بررسی عددی جریان دوفازی در میکروکانال مارپیچ جهت جداسازی ایزوتوپی

INC29-1096

یونس امینی[۱]، ولی‌الله غضنفری[۱]، محمدمهدی شادمان[۱]، امین حسنوند[۲]

۱- پژوهشکده چرخه سوخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی، تهران، ایران
۲- گروه مهندسی پلیمر، دانشکده فنی و مهندسی دانشگاه لرستان، خرم‌آباد، ایران

چکیده:

میکرو سیال، علم و تکنولوژی است که سیال را در حجم $۱۰^{-۹}$ تا $۱۰^{-۱۸}$ لیتر با استفاده از کانال‌هایی با ابعادی در مقیاس میکرو، موردبررسی قرار می‌دهد. از مهم‌ترین کاربردهای این تکنولوژی، تجزیه و تحلیل جریان سیال است. فرایندهای جداسازی در دستگاه‌های میکروفلوئیدیکی در دو دهه گذشته موردتوجه فراوانی قرار گرفته است. در بین فرایندهای جداسازی مختلف، استخراج مایع-مایع به‌طور ویژه از مزایایی چون مسافت نفوذ مولکولی پایین و سطح ویژه فصل مشترک بالا که منجر به انتقال جرم مؤثری در دستگاه‌های میکروفلوئیدیکی می‌شود، برخوردار است. در این پژوهش، شبیه‌سازی استخراج مایع-مایع و تکنولوژی میکروفلویدیک به‌عنوان روشی نوین در هم ادغام شده‌اند. جهت بررسی انتقال جرم در میکروکانال ابتدا باید هیدرودینامیک بررسی شود و الگوی جریان به دست آید. در این پژوهش با هدف ارزیابی امکان انجام شبیه‌سازی استخراج یون کلسیم، در سیستم میکروفلوئیدیک، الگوی جریان در میکروکانال مارپیچ به دست آورده شده است. همچنین توزیع‌های غلظت‌ها در میکرو کانال بر اساس الگوی جریان رسم شده است.

کلیدواژه‌ها: میکروکانال مارپیچ، دینامیک سیالات محاسباتی، استخراج مایع-مایع، جریان دوفازی

Numerical investigation of two-phase flow in serpentine microchannel for isotope separation

Younes Amini[1,*], V. Ghazanfari[1], Mohammad Mahdi Shadman[1], Amin hassanvand[2]

[1] Nuclear Fuel Cycle Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran, Iran
[2] Department of Polymer Engineering, Faculty of Engineering, Lorestan University, Khorramabad, Iran

Abstract:

Microfluidic is a science and technology that examines fluid in the volume of 10^{-9} to 10^{-18} liters using channels with dimensions on a micro scale. One of the most important applications of this technology is fluid flow analysis. Separation processes in microfluidic devices have received a lot of attention in the last two decades. Among different separation processes, liquid-liquid extraction especially has advantages such as low molecular penetration distance and high interface surface area, which leads to effective mass transfer in microfluidic devices. In this research, simulation of liquid-liquid extraction and microfluidic technology has been integrated as a new method. In order to investigate the mass transfer in the microchannel, hydrodynamics must first be investigated and the flow pattern obtained. In this research, with the aim of evaluating the possibility of simulation of calcium ion extraction, in the microfluidic system, the flow pattern in the spiral microchannel has been obtained. Also, the concentration distributions in the microchannel are drawn based on the flow pattern.

Keywords: serpentine microchannel, Computational Fluid Dynamics, Liquid-Liquid Extraction, Two-phase Flow

۱.مقدمه

یکی از فناوری‌های پرکاربرد و جدید که در دنیا برای انجام آزمایش‌های دقیق و حفاظت‌شده بر روی سیالات در مقیاس های میکرو استفاده می‌شود، فناوری میکروفلوئیدیک است. میکروفلوئیدیک علمی است که به مطالعه جریان سیال در کانال‌هایی به ابعاد میکرومتر جایی که نیروهای کشش سطحی و ویسکوزیته بر اثرات جاذبه غلبه می‌کنند، می‌پردازد . از این تکنولوژی برای انجام عملیات مختلف بر روی سیالات و آنالیز آن‌ها استفاده می‌شود. میکروفلوییدیک کاربردهای فراوانی مثل امولسیون، کپسوله کردن دارو، علم پزشکی، بیوتکنولوژی، سیستم‌های میکروالکترومکانیک، سنتز، کریستالیزاسیون، واکنش‌های شیمیایی، محصولات آرایشی بهداشتی و مواد غذایی دارد[1-4].

از مزایای ابزارهای میکروفلویدیک می‌توان به موارد زیر اشاره کرد:

- توانایی انجام فرایندها در حجم نمونه کم
- کاهش دخالت نیروی انسانی و کاهش میزان خطای انسانی
- تکرارپذیری پالاتر
- پاسخ سریع و هزینه کم
- کاهش مصرف انرژی
- بالا بودن میزان انتقال حرارت

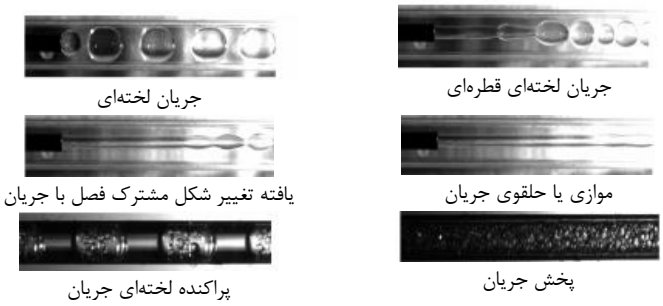
میکروفلویدیک هم از قابلیت کوچک بودن ابعاد و هم از خواص میکروکانال‌ها مانند ایجاد جریان آرام به‌طور هم‌زمان استفاده می‌کند، با توجه به ایجاد جریان آرام، استفاده برای جریان‌های لایه‌ای امکان‌پذیر می‌شود، در ادامه به الگوهای جریان داخل میکروکانال اشاره می‌شود.

رفتار جریانات در میکروکانال در جریان چند فازی به نیروهای مختلفی مانند نیروهای لزج، نیروی اینرسی، گرانش، کشش سطحی، فشار و غیره بستگی دارد. اعداد بی‌بعد بیان‌کننده نسبت اثرهای فیزیکی بوده که راهی برای ساده‌سازی مسائل پیچیده است.

الگوهای جریان در میکروکانال‌ها پارامتر تعیین‌کننده در میزان انتقال جرم است؛ بعلاوه در حین استفاده از جریان‌های موازی برای تماس دو فاز، تعیین شرایطی که جداسازی فازهای غیرقابل امتزاج در میکروکانال انجام شود ضروری به نظر می‌رسد. با تشکیل رژیم‌های مختلف می‌توان اثرات نیروی ویسکوز، کشش سطحی و اینرسی را موردبررسی قرار داد. در بررسی جریان‌های دوفازی نیروهای کشش بین سطحی ($\sim\gamma/d$) به دلیل وابستگی به قطر کانال مؤثرترین نیروهای تعیین‌کننده الگوهای جریان هستند. از طرفی نیروی اینرسی ($\sim\rho u^2$) نیز باوجود داشتن ترم سرعت با توان دوم، الگوی جریان را تحت تأثیر قرار می‌دهد ولی جاذبه ($\sim\rho gH$) معمولاً در مقیاس میکرو صرف‌نظر می‌شود؛ بنابراین رقابت بین نیروهای تأثیرگذار بر الگوی جریان به‌وسیله اعداد بی‌بعد مویینگی، رینولدز و وبر قابل‌تعیین است [5].

رایج‌ترین الگوهای جریان فازها در میکروکانال‌ها بسته به هندسه‌ی میکروکانال و سرعت جریان و ...، شش نوع رژیم جریان‌های مختلفی قابل‌مشاهده است. جریان لخته‌ای[1]، جریان لخته‌ای قطره‌ای[2]، جریان با فصل مشترک تغییر شکل یافته[3]، جریان حلقوی یا موازی[4]، جریان لخته‌ای پراکنده[5] و جریان پخش که در شکل ۱ نمایش داده شده است.

[1] Slug flow
[2] Slug-drop flow
[3] Deformed interface flow
[4] Annular flow
[5] Slug-dispersed flow



شکل۱- الگوهای جریان در میکروکانال‌ها [۶]

جریان موازی در دبی‌های بالا و در داخل میکروکانال‌های بدون ساختار داخلی مشاهده می‌شود.

در میکروکانال‌ها نیروی کشش سطحی و ویسکوز بر نیروی جاذبه غلبه کرده و دو مایع می‌توانند صرف‌نظر از دانسیته-هایشان در کنار یکدیگر حرکت کنند [6].

هیبارا و همکاران [7] از آنالیز بی بعد برای تعیین وابستگی نیروهای موجود به ابعاد کانال و خصوصیات سیال استفاده کردند. این آنالیز فصل مشترک موازی و پایدار مایع- مایع در میکروکانال‌هایی با ابعاد چند صد میکرومتر را تائید می‌کند.

در مطالعه‌ی کیم و همکاران [۸] فرایند استخراج کمپلکس AL^{3+}-DHAB از آب به ۱-بوتانول با الگوی جریان موازی در یک میکروکانال پلیمری با عرض ۲۰۰ میکرومتر و عمق ۱۰ میکرومتر انجام شده است. ازآنجایی‌که این کمپلکس در آب غیر فلوئورسنت است ولی در روغن فلوئورسنت قوی است؛ بنابراین مانیتور کردن مکانی استخراج به‌وسیله طیف‌سنجی فلورسانس امکان‌پذیر بوده به‌گونه‌ای که شدت فلورسانس کمپلکس در فاز بوتانول در جهت جریان و عرض کانال قابل‌اندازه‌گیری است.

در پژوهشی دیگر توسط زنیدارسیک پلازل و همکاران[۹] نتایج به‌دست‌آمده با داده‌های تجربی مقایسه و دقت قابل قبولی داشت. در این مطالعه، پروژسترون و ۱۱- الفا هیدروکسی پروژسترون به‌صورت پیوسته از آب به‌وسیله اتیل استات در یک میکرو راکتور شیشه‌ای به ابعاد ۲۲۰ میکرومتر عرض، ۵۰ میکرومتر عمق و ۳۳۲ میلی‌متر طول استخراج شده است. در مدل ارائه‌شده جابه‌جایی در جهت جریان و نفوذ در همه جهت‌ها را در نظر گرفته است .گسسته‌سازی به روش اختلاف محدود انجام شده است. الگوی جریان سه‌بعدی، پروفایل‌های سرعت دو فاز و هم‌چنین پروفایل غلظت جزء استخراج شونده درون دو فاز محاسبه شده که هم‌خوانی خوبی با داده‌های تجربی داشتند.

روســان و همکاران یک میکروکانال حلزونی دیفرانســیلی طراحی کردند. که با اســتفاده از آن در قطرهای هیدرولیکی متفاوت کنترل پارامتر گردابه دین را موردبررسی قرار دادند و جداسازی میکروذرات ۳ و ۱۰ µm در نرخ جریان ۳۰۰۰ µL/min همراه با رینولدز ۱۵۵ را گزارش کردند [10].

در این پژوهش هدف شبیه‌سازی عددی (دینامیک سیالات محاسباتی[1] به روش حجم محدود[2]) هیدرودینامیک جریان دوفازی و به دست آوردن الگوی جریان در میکروکانال مارپیچی است، برای این منظور سیستم مایع-مایع شامل فاز آبی و فاز آلی (کلروفرم) و هندسه مطابق کار آزمایشگاهی اسدی و همکاران [11] انتخاب شد، و نتایج شبیه‌سازی با نتایج کار اسدی و همکاران اعتبار سنجی شد. این شبیه‌سازی به‌منظور صرفه‌جویی در وقت و هزینه به‌صورت دوبعدی انجام گردید، جریان موردبررسی به‌صورت تراکم ناپذیر، پایا، نیوتنی، و آرام و تمام دیواره‌ها به‌صورت ثابت و با فرض عدم لغزش در نظر گرفته شد.

[1] Computational fluid dynamics
[2] Finite volume method

۲. معادلات مومنتوم و پیوستگی

برای شبیه‌سازی، با توجه به رژیم جریان، باید معادلات بقا جرم، بقا مومنتوم با استفاده از شرایط مرزی مناسب برای جریان حل شوند.

بقای جرم و معادله پیوستگی[12]:

بر اساس تئوری انتقال رینولدز برای یک حجم معیار، رابطه‌ی زیر برای بقای جرم به دست می‌آید:

$$\int_{cv} \frac{\partial \rho}{\partial t} dv + \int_{cs} \rho \vec{v}.\vec{n}.dA = 0 \quad (۱)$$

در صورت داشتن ورودی و خروجی مناسب و منظم معادله‌ی بالا به شکل زیر می‌توان نوشت:

$$\int_{cv} \frac{\partial \rho}{\partial t} dv = \sum_{in} m^{\cdot} - \sum_{out} m^{\cdot} \quad (۲)$$

معادله بالا بیان می‌کند که نرخ خالص تغییر جرم در حجم معیار با تفاوت نرخ جریان‌های ورودی و خروجی آن برابر است.

با ساده‌سازی معادله‌ی (۱) و نوشتن موازنه جرم حول المان کوچکی از سیال معادله دیفرانسیل کلی برای بقای جرم به‌صورت زیر حاصل می‌شود که به معادله پیوستگی شناخته می‌شود:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla}.(\rho \vec{v}) = 0 \quad (۳)$$

و با توجه به این‌که دانسیته سیال با زمان تغییر نمی‌کند معادله به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$\vec{\nabla}.(\rho \vec{v}) = 0 \quad (۴)$$

معادله‌ی مومنتوم[12]:

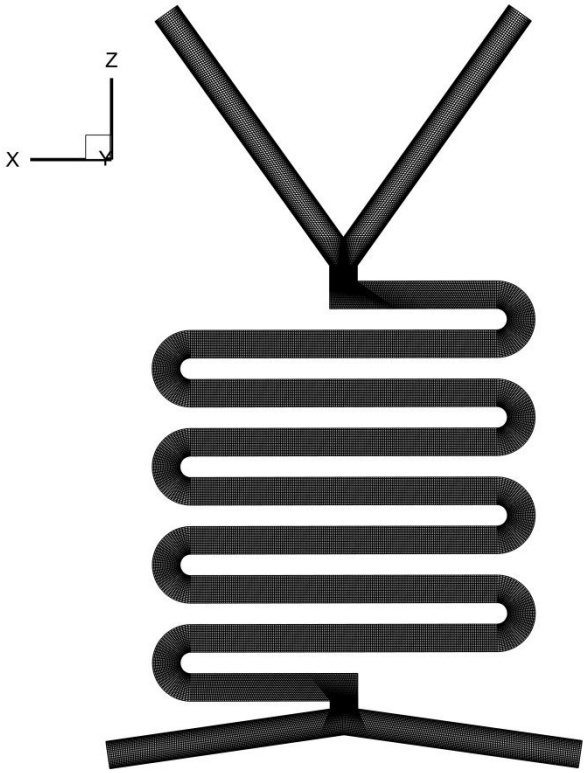
معادله‌ی مومنتوم در سرتاسر دامنه حل می‌شود و میدان سرعت حاصل به‌صورت مشترک در اختیار هر دو فاز قرار می‌گیرد. با نوشتن موازنه مومنتوم بر اساس تئوری رینولدز، معادله ناویر استوکس کلی به‌صورت زیر به دست می‌آید.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{U}) + \nabla.(\rho \vec{U}\vec{U}) = -\nabla P + \nabla.[\mu(\nabla \vec{U} + \nabla \vec{U}^T)] + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (۵)$$

بدین ترتیب برای به دست آوردن توزیع دقیق فشار و سرعت باید این معادلات برای هر فاز به‌صورت جداگانه نوشته و حل شوند.

۳. هندسه مدل

در پژوهش حاضر از میکروکانال مارپیچ استفاده شده است. عرض کانال‌ها ۵۰۰ μm و طول ۱۰۰mm است. دو سیال امتزاج‌ناپذیر به داخل میکروکانال تزریق می‌شوند. محاسبات به دلیل کاهش هزینه و زمان انجام در دو بعد انجام گردید.



(الف) (ب)

شکل ۱ هندسه و شبکه‌بندی مدل

۴. خواص سیالات استفاده‌شده

در شبیه‌سازی عددی میکروکانال از دو سیال آب و کلروفرم استفاده شده است که مشخصات سیالات بکار برده شده و همچنین شرایط عملیاتی استخراج در جدول ۱ آورده شده است:

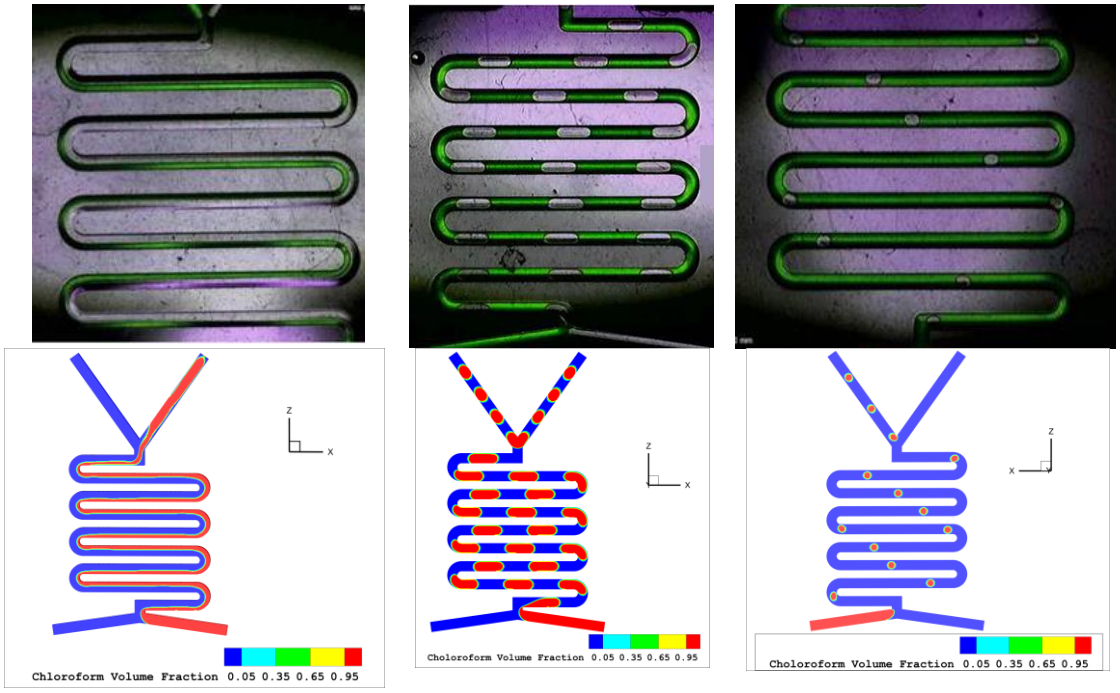
جدول ۱- مشخصات هندسی میکروکانال و سیالات بکار برده شده

مشخصات هندسی		طول (cm)	۱۰
		عرض (µm)	۵۰۰
مشخصات سیالات استفاده شده	آب	چگالی ($kg.m^{-3}$)	۹۹۸/۲
		ویسکوزیته cP	۱
	کلروفرم	چگالی ($kg.m^{-3}$)	۱۴۸۹
		ویسکوزیته cP	۰/۵۸
	کشش سطحی بین آب و کلروفرم N/m		۰/۰۳۱۵

شبیه‌سازی در دمای عملیاتی ۲۹۳ کلوین و فشار عملیاتی ۱ اتمسفر انجام شد. جهت شبیه‌سازی از نرم‌افزار فلوئنت (FLUENT) نسخه 2022R2 استفاده گردید.

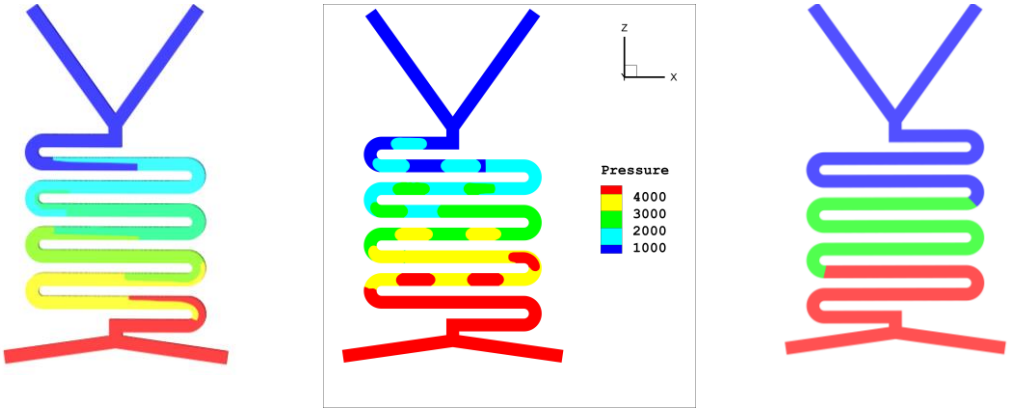
۵. بحث و تفسیر نتایج

جهت اعتبار سنجی از مقایسه نتایج با داده‌های تجربی اسدی و همکاران استفاده شده است. در شکل ۲ توزیع کسر حجمی فاز الی آورده شده است. همان‌طور که در مقدمه بیان گردید، سه نوع جریان مهم در جریان‌های دوفازی وجود دارد: جریان قطره‌ای، لخته‌ای و موازی. با توجه به اینکه سطح انتقال جرم در جریان قطره‌ای بیشتر از دو حالت دیگر است، انتقال جرم در این حالت بیشتر است. ولی با توجه به اینکه جداسازی جریان‌های خروجی یک مرحله به فرایند اضافه می‌کند، تلاش بر این است که از جریان موازی استفاده شود. در جریان موازی در خروج میکروکانال دو جریان از هم جدا شده‌اند و یکی از خصوصیاتی که از این جریان بیشتر استفاده می‌شود همین است. در شکل ۳ پروفایل‌های فشار در میکروکانال نشان داده شده است. در شکل ۴ نتایج شبیه‌سازی الگوی جریان آورده شده است. همان‌طور که از شکل پیداست در ۶۳ حالت از دبی‌های فاز آبی و آلی از ۱۰ تا ۱۰۰۰ میکرولیتر بر دقیقه این نمودار رسم شده است. جریان موازی در دبی‌های فاز آلی بالا اتفاق افتاده است. و این نشان‌دهنده این است که اگر سیستم حالت موازی باشد باید در دبی‌های بالای فاز آلی کار کرد. جریان قطره‌ای در دبی‌های بالای فاز آبی و دبی‌های پایین فاز آلی اتفاق می‌افتد. همچنین جریان لخته‌ای در دبی‌های به مراتب یکسانی از هر دو فاز اتفاق می‌افتد. با استفاده از این الگوی جریان و میکروکانال موردنظر، می‌توان مباحث انتقال جرم را در فاز شبیه‌سازی و تجربی بررسی کرد.



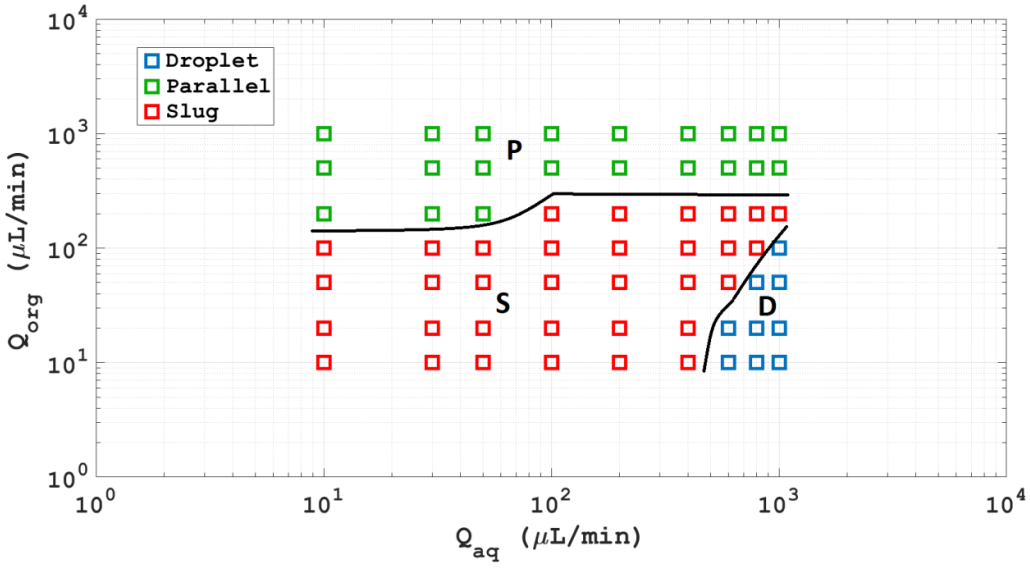
الف ب ج

شکل ۲ نتایج شبیه‌سازی عددی و اعتبار سنجی با نتایج اسدی و همکاران الف) جریان قطره‌ای ب) جریان لخته‌ای ج) جریان موازی



الف ب ج

شکل ۳ تغییرات فشار در طول میکروکانال الف) جریان قطره‌ای ب) جریان لخته‌ای ج) جریان موازی



شکل ۴ الگوی جریان در میکرو کانال مارپیچی

۶. نتیجه‌گیری

شبیه‌سازی مسائل پیچیده از چندین جنبه بسیار موردتوجه است، که می‌توان به موارد صرفه‌جویی در وقت و هزینه و ایجاد دید بازتر در مسائل تجربی اشاره نمود با هدف به دست آوردن الگوی جریان در میکرو کانال، انجام شبیه‌سازی سیستم میکروفلوئیدیک، ابتدا کار آزمایشگاهی اسدی و همکاران جهت امکان‌سنجی و تعیین میزان خطای شبیه‌سازی نسبت به کار آزمایشگاهی شبیه‌سازی گردید. نتایج شبیه‌سازی با نتایج آزمایشگاهی اعتبار سنجی شد. با توجه به نزدیک بودن نتیجه‌ی شبیه‌سازی به نتایج آزمایشگاهی، مدل حل ارائه‌شده، مناسب است. درنهایت یک نقشه جریان جهت میکروکانال مارپیچی به دست آمد که می‌توان از آن در جداسازی ایزوتوپی بهره برد.

فهرست علائم

سطح، m^2	A
سطح ویژه، m^2/ m^3	a
عدد موئینه، $\mu_L U_B/\sigma$	Ca
ضریب نفوذ دوجزئی، m^2/ s	D_{AB}
قطر، mm	d
نیروی کشش سطحی، n/ m^3	f_σ
شتاب جاذبه، m/s^2	g
انرژی جنبشی توربولنس، m^2/s^2	k
جرم مولکولی، kg/kg-mole	M
بردار فلاکس انتقال جرم، kg/m^2s	**n**
فشار، n/m^2	p
عدد رینولدز، $\rho uD/\mu$	Re
زمان، s	t
دما، K	T
سرعت، m/s	u
کسر مولی	x
کسر حجمی	α
ویسکوزیته سینماتیک، m^2/ s	ν
ویسکوزیته دینامیک، kg/m s	μ
چگالی، kg/m^3	ρ
کشش سطحی، n/m	σ

۷.مراجع

1. Zhao, C.X., et al., Effects of fluid–fluid interfacial elasticity on droplet formation in microfluidic devices. AIChE journal, 2011. **57**(7): p. 1669-1677.
2. Wörner, M., Numerical modeling of multiphase flows in microfluidics and micro process engineering: a review of methods and applications. Microfluidics and nanofluidics, 2012. **12**(6): p. 841-886.
3. Plouffe, P., et al., Liquid–liquid mass transfer in a serpentine micro-reactor using various solvents. Chemical Engineering Journal, 2016. **285**: p. 605-61.٥
4. Plouffe, P., D.M. Roberge, and A. Macchi, Liquid–liquid flow regimes and mass transfer in various micro-reactors. Chemical Engineering Journal, 2016. **300**: p. 9-19.
5. Anandan, P., Two phase microfluidics: new trend in model identification. 2013.
6. N. Kashid, M., A. Renken, and L. Kiwi-Minsker, Influence of flow regime on mass transfer in different types of microchannels. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2011. **50**(11): p. 6906-6914.
7. Hibara, A., et al., Integrated multilayer flow system on a microchip. Analytical sciences, 2001. **17**(1): p. 89-93.
8. Kim, H.-B., et al., Spatially-resolved fluorescence spectroscopic study on liquid/liquid extraction processes in polymer microchannels. Analytical sciences, 2000. **16**(8): p. 871-876.
9. Žnidaršič-Plazl, P. and I. Plazl, Steroid extraction in a microchannel system—mathematical modelling and experiments. Lab on a Chip, 2007. **7**(7): p. 883-889.
10. Hazama, R., et al., Challenge on Ca-48 enrichment for candles double beta decay experiment. arXiv preprint arXiv:0710.3840, 2007.
11. Asadi-Saghandi, Hamid, et al. "Dimensionless analysis on liquid–liquid two-phase flow patterns in a numbered-up microfluidic device." Chemical Engineering Journal 429 (2022): 132428.
12. Bird, R.B., Transport phenomena. Appl. Mech. Rev., 2002. **55**(1): p. R1-R4.