

به نام خدا

طرح پیشنهادی جهت دریافت پایان نامه کارشناسی ارشد

دانشکده فنی و مهندسی

گروه مکانیک سیالات

---

عنوان پایان نامه به فارسی

مطالعه عددی و بهینه سازی اختلاط دو سیال ویسکوالاستیک

عنوان پایان نامه به لاتین

**Numerical and optimization Study of Mixing of two Viscoelastic Fluids**

در حوزه اختلاط سیالات ویسکوالاستیک، مدل‌سازی رئولوژیکی نقش کلیدی در پیش‌بینی رفتار جریان و ناپایداری‌های ناشی از خاصیت کشسانی دارد. در ادامه، چند مدل رایج و پرکاربرد معرفی می‌شود که در شبیه‌سازی‌های عددی و تجربی به‌ویژه در میکروسیالات و میکسرهای صنعتی استفاده می‌شوند:

۱. مدل اولدروید-بی<sup>۱</sup>:

$$\lambda \tau_p^\nabla + \tau_p = 2\eta_p D \quad (1)$$

این مدل به عنوان یکی از ساده‌ترین مدل‌های ویسکوالاستیک، رفتار سیالات پلیمری را با ترکیبی از ویسکوزیته نیوتنی و کشسانی خطی توصیف می‌کند. این مدل قادر به پیش‌بینی تنش‌های نرمال اولیه است، اما با فرض کشش‌پذیری نامحدود زنجیره‌های پلیمری، در نرخ‌های برش بالا می‌تواند منجر به نتایج غیرواقعی‌مانند شود. با وجود این محدودیت، به دلیل سادگی ساختار ریاضی، به طور گسترده‌ای در مطالعات پایه‌ای جریان‌های ویسکوالاستیک مورد استفاده قرار می‌گیرد. در این مدل  $\tau_p^\nabla$  و  $D$  به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\tau_p^\nabla = \frac{\partial \tau_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \tau_p) - (\mathbf{u} \tau_p)^T \cdot \tau_p - \tau_p \cdot (\nabla \mathbf{u}) \quad (2) \quad \text{مشتق اولدروید بالایی تنش پلیمری}$$

$$D = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] \quad (3) \quad \text{تنسور نرخ کرنش}$$

۲. مدل گیسکوس<sup>۲</sup>:

$$\lambda \tau_p^\nabla + \left(1 + \frac{\alpha \lambda}{\eta_p} \tau_p\right) \tau_p = 2\eta_p D \quad (4)$$

ضریب غیر خطی  $\alpha$  معمولاً در بازه  $0 \leq \alpha \leq 1$  قرار می‌گیرد.

این مدل با وارد کردن یک ترم درجه دوم غیرخطی از تانسور تنش، رفتار واقعی‌تری از سیالات پلیمری را ارائه می‌دهد. این مدل نه تنها اثرات کاهش ویسکوزیته برشی را نمایش می‌دهد، بلکه کاهش تنش‌های نرمال در نرخ‌های برش بالا را نیز پیش‌بینی می‌کند. وجود پارامتر  $\alpha$  در این مدل، امکان تنظیم درجه غیرخطی بودن و تطبیق بهتر با داده‌های تجربی را فراهم می‌سازد. در کامسول از این مدل برای سیالات پلیمری رقیق تا غلظت متوسط که اثرات برهم‌کنش داخلی زنجیره‌ها اهمیت دارد، استفاده می‌شود و برای حل ناپایداری‌های الاستیک نسبت به Oldroyd-B پایدارتر است.

۳. مدل (پترلین<sup>۳</sup> - الاستیک غیرخطی با توسعه‌پذیری محدود<sup>۴</sup>) (FENE-P):

$$\lambda \tau_p^\nabla + \left\{ 1 + \frac{\frac{3L^2}{L^2-3} + \frac{\lambda}{\eta_p} tr(\tau_p)}{L^2} \right\} \tau_p = \frac{2L^2}{L^2-3} \eta_p D \quad (5)$$

پارامتر  $L^2$  به محدودیت کشیدگی در FENE اشاره دارد و شرط نظریه  $L^2 > 3$  در این مدل همیشه برقرار بوده و بسته به طول زنجیر فرضی مقدار آن  $10^2 < L^2 < 10^4$  می‌باشد. همچنین تعریف  $tr(\tau_p)$  به شکل زیر است.

$$tr(\tau_p) = trace(\tau_p) = \tau_{xx} + \tau_{yy} + \tau_{zz} \quad (6)$$

در این مدل، با استفاده از تقریب پترلین، وابستگی ضریب کشسانی به دنباله تانسور تنش لحاظ می‌شود و رفتار پلیمر را با در نظر گرفتن طول محدود زنجیره‌های پلیمری، بهتر توصیف می‌کند. این مدل مشکل کشیدگی بی‌نهایت Oldroyd-B را حذف می‌کند و اجازه می‌دهد تنسور کانفورماسیون در نرخ‌های کششی بالا اشباع شود. در کامسول، FENE-P برای میکروفلوئیدیک‌های سرعت بالا، رئولوژی جریان‌های با عدد Deborah بالا و محلول‌های دمبلی با طول محدود مناسب است.

<sup>1</sup> Oldroyd-B

<sup>2</sup> Giesekus

<sup>3</sup> Peterlin

<sup>4</sup> Finitely Extensible Nonlinear Elastic

۴. مدل FENE-CR :

$$\lambda \tau_p^\nabla + \left\{ \frac{L^2 + \frac{\lambda}{\eta_p} tr(\tau_p)}{L^2 - 3} \right\} \tau_p = 2 \left\{ \frac{L^2 + \frac{\lambda}{\eta_p} tr(\tau_p)}{L^2 - 3} \right\} \eta_p D \quad (7)$$

مدل FENE-CR به عنوان یک نسخه اصلاح شده از مدل FENE، با حفظ ویسکوزیته برشی اولیه، رفتار سیال را در محدوده وسیعی از نرخ‌های برش بهبود می‌بخشد. این مدل که توسط Chilcott و Rallison توسعه داده شد، برای شبیه‌سازی سیالاتی که در نرخ‌های برش بسیار بالا به یک ویسکوزیته حدی می‌رسند مناسب است و در مدل‌سازی جریان‌های با تغییرات سریع، عملکرد قابل قبولی ارائه می‌دهد.

۵. مدل LPTT :

$$\lambda \tau_p^\nabla + \left\{ 1 + \frac{\lambda \epsilon}{\eta_p} tr(\tau_p) \right\} \tau_p = 2 \eta_p D \quad (8)$$

پارامتر  $\epsilon$  معمولاً در بازه  $0 \leq \epsilon \leq 1$  قرار می‌گیرد.

Linear PTT، مدل خطی Phan-Thien-Tanner که بر اساس تئوری شبکه‌ای پلیمرها بنا شده است، با در نظر گرفتن کشش‌پذیری محدود شبکه پلیمری، رفتار ویسکوالاستیک را توصیف می‌کند. فرم خطی شده ترم اضافی در این مدل، محاسبات عددی را تسهیل می‌بخشد، در حالی که همچنان قادر به پیش‌بینی اثرات غیرخطی مهم مانند ویسکوزیته برشی نزولی و تنش‌های نرمال است.

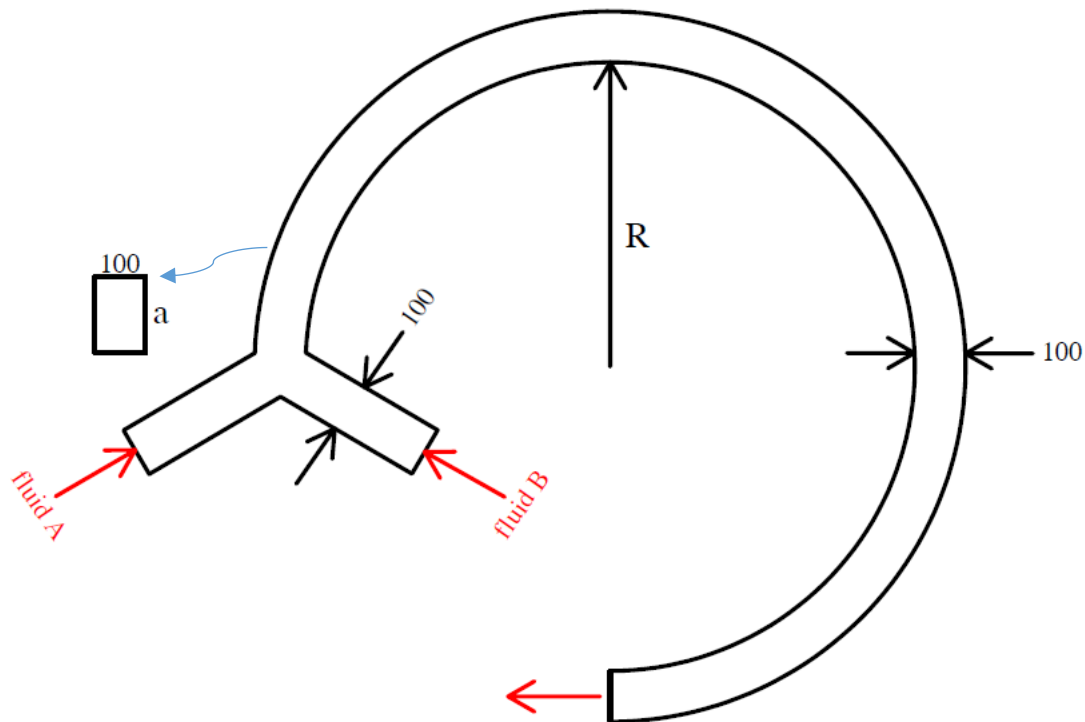
۶. مدل EPTT :

$$\lambda \tau_p^\nabla + \exp \left\{ \frac{\lambda \epsilon}{\eta_p} tr(\tau_p) \right\} \tau_p = 2 \eta_p D \quad (9)$$

Exponential PTT، مدل نمایی Phan-Thien-Tanner با جایگزینی ترم خطی در مدل LPTT با یک تابع نمایی، وابستگی واقعی‌تری بین کشش شبکه پلیمری و تنش ایجاد می‌کند. این مدل به ویژه در پیش‌بینی رفتار سیالات پلیمری در جریان‌های کششی و نرخ‌های تغییر شکل بالا، دقت بیشتری از خود نشان می‌دهد و تطبیق بهتری با نتایج آزمایشگاهی دارد.

### ۳- معرفی مسئله

در اینجا اختلاط دو سیال ویسکوالاستیک با غلظت‌های متفاوت در یک میکرومیکسر سه بعدی Circular-Y شکل با ضخامت  $100 \mu m$  و عمق  $a \mu m$  بررسی می‌شود. (شایان ذکر است در هر دو شاخه ورودی از یک سیال پایه ویسکوالاستیک یکسان استفاده خواهد شد و فقط تفاوت در وجود نوع رنگ دانه ردیابی یا غلظت پلیمر خواهد بود). شکل (۳) هندسه میکرومیکسر را نشان می‌دهد. دو سیال از ورودی‌های مقابل یکدیگر وارد می‌شوند و اختلاط آنها در اتصال بین ورودی‌ها و در قسمت Circular میکرومیکسر صورت می‌گیرد. طبق داده‌های تجربی ویهوا و همکاران [۱۵]، محلول آبی با ۱۰٪ پلی اتیلن گلیکول (PEG) با وزن مولکولی  $10^3 \times 8$  و ۰/۱٪ پلی اتیلن اکساید (PEO) با وزن مولکولی  $2 \times 10^6$  که یک سیال بوگر پایدار با ویژگی‌های رئولوژیک مشخص شامل لزجت دینامیکی  $0.1094 \text{ Pa.s}$  و چگالی  $1204/8 \text{ kg/m}^3$  است، به عنوان سیال ویسکوالاستیک انتخاب می‌شود. (یا نمونه‌های دیگر)



شکل (۳): هندسه میکرومیکسر سه بعدی مسئله

#### ۴- هدف‌های طرح

- ۱- طراحی یک میکرومیکسر سه بعدی جدید
- ۲- بررسی مدل‌های ویسکوالاستیک FENE-CR, FENE-P, EPTT, LPTT, Gieskus, Oldroyd-B و انتخاب مدل مناسب (این مدل‌ها در نرم افزار کامسول نسخه ۶.۳ موجود هستند)
- ۳- بررسی اثر تغییر متغیرهای هندسی  $a$  و  $R$  بر عملکرد اختلاط دو سیال ویسکوالاستیک
- ۴- بررسی اثر تغییر متغیرهای ویسکوالاستیک  $MI, \beta, Sc, De, Wi, Re$  بر عملکرد اختلاط دو سیال ویسکوالاستیک
- ۵- بهینه سازی میکرومیکسر طراحی شده با استفاده از دو روش (۱- نرم افزار کامسول ۲- Design-Expert و روش سطح پاسخ) و مقایسه جواب آنها با یکدیگر

#### ۵- فرضیه‌ها (معادلات حاکم)

معادلات حاکم بر فرایند اختلاط دو سیال ویسکوالاستیک، معادلات پیوستگی، مومنتوم، پخش جابه‌جایی (تنسور ساختاری) و انتقال غلظت با فرض جریان به صورت تراکم ناپذیر و تک فاز، غیردائم و آرام، بدون نیروهای حجمی، دما ثابت و بدون اثرات حرارتی به صورت زیر بیان می‌شوند. اختلاط نیز بر اساس انتقال جرم صورت می‌گیرد.

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (10)$$

$$\rho \left( \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} \right) = -\nabla P + \nabla \cdot \vec{\tau} = -\nabla P + \nabla \cdot (2\eta_s D) + \nabla \cdot \tau_p \quad (11)$$

که  $u$  بردار سرعت،  $\rho$  چگالی،  $P$  فشار و  $\tau$  (تنسور تنش کل) مجموع تنسور تنش برشی حلال یا نیوتونی ( $\tau_s$ ) و پلیمری (محلول الاستیک) ( $\tau_p$ ) است:

$$\vec{\tau} = \vec{\tau}_s + \vec{\tau}_p \quad (12)$$

که

$$\tau_S = \eta_S [\nabla u + (\nabla u)^T] \quad (13)$$

تنسور تنش برشی محلول با استفاده از معادلات ساختاری سیال ویسکوالاستیک مانند (Oldroyd-B, Giesekus, LPTT, FENE-CR) مدل می‌شود:

در ابتدا تنسور تنش برشی محلول با استفاده از معادلات ساختاری سیال ویسکوالاستیک مانند اولدرویید-بی مدل می‌شود:

$$\tau_p + \lambda \left[ \frac{\partial \tau_p}{\partial t} + \nabla \cdot (u \tau_p) - (u \tau_p)^T \cdot \tau_p - \tau_p \cdot (\nabla u) \right] = \eta_p [\nabla u + (\nabla u)^T] \quad (14)$$

همچنین  $\lambda$  زمان تخفیف سیال ویسکوالاستیک (زمان ریلکس شدن) و  $\eta_p$  لزجت دینامیکی محلول (ویسکوزیته سهم پلیمری) است. معادله ساختاری اولدرویید-بی به شکل تنسوری به صورت زیر است:

$$\tau_p = \frac{\eta_p}{\lambda} [C - I] \quad (15)$$

که  $I$  و  $C$  به ترتیب، تنسور متقارن ساختاری (بیانگر غلظت) و تنسور واحد هستند. با جایگذاری معادله (15) در معادله (14)، معادله (14) به صورت زیر در می‌آید:

معادله تنسور ساختاری:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \cdot \nabla C - (\nabla u)^T \cdot C - C \cdot (\nabla u) = \frac{1}{\lambda} [I - C] \quad (16)$$

معادله انتقال غلظت:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \cdot \nabla C = D_m \nabla^2 C \quad (17)$$

$D_m$  ضریب انتشار مولکولی<sup>1</sup> یا انتشار جرم می‌باشد.

حال با استفاده از کمیات بدون بعد برای طول، سرعت، زمان، فشار و غلظت داریم:

$$p^+ = p / (\rho u_{in}^2) \quad t^+ = t u_{in} / D_h \quad u^+ = (u_x, u_y, u_z) / u_{in} \quad C^+ = C / C_{ref} \quad \nabla^+ = D_h \cdot \nabla$$

$D_h$  به عنوان طول مشخصه هندسی یعنی قطر هیدرولیکی در نظر گرفته می‌شود.

معادلات بدون بعد پیوستگی، مومنتوم، پخش جابه جایی و انتقال غلظت به صورت زیر در خواهند آمد:

$$\nabla^+ \cdot u^+ = 0 \quad (18)$$

$$\frac{\partial u^+}{\partial t^+} + u^+ \cdot \nabla^+ u^+ = -\nabla^+ P^+ + \frac{\beta}{Re} \nabla^{+2} u^+ + \frac{1 - \beta}{Re} \nabla^+ \cdot \tau_p^+ \quad (19)$$

$$\tau_p^+ = \frac{1}{De} [C - I] \quad (20)$$

$$\frac{\partial u^+}{\partial t^+} + u^+ \cdot \nabla^+ u^+ = -\nabla^+ P^+ + \frac{\beta}{Re} \nabla^{+2} u^+ + \frac{1 - \beta}{Re De} \nabla^+ \cdot C \quad (21)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t^+} + u^+ \nabla^+ \cdot C - (\nabla^+ u^+)^T \cdot C - C \cdot (\nabla^+ u^+) = \frac{1}{De} [I - C] \quad (22)$$

$$\frac{\partial C^+}{\partial t^+} + u^+ \nabla^+ \cdot C^+ = \frac{1}{Re Sc} \nabla^{+2} C^+ = \frac{1}{Pe} \nabla^{+2} C^+ \quad (23)$$

$$\beta = \frac{\eta_s}{\eta_o} \quad \text{و} \quad \eta_o = \eta_s + \eta_p \quad (24)$$

<sup>1</sup> Molecular Diffusion Coefficient

در این معادله،  $\eta_0$  لزجت کل،  $\beta$  نسبت سهم نیوتونی (حلال) به کل ویسکوزیته و  $\eta_s$  لزجت دینامیکی حلال (ویسکوزیته سهم نیوتونی) است. همچنین اعداد بدون بعد رینولدز، دپورا، اشمیت و پکلت به صورت زیر تعریف می شوند:

$$Re = \frac{u_{in} D_h}{\eta_0} \quad (25)$$

$$Wi = \frac{u_{in} \lambda}{D_h} \quad (26)$$

$$De = \frac{\lambda}{t_c} \quad (27)$$

$$De = \frac{D_h}{u_{in} t_c} Wi \quad (28) \quad \text{رابطه بین عدد دپورا و وایزنبرگ طبق روابط (26) و (27)}$$

$$Sc = \frac{\vartheta}{D_m} = \frac{\eta_0}{\rho D_m} \quad (29)$$

$$Pe = \frac{u_{in} L}{D_m} = Re Sc \quad (30)$$

$$\vartheta = \frac{\eta_0}{\rho} \quad (31) \quad (\vartheta \text{ لزجت سینماتیکی})$$

در نهایت، شاخص اختلاط با استفاده از رابطه‌ی زیر محاسبه می شود:

$$MI = 1 - \sqrt{\frac{\iint (C - \bar{C})^2}{A \cdot \bar{C} (C_{max} - \bar{C})}} \quad (32)$$

شاخص اختلاط میانگین غلظت در مقطع کانال خروجی است.  $A$  سطح مقطع کانال خروجی،  $\bar{C}$  میانگین غلظت نمونه و  $C_{max}$  حداکثر غلظت نمونه در میکروکانال است. شاخص اختلاط صفر و یک به ترتیب نشان دهنده عدم اختلاط و اختلاط کامل است.

شرایط مرزی مسئله بصورت زیر می باشد:

$$u = 0 \quad \text{و} \quad \frac{\partial C}{\partial n} = 0 \quad \text{دیواره ها: عدم لغزش برای سرعت و نفوذ ناپذیری برای غلظت}$$

$$u = u_{in} \quad \text{و} \quad C = C_0 \quad \text{ورودی: سرعت و غلظت مشخص}$$

خروجی:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad \text{شرط گرادیان صفر برای سرعت}$$

$$n \cdot (-D \nabla C + Cu) = Cu_n \quad \text{شرط مرزی خروجی برای غلظت}$$

$$P = 0 \quad \text{برای سرعت در خروجی از شرط فشار صفر مرجع استفاده می شود.}$$

دما در سرتاسر مسئله ثابت و برابر با دمای محیط در نظر گرفته می شود.

روش سطح پاسخ<sup>1</sup> (RSM) یکی از روش‌های قدرتمند طراحی آزمایش و بهینه‌سازی فرآیندهاست که در اختلاط دو سیال ویسکوالاستیک به دلیل وابستگی شدید به پارامترهای فرآیندی (مانند سرعت جریان، طول کانال، نسبت اختلاط، عدد ویسکوالاستیک و هندسه میکسر) بسیار پرکاربرد است. نرم‌افزار Design-Expert به صورت تخصصی برای این کار طراحی شده است. هدف اصلی RSM ایجاد یک مدل ریاضی تجربی برای توصیف رابطه بین متغیرهای مستقل (فاکتورها) و پاسخ‌های فرآیند (مانند شاخص اختلاط، انرژی مصرفی، افت فشار) است که مدل معمولاً به صورت چندجمله‌ای درجه دوم زیر بیان می‌شود که  $X_i$  بیانگر متغیرهای ورودی (مثلاً دبی، غلظت پلیمر، سرعت

<sup>1</sup> Response Surface Methodology

جریان) و  $Y$  بیانگر پاسخ (مثلاً درصد اختلاط) است و ضرایب  $\beta$  از طریق داده‌های شبیه‌سازی یا آزمایش تعیین می‌شوند:

$$Y = \beta_0 + \sum \beta_i X_i + \sum \beta_{ii} X_i^2 + \sum \beta_{ij} X_i X_j \quad (33)$$

در گام اول جهت تعیین فاکتورها و پاسخ‌ها ابتدا فاکتورها (متغیرهای مستقل) مثل نسبت دبی دو سیال، عدد وایزنبرگ، عدد رینولدز، عدد پکلت، عدد  $\beta$  و طول کلنال یا تعداد المان اختلاط را تعیین می‌کنیم. سپس در گام دوم در نرم افزار Design-Expert به انتخاب طرح کامپوزیت مرکزی<sup>۱</sup> مناسب (CCD) یا طراحی باکس-بنکن<sup>۲</sup> (BBD) برای مدل درجه دوم پرداخته و تعداد آزمایش‌های مورد نیاز را بر اساس تعداد فاکتورها انجام می‌دهیم. در گام سوم با استفاده از نرم افزار کامسول داده‌های پاسخ (متغیرهای وابسته) مثل درصد اختلاط (بر اساس شاخص ضریب تغییرات<sup>۳</sup> یا MI)، افت فشار و زمان ریلکس شدن را استخراج کرده و داده‌ها را به نرم‌افزار Design-Expert منتقل می‌کنیم. در گام چهارم، ضرایب مدل چندجمله‌ای محاسبه شده و آنالیز واریانس<sup>۴</sup> را انجام می‌دهیم. در گام آخر بهینه‌سازی با استفاده از Desirability Function در Design-Expert، در شرایطی که درصد اختلاط حداکثر، افت فشار حداقل و مصرف انرژی نیز کمینه است، را به عنوان نقطه بهینه معرفی می‌کنیم. سپس سطوح پاسخ سه‌بعدی<sup>۵</sup> برای مشاهده تأثیر دو متغیر روی پاسخ و کانتورهای دو بعدی<sup>۶</sup> برای یافتن مناطق بهینه را بدست می‌آوریم.

حال معادلات روش سطح پاسخ، برای متغیرهای ورودی  $Wi$  و  $Re$  و  $\beta$  و  $Pe$  و متغیرهای هندسی به صورت زیر است. فرض کنیم  $MI = Y$ :

$$MI = b_0 + b_1 Re + b_2 Wi + b_3 Pe + b_4 \beta + b_{11} Re^2 + b_{22} Wi^2 + b_{33} Pe^2 \quad (34)$$

$$+ b_{44} \beta^2 + b_{12} Re \cdot Wi + b_{13} Re \cdot Pe + b_{14} Re \cdot \beta + b_{23} Wi \cdot Pe$$

$$+ b_{24} Wi \cdot \beta + b_{34} Re \cdot \beta$$

$$(1 \leq Re \leq 100, \quad 0.1 \leq Wi \leq 10, \quad 10^2 \leq Pe \leq 10^4, \quad 0.1 \leq \beta \leq 0.9)$$

با بهره‌گیری از روش سطح پاسخ، بهینه‌سازی میکرومیکسر پیشنهادی با در نظر گرفتن شاخص اختلاط و افت فشار به‌عنوان توابع هدف انجام خواهد شد.

در مطالعه تجربی، با استفاده از PDMS به ساخت چیپ میکرومیکسر بهینه شده، پرداخته و نتایج حاصله به صورت کیفی با نتایج عددی مقایسه خواهد شد.

همچنین مطالعه عددی فرآیند اختلاط دو سیال ویسکوالاستیک مورد نظر در حالت سه بعدی و با استفاده از نرم‌افزار COMSOL صورت خواهد گرفت.

<sup>1</sup> Central Composite Design

<sup>2</sup> Box-Behnken Design

<sup>3</sup> Coefficient of Variation

<sup>4</sup> ANOVA

<sup>5</sup> 3D plots

<sup>6</sup> Contour plots