

صلى الله عليه وسلم



دانشکده مهندسی

گروه مهندسی مکانیک

عنوان پایان نامه:

بررسی رفتار هیدرودینامیکی و حرارتی جریان غیرتعادلی در میکرو/نانو کاویتی با استفاده از شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو

نگارنده:

علیرضا محمدزاده

ارائه شده جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک

گرایش تبدیل انرژی

استاد راهنما:

دکتر حمید نیازمند

استاد مشاور:

دکتر احسان روحی گل‌ختمی

بهمن ماه ۱۳۹۰

فصل اول

مقدمه‌ای بر سیستم‌های میکرو/نانو

۱-۱ مقدمه

توسعه سریع در ساخت میکرو/نانو سامانه‌ها^۱ همراه با رشد برابری از آشنایی با مکانیک سیالات آنها نبوده است. از آنجا که وسایل اندازه‌گیری در این ابعاد باید از خود این هندسه‌ها کوچکتر باشند، اندازه‌گیری تجربی در این ابعاد بسیار پیچیده بوده و خطای اندازه‌گیری قابل ملاحظه می‌باشد. بنابراین، قابلیت مدل‌سازی عددی دقیق این وسایل حایز اهمیت می‌باشد. مدل‌سازی عددی دقیق می‌تواند قابلیت طراحی این وسایل را با شناسایی میدان جریان و مشخصه‌های عملکردی آنها فراهم نماید. رفتار جریان سیال در ابعاد میکرو-نانو با رفتار جریان در ابعاد بزرگ اندازه تفاوت قابل ملاحظه‌ای دارد. با توجه به اینکه طول مشخصه این وسایل در محدوده‌ی کوچکتر از میکرون می‌باشد، تأثیرات رفتار مولکولی قابل توجه می‌باشد.

^۱ Micro/Nano systems

سه پارامتر مهم تعیین کننده رفتار جریان (عدد نودسن^۲، عدد رینولدز^۳ و نسبت حجم به سطح) در رژیم میکرو-نانو در مقایسه با جریان در ابعاد بزرگ اندازه متفاوت می‌باشند. عدد نودسن به صورت نسبت طول پوشش آزاد مولکولی به طول مشخصه هندسه جریان تعریف می‌شود:

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \quad (1-1)$$

تقسیم‌بندی رژیم‌های جریان براساس عدد نودسن برای اولین بار توسط تسین^۴ [۱] ارائه شد. در شکل (۱-۱) این تقسیم‌بندی و معادلات حاکم بر جریان در هر رژیم نشان داده شده است. این تقسیم‌بندی جریان رقیق‌شده از مطالعات آزمایشگاهی و عددی جریان در میکرو کانال‌های بلند که بیشتر طبیعت یک‌بعدی دارند به دست آمده است و برای هندسه‌های پیچیده‌تر که در آن‌ها اثرات دو و سه‌بعدی به صورت قابل توجهی وجود دارد این تقسیم‌بندی سوال‌برانگیز می‌باشد و درحقیقت رژیم‌های رقیق‌شدگی در هر مسئله با توجه به شرایط مخصوص خود باید تعریف گردد. جریان در وسایل میکرو مانند جریان گاز در ارتفاعات بسیار بالا و فشار پایین دارای اثرات رقیق‌شدگی می‌باشد. مقدار عدد نودسن در یک جریان مشخص‌کننده‌ی درجه-ی رقیق‌شدگی گاز بوده و همچنین میزان اعتبار مدل‌های پیوسته را تعیین می‌نماید. در نزدیکی عدد نودسن برابر صفر، جملات مربوط به تنش برشی و شار حرارتی در معادلات بقای ممنتوم و انرژی قابل چشم‌پوشی هستند و معادلات ناویر-استوکس^۵ به معادلات غیرلزجی اوپلر ساده می‌شوند. با افزایش عدد نودسن اثرات

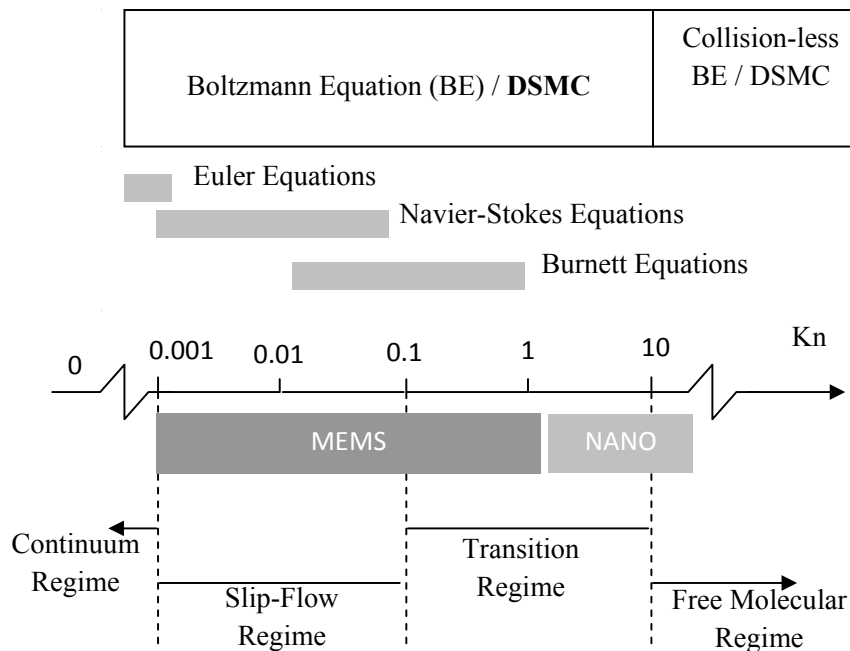
² Knudsen number

³ Reynolds number

⁴ Tsien

⁵ Navier-Stocks

رقیق‌شدگی بیشتر در میدان آشکار شده تا آن‌جا که مدل پیوسته کارآیی خود را در مدل‌سازی صحیح جریان از دست می‌دهد.



شکل (۱-۱): رژیم‌های عدد نودسن و محدودیت‌های آن بر مدل‌سازی گاز

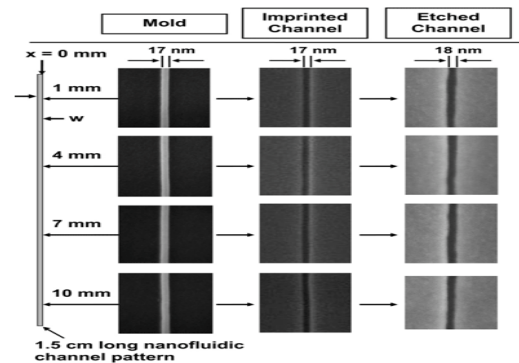
پارامتر مهم دیگر در جریان‌های میکرو و نانو، عدد رینولدز می‌باشد که مقیاسی از نیروی اینرسی به نیروی لزجی را نشان می‌دهد. عدد رینولدز در ریز سامانه‌ها تحت تأثیر طول مشخصه کوچک هندسه قرار می‌گیرد. برای جریان هوای استاندارد در یک ریز سامانه با طول مشخصه ۱ میکرون و عدد ماخ برابر ۱، عدد رینولدز برابر ۲۳ می‌باشد [۲]. بنابراین ریز سامانه‌ها در رژیمی قرار دارند که در آن نیروهای لزجی نقش عمده‌ای را ایفا می‌کند. اگر طول مشخصه به ابعاد نانو کاهش یابد، جریان در رژیم خزشی استوکس با شرایط $Re \ll 1$ قرار می‌گیرد.

پارامتر سومی که جریان میکرو/نانو را از جریان متداول بزرگ اندازه متمایز می‌نماید نسبت قابل ملاحظه سطح به حجم می‌باشد. این نسبت به صورت معکوس با ابعاد هندسه تغییر می‌کند. در یک وسیله در ابعاد میکرون، یک میلیون مرتبه افزایش در نسبت سطح به حجم در مقایسه با یک وسیله که دارای ابعاد یک متر می‌باشد مشاهده می‌گردد. بنابراین، جریان میکرو/نانو به شدت تحت تأثیر نیروهای سطحی قرار دارد. افزایش اصطکاک سطحی و انتقال حرارت دو ویژگی مهم مربوط به ریزسامانه‌ها هستند. افزایش نسبت سطح به حجم به منزله افزایش متناسبی در میزان حرارت منتقل شده به یک ریزسامانه می‌باشد.

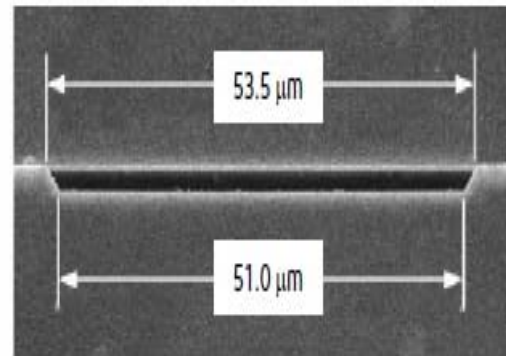
سامانه‌های الکترونیکی-مکانیکی در ابعاد میکرو/نانو^۶ در بسیاری از وسایل کاربردی از جمله لوازم صنعتی و پزشکی مورد استفاده قرار می‌گیرد. سامانه‌های الکترونیکی-مکانیکی میکرواندازه به وسایلی گفته می‌شود که طول مشخصه آن‌ها در حدود میکرومتر تا میلی‌متر بوده و از اجزای الکتریکی و یا مکانیکی تشکیل شده باشند. این سیستم‌ها می‌توانند به عنوان حسگر، کنترلر و عملگر در مقیاس میکرو عمل نمایند. در سال‌های اخیر برای تولید وسایل بسیار ریز در ابعاد میکرو/نانو، فناوری‌های ساخت گوناگونی توسعه یافته است [۳،۴]. فناوری‌های ساخت برای این تجهیزات شامل میکروماشین‌کاری سطح سیلیکونی، لیتوگرافی، ذوب پلاستیکی و ماشین‌کاری تخلیه الکتریکی می‌باشند [۵،۶]. با استفاده از چنین فرایندهای ساختی موتور، شیر، دنده، دیافراگم، محرک‌های الکترواستاتیکی، الکترومغناطیسی، بادی و حرارتی با اندازه‌ای کمتر از ۱۰۰ میکرومتر ساخته شده و استفاده می‌گردند. این وسایل به عنوان حسگر برای فشار، دما و ترکیبات شیمیایی و همچنین به عنوان اجزایی برای سیستم‌های پیچیده چون ربات‌ها و میکروپمپ‌های حرارتی مورد استفاده

⁶ Micro/Nano Electro Mechanical Systems

قرار می‌گیرند [۷،۸]. در شکل (۲-۱) نمونه‌هایی از هندسه‌های کاربردی در ابعاد میکرو/نانو نشان داده شده است.



ب) نانوکanal



الف) میکروکانال

شکل (۲-۱): هندسه‌های مختلف کاربردی در ابعاد میکرو/نانو [۲]

از فواید سامانه‌های به ابعاد میکرو/نانو نسبت به وسایل معمولی دیگر که کار یکسانی را انجام می‌دهند به موارد زیر می‌توان اشاره نمود:

- اینگونه تجهیزات بسیار کوچک بوده به گونه‌ای که صدها عدد از آنها فضایی برابر با یک وسیله متداول بزرگ اندازه که همان کار را انجام می‌دهد اشغال می‌کنند.
- از آنجا که سیستم‌های الکترونیکی می‌توانند به طور مستقیم روی این سامانه‌های میکرواندازه قرار گیرند اجزای الکتریکی سنگینی مورد نیاز نمی‌باشد. این خاصیت سبب می‌گردد که اغتشاش‌های الکتریکی کمتری ایجاد شده و متعاقباً دقت حسگرها افزایش یابد.

• با توجه به قابلیت استفاده از بردهای الکترونیکی فشرده^۷ که هزاران عدد از آنها می‌توانند روی یک قطعه کوچک قرارگیرند، تولید این گونه وسایل باعث کاهش قیمت‌ها به صورت چشم‌گیری می‌گردد.

در مدل‌سازی جریان در این تجهیزات با عبور گاز از مجاری فوق‌ریز مواجه بوده که نیازمند دانش نانو برای تحلیل این‌گونه وسایل می‌باشد. در برخورد با جریان‌های درون وسایل میکرو/نانو، این سؤال به ذهن می‌آید که از کدام مدل و شرط‌مرزی باید استفاده نمود تا به حل صحیحی از خواص جریان دست یافت. لغزش جریان، پرش دمایی، رقیق‌شدگی، اتلافات لزجی، تراکم پذیری، نیروهای بین مولکولی و سایر اثرات غیرمعمول در جریان‌های بزرگ اندازه می‌تواند اثرات چشم‌گیری بر الگوی جریان میکرواندازه بگذارد. به عنوان نمونه در جریان‌های متداول معمولاً اگر عدد ماخ موضعی کمتر از 0.3 باشد جریان را تراکم‌پذیر طبقه‌بندی می‌نمایند، درحالی‌که چنین معیاری را نمی‌توان به عنوان شرط کافی در جریان‌های میکرواندازه در نظر گرفت. مثلاً گرما دادن به سیال از طریق دیواره‌ها ممکن است سبب تغییر چگالی گردد و در نتیجه تقریب تراکم‌ناپذیری حتی در سرعت‌های پایین زیر سؤال رود. همین‌طور در جریان‌های بزرگ اندازه، تغییرات فشار به دلیل اینرسی سیال در اعداد ماخ پایین قابل چشم‌پوشی می‌باشد. این درحالیست که تغییرات فشار در وسایل میکرو/نانو می‌تواند بیشتر به دلیل اثرات تنشی سطحی باشد؛ مثلاً در یک میکروکانال طویل تغییرات فشار می‌تواند برای یک عدد ماخ پایین به‌خاطر اثرات زیاد تنش برشی در سطح کانال چشمگیر باشد.

⁷ Integrated Circuit (IC)

۲-۱ شبیه‌سازی جریان میکرو/نانو

جریان گاز در ابعاد میکرو/نانو می‌تواند با دیدگاه میکروسکوپیک (با استفاده از روش‌های مولکولی) و یا ماکروسکوپیک (با استفاده از معادلات پیوسته) مدل‌سازی گردد. روش‌های مولکولی سیال را بر اساس برخورد بین ذرات و برخورد ذرات به دیوار مدل می‌نماید. از طرف دیگر، مدل پیوسته ناویر-استوکس برای بسیاری از جریان‌های غیرتعادلی استفاده می‌گردد. این روش طبیعت مولکولی سیال را در نظر نمی‌گیرد؛ بلکه به سیال به عنوان یک محیط پیوسته نگاه می‌کند. به دست آوردن حل‌های دقیق از طریق معادلات ناویر-استوکس ملزم به ارضا شدن دو شرط می‌باشد؛ اول آن‌که خواص محلی مانند چگالی و سرعت را بتوان به صورت میانگینی از خواص در مجموعه المان‌هایی که نسبت به ساختار میکروسکوپیک سیال بزرگ‌اند ولی نسبت به پدیده‌های ماکروسکوپیک به اندازه کافی کوچک‌اند در نظر گرفت. شرط دوم این است که جریان نباید از حالت تعادل خیلی دور باشد.

۱-۲-۱ روش مدل‌سازی عددی

به طور کلی، سه عامل اصلی تأثیرگذار شامل اثرات غیرتعادلی (عدد نودسن بالا)، لزجت (عدد رینولدز کم)، و نقش نیروهای سطحی (زیاد بودن نسبت سطح به حجم) باید در مدل‌سازی عددی ریزسامانه‌ها لحاظ گردد. برای رژیم‌های بسیار کوچک نودسن، فرضیه پیوستگی می‌تواند کماکان صادق باشد؛ بنابراین چگالی و سرعت را می‌توان به صورت متوسط روی یک المان که از ابعاد میکروسکوپیک گاز بزرگتر بوده ولی در مقایسه با ابعاد ماکروسکوپیک کوچک‌تر باشد تعریف نمود. در این شرایط و در صورتی که جریان از شرایط تعادل ترمودینامیکی دور نباشد، مدل‌سازی عددی را می‌توان با استفاده از معادلات اوپلر برای جریان غیر لزج و یا معادلات ناویر-استوکس برای جریان لزج انجام داد. برای اعداد نودسن بزرگتر از 0.001 (رژیم لغزشی)،

پدیده رقیق‌شدگی جریان را در نزدیکی مرز جامد-گاز تحت تأثیر قرار می‌دهد. این پدیده را معمولاً با اصلاح شرایط مرزی معادلات ناویر-استوکس به صورت اعمال مقدار لغزش روی دیواره و پرش در دما به صورت تقریب‌های مرتبه اول و یا بالاتر از نودسن، بیان می‌نمایند. شرایط مرزی بسیار دقیقی توسط کارنیاداکیس^۸ و همکاران [۹] پیشنهاد شده است. برای جریان با نودسن بزرگتر از ۰/۱ (رژیم گذرا) اثرات مرتبه بالاتر در برهم‌کنش مولکولی قابل اهمیت می‌شود و رابطه خطی تنش-کرنش که در معادلات ناویر-استوکس استفاده می‌شود اعتبار خود را از دست می‌دهد. معادلات برنت^۹ که براساس بسط چپمن-انسکوگ^{۱۰} تا دقت مرتبه‌ی دوم عدد نودسن از معادله بولتزمن^{۱۱} استخراج می‌شوند را می‌توان به عنوان معادلات حاکم در رژیم گذرا استفاده نمود. ناپایداری ذاتی معادلات برنت مشکلات محاسباتی استفاده از آنها را افزایش داده و حل آنها نیاز به تدابیر خاصی دارد. اگر عدد نودسن به میزان قابل توجهی افزایش داده شود که فرض پیوستگی در فازهای سرعت از درجه‌ی اعتبار ساقط شود، مدل‌سازی عددی براساس معادله بولتزمن (معادله بنیادی تئوری جنبشی) انجام می‌شود.

به طور کلی، حل عددی معادله بولتزمن از دو راه ممکن می‌باشد؛ اول انتگرال‌گیری عددی مستقیم از این معادله و دوم شبیه‌سازی ذره‌ای. انتگرال‌گیری عددی مستقیم (یا دینامیک سیالات محاسباتی بولتزمن) از روش‌های تفاضل محدود و یا المان محدود برای گسسته‌سازی تابع توزیع سرعت استفاده می‌کند. روش انتگرال‌گیری مستقیم از روش‌های قطعی و یا آماری برای محاسبه انتگرال برخوردار که در سمت راست معادله بولتزمن ظاهر می‌شود، استفاده می‌کند (بخش ۲-۲ را نگاه کنید). تعداد زیاد متغیرهای مستقل و هزینه زیاد

⁸ Karniadakis

⁹ Bernette

¹⁰ Chapman-Enskog

¹¹ Boltzmann equation

محاسباتی انتگرال برخورد استفاده از روش دینامیک سیالات محاسباتی بولتزمن را محدود می‌کند. روش‌های جایگزین برای حل معادله بولتزمن استفاده از شبیه‌سازی مستقیم آماری پدیده‌های مولکولی که با تئوری جنبشی توصیف می‌شود می‌باشند. این روش‌ها جریان گاز را به صورت مجموعه‌ای از ذرات در نظر می‌گیرند که از جمله این روش‌ها می‌توان به روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو^{۱۲} (DSMC) اشاره نمود. برد^{۱۳} [۱۰] به عنوان مبتکر اصلی و گسترش‌دهنده‌ی روش DSMC شناخته شده است. قاعده اصلی روش DSMC تفکیک کردن حرکت پیوسته مولکول‌های گاز به دو مرحله می‌باشد: حرکت آزاد مولکولی و برخورد مولکولی. در روش DSMC میدان فیزیکی جریان به مجموعه‌ای از سلول‌ها تقسیم‌بندی می‌شود و می‌توان از هر دو نوع شبکه منظم و نامنظم استفاده نمود. در هر دو حالت، ابعاد سلول‌های شبکه باید به اندازه کافی ریز باشد، به‌گونه‌ای که تغییرات خواص جریان در هر سلول کم باشد. گام زمانی در شبیه‌سازی معمولاً به صورت حداقل زمان متوسط برخورد بین مولکول‌ها و زمان متوسط اقامت مولکول‌ها در سلول می‌باشد؛ بنابراین، مولکول‌ها بیش از عرض یک سلول را در هر گام زمانی طی نخواهند کرد و می‌توان برخورد و حرکت مولکولی را مستقل در نظر گرفت. بعد از اینکه جریان به شرایط دائمی رسید، برای زمان قابل توجهی متوسط‌گیری از خواص ماکروسکوپی در هر سلول انجام می‌شود تا نوسانات آماری داده‌ها کاهش یابد.

۳-۱ مروری بر مطالعات عددی گذشته

برد [۱۱] برای اولین بار با استفاده از DSMC توزیع توابع سرعت در جریان یک موج ضربه ای را مدل-سازی کرد. سپس، از این روش برای تحلیل چگونگی شکل‌گیری موج ضربه ای پرداخت [۱۲]. دوگرا^{۱۴} و

¹² Direct Simulation Monte Carlo

¹³ Bird

¹⁴ Dogra

همکاران [۱۳] نیروی پسا در جریان فراصوت بر روی یک کره در محدوده‌ی لغزش را با استفاده از روش DSMC محاسبه کرده و نتایج آن را با داده‌های تجربی مقایسه کردند. آنها هم‌خوانی قابل قبولی را بین نتایج روش DSMC و نتایج آزمایشگاهی گزارش کردند.

هندسه‌ی کاویتتی در رژیم غیرتعادلی توسط تعدادی از محققین مورد بررسی قرار گرفته است. ناریس^{۱۵} و والوگرگیس^{۱۶} [۱۴] به بررسی جریان در میکرو کاویتتی در چهار رژیم رقیق‌شدگی پرداختند. آنها در مطالعه‌ی خود با استفاده از معادلات جنبشی خطی‌شده^{۱۷} نشان دادند که موقعیت افقی مرکز گردابه در کاویتتی در کلیه‌ی رژیم‌های رقیق‌شدگی بر روی محور عمودی کاویتتی قرار دارد. آنها هم‌چنین گزارش کردند که توزیع دما در رژیم‌های لغزشی تا آزاد مولکولی یک توزیع متقارن دارد. اولد^{۱۸} و لان^{۱۹} [۱۵] از روش DSMC موازی استفاده کردند تا موقعیت مرکز گردابه را در محدوده‌ی وسیعی از اعداد رینولدز بدست آورند. مطالعه‌ی آنها نشان داد که با اضافه شدن عدد نودسن موقعیت پیش‌بینی شده توسط معادلات ناویر-استوکس برای مرکز گردابه از نتایج به‌دست آمده توسط روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو فاصله می‌گیرد. آنها هم‌چنین گزارش کردند که این اختلاف در شرایطی که اثرات تراکم‌پذیری بیشتر می‌گردد قابل توجه‌تر است. میزی^{۲۰} و همکارانش [۱۶] به مقایسه‌ی خطوط جریان به‌دست آمده از حل معادلات ناویر-استوکس و روش مونت کارلو در رژیم لغزشی و اوایل رژیم گذرا پرداختند. آنها با مشاهده‌ی اختلاف خطوط جریان به‌دست آمده در ابتدای رژیم گذرا ناکارآمد بودن روش پیوسته را در اطراف گوشه‌های بالایی کاویتتی گزارش کردند.

¹⁵ Naris

¹⁶ Valougeorgis

¹⁷ Linearized kinetic equations

¹⁸ Auld

¹⁹ Lan

²⁰ Mizzi

پرومال^{۲۱} و همکاران [۱۷] از روش لاتیس بولتزمن^{۲۲} استفاده کردند تا خواص هیدرودینامیک کاویتی را در رژیم لغزشی مدل‌سازی کنند. آنها اعلام کردند با افزایش عدد نودسن موقعیت مرکز گردابه اندکی به سمت دیوار تحتانی کاویتی حرکت خواهد کرد. آنها همچنین گزارش کردند که موقعیت افقی مرکز گردابه در رژیم‌های غیرتعادلی تغییری نخواهد کرد و همواره بر روی محور عمودی کاویتی قرار دارد. پرومال و همکاران [۱۸] در تحقیق دیگری نشان دادند که در اثر افزایش نسبت اندازه‌ی عمق به عرض کاویتی در رژیم لغزشی چندین گردابه در قسمت پایینی کاویتی به وجود می‌آید. این گردابه‌ها با افزایش اثرات غیرتعادلی در کاویتی از بین می‌رود.

اگرچه خواص هیدرودینامیک کاویتی توسط تعدادی از محققین بررسی شده است، بررسی خواص حرارتی این هندسه همچنان همراه با نوآوری می‌باشد. در حقیقت، علل بسیاری از رفتارهای غیرمعمول جریان رقیق‌شده در کاویتی توضیح داده نشده است. استروشراپ^{۲۳} و همکارانش [۱۹] از روش معادلات ۱۳ ممان^{۲۴} استفاده کردند تا نشان دهند که این روش قابلیت پیش‌بینی خواص حرارتی جریان غیرتعادلی را در $Kn=0.1$ دارا می‌باشد. آنها با مقایسه‌ی نتایج به دست آمده از روش ممان‌های بالاتر با نتایج شبیه‌سازی مونت کارلو نشان دادند که بین نتایج روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو و ممان‌ها همخوانی وجود دارد؛ در حالیکه، معادلات ناویر-استوکس قادر به بدست آوردن خواص حرارتی جریان در این رژیم رقیق‌شدگی نمی‌باشند. جان^{۲۵} و همکاران [۲۰] از روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو استفاده کردند تا خواص حرارتی

²¹ Perumal

²² Lattice-Boltzmann method

²³ Struchtrup

²⁴ 13-Moment equations

²⁵ John

جریان گاز رقیق شده را در رژیم گذرا و آزاد مولکولی در کاویتی مدل سازی کنند. آن ها گزارش کردند که در نتیجهی حضور خواص غیرتعادلی در کاویتی انتقال حرارت از محیط سرد به گرم به وجود می آید.

انتقال حرارت سرد به گرم بر اساس روابط دینامیک مولکولی و حتی محیط های پیوسته ممکن می باشد. فقط از آنجا که این پدیده در محیط های بزرگ اندازه دیده نمی شود، غیر معمول می باشد. اووادا^{۲۶} و همکارانش [۲۱] نشان دادند که برای جریان پوازی در صورتی که گرادیان دما در داخل حوزه ی حل موجود نباشد، انتقال گرما از محیط کم فشار به پر فشار اتفاق می افتد. آنها انتقال حرارت را به دو قسمت مربوط به گرادیان دما، که از گرم به سرد روی می دهد، و مربوط به گرادیان فشار، که از کم فشار به پر فشار اتفاق می افتد، تقسیم کردند. بدیهی است که در هندسه ای که در آن هر دوی این اثرات موجود باشد و قسمت کم فشار در ناحیه ی سرد هندسه قرار گرفته باشد، می توان انتظار داشت که انتقال حرارت از محیط سرد (کم فشار) به گرم (پرفشار) اتفاق بیفتد. ژنگ^{۲۷} و باگی^{۲۸} [۲۲] نشان دادند که از آنجا که هندسه ی جریان در یک یاتاقان گازی ترکیبی از جریان پوازی و کوئت می باشد، میدان دمای آن هم تابع گرادیان دماست و هم تابع گرادیان فشار است. به عبارتی در صورت کوچک بودن جمله ی گرادیان دما و بزرگ بودن گرادیان فشار امکان وجود انتقال حرارت از محیط سرد به گرم موجود می باشد. جان و همکاران [۲۳] هم چنین به بررسی اثرات ضریب انطباق دمایی^{۲۹} دیواره در میکرو کاویتی بر روی خطوط انتقال حرارت پرداختند. آنها گزارش کردند که اعمال ضریب انطباق دمایی کوچک تر از واحد برای دیواره های میکرو کاویتی بر روی خواص هیدرودینامیکی و حرارتی آن به صورت چشم گیری تاثیر می گذارد.

²⁶ Ohwada

²⁷ Zhang

²⁸ Bogy

²⁹ Thermal accommodation coefficient

۴-۱ معرفی کلی پایان نامه و نوآوری‌ها در پروژه حاضر

همانطور که در قسمت پیش نشان داده شد، تحقیق‌های قبلی بر روی هندسه‌ی کاویتا، توضیح و توجیه کامل و دقیقی بر علت و چگونگی رفتارهای هیدرودینامیک و مخصوصاً حرارتی کاویتا در اختیار محققین قرار نمی‌دهند. در این پژوهش در ابتدا کد محاسباتی DSMC که برای مدل‌سازی جریان در میکروکانال طراحی و نوشته شده بود، به هندسه‌ی میکرو کاویتا گسرش داده شده است. سپس روابط دینامیک گاز مولکولی برای بدست آوردن تنش برشی، شار حرارتی، توابع توزیع سرعت مولکولی و آنتروپی به کد DSMC اضافه شد. لازم به ذکر است اضافه کردن محاسبات آنتروپی پیچیده ترین بخش کدنویسی حاضر را تشکیل داده است. به علاوه با مقایسه‌ی نتایج به دست آمده از معادلات ناویر-استوکس و روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو به غیر کاربردی بودن این معادلات در میانه‌ی رژیم لغزش، $Kn=0.05$ اشاره می‌شود و نشان داده خواهد شد که استفاده از تقریب‌های مرتبه‌ی اول برای تنش برشی و شار حرارتی به همراه معادلات محیط پیوسته برای هندسه‌ی میکرو/نانو کاویتا نامناسب می‌باشد. مقایسه‌های انجام شده در این پژوهش به صورت کلی مربوط به سرعت لغزشی، دمای پرشی، توزیع فشار، تنش برشی و شار حرارتی می‌باشد. همچنین نتایج حل معادلات ۱۳ ممان برای میکروکاویتا ارائه خواهد شد تا قدرت روش‌های پیوسته با دامنه‌ی کاری بالاتر در به‌دست آوردن انتقال حرارت در جریان غیرتعادلی نیز بررسی شود. همچنین در این پروژه به محاسبه و مقایسه‌ی توزیع آنتروپی با استفاده از دو روش مولکولی و پیوسته پرداخته می‌شود تا مشاهده شود خطوط غیرمعمول انتقال حرارت در میکروکاویتا با قانون دوم ترمودینامیک همخوانی داشته و از ناحیه با آنتروپی کمتر به ناحیه با آنتروپی بیشتر می‌باشد. در این پروژه همچنین به بررسی توابع توزیع سرعت در کاویتا پرداخته می‌شود؛ به‌علاوه، به منظور بررسی دقیق‌تر اثرات شرایط مرزی حرارتی بر ویژگی‌های جریان داخل

کاویتی، در این پروژه به مدل‌سازی کاویتی با دیواره‌های عایق نیز پرداخته می‌شود. در انتها به مقایسه‌ی خواص هیدرودینامیک و حرارتی در جریان مولکول‌های تک‌اتمی و دواتمی در رژیم‌های لغزشی، گذرا و آزاد مولکولی پرداخته می‌شود.

قابل ذکر است که بررسی موارد زیر در این پایان‌نامه، نوآوری‌های اساسی تحقیق حاضر می‌باشد:

۱- توجیه فیزیکی و مولکولی وقوع پدیده انتقال حرارت از ناحیه سرد به گرم و اعتبارسنجی تقریب‌های مرتبه‌ی بالاتر (فرمولاسیون تئوری مجانبی بولتزمن و فرمولاسیون ممان مرتبه ۱۳) در دینامیک گاز مولکولی برای پیش‌بینی رفتار شار حرارتی

۲- بررسی سرعت لغزشی و پرش دمایی در روی دیواره بالایی کاویتی براساس فرمولاسیون دینامیک گاز مولکولی و روش ماکروسکوپی و تشخیص غیرتعادلی‌ترین موقعیت در کاویتی

۳- مقایسه رفتار تنش برشی و شار حرارتی در بازه گسترده‌ای از عدد نودسن و توجیه مولکولی رفتار جریان

۴- تحلیل آنتروپی براساس فرمولاسیون دینامیک گاز مولکولی و توجیه رفتار انتقال حرارت از ناحیه سرد به گرم براساس آنتروپی

سرفصل‌های ارائه شده در این پایان‌نامه به صورت زیر تنظیم شده است:

• فصل دوم: دینامیک گاز مولکولی و روش حل جریان‌های غیرتعادلی

در این بخش به معرفی روش DSMC و معادلات ناویر-استوکس پرداخته می‌شود و الگوریتم مدل‌سازی جریان غیرتعادلی به تفصیل بیان می‌گردد.

- فصل سوم: تحلیل رفتار جریان گاز رقیق شده در حوزه‌ی لغزشی

در این فصل حوزه‌ی لغزشی برای جریان رقیق شده مطالعه می‌گردد و به مقایسه‌ی نتایج روش DSMC و معادلات گسترش داده شده ناویر-استوکس در این حوزه پرداخته می‌شود.

- فصل چهارم: جریان‌های غیرتعادلی گازهای تک اتمی و دو اتمی

در این فصل به مقایسه و تحلیل جریان گازهای تک اتمی و دو اتمی در حضور اثرات شدید غیرتعادلی در رژیم لغزشی، گذرا و آزاد مولکولی پرداخته می‌شود.

- فصل پنجم: نتیجه‌گیری و پیشنهادات برای ادامه کار

فصل دوم

دینامیک گاز مولکولی و روش‌های حل جریان غیرتعادلی

۱-۲ مقدمه

در فصل قبل اشاره شد که معادلات ناویر-استوکس رفتار جریان در رژیم‌های انتقالی تا آزاد مولکولی را نمی‌توانند به درستی توصیف نمایند. در واقع، برای محدوده عدد نودسن $Kn \approx 0.1$ و یا حتی کمتر از آن، فرضیه پیوستگی که در معادلات ناویر-استوکس استفاده شده است معتبر نمی‌باشد. علاوه بر آن، رابطه خطی استوکس بین تنش برشی و نرخ کرنش و نیز قانون فوریه^{۳۰} برای شار حرارتی و گرادیان دما نامعتبر است. در این فصل اصول دینامیک گاز مولکولی و روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو مورد بررسی قرار می‌گیرد و معرفی می‌شود. در انتهای این فصل به معرفی معادلات ناویر-استوکس به همراه شرایط مرزی لغزشی و پرشی و روش گسسته‌سازی این معادلات که در این پژوهش استفاده شده‌اند پرداخته خواهد شد.

³⁰ Fourier law