

DARALAN GENİŞLEYEN KANALLARDA ÇOK FAZLI VISKOELASTİK AKIŞ SİSTEMLERİNİN SAYISAL MODELLENMESİ

Daulet Izbassarov* ve Metin
Muradoğlu†
Koç Üniversitesi, İstanbul

ÖZET

Bu çalışmada daralan/genişleyen kanallardaki basınç itkili iki-fazlı viskoelastik akışların arayüz izleme/sonlu farklar yöntemi kullanılarak sayısal olarak incelemesi yapılmıştır. Bu akışlara mikro ve biyo akış uygulamalarında sıkça rastlanır. Üç farklı akış türü incelenmiştir: Newtonyen ortamdaki viskoelastik damlacık (VN), viskoelastik ortamdaki Newtonyen damlacık (NV), ve viskoelastik ortamdaki başka bir viskoelastik damlacık (VV). Viskoelastik akışkan modeli olarak FENE-CR (Finite Extendable Non-linear Elastic – Chilcott and Rallison) kullanılmıştır. Damlacık dinamiğini incelemek için göreceli damlacık boyutu, kapilari sayısı (Ca), viskozite oranı (θ), Weissenberg sayısı (We) ve Reynold sayısını (Re) içeren geniş bir parametre uzayında yoğun bir sayısal çalışma yürütülmüştür. Zamanda FENE-CR modelini integre etmek için eksplisit yarı analitik şema kullanılırken, yüksek Weissenberg sayısında ortaya çıkan sayısal problemleri gidermek için "log-conformation" metodu kullanılmıştır. Bu çalışma göstermiştir ki; ani daralma ve genişleme içeren kılcal tüplerde iki-fazlı viskoelastik sistemler çok zengin dinamiklere sahiptir. Buna ek olarak mikro kanallarda damlacık deformasyonu büyük oranda Ca ve Re'ye bağımlılık göstermektedir. Ayrıca artan θ değeri ile birlikte viskoelastisite damlacık şekil değiştirmesinde önemli bir role sahip olmaya başlamaktadır. Bu özelliklerle mikro/biyo akış uygulamalarında sıklıkla karşılaşılmaktadır. Dolayısıyla bu çalışmanın akışların temel fiziğinin anlaşılmasına ışık tutması ve daha iyi mikro akış aletlerinin tasarlanmasına yardımcı olması beklenmektedir.

GİRİŞ

Çok-fazlı mikro akış uygulamaları kimya mühendisliği [Hessel vd., 2004], "lab-on-a-chip" [Stone vd., 2004], biyoloji [Gomez, 2008; Tasoglu vd., 2010], ve tıp [Saliterman, 2006] gibi çok geniş kullanım alanlarından dolayı popülerliğini hızlı bir şekilde arttırmıştır. Çok sıklıkla bu uygulamalar makro molekül içeren ve Newtonyen olmayan kompleks akışkanların akışlarını da içermektedir. Dolayısıyla, ilgili fiziğin çok-fazlı sistemlerde damlacık dinamiğinin fiziğini anlaşılması çok önemlidir.

*Araştırma görevlisi, Makina Müh. Böl., E-posta: dizbassarov@ku.edu.tr

†Doç. Dr., Makina Müh. Böl., E-posta: mmuradoglu@ku.edu.tr

Hareketli ve sürekli şekil değiştiren faz ara yüzlerinin bulunması çok fazlı akışlarının sayısal modellenmesini zorlaştırmaktadır. Buna ilave olarak özellikle yüksek Weissenberg sayılarında akış ve viskoelastik zaman ölçekleri arasında oluşan büyük fark sebebi ile viskoelastik çok fazlı sistemlerin modellenmesi daha da zordur. Bu nedenle viskoelastik model denklemlerin akış denklemleri ile birlikte çözülebilmesi için farklı kararlılaştırma yöntemleri kullanılmıştır [Afonso vd., 2012; Chen vd., 2013; Fattal ve Kupferman, 2005; Sahin , 2013; Sarkar ve Schowalter, 2000]. Sarkar ve Schowalter [2000] üssel zaman varyasyonunun ekspilisit olarak sağlandığı yarı analitik yaklaşım önermiştir. Yakın zamanda Chen vd. [2013] viskoelastik akışların benzetiminde kullanılan farklı ve güncel kararlılaştırma yaklaşımlarını karşılaştırmıştır. Buna göre "log-conformation" yöntemi (log conformation method (LCM)) ve "square-root-conformation representation" gösterilimi (SRCR) yüksek Weissenberg sayılarında kararlı ve LCM SRCR'ye göre daha hassas olduğu gösterilmiştir. Yakın zamanda "log-conformation" yöntemi kullanılarak serbest yüzey akışları çalışılmıştır [Tome vd., 2012; Choi ve Hulsen, 2011].

Daraltılmış geometride tek-fazlı viskoelastik akışların yaygın olarak çalışmasına karşın çok-fazlı akışların modellenmesi az ilgi görmüştür. Buna karşılık homojen kayma ve genişlemeli akışlardaki damlacık şekil değiştirmesi ile ilgili çok sayıda çalışma yapılmıştır [Ramaswamy ve Leal, 1999]. Bu çalışmada damlacık sıvısının viskoelastisitenin şekil değiştirmesini azalttığı buna karşın ortamdaki viskoelastisitenin şekil değiştirmesini arttırdığı rapor edilmiştir. Zhou vd. [2008] tarafından eksen simetrik konik geometride yapılan yeni bir sayısal çalışmada ise daha kompleks bir resim ortaya konmuştur. Bunda göre Weissenberg sayısı, kapilari sayısı ve damlacık-ortam viskozite oranına bağlı olarak damlacık deformasyonun arttıp veya azalabileceği görülmüştür. Genişleyen/daralan geometrilerdeki damlacık dinamiğini anlamak için eksen simetrik [Zhou vd., 2007] ve düzlemsel damlacık şekil değiştirme [Chung vd., 2009] üzerinde birçok çalışma yapılmıştır. Ancak bütün bu çalışmalarda damlacık üzerindeki atalet etkileri ihmal edilmiştir. Atalet etkilerinin mikro akış olgulara etki etmeyeceği yönündeki genel kanaata rağmen yeni yapılan bir çalışmada atalet kuvvetlerinin akış üzerinde önemli etkilere sebep olabileceği gösterilmiştir [Di Carlo, 2009]. Bu çalışmada 5:1:5 eksen simetrik daralan/genişleyen bir kanalda damlacık deformasyonu ve dinamiği incelenmiştir. Bu amaçla çok sayıda doğrudan sayısal simulasyon yapılarak görelî damlacık boyutunun etkileri, kapilari sayısı (Ca), viskozite oranı (θ), Weissenberg sayısı (We) ve Reynolds sayısının (Re) etkileri araştırılmıştır.

YÖNTEM

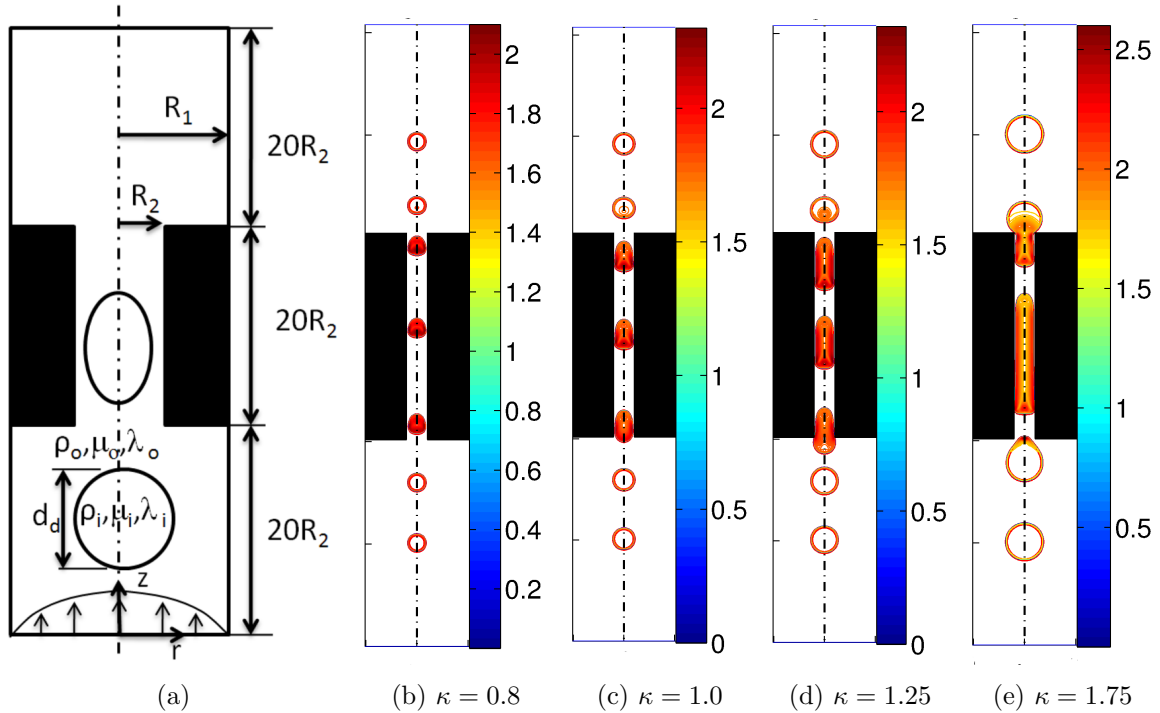
Bu bölümde bünye denklemleri sonlu farklar/ara yüz izleme metodu bağlamında anlatılmış ve sayısal yöntemler kısaca açıklanmıştır. Buradaki vurgu sayısal yöntemdeki yeni içerikler üzerinde olmuştur, ve ara yüz izleme metodunun ayrıntıları için kaynaklara atıfta bulunmuştur. Akışın sıkıştırılmaz olduğu ve tüpün eksene göre simetrik olduğu düşünülmüştür. Unverdi ve Tryggvason [1992] takip edilerek tüm sayısal tanım bölgesi için tek bir bünye denklem seti yazılabilmektedir. Bu denklem setinde yoğunluk, viskozite, ve gevşeme zamanı gibi malzeme özellikleri hesaba katılmış ve arayüzdeki yüzey gerilmesinin etkisi uygun bir şekilde modellenmiştir. Viskoelastik akışkan modeli olarak FENE-CR [Chilcott ve Rallison, 1988] kullanılmıştır. Süreklilik, momentum ve viskoelastik model denklemleri aşağıdaki gibi yazılmıştır:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \mu_s \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{F}_b, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{A} - (\nabla \mathbf{u})^T \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{F_A}{\lambda} (\mathbf{A} - \mathbf{I}), \quad (3)$$

$$F_A = \frac{L^2}{L^2 - \text{trace}(\mathbf{A})}. \quad (4)$$



Şekil 1: Eksenel simetrik ani daralma/genişleme içeren akış geometrisi ve damlacık şekil değişimi üzerindeki yarıçap etkisi (a) geometri (b) kontur ortalama polimer genişlemeyi temsil etmektedir. $\sqrt{\text{trace}(\mathbf{A})}$ ($Ca = 0.1, Re = 1, We = 0.4, \theta = 1, VN$)

Denklem (1-4)de $p, \mu_s, \mathbf{u}, \mathbf{F}_b, \boldsymbol{\tau}, \mathbf{A}, t, \lambda$ ve \mathbf{I} sembolleri sırasıyla basınç, çözücü viskozitesi, hız vektörü, yüzey gerilmesi ve yer çekiminden kaynaklanan bünye kuvvetleri, ekstra gerilme tensörü, konformasyon tensörü, fiziksel zaman, polimerin gevşeme zamanı, ve birim tensörünü göstermektedir. FENE-CR modelinde ekstra gerilme tensörü $\boldsymbol{\tau}$ ile konformasyon tensörü \mathbf{A} arasındaki ilişki aşağıdaki gibi yazılır.

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{F_A \mu_p}{\lambda} (\mathbf{A} - \mathbf{I}). \quad (5)$$

Bu çalışmada HWNP (High Weissenberg number problem) ile ortaya çıkan zorlukları aşmak için iki farklı zaman integrasyon metodu kullanılmıştır. İlk yaklaşımda Sarkar ve Schowalter [2000] takip edilerek yarı analitik metod (semi analytical method (SAM)) kullanılmıştır. Bu yöntem düşük ve orta büyüklükteki Weissenberg sayıları için uygundur. Yüksek Weissenberg sayılarında akış ve viskoelastik zaman ölçekleri arasındaki büyük farktan dolayı SAM yöntemi kararsızlık göstermektedir. Bu kararsızlık problemi aşmak için, Fattal ve Kupferman [2005] tarafından geliştirilen log-conformation yöntemi (LCM) kullanılmıştır.

Akış denklemleri Unverdi ve Tryggvason [1992] tarafından geliştirilen ara yüz izleme yöntemi kullanılarak çözülmüştür. Ara yüz izleme yöntemi, tüm sayısal tanım bölgesi için akış denklemlerinin tek alan formülasyonuna dayanmaktadır. Dolayısıyla farklı fazlar değişik malzeme özellikli tek akışkan olarak modellenmiştir. Bu yöntemde fazlar arasındaki arayüz yerel akış hızları ile hareket eden birbirine bağlı Lagranjiyen işaretleyici noktalarla temsil edilmiştir. Akış denklemleri projeksiyon metodu kullanılarak çözülmüştür. Değişik fazlardaki akışkan özellikleri (yoğunluk, viskozite, gevşeme zamanı vs.) gösterge fonksiyonu kullanılarak tespit edilmiştir. Gösterge fonksiyonu damlacık içerisinde bir ve dışında sıfır değerini alacak şekilde Tryggvason vd. [2001] tarafından önerilen yöntemle hesaplanmıştır. Ara yüz izleme metodunun detaylarını Tryggvason vd. [2001]'de bulunabilir.

SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Fiziksel problem ve sayısal tanım bölgesi Şekil 1(a)'da gösterilmiştir. Geometri 5:1:5 daralan/genişleyen bir kanaldan oluşmaktadır. Kanalın giriş ve çıkış yarıçapı R_1 ile gösterilmiştir. Daralan kısmın yarıçapı R_2 ve uzunluğu ise $20R_2$. Kanal giriş ve çıkış uzunlukları ise yine $20R_2$ 'dir. Damlacık başlangıçta d_d çapında ve küresel olarak eksen üzerinde girişe $10R_2$ mesafede ani olarak yerleştirilmiştir. Başlangıçta kanalda akış olmadığı ve akışın girişe uygulanan hız profili ile ani olarak başlatıldığı kabul edilmiştir. Girişte tam gelişmiş boru akışı kabul edilmiştir. Bu çalışmada sadece ani daralma ve genişleme göz önüne alınmıştır. FENE-CR modeli için benzetimler Weissenberg sayısına bağlı olarak SAM ve LCM yöntemleri kullanılarak yapılmıştır. Temel simülasyon durumu yoğunluk oranı $\alpha = 1$, viskozite oranı $\theta = 1$, boyutsuz damlacık çapı $\kappa = 1.25$, Reynolds sayısı $Re = 1$, kapilari sayısı $Ca = 0.1$ ve Weissenberg sayısı $We = 0.4$ olacak şekilde ayarlanmıştır. Basınç itkili eksen simetrik daralan/genişleyen bir mikro-kanaldaki damlacığın hareketi ve deformasyonu incelenmesi için yoğun sayısal benzetimler yapılmıştır. Burada sunulan tüm sonuçlar için tekdüze olmayan (non-uniform staggered grid) yerel kartezyen grid kullanılmıştır. Tüm çözüm ağları duvar, genişleme ve daralma bölgelerinde yüksek çözünürlüklü olacak şekilde tasarlanmıştır. Çünkü bu bölgelerin göz önüne alınan değişkenler için yüksek değişim içerdikleri bilinmektedir. Uzaysal ayrıklaştırma hatasını eşik değerinin altında tutabilmek amacıyla karşılaştırmalı çözüm ağı yakınsaklığı çalışmaları yapılmıştır. Bu çalışmanın sonucu olarak 64×768 çözünürlüğünden sonra çözüm ağı yakınsaklığının sağlandığı gözlenmiştir. Boyutsuz parametrelerin etkilerini incelemek için çok sayıda sayısal benzetim yapılmıştır. İlk hesaplamalar görelî damlacık boyutunun değişik değerler için, diğer parametreler sabit tutularak yapılmıştır. Herbir damlacık boyutu için toplam şekil değiştirmesi Şekil 1(b)-(e)'de gösterilmiştir. Bu şekillerde damlacık içerisindeki oluşan ortalama polimer uzunluğu gösterilmiştir. Ortalama polimer uzunluğu elastik gerilmelerinin büyüklüğünün göstergesidir. Görüldüğü gibi κ artarken dar kanaldaki damlacık daha çok uzamaktadır. Ayrıca küçük κ değerleri için dar kanalın çıkışında damlacığın çapraz akış yönünde daha çok deforme olduğu görülmektedir. Bununla beraber yüksek κ değerleri için deformasyonu orantılı olarak artmaktadır ve genişleme bölgesinde damlacığın küresel şekle dönmesi daha uzun zaman almaktadır. Bundan sonra değişik damlacık-matris viskozite oranları θ incelenmiştir. Bu amaçla Newtonyen akışkan içerisinde viskoelastik damlacık (VN) ve viskoelastik akışkan içerisinde Newtonyen damlacık (NV) sistemleri göz önünde bulundurulmuştur. VN ve NV durumları için dar kanaldaki damlacık şekil değiştirmesinin θ ile birlikte daha arttığı gözlenmiştir. İlginç bir şekilde VN sisteminde deformasyon $\theta = 0.05$ ve $\theta = 0.1$ değerleri için yaklaşık olarak aynı kalmaktadır. Damlacık akışkan elastisitesinin etkilerini tespit edebilmek için ortalama polimer uzunluğu ve normal gerilme farkları da incelenmiştir. En yüksek polimer uzunluğunun ve normal gerilme farkının $\theta = 0.1$ durumunda ortaya çıktığı görülmüştür. NV sisteminde ise her iki viskozite oranı için damlacık deformasyonun elastisite ile arttığı görülmüştür. Ancak, VN sistemi için damlacık şekil değiştirmesi parametresinin aynı olduğu görülmüştür. Bundan sonra Ca sayısının damlacık deformasyonuna etkisi VN ve NV sistemleri için incelenmiş ve Ca arttığında damlacığın dar kanalda daha çok uzadığı görülmüştür. Buna ilave olarak yüksek Ca değerleri için dar kanalın çıkışında damlacığın çapraz akış yönünde daha çok şişkinleştiği görülmüştür. VN sistemi için normal gerilme farklarının damlacık içerisinde duvara yakın bölgede ve arka duraksama noktasında yoğunlaştığı görülmüştür. NV sisteminde ise film bölgesinde çok yüksek normal gerilme farkları oluşmaktadır. Son olarak damlacık üzerindeki atalet etkilerini araştırmak için simülasyonlar yapılmıştır. Dar kanalda deformasyonun Re ile önemli oranda arttığı ve genişleme bölgesine geçişte salınım yaptığı gözlenmiştir. Salınım genliği Re sayısı ile orantılı olarak artmaktadır. Dolayısıyla yüksek Re sayısında küresel şekle erişebilmek için daha uzun çıkış mesafesi gerekmektedir. Sonuç olarak $Re < 10$ durumları için Reynolds sayısının etkileri ihmal edilebilecek mertebede iken daha büyük Re sayılarında atalet kuvvetlerinin önemli etkileri vardır ve mutlaka hesaba katılmalıdır. Hatta $Re = 100$ olduğunda damlacık bölünmesi (breakup) bile gözlenmiştir.

SONUÇ

Viskoelastik çok fazlı akışkan akışlarının doğrudan sayısal simulasyonu için bir ara yüz izleme metodu geliştirilmiştir. Viskoelastik model denklemlerin zamanda integrasyonu için yarı analitik ve log-conformation metodları kullanılmıştır. Log-conformation metodunun yarı analitik metod ile uyumlu olduğu görülmüştür, ve LCM yönteminin yüksek Weissenberg sayıları ($We = 100$) için bile gürbüz olduğu tespit edilmiştir. Basınç itkili daralan/genişleyen bir kanalda damlacık dinamiği bu metod kullanılarak incelenmiştir. Viskozite oranı, damlacık boyutu, akışkan elastisitesi, atalet ve yüzey gerilmesinin damlacık deformasyonu ve dinamiği üzerindeki etkileri araştırılmıştır. Damlacığın daralma bölgesinde aksel, ve genişleme bölgesinde radyal yönünde deforme olduğu görülmüştür. Yüksek viskozite oranında büyük damlacık deformasyonu gözlenmiştir. NV sisteminde akışkanın elastisitesinin damlacık deformasyonu üzerindeki etkilerinin VN sistemine göre daha büyük olduğunu tespit edilmiştir. Reynolds sayısının yaklaşık olarak 10'dan büyük olduğu durumlarda atalet kuvvetlerinin etkilerinin önemli olduğu ve mutlaka hesaba katılması gerektiği sonucuna ulaşılmıştır. Bu sayısal analizin özellikle mikro kanallardaki damlacık manipülasyonu için faydalı olabileceği değerlendirilmiştir.

Destek

Bu çalışma TÜBİTAK tarafından 112M181 projesi kapsamında desteklenmiştir.

Kaynaklar

- Afonso, A., Pinho, F.T., Alves, M.A., 2012. *The Kernel-Conformation Constitutive Laws*, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 167-168, 30-37.
- Chen, X., Marshall, H., Schafer, M., Bothe, D., 2013. *A comparison of stabilisation approaches for finite-volume simulation of viscoelastic fluid flow*, International Journal of Computational Fluid Dynamics 27:6-7, 229-250.
- Chilcott, M.D., Rallison, J.M., 1988. *Creeping flow of dilute polymer solutions past cylinders and spheres*, J. Non-Newtonian Fluid Mech. 29, 381-432.
- Choi, Y.J., Hulsen, M.A., 2011. *Simulation of extrudate swell using an extended finite element method*, Korea-Aust. Rheol. J. 23, 147-154.
- Chung, C., Kim, J.M., Hulsen, M.A., Ahn, K.H., Lee, S.J., 2009. *Effect of viscoelasticity on drop dynamics in 5:1:5 planar contraction/expansion microchannel flow*, Chemical Engineering Science 64, 4515-4524.
- Di Carlo, D., 2009. *Inertial microfluidics*, Lab Chip 9(21):3038-3046.
- Fattal, R., Kupferman, R., 2005. *Time-dependent simulation of viscoelastic flows at high Weissenberg number using the log-conformation representation*, J. Non-Newt. Fluid Mech. 126, 23-37.
- Hessel, V., Hardt, S., Löwe, H. 2004. *Chemical micro process engineering: fundamentals, modelling and reactions*, Wiley, Weinheim
- Gomez, F.A., 2008. *Biological applications of microfluidics*, Wiley, Hoboken
- Ramaswamy, S., and L. G. Leal, 1999. *The deformation of a Newtonian drop in the uniaxial extensional flow of a viscoelastic liquid*, J. Non-Newtonian Fluid Mech. 88, 149-172, 1999a.

- Saliterman, S., 2006. *Fundamentals of bioMEMS and medical microdevices*, SPIE, Bellingham
- Sahin, M., 2013. *Parallel Large-Scale Numerical Simulations of Purely-Elastic Instabilities Behind a Confined Circular Cylinder in a Rectangular Channel*, J. Non-Newtonian Fluid Mech. 195(0), 46-56.
- Sarkar, K., Schowalter, W.R., 2000. *Deformation of a two-dimensional viscoelastic drop at non-zero Reynolds number in time-periodic extensional flows*, J. Non-Newtonian Fluid Mech. 95, 315-342.
- Stone, H.A., Stroock, A.D ve Ajdari A., 2004. *Engineering flows in a small devices*, Annu Rev Fluid Mech 36(1):381-411.
- Tasoglu, S., Kaynak, G., Szeri, A.J., Demirci, U., Muradoglu, M., 2010. *Impact of a compound droplet on a flat surface: A model for single cell epitaxy*, Physics of Fluids, vol. 22, 082103.
- Tome, M. F., Castelo, A., Afonso, A. M., Alves, M.A., Pinho, F.T., 2012. *Application of the log-conformation tensor th three-dimensional time-dependent free surface flows*, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 175-176, 44-54.
- Tryggvason, G., Bunner, B., Esmaeeli, A., Juric, D., Al-Rawahi, N., Tauber, W., Han, J., Nas, S. and Jan, Y.-J., 2001. *front-tracking method for the computations of multiphase flow*, J. Comput. Phys. 169 (2), 708-759.
- Unverdi, S. O., Tryggvason, G., 1992. *A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows*, J. Comput. Phys. 100(1), 25-37.
- Zhou, C., Yue, P., Feng, J.J., 2007. *Simulation of Neutrophil Deformation and Transport in Capillaries using Newtonian and Viscoelastic Drop Models*, Annals of Biomedical Engineering 35, 766-780.
- Zhou, D., Yue, P., Feng, J., 2008. *Viscoelastic effects on drop deformation in a converging pipe flow*, J. Rheol. 522, 469-487.