزشی): $\mu_0 \approx \lambda \bar{v} \rho$

برای رژیم جریان آزاد مولکولی فقط برخورد مولکولها با دیواره ها در نظر گرفته می شوند و ویسکوزیته دینامیکی بر حسب طول مشخصه (ارتفاع

کانال) تعریف می شود: $\mu \approx h \bar{v} \rho$

می توان ویسکوزیته دینامیکی برای تمام نادسها را به شکل ترکیبی زیر نوشت: $\mu \approx \rho \bar{v} \left[\frac{1}{\frac{1}{\lambda} + \frac{1}{h}} \right] = \rho \bar{v} \lambda \left[\frac{1}{1 + \text{Kn}} \right] \Rightarrow \mu(\text{Kn}) = \mu_0 \left[\frac{1}{1 + \text{Kn}} \right]$

تحلیل مشابهی برای فرکانس برخورد می توان انجام داد، نسبت فرکانس برخوردهای بین مولکولی به کل برخوردها (بین مولکولی و با دیواره):

$$\frac{f_g}{f_g + f_w} = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \text{Kn}}$$

برای مدل کردن اثرات افزایش رقت در دبی هم یک ضریب تصحیح به نام ضریب رقت (C_r) که تابع عدد نادسن فرض می شود، تعریف می

کنیم:

$$\dot{Q} = - \frac{h^3}{12\mu_0} \frac{dP}{dx} \left[1 + \frac{6\text{Kn}}{1 - b\text{Kn}} \right] \times C_r(\text{Kn})$$

فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

➤ مدل یکپارچه جریان برای دو صفحه موازی با فاصله h (هندسه دوبعدی):

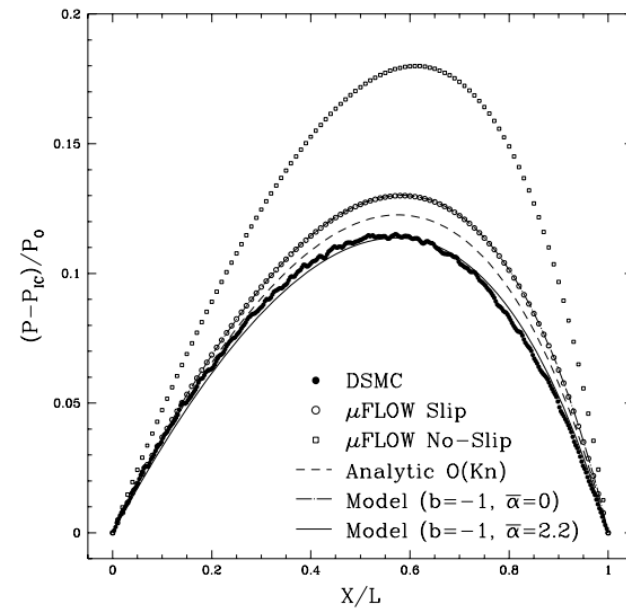
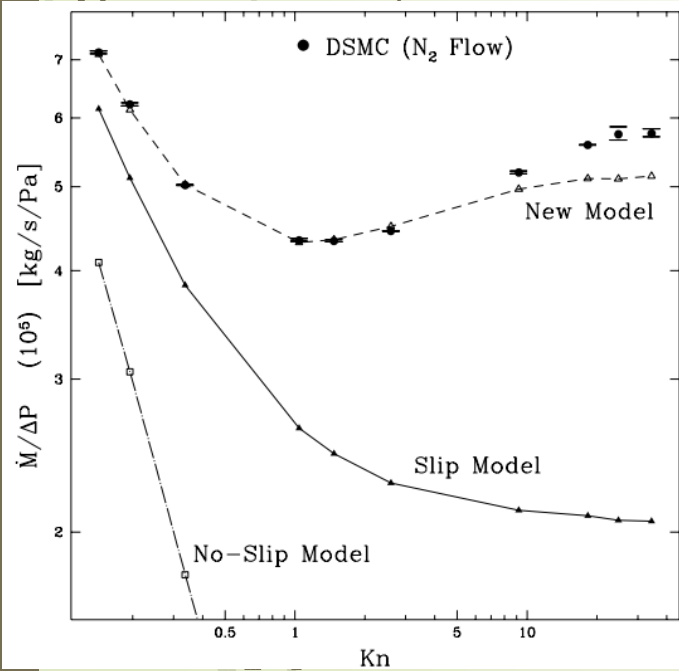
➤ ضریب رقت (rarefaction coefficient): $C_r(\text{Kn}) = 1 + \alpha \text{Kn}$

➤ α ثابت باشد، دبی در جریان لغزشی به صورت غلط بیشتر تخمین زده می شود پس تابع Kn در نظر گرفته می شود ولی برای رژیم آزاد مولکولی در بین دو صفحه $\alpha \approx 2.2$ می توان بکار برد. دبی جرمی به ازای واحد عرض:

$$\dot{M} = \frac{h^3 P_o}{24\mu_o RT_o} \frac{\Delta P}{L} \left[(\Pi + 1) + 2 \left[6 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} + \bar{\alpha} \right] \text{Kn}_o + 12 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \frac{b + \bar{\alpha}}{\Pi - 1} \text{Kn}_o^2 \log_e \left(\frac{\Pi - b \text{Kn}_o}{1 - b \text{Kn}_o} \right) \right]$$

➤ توزیع فشار:

$$\tilde{P}^2 - 1 + 2(6 + \bar{\alpha}) \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \text{Kn}_o (\tilde{P} - 1) + 2(6b + \bar{\alpha}) \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \text{Kn}_o^2 \log_e \left(\frac{\tilde{P} - b \text{Kn}_o}{1 - b \text{Kn}_o} \right) = B \left(1 - \frac{x}{L} \right)$$



فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

➤ مدل یکپارچه جریان برای لوله (مقطع دایره) و کانال (مقطع مستطیل):

➤ باز هم بطور مشابه برای لوله و کانال هم ضریب رقت (rarefaction coefficient) را برای دبی بکار می گیریم: $C_r(\text{Kn}) = 1 + \alpha \text{Kn}$

(که برای $\text{Kn} \leq 0.1$, $\alpha \rightarrow 0$ و برای $\text{Kn} \rightarrow \infty$, $\alpha \rightarrow \alpha_0$)

➤ برای جریان داخل لوله و کانال ضریب رقت از فرمول زیر محاسبه می شود: $\alpha = \alpha_0 \frac{2}{\pi} \tan^{-1}(\alpha_1 \text{Kn}^\beta)$

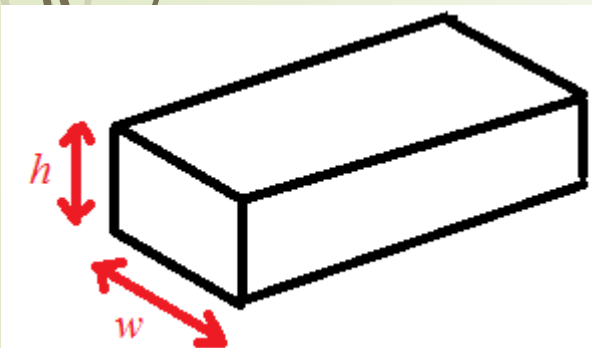
که برای لوله:

$$\alpha_1 = 4.0, \beta = 0.4$$

$$\alpha_{\text{Kn} \rightarrow \infty} \equiv \alpha_0 = \left(\frac{64}{3\pi(1 - \frac{4}{b})} \right)$$

و برای کانال با مقطع مستطیل با نسبت منظریهای (Aspect Ratio) مختلف:

$(\text{AR}) = w/h$	$C(\text{AR})$	α_0	α_1	β
1	0.42173	1.7042	8.0	0.5
2	0.68605	1.4400	3.5	0.5
4	0.84244	1.5272	2.5	0.5



فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

➤ مدل یکپارچه جریان برای لوله:

➤ پروفیل سرعت بی بعد شده در لوله ($\text{Kn} = \lambda/a$ که a شعاع): با ضریب لغزش کلی $b = -1$ تا $\text{Kn} = 10$ با دایره های توپر

➤ (حل بولتزمن خطی شده) همخوانی دارد (غیر از لغزش کنار دیواره):

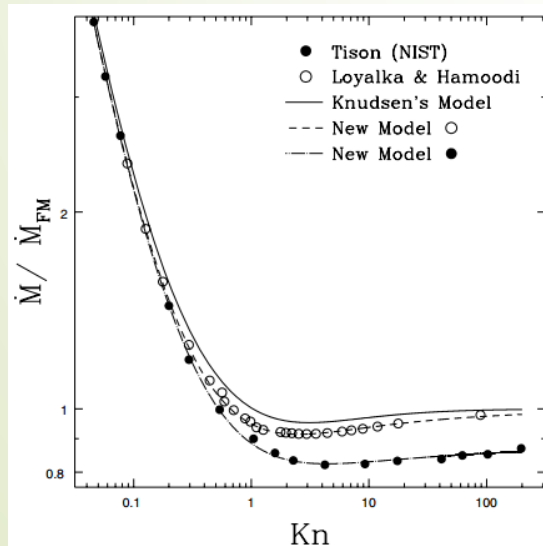
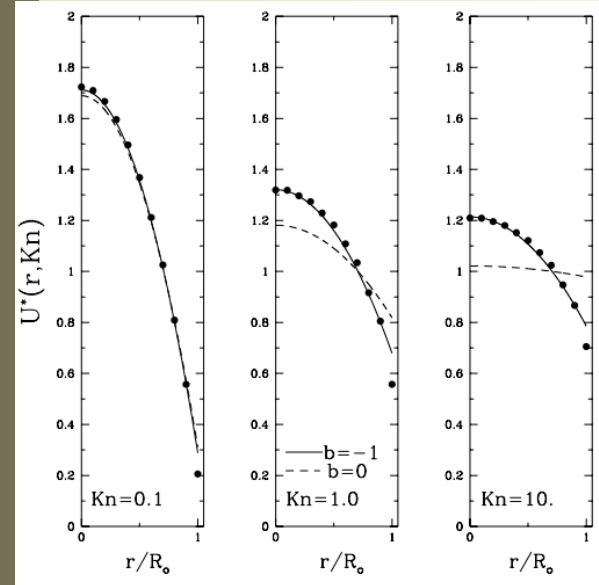
$$U^*(r, \text{Kn}) = \frac{U(x, r)}{\bar{U}(x)} = \left[\frac{-\left(\frac{r}{a}\right)^2 + 1 + 2\frac{\text{Kn}}{1-b\text{Kn}}}{\frac{1}{2} + 2\frac{\text{Kn}}{1-b\text{Kn}}} \right]$$

➤ دبی حجمی:

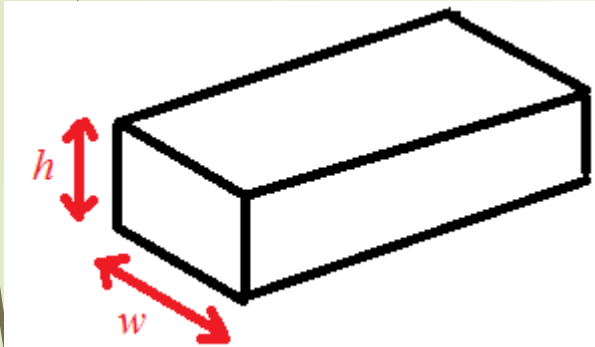
$$\dot{Q} = -\frac{\pi a^4}{8\mu_o} \frac{dP}{dx} (1 + \alpha \text{Kn}) \left[1 + \frac{4 \text{Kn}}{1 - b \text{Kn}} \right]$$

➤ دبی جرمی:

$$\dot{M} = \frac{\pi a^4 P_o}{16\mu_o RT_o} \frac{\Delta P}{L} \left[(\Pi + 1) + 2(4 + \alpha) \text{Kn}_o + \frac{8(\alpha + b)}{\Pi - 1} \text{Kn}_o^2 \log_e \left(\frac{\Pi - b \text{Kn}_o}{1 - b \text{Kn}_o} \right) \right]$$



فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری



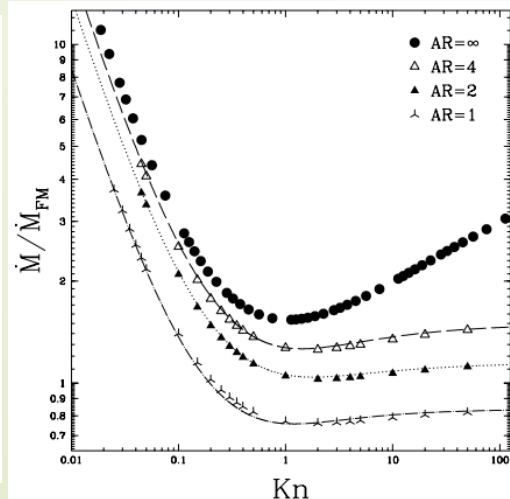
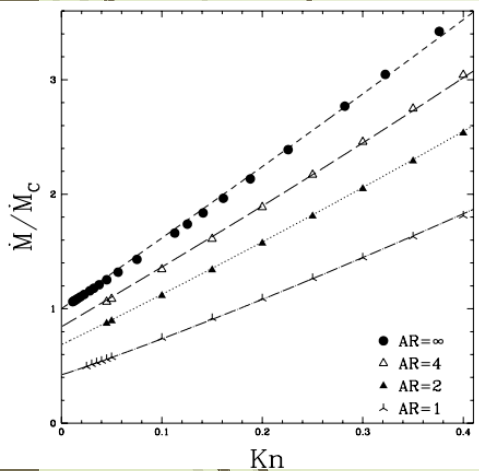
مدل یکپارچه جریان برای کانال با مقطع مستطیلی ($AR=w/h$):

$$\dot{Q} = C(AR) \frac{wh^3}{12\mu_0} \left(-\frac{dP}{dx} \right) (1 + \alpha Kn) \left(1 + \frac{6 Kn}{1 - b Kn} \right)$$

دبی حجمی:

$$C(AR) = \left[1 - \frac{192(AR)}{\pi^5} \sum_{i=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{\tanh(i\pi/2(AR))}{i^5} \right]$$

ضریب تصحیح:



دبی جرمی بی بعد شده:

$$\frac{\dot{M}}{\dot{M}_C} = C(AR) (1 + \alpha \overline{Kn}) \left[1 + \frac{6\overline{Kn}}{1 - b\overline{Kn}} \right]$$

برای ابتدای رژیم گذار:

$$\frac{\dot{M}}{\dot{M}_{FM}} = \frac{C(AR)}{6\overline{Kn}} (1 + \alpha \overline{Kn}) \left[1 + \frac{6\overline{Kn}}{1 - b\overline{Kn}} \right]$$

بی بعد شده با دبی جرمی رژیم مولکولی آزاد:

(مدل یعنی خطها پدیده مینم نادسن نامبر را مطابق با بولتزمان خطی شده پیش بینی کرده)

فصل چهارم - جریانهای با نیروی محرکه فشاری

مثال جریان هوا از نانولوله ای به قطر 8nm عبور می کند. اگر طول مسیر آزاد میانگین در مقطعی 6nm باشد، سرعت بی بعد شده در مرکز لوله در آن مقطع چقدر است؟ با فرض اینکه گرادیان فشار دو سمت لوله -10000 kPa/m باشد، دبی حجمی هوای عبوری را تقریباً بزنید (ویسکوزیته هوا در دمای 20°C را $0.000018 \text{ Pa}\cdot\text{s}$ در نظر بگیرید).

حل برای لوله عدد نادسن بر حسب شعاع در روابط استفاده شده:

$$\text{Kn} = \frac{\lambda}{a} = \frac{6 \text{ nm}}{4 \text{ nm}} = 1.5 \Rightarrow \text{رژیم گذار}$$

$$U^*(r=0, \text{Kn}=1.5) = \frac{-0 + 1 + 2 \times \frac{1.5}{1+1.5}}{0.5 + 2 \times \frac{1.5}{1+1.5}} = 1.29$$

مرکز لوله یعنی $r=0$

$$\alpha = \alpha_0 \frac{2}{\pi} \tan^{-1}(\alpha_1 \text{Kn}^\beta) = \frac{64}{3\pi \left(1 - \frac{4}{-1}\right)} \times \frac{2}{\pi} \tan^{-1}(4 \times \text{Kn}^{0.4}) = 67.44$$

$$\dot{Q} = \frac{\pi \times (4 \times 10^{-9})^4}{8 \times 0.000018} \times 10000 \times 10^3 \times (1 + 67.44 \times 1.5) \times \left[1 + \frac{4 \times 1.5}{1 + 1.5}\right] = 0.19 \times 10^{-27} \text{ m}^3/\text{s}$$

فصل پنجم- اثرات حرارتی در مقیاس میکرو

انتقال حرارت در جریانهای مقیاس میکرو گازی مد نظر است.

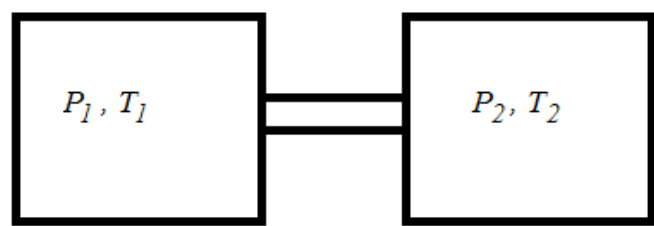
پدیده خزش حرارتی (thermal creep) یا تراوش حرارتی (transpiration):

در کانالهایی که گرادیان دمای مماس بر دیواره روی سطوح داریم (مثلا سطح یک میکروکانال با شار حرارتی معین) خزش حرارتی اهمیت پیدا می کند.

امکان شروع جریان گاز رقیق شده به دلیل گرادیان دمای مماسی در امتداد دیواره های کانال وجود دارد که در چنین جریانی سیال شروع به خزش از قسمت سرد به قسمت گرم می کند که به آن خزش حرارتی می گوئیم. این اثر خلاف شهود عادی است!

دو مخزن پر شده با سیال یکسان با فشارهای یکسان و دماهای متفاوت در نظر بگیرید که $P_1 = P_2, T_1 > T_2$

• اگر کانال متصل کننده قطور باشد که طبق شرایط تعادل جریان نداریم اما اگر ضخامت کانال (h) در حد طول مسیر آزاد میانگین باشد، اثرات رقت باید لحاظ شود (مکانیزم تعادل محلی پیچیده است و برخورد مولکولهای گاز با دیواره ها باید مدنظر قرار گیرد).



• در اینجا رژیم آزاد مولکولی بررسی می گردد: $\lambda \gg h$

فصل پنجم - اثرات حرارتی در مقیاس میکرو

- با فرض اینکه برخورد مولکولها با دیواره آینه ای باشد: $\sigma_v = 0$

- فرض می کنیم چگالی سیال با چگالی تعداد مولکولها (تعداد مولکولها به ازای واحد حجم) متناسب باشد: $\rho \propto n$

- دما هم متناسب با مجذور سرعت متوسط مولکولی باشد: $T \propto \bar{c}^2$

- شار جرم (دبی جرمی بر واحد سطح مقطع) در دو انتهای گرم و سرد کانال (m جرم یک مولکول گاز): $mn_1\bar{c}_1, mn_2\bar{c}_2$

- معادله حالت گاز ایده آل و برابری فشارها: $P = \rho RT, \frac{P_1}{P_2} = 1$

- پس نسبت شار جرمی ها:

$$\frac{mn_1\bar{c}_1}{mn_2\bar{c}_2} \approx \frac{\rho_1}{\rho_2} \times \left(\frac{T_1}{T_2}\right)^{0.5} = \frac{\frac{P_1}{T_1}}{\frac{P_2}{T_2}} \times \left(\frac{T_1}{T_2}\right)^{0.5} = \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^{0.5} \leq 1$$

- در نتیجه خزش حرارتی از سمت سرد به سمت گرم ایجاد می شود.

► Reynolds اولین بار این پدیده را در سال ۱۸۷۹ درک کرد. همزمان Maxwell مستقلا تئوری ارائه کرد. در دهه ابتدایی ۱۹۰۰ آقای

Knudsen کمپرسور مولکولی بر اساس این پدیده ساخت. آقای Gaede هم بعدا به صورت مفهومی پمپ حرارتی پیشنهاد کرد.

جریانهای میکرو و نانو- مدرس: محمد وهابی

فصل پنجم- اثرات حرارتی در مقیاس میکرو

پدیده خزش حرارتی (در صورت وجود گرادیان فشار مماسی) سبب تغییر سرعت لغزشی روی دیواره می شود:

$$U_c = \frac{3 \mu R}{4 P} \frac{\partial T}{\partial s} \longrightarrow U_s = \frac{1}{2} [(2 - \sigma)U_\lambda + \sigma U_w] + U_c$$

دبی جرمی برای کانال با گرادیان فشار دو سمت اصلاح می شود:

$$\dot{M} = -\frac{h^3 P}{12 \mu R T} \frac{dP}{dx} \left[1 + 6 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} (\text{Kn} - \text{Kn}^2) \right] + \frac{3 \mu h}{4 T} \frac{dT}{dx}$$

اگر گرادیان فشار و گرادیان دما در یک جهت باشند، دبی کم می شود و اگر نه زیاد می شود.

پس امکان دارد در یک میکروکانال با عدم گرادیان فشار، دبی داشته باشیم!

همچنین امکان دارد با وجود گرادیان فشار، دبی خالص نداشته باشیم! (شبیه سازی این حالت: دو مخزن با دماهای 300K و 400K و فشار

اتمسفیریک به هم متصل شده و برای نادرسیهای مختلف: 0.365، 0.122 و 0.052 بررسی شده)

فصل ششم - نمونه های کاربردی جریانهای گازی

- در این فصل در مورد جریانهای گازی رقیق در مسائل کاربردی (فراتر از میکروکانالهای ساده) صحبت می شود.
- مثالها:
- یاتاقانهای لغزشی (دستگاههای ذخیره اطلاعات مغناطیسی که هد که در ارتفاع 50nm بالاتر از دیسک قرار دارد).
- فیلم فشرده شده سیال (که در طراحی شتاب سنجهای میکرومکانیکی اهمیت دارد).
- جریانهای جدا شده در هندسه های داخلی و خارجی در رژیم لغزشی.
- جریان استوکس عبوری از روی کره در رژیم لغزشی.
- میکروفیلترها.
- جریانهای رقیق شده سرعت بالا عبوری از میکرونالها (نازلهایی با گلوگاههای 20 μ m ساخته شده که عدد ماخ در خروجی آنها بالاتر از 4 است).
- و ...

فصل ششم - نمونه های کاربردی جریانهای گازی

- طراحی بسیاری از سیستمهای میکروالکترومکانیکی (MEMS) نیاز به درک درست پاسخ دینامیکی سیستم به تحریکات مختلف دارد. چون اغلب این دستگاهها تحت شرایط اتمسفریک کار می کنند، رفتار گاز می تواند تاثیر قابل توجهی در پاسخ دینامیکی آن داشته باشد.
- مدلسازی تاثیرات تعلیقی گاز مشکل است چون:

الف) پیچیدگی هندسه دستگاههای MEMS.

ب) اثرات تراکم پذیری که سبب پاسخ تناوبی پیچیده می شود.

ج) شروع اثرات رقت در مقیاسهای از مرتبه میکرون و زیر میکرون.

- از لحاظ سیالاتی در اجزای متحرک MEMS با یکی از شرایط زیر یا ترکیب آنها مواجه هستیم:

۱- حرکت افقی بین دو صفحه (مشابه جریان کوئت نوسانی که در فصل سوم صحبت شد).

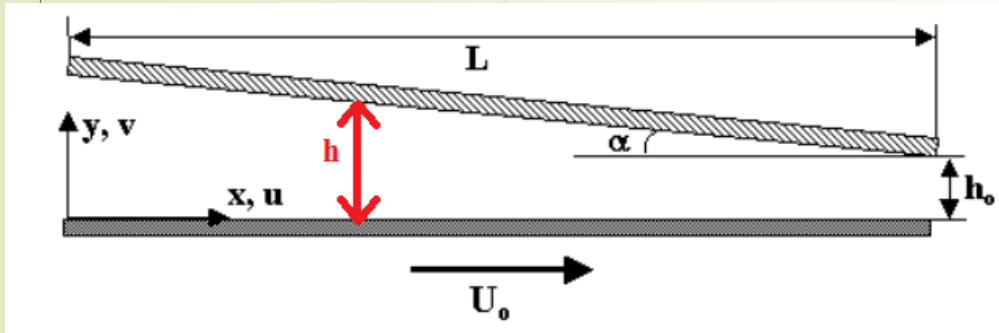
۲- نوسانات عمودی بین دو صفحه: فیلم فشرده سیال (squeezed film).

۳- حرکت افقی با شیب جزئی: یاتاقان لغزشی.

۴- حرکت نوسانی زاویه ای بین دو صفحه: فیلم فشرده سیال.

با معادله رینولدز برای فیلم نازک
روغنکاری قابل تحلیل هستند

فصل ششم - نمونه های کاربردی جریانهای گازی



➤ معادله رینولدز:

➤ فیلم نازک روغناکاری ($h_0 \ll L$, $w > h_0$ و α بسیار کوچک).

➤ جریان دوبعدی و دائمی.

➤ پروفیل سرعت توسعه یافته نیست و به آرامی (به دلیل تغییرات تدریجی سطح کانال) در راستای جریان تغییر می کند.

$$\frac{\rho u \frac{\partial u}{\partial x}}{\mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}} \approx \frac{\rho U_0^2 / L}{\mu U_0 / h_0^2} = \frac{\rho U_0 L}{\mu} \times \left(\frac{h_0}{L}\right)^2 = R^*$$

➤ نسبت ترم اینرسی به ترم لزجت در معادله ناویر-استوکس جهت افقی:

$$\Rightarrow R^* = Re \times \left(\frac{h_0}{L}\right)^2 \ll 1$$

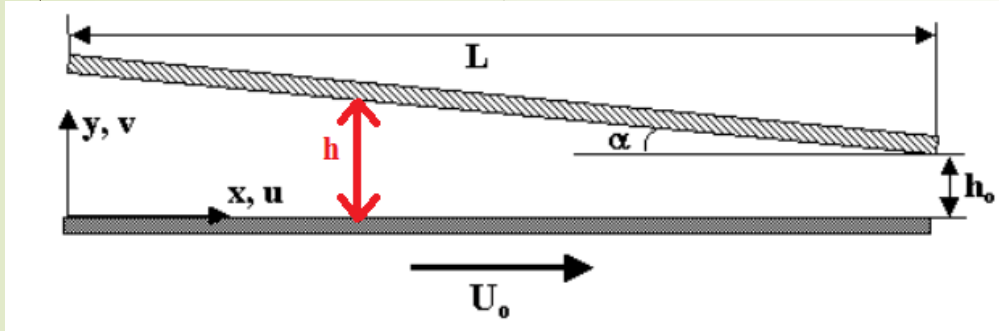
➤ معمولا در MEMS ها عدد رینولدز جریان بسیار کوچک است و ضمنا $h_0 \ll L$. پس:

و می توان از ترمهای اینرسی در مقابل ترمهای لزجت صرفنظر کرد.

$$\frac{\partial p}{\partial x} \gg \frac{\partial p}{\partial y}$$

➤ با آنالیز مرتبه بزرگی معادله پیوستگی: $u \gg v$ مقایسه معادلات ناویر-استوکس دو جهت مشخص است که:

فصل ششم - نمونه های کاربردی جریانهای گازی



➤ معادله رینولدز:

➤ از آنالیز مرتبه بزرگی:

$$\frac{\partial u / \partial x}{\partial u / \partial y} \approx \frac{U_0 / L}{U_0 / h_0} = \frac{h_0}{L} \ll 1 \Rightarrow u \text{ فقط تابع } y \Rightarrow u(y)$$

➤ معادله ناویر-استوکس در راستای جریان ساده می شود:

$$\frac{dp}{dx} = \mu \frac{d^2 u}{dy^2}$$

➤ با دو بار انتگرالگیری از معادله بالا (با شرایط مرزی عدم لغزش یا لغزشی) پروفیل سرعت بدست می آید.

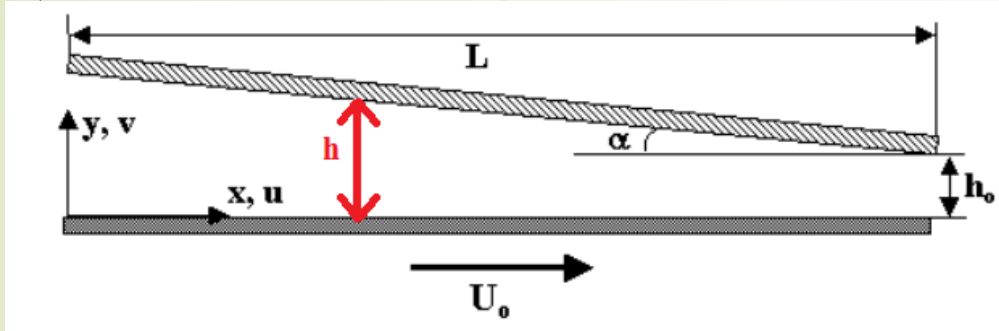
➤ در هر مقطع دلخواه، دبی جرمی به ازای واحد عرض کانال برای جریان با شرط مرزی عدم لغزش:

$$\dot{m} = \rho \int_0^h u dy = \frac{1}{2} \rho U_0 h - \frac{\rho h^3}{12\mu} \frac{dp}{dx}$$

➤ طبق بقای جرم دائمی، دبی جرمی در تمامی مقاطع عرضی یکسان است، یعنی دبی جرمی تابع x نمی باشد:

$$\frac{\partial \dot{m}}{\partial x} = 0 \Rightarrow \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{2} \rho U_0 h - \frac{\rho h^3}{12\mu} \frac{dp}{dx} \right) = 0 \Rightarrow \times 12\mu \Rightarrow 6\mu \frac{\partial}{\partial x} (\rho U_0 h) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho h^3 \frac{dp}{dx} \right)$$

فصل ششم - نمونه های کاربردی جریانهای گازی



➤ معادله رینولدز:

➤ با فرض جریان دما ثابت و با در نظر گرفتن معادله حالت گاز ایده آل:

$$\rho = \frac{p}{RT}$$

➤ شکل نهایی معادله رینولدز یک بعدی دائمی:

$$RT \text{ کردن ساده} \Rightarrow 6\mu \frac{\partial}{\partial x} (pU_0h) = \frac{\partial}{\partial x} \left(ph^3 \frac{dp}{dx} \right)$$

متناسب با دبی جرمی
جریان کوئت صفحه ای

متناسب با دبی جرمی
جریان پوازی صفحه ای

➤ ارتفاع کانال در هر مقطع (h) در هر مقطع معلوم است و فقط فشار مجهول است. شرایط مرزی هم فشار محیط (p0) در دو سمت داریم.

➤ معادله رینولدز برای سرعتهای کم مناسب است. برای جریان با سرعتهای بالا، گرمای ویسکوز فرض دمای ثابت را تحت تاثیر قرار می دهد.

➤ می توان نشان داد شکل کلی معادله رینولدز:

$$\nabla \cdot \left[\left(\frac{\rho h^3}{\mu} \right) \nabla p \right] = 12 \frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + 6 \nabla \cdot (\rho h \mathbf{U}_0)$$

فصل ششم - نمونه های کاربردی جریانهای گازی

➤ معادله رینولدز:

➤ بی بعدسازی معادله رینولدز یک بعدی دائمی:

$$X = \frac{x}{L}, H = \frac{h}{h_0}, P = \frac{p}{p_0} \Rightarrow 6\mu \frac{\partial}{L\partial X} ((p_0 P) U_0 (h_0 H)) = \frac{\partial}{L\partial X} \left((p_0 P) (h_0 H)^3 \frac{p_0 dP}{L dX} \right)$$

$$\Rightarrow \frac{6\mu U_0 L}{p_0 h_0^2} \frac{\partial}{\partial X} (PH) = \frac{\partial}{\partial X} \left(PH^3 \frac{dP}{dX} \right) \Rightarrow \Lambda \frac{\partial}{\partial X} (PH) = \frac{\partial}{\partial X} \left(PH^3 \frac{dP}{dX} \right)$$

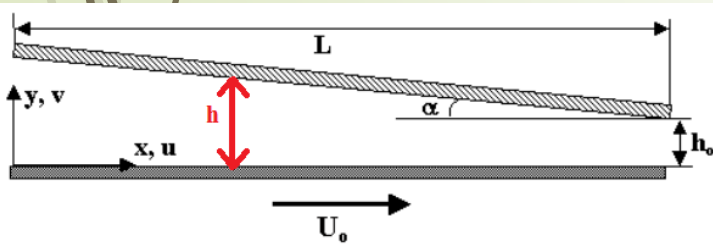
Bearing number عدد یاتاقان

➤ معادله رینولدز در رژیم لغزشی (با شرط مرزی لغزشی مرتبه اول):

$$\mathbf{Kn} = \frac{\lambda}{h} < 0.1 : \frac{\partial}{\partial X} \left(\left[1 + 6 \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \mathbf{Kn} \right] PH^3 \frac{dP}{dX} \right) = \Lambda \frac{\partial}{\partial X} (PH) \rightarrow \text{Burgdorfer, 1959}$$

پس مثلا برای هوا محدوده اعتبار رابطه بالا:

$$\lambda_{\text{هوا}} \approx 65 \text{ nm} \Rightarrow h_0 \geq 0.6 \mu \text{ m}$$

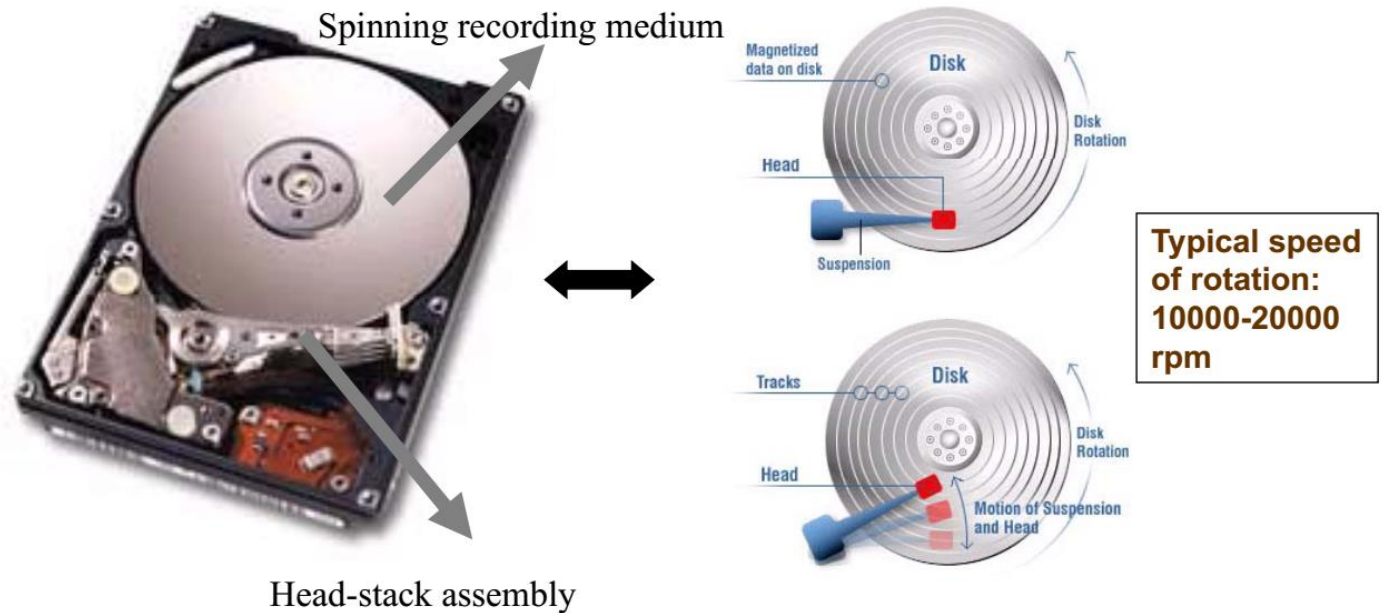
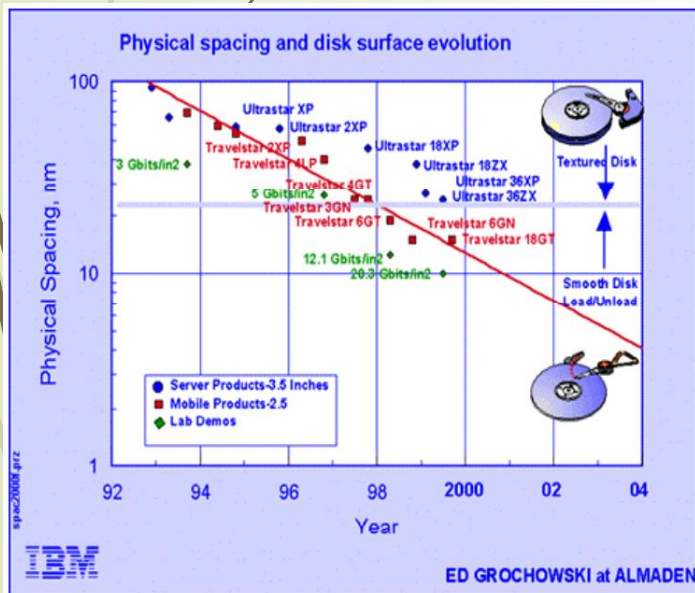


فصل ششم - نمونه های کاربردی جریانهای گازی

➤ معادله رینولدز:

➤ برای بسیاری از میکروسیستمهای الکترومکانیکی فاصله لقی $0.6\mu\text{m}$ منطقی است اما همه کارکردها را پوشش نمی دهد.

➤ در هارددیسک درایوهای فعلی، فاصله هد و دیسک کمتر از 50nm است و هدف گذاری برای چگالی خواندن و نوشتن اطلاعات 100 گیگابیت بر اینچ مربع است که نیاز به فاصله 5nm تا 10nm دارد (رژیم گذار). نسل آینده هارددیسکها قطعا در محدوده رژیم آزاد مولکولی خواهد بود.



فصل ششم - نمونه های کاربردی جریانهای گازی

➤ معادله رینولدز اصلاح شده برای لغزش:

➤ می توان گفت پروفیل سرعت در یاتاقان لغزشی ادغام پروفیل سرعت کوئت و پوازی است (نشان دادیم معادله ممنتم به شکل خطی در می

$$u(y) = u_p(y) + u_c(y) \quad \text{آید:}$$

➤ با فرض دیوار دیفیوز و $b=-1$:

$$u(y) = \underbrace{-\frac{h^2}{2\mu_o} \frac{dp}{dx} (1 + \alpha Kn) \left[\frac{Kn}{1 + Kn} + \frac{y}{h} - \left(\frac{y}{h}\right)^2 \right]}_{\text{Plane Poiseuille flow velocity}} + \underbrace{\frac{U_o(1 + \delta Kn - \frac{y}{h})}{1 + 2\delta Kn}}_{\text{Plane Couette flow velocity}}$$

Mass flow rate:

$$\dot{M} = -\frac{\rho h^3}{12\mu_o} \frac{dp}{dx} (1 + \alpha Kn) \left[1 + \frac{6Kn}{1 + Kn} \right] + \frac{1}{2} \rho U_o h$$

Plane Poiseuille Flows

Plane Couette Flows

تابع نادسن نمی باشد

فصل ششم - نمونه های کاربردی جریانهای گازی

➤ معادله رینولدز اصلاح شده برای لغزش ($b = -1$):

$$\dot{M} \text{ یا } \dot{m} = \rho \int_0^h u dy = -\frac{\rho h^3}{12\mu_0} \frac{dp}{dx} (1 + \alpha Kn) \left[1 + \frac{6Kn}{1 + Kn} \right] + \frac{1}{2} \rho U_0 h$$

➤ مجدداً چون دبی جریان در راستای x تغییر نمی کند:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(ph^3 \frac{dp}{dx} (1 + \alpha Kn) \left(1 + \frac{6Kn}{1 + Kn} \right) \right) = 6\mu_0 \frac{\partial}{\partial x} (phU_0)$$

➤ به شکل بی بعد:

$$\frac{\partial}{\partial X} \left(PH^3 \frac{dP}{dX} (1 + \alpha Kn) \left(1 + \frac{6Kn}{1 + Kn} \right) \right) = \Lambda \frac{\partial}{\partial X} (PH)$$

➤ که اگر $\alpha=0$ و $b=0$ همان رابطه مقاله Burgdorfer است.

فصل ششم - نمونه های کاربردی جریانهای گازی

➤ معادله رینولدز اصلاح شده:

➤ برای حل مجبوریم از روشهای عددی کمک بگیریم.

BOUNDARY CONDITIONS: $P(X=0)=1$ and $P(X=1)=1$

$$H = H_1(1 - X) + X$$

➤ حل با تفاضل محدود مرتبه دوم:

We set $\psi=PH$ and transform the above equation

$$\frac{d}{dX} \left[C_1 H \frac{d\psi}{dX} - (C_2 + \Lambda)\psi \right] = 0$$

$$C_1 = \frac{(\psi + \alpha Kn_o)(\psi + 7Kn_o)}{(\psi + \alpha Kn_o)}, C_2 = C_1(1 - H_1)$$

If the function $\psi(X)$ be expanded about a point X_k using a Taylor's series expansion, we can get the derivatives of ψ at X_k

$$\frac{d\psi}{dX} = \frac{\psi_{k+1} - \psi_{k-1}}{2\Delta X} - \frac{(\Delta X)^2}{6} \psi_{xxx} + \dots$$

$$\frac{d^2\psi}{dX^2} = \frac{\psi_{k+1} - 2\psi_k + \psi_{k-1}}{(\Delta X)^2} - \frac{(\Delta X)^2}{12} \psi_{xxxx} + \dots$$

فصل ششم- نمونه های کاربردی جریانهای گازی

$$\psi_k^{n+1} = \frac{(\Delta X)^2}{2C_1 H} \left[\left(\frac{C_1 H}{(\Delta X)^2} - \frac{(C_2 + \Lambda - C_1(1-H_1))}{2\Delta X} \right) \psi_{k-1}^n + \left(\frac{C_1 H}{(\Delta X)^2} + \frac{(C_2 + \Lambda - C_1(1-H_1))}{2\Delta X} \right) \psi_{k+1}^n \right]$$

حل معادله رینولدز اصلاح شده: ▶

- ▶ We used N=400 equally spaced grid points in the stream-wise direction. ΔX is the grid spacing=0.0025
- ▶ Iterations are continued until the “convergence indicator”, is sufficiently small (typically 10^{-14}).
- ▶ Grid independence studies were performed.
- ▶ Residuals of the global conservation of mass was monitored. $\left| \frac{\psi_k^{n+1} - \psi_k^n}{\psi_k^n} \right|$
- ▶ All calculations were performed to double precision accuracy. (16 significant digits)

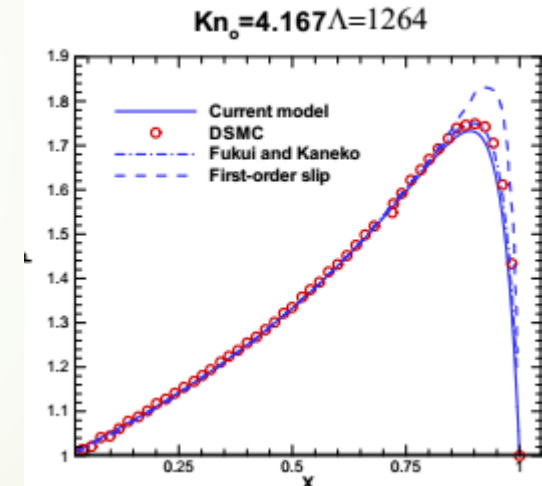
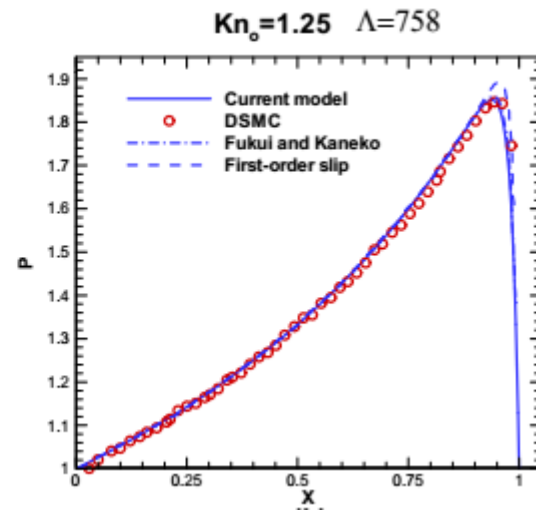
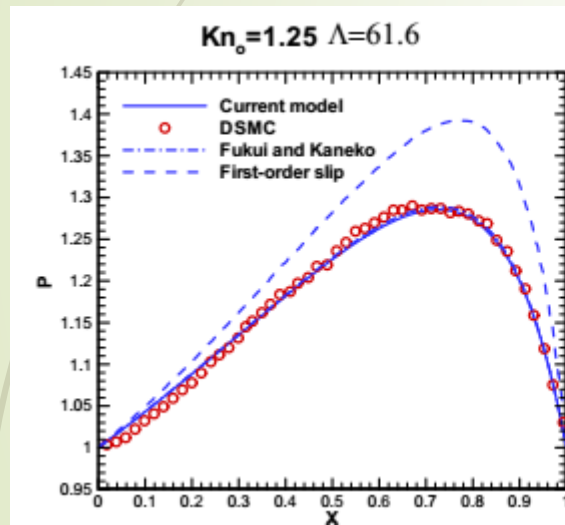
$$\frac{d}{dX} \left[C_1 H \frac{d\psi}{dX} - (C_2 + \Lambda) \psi \right] = 0$$

$$C_1 = \frac{(\psi + \alpha Kn_o)(\psi + 7Kn_o)}{(\psi + \alpha Kn_o)}, C_2 = C_1(1 - H_1)$$

فصل ششم - نمونه های کاربردی جریانهای گازی

حل معادله رینولدز اصلاح شده:

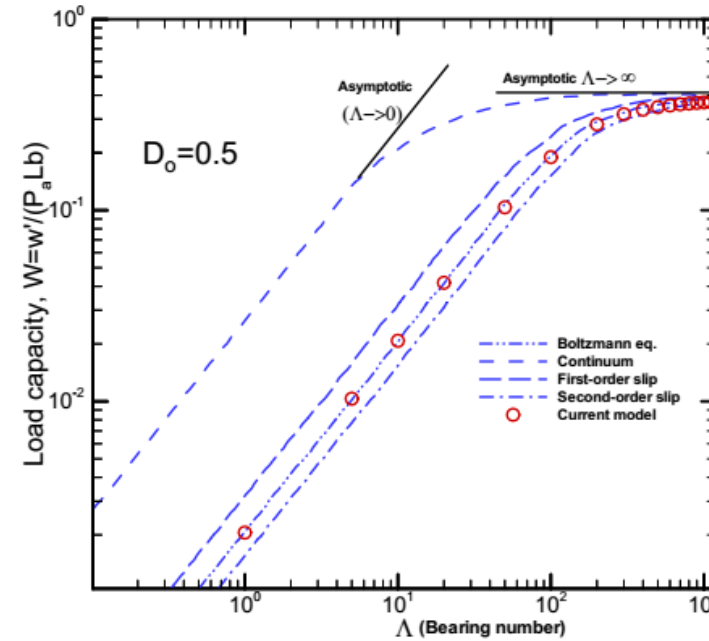
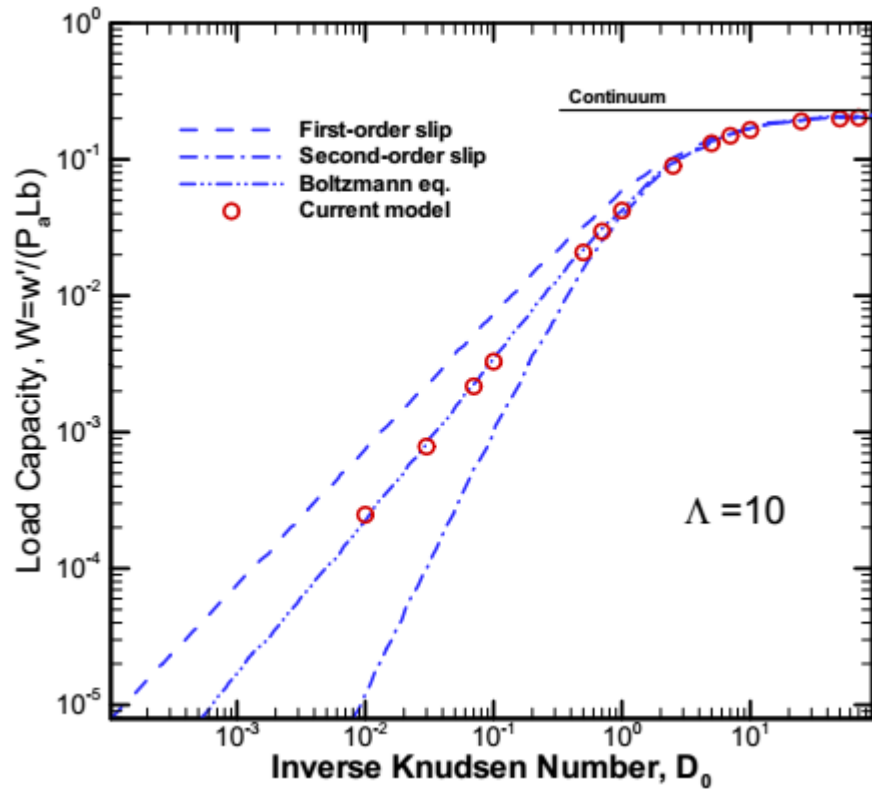
با روش اخیر توزیع فشار برای تمام نادسنها عالی بدست آمده است.



فصل ششم - نمونه های کاربردی جریانهای گازی

حل معادله رینولدز اصلاح شده:

ظرفیت بار:

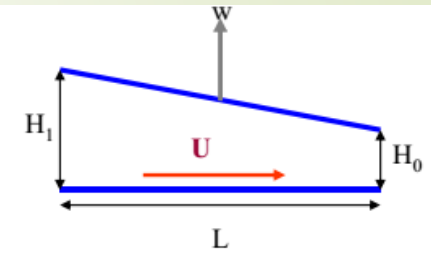


Non-dimensional load capacity:

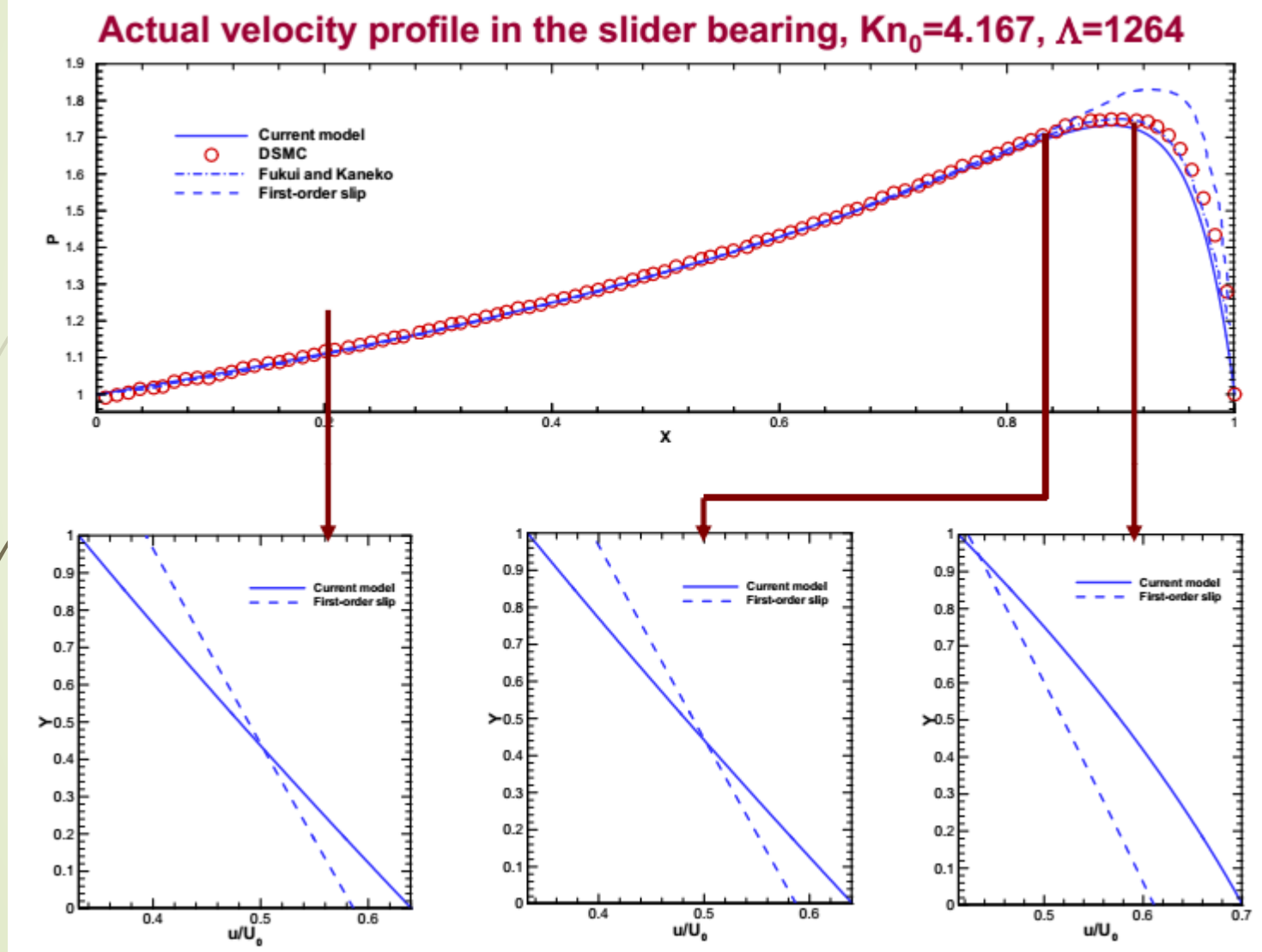
$$W = \frac{w'}{P_a L b} = \frac{1}{P_a L b} \int_0^1 (P-1) dX$$

Load capacity of the slider bearing:

- Represents vertical load acting on the slider bearing.
- Determines the position of the flying head.
- The head will not accurately read or write if it flies too high and will catastrophically crash into the spinning platter if it flies too low.



فصل ششم - نمونه های کاربردی جریانهای گازی



حل معادله رینولدز اصلاح شده:

پروفیل سرعت در سه مقطع:

فصل ششم - نمونه های کاربردی جریانهای گازی

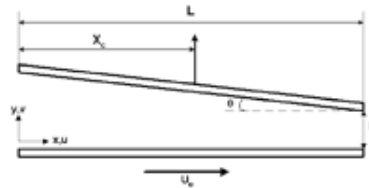
یه نام خدا

پروژه اول درس جریانهای میکرو و نانو- مدرس: محمد وهابی- تاریخ تحویل: ۱۰/۱۰/۱۴۰۰

در کلاس نشان داده شد که معادله رینولدز اصلاح شده لغزشی بی بعد شده برای لایه روغنکاری گازی بین لغزنده و دیسک گردان (مطابق یا شکل زیر) یا تعریف پارامترهای بدون بعد $X = \frac{x}{L}$ ، $H = \frac{h}{h_0}$ ، $P = \frac{p}{p_{atm}}$ و

یه شکل زیر است: $\Lambda = 6 \frac{\mu_e U_e L}{p_e h_0^2}$

$$\frac{\partial}{\partial X} \left[PH^3 \frac{dP}{dX} (1 + \alpha Kn) \left(\frac{6Kn}{1 + Kn} + 1 \right) \right] = \Lambda \frac{\partial}{\partial X} (PH)$$



نشان دهید این معادله یا تعریف $\psi = PH$ یه شکل زیر در می آید:

$$\frac{d}{dX} \left[C_1 H \frac{d\psi}{dX} - (C_2 + \Lambda) \psi \right] = 0$$

که: $C_2 = C_1(1 - H_1)$ و $C_1 = (\psi + \alpha Kn_e) \left(\frac{\psi + 7Kn_e}{\psi + Kn_e} \right)$

معادله بالا را به روش تفاضل محدود (Finite Difference) یا روشی و آن را به کمک رایانه (یا نوشتن یک الگوریتم تکراری) حل کرده و نتایج را یا نتایج شبیه سازی مستقیم مونت کارلو (DSMC) موجود برای رژیمهای مختلف مقایسه کنید.

راهنمایی: در طی قرآیند حل C_1 و C_2 از مقدار قبلی حساب می شوند و در گسسته سازی مانند یک پارامتر ثابت قرص می شوند و در الگوریتم تکراری حل از حل تکرار قبلی محاسبه می شوند. برای حل شرایط مرزی ورودی و خروجی کانال را اتمسفر ($P=1$) در نظر بگیرید.

فصل شانزدهم - مدل سازی چند مقیاسه جریانهای مایعات

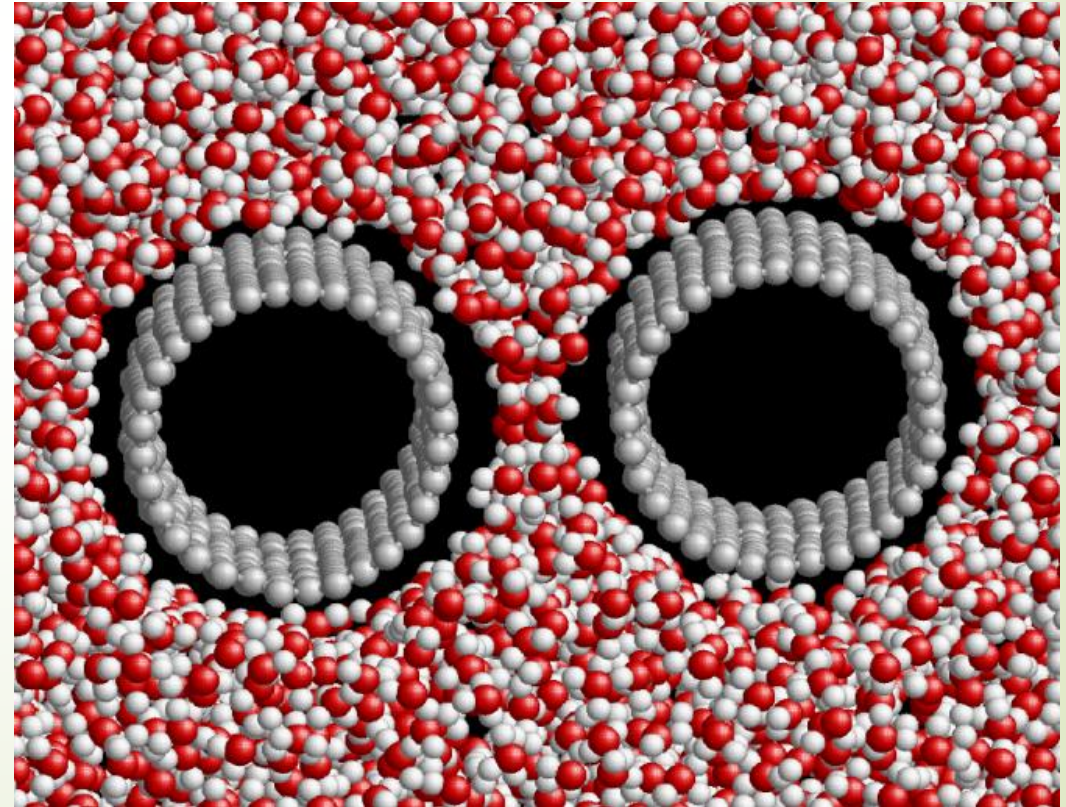
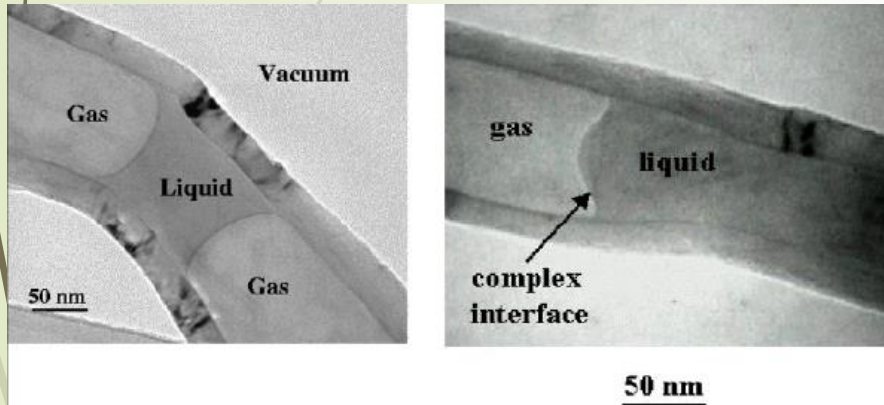
- روش دینامیک مولکولی (MD=Molecular Dynamics): در سال ۱۹۵۷ توسط Alder و Wainwright ارائه شد.
- روش قطعی (deterministic) است.
- بیشتر بیان شده که مناسب برای مدل سازی مایعات است.
- MD برای شبیه سازی حجمهای بسیار کوچک جریانهای مایعات با ابعاد از مرتبه 100nm یا کوچکتر و برای فواصل زمانی چند ده نانو ثانیه مناسب است.
- روش MD به خوبی در دامنه های با ابعاد نانومتر برخورد می کند و شاید بتوان گفت تنها روش دقیق شبیه سازی جریانهای شامل دارای برش زیاد در رژیمهای غیرپیوسته است.
- برای ابعادی از مرتبه ۱۰ مولکول، فرضیه محیط پیوسته حتی برای مایعات هم کاملاً اعتبارش از بین می رود و برای شبیه سازی رفتار اتمستیک چنین سیستمی باید از MD استفاده شود.
- MD برای شبیه سازی میکرو جریانهای گازی به دلیل فواصل بزرگ بین مولکولی مناسب نیست (DSMC مناسب است).

فصل شانزدهم - مدل سازی چند مقیاسه جریانهای مایعات

روش دینامیک مولکولی (MD=Molecular Dynamics):

با روش MD می توان رفتار سیالاتی-ترمودینامیکی نانوتیوبها را بررسی کرد (مثلا رفتار جالب آب دوستی و آب گریزی نانوتیوبهای کربنی).

مثلا نتایج شبیه سازی MD آب گریزی در اطراف دو نانوتیوب کربنی به قطر 5nm.



فصل شانزدهم - مدل سازی چند مقیاسه جریانهای مایعات

➤ روش دینامیک مولکولی (MD=Molecular Dynamics):

➤ روش MD مسیر حرکت ذراتی که اتمهای سیستم را مدل می کنند، محاسبه می کند.

➤ در این روش تعدادی نقطه در فضای فازی به صورت تابعی از زمان تولید می شود. این ذرات که متعلق به یک دسته جمعی (ensemble) هستند با ترکیبات مختلف سیستم و ممنت آنها ارتباط دارند. منظور از بکارگیری دسته جمعی (ensemble) مجموعه ای از نقاط است که حالت ترمودینامیک خاصی را ارضاء می کنند. دسته جمعی های مختلفی در MD بکار می روند:

➤ الف) NPT (دسته جمعی فشار ثابت-دما ثابت) که با تعداد معینی اتم (N) با فشار ثابت (P) و دمای ثابت (T) مشخص می شود.

➤ ب) NVE که با تعداد معینی اتم (N) با حجم ثابت (V) و انرژی ثابت (E) مشخص می شود. (با سیستم ایزوله تطابق دارد)

➤ ج) NVT که مجموعه ای از همه سیستمها است که حالت ترمودینامیکی شان با تعداد ثابت اتمها (N)، با حجم ثابت (V) و دمای ثابت (T) مشخص می شود.

➤ د) μVT که با پتانسیل شیمیایی ثابت (μ)، حجم ثابت و دمای ثابت مشخص می شود.

استفاده از **perturbation**

➤ شبیه سازی های مبتنی بر MD به دو دسته تقسیم می شوند: الف) شبیه سازی های تعادلی (EMD) و ب) شبیه سازی های غیرتعادلی (NEMD).

فصل شانزدهم - مدل سازی چند مقیاسه جریانهای مایعات

➤ روش دینامیک مولکولی (MD=Molecular Dynamics):

➤ در روش MD معادله حاکم بر حرکت دسته جمعی اتمها ناشی از نیروهای بین اتمی است که به نوبه خود از اندرکنشهای الکترونیکی و هسته ها نشات می گیرند. بنابراین اعتبار شبیه سازی با توانایی تابع انرژی پتانسیل مورد استفاده در مدل کردن زیربنای سیستم مرتبط است.

➤ در شبیه سازی به روش MD کلاسیک، ابتدا یک سیستم شامل N ذره انتخاب شده و قانون حرکت نیوتون برای اتمها حل می شوند تا زمانی که خواص سیستم دیگر با زمان تغییر نکنند. به محض اینکه شرایط پایا حاکم شد، اندازه گیری خواص مورد نظر انجام می شود.

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i$$



$$\mathbf{a}_i(t) = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i}$$

➤ چهار مرحله کلیدی روش MD:

➤ ۱- مقدار دهی اولیه (Initialization):

➤ ۲- محاسبه نیرو (Force Calculation):

➤ ۳- انتگرالگیری معادلات حرکت (Integration of the Equations of Motion):

➤ ۴- ذخیره کردن اطلاعات و تحلیل آنها (Data Storage and Analysis):

فصل شانزدهم - مدل سازی چند مقیاسه جریانهای مایعات

➤ روش دینامیک مولکولی (MD=Molecular Dynamics):

➤ چهار مرحله کلیدی روش MD:

➤ ۱- مقدار دهی اولیه (Initialization): قبل از شروع شبیه سازی، مکان و سرعت اولیه تمام ذرات سیستم مشخص می شود (مکانهای اولیه باید با ساختار مورد شبیه سازی همخوانی داشته باشند).

➤ ۲- محاسبه نیرو (Force Calculation): در هر گام، اندرکنشهای بین ذرات بررسی شده و نیروهای مرتبط با این اندرکنشها محاسبه می شوند.

➤ ۳- انتگرالگیری معادلات حرکت (Integration of the Equations of Motion): معادلات حرکت با روشهای مختلف (که معمولا بر گرفته از FD هستند) انتگرالگیری شده و مکان و سرعت جدید ذرات بدست می آیند. الگوریتم Verlet یکی از پرکاربردترین الگوریتمها برای انتگرالگیری زمانی است:

$$\mathbf{r}_i^{n+1} = 2\mathbf{r}_i^n - \mathbf{r}_i^{n-1} + \mathbf{a}_i(t) \times \Delta t^2 + O(\Delta t^4)$$

➤ ۴- ذخیره کردن اطلاعات و تحلیل آنها (Data Storage and Analysis): بعد از انتگرالگیری معادلات حرکت، خواص مرتبط سیستم (نظیر دما، فشار و حجم) محاسبه و ذخیره می شوند.

فصل شانزدهم - مدل سازی چند مقیاسه جریانهای مایعات

➤ روش دینامیک مولکولی (MD=Molecular Dynamics):

➤ تعریف دقیق پتانسیل بین مولکولی کلید هر شبیه سازی درست در مقیاس اتمی است.

➤ شکل کلی انرژی پتانسیل (V) سیستمی شامل N ذره اندرکنش کننده:

$$V = \sum_i V_1(r_i) + \sum_i \sum_{j>i} V_2(r_i, r_j) + \overbrace{\sum_i \sum_{j>i} \sum_{k>j>i} V_3(r_i, r_j, r_k)}^{\text{معمولا صرفنظر می شوند}} + \dots$$

ناشی از نیروهای خارجی

ناشی از تاثیر یک جفت

ناشی از تاثیر سه تایی

➤ معمولا در سمت راست از ترمهای سوم و بالاتر صرفنظر می کنند.

فصل شانزدهم - مدل سازی چند مقیاسه جریانهای مایعات

➤ روش دینامیک مولکولی (MD=Molecular Dynamics):

➤ پتانسیلهای بین مولکولی جفتی (دوتایی):

➤ ۱- پتانسیل Square-Well:

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r \leq \sigma \\ -\epsilon & \sigma < r \leq \lambda\sigma \\ 0 & r > \lambda\sigma \end{cases}$$

➤ ساده ترین مدل که می تواند خواص مایعات را تولید کنند.

➤ آنها با کره های سخت غیرقابل نفوذ به قطر σ مدل می شوند.

➤ r فاصله بین مولکولها، λ ضریب و ϵ اندازه اندرکنش جذبی می باشد.

فصل شانزدهم - مدل سازی چند مقیاسه جریانهای مایعات

➤ روش دینامیک مولکولی (MD=Molecular Dynamics):

➤ پتانسیلهای بین مولکولی جفتی (دوتایی):

➤ ۲- پتانسیل Yukawa:

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r \leq \sigma \\ -\epsilon\sigma/r e^{-z(r/\sigma-1)} & \sigma < r \end{cases}$$

➤ که Z یک پارامتر است که بسته به مسئله تعیین می شود.

➤ برای سیستمهای یونی هم کاربرد دارد.

➤ اگر $z=1.8$ رفتار این مدل بسیار شبیه به مدل لnard-جونز با توانهای ۶ و ۱۲ رفتار می کند.

فصل شانزدهم - مدل سازی چند مقیاسه جریانهای مایعات

روش دینامیک مولکولی (MD=Molecular Dynamics):

پتانسیلهای بین مولکولی جفتی (دوتایی):

$$V(r) = \epsilon \left[\frac{m}{n-m} x^{-n} - \frac{n}{n-m} x^{-m} \right]$$

$$x = r/r_m$$

۳- پتانسیل Leonard-Jones:

که r_m جدایی متناسب با مینیمم انرژی پتانسیل. m و n دو ثابت هستند.

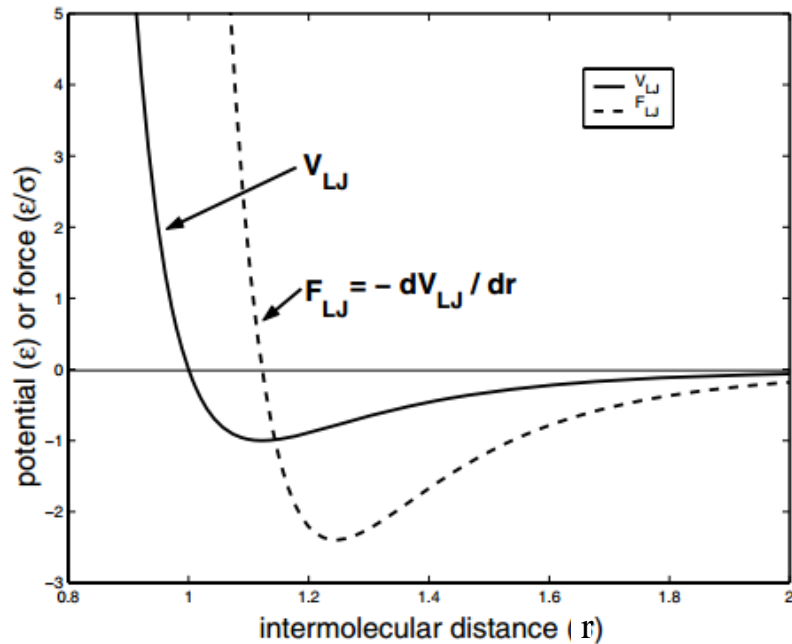
قطر کره سخت با جدایی مینیمم انرژی متناسب است: $\sigma = r_m \left(\frac{m}{n} \right)^{\frac{1}{n-m}}$

یکی از پرکاربردترین مدلها برای مواد غیرقطبی.

شکل پر کاربرد به ازای $m=6$ و $n=12$:
$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

ترم اول نیروی دافعه با برد کوتاه که از تلاقی اتمها به داخل یکدیگر جلوگیری می کند.

ترم دوم جاذبه است.



فصل شانزدهم - مدل سازی چند مقیاسه جریانهای مایعات

➤ روش دینامیک مولکولی (MD=Molecular Dynamics):

➤ پتانسیلهای بین مولکولی جفتی (دوتایی):

➤ ۴- پتانسیل Weeks-Chandler-Andersen (WCA):

➤ این مدل در حقیقت مدل اصلاح شده LJ است (بریده شده و جابجا شده).

$$V(r) = \begin{cases} 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] - V_{LJ}(r_c), & r \leq r_c, \\ 0, & r > r_c, \end{cases}$$

➤ فاصله قطع: $r_c (= \sigma/2^{1/6})$

➤ در این مدل آنها فقط نیروی دافعه به هم وارد می کنند.

فصل شانزدهم - مدل سازی چند مقیاسه جریانهای مایعات

➤ روش دینامیک مولکولی (MD=Molecular Dynamics):

➤ پتانسیلهای بین مولکولی جفتی (دوتایی):

➤ ۵- پتانسیل Buckingham:

$$V(r) = A \exp(-Br) - \frac{C_6}{r^6}$$

➤ A، B و C6 ثوابت تجربی.

➤ نسبت به LJ ترم دافعه نمایی شده که واقعتر است ولی هزینه محاسباتی بیشتر شده است.

➤ ۶- پتانسیل Coulomb:

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} \frac{q_1q_2}{r}$$

➤ برای محاسبه اندرکنشهای الکتروستاتیک وقتی بار داریم مثلا برای یونها و مولکولهای چند اتمی با بار جزئی کاربرد دارد.

فصل شانزدهم - مدل سازی چند مقیاسه جریانهای مایعات

روش دینامیک مولکولی (MD=Molecular Dynamics):

$$\vec{F} = -\nabla_r V(r) \quad \text{محاسبه نیروی ما بین دو ذره:}$$

توجه: نیروی ما بین دو ذره، در راستای خط وصل دو ذره است.

برای محاسبه نیروی وارده به یک ذره خاص، باید بین نیروهای وارده به آن از طرف ذرات مختلف برآیند بگیریم.

با فرض پتانسیل لئونارد-جونز در روش دینامیک مولکولی (MD)، اندازه نیروی وارد بر ذره A (در شکل زیر) در اثر حضور ذرات B و C را بیابید. هر واحد روی شکل 1nm می باشد. ضمناً قطر مولکول با فرض کره سخت را 0.1nm در نظر بگیرید. راهنمایی: نیروی ما بین دو ذره، در راستای دو ذره است.

$\sigma = 0.1 \text{ nm}$

$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right]$

$F = -\frac{dV}{dr} = 4\epsilon \left[\sigma^6 \times (-6)r^{-7} - \sigma^{12} \times (-12)r^{-13} \right]$

$r_{AB} = \sqrt{2^2 + 3^2} = \sqrt{13} \text{ nm} \approx 0.25$

$r_{AC} = \sqrt{1^2 + 4^2} = \sqrt{17} \text{ nm} \approx 0.25$

$\vec{r}_{AB} = \frac{2\hat{i} + 3\hat{j}}{\sqrt{2^2 + 3^2}}$

$\vec{r}_{AC} = \frac{-4\hat{i} - \hat{j}}{\sqrt{1^2 + 4^2}}$

$|\vec{F}_{AB}| = \frac{4\epsilon}{r_{AB}} \left[12 \left(\frac{\sigma}{r_{AB}}\right)^{12} - 6 \left(\frac{\sigma}{r_{AB}}\right)^6 \right] = 0.25$

$|\vec{F}_{AC}| = \frac{4\epsilon}{r_{AC}} \left[12 \left(\frac{\sigma}{r_{AC}}\right)^{12} - 6 \left(\frac{\sigma}{r_{AC}}\right)^6 \right] = 0.125$

$\vec{F} = \vec{F}_{AB} + \vec{F}_{AC} = 0.375$