



Simulation of Particles Dissolution Process in Shear Field using Combined Concentration Lattice Boltzmann–Smoothed Profile Methods

ARTICLE INFO

Article Type

Original Research

Authors

Safa R.¹ MSc,
Soltani Goharrizi A.^{*1} PhD,
Jafari S.² PhD,
Jahanshahi Javaran E.³ PhD

How to cite this article

Safa R, Soltani Goharrizi A, Jafari S, Jahanshahi Javaran E. Simulation of Particles Dissolution Process in Shear Field using Combined Concentration Lattice Boltzmann–Smoothed Profile Methods. Modares Mechanical Engineering. 2020;20(3):575-585.

ABSTRACT

In the present study, the combination of concentration lattice Boltzmann method with a smoothed profile method was used to simulate the dissolution of solid circular particles between parallel plates that are moving in opposite directions. The hydrodynamic simulation was performed based on the single relaxation time lattice Boltzmann method and the convection-diffusion equation was used to determine the concentration of the solute in the liquid phase. Additionally, the smoothed profile method was used to calculate the no-slip boundary condition at the liquid-solid interface and concentration forces. To evaluate the accuracy of the proposed model, the simulation results were compared with the empirical data in the literature. The difference between the simulation results and the empirical data for the Sherwood number at different Peclet numbers was less than 2%. The results show that the smallest dissolution time in systems with different volume fractions is in a system with the least volume fraction. As the volume fraction increases, the solid-liquid mass transfer driving force is decreased in the system. The simulation results showed that by increasing the Reynolds number from 0.05 to 0.38, the time required to reach the normalized volume fraction to 0.05 of its initial value reduced from 0.36 s to 0.17 s. Also, by increasing the Peclet number from 5.5 to 115, the Sherwood number increased from 1.74 to 4.06. In addition, the increase in the Schmidt number in the system leads to a slower dissolution time. Finally, the polydispersity in the system was studied.

Keywords Dissolution; Particle; Concentration; Shear Rate; Smoothed Profile Method

¹Chemical Engineering Department, Shahid Bahonar University, Kerman, Iran

²Petroleum Engineering Department, Shahid Bahonar University, Kerman, Iran

³Energy Conversion & Renewable Energy Engineering Department, Graduate University of Advanced Technology, Kerman, Iran

*Correspondence

Address: Chemical Engineering Department, Shahid Bahonar University, Kerman, Iran. Postal Code: 7618868366

Phone: +98 32118298 (34)

Fax: +98 32118298 (34)

a.soltani@uk.ac.ir

Article History

Received: December 29, 2018

Accepted: May 19, 2019

ePublished: March 01, 2020

CITATION LINKS

[1] Simulations of dissolution of spherical particles in laminar shear flow [2] A hybrid mesoscale modelling approach to dissolution of granules and tablets [3] Mathematical modeling of drug dissolution [4] Coupled lattice Boltzmann and discrete element modelling of fluid-particle interaction problems [5] Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation [6] Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation [7] Lattice-Boltzmann simulations of particle-fluid suspensions [8] Hydrodynamic force on spheres in cylindrical and prismatic enclosures [9] Implementation of parallel processing on GPU for fluid flow simulation using Lattice Boltzmann method and Smoothed Profile method [10] A new curved boundary treatment for the lattice Boltzmann method [11] Momentum transfer of a Boltzmann-lattice fluid with boundaries [12] The immersed boundary method [13] Simulation method to resolve hydrodynamic interactions in colloidal dispersions [14] Lattice-Boltzmann method combined with smoothed-profile method for particulate suspensions [15] An efficient smoothed profile-lattice Boltzmann method for the simulation of forced and natural convection flows in complex geometries [16] A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems [17] Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method [18] Smoothed profile method for particulate flows: Error analysis and simulations [19] Solid-fluid boundaries in particle suspension simulations via the lattice Boltzmann method [20] Heat and mass transfer from small spheres and cylinders freely suspended in shear flow

شبیه‌سازی فرآیند انحلال ذرات جامد در میدان برشی با استفاده از ترکیب روش شبکه بولتزمن-نمایه‌هموار غلظتی

راضیه صفا MSc

گروه مهندسی شیمی، دانشگاه شهید باهنر، کرمان، ایران

عطاالله سلطانی‌گوهرریزی* PhD

گروه مهندسی شیمی، دانشگاه شهید باهنر، کرمان، ایران

سعید جعفری PhD

گروه مهندسی نفت، دانشگاه شهید باهنر، کرمان، ایران

ابراهیم جهانشاهی‌جواران PhD

گروه مهندسی انرژی‌های تجدیدپذیر و تبدیل انرژی، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان، ایران

چکیده

در مطالعه حاضر ترکیب روش شبکه بولتزمن با روش نمایه‌هموار غلظتی برای شبیه‌سازی انحلال ذرات جامد دایره‌ای بین صفحات موازی که خلاف جهت همدیگر در حرکت هستند به کار برده شد. شبیه‌سازی هیدرودینامیکی سیال بر پایه روش شبکه بولتزمن تک‌زمانه انجام گرفت و از معادله جابجایی-نفوذ برای تعیین غلظت جسم حل‌شده درون فاز مایع استفاده شد. علاوه بر این روش نمایه‌هموار برای محاسبه شرط مرزی عدم لغزش در سطح تماس ذره-سیال و همچنین نیروهای غلظتی به کار برده شد. برای ارزیابی دقت مدل ارائه شده، نتایج شبیه‌سازی با داده‌های تجربی موجود در منابع مورد مقایسه قرار گرفت. اختلاف بین نتایج حاصل از شبیه‌سازی و داده‌های تجربی برای عدد شروود در عدد پکلت متفاوت کمتر از ۲٪ بود. نتایج به‌دست‌آمده نشان می‌دهد که کمترین زمان انحلال در سیستم‌های با درصد حجمی‌های متفاوت مربوط به سیستمی با کمترین درصد حجمی است. با افزایش درصد حجمی درون سیستم، نیرومحرکه انتقال جرم درون سیستم کاهش می‌یابد. نتایج شبیه‌سازی نشان داد که با افزایش عدد رینولدز از ۵٪ تا ۳۸٪، زمان مورد نیاز برای رسیدن کسر حجمی نرمالیزه شده به ۵٪ مقدار اولیه از ۳۶٪ ثانیه به ۱۷٪ ثانیه کاهش یافت. همچنین با افزایش عدد پکلت از ۵/۵ تا ۱۱۵، عدد شروود از ۱/۷۴ تا ۴/۰۶ افزایش یافت. علاوه بر این افزایش عدد اشمیت در سیستم منجر به کندتر شدن زمان انحلال می‌شود. سرانجام رفتار سیستم‌های با توزیع متفاوت اندازه ذرات در ورودی بررسی شد.

کلیدواژه‌ها: انحلال، ذرات، غلظت، نرخ برشی، روش نمایه‌هموار

تاریخ دریافت: ۱۳۹۷/۱۰/۸

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۸/۲/۲۹

*نویسنده مسئول: a.soltani@uk.ac.ir

مقدمه

انتقال جرم بین سطح ذرات جامد و سیال مجاور آن در بیشتر فرآیندهای مهندسی و طبیعی نقش اساسی دارد، به گونه‌ای که از فرآیندهای انتقال جرم به‌عنوان قلب بیشتر فرآیندهای صنعتی می‌توان یاد کرد. به‌عنوان مثال، فرآیند خشک‌کردن، فیلتراسیون، کشف عوامل بیولوژیکی و بیوشیمیایی در تشخیص بیماری‌ها در پزشکی از طریق تاثیر ذرات جامد بر سیال و انحلال ذرات دارای پتانسیل دارویی در یک ماتریس پلیمری برای تولید مقدار مناسب

دارو و غیره از جمله فرآیندهایی هستند که انتقال جرم در آنها مهم است [1].

یکی از کاربردهای مهم فرآیند انتقال جرم و همچنین انحلال، تولید دارو در صنعت داروسازی است. در فرآیند تولید دارو، نرخ انتقال جرم توسط رفتار دینامیکی جریان کنترل می‌شود که می‌تواند بر چگونگی توزیع ذرات در سیال نظارت کند که در نهایت باعث یک توزیع نامتقارن جسم جامد درون فاز مایع می‌شود که به نوبه خود بر کیفیت نهایی محصول اثر می‌گذارد. در نتیجه فهم جزئیات فرآیند تولید دارو تاثیر مستقیمی روی کیفیت، بازده و اقتصاد محصول دارد که شبیه‌سازی عددی می‌تواند به‌عنوان یک ابزار مناسب و کاربردی برای مشخص‌کردن فیزیک پیچیده برهمکنش بین ذرات جامد و سیال به شمار آید [2, 3].

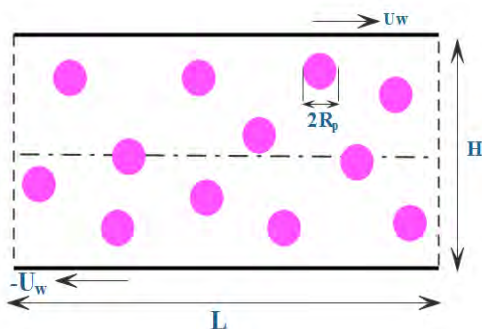
روش‌های المان محدود و حجم محدود در شبیه‌سازی جریان‌های با تعداد زیادی ذره جامد و همچنین برای هندسه‌های پیچیده چندان موفق عمل نکرده‌اند. مشکل اصلی این روش‌ها این است که باید در هر گام زمانی، هندسه به گونه‌ای مش‌بندی شود که گرہ‌ها منطبق بر هندسه باشند که کار سخت و پرهزینه، مخصوصاً در سیستم‌های سه‌بعدی است [4]. روش شبکه بولتزمن که در اوایل دهه ۹۰ میلادی توسط *لد* به‌طور موفقیت‌آمیز برای سیستم‌های سیال حاوی ذرات جامد به‌کار برده شد [5, 6]، یک روش کارآمد برای شبیه‌سازی جریان‌های حاوی ذرات جامد است [7, 8]. روش شبکه بولتزمن از یک شبکه محاسباتی اولیرین و ثابت برای حل جریان سیال استفاده می‌کند و نیاز به تولید شبکه در هر گام زمانی ندارد، برنامه‌نویسی آسانی دارد و همچنین می‌تواند با برنامه‌نویسی روی پردازنده‌های موازی زمان محاسبات را کاهش دهد [9].

یکی از مهم‌ترین موضوعات در استفاده از روش شبکه بولتزمن، مساله برهمکنش ذرات جامد با سیال و پیاده‌سازی مرزهای منحنی‌شکل در شبکه مربعی شبکه بولتزمن است. برای این منظور نیاز به شرط مرزی عدم لغزش مناسب است که در فصل مشترک ذره-سیال به سیستم اعمال شود. پرکاربردترین شرط مرزی عدم لغزش، شرط مرزی کمانه‌کردن است که در آن مرز جامد روی نقاط شبکه قرار گرفته است. در این شرط مرزی، توابع توزیع واردشده به مرز جامد از طرف سیال، به‌سادگی در جهتی که وارد شده‌اند، منعکس می‌شوند. بر اساس این شرط، هیچ سرعت مماسی در سطح مشترک سیال و ذره جامد وجود ندارد. از محدودیت‌های این روش، انطباق هندسه جسم جامد بر نقاط شبکه است و در هندسه‌های پیچیده به دلیل نمایش پله‌مانند سطوح باعث ایجاد نوسان در نیروهای اعمالی وارد بر ذره می‌شود [10, 11]. بر این اساس برای غلبه بر مشکلات شرط مرزی کمانه‌کردن در سال ۱۹۹۷، روش مرز شناور توسط پسکن برای جریان‌های خزشی و ذرات تغییر شکل‌پذیر برای نخستین بار در معادلات ناویر-استوکس استفاده شد [12]. در این روش نیاز به انطباق جسم جامد بر خطوط شبکه نیست. به گونه‌ای که ابتدا یک شبکه ساده تولید می‌شود و سپس اثر جسم جامد در مراحل مختلف به سیستم اعمال می‌شود. همچنین روش مرز شناور

این ترکیب یک روش مفید و کارآمد برای شبیه‌سازی جرم منتقل شده از جامد به سیال، به دلیل ویژگی مشترک روش نمایه‌هموار و روش شبکه بولتزمن مبنی بر استفاده از یک شبکه کارترزین ثابت است.

۲- فیزیک مساله و فرضیات

طرحی از فیزیک مساله حاضر در شکل ۱ نشان داده شده است. مساله مذکور شامل ذراتی با قطرهای یکسان $d_p = 200 \mu m$ است که در میانه یک لایه سیال قرار گرفته‌اند. این لایه فضای بین دو صفحه موازی است که با سرعت‌های u_w در جهت‌های مختلف حرکت می‌کنند. نسبت طول به عرض ناحیه حل $L/H = 1/65$ است. همچنین عرض میدان برشی 10 برابر قطر ذرات است ($H/d_p = 10$). صفحات میدان برشی با سرعتی برابر با $u_w = 0.03$ واحد شبکه در خلاف جهت همدیگر در حال حرکت هستند.



شکل ۱ طرح مساله حاضر

شرایط مرزی استفاده‌شده در این مطالعه برای قسمت هیدرودینامیکی مساله، شرط مرزی پرپودیک سرعتی در ورودی ($x=0$) و خروجی ($x=L$)، شرط مرزی کمانه‌کردن روی دیواره پایین ($y=0$) و دیواره بالا ($y=H$) و شرط مرزی عدم‌لغزش (نمایه‌هموار) در سطح تماس بین ذره و سیال است. شرایط مرزی برای قسمت غلظتی مساله عبارتند از: شرط مرزی پرپودیک غلظتی در ورودی ($x=0$) و خروجی ($x=L$) و شرط مرزی گرادیان غلظت صفر ($\partial c / \partial y = 0$) روی دیواره پایین ($y=0$) و دیواره بالا ($y=H$) است. غلظت ذرات در این شبیه‌سازی $c=1$ در نظر گرفته شد و فرض شد که در طول فرآیند شبیه‌سازی ثابت نگه داشته شوند، این در حالی بود که غلظت اولیه سیال $c=0$ فرض شد که با انحلال ذرات با گذشت زمان، غلظت سیال در طول شبیه‌سازی تغییر می‌کند. نسبت دانسیته ذرات جامد به سیال (ρ_p / ρ_f) برابر با $1/25$ در نظر گرفته شد. عدد رینولدز برشی بر مبنای ذرات جامد $Re = \gamma^0 d_p^2 / 4\nu = 0.05$ است که در آن $\gamma^0 = 2u_w / H$ نرخ برش اعمال‌شده به صفحات است. عدد اشمیت نیز معادل با $Sc = 300$ انتخاب شد.

عدد شروود به‌عنوان یک پارامتر مهم در بحث انتقال جرم است که به‌صورت رابطه ۱ تعریف می‌شود.

$$Sh = \frac{kd_p}{D} \quad (1)$$

از دو شبکه‌بندی مجزا برای شبیه‌سازی جریان سیال و ذرات جامد استفاده می‌کند. شبکه‌بندی اولرین ثابت برای جریان سیال و برای مرز جامد شناور درون سیال از شبکه‌بندی لاگرانژین استفاده می‌کند که نقاط شبکه لاگرانژین روی سطح ذرات آزادانه همراه با سیال حرکت می‌کنند. شرط مرزی عدم لغزش در روش مرز شناور به‌صورت یک نیروی حجمی به معادلات بولتزمن اضافه می‌شود.

به دلیل محاسبات پیچیده نیرو در روش مرز شناور، روش نمایه‌هموار برای اولین بار توسط *ناکایاما* و *یاماموتو* برای استفاده در معادلات ناویر-استوکس معرفی شد^[13] که در سال ۲۰۱۱، این روش برای اولین بار توسط *جعفری* و همکاران با روش شبکه بولتزمن ترکیب شد^[14]. اساس کار این روش همانند روش مرز شناور است و برای نشان‌دادن حضور ذرات جامد در جریان سیال از یک نیروی حجمی استفاده می‌شود. این روش از یک شبکه‌بندی اولرین ثابت برای سیال میزبان استفاده می‌کند و نیاز به نقاط حسابگر برای تعیین مرز داخلی ناحیه جامد ندارد و تمام محاسبات در نقاط اولرین انجام می‌شود. در نتیجه به میان‌یابی سرعت در نقاط لاگرانژین برای تعیین نیرو نیاز ندارد که از این طریق، هزینه محاسبات کاهش می‌یابد. استفاده از شبکه‌بندی کارترزین در روش نمایه‌هموار و روش شبکه بولتزمن باعث شد که این روش به‌عنوان یک روش کارآمد برای شبیه‌سازی حرکت ذرات جامد درون ناحیه سیال شناخته شود.

هو و همکاران^[15] برای اولین بار در سال ۲۰۱۵ روش نمایه‌هموار دمایی را با روش شبکه بولتزمن برای شبیه‌سازی جریان‌های ترمال به دلیل پیچیدگی محاسبه دما در نقاط لاگرانژین در مسائل حرارتی، ترکیب کردند. آنها جابه‌جایی طبیعی در یک حفره با مانع دایره‌شکل را با روش نمایه‌هموار دمایی بررسی کردند. اثر دما در میدان جریان سیال به‌صورت چشمه-چاه به معادله بولتزمن حرارتی اضافه شد. آنها نشان دادند که به دلیل استفاده از شبکه‌بندی اولرین در روش نمایه‌هموار دمایی، محاسبات نسبت به روش مرز شناور به مراتب ساده‌تر و زمان انجام محاسبات کمتر است.

درکس و همکاران، انحلال ذرات جامد درون سیال نیوتنی در یک میدان برشی ساده را مورد بررسی قرار دادند^[1]. آنها برای شبیه‌سازی میدان جریان از روش شبکه بولتزمن استفاده کردند. همچنین، از روش المان محدود برای حل معادله غلظت بهره گرفت و برای برهمکنش بین ذرات جامد با سیال از شرط مرز شناور استفاده کردند. چون فرآیند انحلال روی ذرات در اندازه میکرون بررسی شد، فرض کردند که ذرات جامد در کل فرآیند انحلال، شکل کروی خود را حفظ می‌کنند.

هدف اصلی مطالعه حاضر، معرفی یک روش عددی ترکیبی جدید برای شبیه‌سازی انتقال جرم بین سیال و جامد است. در این مطالعه، روش نمایه‌هموار غلظتی با معادلات بولتزمن ترکیب شد تا فرآیند انحلال ذرات جامد درون سوسپانسیون‌های چگال با توزیع یکسان و متفاوت اندازه ذرات در ورودی و همچنین، اثر درصد حجمی اولیه ذرات جامد بر چگونگی روند فرآیند انحلال ذرات جامد بررسی شود.

در معادله فوق، c بردارهای سرعت شبکه، λ زمان آرامش و f^{eq} تابع توزیع تعادلی ماکسول-بولتزمان است.

۱-۱-۳ معادله بولتزمان برای تحلیل هیدرودینامیک جریان

فرم گسسته شده معادله بولتزمان با حضور نیروی خارجی برای میدان جریان به صورت معادله ۱۴ نوشته می شود.

$$f_{\alpha}(x + e_{\alpha}\Delta t, t + \Delta t) - f_{\alpha}(x, t) = -\frac{1}{\tau_f}(f_{\alpha}(x, t) - f_{\alpha}^{eq}(x, t)) + F_{\alpha}\Delta t \quad (14)$$

که $f_{\alpha}(x, t)$ و $f_{\alpha}^{eq}(x, t)$ به ترتیب تابع توزیع دانسیته و تابع توزیع تعادلی هستند. F_{α} ترم گسسته شده نیرو به واسطه مرز شناور هیدرودینامیکی، است. معمولاً برای اضافه کردن ترم نیروی خارجی به معادلات بولتزمان روش های متعددی وجود دارد که در این مطالعه از رابطه ۱۵ استفاده می شود [17].

$$F_{\alpha} = \omega_{\alpha} \left(\frac{2\tau_f - 1}{2\tau_f} \right) \left(3 \frac{e_{\alpha} \cdot u}{c^2} + 9 \frac{e_{\alpha} \cdot u}{c^4} \cdot e_{\alpha} \right) \cdot f_s \quad (15)$$

f_s نیروی هیدرودینامیکی بین سیال-جامد است. همچنین با استفاده از بسط چابمن-انسکوگ می توان نشان داد که ویسکوزیته سینماتیکی سیال تابعی از زمان آرامش بی بعد سیال ($\tau = \frac{\Delta t}{\lambda}$) است و به صورت رابطه ۱۶ تعریف می شود.

$$v = \frac{1}{3}(\tau_f - 0.5)c^2 \Delta t \quad (16)$$

مولفه بردار سرعت (e_{α})، برای مدل D_2Q_9 طبق رابطه ۱۷ تعیین می شود.

$$e_{\alpha} = \begin{cases} (0,0), & \alpha = 0 \\ (\mp 1,0), (0, \mp 1), & \alpha = 1 - 4 \\ (\mp 1, \mp 1), & \alpha = 5 - 8 \end{cases} \quad (17)$$

تابع توزیع تعادلی، $f_{\alpha}^{eq}(x, t)$ ، در رابطه ۱۴ بر اساس رابطه ۱۸ محاسبه می شود.

$$f_{\alpha}^{eq}(x, t) = \omega_{\alpha} \rho \left(1 + 3 \frac{e_{\alpha} \cdot u}{c^2} + \frac{9}{2} \frac{(e_{\alpha} \cdot u)^2}{c^4} - \frac{3}{2} \frac{u^2}{c^2} \right) \quad (18)$$

$$w_{\alpha} = \begin{cases} 4/9, & \alpha = 0 \\ 1/9, & \alpha = 1 - 4 \\ 1/36, & \alpha = 5 - 8 \end{cases} \quad (19)$$

در رابطه ۱۸، w_{α} ثابت وزنی و $c = \Delta x / \Delta t$ سرعت شبکه برای ذرات سیال است که از یک نقطه شبکه به نقطه دیگر در حال حرکت هستند که در این حل برابر یک در نظر گرفته می شود. کمیت های ماکروسکوپی جریان از قبیل چگالی و سرعت را می توان از روابط ۲۰ و ۲۱ بر اساس توابع توزیع محاسبه کرد.

$$\rho = \sum_{\alpha=0}^8 f_{\alpha} \quad (20)$$

$$u = \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha=0}^8 e_{\alpha} f_{\alpha} + 0.5 f_s \Delta t \quad (21)$$

۲-۱-۳ معادله بولتزمان برای تحلیل میدان غلظت جریان

معادله شبکه بولتزمان با حضور ترم چشمه برای میدان غلظت به صورت رابطه ۲۲ محاسبه می شود.

$$j_{\alpha}(x + e_{\alpha}\Delta t, t + \Delta t) - j_{\alpha}(x, t) = -\frac{1}{\tau_j}(j_{\alpha}(x, t) - j_{\alpha}^{eq}(x, t)) + J_{\alpha}\Delta t \quad (22)$$

که $j_{\alpha}(x, t)$ و $j_{\alpha}^{eq}(x, t)$ به ترتیب تابع توزیع غلظت، تابع توزیع تعادلی غلظت و ترم چشمه به دلیل برهمکنش بین جامد-سیال

در این رابطه، D ضریب نفوذ انتقال جرم و k ضریب جابه جایی جرمی است که از تعریف شار نفوذی انتقال جرم و شار جابه جایی انتقال جرم قابل محاسبه هستند.

$$m^0 = -D \int_A \frac{\partial C}{\partial n} dA \quad (2)$$

$$m^0 = ks\Delta c \quad (3)$$

Δc ، اختلاف غلظت سطح ذره و سیال است که برابر با یک است و s مساحت سطح ذرات است که با فرض دوبعدی بودن سیستم از رابطه ۴ محاسبه می شود.

$$s = \pi d_p \quad (4)$$

با جایگزین کردن روابط ۲، ۳ و ۴ در رابطه ۱ داریم:

$$Sh = \frac{-\int_A \frac{\partial C}{\partial n} dA}{\pi} \quad (5)$$

که مقدار $\int_A \frac{\partial C}{\partial n} dA$ از قانون بقای جرم، رابطه ۶ قابل محاسبه است.

$$\int \frac{1}{2} q dV = -D \int_A \frac{\partial C}{\partial n} dA + \frac{d}{dt} \int C dV \quad (6)$$

که در این رابطه، V حجم ذرات است. زمانی که میدان غلظت به حالت پایدار برسد:

$$-\int_A \frac{\partial C}{\partial n} dA = \frac{\int q dV}{2D} \quad (7)$$

در پایان عدد شروود از رابطه ۸ قابل محاسبه است.

$$Sh = \frac{\int q dV}{2\pi D} \quad (8)$$

با انتگرال گیری از شار انتقال جرم (رابطه ۲)، بر سطح ذره در هر مرحله با گذشت زمان، تغییر شعاع ذره طبق روابط زیر به دست می آید:

$$\frac{d}{dt}(\rho_p \pi r^2) = -\int_A m^0 dA \quad (9)$$

$$\frac{dr}{dt} = \frac{D}{2\pi \rho_p r} \int_A \frac{\partial C}{\partial n} dA \quad (10)$$

با جایگزین کردن رابطه ۷ در رابطه ۱۰ شعاع جدید ذره (r^*) برابر است با:

$$r^* = (r^2 - \frac{\int q dV}{2\pi \rho_p})^{1/2} \quad (11)$$

۳- روش حل عددی

۱-۳-۱ روش شبکه بولتزمان

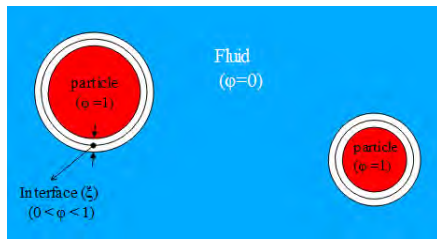
در روش شبکه بولتزمان، سیال به صورت مجموعه ای از ذرات مجزا در نظر گرفته می شود که در محل گره های یک شبکه، مراحل برخورد و انتشار را تا رسیدن به حل مورد نظر در طول زمان تکرار می کند. معادله بولتزمان در حضور نیروی خارجی F به صورت زیر تعریف می شود:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c \frac{\partial f}{\partial r} + F \frac{\partial f}{\partial c} = \Omega(f) \quad (12)$$

تابع f ، تابع توزیع احتمال ذراتی از سیال است که با یک سرعت و حجم مشخص در زمان و مکان خاصی جابه جا می شوند ($f(x, c, t)$). در این معادله، F بیانگر جمله نیرو و Ω عملگر برخورد است که با جایگزینی آن با مدل تک زمانه BGK [16]، معادله بولتزمان به فرم زیر بیان می شود:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c \frac{\partial f}{\partial r} + F \frac{\partial f}{\partial c} = -\frac{f - f^{eq}}{\lambda} \quad (13)$$

که N_p ، تعداد ذرات در میدان حل است.



شکل ۲) نمایش ذره جامد به کمک روش نمایه‌هموار

۳-۲-۱- روش نمایه‌هموار برای میدان سرعت

در روش نمایه‌هموار تمامی محاسبات در گره‌های اولی‌ری انجام می‌شود. این روش همانند سایر روش‌های مرز شناور نیاز به گره‌های لاگرانژی برای نشان‌دادن مرز جامد ندارد. همان گونه که ذکر شد، حضور ذره جامد به صورت یک نیروی حجمی (F_{α} در رابطه ۱۴) به معادله بولتزمن اضافه می‌شود. روند محاسبه خاصیت ماکروسکوپی سرعت در روش نمایه‌هموار به این صورت است که در مرحله اول، کمیت میدانی سرعت موقت $u^*(x, t)$ روی تمامی گره‌های ناحیه محاسباتی شامل سیال و کل ذرات جامد، بدون در نظر گرفتن نیروی برهمکنش بین ذره جامد و سیال مطابق رابطه ۲۹ محاسبه می‌شود.

$$u^*(x, t) = \frac{1}{\rho(x, t)} \sum_{\alpha=0}^8 e_{\alpha} f_{\alpha}(x, t) \quad (29)$$

در مرحله دوم، به منظور در نظر گرفتن اثر تقابل بین جامد و سیال، نیروی برهمکنش بین ذره جامد و سیال ($f_s(x, t)$) مطابق رابطه ۳۰ محاسبه می‌شود [15].

$$f_s(x, t) = \frac{\varphi(x, t) \cdot \rho(x, t) [u_p(x, t) - u^*(x, t)]}{\Delta t} \quad (30)$$

که $u_p(x, t)$ ، میدان سرعت کل ذرات جامد در ناحیه حل است که با استفاده از سینماتیک اجسام صلب به صورت رابطه ۳۱ قابل محاسبه است.

$$u_p(x, t) = \sum_{i=1}^{N_p} \varphi_i(x, t) [U_i(t) + \Omega_i(t) \times (x - R_i)] \quad (31)$$

همان گونه که از رابطه بالا مشخص است، سرعت ذره جامد در واقع مجموع سرعت خطی ($U_i(t)$) و سرعت زاویه ($\Omega_i(t)$) آن ذره است. در مرحله پایانی، خاصیت ماکروسکوپی سرعت با توجه به نیروی برهمکنش بین ذره جامد و سیال، تصحیح می‌شود.

$$u(x, t) = u^*(x, t) + \frac{1}{2\rho(x, t)} f_s(x, t) \Delta t \quad (32)$$

۳-۲-۲- روش نمایه‌هموار برای میدان غلظت

روش نمایه‌هموار می‌تواند با روش شبکه بولتزمن غلظتی برای نشان‌دادن برهمکنش بین ذرات جامد و سیال، نیز ترکیب شود. در نتیجه این امر، اضافه‌شدن ترم نیروی حجمی به معادله بولتزمن غلظتی است (رابطه ۲۲). توزیع غلظت برای کل میدان با رابطه ۳۳ بیان می‌شود.

$$C(x, t) = (1 - \varphi(x, t)) C_f(x, t) + \varphi(x, t) C_p(x, t) \quad (33)$$

که $C_f(x, t)$ ، غلظت سیال و $C_p(x, t)$ غلظت ذره جامد است. روند محاسبه توزیع غلظت در روش نمایه‌هموار، همانند سرعت است. به

همچنین τ_j ، زمان آرامش بدون بعد غلظتی است که به صورت رابطه ۲۳ داده می‌شود.

$$\tau_j = \frac{3D}{c^2 \Delta t} + 0.5 \quad (23)$$

در این رابطه، D ضریب نفوذ جرمی است. $J_{\alpha}^{eq}(x, t)$ و J_{α} توسط روابط ۲۴ و ۲۵ بیان می‌شوند.

$$J_{\alpha}^{eq}(x, t) = \omega_{\alpha} C \left(1 + 3 \frac{e_{\alpha} \cdot u}{c^2} + \frac{9 (e_{\alpha} \cdot u)^2}{2 c^4} - \frac{3 u^2}{2 c^2} \right) \quad (24)$$

$$J_{\alpha} = \omega_{\alpha} \left(\frac{2\tau_j - 1}{2\tau_j} \right) q_c \quad (25)$$

خاصیت ماکروسکوپی غلظت نیز بر اساس رابطه ۲۶ قابل محاسبه است.

$$C = \sum_{\alpha=0}^8 j_{\alpha} + 0.5 q_c \Delta t \quad (26)$$

۳-۲-۳ روش نمایه‌هموار

برای شبیه‌سازی حرکت ذره جامد درون سیال و اعمال شرط مرزی عدم لغزش در سطح مشترک ذره جامد و سیال، روش نمایه‌هموار توسط ناکایاما و یاماموتو [13] در سال ۲۰۰۵ ارائه شد که در ادامه کار آنها، جعفری و همکاران [14] این روش را با روش لنیس بولتزمن ترکیب کردند. حضور ذره جامد در سیال باعث اعمال نیرو از طرف سیال به ذره و متقابلاً از طرف ذره جامد به سیال می‌شود که نیروی برهمکنش بین ذره جامد و سیال نامیده می‌شود. در روش نمایه‌هموار، حضور ذره جامد در سیال به صورت یک نیروی حجمی هموار معین به معادلات بولتزمن اضافه می‌شود و یک معادله بدون هیچ شرط مرزی داخلی در یک دامنه محاسباتی شامل ذره جامد حل می‌شود. گره‌هایی که توسط ذره جامد پوشیده شده‌اند، باید سرعتی برابر با سرعت ذره جامد داشته باشند. در نتیجه یک نیروی حجمی به کل ناحیه حل وارد می‌شود تا سیال مجازی درون ناحیه حل را وادار به ارضاکردن حرکت جسم صلب کند که روش نمایه‌هموار بر پایه چنین ایده‌ای استوار است.

سطح ذره جامد در این روش، به عنوان یک سطح با ضخامت برابر با واحد شبکه مشخص می‌شود. تابع موقعیت ذره φ_i یا تابع چگالی ذره (φ_i) یک منحنی هموار است که این منحنی در ناحیه جامد دارای مقدار یک، در ناحیه سیال دارای مقدار صفر و در سطح مشترک ذره جامد و سیال به طور هموار از یک تا صفر تغییر می‌کند (شکل ۲) و به صورت رابطه ۲۷ تعریف می‌شود [13, 18].

$$\varphi_i(x, t) = \begin{cases} 0 & d < -\frac{\xi}{2} \\ 0.5 \left(\sin\left(\frac{\pi d}{\xi}\right) + 1 \right) & |d| < \frac{\xi}{2} \\ 1 & d > \frac{\xi}{2} \end{cases} \quad (27)$$

در این رابطه، ξ ضخامت فصل مشترک ذره جامد و سیال است که در این مطالعه برابر واحد در نظر گرفته شد. همچنین d برابر است با $d = (R_i - |x - R_i|)$ که R_i و R_i به ترتیب اشاره به شعاع \hat{a}_m ذره و بردار موقعیت مرکزی همان ذره دارد. همچنین x ، بردار موقعیت هر ذره در حوزه محاسباتی است. تابع چگالی کل ذرات از رابطه ۲۸ محاسبه می‌شود.

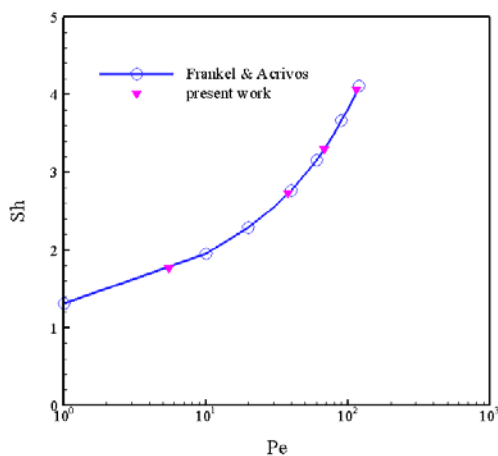
$$\varphi(x, t) = \sum_{i=0}^{N_p} \varphi_i(x, t) \quad (28)$$

- ۲- محاسبه خواص ماکروسکوپی سرعت و غلظت موقت با استفاده از روابط ۲۹ و ۳۴؛
- ۳- محاسبه میدان سرعت ذره نام با استفاده از روابط ۲۷ و ۳۱؛
- ۴- محاسبه برهمکنش بین ذرات جامد و سیال با استفاده از روابط ۳۰ و ۳۵؛
- ۵- تصحیح میدان‌های سرعت و غلظت با استفاده از روابط ۳۲ و ۳۶؛
- ۶- حل میدان‌های سرعت و غلظت با استفاده از معادلات بولتزمان هیدرودینامیکی و غلظتی (روابط ۱۴ و ۲۲)؛
- ۷- محاسبه نیرو و گشتاور هیدرودینامیکی وارد بر ذره با استفاده از روابط ۳۸ و ۳۹؛
- ۸- به‌روزرسانی سرعت خطی، سرعت زاویه و موقعیت هر ذره با استفاده از روابط ۴۰ تا ۴۲ و برگشت به مرحله ۲.

۴- اعتبارسنجی برنامه عددی

در این قسمت برای ارزیابی عملکرد روش نمایه‌هموار غلظتی در ترکیب با روش شبکه بولتزمان، چرخش یک ذره جامد بدون انحلال آن، در میدان برشی مورد ارزیابی قرار گرفت. به تدریج با نفوذ مومنتوم از دیواره‌ها به درون ناحیه حل، ذره شروع به چرخش می‌کند تا اینکه به یک سرعت زاویه مشخص می‌رسد. برای بررسی صحت حل عددی حاضر، عدد شروود مدل حاضر با عدد شروود رابطه ۴۳، کار فرانکل و آکریوس^[20] در نمودار ۱ مقایسه شد.

$$Sh = 2 \left[1.372 + \frac{1}{2} \log 2 - \frac{1}{2} \log Pe \right]^{-1} \quad (43)$$



نمودار ۱) تغییرات عدد شروود بر حسب عدد پکلت در $Sc=300$

همان گونه که از نمودار ۱ مشاهده می‌شود، هماهنگی بسیار خوبی بین نتایج مطالعه حاضر و نتایج ارائه شده توسط فرانکل و آکریوس^[20] وجود دارد. برای مقایسه بهتر، اختلاف نسبی نتایج در اعداد پکلت مختلف در جدول ۱ آورده شده است. همان گونه که در این جدول مشاهده می‌شود، اختلاف‌ها کمتر از ۲٪ بوده است که قابل قبول است. علاوه بر این، نمودار ۱ نشان می‌دهد که با افزایش عدد پکلت $(pe = \gamma^0 d_p^2 / 4\Gamma)$ ، شار انتقال جرم بین مایع و سطح ذره افزایش می‌یابد، در نتیجه عدد شروود نیز افزایش می‌یابد.

این صورت است که ابتدا، میدان غلظت موقت، $C^*(x, t)$ ، با رابطه ۳۴ و جمله چشمه یا چاه غلظتی با رابطه ۳۵ محاسبه می‌شوند.

$$C^*(x, t) = \sum_{\alpha=0}^8 j_{\alpha}(x, t) \quad (34)$$

$$q_C(x, t) = \frac{\varphi(x, t)[C_p(x, t) - C^*(x, t)]}{\Delta t} \quad (35)$$

در پایان میدان غلظت با در نظر گرفتن ترم تصحیح $q_C(x, t)$ می‌شود.

$$C(x, t) = C^*(x, t) + 0.5q_C(x, t)\Delta t \quad (36)$$

۳-۳- معادلات حاکم بر ذرات

یکی از متداول‌ترین روش‌ها برای محاسبه نیرو و گشتاور هیدرودینامیکی روی سطوح خمیده در روش شبکه بولتزمان، استفاده از روش تبادل مومنتوم است^[19]. همان گونه که اشاره شد، $f_s(x, t)$ نیروی ناشی از تبادل مومنتوم بین سیال و ذره جامد است (رابطه ۳۰) که عکس‌العمل این نیرو با استفاده از قانون سوم نیوتن، به گره‌های جامد (گره‌های قرارگرفته درون ذره جامد) برمی‌گردد و به صورت رابطه ۳۷ محاسبه می‌شود.

$$f_p(x, t) = -f_s(x, t) = \frac{\varphi(x, t) \cdot \rho(x, t) [u^*(x, t) - u_p(x, t)]}{\Delta t} \quad (37)$$

این نیرو، نیروی وارد شده بر یک گره درون ذره جامد است که با انتگرال‌گیری از آن بر کل حجم جامد می‌توان کل نیرویی که از طرف سیال به هر ذره جامد وارد می‌شود (F_i^H) را محاسبه کرد^[14].

$$F_i^H = \int_{V_{pi}} f_p(x, t) dV_{pi} = \frac{1}{\Delta t} \int_{V_{pi}} \rho(x, t) \varphi(x, t) \cdot [u^*(x, t) - u_p(x, t)] dV_{pi} \quad (38)$$

متقابلاً، با انتگرال‌گیری از گشتاور حاصل از این نیرو، روی کل حجم جسم جامد، کل گشتاور هیدرودینامیکی وارد شده به هر ذره جامد نیز به دست می‌آید.

$$T_i^H = \int_{V_{pi}} (x - R_i) \times f_p(x, t) dV_{pi} = \frac{1}{\Delta t} \int_{V_{pi}} (x - R_i) \times \rho(x, t) \varphi(x, t) [u^*(x, t) - u_p(x, t)] dV_{pi} \quad (39)$$

با استفاده از معادلات حرکت و روش صریح اویلر، سرعت خطی، سرعت ω و موقعیت مکانی ذرات جامد با استفاده از روابط ۴۰، ۴۱ و ۴۲ به‌روزرسانی می‌شوند.

$$U_i^{n+1} = U_i^n + M_{pi}^{-1} \int_{t_n}^{t_n+\Delta t} (F_i^H + F_i^r + F_i^{ext}) dS \quad (40)$$

$$\Omega_i^{n+1} = \Omega_i^n + I_{pi}^{-1} \int_{t_n}^{t_n+\Delta t} (T_i^H + T_i^{ext}) dS \quad (41)$$

$$R_i^{n+1} = R_i^n + \int_{t_n}^{t_n+\Delta t} U_i dS \quad (42)$$

در این روابط، F_i^r ، F_i^{ext} ، T_i^{ext} و M_{pi} به ترتیب نیروی دافعه بین ذرات، نیروی خارجی، گشتاور خارجی و جرم ذرات هستند.

۴-۳- الگوریتم حل عددی

در این بخش الگوریتم حل عددی شبیه‌سازی جریان سیال با روش ترکیبی نمایه‌هموار- شبکه بولتزمان ارائه شده است. به‌طور خلاصه الگوریتم حل در روش ترکیبی شبکه بولتزمان با روش نمایه‌هموار در هر گام زمانی شامل مراحل زیر است:

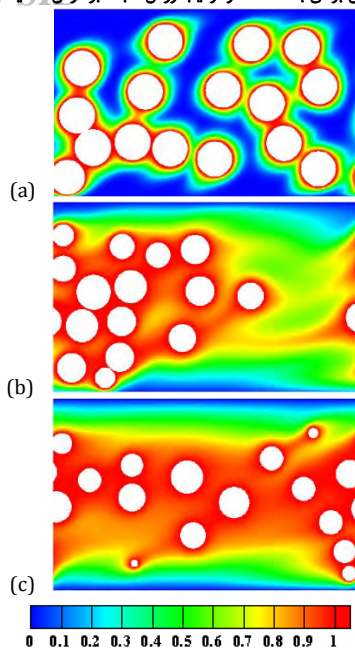
۱- مقداردهی اولیه میدان‌های سرعت و غلظت سیال، همچنین سرعت ذرات جامد (سرعت خطی و زاویه‌ای) و غلظت ذرات؛

$Er(\%) = \left \frac{sh_{Fr} - sh_{pr}}{sh_{Fr}} \right \times 100$	$Sh_{Frankel et al}$	$Sh_{present work}$	Pe
۰/۵	۱/۷۴	۱/۷۵	۵/۵
۰/۴	۲/۷۲	۲/۷۴	۳۸
۱/۲	۳/۳۰	۳/۳۴	۶۸
۱/۵	۴/۰۶	۴/۰۰	۱۱۵

۵- بحث و نتیجه‌گیری

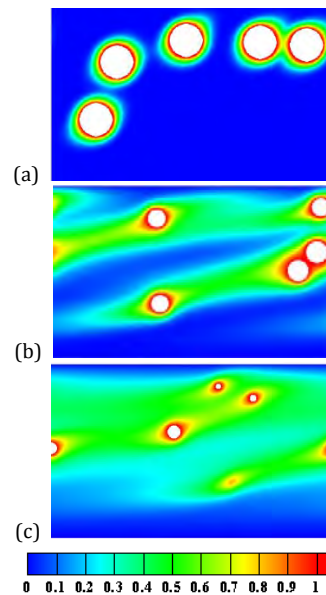
۱-۵ اثر درصد حجمی اولیه ذرات روی چگونگی فرآیند انحلال

شکل‌های ۳ تا ۵ به ترتیب به صورت کیفی، فرآیند انحلال ذرات جامد را در $Re=۰/۰۵$ و $Sc=۳۰۰$ برای درصد حجمی اولیه ۱۰، ۲۰ و ۳۰ نشان می‌دهند.

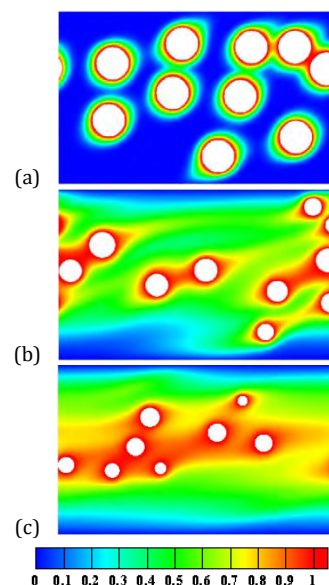


شکل ۵) میدان غلظت برای $\phi_0 = ۰/۳$ در $Re=۰/۰۵$ و $Sc=۳۰۰$: a: $\gamma t = ۱$; b: $\gamma t = ۱۰$; c: $\gamma t = ۲۰$

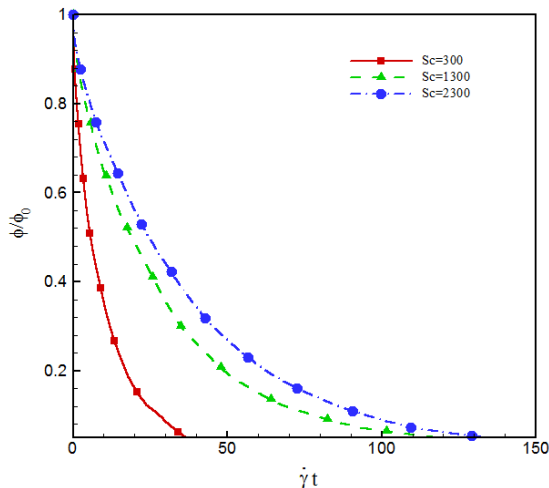
همان گونه که از شکل‌ها مشخص است با افزایش درصد حجمی ذرات جامد در میدان حل در یک زمان مشخص، روند انحلال ذرات کندتر می‌شود. زیرا با افزایش تعداد ذرات جامد درون سیستم، غلظت جسم حل‌شده درون سیستم افزایش می‌یابد و این افزایش غلظت باعث کاهش اختلاف غلظت بین سطح ذرات جامد با غلظت بالک سیال می‌شود و به دنبال آن نیروی محرکه انتقال جرم کاهش می‌یابد و فرآیند انحلال کندتر انجام می‌شود که این روند در نمودار ۲ نیز قابل مشاهده است. در این نمودار، برای فهم و مقایسه بهتر روند انحلال ذرات، از درصد حجمی بدون بعد، درصد حجمی در هر لحظه (ϕ) به درصد حجمی اولیه ذرات (ϕ_0)، استفاده شد. مطابق این نمودار، شیب منحنی درصد حجمی ذرات در زمان‌های اولیه فرآیند زیاد است و بعد از آن با یک افت شدید روبه‌رو می‌شود. چون در زمان‌های اولیه، انحلال ذرات در درون سیال، تازه رخ می‌دهد که اختلاف غلظت بین سیال و سطح ذره بالا است، در نتیجه گرادیان غلظت بالا است. اما با گذشت زمان به دلیل ادامه روند انحلال ذرات، این اختلاف غلظت کاهش یافته در نتیجه شیب خطوط کم می‌شود و زمان بیشتری برای انحلال سپری می‌شود. همچنین این شیب برای درصد حجمی‌های کمتر نسبت به درصد حجمی‌های زیادتر، بیشتر است. در درصد حجمی پایین، به دلیل تراکم کم ذرات در میدان حل، گرادیان غلظت بین سطح ذره و توده سیال نسبت به حالت درصد حجمی بیشتر، بالاتر است. بالاتر بودن گرادیان غلظت، نرخ انحلال را افزایش می‌دهد. در این شبهه‌سازی، فرآیند انحلال تا زمانی که درصد حجمی ذرات به $۰/۰۵$ مقدار اولیه خود برسد ($\phi/\phi_0 = ۰/۰۵$)، ادامه می‌یابد و همچنین اگر تا رسیدن درصد حجمی ذرات به $۰/۰۵$ مقدار اولیه خود، شعاع ذرات کمتر از ۲ واحد شبکه شود، ذره حل‌شده فرض می‌شود.



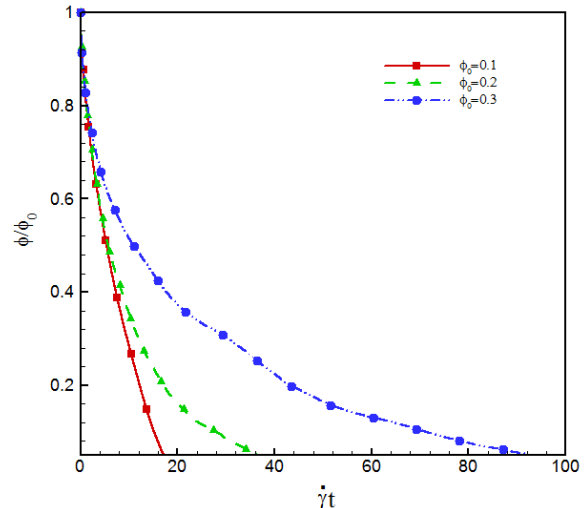
شکل ۳) میدان غلظت برای $\phi_0 = ۰/۱$ در $Re=۰/۰۵$ و $Sc=۳۰۰$: a: $\gamma t = ۱$; b: $\gamma t = ۱۰$; c: $\gamma t = ۲۰$



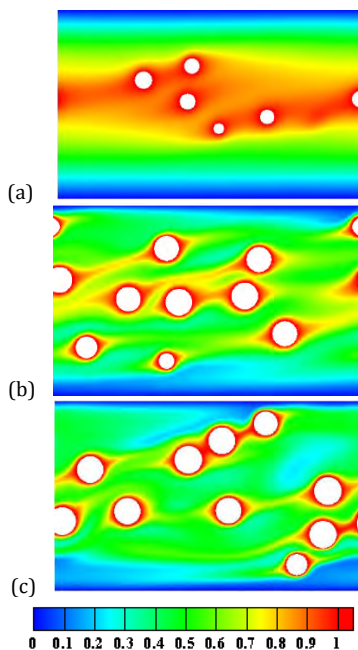
شکل ۴) میدان غلظت برای $\phi_0 = ۰/۲$ در $Re=۰/۰۵$ و $Sc=۳۰۰$: a: $\gamma t = ۱$; b: $\gamma t = ۱۰$; c: $\gamma t = ۲۰$



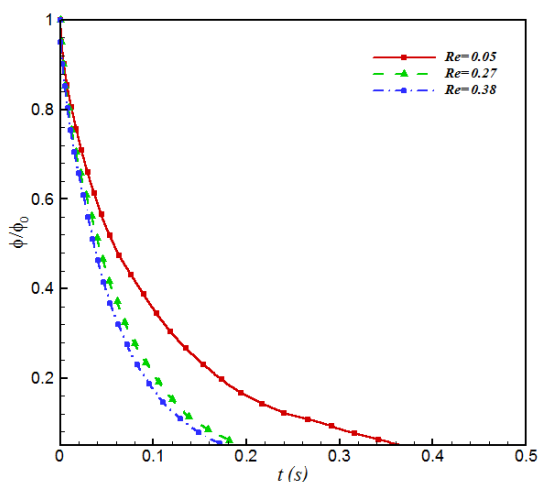
نمودار (۳) تاثیر عدد اشمیت روی نرخ انحلال ذرات



نمودار (۲) اثر درصد حجمی اولیه ذات روی زمان انحلال



شکل (۶) میدان غلظت برای $\phi_0=0.2$ در $\gamma t=3.0$ و $Re=0.0$: a: $Sc=300$; b: $Sc=1300$ و c: $Sc=2300$



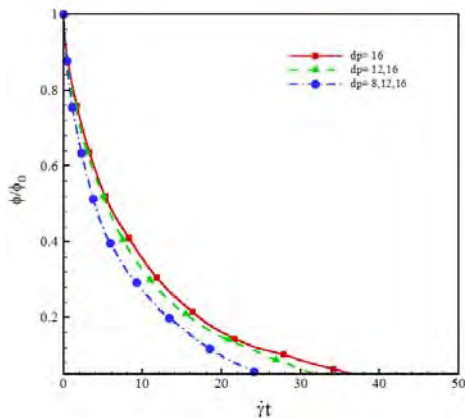
نمودار (۴) تاثیر عدد رینولدز روی نرخ انحلال ذرات

۲-۵- تاثیر عدد اشمیت روی نرخ انحلال

در ادامه، تاثیر عدد اشمیت در عدد رینولدز ثابت ($Re=0.05$) روی فرآیند انحلال بررسی شد. تغییرات درصد حجمی بدون بعد ذرات با گذشت زمان برای $\phi_0=0.2$ در اشمیت‌های ۳۰۰، ۱۳۶۰ و ۲۳۰۰ در نمودار ۳ نشان داده شده است. مطابق با این شکل نرخ انحلال برای عدد اشمیت کوچک‌تر، بیشتر است، زیرا هرچه عدد اشمیت (Sc) v/D کمتر شود، به دلیل ثابت‌بودن ویسکوزیته سیال (ν)، ضریب نفوذ (D) در سیستم بالا می‌رود و هرچه ضریب نفوذ در سیستم بالاتر رود، فرآیند انحلال سریع‌تر اتفاق می‌افتد. این نتایج به صورت کیفی در شکل ۶ نیز قابل مشاهده است. در نتیجه هرچه عدد اشمیت درون سیستم کمتر باشد، فرآیند انحلال سریع‌تر انجام می‌شود و مدت زمان کمتری نیاز است که درصد حجمی فرآیند به 0.05% مقدار اولیه خود برسد.

۳-۵- تاثیر عدد رینولدز روی نرخ انحلال

در این بخش به بررسی تاثیر عدد رینولدز روی نرخ انحلال در عدد اشمیت ثابت ($Sc=300$) پرداخته شده است. نمودار ۴ تغییرات درصد حجمی ذرات در $\phi_0=0.2$ را با گذشت زمان در رینولدزهای 0.05% ، 0.27% و 0.38% نشان می‌دهد. برای افزایش عدد رینولدز در این بخش، از افزایش نرخ برشی استفاده شد؛ یعنی سرعت حرکت صفحات در خلاف جهت هم افزایش یافت. با افزایش سرعت حرکت صفحات، سرعت جابه‌جاشدن سیال درون میدان برشی افزایش می‌یابد و باعث می‌شود که توزیع یکنواختی از غلظت درون ناحیه حل ایجاد شود. این یکنواختی غلظت سیال در ناحیه حل، باعث کاهش غلظت سیالی که در تماس با ذره جامد است، می‌شود. در نتیجه اختلاف غلظت بین سیال و ذره جامد زیاد می‌شود و نیروی محرکه انتقال جرم افزایش می‌یابد. با افزایش نیروی محرکه انتقال جرم، نرخ کوچک‌شدن ذرات زیاد می‌شود و سرعت انحلال ذرات افزایش می‌یابد. میدان غلظت به صورت کیفی در رینولدزهای 0.05% ، 0.27% و 0.38% را برای $\phi_0=0.2$ و $t=0.1s$ در شکل ۷ نشان داده می‌شود.



نمودار (۵) تاثیر مختلف سایزبودن روی نرخ انحلال

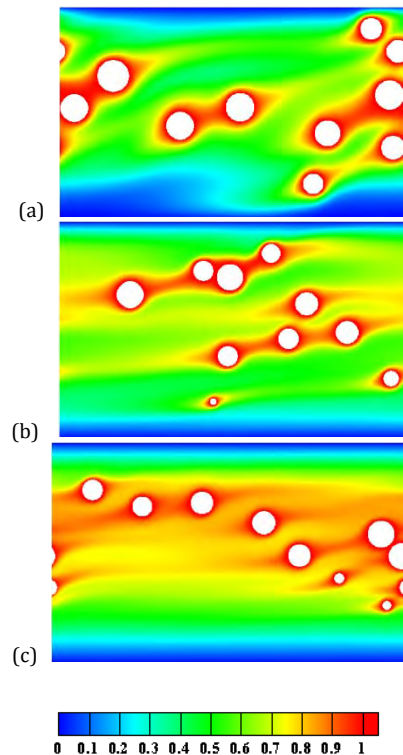
۶- بحث و نتیجه‌گیری

در این مطالعه، ترکیب دوبعدی روش نمایه‌هموار غلظتی با روش شبکه بولتزمن برای شبیه‌سازی فرآیند انحلال ذرات جامد دایره‌ای در میدان برشی مطالعه شد. همچنین این طرح برای حل مسائل برهمکنش غلظت بین ذرات جامد و سیال به‌کار برده شد. روش شبکه بولتزمن به‌کاربرده شد تا حرکت جریان سیال و غلظت سیال را شبیه‌سازی کند. روش نمایه‌هموار نیز برای اعمال شرط مرزی عمده لغزش سرعتی و غلظتی در سطح مشترک ذرات و سیال به‌کار برده شد. نیروهای هیدرودینامیکی و گشتاور واردشده بر هر ذره از طریق قانون بقای مومنتوم ارزیابی شدند. همچنین از قانون دوم نیوتن برای محاسبه سرعت خطی و زاویه‌ای ذرات استفاده شد.

مقایسه نتایج حاصل از مدل‌سازی با نتایج عددی موجود، حاکی از آن بود که ترکیب روش شبکه بولتزمن غلظتی و نمایه‌هموار یک روش ساده و بسیار مناسب جهت حل عددی مسائل ذرات جامد-سیال است. در اثر منتقل‌شدن جرم از سطح ذراتی که در تماس با سیال هستند، ذرات شروع به کوچک‌شدن با گذشت زمان می‌کنند. نتایج به‌دست‌آمده نشان می‌دهد که فرآیند انحلال در سوسپانسیون‌های غلیظ نسبت به سوسپانسیون‌های رقیق کندتر انجام می‌گیرد؛ زیرا در سوسپانسیون‌های غلیظ، غلظت جسم حل‌شده در توده مایع افزایش می‌یابد و باعث کاهش نیروی محرکه انتقال جرم می‌شود. کاهش ضریب نفوذ انتقال جرم (D) به دلیل افزایش عدد اشمیت و همچنین کاهش نرخ برشی به دلیل کاهش عدد رینولدز نیز باعث افزایش زمان انحلال ذرات جامد می‌شود. در نتیجه روش شبکه بولتزمن غلظتی به‌عنوان یک روش کارآمد برای شبیه‌سازی رفتار سیستم‌های شامل ذرات جامد که در آنها انتقال جرم و مومنتوم به‌صورت همزمان اتفاق می‌افتد، مناسب است.

تشکر و قدردانی: نویسندگان بر خود لازم می‌دانند از دانشکده فنی و مهندسی دانشگاه شهید باهنر کرمان که امکان انجام این پژوهش را فراهم نموده است، تشکر و قدردانی نمایند.

تاییدیه اخلاقی: این مقاله تاکنون در نشریه دیگری (به‌طور کامل یا



شکل (۷) میدان غلظت برای $\phi_0=0/2$ در $t=0/1s$ و $Re=0/0$; $SC=300$ (a)، $Re=0/38$ (b) و $Re=0/2$ (c)

همان طور که از شکل مشاهده می‌شود در درصد حجمی اولیه $0/2=0$ ϕ_0 در یک زمان مشخص، نرخ انحلال ذرات در عدد رینولدز بالا، بیشتر است.

۴-۵- بررسی رفتار انحلال سیستم‌های با اندازه ذرات مختلف

در یک فرآیند انحلال واقعی اندازه ذرات متفاوت است. در نتیجه مطالعه رفتار سیستم‌های با اندازه ذرات مختلف از اهمیت بالایی برخوردار است. در این قسمت به بررسی اثر مختلف سایزبودن ذرات روی فرآیند انحلال پرداخته می‌شود.

سه سیستم متفاوت با تعداد مختلفی ذره در نظر گرفته شد. سیستم اول شامل ذراتی با اندازه‌های یکسان ۱۶ واحد شبکه، سیستم دوم شامل ذراتی با اندازه‌های ۱۲ و ۱۶ واحد شبکه و سیستم سوم شامل ذراتی با اندازه‌های ۸، ۱۲ و ۱۶ واحد شبکه مشخص شد. درصد حجمی ذرات، عدد رینولدز و عدد اشمیت معادل $0/2$ ، $0/5$ و 300 برای این سه سیستم معین شد. در نمودار ۵، تغییرات درصد حجمی ذرات با گذشت زمان برای این سیستم‌ها نشان داده شده است. همان گونه که مشخص است، در زمان انحلال یکسان، درصد حجمی برای سیستم سوم که محدوده اندازه ذرات در آن بیشتر است، کمتر از درصد حجمی برای سیستم دوم است و درصد حجمی سیستم دوم از درصد حجمی سیستم اول در همان زمان کمتر است. در نتیجه سیستم سوم به دلیل داشتن ذراتی که داری محدوده وسیع از اندازه است، دارای نرخ انحلال بیشتری است و کمترین زمان انحلال را به خود اختصاص می‌دهد.

تعدادی	eq	بالانویس‌ها
خارجی	ext	
		زیرنویس‌ها
ذره	p	
سیال	f	
دیوار	w	

منابع

1- Derksen JJ, Reynolds G, Crampton A, Huang Z, Booth J. Simulations of dissolution of spherical particles in laminar shear flow. *Chemical Engineering Research and Design*. 2015;93:66-78.

2- Jia X, Williams RA. A hybrid mesoscale modelling approach to dissolution of granules and tablets. *Chemical Engineering Research and Design*. 2007;85(7):1027-1038.

3- Siepman J, Siepman F. Mathematical modeling of drug dissolution. *International Journal of Pharmaceutics*. 2013;453(1):12-24.

4- Han K, Feng YT, Owen DRJ. Coupled lattice Boltzmann and discrete element modelling of fluid-particle interaction problems. *Computers & Structures*. 2007;85(11-14):1080-1088.

5- Ladd AJC. Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 1. Theoretical foundation. *Journal of Fluid Mechanics*. 1994;271:285-309.

6- Ladd AJC. Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 2. Numerical results. *Journal of Fluid Mechanics*. 1994;271:311-339.

7- Ladd AJC, Verberg R. Lattice-Boltzmann simulations of particle-fluid suspensions. *Journal of Statistical Physics*. 2001;104(5-6):1191-1251.

8- Feng ZG, Michaelides EE. Hydrodynamic force on spheres in cylindrical and prismatic enclosures. *International Journal of Multiphase Flow*. 2002;28(3):479-496.

9- Khalili B, Rahnama M, Jafari S, Jahanshahi Javaran E. Implementation of parallel processing on GPU for fluid flow simulation using Lattice Boltzmann method and Smoothed Profile method. *Modares Mechanical Engineering*. 2016;16(9):449-458.

10- Mohammadipoor O, Mirbozorgi SA. A new curved boundary treatment for the lattice Boltzmann method. *Modares Mechanical Engineering*. 2013;13(8):28-41.

11- Bouzidi MH, Firdaouss M, Lallemand P. Momentum transfer of a Boltzmann-lattice fluid with boundaries. *Physics of Fluids*. 2001;13(11):3452-3459.

12- Peskin CS. The immersed boundary method. *Acta Numerica*. 2002;11:479-517.

13- Nakayama Y, Yamamoto R. Simulation method to resolve hydrodynamic interactions in colloidal dispersions. *Physical Review E, Covering Statistical, Nonlinear, Biological, and Soft Matter Physics*. 2005;71(3 Pt 2B):036707.

14- Jafari S, Yamamoto R, Rahnama M. Lattice-Boltzmann method combined with smoothed-profile method for particulate suspensions. *Physical Review E, Covering Statistical, Nonlinear, Biological, and Soft Matter Physics*. 2011;83(2 Pt 2):026702.

15- Hu Y, Li D, Shu S, Niu X. An efficient smoothed profile-

بخشی از آن) به چاپ نرسیده است. ضمناً محتویات علمی و ادبی مقاله منتج از فعالیت علمی خود نویسندگان بوده و صحت و اعتبار نتایج و متن مقاله برعهده نویسندگان مقاله است.

تعارض منافع: نویسندگان اعلام می‌کنند که این اثر، هیچ گونه تعارض منافعی با اشخاص و سازمان‌های دیگر ندارد.

سهم نویسندگان: راضیه صفا (نویسنده اول)، نگارنده مقدمه/پژوهشگر اصلی/تحلیلگر آماری/نگارنده بحث (۵۰٪)؛ عطاالله سلطانی‌گوهرریزی (نویسنده دوم)، روش‌شناس/تحلیلگر آماری (۱۵٪)؛ سعید جعفری (نویسنده سوم)، روش‌شناس/تحلیلگر آماری (۱۵٪)؛ ابراهیم جهانشاهی‌جواران (نویسنده چهارم)، روش‌شناس/تحلیلگر آماری (۱۵٪)

منابع مالی: منابع مالی خاصی برای انجام این تحقیق استفاده نشده است.

فهرست علائم

تابع توزیع دانسیته	f_{α}
تابع توزیع غلظت	\hat{J}_{α}
تابع توزیع تعدادی	f_{α}^{eq}
تابع توزیع تعدادی غلظت	g_{α}^{eq}
نیروی خارجی	F_{α}
چشمه-چاه غلظتی	\hat{J}_{α}
بردار سرعت	e_{α}
گام زمانی	Δt
ضرب نفوذ جرمی	D
نیروی هیدرودینامیکی بین ذرات-سیال	f_s
نیروی برهمکنش غلظتی بین ذرات-سیال	q_c
سرعت سیال	$u_f(x,t)$
سرعت ذره	$u_p(x,t)$
میدان سرعت موقت	$u^*(x,t)$
میدان کلی سرعت	$u(x,t)$
غلظت سیال	$C_f(x,t)$
غلظت ذره	$C_p(x,t)$
میدان غلظت موقت	$C^*(x,t)$
میدان کلی غلظت	$C(x,t)$
تابع چگالی ذرات	$\varphi(x,t)$
طول میدان برشی	L
عرض میدان برشی	H
عدد رینولدز	Re
عدد اشمیت	Sc
عدد شروود	Sh
عدد پکلت	Pe
علائم یونانی	
لزجت دینامیکی ($kgm^{-1}s^{-1}$)	μ
چگالی (kgm^{-3})	$\rho(x,y)$
زمان آرامش سرعتی	τ_f
زمان آرامش غلظتی	τ_j
تابع وزنی	ω_{α}
ویسکوزیته سینماتیکی (m^2/s)	ν
اپراتور برخورد	Ω

18- Luo X, Maxey MR, Karniadakis GE. Smoothed profile method for particulate flows: Error analysis and simulations. *Journal of Computational Physics*. 2009;228(5):1750-1769.

19- Behrend O. Solid-fluid boundaries in particle suspension simulations via the lattice Boltzmann method. *Physical Review E, Covering Statistical, Nonlinear, Biological, and Soft Matter Physics*. 1995;52(1):1164-1175.

20- Frankel NA, Acrivos A. Heat and mass transfer from small spheres and cylinders freely suspended in shear flow. *The Physics of Fluids*. 1968;11(9):1913-1918.

lattice Boltzmann method for the simulation of forced and natural convection flows in complex geometries. *International Communications in Heat and Mass Transfer*. 2015;68:188-199.

16- Bhatnagar PL, Gross EP, Krook M. A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Physical Review*. 1954;94(3):511.

17- Guo Z, Zheng C, Shi B. Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method. *Physical Review E, Covering Statistical, Nonlinear, Biological, and Soft Matter Physics*. 2002;65(4):046308.