

علمی - ترویجی

# شبیه‌سازی جریان میکروپمپ الکترواسموتیک، با استفاده از روش دینامیک ذرات استهلاکی

در این مقاله، از روش دینامیک ذرات اتلافی برای شبیه‌سازی ریزپمپ الکترواسموتیک در نقش قلب یک سیستم پیش‌ران فضایی- شیمیایی استفاده می‌شود. در این شبیه‌سازی، بر اساس قاعده جریان الکترواسموتیک، سیال توسط ریزپمپ رسانش و پارامترهای متأثر، مانند ابعاد کانال، ولتاژ اعمال شده و اثر جنس سطح یا زتاپتانسیل بررسی و تحلیل شده است. چگونگی توسعه روش شبیه‌سازی به منظور اعمال نیروی خارجی (نیروی الکترواسموتیک) و همچنین، چگونگی توسعه روش به کانال با ابعاد یا شرایط متفاوت ارائه شده است. نتایج به دست آمده بررسی پروفیل سرعت در کانال به ازای پارامترهای متفاوت متأثر را شامل می‌شود. این نتایج با حل تحلیلی مقایسه و اعتبارسنجی شده است. در این بررسی نشان داده شده که روش الکترواسموتیک روشی ایده‌آل برای انتقال سیال به عنوان ریزپمپ در شرایط مختلف و همچنین، کاربردی در شاخص ریز، مانند ریزماهواره، است.

واژه‌های کلیدی: دینامیک ذرات استهلاکی، ریزپمپ، جریان الکترواسموتیک، میکروکانال

رامین ذاکری<sup>۱\*</sup>، استادیار، دانشکده مهندسی مکانیک- هوافضا، دانشگاه صنعتی شاهرود

رخشاد دشتی گوهری<sup>۲</sup>، دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی مکانیک- هوافضا، دانشگاه صنعتی شاهرود

اسماعیل یداللهی افرایی<sup>۳</sup>، دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی مکانیک- هوافضا، دانشگاه صنعتی شاهرود

\* نویسنده مخاطب، آدرس: شاهرود، کدپستی: ۳۶۱۹۹۵۱۶۱

## Simulation of Electro-osmotic Micro Pump, Using Dissipative Particle Dynamics

*In this paper, the dissipative particle dynamic method is used to simulate the electroosmotic micro pump as the main part of a spatial-chemical propulsion system. In this simulation, the micro-pump is driven by the principle of electroosmotic flow. Furthermore, the effective parameters, such as channel dimensions, applied voltage, surface effect, or zeta potential are analyzed. This research focuses on developing a simulation method for applying external force (electroosmotic force) as well as developing a method to a channel with different sizes and conditions. Our results include velocity profile in a channel with different effective parameters. The result were compared with and validated by analytical solution. It was shown that the electroosmotic method is an ideal method for transferring fluid as a micro-pump in different conditions and also in fine-scales applications, such as in micro-satellites.*

**Keywords:** Dissipative Particle Dynamics, Micropump, Electroosmotic Flow, Micro Channel

R. Zakeri<sup>1\*</sup>, Assistant Professor, Department of Mechanical and Aerospace, Engineering, Shahrood University of Technology

R. Dashti Gohari<sup>2</sup>, M.Sc. Student, Department of Mechanical and Aerospace, Engineering, Shahrood University of Technology

E. Yadollahi<sup>3</sup>, M.Sc. Student, Department of Mechanical and Aerospace, Engineering, Shahrood University of Technology

\*Corresponding Author, Postal Code: 3619995161, Shahrood, IRAN

r\_zakeri@shahroodut.ac.ir

## مقدمه

یکی از روش‌های انتقال سیال استفاده از اثر میدان الکتریکی در میکروکانال‌ها و نانوکanal‌ها در پدیده جریان الکترواسموتیک (EOF)<sup>۱</sup> است. به طور کلی، جریان الکترواسموتیک حرکت توده‌ای مولکول‌های مایع را در نزدیکی سطح جامد توصیف می‌کند و در پاسخ به یک میدان الکتریکی به موازات سطح پیشنهاد شده اعمال می‌شود. الکترواسموتیک برای مقیاس‌های کوچک مناسب است و کاربردهای فراوانی در سیستم‌های میکرو و نانوالکترومکانیکی<sup>۲</sup> (MEMS/NEMS) دارد. یکی از کاربردهای مهم آن پمپاژ مایعات از طریق میکرو و نانوکanal‌هاست. جریان الکترواسموتیک مزایای زیادی نسبت به رویکردهای جریان معمولی تحت فشار دارد، زیرا استفاده از بخش متحرک را کاهش می‌دهد. به علاوه، پروفیل سرعت شبیه صفحه تخت تولید شده در کانال، پراکنندگی نمونه‌های گسسته را کاهش می‌دهد.

جریان الکترواسموتیک مزایای مهم دیگری نیز دارد که می‌توان به روش ساخت ساده، قابلیت اطمینان کافی، نداشتن سر و صدا و قابلیت کنترل پذیری اشاره کرد. بنابراین، جریان الکترواسموتیک، کاربرد زیادی در دستگاه‌های میکروفلوئیدیک ساخته شده دارد. برای مثال در پمپاژ مایعات از طریق نانوکanal‌ها به طور گسترده از EOF استفاده شده است [۴-۱] یا در میکروکانال‌ها [۷-۵] از دیدگاه‌های مختلف، در هدایت جریان از طریق نانوکanal‌ها [۸]، آنالیز تزریق جریان [۹]، عملگرهای میکرومکانیکی [۱۰]، خنک کننده میکروالکترونیک [۱۱]، تزریق سوخت در نانو ساختارها [۱۲] استفاده می‌شود.

این برنامه‌های کاربردی بی‌شمار، محققان را به کار جدی‌تر در زمینه آنالیز دقیق جریان الکترواسموتیک یا شبیه‌سازی‌های دیگر ترغیب کرده است. بدیهی است که شبیه‌سازی نمونه‌های الکترواسموتیک یاد شده برای کنترل کار آبی و طراحی بهینه چنین دستگاه‌هایی در مقیاس نانو/میکرو بسیار مهم است [۱۳]. علاوه بر تجزیه و تحلیل‌های نظری و کارهای تجربی، تلاش‌های عددی زیادی برای شبیه‌سازی الکترواسموتی برای میکروکانال ساده و هندسه‌های مختلف در مقیاس میکرون انجام شده است [۱۶-۱۴]. با این حال چنین مطالعاتی به بررسی جریان پیوسته مربوط است. همان‌طور که مشخص است، معادلات ناویر استوکس نمی‌تواند به طور دقیق پدیده‌های حقیقی را توصیف کند که در موارد جریان الکترواسموتیک غیرپیوسته اتفاق می‌افتد. این مسئله محققان را به جستجوی مدل‌های جایگزین دیگری برای رفتار نمونه‌های جریان

الکترواسموتیک ناپیوسته تشویق کرده است. رفتار یک سیال ناپیوسته در میکروکانال T شکل با استفاده از روش المان محدود و مطالعه خواص رئولوژی جریان الکترواسموتیک شبیه‌سازی شد [۱۷]. از دیدگاه مزوسکوپیک، تلاش‌های فراوانی برای استفاده از روش‌های مختلف مانند دینامیک مولکولی [۱۸] یا روش لیتس بولتزمن<sup>۳</sup> (LBM) [۲۰-۱۹] برای شبیه‌سازی EOF در مقیاس میکرون انجام شده است. روش‌های شبیه‌سازی ناپیوسته الکترواسموتیک در مقیاس میکرون یکی دیگر از روش‌های مزوسکوپیک و روش دی‌پی‌دی (DPD)<sup>۴</sup> توسعه یافته [۲۱] برای جریان در مقیاس‌های بزرگ‌تر است. این روش شبیه‌سازی نسبت به روش شبیه‌سازی مولکولی به هزینه محاسباتی کمتری نیاز دارد [۲۲]. ذرات DPD نشان‌دهنده گروهی از مولکول‌ها و هر ذره نماینده گروهی از مولکول‌های واقعی است. بر خلاف روش دینامیک مولکولی (MD)<sup>۵</sup>، در روش DPD به دلیل تحمیل تعامل ذرات نرم می‌توان از گام‌های زمانی بزرگ‌تر و محاسبه اندازه ذرات بزرگ‌تر استفاده کرد. جریان الکترواسموتیک در نانوکanal‌های T شکل با استفاده از DPD شبیه‌سازی و نشان داده شد که هزینه محاسباتی مورد نیاز در مقایسه با شبیه‌سازی مولکولی، معقول‌تر به نظر می‌رسد [۱۳].

میکروماهواره‌ها جایگزین مناسبی برای سیستم‌های تحقیقاتی با مدار بزرگ‌تر است. با رشد روزافزون فناوری‌های ماهواره‌ای، از پمپ الکترواسموتیک برای انتقال سوخت در ریزماهواره‌ها استفاده می‌شود [۲۶-۲۳]. در این مقاله، جریان الکترواسموتیک برای استفاده از میکروپمپ‌ها در کاربرد میکروماهواره‌ها شبیه‌سازی شده است. پارامترهای مؤثر بررسی و در حالتی که کانال دارای گرفتگی باشد، نتایج مسئله توسعه داده شده است.

## جریان الکترواسموتیک

با توجه به شکل ۱، جریان الکترواسموتیک به علت ایجاد یک ناحیه دوگانه الکتریکی در نزدیکی دیواره‌های باردار کانال در ابعاد میکرو تشکیل می‌شود. در حقیقت، اگر یک محلول الکترلیت حاوی یون‌های مثبت و منفی در مجاورت یک سطح باردار قرار داده شود، نیروی الکترواستاتیکی میان این سطح و یون‌های محلول سبب جذب یون‌های ناهمنام و دفع یون‌های همنام توسط سطح دیواره می‌شود و در نتیجه، یک ناحیه دوگانه الکتریکی در مجاورت سطح باردار دیواره تشکیل خواهد شد که در آن غلظت یون‌های ناهمنام دیواره بیشتر از غلظت یون‌های همنام دیواره است. حال اگر یک میدان الکتریکی در راستای طول کانال به این سیستم اعمال شود، جریانی در جهت حرکت

3. Lattice Boltzmann Method (LBM)  
4. Dissipative Particle Dynamics  
5. Molecular Dynamics

1. Electro-Osmotic Flow (EOF)  
2. Microelectromechanical Systems / Nanoelectromechanical Systems

$$\varepsilon \frac{d^2 \Psi}{dy^2} = -\rho_e \quad (3)$$

در این معادله،  $\Psi$  پتانسیل الکتریکی و  $y$  فاصله از سطح شارژ شده است. فرض می‌شود که توزیع بولتزمن برای یون‌ها و زتانسیل کوچک در نظر گرفته شده است. پروفیل پتانسیل الکتریکی را می‌توان از معادله خطی شده پواسون - بولتزمن (PBE) به صورت زیر به دست آورد.

$$\frac{d^2 \Psi}{dy^2} = k^2 \Psi, \quad (4)$$

که در آن،  $K$  معکوس طول دبی است (معادله (۱)). اگر  $h$  برابر با نیمی از ارتفاع کانال باشد، شرایط مرزی را می‌توان به صورت رابطه (۵) در نظر گرفت.

$$\frac{d\Psi}{dy} \Big|_{y=0} = 0 \quad \text{و} \quad \Psi \Big|_{y=h} = \zeta \quad (5)$$

با حل معادله (۴) و قرار دادن دو شرط مرزی بالا در معادله، در نهایت معادله (۶) به دست می‌آید.

$$\Psi(y) = \zeta \frac{\cosh(ky)}{\cosh(kh)} \quad (6)$$

در این معادله، پارامتر  $kh$  به عنوان نسبت نیمی از ارتفاع کانال به طول دبی تعریف شده است که گسترش EDL در کانال را نشان می‌دهد که اگر بزرگ‌تر از ۱ باشد EDL باریک خواهد بود. اما اگر مقادیر آن کوچک‌تر یا مساوی ۱ باشد، EDL گسترده می‌شود. در نتیجه، EDL تمام کانال را پوشش می‌دهد. با قرار دادن رابطه (۶) در معادله (۳)، معادله (۷) حاصل می‌شود.

$$\rho_e = -k^2 \varepsilon \Psi \quad (7)$$

با قرار دادن معادله (۷) در معادله اندازه حرکت خطی در جهت  $x$ ، رابطه (۸) حاصل می‌شود.

$$\frac{d}{dy} \left( \mu \frac{dv_x}{dy} \right) - E_0 k^2 \varepsilon \Psi = 0 \quad (8)$$

با ترکیب معادله‌های (۲) و (۷) می‌توان به رابطه (۹) رسید [۲۸].

$$F_x + E_0 k^2 \varepsilon \Psi = 0 \quad (9)$$

با استفاده از این معادله می‌توان نیروی الکترواسموتیک خالص در کانال را به دست آورد که می‌تواند به عنوان نیروی بدنه اعمال و به نیروهای تعامل بین ذرات مایع اضافه شود [۲۴]. سپس، می‌توان معادله (۹) را به صورت رابطه (۱۰) نوشت.

$$\mu \frac{d^2 v_x}{dy^2} + F_x = 0 \quad (10)$$

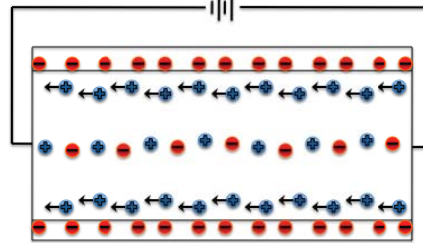
برای استخراج یک راه حل تحلیلی، دو شرط مرزی زیر انتخاب می‌شود:

$$\frac{dv_x}{dy} \Big|_{y=h} = 0 \quad \text{و} \quad v_x \Big|_{y=0} = 0. \quad (11)$$

با توجه به شرایط مرزی یادشده، یک راه حل برای معادله (۱۰) مطابق رابطه (۱۲) به دست می‌آید.

$$v_x(y) = k \frac{n-1}{n} \left( \frac{-\varepsilon E_0 \zeta}{m} \right)^{\frac{1}{n}} \frac{\int_{ky}^{kh} \sinh^{\frac{1}{n}}(ky) d(ky)}{\cosh^{\frac{1}{n}}(kh)} \quad (12)$$

یون‌های ناهم نام دیواره در ناحیه دوگانه الکتریکی یا لایه دوتایی الکتریکی (EDL) حاصل می‌شود. با انتقال این جریان به دیگر ذرات سیال، جریان یکنواختی در توده سیال تشکیل می‌شود که به آن جریان الکترواسموتیک گویند [۲۷].



شکل ۱- حرکت یون‌ها توسط پدیده الکترواسموتیک.

پدیده الکتروکینتیک زمانی اتفاق می‌افتد که میدان الکتریکی خارجی به طور مناسب به ذرات سیال در میدان جریان اعمال شود. اگرچه از نقطه نظر الکترولیتی، سیال خنثی است، در نزدیکی مرز جامد در EDL این طور نیست. در حقیقت، یون‌های مخالف در نزدیکی مرز جامد غالب هستند. تأثیر EDL را می‌توان به طور تقریبی با طول دبی  $\lambda_D$  پیش‌بینی کرد که بستگی به غلظت مولی سیال یونیزه شده دارد.

با توجه به نظریه Debye-Hückel طول دبی یا طول  $\lambda_D$  را می‌توان از معادله (۱) محاسبه کرد.

$$k^{-1} = \lambda_D = \left( \frac{\varepsilon k_B T}{2e^2 z^2 n_{\infty}} \right)^{\frac{1}{2}} = (8\pi e^2 \lambda_B z^2 n_{\infty})^{-1/2} \quad (1)$$

در این معادله،  $k_B$  ثابت بولتزمن،  $T$  (°K) دمای مطلق و  $e$  (°C) ثابت بار بنیادی است.  $z$  ظرفیت یون‌ها و  $n_{\infty}$  عدد پالک که نشان‌دهنده غلظت یون‌ها و ممکن است مقادیر مختلفی داشته باشد. بدیهی است که مقادیر مختلف آن به طول دبی‌های مختلف منجر می‌شود. به علاوه،  $\lambda_B$  طول بنجامین یا Bjerrum است که نشان‌دهنده فاصله‌ای است که باید بین یون‌های  $z^+ = z^- = 1$  برای جلوگیری از تجمع برقرار باشد. به طور کلی، تعامل میدان الکتریکی اعمال شده با یون‌های سیال مثبت در EDL، نیروی EOF خالص را تولید می‌کند. فرض بر این است که میدان الکتریکی اعمال شده در جهت  $x$  است. نیروی حاصل از نیروی خارجی با استفاده از رابطه (۲) به دست می‌آید.

$$F_x = E_0 \rho_e \quad (2)$$

در این معادله،  $E_0$  قدرت میدان الکتریکی و  $\rho_e$  چگالی خالص است. در حالت یک‌بعدی، معادله پواسون که رابطه پتانسیل الکتریکی سطح با چگالی شارژ خالص است به صورت رابطه (۳) نوشته می‌شود.

اهمیت دارد و روش MD در شاخص میکرو هزینه‌های بالایی دارد. در روش LBM، درجات آزادی کاهش پیدا می‌کند که این امر موجب می‌شود از واقعیت دور شد. در رژیم ناپیوسته به نرم‌افزاری قوی برای رسیدن به واقعیت نیاز است، بنابراین در این مطالعه روش DPD انتخاب شد [۲۸-۳۰].

روش DPD مانند روش MD در تغییر موقعیت و سرعت، پیوسته است. در تمام مطالعات دامنه محاسباتی دارای مرزهای دوره‌ای است، به همین دلیل به راحتی اجرا می‌شود اما در شرایطی که مرز دیواره وجود داشته باشد، روش DPD مشکل را حل می‌کند. به دلیل استفاده از پتانسیل نرمی که در این روش وجود دارد ذرات به دیواره نفوذ می‌کنند، به همین دلیل شرایط مرزی در این روش یک مشکل چالش برانگیز است. شرایط مرزی در این روش شرایط مرزی متقارن است. برخلاف مرز دیوار که خارج از سیستم ذرات DPD است، سطح متقارن، یک سطح داخلی است و ذره می‌تواند از مرز تقارن عبور کند. بنابراین، نمی‌توان از ذرات مرز سیال منجمد برای مرز داخلی متقارن استفاده کرد. در مرز متقارن، یک لایه از ذرات فرضی در نظر گرفته می‌شود که تصاویر آینه‌ای از ذرات مایع واقعی در بالای مرز است [۳۱].

برخلاف معادلات MD، معادلات DPD تصادفی هستند و در نتیجه، شبیه‌سازی DPD درجه سختی بیشتری نسبت به شبیه‌سازی MD دارد. به علاوه، نیروی اضمحلالی به سرعت و وجود دارد. روش انتگرال‌گیری وارلت بر اساس الگوریتم کلاسیک MD است و در روش DPD نیز استفاده می‌شود که در این تحقیق نیز از آن بهره‌برداری شده است.

سیال DPD یا ذرات DPD به مؤلفه‌های درشت‌دانه مربوط می‌شود که مجموعه‌ای از مولکول‌ها یا گروه‌های مولکولی را به جای اتم‌های فردی نشان می‌دهد [۳۱]. دانه‌های درشت منجر به پتانسیل جفتی نرم می‌شود که ذرات را با هم همپوشانی می‌کند. با استفاده از DPD به جای MD می‌توان گام‌های زمانی بزرگ‌تری را در نظر گرفت، در نتیجه، هزینه محاسباتی نسبت به روش MD کمتر خواهد شد [۳۲]. طبق مرجع [۲۴] DPD یک سیستم n ذره‌ای است که حرکت ذراتی با جرم  $m_i$ ، موقعیت  $r_i$  و سرعت‌های  $v_i$  را توصیف می‌کند، تعاملات بین ذرات  $i$  و  $j$  ترکیبی از بقای دوتایی، اضمحلالی و نیروهای تصادفی وارد بر ذره  $i$ ، توسط ذره  $j$  است که با رابطه (۱۵) مشخص می‌شود.

$$\frac{dr_i}{dt} = v_i \quad (15)$$

$$\frac{dv_i}{dt} = \sum_{j \neq i} f_{ij} + F^e \quad (16)$$

سیستم متشکل از n ذره با جرم  $m_i$ ، موقعیت  $r_i$  و سرعت  $v_i$  سه نوع نیروی ذکر شده، به ذره  $j$  توسط ذره  $i$  اعمال می‌شود.

$$F_{ij}^c = F_{ij}^c(r_{ij})r_{ij} \quad (17)$$

اگر این راه حل در معادله (۱۰) جایگزین شود، در نهایت رابطه (۱۳) حاصل خواهد شد.

$$\mu = \mu_0 \frac{1}{n} (-k\epsilon E_0 \zeta)^{\frac{n-1}{n}} \left[ \frac{\sinh(ky)}{\cosh(kh)} \right]^{\frac{n-1}{n}} \quad (13)$$

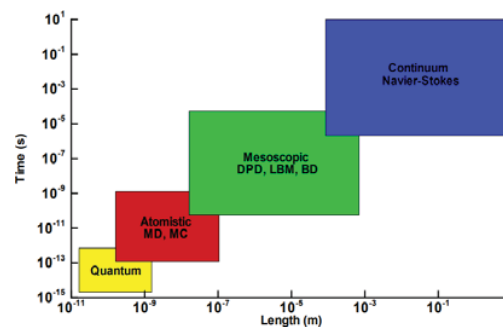
همچنین، تنش برشی از معادله (۸) به دست آمده که در نهایت، با جایگزینی رابطه (۱۴) حاصل خواهد شد [۲۸].

$$\tau = \frac{-k\epsilon E_0 \zeta \sinh(ky)}{\mu_0 \cosh(kh)} \quad (14)$$

در این مقاله، مقدار ضریب توان  $n$  برای سیال نیوتونی واحد در نظر گرفته شده است.

### روش عددی دینامیک ذرات استهلاکی (DPD)

روش دینامیک ذرات استهلاکی، یک روش درشت‌دانه برای شبیه‌سازی جریان پیچیده در مقیاس میکرو است. روش DPD، یک روش ترکیبی از روش دینامیک مولکولی و روش بولتزمن است. روش DPD شاخص طولی و زمانی بیشتری نسبت به روش MD دارد. روش DPD برخورد بین ذرات را در همه جهات بررسی می‌کند، در حالی که روش LBM برخورد بین ذرات را بین چند جهت محدود بررسی خواهد کرد. این در حالی است که معادلات ناویر استوکس برخورد ذرات را در نظر نمی‌گیرد و حلی پیوسته ارائه می‌دهد. یعنی اگر در معادلات بولتزمن، ترم برخورد یا ترم راست معادله صفر در نظر گرفته شود، بعد از ساده‌سازی به معادلات ناویر استوکس حاصل خواهد شد. می‌توان گفت روش DPD در شاخص طولی و زمانی بین روش MD و LBM یا معادلات ناویر استوکس است (شکل ۲).



شکل ۲- مقایسه شاخص طولی و زمانی در روش‌های مختلف.

همچنین، حفظ ممنتوم یکی از ویژگی‌های برجسته روش DPD است که در حقیقت، مدلی برای حفظ جرم و پایستاری ممنتوم است. مزیت دیگر این روش عاملی است که رژیم‌های میکرو و نانو را برای مطالعه پدیده‌های بزرگ‌تر به هم متصل می‌کند. در روش DPD از سه نیروی بقا، تصادفی و اضمحلالی استفاده می‌شود. علاوه بر سه نیروی یادشده، می‌توان یک نیروی خارجی مانند ایجاد رسانا، اختلاف فشار و اختلاف دما را نیز در سیال اعمال کرد. در شاخص ریز، برخورد بین ذرات

$$v_{new} = 2U_{wall} - v_{old} \quad (28)$$

$$r_{new} = r_{old} + 2d_r n_w \quad (29)$$

در معادله (۲۹)،  $d_r$  فاصله بین ذره و مرز،  $U_{wall}$  بردار سرعت دیوار و  $n_w$  بردار عمود بر سطح دیوار است که جهت مثبت آن از دیوار به سمت دامنه در نظر گرفته شده است. این شرط مرزی به طور خودکار شرط عدم لغزش روی دیوار را ارضا می‌کند. یکپارچگی زمان تا رسیدن به یک راه‌حل همگرا برای  $v_x$  بدون تغییر بیشتر در داخل تکرارها ادامه می‌یابد. بعد از استنتاج میدان سرعت، می‌توان سرعت جریان حجمی را بصورت زیر به راحتی از آن محاسبه کرد [۲۸]:

$$Q = 2H\bar{v} \quad (30)$$

در معادله (۳۰) می‌توان سرعت متوسط جریان را با محاسبه سرعت متوسط ذرات، طبق رابطه (۳۱) به دست آورد.

$$\sum_{i=1}^N v_{x_i} = \frac{1}{N} \bar{v} \quad (31)$$

با در نظر گرفتن الگوریتم روش یادشده به حل معادله (۴) نیاز است تا چگالی شارژ خالص و نیروی بدنه با قرار دادن پتانسیل الکتریکی به دست آمده در معادله (۷) و معادله (۲) محاسبه شود. بر اساس الگوریتم DPD، ابتدا سرعت اولیه ذرات DPD بر اساس شاخص رفتار جریان مورد نظر انتخاب و نیروی خارجی محاسبه می‌شود. برای یکپارچگی زمان حرکت ذرات، الگوریتم سرعت وارلت مناسبی در روش DPD پیشنهاد شده است [۳۶]. طرح ادغام مبتنی بر سرعت وارلت می‌تواند برای اتصال بین نیروهای داخلی DPD و نیروی خارجی EOF، برای مدل‌های سیالات مختلف تعمیم داده شود. در ابتدا با توجه به هندسه (در این مقاله، یک نانوکanal)، چگالی شارژ خالص و نیروی EOF باید با حل معادله (PBE) پواسون - بولتزمن محاسبه شود. طبق الگوریتم سرعت وارلت، برای محاسبه DPD دو فرایند کلی در نظر گرفته می‌شود که شامل محاسبه سرعت و مکان ذرات توسط محاسبه نیروهای داخلی و خارجی و سپس، بروزرسانی آنهاست که باید محاسبه با استفاده از نیروی بدنه الکترواسموتیک، بعنوان نیروی خارجی انجام و سرعت و موقعیت محاسبه و سپس، نیروی بدنه پاورلو برای محاسبه سرعت و موقعیت به‌روزرشده استفاده شود. این فرایند برای تمامی ذرات، در تمام مراحل زمانی و بین مراحل زمانی خاص تکرار می‌شود. در آخرین مرحله، پردازش پست برای محاسبه مقادیر فیزیکی انجام می‌شود.

## نتایج

در این بخش، نتایج شبیه‌سازی DPD بررسی شده است. شرایط شبیه‌سازی با در نظر گرفتن  $1,000$  ذره شبیه‌ساز و سیال یونی شده در جدول ۱ مشخص شده است.

$$F_{ij}^D = \gamma W^D(r_{ij})(v_{ij} \cdot r_{ij}) r_{ij} \quad (18)$$

$$F_{ij}^R = W^D(r_{ij}) \xi_{ij} \sigma \quad (19)$$

در این روابط،  $\gamma$  و  $\sigma$  به ترتیب نیروی اضمحلال و نیروی تصادفی را مشخص می‌کنند.  $\xi$  متغیرهای تصادفی گاوسی متقارن با میانگین واحد واریانس صفر است. نیروی پایستاری  $F_{ij}^C$  شبیه فرمول MD است و می‌تواند شامل هر نوع افت فشار، اختلالات الکترواسموتیک یا مغناطیسی باشد.

در اینجا فرض می‌شود جرم هر ذره واحد است.  $F^e$  نیروی خارجی (نیروی الکترواسموتیک) و  $\sum_{j \neq i} f_{ij}$  نیروی داخلی اعمال شده به ذره  $i$  توسط ذره  $j$  است. این نیرو توسط معادله (۲۰) محاسبه می‌شود.

$$\sum_{j \neq i} f_{ij} = \sum_{j \neq i} [F_{ij}^C + F_{ij}^D + F_{ij}^R] \quad (20)$$

در این رابطه،  $F_{ij}^C$  نیروی بقا،  $F_{ij}^D$  نیروی اضمحلالی و  $F_{ij}^R$  نیروهای تصادفی است. نیروی بقا با استفاده از معادله (۲۱) به دست می‌آید.

$$F_{ij}^C = \begin{cases} a_{ij} \left(1 - \frac{r_{ij}}{r_c}\right) \hat{r}_{ij}, & r_{ij} < r_c \\ 0, & r_{ij} \geq r_c \end{cases} \quad (21)$$

در این رابطه،  $a_{ij} = 75k_B T / \rho$  حداکثر مقاومت بین ذرات  $i$  و  $j$  و همچنین،  $\rho$  چگالی سیستم است. شایان توجه است که  $r_{ij}$  به فشرده‌سازی سیستم ایزوترمال مربوط است [۳۷-۳۳]. همچنین، نیروی اضمحلالی و نیروی تصادفی به ترتیب با روابط (۲۲) و (۲۳) محاسبه می‌شود.

$$F_{ij}^D = WD(r_{ij})(r_{ij} \cdot v_{ij}) r_{ij} \quad (22)$$

$$F_{ij}^R = \sigma \omega^R(r_{ij}) \theta_{ij} \hat{r}_{ij} \quad (23)$$

در این رابطه،  $\theta_{ij}$  یک تابع تصادفی با خواص میانگین صفر و واریانس یک است [۲۲].  $\sigma$  و  $\gamma$ ، به ترتیب ضریب قدرت برای تسریع و نیروهای تصادفی  $v_{ij}$  و  $(v_i - v_j)$  است.  $\omega^R$  و  $\omega^D$  دو تابع وزن است که با استفاده از رابطه (۲۴) محاسبه می‌شود.

$$\omega^D(r_{ij}) = [\omega^R(r_{ij})]^2 = \begin{cases} \sqrt{1 - \frac{r_{ij}}{r_c}}, & r_{ij} < r_c \\ 0, & r_{ij} \geq r_c \end{cases} \quad (24)$$

تکامل زمان ذرات DPD را می‌توان با استفاده از قانون نیوتن توصیف کرد. با توجه به معادله (۱۵) و (۱۶) می‌توان نوشت:

$$r_i = v_i dt, \quad (25)$$

$$dv_i = \frac{1}{m} (F_i^C dt + F_i^D dt + F_i^R \sqrt{dt} + F_i^e dt), \quad (26)$$

$$F_i^e = \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu \frac{dv_x}{dy} \right] = \frac{\partial}{\partial y} \left[ m \left( -\frac{dv_x}{dy} \right)^{n-1} \frac{dv_x}{dy} \right]. \quad (27)$$

الگوریتم وارلت سرعت DPD، برای ادغام معادلات حرکت استفاده می‌شود [۲۸]. برای به کارگیری شرایط مرزی، یک لایه از ذرات یخ‌زده روی دیوار در نظر گرفته و شرایط بازگشت‌پذیری اعمال شده است. بنابراین، بردارهای مکان و سرعت ذرات با استفاده از معادله‌های زیر به دست می‌آید [۲۸]:



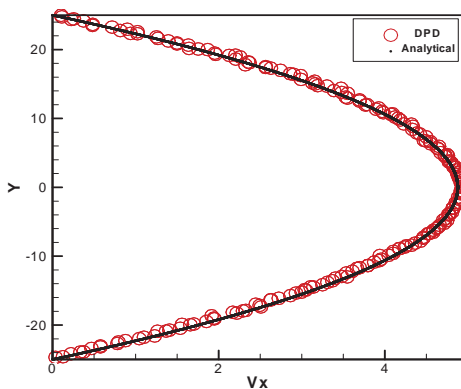
جدول ۱- پارامترهای تنظیمی جریان الکترواسموتیک.

پارامتر	شعاع برش	$a_i$	$a_{wij}$	$\gamma$	$\mu_0$
اندازه	۱	۷۵/۱۸	۵	۵/۴	$9 \times 10^{-3}$

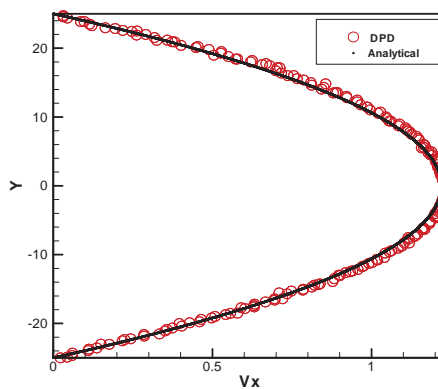
منظور از یونی کردن سیال این است که مقداری ماده یونی (در این مقاله ماده KCL) اضافه کرد تا قابلیت رسانایی سیال بیشتر شود. اندیس  $z_i$  به برخورد ذرات سیال با یکدیگر و اندیس  $w$  به برخورد ذرات سیال به دیواره مربوط است. در این تحقیق، پارامترهای مهمی مانند  $kh$ ، قدرت میدان الکتریکی و زتاپتانسیل، به عنوان سه پارامتر اصلی بررسی و بر نرخ حجمی EOF تأثیرگذار است. تغییرات این سه پارامتر در این مطالعه به دقت بررسی شده است. نتایج این تحقیق می‌تواند ملاحظات مهمی در طراحی و ساخت دستگاه‌های EOF با کارایی بالا ارائه دهد.

تأثیر سه پارامتر یادشده بر میزان دبی جریان یا به عبارتی سرعت جریان خواهد بود. به همین دلیل، پروفیل سرعت بررسی شده است. تمامی نتایج با نتایج تحلیلی مقایسه شده است. علت انتخاب مقایسه با نتایج تحلیلی، انتخاب این روش توسط

نویسندگان بسیاری مانند مراجع [۳۵، ۳۰] و سهولت در دسترس بودن است. باید توجه داشت که روش پیوسته ناوبر-استوکس از جنبه فیزیک جریان در مقیاس ریز (برخورد ذرات) کاربردی نیست. برای بررسی سرعت جریان الکترواسموتیک، در شکل ۳ نتایج در دو حالت مختلف نمایش داده شده است. پروفیل سرعت محوری برای دو میدان مختلف الکتریکی  $250 \text{ V/m}$  و  $1000 \text{ V/m}$  را با توجه به  $kh=0/82$  و پتانسیل زتا برابر  $25 \text{ mV}$  نشان می‌دهد. همان‌طور که انتظار می‌رود با افزایش قدرت میدان الکتریکی سرعت جریان هم، در نتایج عددی و هم، در نتایج تئوری بیشتر می‌شود. به طور معمول انتظار می‌رود این نتیجه حاصل شود، زیرا قدرت میدان الکتریکی بالاتر موجب به وجود آمدن نیروی قوی‌تر روی هر ذره DPD در کانال می‌شود. باید توجه داشت که اثر تجزیه شیمیایی در نظر گرفته نشده است و در حالتی که سیال بسیار یونی شود، امکان تجزیه شیمیایی وجود دارد. ولی در محدوده در نظر گرفته‌شده بر اساس مراجع [۲۰ و ۱۹] می‌توان فرضیه جریان را بدون تجزیه شیمیایی در نظر گرفت.



میدان الکتریکی  $1000 \text{ V}$



میدان الکتریکی  $250 \text{ V}$

شکل ۴- پروفیل سرعت جریان الکترواسموتیک در میدان‌های الکتریکی مختلف در  $kh=0/82$ .

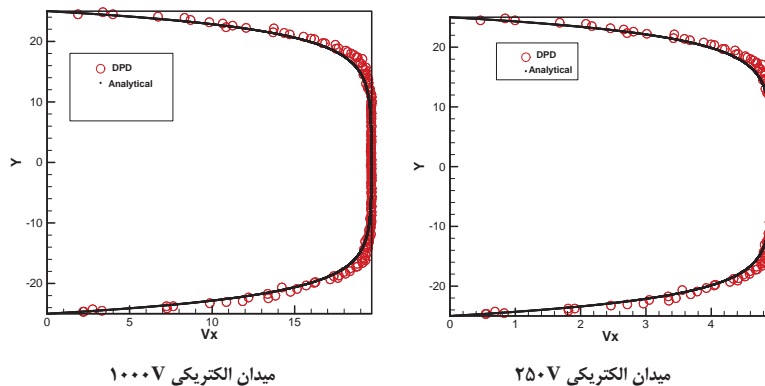
برای طراحی میکروپمپ در زتاپتانسیل‌های مختلف، نتایج در شکل ۵ مقایسه شده است. با در نظر گرفتن پارامتر  $kh$  برابر ۱۶ و ولتاژ اعمالی  $250 \text{ V}$ ، مقدار زتاپتانسیل برابر  $25$  و  $50$  میلی‌ولت در نظر گرفته شده است. زتاپتانسیل متأثر از نوع ماده دیواره میکروکانال است و با توجه به شکل، با افزایش زتاپتانسیل مقدار جریان نیز افزایش می‌یابد. علت آن است که با افزایش زتاپتانسیل، لایه دوتایی قوی‌تر شده است و در برابر میدان الکتریکی سریع‌تر واکنش نشان می‌دهد و سرعت جریان افزایش می‌یابد. توجه شود که با افزایش زتاپتانسیل دبی نیز به صورت خطی زیاد می‌شود.

در شکل ۶ تأثیر پارامتر  $kh$  نیز بررسی و اعتبارسنجی شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش  $kh$ ، نسبت

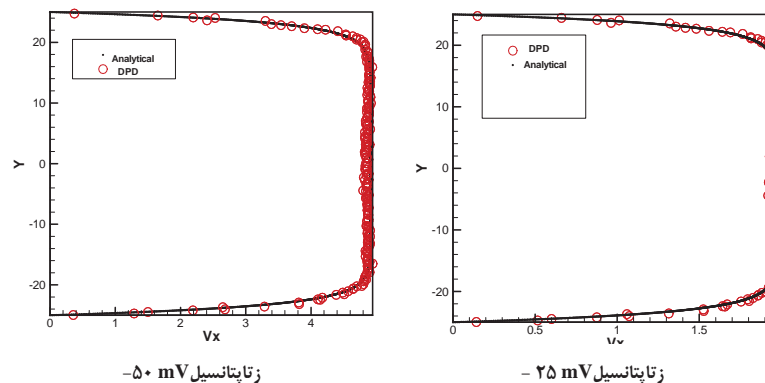
در شکل ۴ با افزایش پارامتر  $kh$  بررسی مشابهی انجام شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش پارامتر  $kh$ ، پروفیل سرعت تخت‌تر خواهد شد. علت این پدیده آن است که با افزایش پارامتر  $kh$ ، لایه الکتریکی دوتایی در طول کمتر ولی قوی‌تر عمل کرده است و حرکت جریان از همین لایه شروع خواهد شد. مابقی پروفیل به دلیل حرکت در لایه الکتریکی دوتایی جابه‌جا شده است و پروفیل سرعت تختی را سبب خواهد شد. باید توجه داشت که با افزایش ولتاژ دبی جریان به صورت تقریباً خطی در حال افزایش است. علت این تغییر در بیشتر شدن میدان الکتریکی و تمایل سیال یونی‌شده در تعقیب خطوط الکتریکی در سیال است.

تمامی نتایج نمایش داده‌شده در شکل‌های ۳ تا ۷ با نتایج تحلیلی مقایسه شده است که دقت مناسب روش یادشده را نشان می‌دهد. روش حاضر، روشی مناسب برای شبیه‌سازی انواع میکروکانال در جریان الکترواسموتیک است و می‌توان در حالات مختلف خواص جریان را بدون نیاز به ساخت اولیه طراحی شبیه‌سازی کرد.

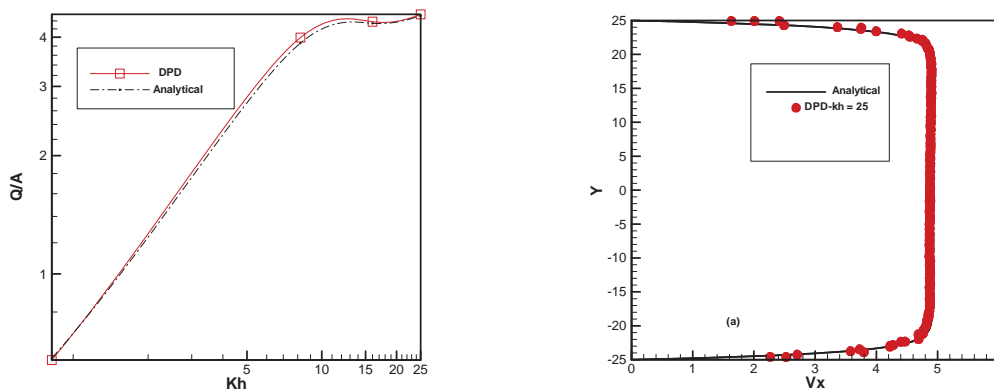
به نتایج قبل پروفیل سرعت تمایل به مسطح شدن نشان می‌دهد و مقدار سرعت جریان نیز زیاد خواهد شد. به علاوه، میزان دبی نیز در شکل ۷ تغییر کرده است که رفتاری غیرخطی را نشان می‌دهد. این نتیجه برخلاف تغییرات خطی ولتاژ و زتاپتانسیل است زیرا تغییرات یونی بودن سیال یا پارامتر ارتفاع تأثیر مستقیمی بر لایه دوتایی الکتریکی خواهد گذاشت.



شکل ۴- پروفیل سرعت جریان الکترواسموتیک در میدان‌های الکتریکی مختلف در  $kh=8/2$ .



شکل ۵- پروفیل سرعت جریان الکترواسموتیک در زتاپتانسیل‌های مختلف در  $kh=8/2$ .



شکل ۷- تغییرات دبی جریان با تغییر  $kh$  پارامتر.

شکل ۶- پروفیل سرعت جریان الکترواسموتیک در پارامتر  $kh=25$ .

- [12] Patel, K.D. and et al., "Electrokinetic pumping of Liquid Propellants for Small Satellite Microthruster Applications", *Sensors Actuators B*, No. 132, pp.461–470, 2008.
- [13] Duong-Hong, D., Wang, J.S., and Liu, G.R., "Dissipative Particle Dynamics Simulations of Electroosmotic Flow in Nano-Fluidic Devices", *Microfluid Nanofluidics*; No. 4, pp. 219–225, 2008.
- [14] Bianchi, F., Ferrigno, R., and Girault, H.H., "Finite element Simulation of Anelectroosmotic-Driven Flow Division at a T-Junction of Micro Scale Dimensions", *Anal. Chem.*, No. 72, pp.1987–1993, 2000.
- [15] Gao, Y., Wong, T.N., and Chai, J.C., "Numerical Simulation of Two-Fluidelectroosmotic Flow in Microchannels", *Int. J. Heat Mass Transf*, No. 48, pp. 5103–5111, 2005.
- [16] Shamloo, A., Madadelahi, M., and Abdorahimzadeh, S., "Three-Dimensional Numerical Simulation of A Novel Electroosmotic Micromixer", *Chem. Eng. Process Process Intensif*, No. 119, pp. 25–33, 2017.
- [17] Zimmerman, W.B., Rees, J.M., and Craven, T. J., "Rheometry of Non-Newtonian electrokinetic Flow in a Microchannel T-Junction", *Microfluid Nanofluidics*, No. 2, pp. 481–492, 2006.
- [18] Tessier, F. and Slater, G., "Control and Quenching of electroosmotic flow with End-Grafted Polymer Chains", *Macromolecules*, No. 38, pp. 6752–6754, 2005.
- [19] Boyd, J., Buick, J., and Green, S. "A Second-Order Accurate Lattice Boltzmann-Newtonian Flow Model", *J. Phys. A Math Gen.*, No. 39, pp. 14241–14247, 2006.
- [20] Tang, G.H., Ye, P.X., and Tao, W.Q., "Pressure-driven and Electroosmotic Non-Newtonian Flows Through Microporous Media via Lattice Boltzmann method", *J. Nonnewton Fluid Mech.*, No. 165, pp.1536–1542, 2010.
- [21] Hoogerbrugge, P.J. and Koelman, J., "Simulating Microscopic Hydrodynamic Phenomena with Dissipative Particle Dynamics", *Euro phys. Let.*, No. 19, pp. 155–160, 1992.
- [22] Groot, R.D. and Warren, P.B., "Dissipative Particle Dynamics: Bridging the Gap Between Atomistic and Mesoscopic Simulation", *J. Chem. Phys.*, No. 107, pp. 4423–4435, 1997.
- [23] Nikunen, P., Karttunen, M., and Vattulainen, I., "How Would You Integrate the Equations of Motion in Dissipative Particle Dynamics Simulations?," *Comput Phys. Commun.*, No.153, pp. 407–423, 2003.
- [24] Fabrizio, V., The REM-IR Camera: High Quality Nearinfrared Imaging with a Small Robotic Telescope Proc, SPIE4841, pp. 627–38, 2002.
- [25] Yuan, S., "Heat Transfer in Very Narrow Channels of Low-Temperature Devices Used in Fluid Management Of He II In Space", *Cryogenics*, No. 32, pp. 473–8, 1992.
- [26] Zhang, X., "Pumping Capacity and Reliability Of Cryogenic Micro-Pump For Micro-Satellite Applications", *Journal of Micromechanics and Microengineering*, 2004, pp. 14.10, 1421.
- [27] Rezaei, M., Molecular Dynamics Simulation of Electrokinetic Phenomena in Electroosmotic and

## جمع بندی

در این بررسی، جریان الکترواسموتیک با روش دینامیک ذرات اتلافی در میکروکانال به عنوان میکروپمپ در رسانش سیال در کاربردهای هوافضایی شبیه‌سازی شده است. پارامترهای متأثر، مانند تأثیر ولتاژ، زتاپتانسیل و پارامتر kh بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که اثر افزایش ولتاژ یا زتاپتانسیل بر دبی جریان به صورت خطی است، در حالی که اثر تغییر غلظت یا عرض کانال (پارامتر kh) غیر خطی است. تمامی نتایج با نتایج تحلیلی مقایسه و دقت مناسب نشان داده شده است. در ادامه، نتایج به هندسه پیچیده نازل توسعه یافته و بررسی شده است. روش حاضر به عنوان روشی توانمند در بررسی ریزپمپ‌های الکترواسموتیک کاربردی است.

## مراجع

- [1] Seng, T., "Electrokinetic Flow In A Ph-Regulated Cylindrical Nanochannel Containing Multiple Ionicspecies", *Microfluidics and Nanofluidics*, No. 15, pp. 847-857, 2013.
- [2] Marconi, U., Monteferrante, M., and Melchionna, S., "Electro-Osmoticflow In Coated Nanocapillaries: Atheoretical Investigation", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, No. 16, pp. 25473–25482, 2014.
- [3] De, S., Bhattacharyya, S., and Hardt, S., "Electroosmotic Flow in a Slit Nanochannel with Superhydrophobic Walls", *Microfluid Nanofluidics*, No. 19, pp. 1465–1476, 2015.
- [4] Sadeghi, M., Saidi, M.H., and Sadeghi, A., "Electroosmotic Flow and Ionic Conductance in a Ph-Regulated Rectangular Nanochannel", *Phys. Fluid*, No. 29, pp. 62002, 2017.
- [5] Wang, X. and et al., "Electroosmotic Pumps and Their Applications in Microfluidic Systems", *Microfluid Nanofluidics*, No. 6, pp. 145–162, 2009.
- [6] Cao, Z. and et al., "Microchannel Plate Electro-Osmotic pump", *Microfluid Nanofluidics*; No. 13, pp. 279–288, 2012.
- [7] Gao, M. and Gui, L., "A Handy Liquid Metal Based Electroosmotic Flow Pump", *Lab on a Chip*; No. 14, 1866–1872, 2014.
- [8] Bonome, E.L., Cecconi, F., and Chinappi, M., "Electroosmotic Flow Through And Hemolysin Nanopore", *Microfluid Nanofluidics*; No. 21, pp. 96, 2017.
- [9] Dasgupta, P.K. and Liu, S., "Electroosmosis: A Reliable Fluid Propulsion System For Flow Injection Analysis", *hem.*, Vol. 66, pp.1792–1798, 1994.
- [10] Kirby, B.J., Sheppard, T.J., and Hasselbrink, F., "Voltage-Addressable on/off Microvalves for High-Pressure Microchip Separations", *J. Chromatogr A.*, No. 979, pp. 147–154, 2002.
- [11] Jiang, L.N. and et al., "Closed-Loop Electroosmotic microchannel Cooling System For VLSI Circuits", *IEEE Trans. Components Packag Technol.*, No. 25, pp.347–355, 2002.



- (DPD): Methodology and Experimental Validation", *MolSimul*, Vol. 34, No. 3, pp. 243–250, 2008.
- [33] Zhou, Y., Long, X., and Zeng, Q., "Effect of the Angular Potential on the Temperature Control in Dissipative Particle Dynamics Simulations. *Molsimul*", Vol. 38, No. 12, pp. 961–969, 2012.
- [34] Mukhopadhyay, S. and Abraham, J., "A Particle-Based Multiscale Model for Submicron Fluid Flows", *Phys. Fluids*, No. 21, pp. 027102, 2009.
- [35] Duong-Hong, D., Phan-Thien, N., and Fan, X., "An Implementation Of Noslipboundary Conditions in DPD", *Comput. Mech.*, No. 35, pp. 24–29, 2004.
- [36] Ludlow, J.D., Study of a Silicon Micropump for Use in Circulating Coolant in a Cryogenic Refrigeration System. Diss., Boston University, 2003.
- [37] Laser, D.J. and Santiago, J.G., "A Review of Micropumps", *Journal of Micromechanics and Microengineering*, Vol. 14, No. 6, 2004.
- Electrophoretic Flows in Nanochannels, Isfahan University of Technology, 2013.
- [28] Zhao, C. and et al., "Analysis of Electroosmoticflow of Power-Law Fluids in a Slit Microchannel", *J. Colloid Interface Sci.*, No. 326, pp. 503–510, 2008.
- [29] Zakeri, R. and Lee, E.S., Simulation of Nano Polymer Chain Sensor in Electroosmotic Flow Using Dissipative Particle Dynamics (DPD) Method. ASME, International Mechanical Engineering Congress and Exposition, Montreal, Quebec, Canada, 2014.
- [30] Karniadakis, G., Beskok, A., and Aluru, N., *Microflows a Nanoflows: Fundamentals and Simulation*, Springer, 2005.
- [31] Pal, S. and et al., "Symmetry Boundary Condition In Dissipative Particle Dynamics", *Journal of Computational Physics*, No. 292, pp. 287-299, 2015.
- [32] Chatterjee, A. and Wu, L., "Predicting Rheology of suspensions of Spherical and Non-Spherical Particles Using Dissipative Particle Dynamics