

**BỘ GIÁO DỤC
VÀ ĐÀO TẠO**

**VIỆN HÀN LÂM KHOA HỌC
VÀ CÔNG NGHỆ VIỆT NAM**

HỌC VIỆN KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ



Nguyễn Đình Hòa

**NGHIÊN CỨU TƯƠNG TÁC CỦA HẠT CHẤT LỎNG VỚI BỀ MẶT
RẮN DƯỚI TÁC ĐỘNG CỦA MAO DẪN NHIỆT**

LUẬN ÁN TIẾN SĨ CƠ HỌC CHẤT LỎNG VÀ CHẤT KHÍ

Hà Nội - 2023

BỘ GIÁO DỤC
VÀ ĐÀO TẠO

VIỆN HÀN LÂM KHOA HỌC
VÀ CÔNG NGHỆ VIỆT NAM

HỌC VIỆN KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ

Nguyễn Đình Hòa

**NGHIÊN CỨU TƯƠNG TÁC CỦA HẠT CHẤT LỎNG VỚI BỀ
MẶT RẮN DƯỚI TÁC ĐỘNG CỦA MAO DẪN NHIỆT**

LUẬN ÁN TIẾN SĨ CƠ HỌC CHẤT LỎNG VÀ CHẤT KHÍ

Mã số: 9 44 01 08

**Xác nhận của Học viện
Khoa học và Công nghệ**

Người hướng dẫn 1
(Ký, ghi rõ họ tên)

Người hướng dẫn 2
(Ký, ghi rõ họ tên)

Hà nội - 2023

LỜI CAM ĐOAN

Tôi xin cam đoan đề tài nghiên cứu trong luận án này là công trình nghiên cứu của tôi dựa trên những tài liệu, số liệu do chính tôi tự tìm hiểu và nghiên cứu. Chính vì vậy, các kết quả nghiên cứu đảm bảo trung thực và khách quan nhất. Đồng thời, kết quả này chưa từng xuất hiện trong bất cứ một nghiên cứu nào. Các số liệu, kết quả nêu trong luận án là trung thực, nếu sai tôi hoàn toàn chịu trách nhiệm trước pháp luật.

Nghiên cứu sinh

Nguyễn Đình Hòe

LỜI CẢM ƠN

Lời đầu tiên, NCS xin chân thành cảm ơn sự hướng dẫn và tận tình chỉ bảo của PGS.TS. Vũ Văn Trường và TS. Nguyễn Hồng Phan đã giúp đỡ NCS hoàn thành luận án tiến sĩ này.

NCS xin chân thành cảm ơn các thầy giáo, cô giáo đã tham gia giảng dạy và đào tạo trong quá trình NCS học tập tại Viện Cơ học, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam.

NCS xin gửi lời cảm ơn chân thành đến các bạn trong nhóm Nghiên cứu “Cơ học lưu chất ứng dụng, Khoa Kỹ thuật Ô tô và Năng lượng, Trường Đại học Phenikaa” do PGS.TS. Vũ Văn Trường hướng dẫn.

NCS xin gửi lời cảm ơn chân thành đến các cá nhân và tập thể thuộc Học viện Khoa học và Công nghệ, Viện Cơ học, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam đã tạo điều kiện, giúp đỡ rất nhiệt tình trong quá trình học tập và nghiên cứu.

Cuối cùng NCS xin gửi lời cảm ơn sâu sắc nhất đến ông, bà, bố mẹ, anh em trong gia đình, bạn thân của NCS đã có những hỗ trợ về vật chất cũng như tinh thần giúp NCS hoàn thiện luận án.

Nghiên cứu sinh

Nguyễn Đình Hòa

MỤC LỤC

LỜI CAM ĐOAN	i
LỜI CẢM ƠN	ii
MỤC LỤC	iii
DANH MỤC CÁC KÝ HIỆU, CÁC CHỮ VIẾT TẮT.....	vi
DANH MỤC CÁC BẢNG.....	ix
DANH MỤC CÁC HÌNH VẼ, ĐỒ THỊ	x
MỞ ĐẦU	1
Chương 1. TỔNG QUAN NGHIÊN CỨU	4
1.1. Các khái niệm cơ bản và định nghĩa	4
1.2. Các nghiên cứu về tương tác của hạt chất lỏng với bề mặt rắn có tính đến ảnh hưởng của mao dẫn nhiệt trên thế giới.....	5
1.2.1. Tương tác dạng cản trở	6
1.2.2. Tương tác dạng trực tiếp	9
1.3. Tình hình nghiên cứu tương tác của hạt chất lỏng với bề mặt rắn có kể đến mao dẫn nhiệt ở Việt Nam	13
1.4. Một vài nhận xét về tình hình nghiên cứu chuyển động của hạt chất lỏng trên bề mặt rắn dưới tác động của mao dẫn nhiệt ở trên thế giới và ở Việt Nam	14
Chương 2. XÂY DỰNG CHƯƠNG TRÌNH MÔ PHỎNG TƯƠNG TÁC CỦA HẠT CHẤT LỎNG VỚI BỀ MẶT RẮN DƯỚI TÁC ĐỘNG CỦA MAO DẪN NHIỆT.15	
2.1. Các hệ phương trình cơ bản và giả thiết đóng kín	15
2.2 Phương pháp theo dấu biên	16
2.2.1. Xây dựng biên phân cách.....	16
2.2.2. Xác định đặc tính cho từng chất lỏng.....	17
2.2.3. Tính toán sức căng bề mặt	19
2.2.4. Di chuyển biên phân cách	19
2.2.5. Mô hình toán thể hiện động lực học góc tiếp xúc giữa bề mặt rắn và hạt chất lỏng.....	20
2.3. Phương pháp giải và lược đồ giải.....	23
2.3.1. Rời rạc hóa thành phần khuếch tán và thành phần đối lưu	24
2.3.2. Điều kiện biên cho vận tốc.....	26
2.3.3. Xấp xỉ hóa phương trình năng lượng	27
2.3.4. Điều kiện biên cho nhiệt độ	28
2.3.5. Lược đồ giải	29
2.4. Nhận xét về kết quả đạt được	30

2.4.1. Hạt chất lỏng hai lớp di chuyển trong kênh dẫn thẳng (tương tác dạng cản trở).....	30
2.4.2. Hạt chất lỏng tương tác trực tiếp với bề mặt rắn.....	31
2.5. Kết luận chương 2	34

Chương 3. MÔ PHỎNG TƯƠNG TÁC CỦA HẠT CHẤT LỎNG ĐA LỚP VỚI BIÊN DẠNG CỦA KÊNH DẪN THẮT LẠI TRONG ĐIỀU KIỆN ĐĂNG NHIỆT.....

3.1. Mô hình bài toán và phương pháp mô phỏng	36
3.2. Kết quả và thảo luận.....	39
3.2.1. Ảnh hưởng của số mao dẫn.....	42
3.2.2. Ảnh hưởng của tỷ lệ bán kính giữa hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài.....	44
3.2.3. Ảnh hưởng của tỷ số sức căng bề mặt của hạt chất lỏng bên trong với hạt chất lỏng bên ngoài	45
3.2.4. Ảnh hưởng của tỷ số giữa bán kính hạt chất lỏng bên ngoài và bán kính kênh dẫn	47
3.2.5. Ảnh hưởng của độ thắt lớn nhất của kênh dẫn.....	48
3.2.6. Biểu đồ trạng thái	49
3.3. Kết luận chương 3	49

Chương 4. MÔ PHỎNG TƯƠNG TÁC CỦA HẠT CHẤT LỎNG VỚI BỀ MẶT RẮN KHÔNG DÍNH ƯỚT CÓ KỂ ĐẾN ẢNH HƯỞNG CỦA MAO DẪN NHIỆT.....

4.1. Mô hình bài toán và phương pháp mô phỏng	52
4.2. Kết quả và thảo luận.....	55
4.2.1. Ảnh hưởng của số Marangoni.....	58
4.2.2. Ảnh hưởng của tỷ lệ thể tích giữa hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài.....	59
4.2.3. Ảnh hưởng của tỷ lệ sức căng bề mặt của hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài	62
4.2.4. Ảnh hưởng của số Bond.....	63
4.2.5. Ảnh hưởng của số Weber.....	64
4.2.6. Ảnh hưởng của số Reynolds	66
4.2.7. Biểu đồ trạng thái	67
4.3. Kết luận chương 4	68

Chương 5. MÔ PHỎNG CHUYỂN ĐỘNG CỦA HẠT CHẤT LỎNG TRÊN BỀ MẶT DÍNH ƯỚT DƯỚI TÁC ĐỘNG CỦA MAO DẪN NHIỆT

5.1. Mô hình bài toán và phương pháp mô phỏng	70
5.2. Kết quả và thảo luận.....	72
5.2.1. Ảnh hưởng của tỷ số độ nhớt giữa chất lỏng bên ngoài và chất lỏng trung gian	74
5.2.2. Ảnh hưởng của tỷ số bán kính tương đương của hạt chất lỏng bên ngoài và bán kính hạt chất lỏng bên trong.....	76
5.2.3. Ảnh hưởng của góc tiếp xúc tĩnh	77
5.2.4. Biểu đồ trạng thái	78
5.3. Kết luận chương 5	79

KẾT LUẬN CHUNG.....	81
HƯỚNG PHÁT TRIỂN TƯƠNG LAI.....	82
DANH MỤC CÔNG TRÌNH CỦA NCS	83
TÀI LIỆU THAM KHẢO.....	84

DANH MỤC CÁC KÝ HIỆU, CÁC CHỮ VIẾT TẮT

Ký hiệu	Ý nghĩa	Đơn vị
Bo	Số Bond	
Ca	Số mao dẫn	
c_p	Hệ số nhiệt dung riêng đẳng áp	J/(kg.K)
f	Biên phân cách	
FT	Phương pháp theo dấu biên	
H	Chiều cao miền tính toán	m
H_m	Chiều cao lớn nhất mà hạt chất lỏng có thể nảy lên	m
H_s	Chiều cao ổn định của hạt chất lỏng trên bề mặt rắn	m
I_i	Hàm chỉ thị của biên bên trong	
I_o	Hàm chỉ thị của biên bên ngoài	
k_{mo}	Tỷ số dẫn nhiệt của chất lỏng trung gian với chất lỏng bên ngoài	
k_{io}	Tỷ số dẫn nhiệt của chất lỏng ở trong với chất lỏng bên ngoài	
k	Hệ số dẫn nhiệt	W/(m.K)
LS	Phương pháp Level-set	
Ma	Số Marangoni	
\mathbf{n}_f	Véc tơ pháp tuyến tại mặt phân cách	m
Oh	Số Ohnesorge	
p	Áp suất	N/m ²
p_n	Áp suất không thứ nguyên	
Re	Số Reynolds	
R_i	Bán kính hạt chất lỏng bên trong	m
R_o	Bán kính hạt chất lỏng bên ngoài	m
R_{io}	Tỷ số bán kính giữa hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài	
r	Tọa độ hướng tâm	m

s	Độ dài cung dọc theo bề mặt	m
t	Thời gian	s
t_c	Thời gian tham chiếu	s
T	Nhiệt độ	°C, K
T_n	Nhiệt độ không thứ nguyên	
t_r	Thời gian mà hạt chất lỏng tiếp xúc với bề mặt rắn	s
τ	Thời gian không thứ nguyên	
\mathbf{u}	Véc tơ vận tốc	m/s
U_c	Vận tốc tham chiếu	m/s
V_f	Vận tốc của các điểm trên biên phân cách	m/s
VOF	Phương pháp thể tích chất lỏng	
W	Chiều rộng miền tính toán	m
z	Tọa độ hướng trục	m
μ_i	Độ nhớt động lực học của chất lỏng bên trong	kg/(m.c)
μ_m	Độ nhớt động lực học của chất lỏng trung gian	kg/(m.c)
μ_o	Độ nhớt động lực học của chất lỏng bên ngoài	kg/(m.c)
ρ_i	Khối lượng riêng của chất lỏng bên trong	kg/m ³
ρ_m	Khối lượng riêng của chất lỏng trung gian	kg/m ³
ρ_o	Khối lượng riêng của chất lỏng bên ngoài	kg/m ³
σ_i	Sức căng bề mặt của hạt chất lỏng bên trong	N/m
σ_{io}	Tỷ số sức căng bề mặt giữa hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài	
σ_o	Sức căng bề mặt của hạt chất lỏng bên ngoài	N/m
μ_{io}	Tỷ số độ nhớt giữa chất lỏng bên trong và bên ngoài	
μ_{mo}	Tỷ số độ nhớt giữa chất lỏng trung gian và bên ngoài	
ρ_{io}	Tỷ số khối lượng riêng giữa chất lỏng bên trong và bên ngoài	
ρ_{mo}	Tỷ số khối lượng riêng giữa chất lỏng trung gian và bên ngoài	

x	Hoành độ	m
X_{co}	Hoành độ của trọng tâm hạt chất lỏng bên ngoài	m
X_{ci}	Hoành độ của trọng tâm hạt chất lỏng bên trong	m
y	Tung độ	m
Y_{co}	Tung độ của trọng tâm hạt chất lỏng bên ngoài	m
Y_{ci}	Tung độ của trọng tâm hạt chất lỏng bên trong	m
We	Số Weber	
θ_e	Góc tiếp xúc tĩnh của hạt chất lỏng và bề mặt rắn	°
θ_D	Góc tiếp xúc động của hạt chất lỏng và bề mặt rắn	°
θ_{Di}	Góc tiếp xúc giả định	°
θ_0	Góc tiếp xúc ban đầu của hạt chất lỏng và bề mặt rắn	°

DANH MỤC CÁC BẢNG

Bảng 1 Giá trị và phạm vi của các tham số mô phỏng trong một số nghiên cứu38

DANH MỤC CÁC HÌNH VẼ, ĐỒ THỊ

<i>Hình 1.1</i> Cách tạo hạt chất lỏng đa lớp [15]	4
<i>Hình 1.2</i> Phân loại mức độ dính ướt của bề mặt rắn.....	5
<i>Hình 1.3</i> Chuyển động của hạt chất lỏng trên bề mặt rắn [16]. Nhiệt độ cao hơn nằm bên trái của khung hình còn nhiệt độ thấp hơn nằm ở bên phải khung hình	6
<i>Hình 1.4</i> Khái niệm góc giãn ra và góc co lại. a) Góc giãn ra θ_A . b) Góc co lại θ_R	6
<i>Hình 1.5</i> Chuyển động của hạt chất lỏng trong kênh nối [20]	7
<i>Hình 1.7</i> Hạt chất lỏng tách thành nhiều hạt chất lỏng nhỏ hơn và sau đó hợp lại [23]	9
<i>Hình 1.6</i> Kênh dẫn có phần thu hẹp và mở rộng liên tiếp nhau [21]	8
<i>Hình 1.8</i> Sự tách hạt của hạt chất lỏng bên ngoài	9
<i>Hình 1.9</i> Chuyển động mao dẫn nhiệt của hạt dầu hỏa trên bề mặt rắn mịn. <i>Hình 1.9a,b,c, d</i> và <i>e</i> thể hiện hình dạng của hạt chất lỏng tại các thời điểm khác nhau [27]	10
<i>Hình 1.10</i> Chuyển động của hạt dầu hỏa trên các bề mặt rắn khác nhau. a) bề mặt rắn phẳng. b) Bề mặt rắn có rãnh song song. c) Bề mặt rắn có rãnh vuông góc. Trường nhiệt độ đặt vào có giá trị là $3^\circ\text{C}/\text{mm}$ [28].....	11
<i>Hình 1.11</i> Chuyển động mao dẫn nhiệt của hạt chất lỏng trên bề mặt rắn, trường nhiệt độ không đổi được đặt ở biên phía trên của miền tính toán [30]	12
<i>Hình 1.12</i> Chuyển động mao dẫn nhiệt của hạt chất lỏng trên bề mặt rắn với trường nhiệt độ thay đổi theo chu kì [33]	12
<i>Hình 2.1</i> Mô hình hóa bài toán hạt chất lỏng đơn lớp di chuyển trên bề mặt rắn.....	16
<i>Hình 2.2</i> Xây dựng biên phân cách	17
<i>Hình 2.3</i> Phần tử biên tính toán lực căng bề mặt	19
<i>Hình 2.5</i> Thêm và xóa điểm trên biên phân cách.....	20
<i>Hình 2.4</i> Xác định hàm trọng số.	18
<i>Hình 2.6</i> Mô tả các tham số trong mô hình góc tiếp xúc động của hạt chất lỏng với bề mặt rắn.....	22
<i>Hình 2.7</i> Lưới lưu trữ áp suất, các đại lượng khác như độ nhớt, khối lượng riêng, và nhiệt độ được lưu trữ tương tự	24
<i>Hình 2.8</i> Lưới lưu trữ vận tốc. a) Vận tốc theo phương ngang (u). b) Vận tốc theo phương dọc (v)	25
<i>Hình 2.9</i> Điều kiện biên cho thành phần vận tốc tiếp tuyến	27
<i>Hình 2.10</i> Lưới so le lưu trữ đại lượng nhiệt độ	28
<i>Hình 2.11</i> Điều kiện biên nhiệt với biên là tường rắn.....	28

<i>Hình 2.12</i> Lược đồ giải bài toán tương tác của hạt chất lỏng với bề mặt rắn dưới tác động của mao dẫn nhiệt.....	29
<i>Hình 2.13</i> Kết quả kiểm chứng độ chính xác của phương pháp số. a) Cấu tạo của kênh dẫn. b) So sánh kết quả tính toán bằng phương pháp hiện tại và kết quả của Borthakur và cộng sự [24].....	31
<i>Hình 2.14</i> Kiểm chứng tính chính xác của phương pháp. Kết quả thực nghiệm bởi Qu và Hu [51] được thể hiện ở phía trên, kết quả mô phỏng được thể hiện ở phía dưới	32
<i>Hình 2.15</i> Kiểm chứng độ chính xác của phương pháp. a) So sánh với kết quả đưa ra bởi Young và cộng sự [52]. b) So sánh với kết quả đã đưa ra bởi Kalichetty và cộng sự [53]	33
<i>Hình 2.16</i> Kết quả mô phỏng kiểm tra trạng thái tĩnh của hạt chất lỏng đơn lớp trên bề mặt rắn.....	33
<i>Hình 2.17</i> Kiểm nghiệm tính chính xác của phương pháp mô phỏng. Kết quả so sánh bán kính dính ướt của hạt chất lỏng theo thời gian, tham số không thứ nguyên bao gồm: $Re = 36$, $We = 93$, $Eo = 0,285$	34
<i>Hình 3.1</i> Mô hình hóa bài toán. a) Cấu tạo của hạt chất lỏng đa lớp. b) Cấu tạo và kích thước của kênh dẫn.....	37
<i>Hình 3.2</i> Chuyển động của hạt chất lỏng đa lớp tại các thời điểm khác nhau. Khung hình bên trái thể hiện trường áp suất, được không thứ nguyên hóa bởi $0,5\rho_o U_{ave}^2$. Khung hình bên phải thể hiện trường vận tốc không thứ nguyên bởi vận tốc tham chiếu U_{ave}	39
<i>Hình 3.3</i> Các tham số để tính toán độ lồi của hạt chất lỏng bên ngoài.....	41
<i>Hình 3.4</i> Chuyển động của hạt chất lỏng tại các thời điểm khác nhau.....	40
<i>Hình 3.5</i> Sự biến thiên độ lớn độ lồi tại bề mặt phía sau của hạt chất lỏng bên ngoài. (a) Hạt chất lỏng chỉ bị lồi ở phía sau phần thắt lại, tham số mô phỏng giống với tham số được đưa ra ở <i>Hình 3.4b</i> . (b) Hạt chất lỏng bị lồi ở cả phía trước và phía sau phần thắt lại, tham số mô phỏng giống với tham số được đưa ra ở <i>Hình 3.4c</i>	42
<i>Hình 3.6</i> Kết quả đánh giá ảnh hưởng của số mao dẫn.....	43
<i>Hình 3.7</i> Kết quả đánh giá ảnh hưởng của tỷ lệ bán kính giữa hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài	45
<i>Hình 3.8</i> Kết quả đánh giá ảnh hưởng của tỷ lệ sức căng bề mặt giữa hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài	46
<i>Hình 3.9</i> Kết quả đánh giá ảnh hưởng của tỷ lệ bán kính giữa hạt chất lỏng bên ngoài và bán kính của kênh dẫn.....	47
<i>Hình 3.10</i> Kết quả đánh giá ảnh hưởng của độ thắt lớn nhất của kênh dẫn	48

<i>Hình 3.11</i> Biểu đồ trạng thái chỉ ra sự chuyển tiếp của các trạng thái lốm của hạt chất lỏng đa lớp. <i>Hình 3.11a,c</i> , và <i>e</i> chỉ ra các trạng thái lốm của hạt chất lỏng bên ngoài. <i>Hình 3.11b, d</i> , và <i>f</i> chỉ ra các trạng thái lốm tại của hạt chất lỏng bên trong	50
<i>Hình 4.1</i> Mô hình hóa bài toán. a) Cấu tạo của hạt chất lỏng đa lớp. b) Sơ đồ và các kí hiệu của bài toán	53
<i>Hình 4.2</i> Kiểm tra độ hội tụ của lưới. a) Hình dạng của hạt chất lỏng tại các thời điểm khác nhau. b) Độ biến dạng của hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài	54
<i>Hình 4.3</i> Mô tả chuyển động của hạt chất lỏng theo thời gian. Vận tốc sẽ được không thứ nguyên hóa theo U_c . Áp suất được không thứ nguyên hóa theo $0,5\rho_m U_c^2$. Nhiệt độ được không thứ nguyên $T_n = (T - T_{hot})/(T_{hot} - T_{cold})$	56
<i>Hình 4.4</i> Sự biến đổi theo thời gian của (a) trọng tâm của hạt chất lỏng bên trong (Y_{ci}) và bên ngoài (Y_{co}), và (b) độ biến dạng của hạt chất lỏng bên trong (T_i), bên ngoài (T_o), và vị trí thấp nhất của hạt chất lỏng đa lớp so với bề mặt rắn (Y_m)	57
<i>Hình 4.5</i> Kết quả đánh giá ảnh hưởng của số Marangoni	59
<i>Hình 4.6</i> Đánh giá ảnh hưởng của tỷ lệ hạt chất lỏng bên trong và hạt chất lỏng bên ngoài	60
<i>Hình 4.7</i> Kết quả đánh giá ảnh hưởng của tỷ lệ sức căng bề mặt của hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài	62
<i>Hình 4.8</i> Kết quả đánh giá ảnh hưởng của số Bond.....	64
<i>Hình 4.9</i> Kết quả đánh giá ảnh hưởng của số Weber.....	65
<i>Hình 4.10</i> Kết quả đánh giá ảnh hưởng của số Reynolds	67
<i>Hình 4.11</i> Biểu đồ sự thay đổi trạng thái của hạt chất lỏng đa lớp	68
<i>Hình 5.1</i> Mô hình hóa bài toán hạt chất lỏng đa lớp di chuyển trên bề mặt rắn.....	70
<i>Hình 5.2</i> Chuyển động của hạt chất lỏng tại các thời điểm khác nhau, trường vận tốc được không thứ nguyên hóa bằng U_c . Trường áp suất được không thứ nguyên hóa bởi $0,5\rho_m U_c^2$. Nhiệt độ không thứ nguyên $T_n = (T - T_{cold}) / (T_{hot} - T_{cold})$	72
<i>Hình 5.3</i> Quỹ đạo chuyển động của hạt chất lỏng đa lớp (a) hạt chất lỏng bên ngoài (b) hạt chất lỏng bên trong	73
<i>Hình 5.4</i> Chuyển động của hạt chất lỏng đa lớp tại các thời điểm khác nhau. Hạt chất lỏng di chuyển sang phía có nhiệt độ cao hơn	74
<i>Hình 5.5</i> Quỹ đạo chuyển động của hạt chất lỏng đa lớp (a) hạt chất lỏng bên ngoài (b) hạt chất lỏng bên trong	75
<i>Hình 5.6</i> Ảnh hưởng của tỷ số độ nhớt	76
<i>Hình 5.7</i> Ảnh hưởng của tỷ số bán kính tương đương của hạt chất lỏng bên ngoài và bán kính hạt chất lỏng bên trong	77
<i>Hình 5.8</i> Ảnh hưởng của góc tiếp xúc tĩnh	78

Hình 5.9 Biểu đồ trạng thái thể hiện sự chuyển tiếp xu hướng di chuyển của hạt chất lỏng đa lớp.....79

MỞ ĐẦU

Mạch vi lỏng là một mô hình trong đó tích hợp toàn bộ qui trình, xét nghiệm. Tầm mạch được ra đời từ những năm 70 của thế kỷ trước. Nguyên lý hoạt động của mạch dựa trên ứng dụng các nghiên cứu tính chất dòng chảy trong thiết bị vi lỏng (thiết bị sử lý một lượng nhỏ chất lỏng). Chất lỏng di chuyển trong các kênh có kích thước nhỏ cỡ từ vài trăm micromét đến một vài milimét. Động lực cho chất lỏng di chuyển trong kênh có thể là lực điện trường, lực từ trường, hoặc lực mao dẫn nhiệt. Việc nghiên cứu chuyển động của hạt chất lỏng trên bề mặt rắn của kênh vi lỏng trong mạch vi lỏng đóng vai trò quyết định trong việc tạo ra các mạch vi lỏng phức tạp, tổng hợp và hiệu năng cao. Vì vậy, NCS lựa chọn đề tài luận án: “Nghiên cứu tương tác của hạt chất lỏng với bề mặt rắn dưới sự tác động của mao dẫn nhiệt”. Nội dung cốt yếu trong luận án là nghiên cứu chuyển động của hạt chất lỏng trên bề mặt rắn dưới tác động của mao dẫn nhiệt.

Nghiên cứu tương tác của hạt chất lỏng và bề mặt rắn (như bề mặt của thiết bị vi lỏng) dưới tác động của lực mao dẫn nhiệt đã được thực hiện nhiều [1–5]. Tuy nhiên, các nghiên cứu này chỉ tập trung vào hạt chất lỏng đơn lớp. Trong nhiều ứng dụng thực tế (như ngành y học [6], công nghệ thực phẩm [7], hoặc ngành vật liệu [8]...), hạt chất lỏng đa lớp được sử dụng thay vì hạt chất lỏng đơn lớp. Vì vậy, luận án tập trung vào hạt chất lỏng đa lớp. Tương tác của hạt chất lỏng với bề mặt rắn được chia thành hai loại: tương tác dạng cản trở (tức là, hạt chất lỏng di chuyển bên trong và tương tác với biên dạng của kênh dẫn thất lại) và tương tác dạng trực tiếp (tức là, hạt chất lỏng tiếp xúc với bề mặt rắn).

- Lý do chọn đề tài:

Như đã được phân tích ở trên, việc nghiên cứu tương tác của hạt chất lỏng với bề mặt rắn dưới tác động của mao dẫn nhiệt được ứng dụng trong ngành sinh học, hóa học, cũng như y học. Kết quả của luận án sẽ giúp khám phá ra những điểm mới, từ đó thúc đẩy việc tạo ra các ứng dụng tiềm năng trong các lĩnh vực kể trên. Vì vậy, NCS đã lựa chọn đề tài này.

- Mục tiêu nghiên cứu của luận án:

Luận án đưa ra động lực học ứng xử và tương tác của hạt chất lỏng đa lớp với bề mặt rắn dưới sự tác động của mao dẫn nhiệt.

- Nội dung nghiên cứu:

Luận án bao gồm: Mở đầu, Kết luận, và năm chương sau đây:

Chương 1. Tổng quan nghiên cứu.

Chương này giải thích các khái niệm cơ bản về mao dẫn nhiệt, bề mặt rắn, hạt chất lỏng đa lớp, v.v... Chương này cũng đưa ra các nghiên cứu đã được thực hiện về tương tác dạng cản trở và tương tác dạng trực tiếp.

Chương 2. Xây dựng chương trình mô phỏng tương tác của hạt chất lỏng với bề mặt rắn dưới tác động của mao dẫn nhiệt.

Chương này đưa ra các phương trình toán học và phương pháp số thực hiện việc mô phỏng.

Chương 3. Mô phỏng tương tác của hạt chất lỏng đa lớp với biên dạng của kênh dẫn thất lại trong điều kiện đẳng nhiệt.

Chương này đưa ra tương tác dạng cản trở thông qua nghiên cứu hạt chất lỏng đa lớp di chuyển bên trong và tương tác với phần thất lại của kênh dẫn.

Chương 4. Mô phỏng tương tác của hạt chất lỏng đa lớp với bề mặt rắn không dính ướt có kể đến ảnh hưởng của mao dẫn nhiệt.

Chương này đưa ra tương tác trực tiếp của hạt chất lỏng đa lớp với bề mặt rắn không dính ướt thông qua nghiên cứu va chạm của hạt chất lỏng đa lớp với bề mặt rắn dưới tác động của trường nhiệt độ. Lực mao dẫn nhiệt được sinh ra từ một trường nhiệt độ với nhiệt độ cao hơn được đặt ở biên bên trên và nhiệt độ thấp hơn được đặt ở bề mặt rắn. Lực mao dẫn nhiệt đóng vai trò hỗ trợ hạt chất lỏng đa lớp nảy lên khỏi bề mặt rắn.

Chương 5. Mô phỏng chuyển động của hạt chất lỏng đa lớp trên bề mặt rắn dính ướt dưới tác động của mao dẫn nhiệt.

Chương này đưa ra tương tác trực tiếp của hạt chất lỏng đa lớp và bề mặt rắn. Nhiệt độ cao hơn được đặt ở biên bên phải và nhiệt độ thấp hơn được đặt ở biên bên trái. Tùy theo góc tiếp xúc tĩnh của hạt chất lỏng và bề mặt rắn và thành phần của hạt chất lỏng đa lớp mà nó có thể chuyển động sang phía có nhiệt độ cao hơn hoặc sang phía có nhiệt độ thấp hơn.

- Cơ sở khoa học và ý nghĩa thực tiễn của đề tài:

Cơ sở khoa học: Dựa trên kết quả của các nghiên cứu đã được thực hiện về tương tác của hạt chất lỏng đơn lớp với bề mặt rắn dưới tác động của mao dẫn nhiệt, NCS thấy rằng dưới sự tác động của lực mao dẫn nhiệt, tương tác của hạt chất lỏng đa lớp với bề mặt rắn là phức tạp và khó đoán trước được.

Ý nghĩa thực tiễn: Như đã được trình bày ở phần mở đầu, hạt đa lớp được sử dụng nhiều trong các lĩnh vực như y học, vật liệu, và thực phẩm. Do đó, luận án sẽ cung cấp kiến thức quan trọng và cơ sở khoa học để phát triển và khám phá những điểm mới trong các lĩnh vực kể trên. Ví dụ, trong lĩnh vực y học, việc nâng cao hiệu

quả quá trình phân tích mẫu giúp đẩy nhanh việc kiểm tra tính an toàn của thuốc trước khi đưa ra sử dụng.

- Những đóng góp mới của luận án;
 - + Xây dựng được một mô hình mô phỏng tính toán cho bài toán hạt chất lỏng đa lớp tương tác với bề mặt rắn dưới tác động của mao dẫn nhiệt.
 - + Phân tích ảnh hưởng của một số tham số đến độ lõm tại bề mặt phía sau của hạt chất lỏng đa lớp khi di chuyển qua phần thắt lại của kênh dẫn. Qua đó, đánh giá được mức độ cản trở của phần thắt lại của kênh dẫn.
 - + Chỉ ra hiện tượng hạt chất lỏng đa lớp nảy lên và ổn định ở phía trên bề mặt rắn không dính ướt dưới tác động của gradient nhiệt độ được đặt cùng phương với phương mà hạt chất lỏng tương tác với bề mặt rắn.
 - + Phân tích ảnh hưởng của các tham số không thứ nguyên đến quỹ đạo chuyển động của hạt chất lỏng đa lớp dưới tác động của lực mao dẫn nhiệt. Luận án đã cho thấy rằng kích thước hạt bên trong có thể thay đổi hướng chuyển động của hạt bên ngoài.

Trong các bài báo khoa học đã công bố, NCS đóng vai trò là tác giả chính trong 04 bài báo được đăng trên các tạp chí quốc tế uy tín (bài báo số 01 đến 04 trong DANH MỤC CÔNG TRÌNH CỦA NCS) và 01 báo cáo hội nghị trong nước. Ngoài ra, NCS là đồng tác giả của một bài báo quốc tế khác (bài báo số 05 trong DANH MỤC CÔNG TRÌNH CỦA NCS).

Chương 1. TỔNG QUAN NGHIÊN CỨU

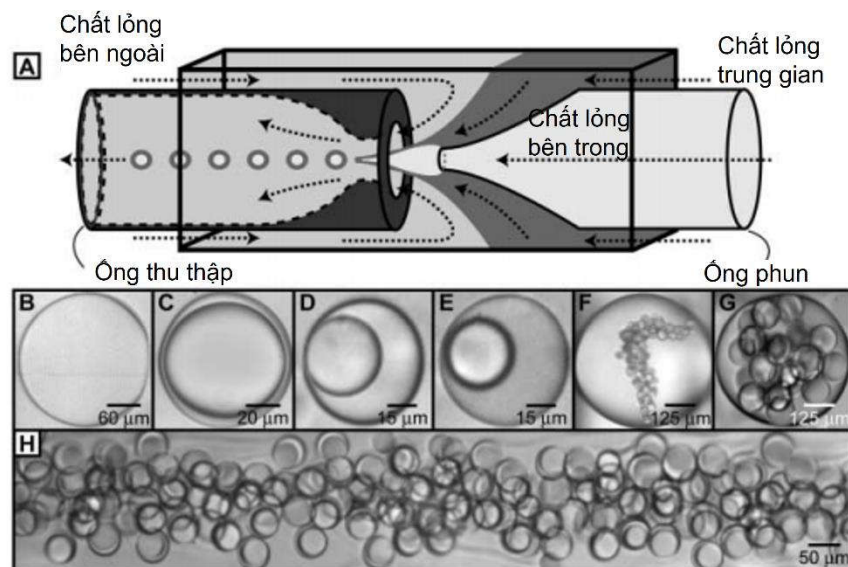
1.1. CÁC KHÁI NIỆM CƠ BẢN VÀ ĐỊNH NGHĨA

Trước tiên, chúng ta cần đưa ra một vài khái niệm cơ bản như mạch vi lỏng, hạt chất lỏng đa lớp, hiện tượng mao dẫn nhiệt, các loại bề mặt rắn, góc tiếp xúc tĩnh, góc tiếp xúc động, góc giãn ra, góc co lại, và vai trò của lực mao dẫn nhiệt trong tương tác của hạt chất lỏng với bề mặt rắn.

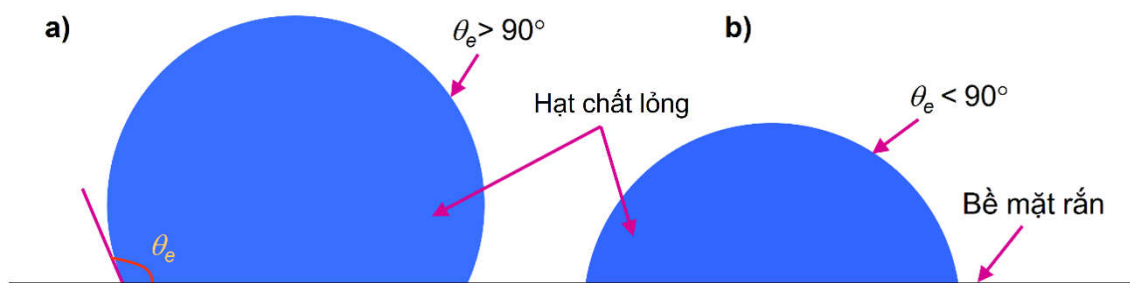
Mạch vi lỏng là thiết bị có kích thước nhỏ chứa nhiều kênh vi lỏng. Thiết bị này thường được sử dụng trong các quá trình phân tích các phản ứng hóa học [9], phân tích mẫu sinh học [10], vận chuyển thuốc [11], chẩn đoán trong y học [12] và nhiều ứng dụng khác [13].

Hạt chất lỏng đa lớp là hạt chất lỏng chứa bên trong nó một hoặc nhiều hạt chất lỏng khác có kích thước nhỏ hơn. Hạt chất lỏng đa lớp có thể được tạo ra từ các vòi phun (*Hình 1.1*). Vòi phun lớn để hình thành hạt chất lỏng bên ngoài và vòi phun nhỏ để hình thành hạt chất lỏng bên trong. Ngoài ra, hạt chất lỏng đa lớp cũng có thể được hình thành từ quá trình tách hạt của một sợi chất lỏng đa lớp [14].

Khi tương tác với bề mặt của một tấm kính, hạt chất lỏng có thể giãn ra và hình thành một vùng dính ướt trên bề mặt tấm kính. Tuy nhiên, cũng với hạt chất lỏng đó, khi tương tác với bề mặt lá sen, hạt chất lỏng giãn ra ít và gần như không xuất hiện vùng diện tích dính ướt. Điều này là do mức độ dính ướt của các loại bề mặt rắn là khác nhau. Mức độ dính ướt của bề mặt rắn được định nghĩa là khả năng mà hạt chất lỏng bám dính trên mặt rắn hay mức độ tương tác giữa hạt chất lỏng và bề mặt rắn. Bề mặt rắn được phân loại dựa trên giá trị của góc tiếp xúc tĩnh (góc θ_e trên *Hình*



Hình 1.1 Cách tạo hạt chất lỏng đa lớp [14]



Hình 1.2 Phân loại mức độ dính ướt của bề mặt rắn

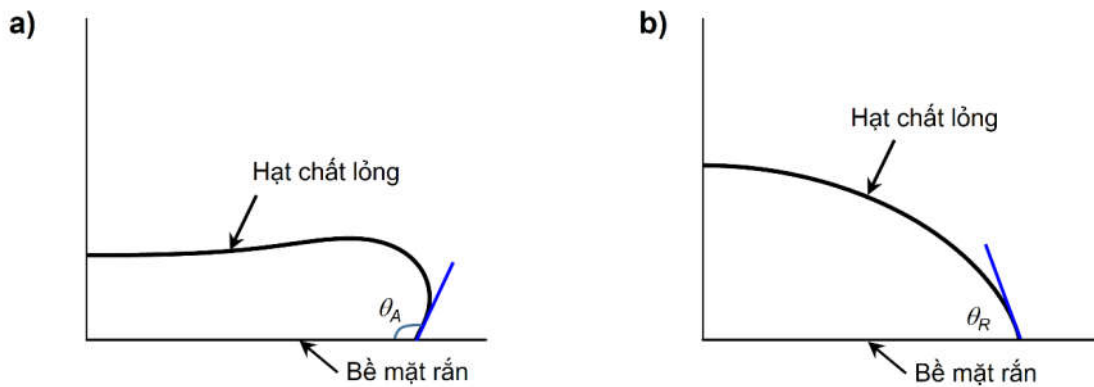
1.2, là góc tiếp xúc của hạt chất lỏng với bề mặt rắn ở trạng thái tĩnh). Khi góc tiếp xúc tĩnh bằng không, bề mặt rắn là dính ướt hoàn toàn. Khi góc tiếp xúc tĩnh có giá trị lớn hơn 90° (Hình 1.2a), bề mặt rắn là khó dính ướt. Khi góc tiếp xúc tĩnh có giá trị nhỏ hơn 90° (Hình 1.2b), bề mặt rắn là dễ dính ướt. Khi hạt chất lỏng là hạt nước, bề mặt rắn khó dính ướt được gọi là bề mặt rắn kỵ nước và bề mặt rắn dễ dính ướt được gọi là bề mặt rắn ưa nước. Góc tiếp xúc của hạt chất lỏng với bề mặt rắn trong trạng thái chuyển động được gọi là góc tiếp xúc động. Góc tiếp xúc lớn nhất khi hạt chất lỏng giãn ra trên bề mặt rắn được gọi là góc giãn ra (Hình 1.3a). Góc tiếp xúc nhỏ nhất khi hạt chất lỏng co lại được gọi là góc co lại (Hình 1.3b).

Hiện tượng mao dẫn nhiệt là hiện tượng sức căng bề mặt của hạt chất lỏng thay đổi dưới tác động của trường nhiệt độ. Sự chênh lệch sức căng bề mặt dọc theo biên phân cách của hạt chất lỏng tạo ra lực mao dẫn nhiệt. Khi lơ lửng bên trong chất lỏng khác, hạt chất lỏng luôn di chuyển từ vùng có nhiệt độ thấp hơn đến vùng có nhiệt độ cao hơn dưới tác động của lực mao dẫn nhiệt. Điều này là do sức căng bề mặt của hạt chất lỏng ở phía có nhiệt độ thấp hơn lớn hơn so với phía có nhiệt độ cao hơn. Tuy nhiên, khi hạt chất lỏng nằm trên bề mặt rắn, tác động của lực mao dẫn nhiệt đến hạt chất lỏng là hoàn toàn khác biệt. Hạt chất lỏng có thể di chuyển từ vùng có nhiệt độ cao hơn sang vùng có nhiệt độ thấp hơn hoặc ngược lại, hoặc có thể đứng yên. Ví dụ, hạt chất lỏng di chuyển từ vùng có nhiệt độ cao hơn [15] (bên trái của Hình 1.4) sang vùng có nhiệt độ thấp hơn (bên phải của Hình 1.4).

1.2. CÁC NGHIÊN CỨU VỀ TƯƠNG TÁC CỦA HẠT CHẤT LỎNG VỚI BỀ MẶT RẮN CÓ TÍNH ĐẾN ẢNH HƯỞNG CỦA MAO DẪN NHIỆT TRÊN THẾ GIỚI

Như đã được phân tích ở phần MỞ ĐẦU, tương tác của hạt chất lỏng với bề mặt rắn được chia thành hai loại sau:

- Tương tác dưới dạng cản trở.
- Tương tác dạng trực tiếp.



Hình 1.3 Khái niệm góc giãn ra và góc co lại. a) Góc giãn ra θ_A . b) Góc co lại θ_R

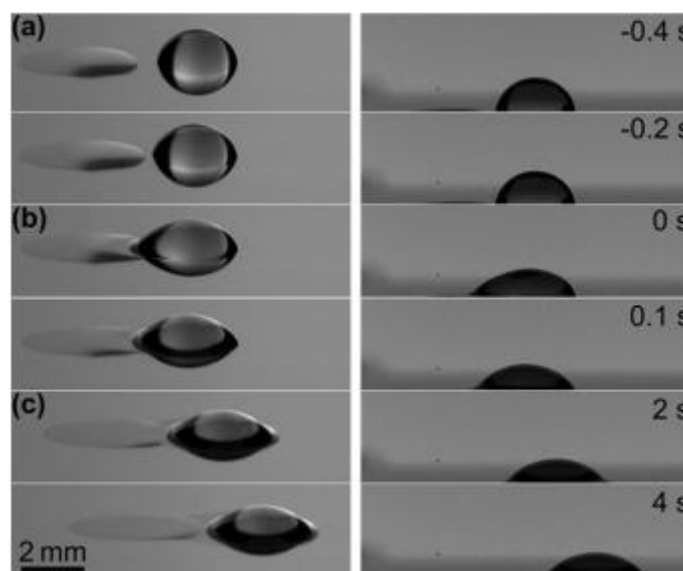
Các nghiên cứu đã được thực hiện về hai loại tương tác này được trình bày ở mục sau.

1.2.1. Tương tác dạng cản trở

Nghiên cứu lý thuyết: Bretherton [16] đã nghiên cứu chuyển động của hạt bong bóng bên trong một ống dẫn thẳng. Tác giả đã đưa ra công thức xác định chiều dày nhỏ nhất của lớp chất lỏng giữa hạt bong bóng và thành của ống mao dẫn (W) được xác định bằng công thức sau:

$$W = 1,29(3\mu U / \sigma)^{2/3} \quad (1.1)$$

Trong đó, U là tốc độ trung bình của hạt bong bóng; μ và σ lần lượt là độ nhớt và sức căng bề mặt của hạt bong bóng. Tuy nhiên, công thức này chỉ đúng khi $\mu U / \sigma < 0,003$. Trong khi đó, Schwartz và cộng sự [17] đưa ra công thức sau:



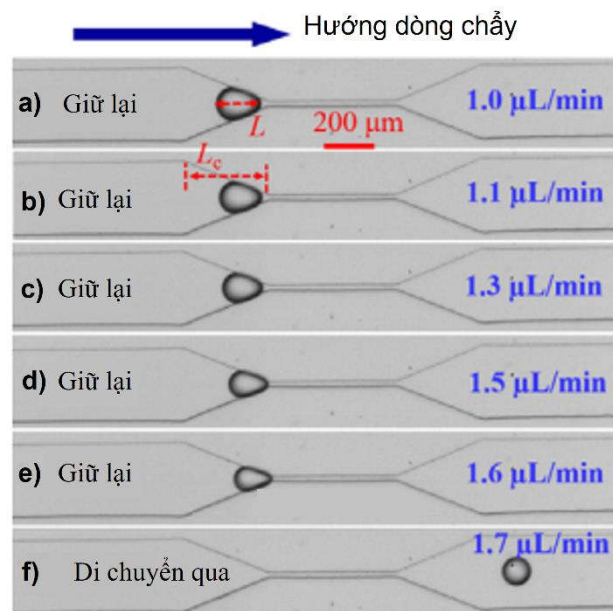
Hình 1.4 Chuyển động của hạt chất lỏng trên bề mặt rắn [15]. Nhiệt độ cao hơn nằm bên trái của khung hình còn nhiệt độ thấp hơn nằm ở bên phải khung hình

$$W = \frac{0,643}{\kappa} (3Ca)^{2/3} \quad (1.2)$$

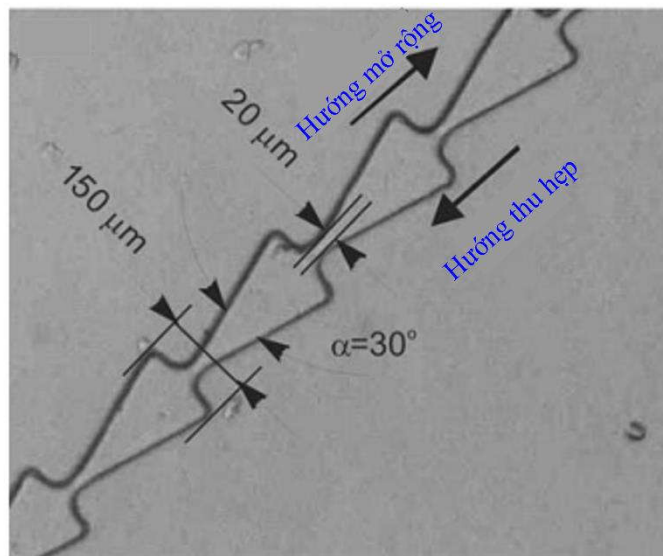
Trong đó, số mao dẫn $Ca = \mu U / \sigma$, độ cong $\kappa = 1/R$ với R là bán kính của hạt bong bóng. Công thức này đúng với giá trị Ca từ 10^{-7} đến 10^{-4} .

Nghiên cứu thực nghiệm: Olbricht và Kung [18] đã tiến hành thực nghiệm về chuyển động của hạt chất lỏng đơn lớp bên trong ống mao dẫn hình trụ tròn. Nhóm tác giả đã quan sát thấy rằng bề mặt phía sau của hạt chất lỏng bị lõm khi số mao dẫn $Ca = 0,277$. Mức độ lõm tăng khi tăng giá trị Ca . Hạt chất lỏng bị tách thành các hạt nhỏ hơn khi $Ca = 4,08$, tỷ số độ nhớt giữa hạt chất lỏng và chất lỏng trung gian $k = 0,0013$, và tỷ số bán kính giữa hạt chất lỏng và bán kính ống mao dẫn $\lambda = 1,13$. Khi giảm độ nhớt của hạt chất lỏng (giảm k), hạt chất lỏng bị tách với giá trị Ca nhỏ hơn. Khi hạt chất lỏng có kích thước nhỏ hơn (giảm λ), hạt chất lỏng bị tách với giá trị Ca lớn hơn. He và cộng sự [19] đã nghiên cứu chuyển động của hạt chất lỏng qua kênh nối (*Hình 1.5*). Nhóm tác giả đã thấy rằng hạt chất lỏng có thể di chuyển qua kênh nối hoặc bị tắc ở phía trước của kênh nối (ở *Hình 1.5f*, hạt chất lỏng có kích thước nhỏ di chuyển qua kênh nối với lưu lượng là 1,7 microlít/phút). Liu và cộng sự [20] đã tiến hành thực nghiệm và mô phỏng chuyển động của hạt chất lỏng trong kênh dẫn có phần thu hẹp và mở rộng liên tiếp nhau (*Hình 1.6*). Nhóm tác giả đã cho thấy rằng hạt chất lỏng di chuyển theo hướng mở rộng tạo ra độ chênh áp suất lớn hơn khi hạt chất lỏng di chuyển theo hướng ngược lại.

Nghiên cứu mô phỏng: Tsai và cộng sự [21] đã nghiên cứu chuyển động của hạt chất lỏng đơn bên trong ống mao dẫn thắt lại có dạng hình sin. Nhóm tác giả đã



Hình 1.5 Chuyển động của hạt chất lỏng trong kênh nối [20]

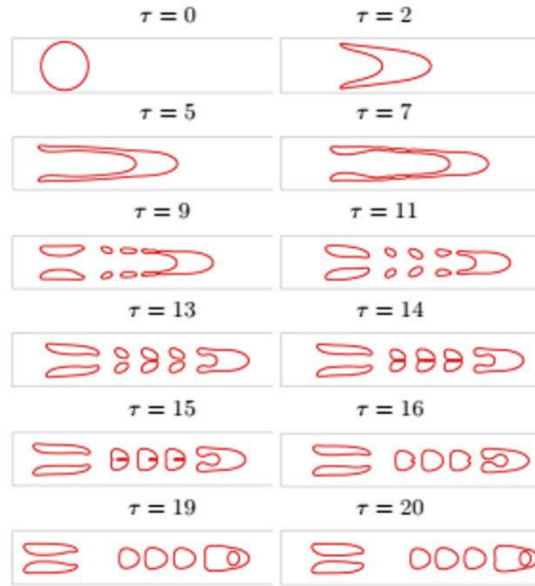


Hình 1.6 Kênh dẫn có phần thu hẹp và mở rộng liên tiếp nhau [20]

thấy rằng khi tỷ số độ nhớt giữa hạt chất lỏng và chất lỏng môi trường nhỏ ($\lambda < 0,01$), số mao dẫn $Ca = 0,1$, và tỷ số bán kính giữa bán kính hạt chất lỏng và bán kính ống mao dẫn $a = 0,9$, hạt chất lỏng có xu hướng tách thành các hạt chất lỏng có kích thước nhỏ hơn khi hạt di chuyển qua phần thắt lại. Với tỷ số độ nhớt lớn hơn, hạt chất lỏng có thể giữ nguyên hình dạng.

Nath và cộng sự [22] đã nghiên cứu chuyển động của hạt chất lỏng trong ống dẫn thẳng với dòng chảy nhớt. Nhóm tác giả đã thấy rằng khi số mao dẫn có giá trị gần bằng một ($Ca \sim 1$), bề mặt phía sau của hạt chất lỏng bị lõm. Ngoài ra, khi tăng tỷ số độ nhớt của hạt chất lỏng và chất lỏng bên ngoài, hạt chất lỏng dễ dàng tách thành nhiều hạt chất lỏng nhỏ hơn. Tuy nhiên, sau đó chúng có thể hợp lại thành hạt chất lỏng đơn lớp hoặc hạt chất lỏng đa lớp (Hình 1.7).

Đối với hạt chất lỏng nhiều lớp (hai lớp), Borthakur và cộng sự [23] đã nghiên cứu động lực học của hạt chất lỏng hai lớp bên trong ống mao dẫn thẳng. Nhóm tác giả đã thấy rằng số mao dẫn Ca có ảnh hưởng lớn đến độ biến dạng cũng như độ lệch tâm của các hạt chất lỏng. Khi tăng giá trị của Ca , hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài bị biến dạng nhiều hơn. Tuy nhiên, độ lệch tâm của hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài ít thay đổi. Ngoài ra, nhóm tác giả cũng đã đưa ra hiện tượng hạt chất lỏng bên trong phá vỡ hạt chất lỏng bên ngoài (Hình 1.8). Vu và cộng sự [24] nghiên cứu chuyển động của hạt chất lỏng đa lớp trong một ống mao dẫn hình côn. Nhóm tác giả đã thấy rằng hạt chất lỏng bên trong bị tách thành nhiều hạt chất lỏng nhỏ hơn do tác động từ biến dạng của hạt chất lỏng bên ngoài. Hạt chất lỏng bên trong dễ dàng bị tách hơn khi được đặt gần với bề mặt phía trước của hạt chất lỏng bên ngoài.



Hình 1.7 Hạt chất lỏng tách thành nhiều hạt chất lỏng nhỏ hơn và sau đó hợp lại [22]

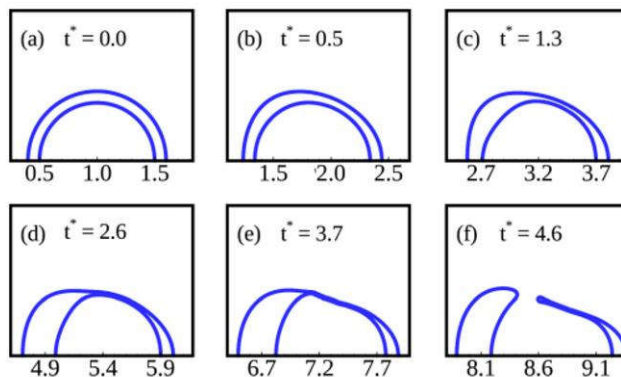
1.2.2. Tương tác dạng trực tiếp

Nghiên cứu lý thuyết: các nghiên cứu lý thuyết về chuyển động của hạt chất lỏng trên bề mặt rắn dưới tác động của mao dẫn nhiệt thường sử dụng thuyết bôi trơn. Vì vậy, góc tiếp xúc tĩnh của hạt chất lỏng và bề mặt rắn có giá trị nhỏ (nhỏ hơn 45°). Ford và Nadim [25] đã sử dụng điều kiện biên trượt để xử lý tương tác giữa hạt chất lỏng và bề mặt rắn. Nhóm tác giả đã đưa ra công thức xác định vận tốc theo phương ngang u của hạt chất lỏng như sau:

$$u = U + b \frac{\partial u}{\partial y} \quad (1.3)$$

Trong đó, U là tốc độ của hạt chất lỏng, b là hệ số trượt. Tốc độ của hạt chất lỏng được xác định như sau:

$$U = \frac{\sigma_T G}{6\mu J} + \frac{\sigma_T G b}{2\mu} - \frac{\sigma_B \cos(\theta_B) - \sigma_A \cos(\theta_A)}{6\mu J} \quad (1.4)$$



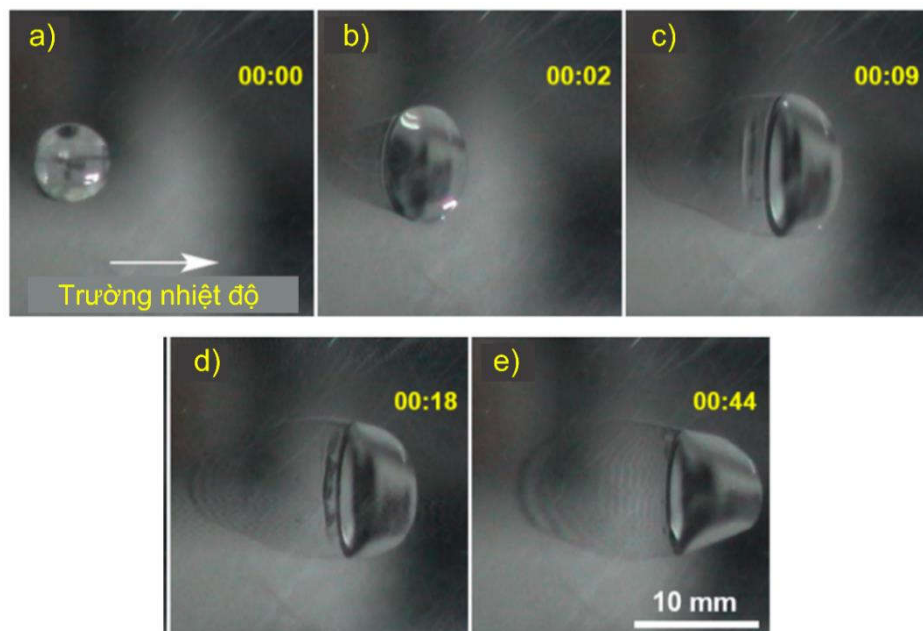
Hình 1.8 Sự tách hạt của hạt chất lỏng bên ngoài [23]

Trong đó, G là trường nhiệt độ dọc theo bề mặt rắn; μ là độ nhớt của hạt chất lỏng; σ_T là hệ số sức căng bề mặt thay đổi theo nhiệt độ; $2l$ là chiều dài của bề mặt rắn; θ là góc tiếp xúc; σ là hệ số sức căng bề mặt; chỉ số dưới A và B lần lượt kí hiệu cho bên có nhiệt độ thấp hơn và bên có nhiệt độ cao hơn. Tham số J được xác định như sau:

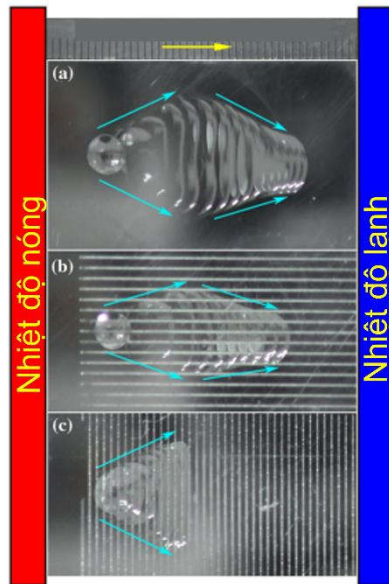
$$J = \frac{1}{2l} \int_{-l}^l \frac{dx}{h(x) + 3b} \quad (1.5)$$

Trong đó, $h(x)$ là chiều cao của hạt chất lỏng.

Các nghiên cứu thực nghiệm, Dai và cộng sự [26] đã nghiên cứu chuyển động của hạt dầu hỏa trên bề mặt rắn mịn. Nguồn nhiệt độ lạnh được duy trì ở 0°C , nguồn nhiệt cao hơn thay đổi từ 30°C đến 140°C . Nhóm tác giả đã thấy rằng khi di chuyển từ nguồn nhiệt lớn hơn đến nguồn nhiệt nhỏ hơn, hạt chất lỏng bị giãn ra, sau đó co lại (Hình 1.9b,c, và d). Vận tốc của hạt chất lỏng lớn nhất ở thời điểm đầu, giá trị này giảm dần và ổn định. Dai và cộng sự [27] đã đánh giá ảnh hưởng của các rãnh vuông góc và song song trên bề mặt rắn tới chuyển động của hạt dầu hỏa (Hình 1.10). Nhóm tác giả đã thấy rằng sự xuất hiện của các rãnh trên bề mặt rắn không làm thay đổi hướng chuyển động của hạt chất lỏng. Tuy nhiên, đối với rãnh có hướng vuông góc, hạt chất lỏng không co lại sau khi giãn ra (Hình 1.10c). Đối với các rãnh có hướng song song, hạt chất lỏng ít bị giãn ra hơn so với trường hợp bề mặt rắn mịn (Hình 1.10b).



Hình 1.9 Chuyển động mao dẫn nhiệt của hạt dầu hỏa trên bề mặt rắn mịn. Hình 1.9a,b,c, d và e thể hiện hình dạng của hạt chất lỏng tại các thời điểm khác nhau [26]



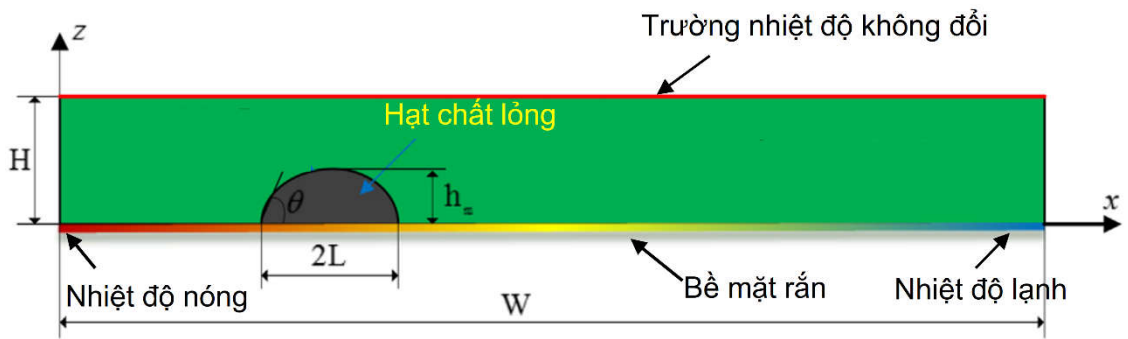
Hình 1.10 Chuyển động của hạt dầu hỏa trên các bề mặt rắn khác nhau. a) Bề mặt rắn phẳng. b) Bề mặt rắn có rãnh song song. c) Bề mặt rắn có rãnh vuông góc.

Trường nhiệt độ đặt vào có giá trị là $3^{\circ}\text{C}/\text{mm}$ [27]

Jiao và cộng sự [28] đã nghiên cứu chuyển động mao dẫn nhiệt của một hạt chất lỏng ở giữa hai tấm phẳng. Các nguồn nhiệt được đặt tại bốn phía của hạt chất lỏng. Nhóm tác giả đã kết luận rằng hạt chất lỏng có thể được di chuyển đến bất kì vị trí mong muốn nào ở giữa hai tấm phẳng bằng việc điều chỉnh tương ứng các nguồn nhiệt.

Các nghiên cứu mô phỏng: Nguyen và cộng sự [29] đã mô phỏng chuyển động mao dẫn nhiệt của một hạt chất lỏng trên bề mặt rắn, góc tiếp xúc được giới hạn bằng 100° . Nhóm tác giả cho thấy rằng khi góc tiếp xúc tĩnh nhỏ hơn 90° , hướng chuyển động của hạt chất lỏng phụ thuộc vào độ lớn của hai xoáy xuất hiện bên trong hạt chất lỏng. Sự chênh lệch độ lớn của hai xoáy này gây ra chuyển động sang phía có nhiệt độ thấp hơn của hạt chất lỏng. Tương tự với thực nghiệm [26], vận tốc của hạt chất lỏng tăng nhanh tại thời điểm đầu, sau đó giảm dần và đạt giá trị ổn định. Mở rộng thêm nghiên cứu của Nguyen và cộng sự [29], Le và cộng sự [30] đã đưa thêm nhiệt độ không đổi ở biên phía trên của miền tính toán (Hình 1.11). Nhóm tác giả đã thấy rằng độ lớn của lực mao dẫn nhiệt giảm do tác động của nhiệt độ được thêm vào. Điều này dẫn đến hạt chất lỏng dừng lại ở một vị trí nào đó trên bề mặt rắn.

Nguyen và cộng sự [31] đã tăng kích thước của hạt chất lỏng so với nghiên cứu trước đó [29]. Nhóm tác giả đã thấy rằng khi chiều dài L của hạt chất lỏng nằm trong khoảng từ 2 đến 3,4 mm, lực nổi có tác động làm giảm vận tốc chuyển động của hạt chất lỏng. Khi tăng chiều dài của hạt chất lỏng (lên đến 6 milimét), vận tốc của hạt chất lỏng giảm nhanh hơn và đạt giá trị xấp xỉ bằng không khi giá trị $L = 6$

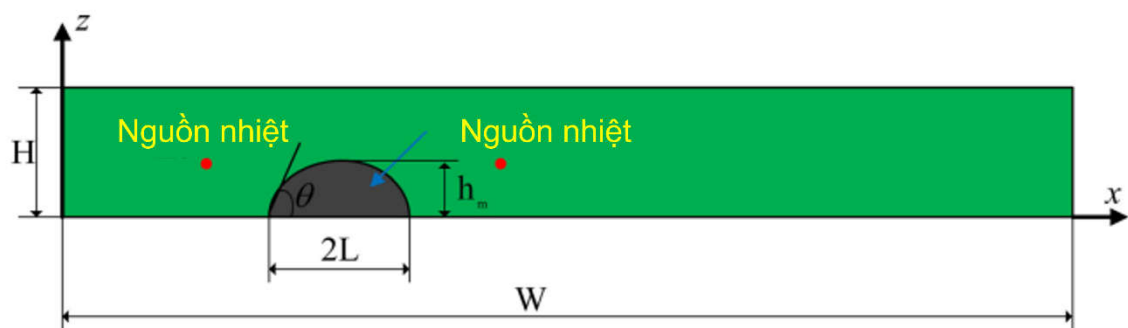


Hình 1.11 Chuyển động mao dẫn nhiệt của hạt chất lỏng trên bề mặt rắn, trường nhiệt độ không đổi được đặt ở biên phía trên của miền tính toán [30]

mm. Sui [1] đã mở rộng nghiên cứu của Nguyen và cộng sự [29] bằng việc tăng giá trị góc tiếp xúc tĩnh lên đến 150° . Hạt chất lỏng rơi vào trạng thái không di chuyển khi góc tiếp xúc tĩnh là 100° và 105° , và tỷ số độ nhớt giữa chất lỏng trung gian và hạt chất lỏng là 0,1. Khi tiếp tục tăng giá trị của góc tiếp xúc tĩnh, hạt chất lỏng di chuyển sang phía có nhiệt độ lớn hơn. Nhóm tác giả đã sử dụng điều kiện biên trượt Navier để mô phỏng tương tác của hạt chất lỏng và bề mặt rắn. Tuy nhiên, việc kiểm chứng phương pháp mô phỏng khi góc tiếp xúc tĩnh có giá trị lớn thì chưa được nhóm tác giả đưa ra.

Một năm sau đó, Fath và Bothe [2] đã tiếp tục nghiên cứu của Sui [1]. Một mô hình góc tiếp xúc động giữa hạt chất lỏng và bề mặt rắn đã được áp dụng để mô phỏng tương tác của hạt chất lỏng và bề mặt rắn. Nhóm tác giả đã kiểm chứng tính chính xác của mô hình này bằng việc so sánh kết quả mô phỏng với kết quả đã được thực nghiệm bởi Šikalo và cộng sự [32] khi góc tiếp xúc tĩnh có giá trị lớn ($\theta_e = 93^\circ$). Ngoài ra, nhóm tác giả cũng đưa ra chi tiết hơn về tổng hợp lực tác động lên hạt chất lỏng tại điểm tiếp xúc giữa hạt chất lỏng và bề mặt rắn.

Le và cộng sự [33] đã nghiên cứu chuyển động của mao dẫn nhiệt của một hạt chất lỏng trên bề mặt rắn với trường nhiệt độ tuần hoàn theo chu kỳ (Hình 1.12). Nhóm



Hình 1.12 Chuyển động mao dẫn nhiệt của hạt chất lỏng trên bề mặt rắn với trường nhiệt độ thay đổi theo chu kỳ [33]

tác giả quan sát thấy rằng hạt chất lỏng có xu hướng di chuyển ra xa nguồn nhiệt. Vì vậy, hạt chất lỏng có thể di chuyển sang cả phía trái và phía phải của miền tính toán khi thay đổi trạng thái của nguồn nhiệt.

1.3. TÌNH HÌNH NGHIÊN CỨU TƯƠNG TÁC CỦA HẠT CHẤT LỎNG VỚI BỀ MẶT RẮN CÓ KÊ ĐẾN MAO DẪN NHIỆT Ở VIỆT NAM

Với sự tìm hiểu của NCS, cho đến nay, nghiên cứu về tương tác của hạt chất lỏng với bề mặt rắn dưới tác động của mao dẫn nhiệt chưa được nghiên cứu và công bố nhiều tại Việt Nam.

Về chuyển động mao dẫn nhiệt của hạt chất lỏng, tại trường Đại học Phenikaa có nhóm nghiên cứu do PGS.TS Vũ Văn Trường là trưởng nhóm. Nhóm đã có những nghiên cứu về chuyển động mao dẫn nhiệt của hạt chất lỏng và kết quả đã được công bố trên các tạp chí quốc tế uy tín. Ví dụ, Nguyen và cộng sự [34] đã nghiên cứu chuyển động mao dẫn nhiệt của một hạt chất lỏng đa lớp trong kênh dẫn thẳng. Nhóm tác giả đã thấy rằng các hạt chất lỏng luôn có xu hướng di chuyển sang phía có nhiệt độ cao hơn. Hạt chất lỏng bên trong di chuyển nhanh hơn hạt chất lỏng bên ngoài. Tuy nhiên, khi bề mặt phía trước của hai hạt chất lỏng chạm nhau, chúng di chuyển với cùng một vận tốc. Sau đó, Nguyen và cộng sự [21] cũng đã nghiên cứu chuyển động của một hạt chất lỏng đơn lớp di chuyển qua một kênh dẫn thắt lại dưới tác động từ một trường nhiệt độ. Hạt chất lỏng có thể di chuyển qua phần thắt lại. Tuy nhiên, hạt chất lỏng di chuyển chậm dần khi tiến sát phần thắt lại. Vận tốc của hạt chất lỏng giảm dần khi tăng giá trị của số Marangoni và độ thắt lớn nhất của phần thắt lại.

Ngoài ra tại Việt Nam còn có nhóm nghiên cứu của Đại học Bách khoa Thành phố HCM nghiên cứu về vấn đề này. Le và cộng sự [35] đã nghiên cứu chuyển động của khối chất lỏng silicon bên trong ống mao dẫn dưới tác động của một trường nhiệt độ không ổn định. Nhóm tác giả đã thấy rằng ở giai đoạn đầu, khối chất lỏng di chuyển nhanh, sau đó giảm dần đến giá trị ổn định. Khối chất lỏng có độ nhớt nhỏ hoặc góc tiếp xúc ban đầu của khối chất lỏng và ống mao dẫn nhỏ thì di chuyển nhanh hơn. Le và cộng sự [36] đã sử dụng phương pháp phần tử hữu hạn mô phỏng chuyển động của hạt chất lỏng trên bề mặt rắn dưới tác động từ một nguồn nhiệt. Nhóm tác giả đã thấy rằng hạt chất lỏng có xu hướng di chuyển ra xa nguồn nhiệt. Tương tự như trường hợp gradient nhiệt độ được đặt trên bề mặt rắn, chuyển động của hạt chất lỏng được gây ra bởi sự chênh lệch độ lớn của hai xoáy xuất hiện bên trong hạt chất lỏng bên ngoài. Vận tốc hạt chất lỏng tăng nhanh ở thời điểm ban đầu, sau đó giảm dần và ổn định.

1.4. MỘT VÀI NHẬN XÉT VỀ TÌNH HÌNH NGHIÊN CỨU TƯƠNG TÁC CỦA HẠT CHẤT LÔNG TRÊN BỀ MẶT RẮN DƯỚI TÁC ĐỘNG CỦA MAO DẪN NHIỆT Ở TRÊN THẾ GIỚI VÀ Ở VIỆT NAM

- Tương tác hạt chất lông trên bề mặt rắn dưới tác động của mao dẫn nhiệt đã được nghiên cứu trên thế giới. Tuy nhiên, các nghiên cứu còn có các điểm hạn chế sau đây:

Nghiên cứu mô phỏng số:

+ Các nghiên cứu chỉ xem xét đến hạt chất lông đơn lớp, hạt chất lông tiếp xúc ướt với bề mặt rắn. Hoàn toàn chưa có nghiên cứu nào về hạt chất lông đa lớp.

+ Mô phỏng số phần lớn là các mô phỏng hai chiều.

+ Trong thực nghiệm, tồn tại một lượng nhỏ chất lỏng lưu lại trên bề mặt rắn khi di chuyển. Tuy nhiên, mô phỏng số chưa đưa ra được hiện tượng này.

Nghiên cứu lý thuyết:

+ Các nghiên cứu lý thuyết chỉ giới hạn với góc tiếp xúc tĩnh nhỏ (nhỏ hơn 45°). Chưa có nghiên cứu lý thuyết về hạt chất lông đa lớp.

Nghiên cứu thực nghiệm:

+ Các nghiên cứu thực nghiệm chưa được đa dạng. Số lượng thực nghiệm còn hạn chế và chưa có thực nghiệm nào về hạt chất lông đa lớp.

Theo như tình hình nghiên cứu hiện tại, nghiên cứu về tương tác của hạt chất lông đa lớp với bề mặt rắn dưới sự tác động của mao dẫn nhiệt chưa được thực hiện. Hạt chất lông bên trong có thể ảnh hưởng rất lớn đến động lực học của hạt chất lông bên ngoài, tương tác giữa hạt chất lông đa lớp với bề mặt rắn dưới tác động của mao dẫn nhiệt có thể phức tạp, khó đoán, và khác biệt so với hạt chất lông đơn lớp. Vì vậy, luận án sẽ đưa ra chi tiết về ứng xử của hạt chất lông đa lớp dính ướt trên bề mặt rắn khi chịu tác động của một trường nhiệt độ đều mà ở trong nước cũng như trên thế giới chưa ai nghiên cứu đến. Kết quả luận án sẽ đóng góp những kiến thức quan trọng trong việc phát triển của các ứng dụng liên quan đến mạch vi lỏng, đặc biệt trong những ứng dụng liên quan đến việc phát triển thuốc trong y học (sử dụng hạt chất lông đa lớp).

Chương 2. XÂY DỰNG CHƯƠNG TRÌNH MÔ PHỎNG TƯƠNG TÁC CỦA HẠT CHẤT LỎNG VỚI BỀ MẶT RẮN DƯỚI TÁC ĐỘNG CỦA MAO DẪN NHIỆT

Các phương trình toán học được sử dụng bao gồm: phương trình bảo toàn động lượng (phương trình Navier-Stokes), phương trình liên tục, phương trình năng lượng, và các phương trình khác. Các đạo hàm được xấp xỉ hóa theo phương pháp sai phân hữu hạn. Các chất lỏng khác nhau được phân biệt dựa trên phương pháp theo dấu biên. Chương trình được viết bằng ngôn ngữ lập trình FORTRAN.

2.1. CÁC HỆ PHƯƠNG TRÌNH CƠ BẢN VÀ GIẢ THIẾT ĐÓNG KÍN

Với đề tài đặt ra, mô hình hóa của bài toán được thể hiện ở Hình 2.1. Bài toán bao gồm một hạt chất lỏng đơn lớp dính ướt trên bề mặt rắn (Hình 2.1). Biên bên trái của hạt chất lỏng được đặt nhiệt độ lớn hơn (T_{hot}) và biên bên phải được đặt nhiệt độ thấp hơn (T_{cold}). Góc tiếp xúc ban đầu của hạt chất lỏng và bề mặt rắn được kí hiệu là θ . Bán kính dính ướt của hạt chất lỏng là R_w , chiều cao của hạt chất lỏng là H_{co} . Các chất lỏng được giả thiết là chất lỏng Newtons, không nén được, và không trộn lẫn. Các phương trình được sử dụng bao gồm phương trình bảo toàn khối lượng, phương trình bảo toàn động lượng, và phương trình cân bằng năng lượng [37].

Phương trình bảo toàn động lượng được viết như sau:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\mu} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) + \mathbf{f} + \rho \mathbf{g} \quad (2.1)$$

Trong đó, $\mathbf{A} = \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u})$ là thành phần đối lưu; $\mathbf{D} = \nabla \cdot \boldsymbol{\mu} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$ là thành phần khuếch tán; \mathbf{f} là lực căng bề mặt; \mathbf{g} là vectơ gia tốc trọng trường; \mathbf{u} là véc tơ vận tốc; p là áp suất; ρ và μ lần lượt là khối lượng riêng và độ nhớt của hạt chất lỏng.

Phương trình cân bằng năng lượng:

$$\rho \frac{\partial (c_p T)}{\partial t} + \rho \nabla \cdot (c_p T \mathbf{u}) = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (2.2)$$

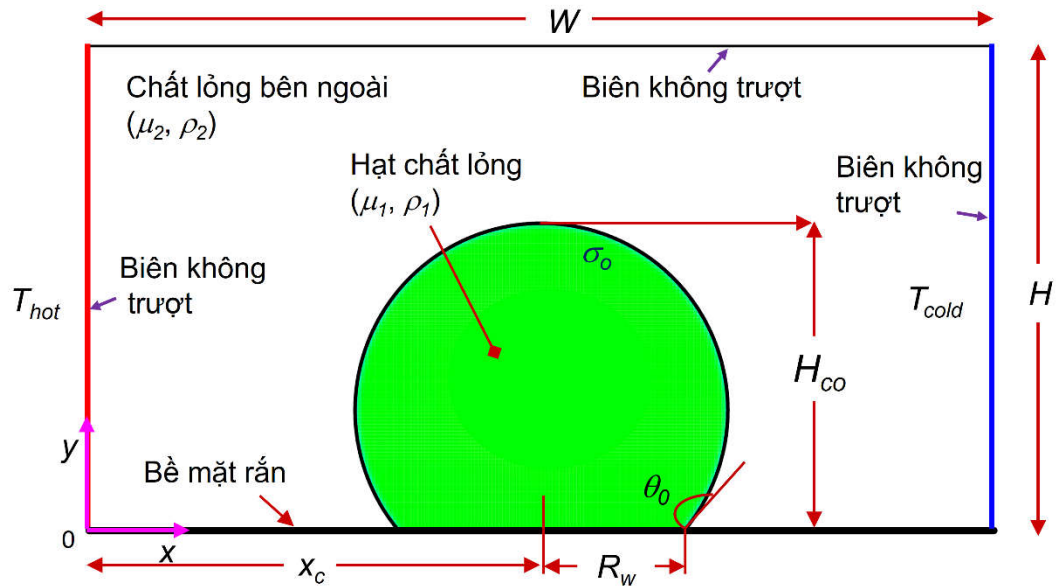
Trong đó, T là nhiệt độ; k và c_p tương ứng là các hệ số dẫn nhiệt và hệ số nhiệt dung riêng đẳng áp.

Giả sử rằng sự tỏa nhiệt của trường nhiệt độ là không đáng kể và khối lượng riêng và độ nhớt của từng chất lỏng là không thay đổi. Các giả thiết này tương ứng với các phương trình toán học sau:

$$\frac{D\rho}{Dt} = 0; \frac{D\mu}{Dt} = 0; \frac{Dk}{Dt} = 0; \frac{Dc_p}{Dt} = 0 \quad (2.3)$$

Trong đó, D/Dt là đạo hàm hữu hình.

Phương trình bảo toàn khối lượng:



Hình 2.1 Mô hình hóa bài toán hạt chất lỏng đơn lớp di chuyển trên bề mặt rắn

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.4)$$

Sức căng bề mặt của hạt là một hàm tuyến tính giảm theo nhiệt độ [38]. Giả thiết này được biểu diễn như sau:

$$\sigma = \sigma_0 - \sigma_T (T - T_0) \quad (2.5)$$

Trong đó, $\sigma_T = -d\sigma/dT$ là hằng số; σ_0 là hệ số sức căng bề mặt ở nhiệt độ tham chiếu T_0 . Giả thiết rằng nhiệt độ không làm thay đổi khối lượng riêng và độ nhớt của các chất lỏng.

Như vậy, chúng ta đã có được các phương trình cơ bản của bài toán [từ phương trình (2.1) đến phương trình (2.5)]. Sau khi đã đưa ra các phương trình toán học cần thiết, các chất lỏng cần được phân biệt với nhau. Luận án sử dụng phương pháp theo dấu biên để giải quyết vấn đề này. Chi tiết về phương pháp theo dấu biên được trình bày ở mục sau.

2.2. PHƯƠNG PHÁP THEO DẤU BIÊN

2.2.1. Xây dựng biên phân cách

Phương pháp theo dấu biên sử dụng hai hệ thống lưới: lưới cố định (lưới Euler) và lưới di động (lưới Lagrange). Đối với bài toán hai chiều, lưới cố định được hình thành bằng cách sử dụng các đường ngang và đứng vuông góc với nhau để chia miền tính toán. Lưới di động được sử dụng để bám theo biên phân cách giữa các chất lỏng. Biên phân cách được xây dựng từ các điểm nối với nhau theo một chiều nhất định. Tọa độ của các điểm trên biên phân cách được lưu trữ tại biến \mathbf{x}_f . Tọa độ của các điểm này có thể không trùng với tọa độ của các nút trên lưới cố định (Hình 2.2).

2.2.2. Xác định đặc tính cho từng chất lỏng

Theo phương pháp theo dấu biên [37], các đặc trưng vật lý của các chất lỏng được xác định dựa trên hàm chỉ thị I . Hàm này là kết quả của việc xấp xỉ hàm bước Heaviside (H). Hàm chỉ thị I có giá trị là một ở một chất lỏng và có giá trị bằng không ở chất lỏng còn lại (đối với bài toán có hai chất lỏng). Ví dụ, các đặc trưng vật lý của từng chất lỏng (bài toán hai chất lỏng được đưa ra ở Hình 2.1) được xác định theo hàm chỉ thị I như sau [37]:

$$\begin{aligned}\rho &= I\rho_1 + (1 - I)\rho_2 \\ \mu &= I\mu_1 + (1 - I)\mu_2\end{aligned}\quad (2.6)$$

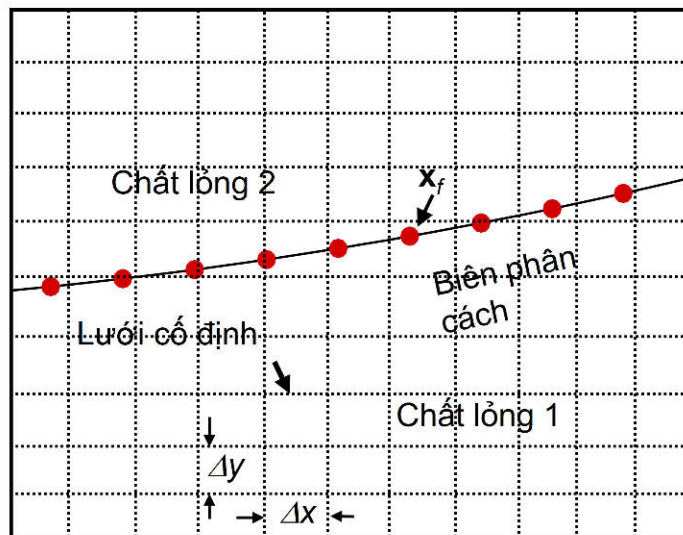
Chỉ số dưới “1” và “2” chỉ chất lỏng 1 và chất lỏng 2 (Hình 2.2). Hàm chỉ thị I có giá trị bằng 1 khi các nút trên lưới cố định nằm bên trong chất lỏng 1 và bằng 0 khi nằm ngoài.

Khi biên phân cách di chuyển, các đặc trưng vật lý của từng chất lỏng được tính toán lại tương ứng tại vị trí mới. Theo đó, giá trị của hàm chỉ thị cũng được tính lại tương ứng. Biên phân cách giữa các chất lỏng là nơi xảy ra bước nhảy về giá trị của hàm chỉ thị (ΔI). Theo đó, gradient của hàm chỉ thị được xác định như sau:

$$\nabla I = \int \Delta I \mathbf{n} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) ds \quad (2.7)$$

Trong đó, \mathbf{n} là vectơ pháp tuyến của phần tử biên; δ là hàm delta Dirac. Giá trị hàm chỉ thị tại các nút của lưới cố định được xác định như sau:

$$(\nabla I)_{i,j} = \sum_{i,j=1}^{nx,ny} (\Delta I \mathbf{n})_{i,j} \frac{\Delta s}{\Delta x \Delta y} \quad (2.8)$$



Hình 2.2 Xây dựng biên phân cách

Trong đó, Δs là chiều dài của một phần tử biên phân cách; Δx và Δy lần lượt là kích thước một mắt lưới cố định; w là hàm trọng số; n_x và n_y lần lượt là số điểm lưới theo phương x và y . Hàm trọng số trên các nút của lưới cố định được xác định như sau:

$$\begin{aligned} w_{i,j} &= \left(\frac{x_{i+1} - x_f}{\Delta x} \right) \left(\frac{y_{j+1} - y_f}{\Delta y} \right) \\ w_{i+1,j} &= \left(\frac{x_f - x_i}{\Delta x} \right) \left(\frac{y_{j+1} - y_f}{\Delta y} \right) \\ w_{i,j+1} &= \left(\frac{x_{i+1} - x_f}{\Delta x} \right) \left(\frac{y_f - y_j}{\Delta y} \right) \\ w_{i+1,j+1} &= \left(\frac{x_f - x_i}{\Delta x} \right) \left(\frac{y_f - y_j}{\Delta y} \right) \end{aligned} \quad (2.9)$$

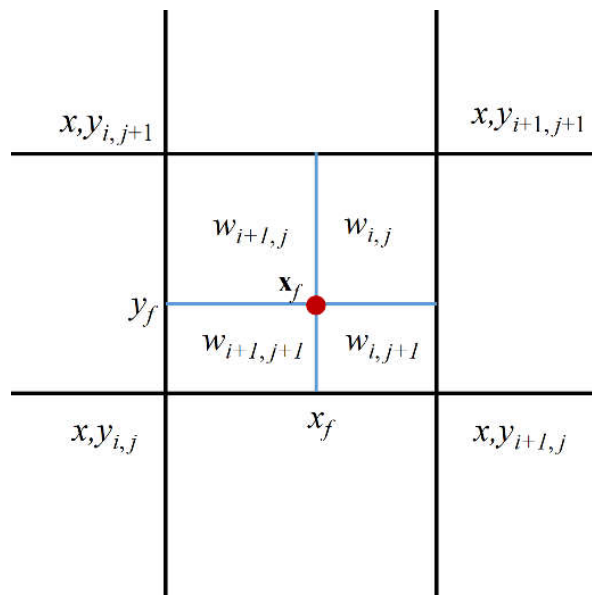
Trong đó, $x_i, x_{i+1}, y_j, y_{j+1}$ là tọa độ các điểm trên lưới cố định gần với điểm trên biên phân cách nhất (Hình 2.3); x_f, y_f là tọa độ của điểm trên biên phân cách. Hàm trọng số phải đảm bảo điều kiện sau:

$$\sum_{i,j=1}^{n_x, n_y} w(i, j) = 1 \quad (2.10)$$

Mặt khác ta có:

$$\nabla^2 I = \nabla \cdot (\nabla I) \quad (2.11)$$

Vế phải của phương trình (2.11) là đại lượng đã được xác định. Do vậy phương trình (2.11) có dạng phương trình Poisson. Phương trình này được giải bằng phương pháp lặp Successive Over-Relaxation (SOR) [39].



Hình 2.3 Xác định hàm trọng số.

2.2.3. Tính toán sức căng bề mặt

Trong phương trình bảo toàn động lượng [phương trình (2.1)], thành phần lực \mathbf{f} tạo bởi lực căng bề mặt của hạt chất lỏng. Thành phần lực này được tính trên biên phân cách giữa hai chất lỏng. Bởi vì biên phân cách được tạo nên bởi các phần tử biên (các đoạn nối với nhau) nên việc tính toán lực căng bề mặt của hạt chất lỏng được tính bằng tổng hợp lực trên từng phần tử biên. Xem xét bài toán hai chiều, một phần tử biên có điểm đầu và điểm cuối được kí hiệu lần lượt là 1 và 2 (Hình 2.4). Phần tử biên này được gộp bởi một nửa phần tử biên nối từ điểm d đến điểm e và một nửa của phần tử biên nối từ điểm e đến điểm f . Lực căng bề mặt của phần tử biên này được xác định như sau:

$$\delta \mathbf{f}_\sigma = \int_{\Delta s} \sigma \kappa \mathbf{n} ds \quad (2.12)$$

Trong đó, σ là hệ số sức căng bề mặt; κ là độ cong; và Δs là chiều dài của phần tử biên. Từ định nghĩa độ cong ta có:

$$\delta \mathbf{f}_\sigma = \int_{\Delta s} \sigma \kappa \mathbf{n} ds = \int_{\Delta s} \frac{\partial \sigma \mathbf{t}}{\partial s} ds = (\sigma \mathbf{t})_2 - (\sigma \mathbf{t})_1 \quad (2.13)$$

Trong đó, \mathbf{t}_1 và \mathbf{t}_2 là vector tiếp tuyến tại điểm đầu và điểm cuối của phần tử biên. Vector này được tính dựa trên tọa độ của các điểm d , e , và f . Vector tiếp tuyến đơn vị tại điểm 1 và điểm 2 được tính như sau:

$$\mathbf{t}_1 = \frac{\mathbf{x}_d - \mathbf{x}_e}{|\mathbf{x}_d - \mathbf{x}_e|}, \quad \mathbf{t}_2 = \frac{\mathbf{x}_e - \mathbf{x}_f}{|\mathbf{x}_e - \mathbf{x}_f|} \quad (2.14)$$

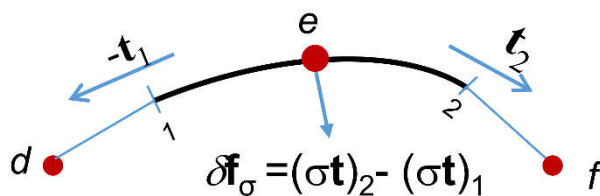
Trong đó, \mathbf{x}_d , \mathbf{x}_e , và \mathbf{x}_f lần lượt là vector tọa độ tại các điểm d , e , và f . Sau khi tính toán được lực căng bề mặt của một phần tử biên, thành phần lực này được nội suy đến các điểm trên lưới cố định. Để nội suy, ta có công thức sau:

$$\mathbf{f}_{i,j} = \sum \frac{\delta \mathbf{f}_\sigma w_{i,j}}{\Delta x \Delta y} \quad (2.15)$$

Trong đó, $\mathbf{f}_{i,j}$ là vector lực căng bề mặt tại các điểm trên lưới cố định.

2.2.4. Di chuyển biên phân cách

Khi hạt chất lỏng chịu tác động bởi ngoại lực, biên phân cách phải được di chuyển theo phương trình sau:



Hình 2.4 Phần tử biên tính toán lực căng bề mặt

$$\frac{d\mathbf{x}_f}{dt} = \mathbf{v}_f \quad (2.16)$$

Trong đó, \mathbf{v}_f là vector vận tốc của điểm trên biên phân cách. Rời rạc hóa phương trình trên ta được:

$$\mathbf{x}_f^{n+1} = \mathbf{x}_f^n + \Delta t \mathbf{v}_f^n \quad (2.17)$$

Trong đó, Δt là sai phân theo thời gian; \mathbf{x}_f^{n+1} là vector tọa độ của điểm trên biên phân cách sau khi di chuyển. Vận tốc của điểm trên biên phân cách được nội suy từ vận tốc tại các nút trên lưới cố định. Do đó, ta có:

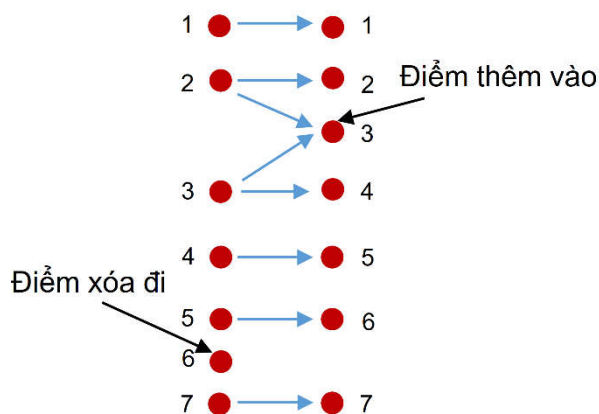
$$\mathbf{v}_f = \sum w_{i,j} \mathbf{u}_{i,j} \quad (2.18)$$

Trong đó, $\mathbf{u}_{i,j}$ là vector vận tốc tại các nút trên lưới cố định.

Do vận tốc của các điểm trên biên phân cách khác nhau nên khoảng cách giữa các điểm này thay đổi theo thời gian. Khi khoảng cách này càng lớn, kết quả tính toán sẽ thiếu chính xác. Ngược lại, khi khoảng cách càng nhỏ, khối lượng tính toán sẽ lớn. Vì vậy, để duy trì khoảng cách ở mức phù hợp, số điểm của biên phân cách trong một ô lưới cố định cần được duy trì ở mức hợp lý. Số điểm biên trên một ô lưới cố định được lấy từ 2-4 điểm. Việc thêm hoặc xóa điểm biên được mô tả ở Hình 2.5.

2.2.5. Mô hình toán thể hiện động lực học góc tiếp xúc giữa bề mặt rắn và hạt chất lỏng

Khi tương tác với bề mặt rắn dính ướt, hạt chất lỏng giãn ra và hình thành vùng diện tích dính ướt trên bề mặt rắn. Đã có nhiều nghiên cứu mô phỏng hiện tượng này [40,41]. Các nhóm tác giả đã cho thấy rằng nếu áp dụng điều kiện biên không trượt cho bề mặt rắn, hạt chất lỏng dừng lại ở một vị trí nào đó, bởi vì ứng suất cắt lớn xuất hiện tại điểm tiếp xúc giữa hạt chất lỏng và bề mặt rắn. Vì vậy, không thể áp dụng



Hình 2.5 Thêm và xóa điểm trên biên phân cách

điều kiện biên không trượt cho bề mặt rắn. Để mô phỏng tương tác của hạt chất lỏng với bề mặt rắn, chúng ta cần đưa vào một điều kiện biên phù hợp hoặc một mô hình góc tiếp xúc động giữa hạt chất lỏng và bề mặt rắn. Chen và cộng sự [42] đã sử dụng mô hình dính trượt để xử lý vấn đề này. Góc tiếp xúc của hạt chất lỏng với bề mặt rắn được xác định như sau:

$$\theta_D = \begin{cases} \theta_R & \text{với } V_{cl} < -V_{cl,max} \\ \theta_R + (\theta_A - \theta_R) \frac{V_{cl} + V_{cl,max}}{2V_{cl,max}} & \text{với } |V_{cl}| \leq V_{cl,max} \\ \theta_A & \text{với } V_{cl} > V_{cl,max} \end{cases} \quad (2.19)$$

Trong đó, V_{cl} là vận tốc đường tiếp xúc của hạt chất lỏng và bề mặt rắn; θ_D là góc tiếp xúc động; θ_R là góc co lại; và θ_A là góc giãn ra. Kistler [43] đã đề xuất mô hình góc tiếp xúc động dựa trên hàm thực nghiệm Hoffman (f_{Hoff}). Trong mô hình, góc tiếp xúc động của hạt chất lỏng với bề mặt rắn được xác định như sau:

$$\theta_D = f_{Hoff}(Ca + f_{Hoff}^{-1}(\theta_e)) \quad (2.20)$$

Trong đó Ca là số mao dẫn; $Ca = \mu V_{cl} / \sigma$; V_{cl} là vận tốc tại điểm tiếp xúc giữa hạt chất lỏng và bề mặt rắn. Hàm thực nghiệm Hoffman được xác định như sau:

$$f_{Hoff}(x) = \cos^{-1} \left\{ 1 - 2 \tanh \left[5,16 \left(\frac{x}{1 + 1,31x^{0,99}} \right)^{0,706} \right] \right\} \quad (2.21)$$

Tuy nhiên, mô hình này là chỉ đúng với số mao dẫn là nhỏ ($0,1 < Ca < 36$). Khi hạt chất lỏng tương tác với vận tốc lớn (số Ca lớn), Muradoglu và Tasoglu [44] đã sửa đổi mô hình của Kistler [43]: góc tiếp xúc động giữa hạt chất lỏng và bề mặt rắn được xác định thông qua góc tiếp xúc giả định, được tính như sau:

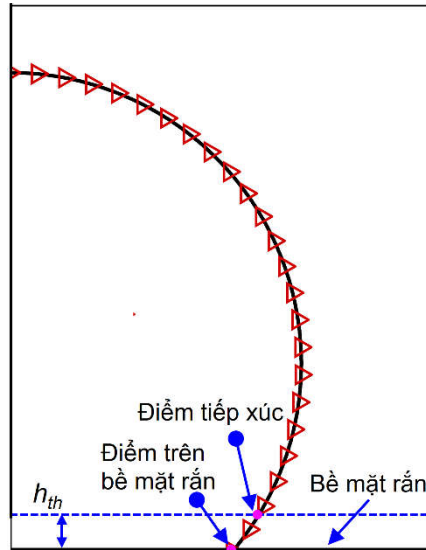
$$\theta_{Di} = f_{Hoff}(Ca_{clm} + f_{Hoff}^{-1}(\theta_e)) \quad (2.22)$$

Trong đó, Ca_{clm} là giá trị nhỏ nhất trong hai giá trị Ca và Ca_{max} ; Ca_{max} là giá trị hằng số cho trước; θ_{Di} là góc tiếp xúc giả định. Vận tốc điểm tiếp xúc (V_{cl}) là vận tốc của điểm trên biên phân cách, điểm này cách bề mặt rắn một khoảng là h_{th} (Hình 2.6). Giá trị của h_{th} thường được lấy bằng $2\Delta x$. Theo đó, góc tiếp xúc động sẽ được tính như sau:

$$\theta_D = \begin{cases} \theta_{Di} & \text{nếu } V_{cl} \geq 0 \\ 2\theta_e - \theta_{Di} & \text{nếu } V_{cl} < 0 \end{cases} \quad (2.23)$$

Các nhóm tác giả khác cũng đưa ra các mô hình góc tiếp xúc khác nhau. Ví dụ, Jiang và cộng sự [45] đã đưa ra mô hình góc tiếp xúc như sau:

$$\frac{\cos(\theta_e) - \cos(\theta_D)}{\cos(\theta_e) + 1} = \tanh(4,96Ca^{0,702}) \quad (2.24)$$



Hình 2.6 Mô tả các tham số trong mô hình góc tiếp xúc động của hạt chất lỏng với bề mặt rắn

Shin và cộng sự [46] đã đưa ra công thức xác định vận tốc tại điểm tiếp xúc giữa hạt chất lỏng và bề mặt rắn như sau:

$$V_{cl} = \lambda \frac{\partial u}{\partial n} \quad (2.25)$$

Trong đó, λ là hệ số trượt; $\partial u / \partial n$ là ứng suất cắt trên bề mặt rắn. Sức căng bề mặt tại điểm tiếp xúc được tính bằng cách kéo dài phần tử biên tiếp xúc với bề mặt rắn. Góc kéo dài được tính như sau:

$$\begin{cases} \theta_{ext} = \theta_A & \text{nếu } \theta_D > \theta_A \\ \theta_{ext} = \theta_R & \text{nếu } \theta_D < \theta_R \\ \theta_{ext} = \theta_D & \text{nếu } \theta_A < \theta_{ext} < \theta_R \end{cases} \quad (2.26)$$

Trong đó: θ_{ext} là góc kéo dài. Yokoi và cộng sự [47] đã đưa ra mô hình góc tiếp xúc như sau:

$$Ca = k(\theta_D - \theta_e)^3 \quad (2.27)$$

Trong đó, k là hằng số được đưa ra từ thực nghiệm. Góc tiếp xúc động được xác định như sau:

$$\theta_D(V_{cl}) = \begin{cases} \theta_{mda} & \text{nếu } V_{cl} > 0 \\ \theta_{mdr} & \text{nếu } V_{cl} < 0 \end{cases} \quad (2.28)$$

Trong đó: θ_{mda} , θ_{mdr} là các góc cho trước. Do đó, gộp phương trình (2.27) và (2.28) ta được:

$$\theta_D(V_{cl}) = \begin{cases} \min \left[\theta_e + \left(\frac{Ca}{k_a} \right)^{1/3}, \theta_{mda} \right] \\ \max \left[\theta_e + \left(\frac{Ca}{k_r} \right)^{1/3}, \theta_{mdr} \right] \end{cases} \quad (2.29)$$

Trong đó: k_a, k_r lần lượt là các hằng số tương ứng cho quá trình giãn ra và co lại. Các hằng số này được xác định từ thực nghiệm.

Cho đến nay, đã có nhiều mô hình góc tiếp xúc được đưa ra, các mô hình đều có thể mô phỏng được quá trình tương tác của hạt chất lỏng với bề mặt rắn. Mỗi mô hình đều có những ưu và nhược điểm khác nhau. Một trong những mô hình thường được sử dụng đó là mô hình được đề xuất bởi Muradoglu và Tasoglu [44]. Trong luận án này, mô hình góc tiếp xúc được đề xuất bởi Muradoglu và Tasoglu [44] đã được sử dụng.

2.3. PHƯƠNG PHÁP GIẢI VÀ LƯỢC ĐỒ GIẢI

Đầu tiên là phương trình bảo toàn động lượng [phương trình 2.1], phương trình này được giải bằng phương pháp tách biến [37]. Giả sử, tại thời điểm t tương ứng với bước thời gian n , giá trị của các đại lượng trong phương trình đều biết. Rồi rạc hóa phương trình (2.1) bằng cách sử dụng lược đồ tiến bậc một theo thời gian ta được:

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -\mathbf{A}_h^n + \frac{1}{\rho^n} (-\nabla_h p + \mathbf{D}_h^n + \mathbf{f}^n) + \mathbf{g}^n \quad (2.30)$$

Trong đó, Δt là bước thời gian tính toán; chỉ số trên n và $n+1$ thể hiện rằng đại lượng được tính toán ở bước thứ n và $n+1$; \mathbf{A}_h và \mathbf{D}_h lần lượt là các xấp xỉ của các đại lượng đối lưu và đại lượng khuếch tán; ∇_h là xấp xỉ của toán tử gradient. Trước tiên, chúng ta bỏ qua thành phần áp suất ở phương trình (2.30) ta được:

$$\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -\mathbf{A}_h^n + \frac{1}{\rho^n} (\mathbf{D}_h^n + \mathbf{f}^n) + \mathbf{g}^n \quad (2.31)$$

Trong đó, \mathbf{u}^* là vận tốc trung gian. Sau đó, chúng ta thêm ảnh hưởng của thành phần áp suất:

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho_h} \nabla_h p \quad (2.32)$$

Khi cộng phương trình (2.31) và (2.32) ta được phương trình (2.30). Để tìm thành phần áp suất, chúng ta lấy toán tử div hai vế của phương trình (2.32) và sử dụng phương trình liên tục ($\nabla_h \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0$) ta được:

$$\frac{\nabla_h \cdot \mathbf{u}^*}{\Delta t} = \nabla_h \cdot \left(\frac{1}{\rho^n} \nabla_h p \right) \quad (2.33)$$

Giải phương trình (2.33) ta được giá trị của áp suất tại bước thứ n . Sau khi có được giá trị của áp suất, thay giá trị đó vào phương trình (2.32) ta có được vận tốc tại thời điểm cần tính (\mathbf{u}^{n+1}).

2.3.1. Rời rạc hóa thành phần khuếch tán và thành phần đối lưu

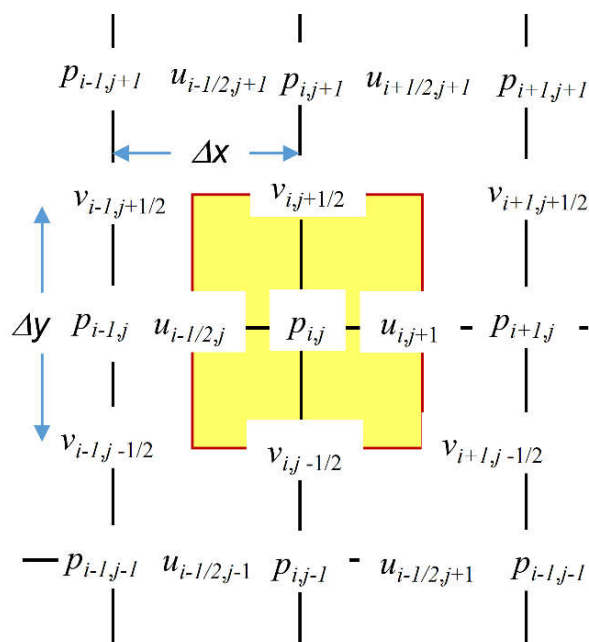
Xem xét bài toán 2 chiều trên tọa độ Đề các (Hình 2.1), lưới được sử dụng là lưới so le. Các đại lượng như áp suất, độ nhớt, khối lượng riêng của chất lỏng được lưu trữ tại các nút có tọa độ (i, j) (Hình 2.7). Vận tốc theo phương ngang (u) được lưu trữ tại các điểm nút bên cạnh (bên trái và bên phải), cách một khoảng là $0,5\Delta x$ (Hình 2.8b). Vận tốc theo phương dọc (v) nằm bên trên và bên dưới, cách một đoạn là $0,5\Delta y$ (Hình 2.8a). Cách sắp xếp này giúp việc xấp xỉ hóa đơn giản và dễ dàng hơn. Phương trình (2.31) được xấp xỉ hóa tại nút như sau:

$$u_{i+1/2,j}^* = u_{i+1/2,j}^n + \Delta t \left\{ (-A_x)_{i+1/2,j}^n + (f_x)_{i+1/2,j}^n + \frac{2}{\rho_{i+1,j}^n + \rho_{i,j}^n} (D_x)_{i+1/2,j}^n \right\} \quad (2.34)$$

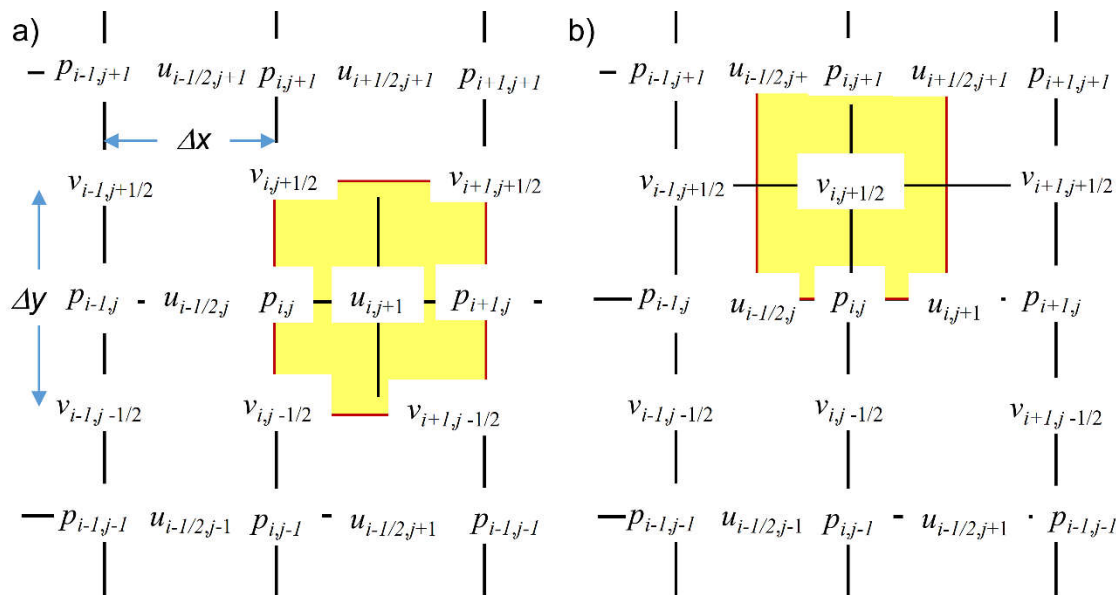
$$v_{i,j+1/2}^* = v_{i,j+1/2}^n + \Delta t \left\{ (-A_y)_{i,j+1/2}^n + (f_y)_{i,j+1/2}^n + \frac{2}{\rho_{i,j+1}^n + \rho_{i,j}^n} (D_y)_{i,j+1/2}^n \right\} + g \quad (2.35)$$

Phương trình (2.32) được xấp xỉ hóa như sau:

$$u_{i+1/2,j}^{n+1} = u_{i+1/2,j}^* - \frac{2\Delta t}{\rho_{i+1,j}^n + \rho_{i,j}^n} \frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{\Delta x} \quad (2.36)$$



Hình 2.7 Lưới lưu trữ áp suất, độ nhớt, khối lượng riêng của chất lỏng



Hình 2.8 Lưới lưu trữ vận tốc. a) Vận tốc theo phương ngang (u). b) Vận tốc theo phương dọc (v)

$$v_{i,j+1/2}^{n+1} = u_{i,j+1/2}^* - \frac{2\Delta t}{\rho_{i,j+1}^n + \rho_{i,j}^n} \frac{p_{i,j+1} - p_{i,j}}{\Delta y} \quad (2.37)$$

Các thành phần đối lưu và thành phần khuếch tán được xấp xỉ hóa bằng sai phân trung gian và sai phân tiến theo phương x và phương y . Ta được kết quả như sau:

$$\begin{aligned} (A_x^n)_{i+1/2,j} &= \frac{1}{\Delta x} \left[0,25(u_{i+3/2,j}^n + u_{i+1/2,j}^n)^2 - 0,25(u_{i+1/2,j}^n - u_{i-1/2,j}^n)^2 \right] \\ &+ \frac{1}{\Delta y} \left[0,25(u_{i+1/2,j+1}^n + u_{i+1/2,j}^n)(v_{i+1,j+1/2}^n + v_{i,j+1/2}^n) \right] \\ &- \frac{1}{\Delta y} \left[0,25(u_{i+1/2,j}^n + u_{i+1/2,j-1}^n)(v_{i+1,j-1/2}^n + v_{i,j-1/2}^n) \right] \end{aligned} \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned} (A_y^n)_{i,j+1/2} &= \frac{1}{\Delta x} \left[0,25(u_{i+1/2,j}^n + u_{i+1/2,j+1}^n)(v_{i,j+1/2}^n + v_{i+1,j+1/2}^n) \right] \\ &- \frac{1}{\Delta x} \left[0,25(u_{i-1/2,j+1}^n + u_{i-1/2,j}^n)(v_{i,j+1/2}^n + v_{i-1,j+1/2}^n) \right] \\ &+ \frac{1}{\Delta y} \left[0,25(v_{i,j+3/2}^n + v_{i,j+1/2}^n)^2 - (v_{i,j+1/2}^n + v_{i,j-1/2}^n)^2 \right] \end{aligned} \quad (2.39)$$

$$\begin{aligned}
(D_x)_{i+1/2,j}^n &= \left[2\mu_{i+1,j}^n \frac{(u_{i+3/2,j}^n + u_{i+1/2,j}^n)}{\Delta x} - 2\mu_{i,j}^n \frac{(u_{i+1/2,j}^n - u_{i-1/2,j}^n)}{\Delta x} \right] \\
&+ \left[\mu_{i+1/2,j+1/2}^n \frac{(u_{i+1/2,j+1}^n + u_{i+1/2,j}^n)}{\Delta y} + \frac{(v_{i+1,j+1/2}^n + v_{i,j+1/2}^n)}{\Delta x} \right] \\
&- \mu_{i+1/2,j-1/2}^n \left[\frac{(u_{i+1/2,j}^n + u_{i+1/2,j-1}^n)}{\Delta y} + \frac{(v_{i+1,j-1/2}^n + v_{i,j-1/2}^n)}{\Delta x} \right]
\end{aligned} \tag{2.40}$$

Trong đó:

$$\mu_{i-1/2,j+1/2} = 0,25(\mu_{i-1,j} + \mu_{i,j} + \mu_{i-1,j+1} + \mu_{i,j+1}) \tag{2.41}$$

$$\mu_{i+1/2,j-1/2} = 0,25(\mu_{i,j} + \mu_{i+1,j} + \mu_{i,j-1} + \mu_{i+1,j-1}) \tag{2.42}$$

$$\mu_{i+1/2,j+1/2} = 0,25(\mu_{i,j} + \mu_{i+1,j} + \mu_{i,j+1} + \mu_{i+1,j+1}) \tag{2.43}$$

Xấp xỉ hóa phương trình áp suất (phương trình (2.32)) ta được:

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2\Delta t} \left(\frac{u_{i+1/2,j}^* - u_{i-1/2,j}^*}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+1/2}^* - v_{i,j-1/2}^*}{\Delta y} \right) = \\
&\frac{1}{\Delta x^2} \left(\frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{\rho_{i+1,j}^n + \rho_{i,j}^n} - \frac{p_{i,j} - p_{i-1,j}}{\rho_{i,j}^n + \rho_{i-1,j}^n} \right) + \frac{1}{\Delta y^2} \left(\frac{p_{i,j+1} - p_{i,j}}{\rho_{i,j+1}^n + \rho_{i,j}^n} - \frac{p_{i,j} - p_{i,j-1}}{\rho_{i,j}^n + \rho_{i,j-1}^n} \right)
\end{aligned} \tag{2.44}$$

Phương trình (2.44) là dạng sai phân của phương trình Poisson với ẩn là đại lượng áp suất. Vế trái của phương trình này đã được xác định. Phương trình này được giải bằng pháp phương pháp lặp SOR [39].

Đối với việc xấp xỉ hóa bằng các lược đồ tường minh, các bước thời gian phải đủ nhỏ để nghiệm có thể hội tụ. Do đó, bước thời gian cần đáp ứng các điều kiện sau [48]:

$$\frac{\mu\Delta t}{\rho h^2} \leq \frac{1}{4} \tag{2.45}$$

$$(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}) \frac{\rho\Delta t}{\mu} \leq 2 \tag{2.46}$$

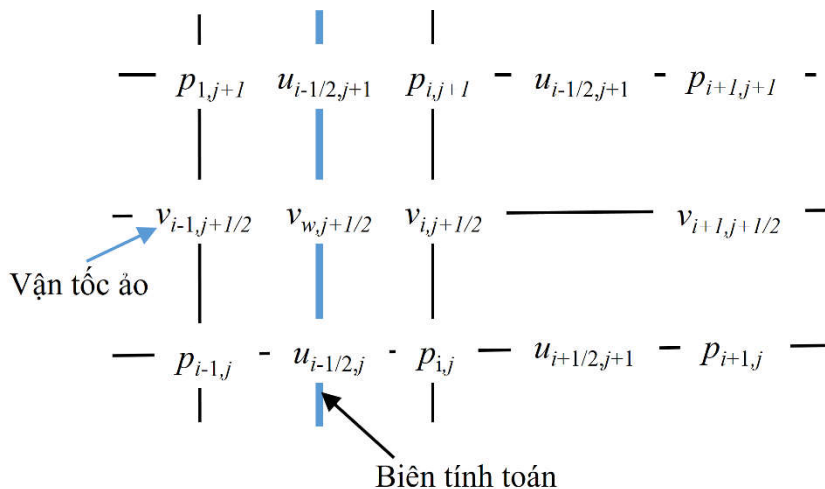
Trong đó, h là giá trị nhỏ nhất trong hai đại lượng Δx và Δy .

2.3.2. Điều kiện biên cho vận tốc

Xem xét biên tính toán được thể hiện ở Hình 2.9, vận tốc trên biên $v_{w,j+1/2}$ là biết trước. Để thuận tiện cho việc tính toán, chúng ta thêm vận tốc ảo $v_{i-1,j+1/2}$. Nếu biên tính toán là biên không trượt, vận tốc ảo này được tính như sau:

$$v_{i-1,j+1/2} = 2v_{w,j+1/2} - v_{i,j+1/2} \tag{2.47}$$

Trong đó, v_w là vận tốc trên biên tính toán.



Hình 2.9 Điều kiện biên cho thành phần vận tốc tiếp tuyến

Nếu biên tính toán là biên trượt, vận tốc ảo này được xác định như sau:

$$v_{i-1,j+1/2} = v_{i,j+1/2} \quad (2.48)$$

2.3.3. Xấp xỉ hóa phương trình năng lượng

Giả thiết rằng khối lượng riêng của từng chất lỏng không thay đổi. Do đó, phương trình cân bằng nhiệt được viết như sau:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p \mathbf{u} \cdot \nabla T = k \nabla^2 T \quad (2.49)$$

Giả sử rằng nhiệt độ tại thời điểm t và bước tính toán n đã biết. Xem xét bài toán hai chiều, nhiệt độ được lưu trữ trên lưới tương tự như đối với áp suất (Hình 2.11). Phương trình (2.49) được xấp xỉ hóa theo lược đồ tường minh như sau:

$$\frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} + \mathbf{u}^n \cdot \nabla_h T^n = \alpha \nabla_h^2 T^n \quad (2.50)$$

Trong đó, α là độ khuếch tán nhiệt. Nhiệt độ tại bước tính toán $n + 1$ được xác định như sau:

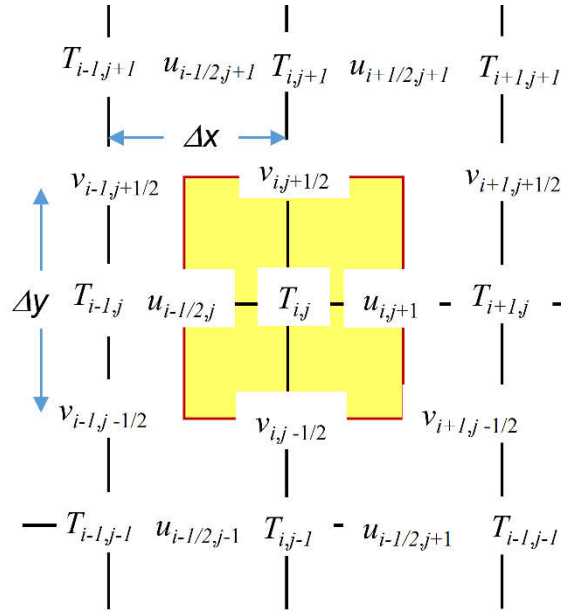
$$T^{n+1} = T^n + \Delta t \left(-\mathbf{u}^n \cdot \nabla_h T^n + \alpha \nabla_h^2 T^n \right) \quad (2.51)$$

Các đại lượng bên vế phải của phương trình (2.51) được xấp xỉ hóa như sau:

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla_h T)_{i,j} = u_{i,j} \frac{T_{i+1,j} - T_{i-1,j}}{2\Delta x} + v_{i,j} \frac{T_{i,j+1} - T_{i,j-1}}{2\Delta y} \quad (2.52)$$

$$(\alpha \nabla_h^2 T)_{i,j} = \alpha \left[u_{i,j} \frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} - T_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + v_{i,j} \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} - T_{i,j-1}}{(\Delta y)^2} \right] \quad (2.53)$$

Trong đó:



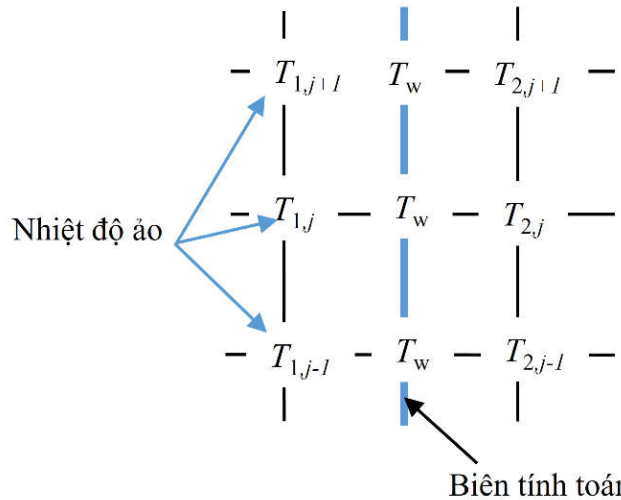
Hình 2.11 Lưới lưu trữ đại lượng nhiệt độ

$$u_{i,j} = \frac{u_{i+1/2,j} + u_{i-1/2,j}}{2}, \quad v_{i,j} = \frac{v_{i,j+1/2} + v_{i,j-1/2}}{2} \tag{2.54}$$

2.3.4. Điều kiện biên cho nhiệt độ

Điều kiện biên nhiệt được áp dụng là điều kiện biên Dirichlet. Nhiệt độ tại biên tính toán T_w đã biết. Nhiệt độ ảo ($T_{1,j}$) được thêm để tạo thuận lợi cho việc tính toán (Hình 2.10), nhiệt độ này nằm ngoài miền tính toán. Nhiệt độ ảo này được lưu trữ tại nút đối xứng với nút đầu tiên và gần biên tính toán nhất ($T_{2,j}$). Nhiệt độ ảo này sẽ được xác định như sau:

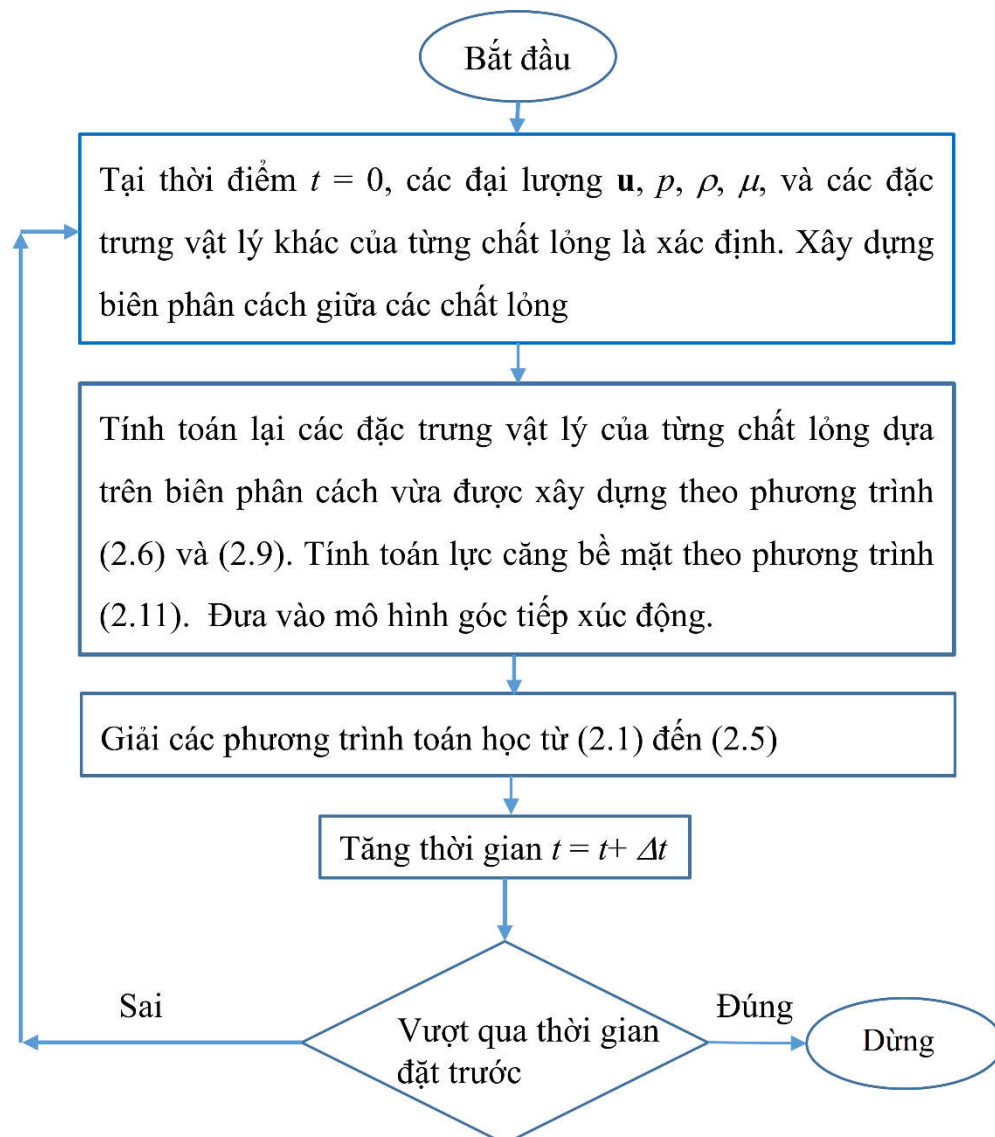
$$T_{2,j} = 2T_w - T_{1,j} \tag{2.55}$$



Hình 2.10 Điều kiện biên nhiệt với biên là tường rắn

2.3.5. Lược đồ giải

Lược đồ giải tổng quát được đưa ra ở *Hình 2.12*. Tại thời điểm ban đầu $t = 0$, các đại lượng như \mathbf{u} , p , và T , và các đặc trưng vật lý của các chất lỏng như ρ , μ , và σ là biết trước. Bước tiếp theo là xây dựng biên phân cách giữa các chất lỏng. Sau khi xây dựng biên phân cách, các đặc trưng vật lý của từng chất lỏng được tính toán dựa trên phương trình hàm chỉ thị (phương trình (2.6) và phương trình (2.11)). Sức căng bề mặt được tính theo phương trình (2.13). Tiếp theo, chúng ta giải các phương trình toán học (2.1) đến phương trình (2.5), xử lý góc tiếp xúc giữa hạt chất lỏng và bề mặt rắn. Chúng ta tăng thời gian tính toán, nếu thời gian tính toán nhỏ hơn thời gian đặt trước và quay lại bước ba (tính toán các đặc trưng vật lý cùng từng chất lỏng). Ngược lại, chúng ta kết thúc chương trình.



Hình 2.12 Lược đồ giải bài toán tương tác của hạt chất lỏng với bề mặt rắn dưới tác động của mao dẫn nhiệt

Ngoài phương pháp theo dấu biên, bài toán đặt ra có thể giải bằng các phương pháp khác như phương pháp thể tích chất lỏng (VOF), hoặc phương pháp Level set (LS). Điểm chung của các phương pháp này là đều sử dụng các phương trình cơ bản của dòng chất lỏng một pha. Đối với phương pháp thể tích chất lỏng và phương pháp Level set, biên phân cách giữa các chất lỏng được tìm thông qua các hàm toán học. Vì vậy, các phương pháp này có ưu điểm là dễ dàng chuyển sang mô hình ba chiều. Việc hợp lại hoặc tách thành nhiều hạt chất lỏng cũng dễ dàng xử lý hơn phương pháp theo dấu biên, tuy nhiên việc tìm biên và tính toán đặc trưng vật lý của từng chất lỏng là phức tạp.

Đối với phương pháp theo dấu biên, biên phân cách giữa các chất lỏng được xây dựng dựa trên cơ sở hình học. Ví dụ, biên phân cách của hạt chất lỏng (hình dạng ban đầu là hình tròn) và chất lỏng khác được xây dựng từ các điểm. Các điểm này tạo nên một hình tròn. Ưu điểm của phương pháp theo dấu biên đó là dễ dàng mô phỏng bài toán hạt chất lỏng có nhiều lớp. Tuy nhiên, việc xây dựng mô hình ba chiều là phức tạp.

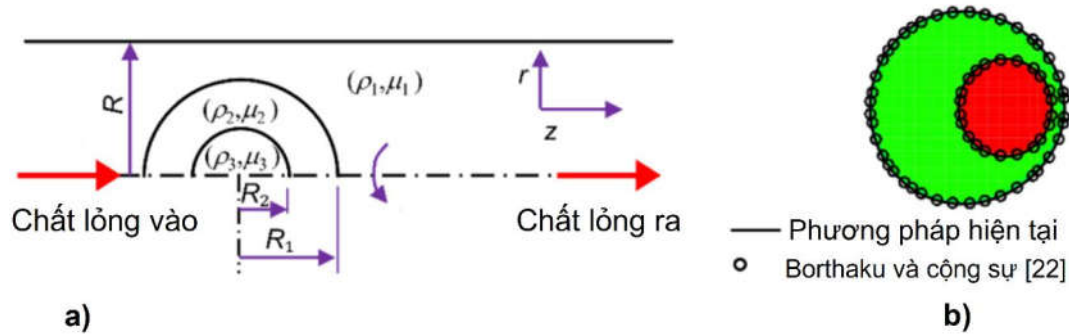
Như vậy, luận án đã trình bày phương pháp mô phỏng bài toán tương tác của hạt chất lỏng với bề mặt rắn dưới tác động của mao dẫn nhiệt. Độ chính xác và tin cậy của phương pháp cần được kiểm chứng. Việc kiểm chứng được trình bày ở các mục tiếp theo.

2.4. NHẬN XÉT VỀ KẾT QUẢ ĐẠT ĐƯỢC

Luận án đã sử dụng các hệ phương trình và lời giải được trình bày ở bên trên để mô phỏng lại và so sánh với các nghiên cứu đã được công bố có liên quan đến đề tài của luận án. Các nghiên cứu đã được công bố này chủ yếu là về hạt chất lỏng đơn lớp hoặc hạt chất lỏng đa lớp với bài toán gần với bài toán mà luận án đã đặt ra. Đối với các bài toán được đưa ra trong luận án của NCS, các kết quả đã được công bố trên các tạp chí quốc tế uy tín về ngành cơ học chất lỏng. Điều này cho thấy rằng phương pháp mà NCS sử dụng có độ chính xác và độ tin cậy cao. Các kết quả so sánh với các nghiên cứu đã được công bố được trình bày ở mục tiếp theo.

2.4.1. Hạt chất lỏng hai lớp di chuyển trong kênh dẫn thẳng (tương tác dạng cản trở)

Tương tác của hạt chất lỏng với bề mặt rắn dưới dạng cản trở trong luận án được thể hiện trong bài toán hạt chất lỏng đa lớp di chuyển trong kênh dẫn thẳng có dạng hình sin. Việc kiểm chứng tính chính xác của phương pháp mô phỏng được thực hiện thông qua việc so sánh hình dạng của hạt chất lỏng đa lớp di chuyển bên trong một kênh dẫn thẳng. Kết quả mô phỏng được so sánh với kết quả được đưa ra bởi



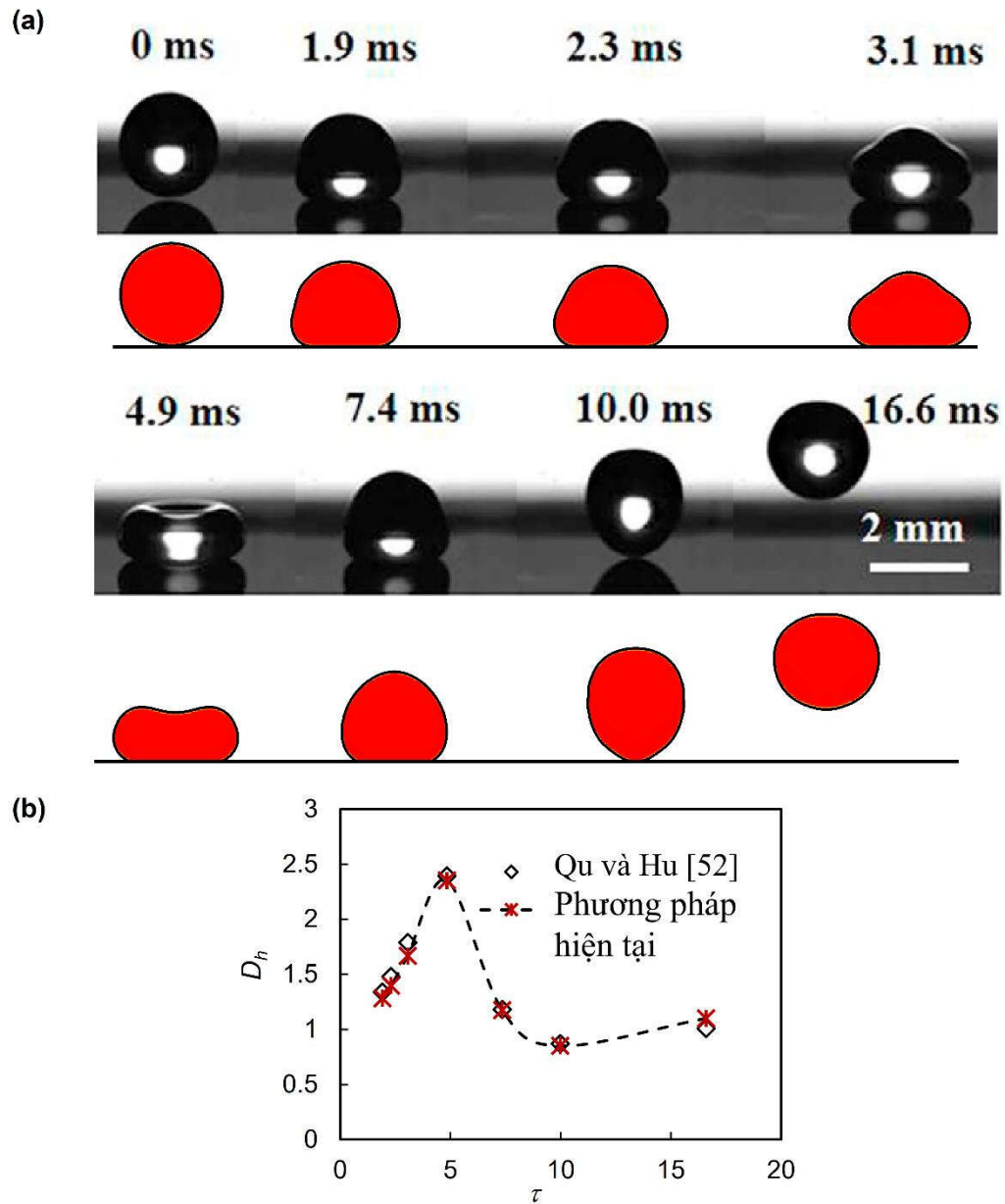
Hình 2.13 Kết quả kiểm chứng độ chính xác của phương pháp số. a) Cấu tạo của kênh dẫn. b) So sánh kết quả tính toán bằng phương pháp hiện tại và kết quả của Borthakur và cộng sự [23]

Borthakur và cộng sự [23] (Hình 2.13). Kết quả so sánh cho thấy rằng phương pháp mô phỏng có thể cho chính xác hình dạng của hạt chất lỏng đa lớp tại một thời điểm bất kì khi di chuyển trong kênh dẫn thẳng. (Hình 2.13b). Điều này cho thấy rằng phương pháp mô phỏng được sử dụng có độ chính xác cũng như độ tin cậy cao.

2.4.2. Hạt chất lỏng tương tác trực tiếp với bề mặt rắn

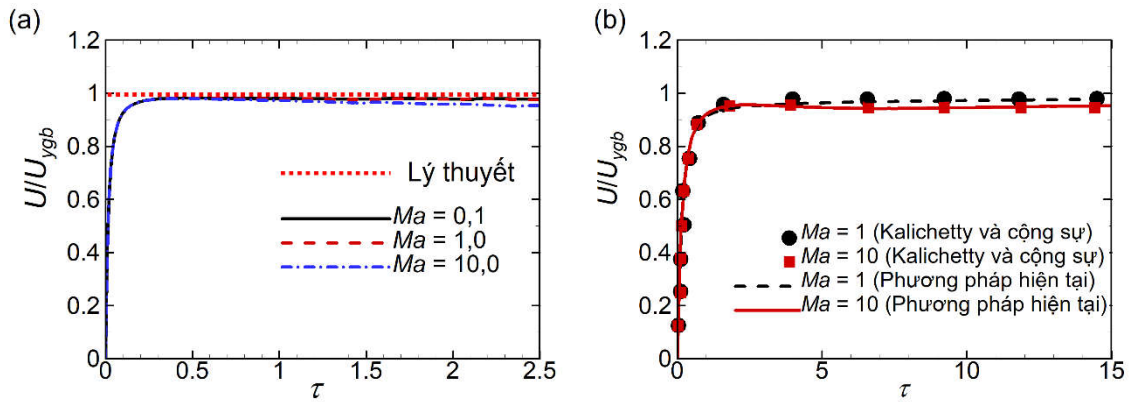
Bài toán tiếp theo mà luận án đưa ra là tương tác của hạt chất lỏng đa lớp với bề mặt rắn không dính ướt có sự ảnh hưởng của mao dẫn nhiệt. Tính chính xác của phương pháp mô phỏng được thể hiện thông qua việc so sánh kết quả được mô phỏng với thực nghiệm được đưa ra bởi Wu và Hu [49] (Hình 2.14). Hình dạng của hạt chất lỏng đơn lớp tại các thời điểm khác nhau là tương đồng với thực nghiệm đưa ra (Hình 2.14a). Ngoài ra, luận án đã so sánh tỷ lệ hình dạng (D_h) của hạt chất lỏng trong quá trình tương tác với bề mặt rắn (Hình 2.14b). Tỷ lệ hình dạng này được định nghĩa là tỷ lệ giữa chiều cao lớn nhất của hạt chất lỏng trên chiều rộng lớn nhất. Kết quả cho thấy rằng mô phỏng là tương đồng so với thực nghiệm. Dựa trên kết quả so sánh này, phương pháp số được đưa ra là hoàn toàn tin cậy để mô phỏng sự tương tác của hạt chất lỏng và bề mặt rắn không dính ướt.

Bởi vì đề tài trong luận án có liên quan đến hiện tượng mao dẫn nhiệt nên luận án kiểm đã chứng độ chính xác của phương pháp số bằng việc so sánh kết quả mô phỏng với kết quả đã được công bố có liên quan đến hiện tượng này [50,51] (Hình 2.15). Young và cộng sự [50] đã đưa ra tính toán lý thuyết giá trị vận tốc ổn định của một hạt chất lỏng đơn lớp trong một ống mao dẫn hình trụ tròn dưới sự tác động của gradient nhiệt độ được đặt theo phương thẳng đứng (đường nét đứt ở Hình 2.15a). Kết quả so sánh cho thấy rằng vận tốc của hạt chất lỏng với các giá trị Ma khác nhau ($Ma = 0,1, 1,0, \text{ và } 10,0$) đều tiến tới giá trị ổn định được đưa ra ở Young và cộng sự [50].



Hình 2.14 Kiểm chứng tính chính xác của phương pháp. a) So sánh về hình dạng của hạt chất lỏng tại các thời điểm khác nhau. b) So sánh giá trị tỷ lệ hình dạng của hạt chất lỏng. Ở hình Hình 2.14a, kết quả thực nghiệm bởi Qu và Hu [49] được thể hiện ở phía trên, kết quả mô phỏng được thể hiện ở phía dưới

Ở Hình 2.15b, Kalichetty và cộng sự [51] đã đưa ra đồ thị thể hiện sự biến thiên vận tốc theo thời gian của một hạt chất lỏng đơn lớp dưới sự tác động của mao dẫn nhiệt trong không gian hẹp. NCS đã thực hiện mô phỏng với các giá trị tham số giống như Kalichetty và cộng sự [51] đã đưa ra. Kết quả mô phỏng được đưa trong luận án là tương đồng với kết quả của Kalichetty và cộng sự [51] (Hình 2.15b). Từ các kết quả của kiểm nghiệm (Hình 2.14 và Hình 2.15), phương pháp mô phỏng mà



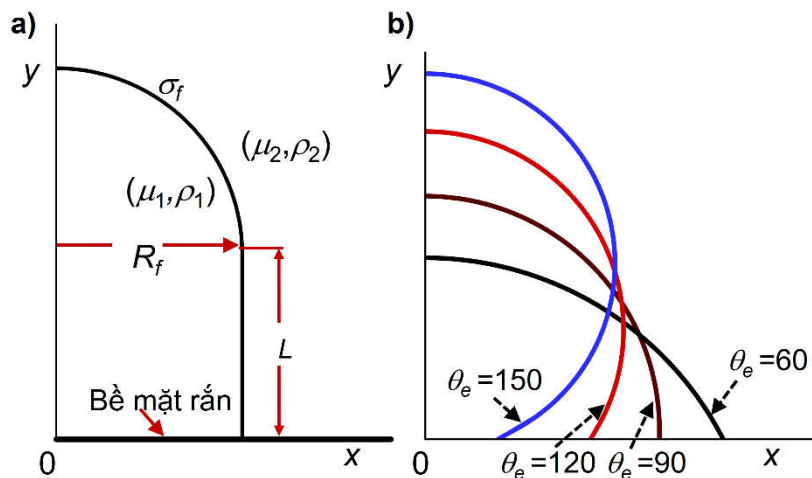
Hình 2.15 Kiểm chứng độ chính xác của phương pháp. a) So sánh với kết quả đưa ra bởi Young và cộng sự [50]. b) So sánh với kết quả đã đưa ra bởi Kalichetty và cộng sự [51]

luyện án sử dụng hoàn toàn tin cậy để mô phỏng bài toán tương tác của hạt chất lỏng đa lớp với bề mặt rắn không dính ướt có tính đến ảnh hưởng của mao dẫn nhiệt.

Bài toán thứ ba được đưa ra trong luận án có sự tương tác trực tiếp của hạt chất lỏng đa lớp với bề mặt rắn dính ướt. Khác với bài toán trước, bề mặt rắn trong bài toán hiện tại là dính ướt. Vì vậy, phương pháp mô phỏng số cần kiểm chứng được các điều kiện sau:

- Trạng thái tĩnh của hạt chất lỏng đơn lớp: khi không chịu tác động từ ngoại lực, hạt chất lỏng tương tác với bề mặt rắn và sau đó đạt trạng thái tĩnh.
- Quá trình tương tác của hạt chất lỏng đơn lớp và bề mặt rắn: điều kiện này thường được kiểm chứng thông qua việc so sánh giá trị bán kính dính ướt của hạt chất lỏng đơn lớp trong quá trình tương tác.

Để kiểm chứng điều kiện thứ nhất, luận án đã thực hiện mô phỏng tương tác của hạt chất lỏng đơn lớp với một bề mặt rắn dính ướt. Hạt chất lỏng ban đầu có hình



Hình 2.16 Kết quả mô phỏng kiểm tra trạng thái tĩnh của hạt chất lỏng đơn lớp trên bề mặt rắn

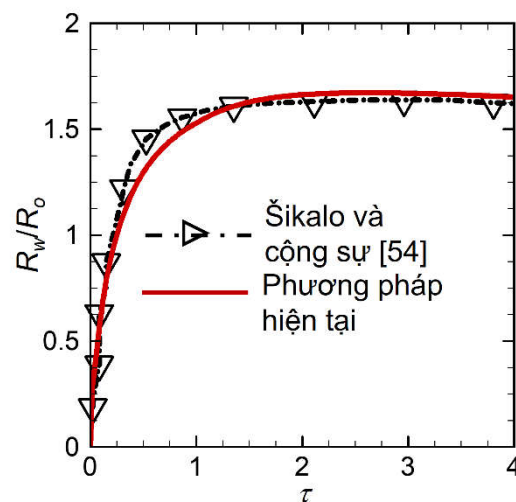
dạng giống như một sợi chất lỏng (*Hình 2.16*), xung quanh hạt chất lỏng đơn lớp là một chất lỏng khác. Bài toán được mô phỏng với các tham số không thứ nguyên như sau: số Ohnesorge $Oh = 0,2$, $A_r = L/R_f$, $\rho_2/\rho_1 = 1,0$, và $\mu_2/\mu_1 = 1,0$. Các góc tiếp xúc tĩnh (θ_e) được kiểm tra lần lượt là: 60° , 90° , 120° , 150° (*Hình 2.16*).

Kết quả cho thấy rằng hạt chất lỏng có thể đạt trạng thái tĩnh với góc tiếp xúc tĩnh được đặt trước, mặc dù kết quả mô phỏng còn có sai số (với sai số lớn nhất là 1,3%). Tuy nhiên, bài toán đưa ra là phức tạp và giá trị góc tiếp xúc phụ thuộc vào độ phân giải của lưới. Vì vậy, sai số này là có thể chấp nhận được.

Đối với điều kiện thứ hai, luận án đã thực hiện kiểm chứng tính chính xác của phương pháp mô phỏng thông qua việc so sánh bán kính dính ướt của một hạt chất lỏng đơn lớp tương tác với bề mặt rắn với các kết quả của thực nghiệm của Šikalo và cộng sự [52]. Bài toán kiểm nghiệm là một hạt chất lỏng đơn lớp tương tác với một bề mặt rắn dạng sấp (với góc tiếp xúc tĩnh là 93°). Kết quả của việc so sánh được thể hiện ở *Hình 2.17*. Kết quả cho thấy rằng sự biến thiên của bán kính dính ướt được đưa ra bởi phương pháp hiện tại và thực nghiệm của Šikalo và cộng sự là tương đồng. Vì vậy, phương pháp mô phỏng được sử dụng trong luận án là tin cậy để mô phỏng được quá trình một hạt chất lỏng tương tác với bề mặt rắn dính ướt.

2.5. KẾT LUẬN CHƯƠNG 2

Chương này đã đưa ra hệ phương trình toán học của bài toán đặt ra như phương trình bảo toàn động lượng (phương trình Navier-Stokes), phương trình bảo toàn khối lượng, phương trình năng lượng, và các giả thiết đóng kín. Ngoài ra, chi tiết về phương pháp giải các phương trình toán học cũng như phương pháp theo dấu biên



Hình 2.17 Kiểm nghiệm tính chính xác của phương pháp mô phỏng. Kết quả so sánh bán kính dính ướt của hạt chất lỏng theo thời gian, tham số không thứ nguyên bao gồm $Re = 36$, $We = 93$, $Eo = 0,285$

dùng để phân biệt các miền chất lỏng cũng được đề cập. Độ chính xác của phương pháp mô phỏng được kiểm chứng thông qua việc mô phỏng lại và so sánh kết quả thu được với các nghiên cứu đã được công bố trên các tạp chí quốc tế uy tín.

Chương 3. MÔ PHỎNG TƯƠNG TÁC CỦA HẠT CHẤT LỎNG ĐA LỚP VỚI BIÊN DẠNG CỦA KÊNH DẪN THẮT LẠI TRONG ĐIỀU KIỆN ĐẲNG NHIỆT

Chương 1 đã chỉ ra rằng tương tác của hạt chất lỏng và bề mặt rắn được chia thành hai loại: tương tác trực tiếp và tương tác dạng cản trở. Tương tác dạng cản trở được thể hiện trong bài toán hạt chất lỏng di chuyển bên trong và tương tác với biên dạng của kênh dẫn dẫn thắt lại. **Chương 1** cũng chỉ ra rằng hạt chất lỏng có thể bị biến dạng, tách thành nhiều hạt khác nhau, hoặc bị tắc lại ở phía trước của phần thắt lại. Các nghiên cứu chủ yếu về hạt chất lỏng đơn lớp, nghiên cứu về hạt đa lớp là hoàn toàn chưa có.

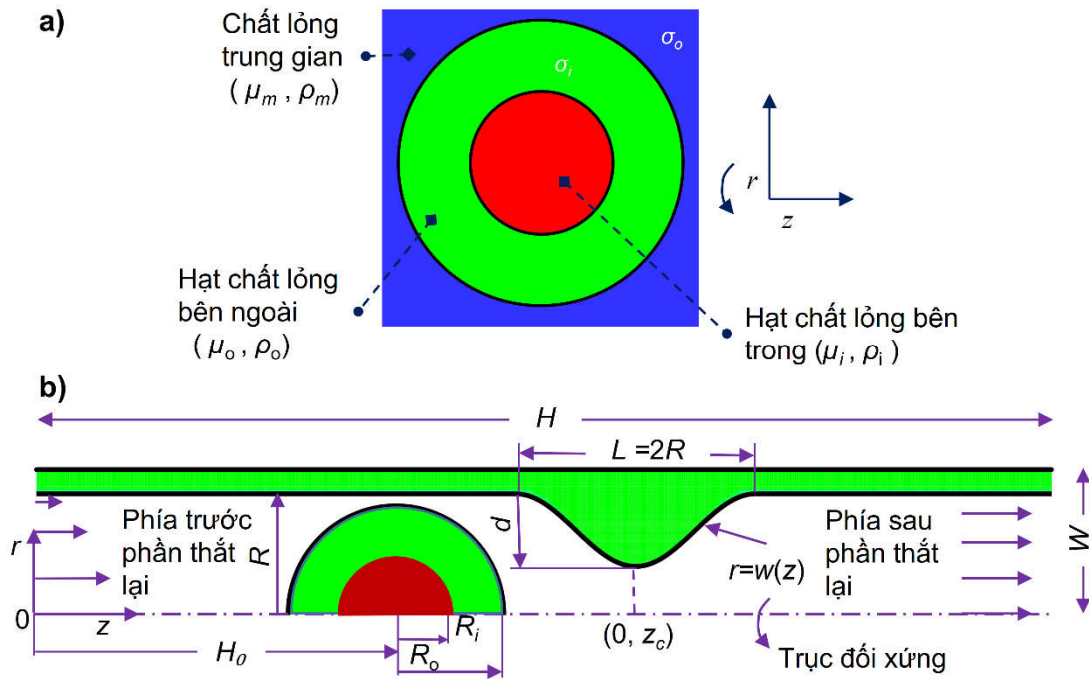
Với sự phát triển của khoa học hiện đại, các bộ phận trên cơ thể con người như các mao mạch bị xơ vữa ... đều có thể mô hình hóa trên các mạch vi lỏng “lab on a chip” [53]. Nghiên cứu tương tác của hạt chất lỏng với biên dạng của kênh dẫn thắt lại được ứng dụng nhiều trong các lĩnh vực y khoa. Ví dụ, kiểm nghiệm thuốc khi di chuyển qua các mạch máu bị xơ vữa. Ngoài ra, nghiên cứu có thể ứng dụng trong các quá trình phân tích sinh học và hóa học. **Chương 2** đã mô tả phương pháp theo dấu biên để phỏng bài toán đặt ra trong luận án. Tính chính xác của phương pháp số cũng đã được đề cập ở **Chương 2**, mục 2.4.1.

3.1. MÔ HÌNH BÀI TOÁN VÀ PHƯƠNG PHÁP MÔ PHỎNG

Mô hình hóa của bài toán được thể hiện ở *Hình 3.1*. Kênh dẫn có tiết diện tròn với bán kính là R và chiều dài là H . Độ thắt lớn nhất nằm ở chính giữa của kênh dẫn [tọa độ là $(0, z_c)$]. Độ thắt này được kí hiệu là d . Chiều dài của vùng thắt lại là $L = 2R$. Phương trình của vùng thắt lại được đưa ra như sau [21]:

$$\begin{cases} r = w(z) = R \left\{ 1 - 0,5 \frac{d}{R} [1,0 + \cos(\pi(z - z_c)/L)] \right\} & \text{khi } |z - z_c| \leq L/2 \\ R & \text{khi } |z - z_c| > L/2 \end{cases} \quad (3.1)$$

Trong đó, $w(z)$ là hàm thể hiện vùng thắt lại của kênh dẫn (gọi tắt là phần thắt lại); r và z lần lượt là tọa độ (theo tọa độ trụ) theo phương hướng tâm và hướng trục. Ban đầu hạt chất lỏng đa lớp được đặt ở một vị trí cách mép vào của kênh dẫn một khoảng là $H_0 = 4R$ [21]. Hạt chất lỏng bao gồm hai lớp, hạt chất lỏng bên ngoài có bán kính là R_o và hạt chất lỏng bên trong có bán kính là R_i . Các hạt chất lỏng ban đầu là đồng tâm với nhau. Hệ số sức căng bề mặt của hạt chất lỏng bên ngoài và bên trong lần lượt là σ_o và σ_i . Các chỉ số dưới “ i ”, “ o ”, “ m ” được sử dụng để phân biệt các đặc trưng vật lý cho chất lỏng bên trong, chất lỏng bên ngoài, và chất lỏng trung gian. Miền tính toán có kích thước là $W \times H = 1,2R \times 12R$. Hạt chất lỏng đa lớp được di



Hình 3.1 Mô hình hóa bài toán. a) Cấu tạo của hạt chất lỏng đa lớp. b) Cấu tạo và kích thước của kênh dẫn

chuyển bằng việc áp đặt vận tốc tại mép vào của kênh. Vận tốc này có phương trình như sau [23]:

$$v = -2U_{ave}(1 - r^2/R^2) \quad (3.2)$$

Trong đó: U_{ave} là vận tốc trung bình.

Các chất lỏng được giả thiết là chất lỏng Newtons, không nén được, và không trộn lẫn. Các phương trình toán học giống với các phương trình đưa ra ở **Chương 2** [phương trình 2.1, 2.3, và 2.4].

Các hạt chất lỏng được nghiên cứu có kích thước nhỏ (từ vài trăm μm đến một vài mm). Do đó, thành phần trọng lực và sự chênh lệch khối lượng riêng giữa các chất lỏng cũng được bỏ qua ($\mathbf{g} = 0$, $\rho_i = \rho_m = \rho_o$). Các chất lỏng được giả thiết là không hợp lại với nhau. Giả thiết này cũng đã được sử dụng trong các nghiên cứu trước đó [14,54]. Đối với chuyển động của hạt chất lỏng trong các kênh vi lỏng, nhiệt độ thường không thay đổi hoặc không có ảnh hưởng lớn đến động lực học của hạt. Theo đó, bài toán xem xét với nhiệt độ là không thay đổi (đẳng nhiệt).

Điều kiện biên đối xứng trục được đặt tại $r = 0$. Tại $z = H$, điều kiện biên dòng ra được áp đặt. U_{ave} được chọn là vận tốc tham chiếu và R là chiều dài tham chiếu. Do đó, thời gian tham chiếu là t_c , $t_c = R/U_{ave}$. Các tham số không thứ nguyên được đưa ra như sau:

$$Re = \frac{\rho_m U_{ave} (2R)}{\mu_m}, Ca = \frac{\mu_m U_{ave}}{\sigma_o}, \mu_{om} = \frac{\mu_o}{\mu_m}, \mu_{im} = \frac{\mu_i}{\mu_m} \quad (3.3)$$

$$\sigma_{io} = \frac{\sigma_i}{\sigma_o}, R_{or} = \frac{R_o}{R}, R_{io} = \frac{R_i}{R_o}, d_R = \frac{d}{R}$$

Trong đó, Re và Ca lần lượt là số Reynolds và số mao dẫn; R_{or} là tỷ lệ giữa bán kính của hạt chất lỏng bên ngoài và bán kính của kênh dẫn; R_{io} là tỷ lệ giữa bán kính hạt chất lỏng bên trong và bán kính hạt chất lỏng bên ngoài; σ_{io} là tỷ số sức căng bề mặt của hạt chất lỏng bên trong và hạt chất lỏng bên ngoài; μ_{om} là tỷ số độ nhớt giữa hạt chất lỏng bên ngoài với chất lỏng trung gian; μ_{im} là tỷ số độ nhớt giữa hạt chất lỏng bên trong với chất lỏng trung gian; d_R là tỷ số giữa độ thất lớn nhất và bán kính của kênh dẫn. Phạm vi nghiên cứu của các tham số không thứ nguyên này được đưa ra ở *Bảng 1*. Đồng thời, *Bảng 1* cũng đưa ra phạm vi nghiên cứu của các nghiên cứu đã được thực hiện. Phạm vi của các tham số được đưa ra dựa trên các nghiên cứu

Bảng 1 Giá trị và phạm vi của các tham số mô phỏng trong một số nghiên cứu

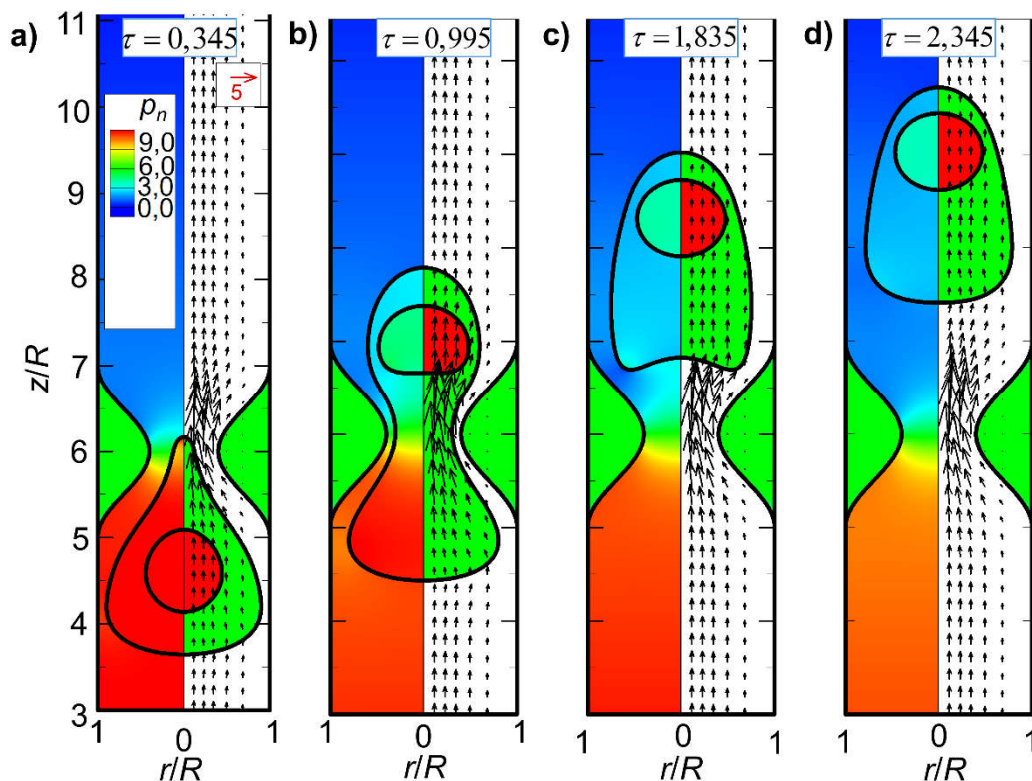
Tham số	Nghiên cứu hiện tại	Olbricht và cộng sự [18]	Tsai và cộng sự [21]	Zolfaghari và cộng sự [55]	Borthakur và cộng sự [23]
Re	1,0	-	-	1,0 – 50,0	2,0 – 40,0
Ca	0,01 – 1,0	0,05 – 0,16	0,05 – 1,0	0,05 – 1,0	0,005 – 0,7
R_{or}	0,2 – 0,9	0,56 – 1,13	0,9 – 1,2	0,9	0,6
R_{io}	0,2 – 0,9	-	-	-	0,5 – 0,83
μ_{om}	1,0	0,075 – 2,10	0,0005 – 0,1	2,0	0,2 – 1,0
μ_{im}	1,0	-	-	-	1,0
σ_{io}	0,1-6,4	-	-	-	1,0
d_R	0,0 – 0,8	0	0,6	0,6	0
Cấu tạo của kênh dẫn	- Hạt chất lỏng đa lớp - Kênh dẫn thất lại	- Hạt chất lỏng đơn - Ống mao dẫn thẳng	- Hạt chất lỏng đơn - Ống mao dẫn thất lại	- Hạt chất lỏng đơn - Ống mao dẫn thất lại	- Hạt chất lỏng đa lớp - Ống mao dẫn thẳng

trước đó. Phạm vi của các tham số này bao gồm các chất lỏng thông dụng như nước, dầu, và nhiều chất lỏng khác.

3.2. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Trong các nghiên cứu trước đó [18,21], các nhóm tác giả đã chỉ ra hiện tượng lõm vào tại bề mặt phía sau của hạt chất lỏng đơn lớp. Tuy nhiên, họ chưa đưa ra chi tiết về độ lõm cũng như các yếu tố ảnh hưởng đến độ lõm của hạt chất lỏng. Tham số này là quan trọng, bởi vì mức độ lõm lại tại bề mặt phía sau của hạt chất lỏng giúp đánh giá mức độ cản trở chuyển động của phần thất lại. Đồng thời tham số này giúp đánh giá được khả năng tách thành các chất lỏng nhỏ hơn. Vì vậy, nó được nghiên cứu chi tiết trong chương này.

Hình 3.2 đưa ra mô tả về chuyển động của hạt chất lỏng đa lớp trong kênh dẫn thất lại. Các tham số không thứ nguyên bao gồm $Ca = 0,1$, $Re = 1,0$, $d_R = 0,6$, $R_{io} = 0,5$, $R_{or} = 0,9$, và $\sigma_{io} = 1,0$. Ban đầu, hạt chất lỏng đa lớp được đặt ở phía trước phần thất lại của kênh dẫn và cách mép vào một khoảng là H_0 (Hình 3.1). Dưới tác động của vận tốc tại mép vào, hạt chất lỏng đa lớp di chuyển ra xa dần vị trí ban đầu. Khi hạt chất lỏng đa lớp di chuyển gần đến phần thất lại, hạt chất lỏng ngoài bị biến dạng.



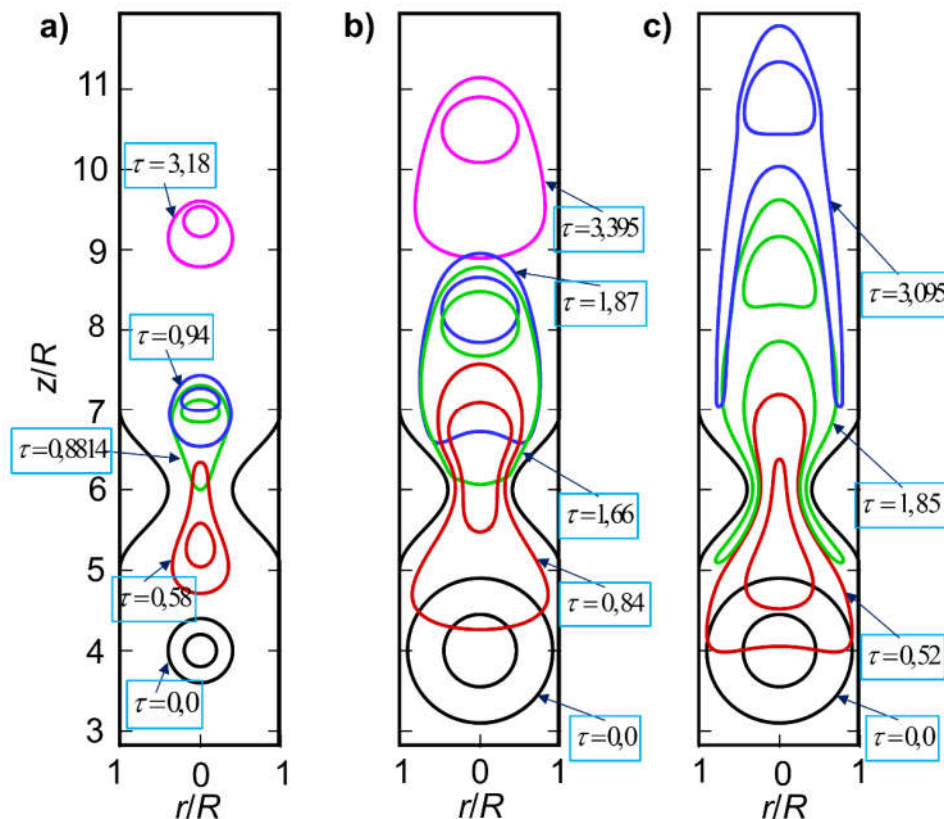
Hình 3.2 Chuyển động của hạt chất lỏng đa lớp tại các thời điểm khác nhau. Khung hình bên trái thể hiện trường áp suất, được không thứ nguyên hóa bởi $0,5\rho_o U_{ave}^2$. Khung hình bên phải thể hiện trường vận tốc không thứ nguyên bởi vận tốc tham chiếu U_{ave}

Phần đầu của hạt chất lỏng bên ngoài trở nên nhọn hơn kéo theo lượng chất lỏng chảy sang phía bên kia của phần thắt lại ít đi, áp suất ở phía trước phần thắt lại tăng lên (Hình 3.2a).

Sự biến đổi của hạt chất lỏng bên trong cũng tương tự như hạt chất lỏng bên ngoài. Tuy nhiên, hạt chất lỏng bên trong bị biến dạng ít hơn. Tiếp đến, một phần của hạt chất lỏng đa lớp di chuyển qua phần thắt lại và tương tác của hạt chất lỏng đa lớp và phần thắt lại lớn. Điều này làm cho hạt chất lỏng đa lớp bị biến dạng nhiều theo phương hướng kính (Hình 3.2b). Lúc này độ biến dạng của hạt chất lỏng đa lớp là lớn nhất.

Khi hạt chất lỏng đa lớp bắt đầu di chuyển qua phần thắt lại (Hình 3.2c), lượng chất lỏng được giải phóng từ phía trước sang phía sau của phần thắt lại làm áp suất ở phía trước phần thắt lại giảm. Sự giảm áp suất đột ngột này tác động lên bề mặt phía sau của hạt chất lỏng đa lớp làm bề mặt này bị lõm vào (Hình 3.2c). Khi di chuyển về phía cuối của kênh dẫn, hạt chất lỏng đa lớp dần hồi phục về hình dạng ban đầu do lực căng bề mặt của nó (Hình 3.2d).

Việc hình thành lõm tại bề mặt phía sau của hạt chất lỏng đa lớp phụ thuộc vào nhiều yếu tố khác nhau. Với phạm vi của các tham số không thứ nguyên đưa ra ở Bảng 1, chúng ta thấy rằng bề mặt phía sau của hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài có thể bị lõm phía trước và phía sau của phần thắt lại (Hình 3.3c, tham số mô phỏng



Hình 3.3 Chuyển động của hạt chất lỏng tại các thời điểm khác nhau

bao gồm: $Ca = 1,0$, $R_{or} = 0,9$, $R_{io} = 0,5$, $\sigma_{io} = 1,0$, và $d_R = 0,6$), chỉ bị lõm ở phía sau của phần thắt lại (Hình 3.3b, tham số mô phỏng bao gồm: $Ca = 0,1$, $R_{or} = 0,9$, $R_{io} = 0,5$, $\sigma_{io} = 1,0$, và $d_R = 0,6$), hoặc không bị lõm (Hình 3.3a, tham số mô phỏng bao gồm: $Ca = 0,25$, $R_{or} = 0,4$, $R_{io} = 0,5$, $\sigma_{io} = 1,0$, và $d_R = 0,6$).

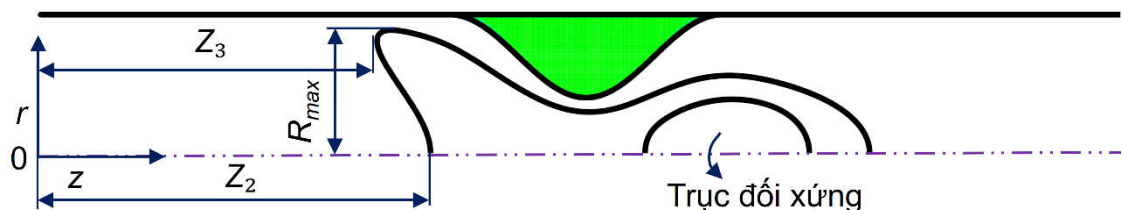
Độ lớn của độ lõm tại bề mặt phía sau của hạt chất lỏng bên ngoài (gọi tắt là độ lõm) được xác định như sau:

$$I_d = \frac{z_3 - z_2}{2R_{\max}} \quad (3.4)$$

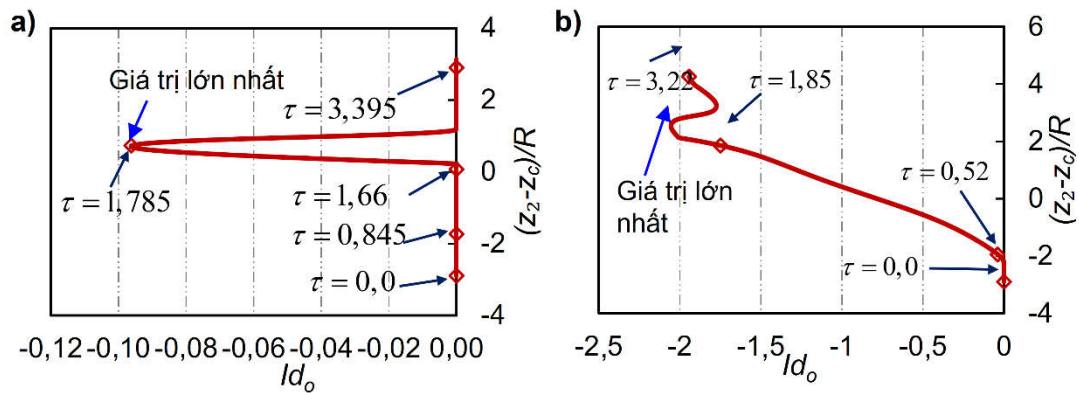
Trong đó, I_d là độ lớn của độ lõm; z_2 là khoảng cách từ mép vào của kênh dẫn đến điểm giao giữa trục đối xứng và bề mặt phía sau của hạt chất lỏng; z_3 là khoảng cách của điểm gần nhất trên bề mặt phía sau của hạt chất lỏng đến trục tọa độ theo phương hướng kính (r); R_{\max} là chiều rộng lớn nhất của hạt chất lỏng bên ngoài theo phương hướng kính. Cách xác định các đại lượng này đối với hạt chất lỏng bên ngoài được mô tả ở Hình 3.4. Độ lớn độ lõm của hạt chất lỏng bên trong được tính tương tự với hạt chất lỏng bên ngoài. Đại lượng z_3 , z_2 , và R_{\max} được xác định tại bề mặt của hạt chất lỏng bên trong. Độ lõm I_d có thể có giá trị âm hoặc bằng không. Giá trị tuyệt đối của I_d càng lớn, bề mặt phía sau của hạt chất lỏng bị lõm càng nhiều.

Hình 3.5 đưa ra sự biến đổi về giá trị độ lõm của hạt chất lỏng bên ngoài (I_{do}) dọc theo kênh dẫn (chỉ số dưới “o” được dùng để chỉ hạt chất lỏng bên ngoài). Tham số mô phỏng cho Hình 3.5a tương tự tham số mô phỏng cho Hình 3.3b và tham số mô phỏng cho Hình 3.5b tương tự tham số mô phỏng cho Hình 3.3c. Hình 3.5a cho thấy rằng hạt chất lỏng bên ngoài chỉ bị lõm ở phía sau của phần thắt lại, giá trị của độ lõm tăng khi hạt chất lỏng bên ngoài bắt đầu ra khỏi phần thắt lại ($z_2 - z_c > 0$). Sau đó độ lõm đạt giá trị lớn nhất và giảm về giá trị bằng không (hạt chất lỏng không bị lõm). Điều này là do lực căng bề mặt của hạt chất lỏng bên ngoài đủ lớn, hạt chất lỏng bên ngoài co lại với hình dạng không bị lõm. Tuy nhiên, khi lực căng bề mặt nhỏ, hạt chất lỏng bên ngoài bị lõm ở phía trước phần thắt lại (Hình 3.5b).

Độ lớn của độ lõm tăng dần khi hạt chất lỏng bên ngoài di chuyển qua phần thắt lại. Giá trị này sau đó giảm và tiếp tục tăng trở lại (Hình 3.5b). Điều này là do khi hạt chất lỏng mới di chuyển qua phần thắt lại, lực đẩy sinh ra do lượng chất lỏng



Hình 3.4 Các tham số để tính toán độ lõm của hạt chất lỏng bên ngoài



Hình 3.5 Sự biến thiên độ lớn độ lồi tại bề mặt phía sau của hạt chất lỏng bên ngoài. (a) Hạt chất lỏng chỉ bị lồi ở phía sau phần thất lại, tham số mô phỏng giống với tham số được đưa ra ở Hình 3.3b. (b) Hạt chất lỏng bị lồi ở cả phía trước và phía sau phần thất lại, tham số mô phỏng giống với tham số được đưa ra ở Hình 3.3c

giải phóng từ phần phía trước sang phần phía sau của phần thất lại làm gia tăng mức độ lồi của hạt chất lỏng bên ngoài. Tuy nhiên, sau đó lực đẩy này giảm, giá trị độ lồi của hạt chất lỏng bên ngoài giảm. Khi lực đẩy biến mất, hạt chất lỏng bên ngoài tiếp tục bị lồi dưới tác động của vận tốc tại mép vào. Do đó, giá trị độ lồi tiếp tục tăng.

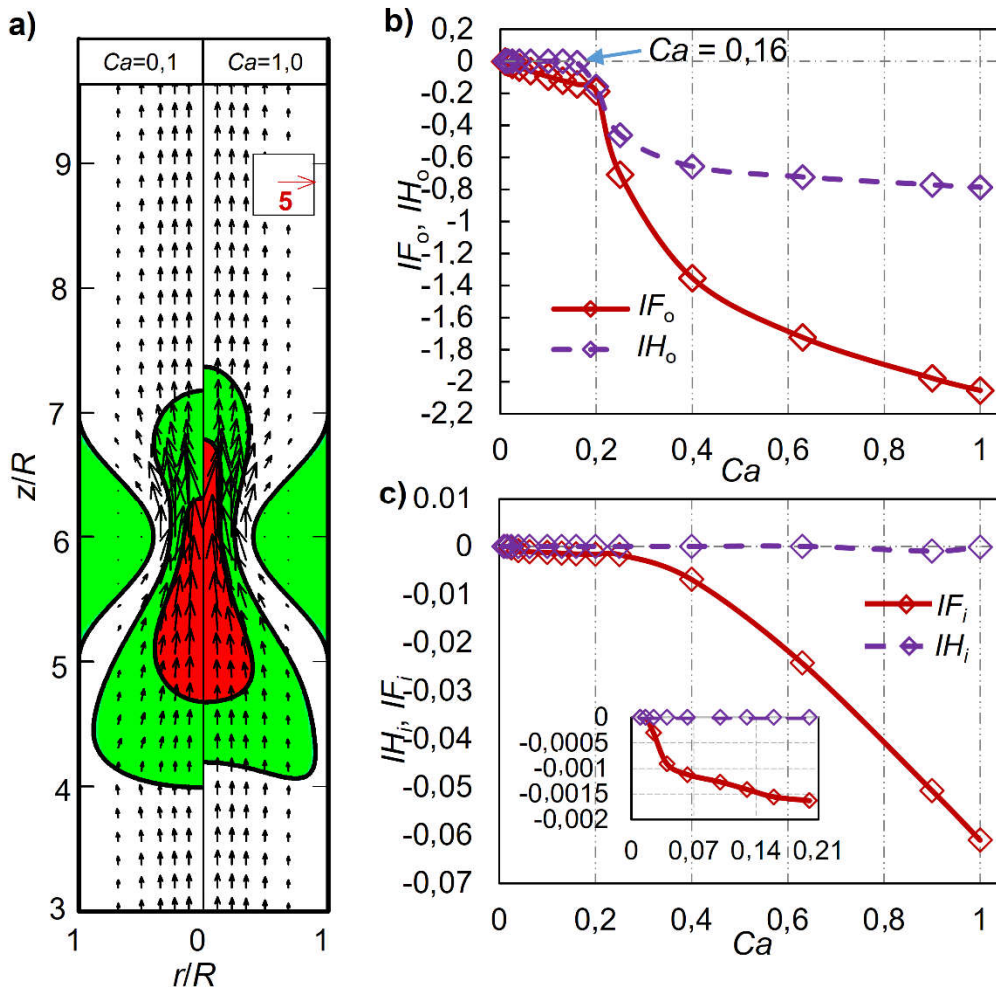
Sự biến thiên về giá trị độ lồi của hạt chất lỏng bên trong cũng xảy ra hai trường hợp tương tự như đối với hạt chất lỏng bên ngoài. Tuy nhiên, mức độ lồi là khác nhau. Từ kết quả Hình 3.5 cho thấy rằng khi hạt chất lỏng đa lớp di chuyển qua phần thất lại, bề mặt phía sau của các hạt chất lỏng có nhiều thay đổi về mức độ lồi cũng như trạng thái lồi. Vì vậy, luận án đưa ra đánh giá về giá trị độ lồi lớn nhất của hạt chất lỏng đa lớp trong hai trường hợp: chỉ tính ở phía trước phần thất lại, và trên toàn bộ kênh dẫn. Chúng ta sử dụng kí hiệu “ IH ” và “ IF ” lần lượt cho các tham số này. Các chỉ số dưới “ i ” và “ o ” để phân biệt cho hạt chất lỏng bên trong và hạt chất lỏng bên ngoài. Ví dụ, độ lồi lớn nhất của hạt chất lỏng bên ngoài ở phía trước phần thất lại và trên toàn kênh dẫn được kí hiệu là IHo và IFo . Mức độ lồi và sự thay đổi về trạng thái lồi của hạt chất lỏng phụ thuộc vào giá trị của các tham số không thứ nguyên. Sự ảnh hưởng của bộ tham số không thứ nguyên đến các đại lượng này được trình bày ở các mục tiếp theo.

3.2.1. Ảnh hưởng của số mao dẫn

Mục này đưa ra ảnh hưởng của số mao dẫn đến giá trị độ lồi lớn nhất của hạt chất lỏng đa lớp. Giá trị của số Ca được thay đổi trong phạm vi từ 0,01 - 1,0. Các tham số khác bao gồm $R_{io} = 0,5$, $R_{or} = 0,9$, $\sigma_{io} = 1,0$, và $d_R = 0,6$. Hình 3.6a thể hiện hình dạng và trường vận tốc bên trong kênh dẫn với các giá trị Ca khác nhau. Hình

3.6b thể hiện giá trị độ lõm lớn nhất của hạt chất lỏng bên ngoài (IF_o , IHo). Hình 3.6c thể hiện giá trị độ lõm của hạt chất lỏng bên trong (IF_i , IHi).

Khi tăng giá trị của Ca , giá trị độ lõm lớn nhất của hạt chất lỏng bên ngoài khi tính trên toàn kênh dẫn tăng. Tuy nhiên, với số Ca nhỏ (0,01 - 0,2), mức độ tăng độ lõm chậm. Khi giá trị của số Ca lớn hơn (0,2 - 1,0), mức độ tăng độ lõm nhanh hơn nhiều (đường nét liền màu đỏ ở Hình 3.6b). Hạt chất lỏng bên ngoài bị lõm ở phía trước phần thu hẹp của kênh dẫn với giá trị $Ca > 0,13$. Tương tự, khi tăng giá trị của số Ca , giá trị độ lõm này tăng (đường nét đứt màu tím ở Hình 3.6b). Điều này là do khi tăng giá trị của số Ca , sức căng bề mặt của hạt chất lỏng bên ngoài giảm. Vì vậy, với cùng vận tốc dòng vào, hạt chất lỏng bên ngoài sẽ bị lõm nhiều hơn so với trường hợp có giá trị Ca nhỏ hơn (Hình 3.6a). Khi giá trị của Ca đủ lớn ($Ca > 0,13$), tác động của vận tốc dòng vào đủ lớn để làm lõm hạt chất lỏng bên ngoài ở phía trước của phần thắt lại, hạt chất lỏng bên ngoài sau đó không thể hồi phục lại hình dạng ban đầu. Điều này dẫn đến mức độ lõm của hạt chất lỏng bên ngoài tăng nhanh hơn so với trường hợp khi hạt chất lỏng bên ngoài có thể tự hồi phục trạng thái không bị lõm.



Hình 3.6 Kết quả đánh giá ảnh hưởng của số mao dẫn

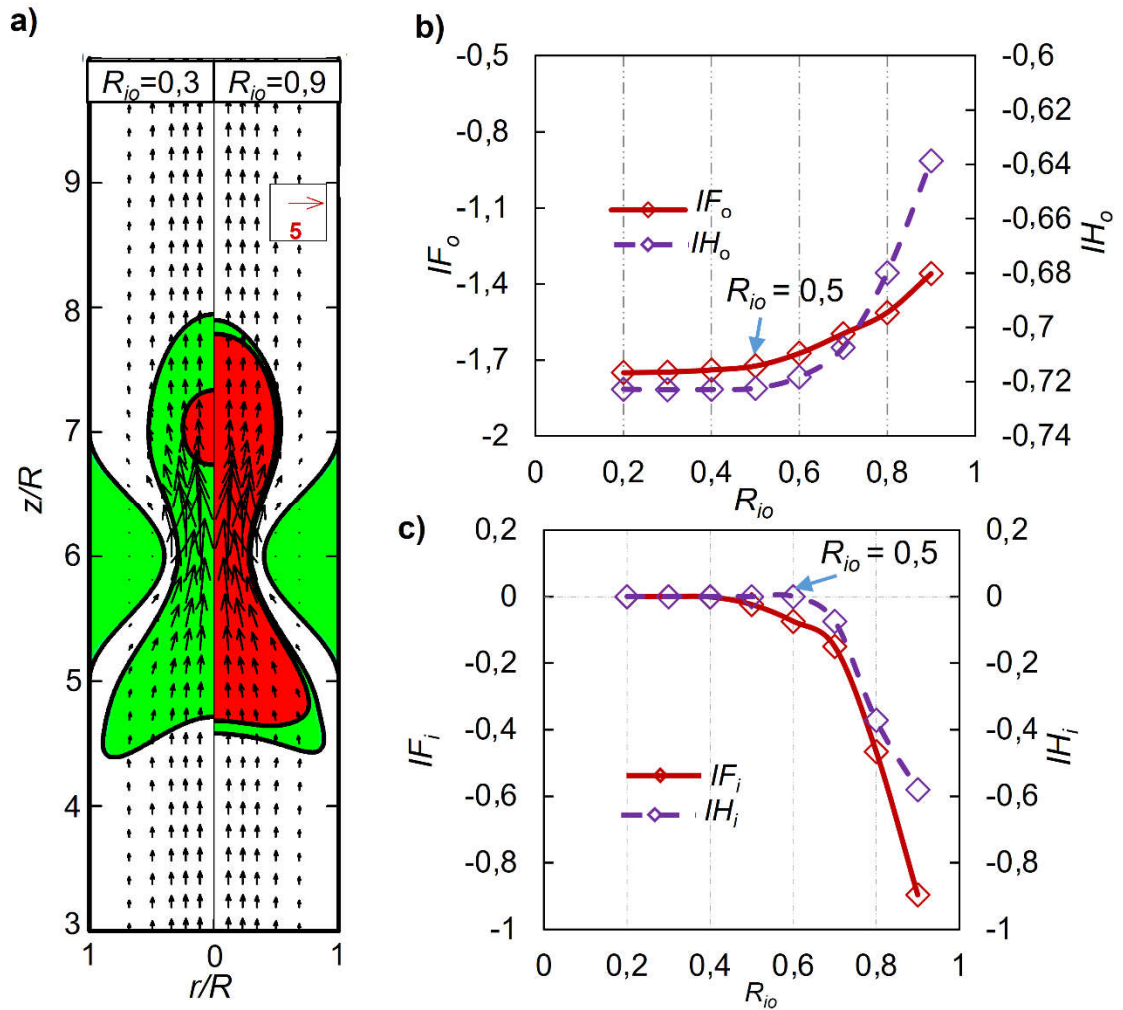
Bề mặt phía sau của hạt chất lỏng bên trong gần như không bị lõm ở phía trước của phần phớt thất lại. Khi tăng giá trị Ca , độ lõm lớn nhất của hạt chất lỏng bên trong thay đổi tương tự với hạt chất lỏng bên ngoài. Tuy nhiên, với cùng một giá trị Ca , hạt chất lỏng bên trong bị lõm ít hơn so với hạt chất lỏng bên ngoài. Nguyên nhân là hạt chất lỏng bên trong có kích thước nhỏ hơn và nằm bên trong hạt chất lỏng bên ngoài. Vì vậy, tác động của vận tốc dòng vào tới hạt chất lỏng bên trong bị hấp thụ một phần bởi hạt chất lỏng bên ngoài.

Nhìn chung, sự biến thiên về giá trị độ lõm lớn nhất của hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài là tương tự nhau và chỉ khác nhau về giá trị độ lớn. Với phạm vi của tham số không thứ nguyên được đưa ra, hạt chất lỏng đa lớp không bị tách thành nhiều hạt chất lỏng nhỏ hơn. Điều này là do hạt chất lỏng bên trong ngăn chặn quá trình tách của hạt chất lỏng bên ngoài. Tuy nhiên, đối với hình dạng kênh dẫn khác, ví dụ, kênh dẫn có phần thất lại hình côn [24], cả hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài của hạt chất lỏng đa lớp đều có thể tách thành hạt chất lỏng nhỏ hơn.

3.2.2. Ảnh hưởng của tỷ lệ bán kính giữa hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài

Trong thực tế, hạt chất lỏng đa lớp có thể chứa hạt chất lỏng bên trong với các kích thước khác nhau. Kích thước của hạt chất lỏng bên trong có ảnh hưởng nhiều đến động lực học của hạt chất lỏng đa lớp khi di chuyển trong kênh dẫn. Trong mục này, ảnh hưởng của kích thước hạt chất lỏng bên trong tới sự thay đổi về giá trị độ lõm lớn nhất của hạt chất lỏng đa lớp sẽ được nghiên cứu (*Hình 3.7*). Kích thước hạt chất lỏng bên trong thay đổi sao cho giá trị của tham số R_{io} thay đổi trong phạm vi từ 0,2 đến 0,9. Các tham số khác bao gồm số mao dẫn $Ca = 0,63$, $Re = 1,0$, $R_{or} = 0,9$, $d_R = 0,6$, $\sigma_{io} = 1,0$. *Hình 3.7a* thể hiện hình dạng của hạt chất lỏng đa lớp và trường vận tốc bên trong kênh dẫn tại các giá trị R_{io} khác nhau. *Hình 3.7b* thể hiện độ lõm của hạt chất lỏng bên ngoài (IF_o, IH_o). *Hình 3.7c* thể hiện độ lõm của hạt chất lỏng bên trong (IF_i, IH_i).

Kết quả cho thấy rằng khi hạt chất lỏng bên trong có kích thước lớn (R_{io} có giá trị lớn), bề mặt phía sau của hạt chất lỏng bên ngoài bị lõm ít hơn (cả ở phía trước của phần thất lại và trên toàn bộ kênh dẫn) (Ở *Hình 3.7b*, giá trị tuyệt đối của IF_o và IH_o giảm). Bởi vì hạt chất lỏng bên trong có kích thước lớn sẽ cản trở sự tác động của vận tốc dòng vào tới bề mặt phía sau của hạt chất lỏng bên ngoài. Vì vậy, giá trị độ lõm lớn nhất tại bề mặt phía sau của hạt chất lỏng bên ngoài giảm. Hạt chất lỏng bên trong chỉ bị lõm (khi xem xét trên toàn kênh dẫn) khi bán kính của nó đủ lớn ($R_{io} > 0,4$) và chỉ bị lõm ở phía trước phần thất lại với giá trị $R_{io} > 0,6$. Khi tăng kích thước của hạt chất lỏng bên trong từ các giá trị này, giá trị độ lõm lớn nhất của hạt chất lỏng



Hình 3.7 Kết quả đánh giá ảnh hưởng của tỷ lệ bán kính giữa hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài

bên trong (IF_i và IH_i) tăng. Điều này là do khi hạt chất lỏng bên trong có kích thước lớn, không gian giữa hai hạt chất lỏng là nhỏ (Hình 3.7a), tác động của dòng vận tốc dòng vào tới bề mặt phía sau của hạt chất lỏng bên trong dễ dàng và lớn hơn so với trường hợp có hạt chất lỏng bên trong nhỏ (Hình 3.7a). Nhìn chung, tăng kích thước của hạt chất lỏng bên trong sẽ làm giảm độ lõm của hạt chất lỏng bên ngoài. Tuy nhiên, hạt chất lỏng bên trong bị lõm nhiều hơn.

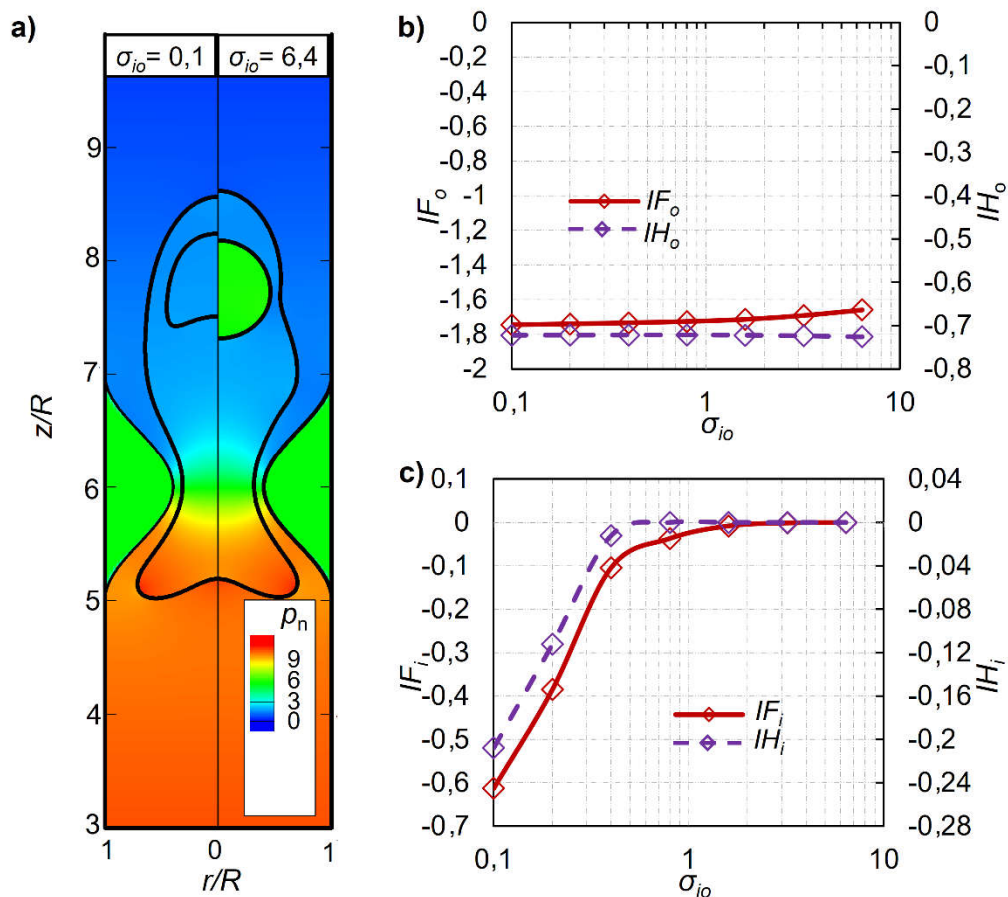
3.2.3. Ảnh hưởng của tỷ số sức căng bề mặt của hạt chất lỏng bên trong với hạt chất lỏng bên ngoài

Kết quả từ các mục trên đã cho thấy rằng độ lớn lực căng bề mặt của hạt chất lỏng đóng vai trò quan trọng đến độ lớn của độ lõm tại bề mặt phía sau của nó. Mục này sẽ đưa ra đánh giá ảnh hưởng của tỷ số sức căng bề mặt của hạt chất lỏng bên trong với hạt chất lỏng bên ngoài (σ_{io}) tới giá trị độ lõm lớn nhất của hạt chất lỏng đa lớp khi di chuyển trong kênh dẫn thu hẹp. Tỷ số này có giá trị thay đổi trong phạm vi

từ 0,1 đến 6,4. Các tham số khác bao gồm $Ca = 0,63$, $R_{io} = 0,5$, $R_{or} = 0,9$, $d_R = 0,6$. Hình 3.8a thể hiện hình dạng của hạt chất lỏng đa lớp và trường áp suất bên trong kênh dẫn. Hình 3.8b thể hiện độ lõm của hạt chất lỏng bên ngoài (IF_o , IH_o). Hình 3.8c thể hiện độ lõm của hạt chất lỏng bên trong (IH_i , IF_i).

Tăng giá trị của σ_{io} không làm thay đổi nhiều giá trị độ lõm lớn nhất của hạt chất lỏng bên ngoài (ở trước phần thắt lại và trên toàn kênh dẫn) (Hình 3.8b). Tuy nhiên, giá trị này đối với hạt chất lỏng bên trong (IF_i và IH_i) giảm nhanh và tiến tới giá trị bằng không (Hình 3.8c). Nguyên nhân là, tăng giá trị σ_{io} làm tăng áp suất bên trong của hạt chất lỏng bên trong [56] (Hình 3.8a). Áp suất này chống lại tác động từ bên ngoài đến hạt chất lỏng bên trong. Điều này khiến hạt chất lỏng bên trong khó bị lõm hơn (cả ở phía trước của phần thắt lại và trên toàn kênh dẫn). Việc thay đổi tỷ số sức căng bề mặt σ_{io} cũng khiến hạt chất lỏng bên trong khó bị tách hạt hơn [24].

Việc thay đổi giá trị σ_{io} chỉ tác động đến hạt chất lỏng bên trong mà không làm thay đổi nhiều về giá trị độ lõm lớn nhất của hạt chất lỏng bên ngoài. Bởi vì việc tăng áp suất bên trong của hạt chất lỏng bên trong không tác động nhiều đến bề mặt phía sau của hạt chất lỏng bên ngoài, hạt chất lỏng bên trong di chuyển nhanh



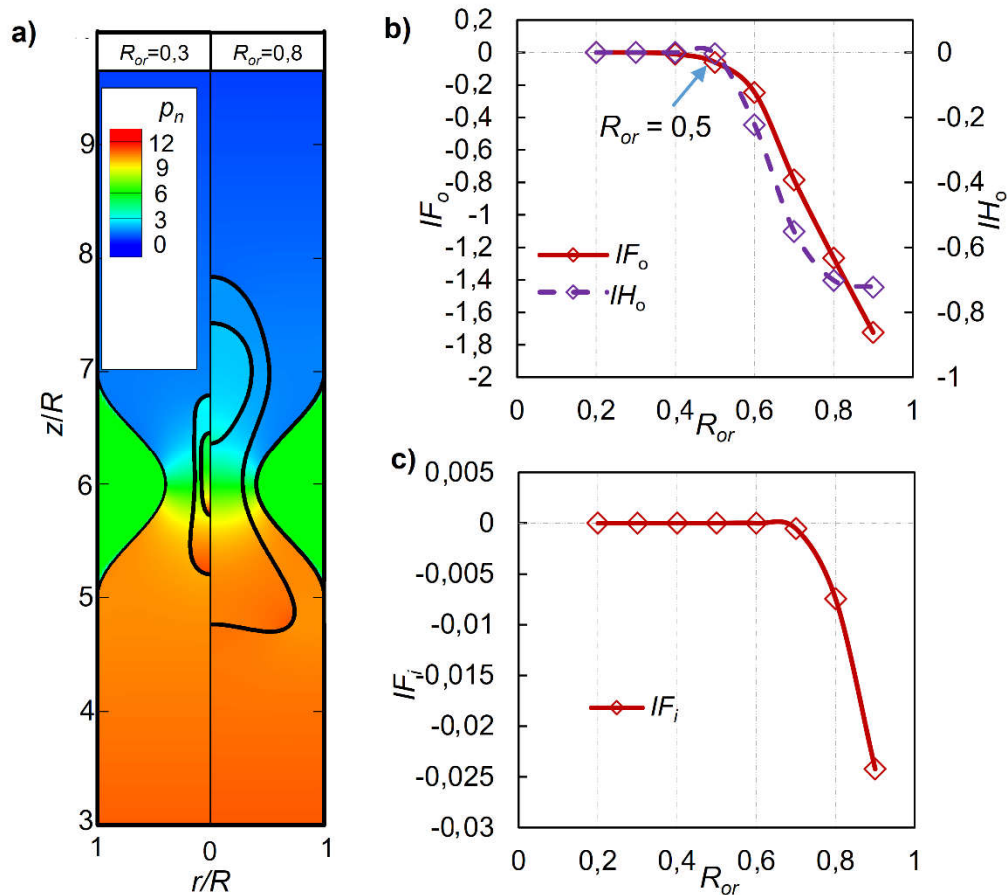
Hình 3.8 Kết quả đánh giá ảnh hưởng của tỷ lệ sức căng bề mặt giữa hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài

hơn và có xu hướng tác động vào bề mặt phía trước của hạt chất lỏng bên ngoài chứ không phải bề mặt phía sau.

3.2.4. Ảnh hưởng của tỷ số giữa bán kính hạt chất lỏng bên ngoài và bán kính kênh dẫn

Mục này sẽ đưa ra ảnh hưởng của tỷ lệ kích thước hạt chất lỏng đa lớp so với bán kính của kênh dẫn đến giá trị độ lõm lớn nhất của hạt chất lỏng đa lớp. Tỷ lệ này được thay đổi trong phạm vi từ 0,2 đến 0,9. Các tham số không thứ nguyên khác bao gồm $Ca = 0,63$, $\sigma_{io} = 1,0$, $R_{io} = 0,5$, và $d_R = 0,6$. Hình 3.9a thể hiện hình dạng của hạt chất lỏng và trường áp suất bên trong kênh dẫn ở các giá trị R_{or} khác nhau. Hình 3.9b thể hiện độ lõm của hạt chất lỏng bên ngoài (IF_o , IH_o). Hình 3.9c thể hiện độ lõm của hạt chất lỏng bên trong (IF_i , IH_i).

Chúng ta nhận thấy rằng khi tỷ số này càng lớn (bán kính hạt chất lỏng bên ngoài càng gần với bán kính kênh dẫn) và hạt chất lỏng bên trong và hạt chất lỏng bên ngoài bị lõm nhiều hơn (giá trị tuyệt đối của IF_o , IH_o , và IF_i giảm). Hạt chất lỏng bên ngoài bị lõm ở phía trước phần thắt lại của ống dẫn với giá trị của $R_{or} > 0,5$. Hiện

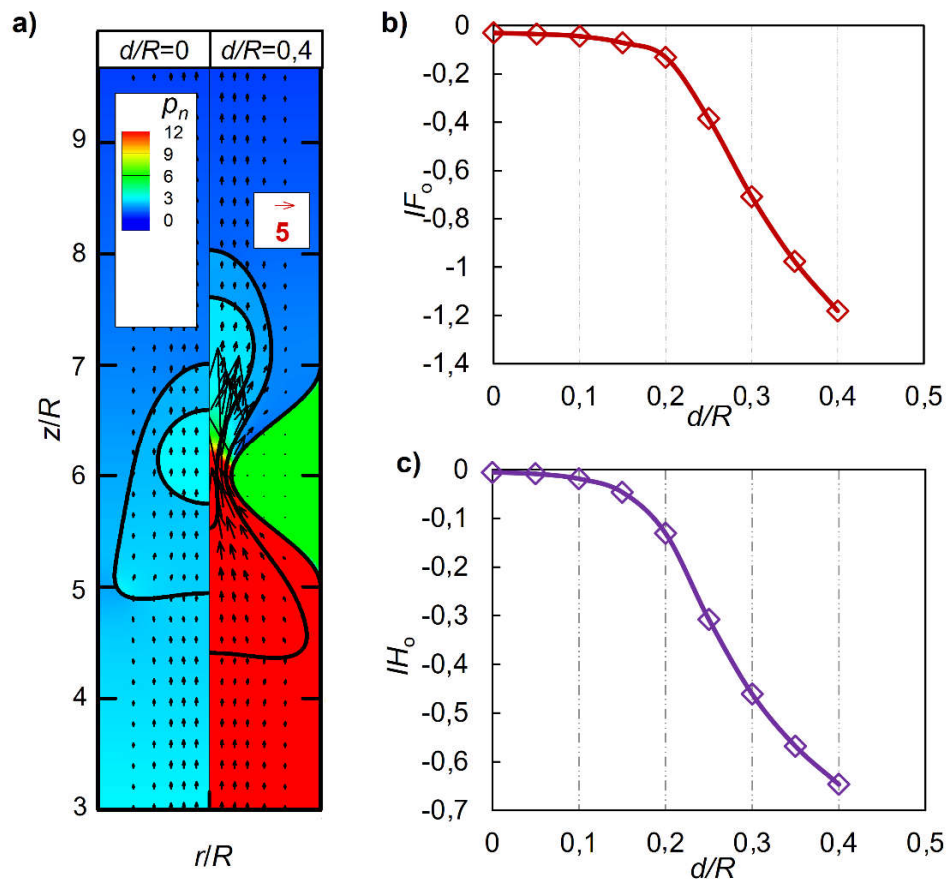


Hình 3.9 Kết quả đánh giá ảnh hưởng của tỷ lệ bán kính giữa hạt chất lỏng bên ngoài và bán kính của kênh dẫn

trạng này không xảy ra đối với hạt chất lỏng bên trong. Điều này là do khi tăng giá trị của R_{or} , kích thước của hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài đều tăng và khe hở giữa hạt chất lỏng đa lớp và thành của kênh dẫn nhỏ đi. Vì vậy, lượng chất lỏng di chuyển sang phía sau phần thất lại ít đi và áp suất tác động vào bề mặt phía sau của hạt chất lỏng đa lớp tăng lên (Hình 3.9a). Do đó, hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài đều bị lõm nhiều hơn. Khi áp suất này đủ lớn, bề mặt phía sau của hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài bị lõm phía trước của phần thất lại. Hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài không bị lõm (cả ở phía trước của phần thất lại và trên toàn kênh dẫn) khi giá trị của $R_{or} < 0,4$. Điều này là dễ hiểu. Vì khi hạt chất lỏng có kích thước nhỏ, sức căng bề mặt của hạt chất lỏng lớn và bề mặt phía sau của hạt chất lỏng khó bị lõm hơn.

3.2.5. Ảnh hưởng của độ thất lớn nhất của kênh dẫn

Hình 3.10a đưa ra hình dạng của hạt chất lỏng đa lớp và trường áp suất bên trong kênh dẫn. Hình 3.10b thể hiện độ lõm của hạt chất lỏng bên ngoài (IF_o). Hình 3.10c thể hiện độ lõm của hạt chất lỏng bên ngoài khi tính ở phía trước của phần thất lại (IH_o). Tham số nghiên cứu bao gồm $Ca = 0,25$, $\sigma_{io} = 1,0$, $R_{or} = 0,9$, $R_{io} = 0,5$, độ thất lớn nhất của kênh dẫn thay đổi từ 0 đến 0,8.



Hình 3.10 Kết quả đánh giá ảnh hưởng của độ thất lớn nhất của kênh dẫn

Kết quả cho thấy khi tăng độ thất lớn nhất của kênh dẫn, hạt chất lỏng bên ngoài càng bị lõm nhiều hơn (IF_o, IH_o tăng). Bởi vì áp suất ở phía trước phần thất lại tăng khi tăng giá trị của d_R (Hình 3.10a). Do đó, bề mặt phía sau của hạt chất lỏng bên ngoài bị lõm nhiều hơn. Tuy nhiên tác động này chưa đủ để làm hạt chất lỏng bên trong bị lõm. Bởi vì hạt chất lỏng bên trong nhỏ hơn, sức căng bề mặt của hạt chất lỏng bên trong lớn. Đồng thời, các lực tác động lên hạt chất lỏng đa lớp bị hạt chất lỏng bên ngoài hấp thụ một phần. Vì vậy, lực tác động lên hạt chất lỏng bên trong nhỏ. Hạt chất lỏng bên trong không bị lõm trong suốt quá trình di chuyển trong kênh dẫn.

3.2.6. Biểu đồ trạng thái

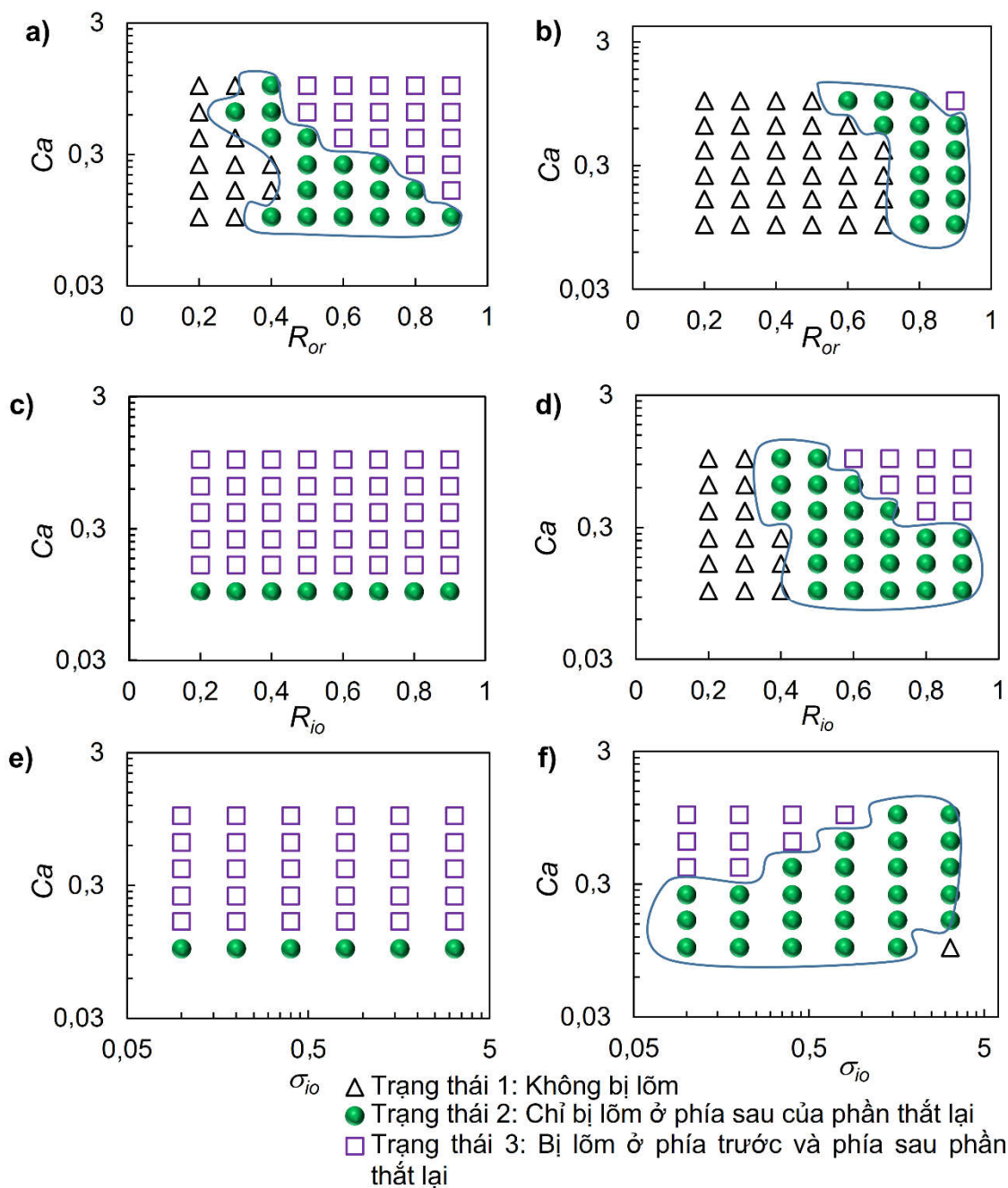
Ở các mục trước, luận án đã chỉ ra rằng bề mặt phía sau của hạt chất lỏng có thể bị chỉ bị lõm ở phía sau của phần thất lại, ở phía trước của phần thất lại, hoặc không bị lõm khi di chuyển trong kênh dẫn (Hình 3.3). Luận án đã đưa ra đánh giá sự ảnh hưởng của các tham số không thứ nguyên tới sự thay đổi về giá trị lớn nhất của hạt chất lỏng đa lớp. Tuy nhiên, chỉ có một tham số nghiên cứu là thay đổi, các tham số khác là cố định. Do đó, bức tranh toàn cảnh về sự chuyển tiếp của các trạng thái lõm tại bề mặt phía sau của các hạt chất lỏng là chưa rõ ràng.

Ở mục này, NCS thực hiện mô phỏng với giá trị của số mao dẫn Ca thay đổi trong phạm vi từ 0,1 đến 1,0. Tương ứng với mỗi giá trị của số mao dẫn, các tham số như R_{io} thay đổi trong phạm vi từ 0,2 đến 0,9, R_{or} thay đổi từ 0,2 đến 0,9, và σ_{io} thay đổi từ 0,1 đến 6,4. Kết quả của mô phỏng được thể hiện ở Hình 3.11.

Kết quả cho thấy rằng hạt chất lỏng bên ngoài không bị lõm khi tỷ số R_{or} có giá trị nhỏ (hạt đa lớp có kích thước nhỏ so với kênh dẫn) (Hình 3.11a). Điều này tương tự với hạt chất lỏng bên trong (Hình 3.11b). Hạt chất lỏng bên ngoài bị lõm ở phía trước phần thất lại khi giá trị của số Ca đủ lớn với mọi giá trị của R_{io} và σ_{io} (Hình 3.11c và e). Tuy nhiên, hạt chất lỏng bên trong bị lõm ở phía trước phần thất lại khi giá trị của số Ca lớn, giá trị của R_{io} lớn, và tỷ số σ_{io} nhỏ (Hình 3.11d và f). Vùng được kí hiệu bởi hình tròn trên hình Hình 3.11 thể hiện rằng hạt chất lỏng (bên trong và bên ngoài) chỉ bị lõm ở phía sau của thất lại.

3.3. KẾT LUẬN CHƯƠNG 3

Chương 3 đã trình bày các kết quả mô phỏng về động lực học hạt chất lỏng di chuyển trong kênh dẫn thất lại với phần thất lại có dạng hình sin. Động lực học của hạt chất lỏng đa lớp được nghiên cứu thông qua tham số về độ lõm tại bề mặt phía sau của hạt chất lỏng đa lớp (I). Các tham số nghiên cứu bao gồm số mao dẫn Ca , tỷ số bán kính của hạt chất lỏng bên trong và hạt chất lỏng bên ngoài R_{io} , tỷ số bán kính



Hình 3.11 Biểu đồ trạng thái chỉ ra sự chuyển tiếp của các trạng thái lõm của hạt chất lỏng đa lớp. Hình 3.11a,c, và e chỉ ra các trạng thái lõm của hạt chất lỏng bên ngoài.

Hình 3.11b, d, và f chỉ ra các trạng thái lõm của hạt chất lỏng bên trong

của hạt chất lỏng bên ngoài và bán kính kênh dẫn R_{or} , tỷ số sức căng bề mặt của hạt chất lỏng bên trong và hạt chất lỏng bên ngoài σ_{io} , độ thắt lớn nhất của kênh dẫn d_R .

Các kết quả chính được trình bày tóm tắt lại như sau:

+ Khi di chuyển trong kênh dẫn thắt lại, bề mặt phía sau của hạt chất lỏng đa lớp có thể có các trạng thái sau:

- Không bị lõm.

- Chỉ bị lõm ở phía sau của phân thắt lại.
 - Bị lõm ở cả phía trước và phía sau của phân thắt lại.
- + Khi tăng giá trị của số Ca , d_R , và R_{or} thì độ lõm tại bề mặt phía sau của hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài đều tăng.
- Khi tăng giá trị của R_{io} , hạt chất lỏng bên ngoài bị lõm ít hơn. Tuy nhiên, hạt chất lỏng trong bị lõm nhiều hơn.
 - Khi tăng giá trị của σ_{io} không thay đổi nhiều giá trị độ lõm lớn nhất của hạt chất lỏng bên ngoài. Tuy nhiên, giá trị độ lõm của hạt chất lỏng bên trong giảm nhanh và tiến tới giá trị bằng không (hạt chất lỏng bên trong không bị lõm).

Động lực học của hạt chất lỏng đa lớp khi di chuyển trong kênh dẫn thắt lại có thể bị ảnh hưởng bởi nhiều thông số khác. Bài toán đặt ra dưới giả thiết chất lỏng xem xét là chất lỏng Newton, hạt chất lỏng đa lớp chỉ có một hạt chất lỏng bên trong. Tuy vậy, nghiên cứu mang lại nhiều ứng dụng trong việc nghiên cứu thuốc hay truyền dẫn thuốc trong y học.

Chương 4. MÔ PHỎNG TƯƠNG TÁC CỦA HẠT CHẤT LỎNG VỚI BỀ MẶT RẮN KHÔNG DÍNH ƯỚT CÓ KỂ ĐẾN ẢNH HƯỞNG CỦA MAO DẪN NHIỆT

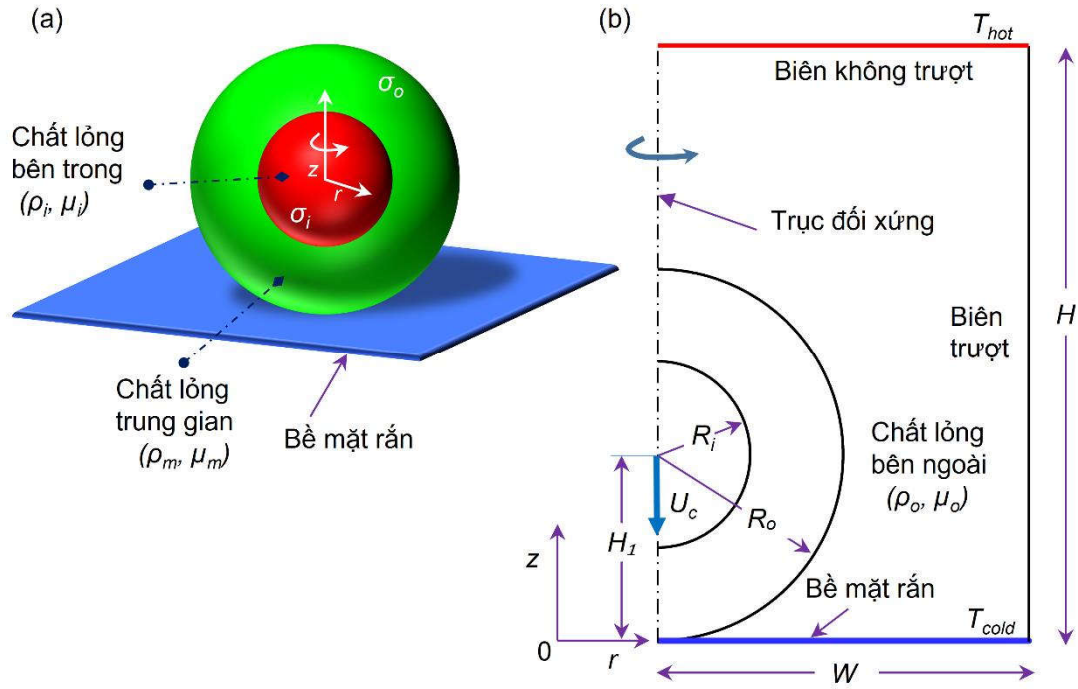
Chương 1 đã chỉ ra rằng các bề mặt rắn không dính ướt xuất hiện nhiều ở tự nhiên, ví dụ, bề mặt lá sen. Đặc biệt, trong các quá trình xử lý hóa học, bề mặt rắn này thường xuyên được sử dụng. Khi tiếp xúc với bề mặt rắn, các hạt chất lỏng hóa học dễ gây ra ăn mòn, thời gian tiếp xúc càng lâu, bề mặt rắn càng bị ăn mòn nhiều. Chương này đưa ra giải pháp nhằm hạn chế việc tiếp xúc của hạt chất lỏng với bề mặt rắn bằng cách lợi dụng sự tác động của lực mao dẫn nhiệt giúp hạt chất lỏng nảy lên khỏi bề mặt rắn. Khi nảy lên khỏi bề mặt rắn, chúng ta có thể dễ dàng tách hạt chất lỏng khỏi bề mặt rắn. Không chỉ trong các quá trình hóa học, việc hỗ trợ hạt chất lỏng nảy lên khỏi bề mặt rắn cũng đóng vai trò quan trọng trong nhiều quá trình công nghiệp [57]. Bài toán được mô phỏng dựa trên phương pháp theo dấu biên. Chi tiết về phương pháp và việc kiểm chứng tính chính xác của phương pháp đã được đưa ra ở **Chương 2** mục 2.4.2.

4.1. MÔ HÌNH BÀI TOÁN VÀ PHƯƠNG PHÁP MÔ PHỎNG

Mô hình hóa của bài toán được thể hiện ở *Hình 4.1*. Hạt chất lỏng bao gồm hai lớp. Hạt ban đầu có dạng hình cầu với các lớp chất lỏng được đặt đồng tâm với nhau. Bán kính của hạt chất lỏng bên ngoài và hạt chất lỏng bên trong được kí hiệu lần lượt là R_o và R_i . Khối lượng riêng và độ nhớt của chất lỏng được kí hiệu lần lượt là ρ và μ . Bài toán được đưa ra bao gồm nhiều chất lỏng khác nhau. Vì vậy, để phân biệt các chất lỏng với nhau, chúng ta sử dụng các chỉ số dưới “ i ”, “ o ”, “ m ” lần lượt cho chất lỏng bên trong, chất lỏng bên ngoài và chất lỏng trung gian. Ví dụ, khối lượng riêng và độ nhớt của hạt chất lỏng bên trong được kí hiệu là ρ_i và μ_i . Hạt chất lỏng đa lớp chịu tác động của vận tốc ban đầu (U_c) và lực mao dẫn nhiệt được tạo ra bởi một trường nhiệt độ. Trường nhiệt độ có nhiệt độ thấp hơn (T_{cold}) được đặt ở trên bề mặt rắn và nhiệt độ cao hơn được đặt ở phía trên hạt chất lỏng đa lớp (T_{hot}) (*Hình 4.1b*). Hệ số sức căng bề mặt của hạt chất lỏng bên ngoài và hạt chất lỏng bên trong được kí hiệu lần lượt là σ_o và σ_i . Chiều rộng và chiều cao của miền tính toán được kí hiệu lần lượt là W và H .

Giả sử rằng các chất lỏng không trộn lẫn, không nén được, và đều là chất lỏng Newton. Các phương trình toán học của bài toán đặt ra giống với phương trình (2.1), (2.3), và (2.4).

Các hạt chất lỏng có kích thước từ một vài mm đến vài chục mm. Vì vậy, thành phần trọng lực cần được tính đến. Các chất lỏng được giả thiết là không hợp lại với



Hình 4.1 Mô hình hóa bài toán. a) Cấu tạo của hạt chất lỏng đa lớp. b) Sơ đồ và các kí hiệu của bài toán

nhau. Giả thiết này được đưa ra dựa trên quan sát từ những thực nghiệm đã được thực hiện [14,54]. Phương trình năng lượng đã được đề cập ở **Chương 2** [Phương trình 2.2 và 2.5].

Bề mặt rắn được giả thiết là hoàn toàn không dính ướt. Do đó, trong chương trình mô phỏng, vận tốc tại các điểm biên tiếp xúc với bề mặt rắn theo phương ngang được đặt bằng không. Cách xử lý này đã được sử dụng ở các nghiên cứu trước đó [56,58]. Kích thước của miền tính toán là $W \times H = 4R_o \times 4R_o$.

Đường kính của hạt chất lỏng bên ngoài (D_o) được chọn làm chiều dài tham chiếu. Vận tốc ban đầu của hạt chất lỏng (U_c) là vận tốc tham chiếu. Do đó, thời gian tham chiếu sẽ là $\tau_c = D_o/U_c$. Các tham số không thứ nguyên được đưa ra như sau:

$$Re = \frac{\rho_m U_c D_o}{\mu_m}, \quad We = \frac{\rho_m U_c^2 D_o}{\sigma_o}, \quad Ma = \frac{\sigma_T D_o^2 \nabla T}{\mu_m \alpha_m}, \quad Bo = \frac{\rho_m g D_o^2}{\sigma_o}, \quad Pr = \frac{c_m \mu_m}{k_m}, \quad (4.1)$$

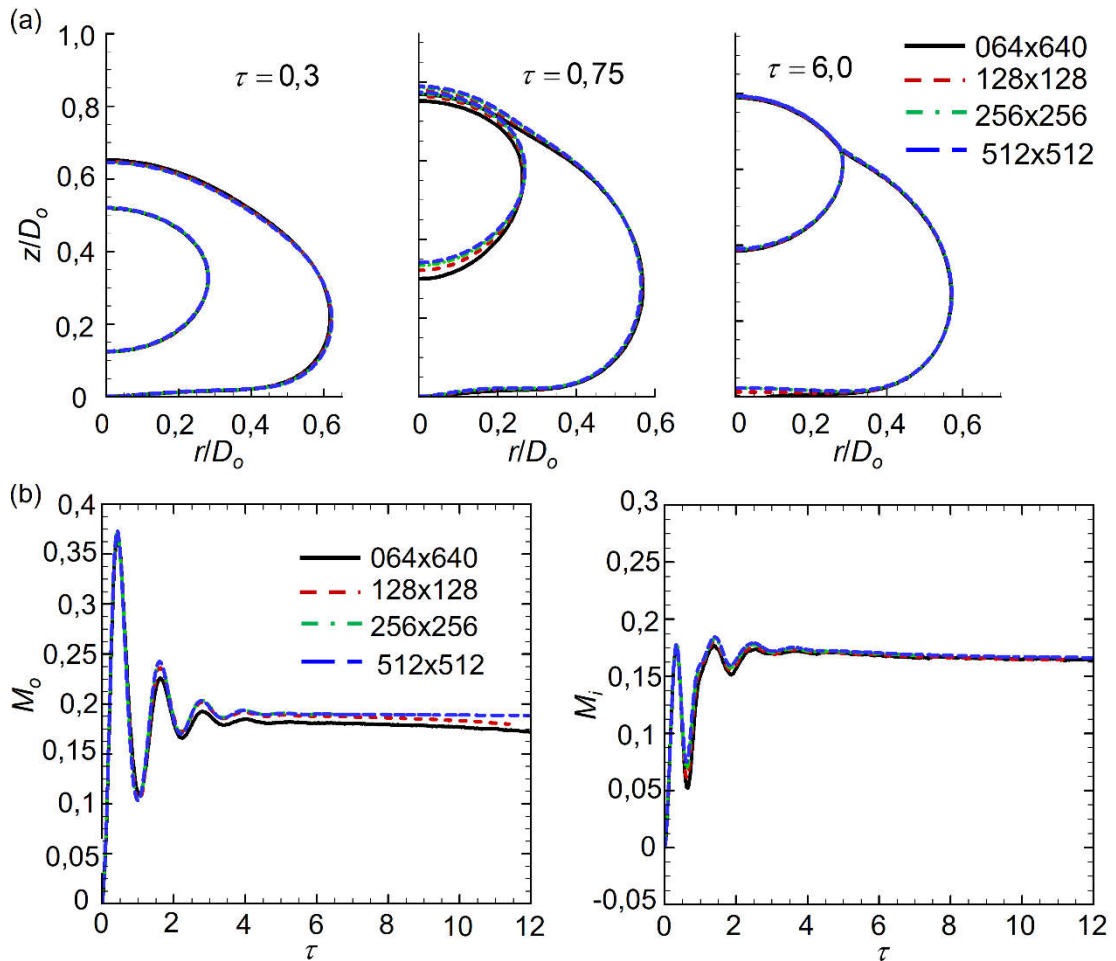
$$\frac{\rho_o}{\rho_m}, \frac{\rho_i}{\rho_m}, \frac{\mu_o}{\mu_m}, \frac{\mu_i}{\mu_m}, \frac{k_o}{k_m}, \frac{k_i}{k_m}, \frac{c_o}{c_m}, \frac{c_i}{c_m}, \sigma_{io} = \frac{\sigma_i}{\sigma_o}, \quad V_{io} = \frac{V_i}{V_o} \quad (4.2)$$

Trong đó, Re , We , Ma , Bo , Pr lần lượt là các số Reynolds, Weber, Marangoni, Bond, và Prandtl; α là hệ số khếch tán nhiệt $\alpha = k/\rho c$; V_{io} là tỷ lệ thể tích giữa hạt chất lỏng bên trong và hạt chất lỏng bên ngoài; V_i là thể tích của hạt chất lỏng bên trong; V_o là thể tích của hạt chất lỏng bên ngoài. Các tham số không thứ nguyên được

lựa chọn nhằm đưa ra tổng quát được động lực học của bài toán. Đồng thời việc lựa chọn các tham số cũng dựa trên các nghiên cứu trước đó [59,60].

Bài toán đưa ra được mô phỏng trên hệ tọa độ trụ (kết quả theo phương góc θ là không thay đổi). Lưới được sử dụng là lưới so le. Nếu số điểm lưới nhỏ, kết quả mô phỏng sẽ thiếu chính xác. Nếu số điểm lưới lớn, thời gian mô phỏng sẽ lâu. Vì vậy, để lựa chọn giá trị độ phân giải lưới tối ưu, luận án thực hiện mô phỏng với các độ phân giải lưới khác nhau, lần lượt là 064×064 , 128×128 , 256×256 , và 512×512 . Các tham số mô phỏng bao gồm $Re = 10$, $We = 1,0$, $Pr = 7,0$, $Bo = 1,0$, $V_{io} = 0,5$, $\rho_o/\rho_m = 0,1$, $\rho_i/\rho_m = 1,0$, $\mu_o/\mu_m = 0,1$, $\mu_i/\mu_m = 1,0$, $\sigma_{io} = 1,0$, $Ma = 350$. Kết quả mô phỏng được thể hiện ở Hình 4.2. Bởi vì kết quả theo phương quay θ là không đổi nên kết quả trên Hình 4.2 chỉ thể hiện theo hai phương là r và z của hệ tọa độ trụ. Trong Hình 4.2b, độ biến dạng của các hạt chất lỏng được xác định như sau:

$$M_o = \frac{2r_{o\max} - \Delta z_o}{2r_{o\max} + \Delta z_o}, M_i = \frac{2r_{i\max} - \Delta z_i}{2r_{i\max} + \Delta z_i} \quad (4.3)$$



Hình 4.2 Kiểm tra độ hội tụ của lưới. a) Hình dạng của hạt chất lỏng tại các thời điểm khác nhau. b) Độ biến dạng của hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài

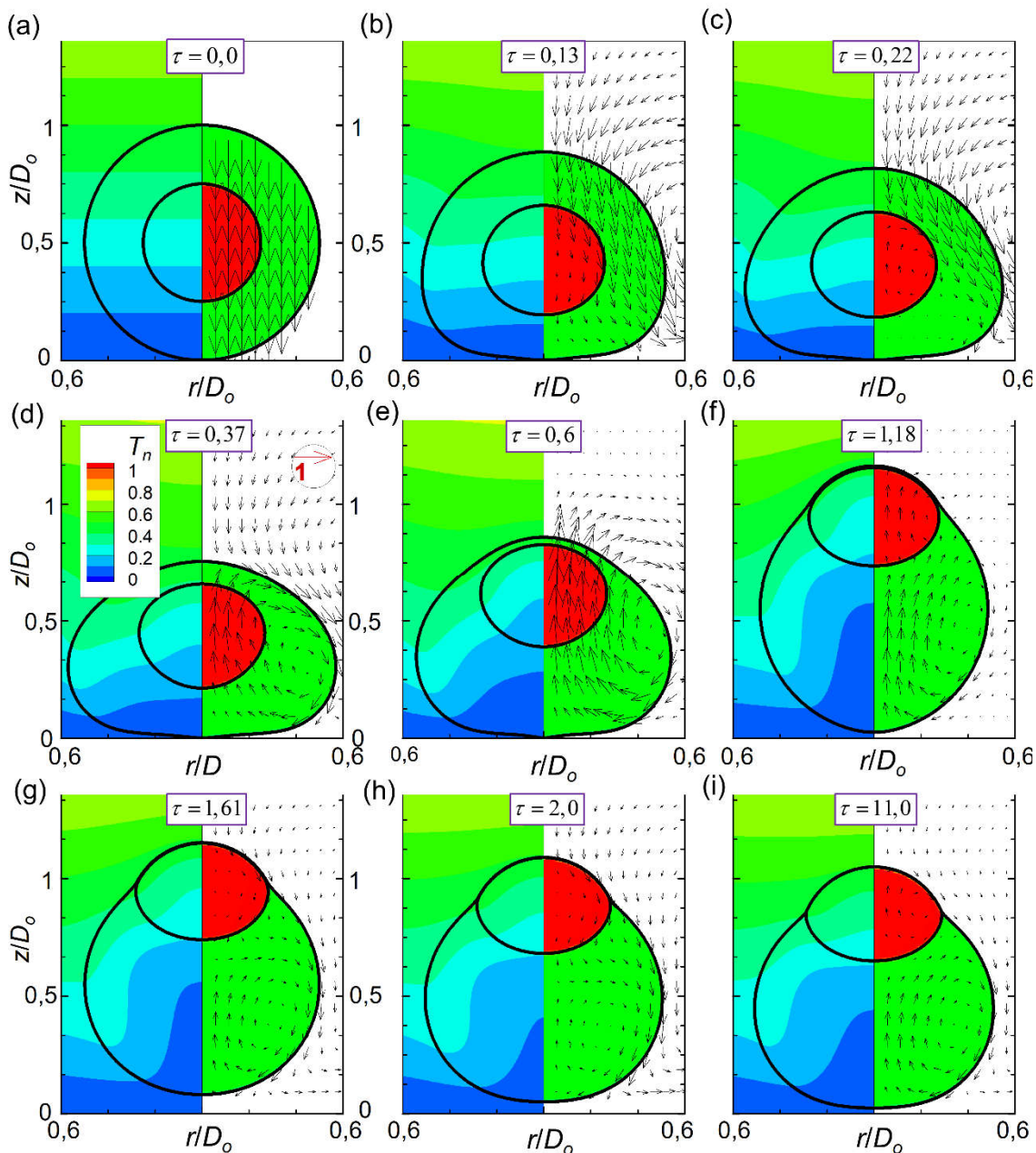
Trong đó, $r_{o\max}$ và $r_{i\max}$ lần lượt là độ rộng lớn nhất của hạt chất lỏng bên ngoài và bên trong theo phương hướng kính; Δz_o và Δz_i lần lượt là chiều dài lớn nhất của hạt chất lỏng bên ngoài và bên trong theo phương hướng trục. Kết quả mô phỏng cho thấy rằng lưới có độ phân giải là 64×64 cho kết quả sai lệch lớn so với các lưới còn lại. Lưới có độ phân giải 256×256 cho sai số nhỏ so với lưới 512×512 . Do đó, lưới 256×256 vẫn cho kết quả chính xác nhưng tiết kiệm thời gian mô phỏng hơn và được sử dụng cho các kết quả tính toán được trình bày ở dưới đây.

4.2. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Hình 4.3 mô tả quá trình chuyển động của hạt chất lỏng đa lớp tại các thời điểm khác nhau. Các tham số mô phỏng bao gồm $Ma = 350$, $Re = 10$, $We = 1,0$, $Pr = 7,0$, và $Bo = 1,0$. Tại thời điểm ban đầu, hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài chịu tác động chủ yếu bởi vận tốc ban đầu. Nguyên nhân là do ảnh hưởng của mao dẫn nhiệt lúc này là không đáng kể so với động năng được gây ra bởi vận tốc ban đầu. Hạt chất lỏng đa lớp di chuyển xuống phía dưới và tương tác với bề mặt rắn (*Hình 4.3b* và *c*). Tiếp theo, khi động năng của hạt chất lỏng đa lớp tiêu tán, các hạt chất lỏng co lại dưới tác động của lực căng bề mặt (*Hình 4.3d* và *e*). Lúc này lực mao dẫn nhiệt bắt đầu tác động lên hạt chất lỏng đa lớp và làm cho hạt chất lỏng bên trong đổi hướng và di chuyển lên phía có nhiệt độ cao hơn. Tiếp theo, cả hai hạt chất lỏng đều có xu hướng di chuyển lên phía trên (phía nhiệt độ cao hơn) (*Hình 4.3d* và *e*). Nếu lực mao dẫn nhiệt đủ lớn, hạt chất lỏng nảy lên và tách khỏi bề mặt rắn. Độ cao lớn nhất mà hạt chất lỏng đa lớp có thể nảy lên là $0,081D_o$ (*Hình 4.3g*). Do tác động của trọng lực hướng xuống dưới, hạt chất lỏng đa lớp từ từ rơi xuống. Tuy nhiên, hạt chất lỏng bên trong kéo hạt chất lỏng bên ngoài lên phía trên. Điều này dẫn đến hạt chất lỏng đa lớp dao động lên xuống trước khi cân bằng ở độ cao nhất định so với bề mặt rắn (tách biệt hẳn so với bề mặt rắn) (*Hình 4.3i*). Hiện tượng này cũng tìm thấy bởi Nagy và cộng sự khi nghiên cứu về hạt chất lỏng đơn lớp [61].

Việc nảy lên của hạt chất lỏng đa lớp phụ thuộc vào nhiều yếu tố khác nhau. Ví dụ, độ lớn của trường nhiệt độ, động năng ban đầu của hạt chất lỏng đa lớp và các đặc trưng vật lý của hạt chất lỏng đa lớp. Ngoài việc cân bằng ở một độ cao nhất định so với bề mặt rắn, hạt chất lỏng đa lớp có thể không nảy lên khỏi bề mặt rắn, hoặc nảy lên nhưng rơi xuống và nằm trên bề mặt rắn. Các tham số nghiên cứu được đưa ra như sau:

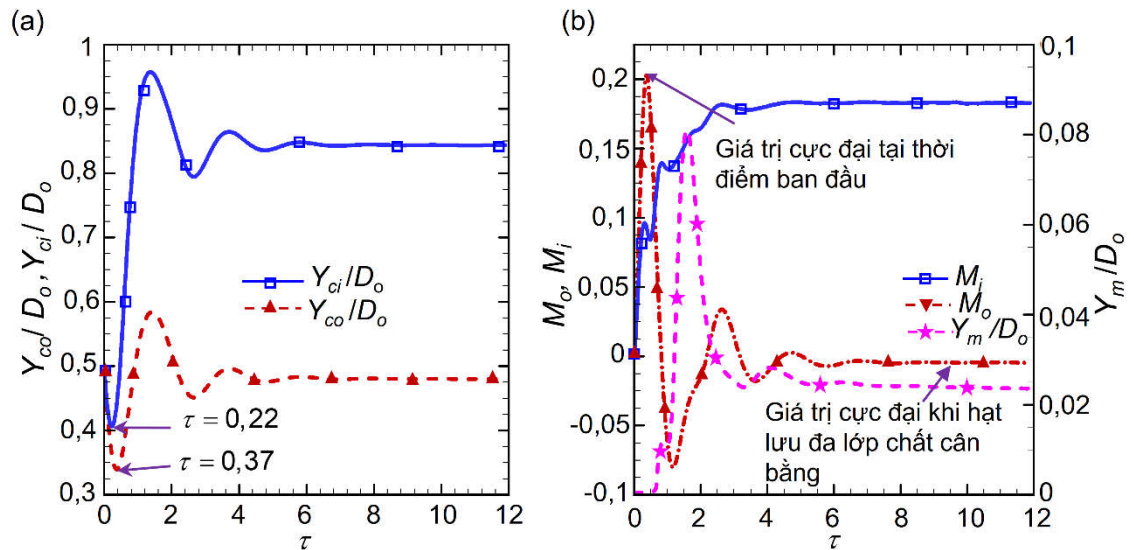
- Độ biến dạng của các hạt chất lỏng: biến dạng của hạt chất lỏng bên ngoài và hạt chất lỏng bên trong được kí hiệu lần lượt là M_o và M_i .



Hình 4.3 Mô tả chuyển động của hạt chất lỏng theo thời gian. Vận tốc sẽ được không thứ nguyên hóa theo U_c . Áp suất được không thứ nguyên hóa theo $0,5\rho_m U_c^2$.

$$\text{Nhiệt độ được không thứ nguyên } T_n = (T - T_{hot}) / (T_{hot} - T_{cold})$$

- Chiều cao này lên lớn nhất và chiều cao khi hạt chất lỏng cân bằng: các đại lượng này được kí hiệu lần lượt là H_m và H_s . Hạt chất lỏng đa lớp được xem là nảy lên khỏi bề mặt rắn khi mà điểm thấp nhất của hạt chất lỏng bên ngoài cao hơn 0,75 lần chiều cao của một ô lưới.
- Thời gian mà hạt chất lỏng tiếp xúc với bề mặt rắn (τ_r): thời gian này được tính từ thời điểm bắt đầu mô phỏng đến thời điểm mà hạt chất lỏng hoàn toàn ở phía trên bề mặt rắn.



Hình 4.4 Sự biến đổi theo thời gian của (a) trọng tâm của hạt chất lỏng bên trong (Y_{ci}) và bên ngoài (Y_{co}), và (b) độ biến dạng của hạt chất lỏng bên trong (M_i), bên ngoài (M_o), và vị trí thấp nhất của hạt chất lỏng đa lớp so với bề mặt rắn (Y_m)

Hình 4.4a đưa ra sự biến đổi theo thời gian của trọng tâm của hạt chất lỏng bên ngoài (Y_{co}) và hạt chất lỏng bên trong (Y_{ci}). Hình 4.4b đưa ra sự biến đổi của độ biến dạng theo thời gian của hạt chất lỏng bên trong (T_i), hạt chất lỏng bên ngoài (T_o), và chiều cao thấp nhất của hạt chất lỏng so với bề mặt rắn (Y_m). Từ công thức (4.3), ta dễ thấy rằng độ biến dạng của hạt chất lỏng lớn khi hạt chất lỏng bị biến dạng nhiều theo phương hướng kính ($r_{o\max}$ và $r_{i\max}$ tăng, Δz_o và Δz_i giảm). Giá trị này nhỏ hoặc có giá trị âm khi hạt chất lỏng biến dạng nhiều theo phương hướng trục ($r_{o\max}$ và $r_{i\max}$ giảm, Δz_o và Δz_i tăng). Tại thời điểm ban đầu, cả hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài đều di chuyển xuống dưới. Hạt chất lỏng bên ngoài tương tác với bề mặt rắn và hạt chất lỏng bên trong bị cản lại bởi lực nhớt của chất lỏng trung gian. Các hạt chất lỏng bị biến dạng theo phương hướng kính với mức độ biến dạng là tăng dần (Hình 4.3a, b, và c). Vì vậy, giá trị độ biến dạng của chúng tăng và đạt giá trị cực đại (Hình 4.4b). Sau đó, các hạt chất lỏng co lại và di chuyển lên phía trên với độ biến dạng của chúng giảm.

Độ biến dạng của của hạt chất lỏng bên trong giảm ít và tiếp tục tăng khi nó di chuyển tới bề mặt phía trên của hạt chất lỏng bên ngoài (đường nét liền ở Hình 4.4b). Điều này là do hạt chất lỏng bên trong có bán kính nhỏ và sức căng bề mặt lớn. Do đó, quá trình co lại diễn ra nhanh và giá trị độ biến dạng giảm nhanh. Khi ép bề mặt phía trên của hạt chất lỏng bên ngoài, hạt chất lỏng bên trong bị nén lại (biến dạng theo phương hướng kính) (Hình 4.3e và f). Vì vậy, giá trị độ biến dạng của nó tiếp tục tăng và đạt ổn định khi hạt chất lỏng đa lớp cân bằng.

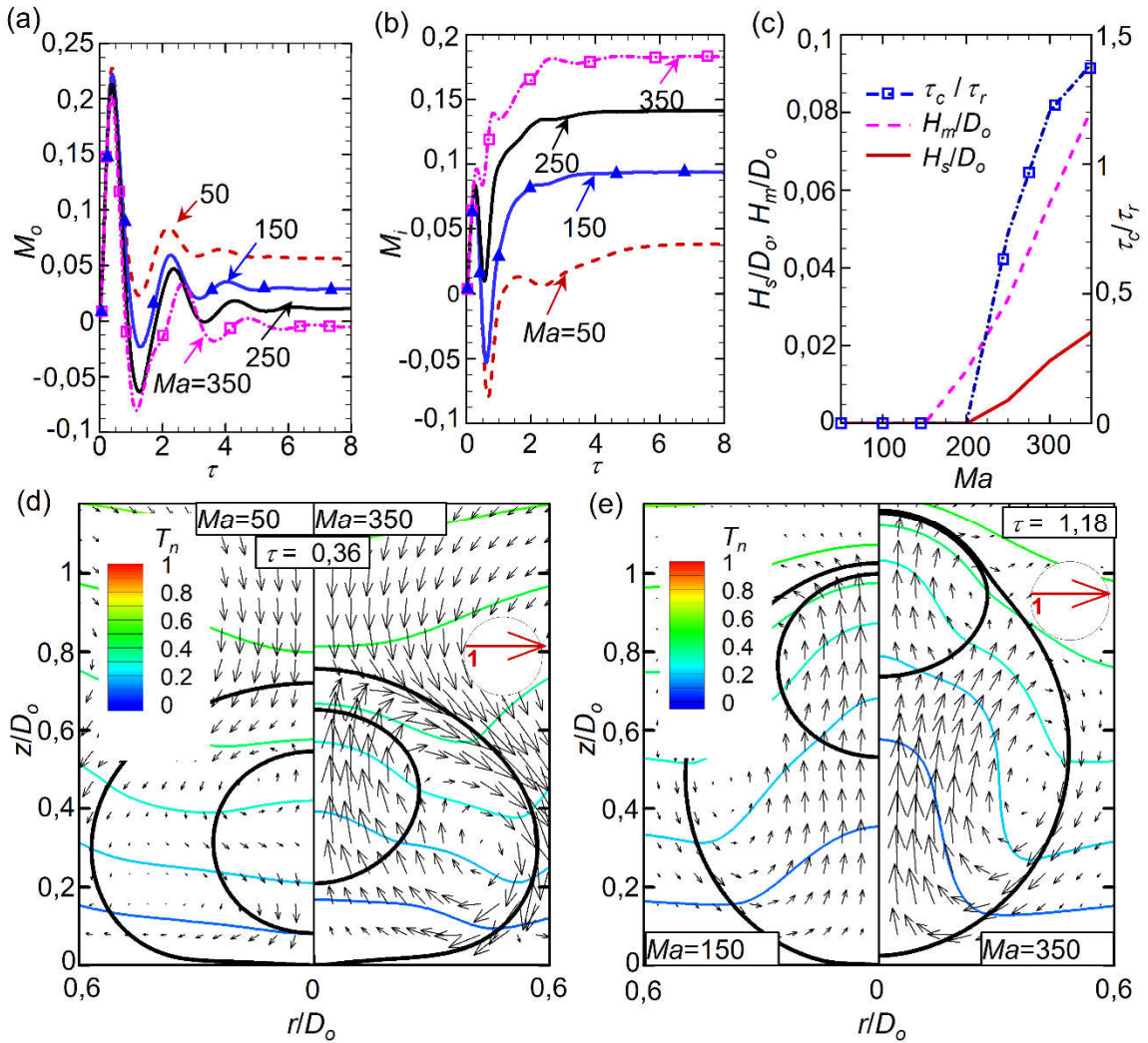
Độ biến dạng của hạt chất lỏng bên ngoài giảm, dao động lên xuống, và cuối cùng ổn định khi hạt chất lỏng đa lớp cân bằng (đường nét đứt ở *Hình 4.4b*). Bởi vì khi co lại, hạt chất lỏng bên ngoài bị biến dạng nhiều theo phương hướng trục (*Hình 4.3e* và *f*) nên giá trị độ biến dạng giảm. Sau đó, hạt chất lỏng đa lớp dao động lên xuống. Vì vậy, độ biến dạng của hạt chất lỏng bên ngoài dao động tăng và giảm trước khi đạt giá trị ổn định (độ biến dạng ổn định).

Sự thay đổi về độ cao nảy lên của hạt chất lỏng, thời gian tiếp xúc với bề mặt rắn, và độ biến dạng của hạt chất lỏng đa lớp phụ thuộc vào giá trị của bộ tham số không thứ nguyên. Vì vậy, luận án đưa ra ảnh hưởng của một số tham số không thứ nguyên quan trọng như số Marangoni (Ma), tỷ lệ thể tích giữa hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài (V_{io}), tỷ lệ sức căng bề mặt giữa hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài (σ_{io}), số Bond (Bo), số Weber (We), và số Reynolds (Re) ở các mục sau.

4.2.1. Ảnh hưởng của số Marangoni

Số Marangoni (Ma) được định nghĩa là tỷ lệ giữa tốc độ đối lưu với tốc độ khuếch tán của dòng Marangoni. Luận án đã đưa ra mô phỏng với giá trị của Ma thay đổi trong phạm vi 50 – 350. Các tham số khác bao gồm $V_{io} = 0,5$, $We = 1,0$, $Bo = 1,0$, $\sigma_{io} = 1$, $V_{io} = 0,125$, và $Re = 10,0$. *Hình 4.5a* và *b* thể hiện độ biến dạng của hạt chất lỏng đa lớp bên ngoài và bên trong. *Hình 4.5c* thể hiện độ cao nảy lên ổn định, độ cao nảy lên lớn nhất và thời gian mà hạt chất lỏng tiếp xúc với bề mặt rắn. *Hình 4.5d* và *e* thể hiện hình dạng của hạt chất lỏng đa lớp, trường vận tốc và trường nhiệt độ xung quanh hạt chất lỏng tại các giá trị Ma khác nhau và tại các thời điểm khác nhau.

Kết quả ở *Hình 4.5* cho thấy rằng với số Marangoni càng lớn thì độ biến dạng cực đại của hạt chất lỏng bên ngoài càng nhỏ (*Hình 4.5a*). Tuy nhiên, giá trị này đối với hạt chất lỏng bên trong càng lớn (*Hình 4.5b*). Bởi vì khi tăng giá trị Ma , vận tốc ban đầu tác động vào hạt chất lỏng đa lớp là không đổi. Do đó, độ biến dạng của hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài không đổi (tại thời điểm ban đầu, các đường thẳng trên *Hình 4.5a* và *b* có độ dốc như nhau). Tuy nhiên, khi động năng ban đầu của các hạt chất lỏng tiêu tán, hạt chất lỏng bên trong di chuyển lên phía trên nhanh hơn (trường hợp mô phỏng có giá trị Ma lớn, phía bên phải ở *Hình 4.5d*). Điều này làm cản trở quá trình biến dạng của hạt chất lỏng bên ngoài (*Hình 4.5d*) và dẫn đến độ biến dạng cực đại của hạt chất lỏng bên ngoài giảm. Ở giai đoạn sau (sau khi các hạt chất lỏng đạt độ biến dạng cực đại), khi tăng giá trị của Ma , lực mao dẫn nhiệt tác động lên hạt chất lỏng bên trong tăng và làm hạt chất lỏng bên ngoài bị biến dạng nhiều hơn theo phương dọc trục (hình bên phải của *Hình 4.5e*). Vì vậy, độ biến dạng ổn định của hạt bên ngoài giảm (*Hình 4.5a*). Đối với hạt chất lỏng bên trong, xu hướng



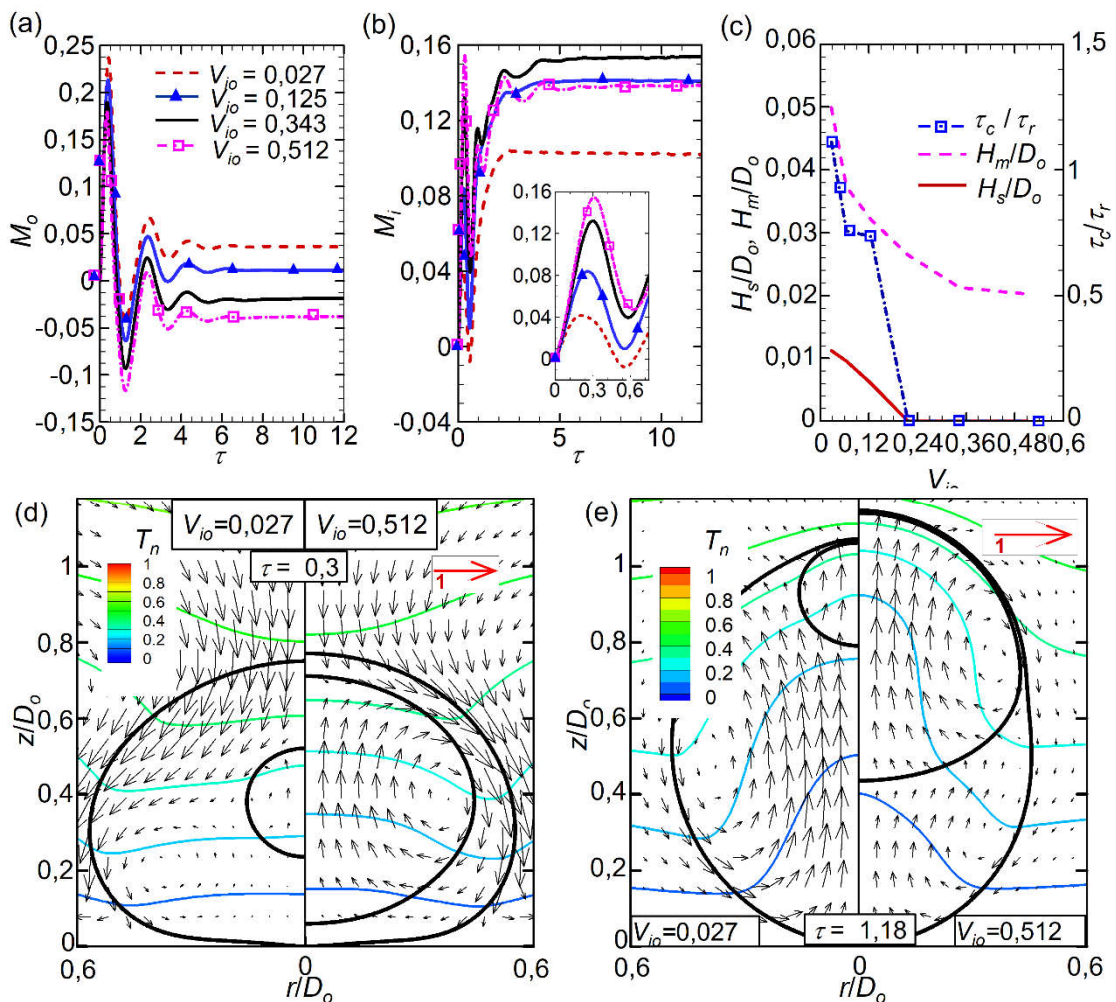
Hình 4.5 Kết quả đánh giá ảnh hưởng của số Marangoni

là ngược lại. Bởi vì với giá trị Ma lớn, hạt chất lỏng bên trong bị biến dạng nhiều hơn theo phương hướng kính do tác động của lực mao dẫn nhiệt (Hình 4.5e). Vì vậy, giá trị độ biến dạng ổn định tăng (Hình 4.5b).

Hình 4.5c đưa ra ảnh hưởng của số Marangoni đến chiều cao nảy lên (H_m , H_s) và thời gian mà hạt chất lỏng tiếp xúc với bề mặt rắn. Kết quả mô phỏng cho thấy rằng khi tăng giá trị Ma , chiều cao nảy lên lớn nhất và chiều cao nảy lên ổn định của hạt chất lỏng đa lớp tăng. Tuy nhiên, thời gian tiếp xúc với bề mặt rắn của hạt chất lỏng đa lớp giảm (t_c/t_r tăng khi tăng giá trị của Ma). Hạt chất lỏng đa lớp nảy lên và tách khỏi bề mặt rắn khi giá trị của Ma lớn hơn hoặc bằng 250. Bởi vì khi tăng giá trị Ma , lực mao dẫn nhiệt tác động đến các hạt chất lỏng tăng [62] (Hình 4.5e). Do đó, hạt chất lỏng đa lớp nảy lên khỏi bề mặt rắn sớm hơn, nảy lên cao hơn, và cân bằng ở một độ cao cao hơn.

4.2.2. Ảnh hưởng của tỷ lệ thể tích giữa hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài

Trong thực tế, hạt chất lỏng bên ngoài có thể chứa hạt chất lỏng bên trong có kích thước khác nhau. Kích thước của hạt chất lỏng bên trong có ảnh hưởng nhiều đến động lực học của hạt chất lỏng đa lớp. Vì vậy, mục này đưa ra ảnh hưởng của tỷ lệ thể tích giữa hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài (V_{io}) đến độ biến dạng, chiều cao nảy lên (H_m và H_s), và thời gian hạt chất lỏng tiếp xúc với bề mặt rắn. Tỷ lệ này thay đổi trong phạm vi từ 0,064 đến 0,512 (theo đó, tỷ lệ giữa bán kính hạt chất lỏng bên trong và hạt chất lỏng bên ngoài thay đổi trong phạm vi tương ứng từ 0,4 đến 0,8). Các tham số mô phỏng khác bao gồm $Ma = 250$, $Re = 10$, $We = 1,0$, và $Bo = 1,0$, $\sigma_{io} = 1,0$. Hình 4.6a và b thể hiện độ biến dạng của hạt chất lỏng đa lớp bên ngoài và bên trong. Hình 4.6c thể hiện độ cao nảy lên ổn định, độ cao nảy lên lớn nhất và thời gian mà hạt chất lỏng tiếp xúc với bề mặt rắn. Hình 4.6d và e thể hiện hình dạng của hạt chất lỏng đa lớp, trường vận tốc và trường nhiệt độ xung quanh hạt chất lỏng tại các giá trị V_{io} khác nhau và tại các thời điểm khác nhau.



Hình 4.6 Đánh giá ảnh hưởng của tỷ lệ hạt chất lỏng bên trong và hạt chất lỏng bên ngoài

Ở giai đoạn đầu, hạt chất lỏng bên trong có kích thước lớn sẽ cản trở quá trình biến dạng theo phương hướng kính của hạt chất lỏng bên ngoài (hình bên phải của *Hình 4.6d*). Vì vậy, độ biến dạng cực đại của hạt chất lỏng bên ngoài giảm (*Hình 4.6a*). Khi tăng kích thước của hạt chất lỏng bên trong, không gian giữa hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài càng giảm (hình bên phải của *Hình 4.6d*) và chuyển động của hạt chất lỏng bên trong ít bị cản trở bởi lực nhớt của hạt chất lỏng bên ngoài. Ngoài ra, hạt chất lỏng bên trong càng lớn càng dễ bị biến dạng. Vì vậy, giá trị độ biến dạng cực đại của hạt chất lỏng bên trong tăng (*Hình 4.6a*).

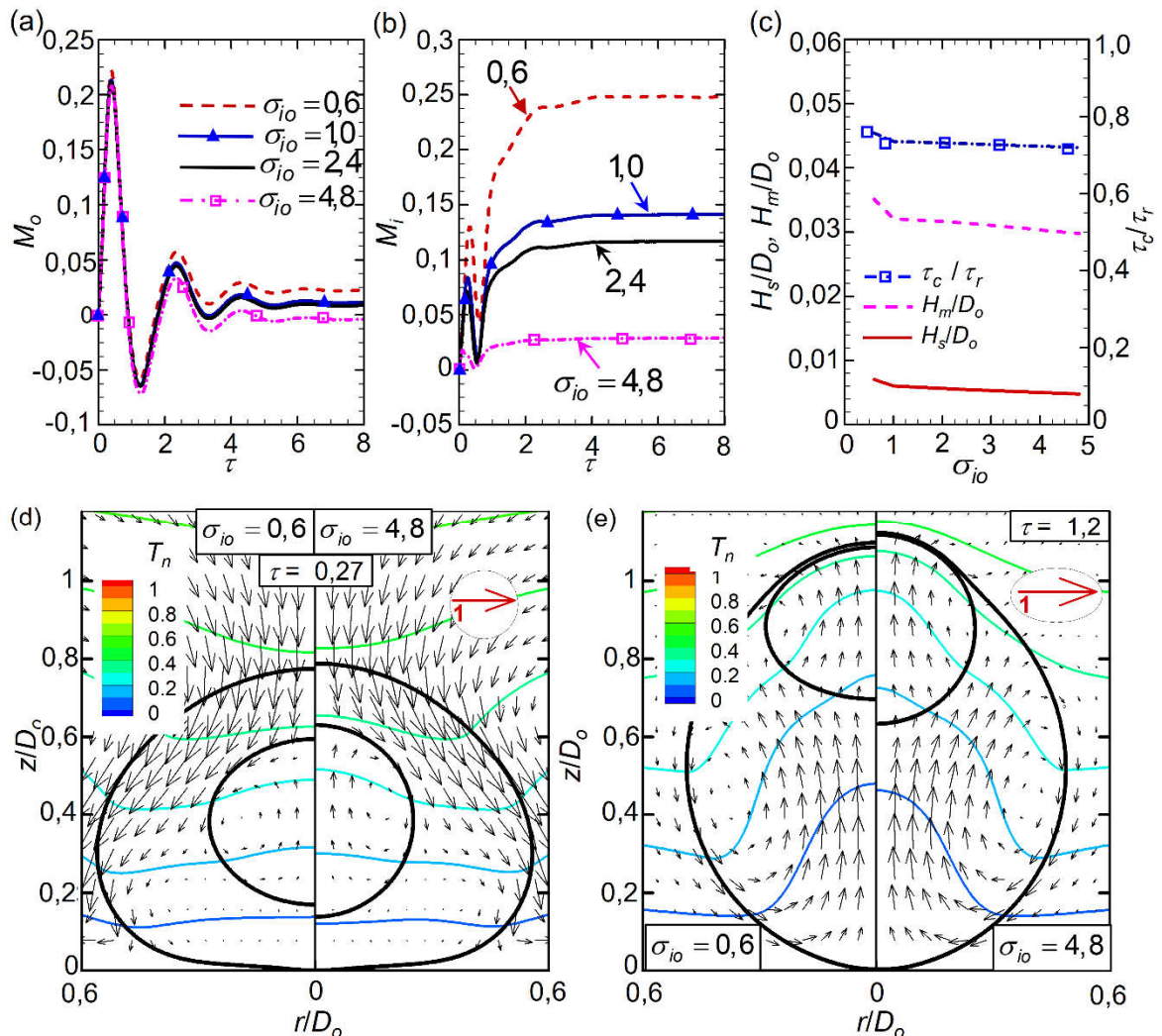
Ở giai đoạn sau đó (sau khi các hạt chất lỏng đạt giá trị độ biến dạng cực đại), khi tăng kích thước của hạt chất lỏng bên trong, lực mao dẫn nhiệt tác động lên hạt chất lỏng bên trong tăng [62]. Điều này làm hạt chất lỏng bên ngoài biến dạng nhiều hơn theo phương hướng trục (hình bên phải của *Hình 4.6e*). Vì vậy, độ biến dạng ổn định của hạt chất lỏng bên ngoài giảm (*Hình 4.6a*). Ngược lại, khi tăng kích thước của hạt chất lỏng bên trong, cản trở từ hạt chất lỏng bên ngoài làm hạt chất lỏng bên trong biến dạng nhiều hơn theo phương ngang (hình bên phải của *Hình 4.6e*). Do đó, giá trị độ biến dạng ổn định của hạt chất lỏng bên trong tăng (*Hình 4.6b*). Tuy nhiên khi thể tích hạt chất lỏng bên trong đủ lớn ($V_{io} > 0,343$ hay $R_i/R_o > 0,7$), độ biến dạng của nó bị dao động mạnh trước khi đạt giá trị ổn định. Với $V_{io} = 0,512$ ($R_i/R_o = 0,8$), độ biến dạng ổn định của hạt chất lỏng bên trong nhỏ hơn so với trường hợp $V_{io} = 0,343$ ($R_i/R_o = 0,7$). Bởi vì sự tuần hoàn khép kín của lực mao dẫn nhiệt phía dưới hạt chất lỏng bên trong yếu đi khi không gian giữa hai hạt chất lỏng nhỏ (hình bên phải của *Hình 4.6e*), hạt chất lỏng bên trong dao động nhiều hơn và giá trị độ biến dạng ổn định nhỏ hơn so với khi giá trị của $V_{io} = 0,343$.

Hình 4.6c thể hiện ảnh hưởng của tỷ lệ tích giữa hạt chất lỏng bên trong và hạt chất lỏng bên ngoài tới chiều cao nảy lên ổn định, chiều cao nảy lên lớn nhất và thời gian tiếp xúc của hạt chất lỏng đa lớp với bề mặt rắn. Khi tăng giá trị của V_{io} , chiều cao nảy lên lớn nhất (H_m) và chiều cao nảy lên ổn định (H_s) của hạt chất lỏng đa lớp giảm. Khi giá trị V_{io} lớn hơn hoặc bằng 0,216 ($R_i/R_o \geq 0,6$), hạt chất lỏng đa lớp nằm lại trên bề mặt rắn. Như đã giải thích ở trên, tuần hoàn khép kín của lực mao dẫn nhiệt phía dưới của hạt chất lỏng bên ngoài yếu đi khi hạt chất lỏng bên trong có thể tích lớn (*Hình 4.6e*). Điều này dẫn đến lực mao dẫn nhiệt không đủ để nâng và giữ cân bằng hạt chất lỏng đa lớp. Thời gian tiếp xúc với bề mặt rắn của hạt chất lỏng đa lớp tăng khi tăng thể tích của hạt chất lỏng bên trong (giá trị của τ_c/τ_r giảm). Bởi vì hạt chất lỏng bên trong càng lớn, thời gian biến dạng càng lâu. Điều này dẫn đến hạt chất lỏng bên ngoài biến dạng lâu hơn. Do đó, hạt chất lỏng đa lớp tiếp xúc với bề mặt rắn lâu hơn.

4.2.3. Ảnh hưởng của tỷ lệ sức căng bề mặt của hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài

Mục này đưa ra ảnh hưởng của tham số σ_{io} đến độ biến dạng, chiều cao nảy lên lớn nhất, chiều cao nảy lên ổn định, và thời gian tiếp xúc với bề mặt rắn của hạt chất lỏng đa lớp. Giá trị tỷ lệ này được thay đổi trong phạm vi 0,6 - 4,8. Các tham số mô phỏng khác bao gồm $Ma = 250$, $V_{io} = 0,125$, $We = 1,0$, và $Re = 10$. Hình 4.7a và b thể hiện độ biến dạng của hạt chất lỏng đa lớp bên ngoài và bên trong. Hình 4.7c thể hiện độ cao nảy lên ổn định, độ cao nảy lên lớn nhất và thời gian mà hạt chất lỏng tiếp xúc với bề mặt rắn. Hình 4.7d và e thể hiện hình dạng của hạt chất lỏng đa lớp, trường vận tốc và trường nhiệt độ xung quanh hạt chất lỏng tại các giá trị σ_{io} khác nhau và tại các thời điểm khác nhau.

Khi tăng giá trị của σ_{io} , áp suất bên trong tăng và hạt chất lỏng khó biến dạng hơn khi chịu tác động của vận tốc và chạm cũng như từ lực mao dẫn nhiệt (Hình 4.7d



Hình 4.7 Kết quả đánh giá ảnh hưởng của tỷ lệ sức căng bề mặt của hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài

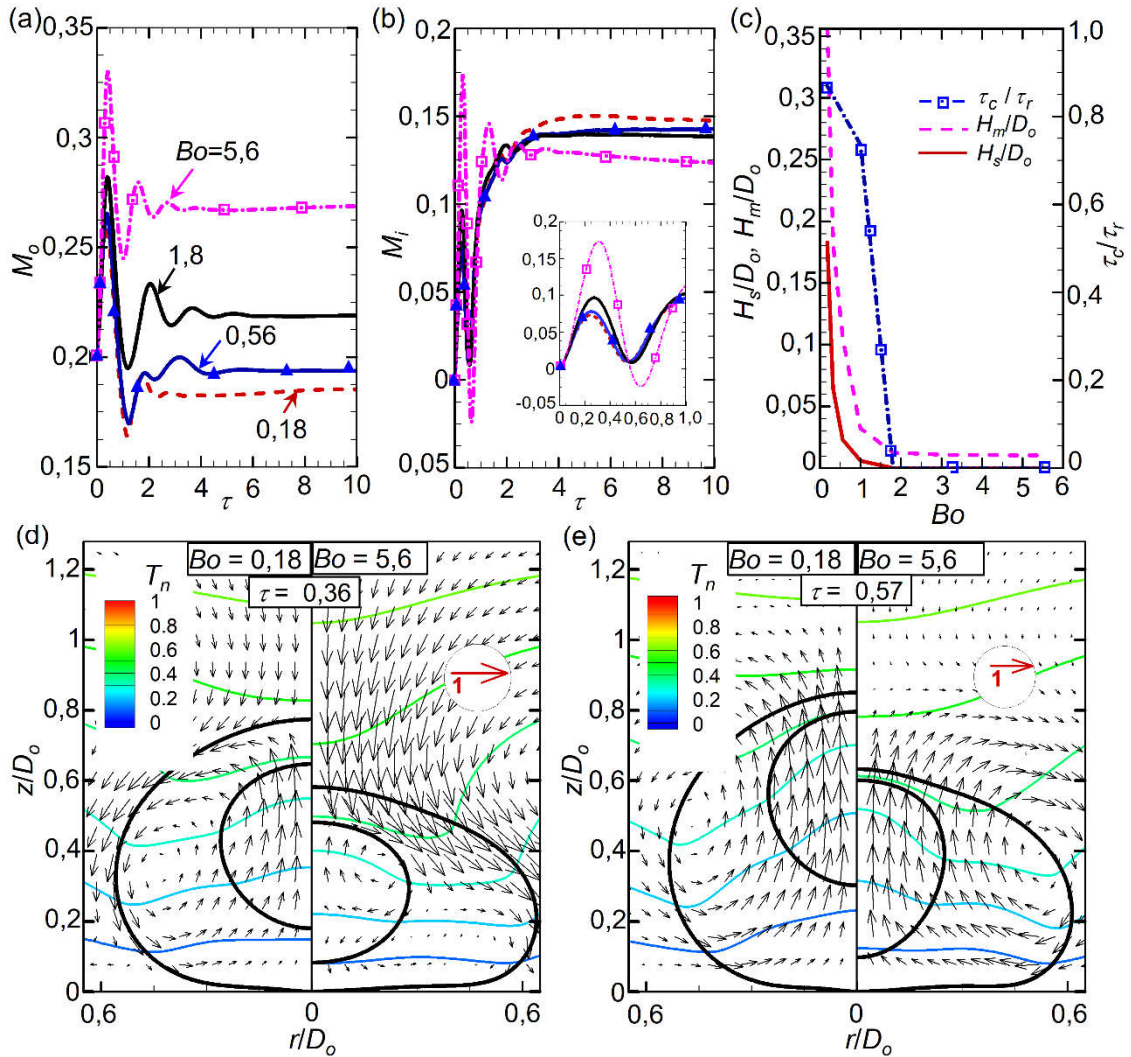
và e). Vì vậy, tại thời điểm đầu và tại thời điểm khi hạt chất lỏng ổn định, độ biến dạng cực đại và độ biến dạng ổn định của hạt chất lỏng bên trong giảm (*Hình 4.7b*). Điều này là do việc thay đổi của giá trị σ_{io} không làm thay đổi nhiều trường nhiệt độ (*Hình 4.7d* và e) cũng như việc tăng áp suất bên trong hạt chất lỏng bên trong không tác động nhiều đến hạt chất lỏng bên ngoài. Do đó, giá trị độ biến dạng của hạt chất lỏng bên ngoài không thay đổi nhiều ở giai đoạn đầu và giai đoạn khi hạt chất lỏng đã lớp cân bằng (*Hình 4.7a*).

Sự ảnh hưởng của tham số này tới chiều cao nảy lên (H_m, H_s) và thời gian mà hạt chất lỏng tiếp xúc với bề mặt rắn được thể hiện ở *Hình 4.7c*. Khi thay đổi giá trị của σ_{io} chỉ ảnh hưởng đến áp suất bên trong hạt chất lỏng bên trong [56] mà trường nhiệt độ không thay đổi nhiều (*Hình 4.7f*). Vì vậy, chiều cao nảy lên lớn nhất, chiều cao ổn định, và thời gian hạt chất lỏng tiếp xúc với bề mặt rắn là gần như không thay đổi.

4.2.4. Ảnh hưởng của số Bond

Số Bond là tham số không nguyên được định nghĩa là tỷ lệ giữa trọng lực và lực căng bề mặt. Tỷ lệ này có thể ảnh hưởng lớn đến khả năng nảy lên cũng như thời gian mà hạt chất lỏng đã lớp tiếp xúc với bề mặt rắn. NCS đã thực hiện mô phỏng với giá trị của Bo trong phạm vi từ 0,18 đến 5,6. Các tham số mô phỏng khác bao gồm $Ma = 250$, $Re = 10$, $We = 1,0$, $Pr = 7,0$, $V_{io} = 0,125$, và $\sigma_{io} = 1,0$. *Hình 4.8a* và b thể hiện độ biến dạng của hạt chất lỏng đã lớp bên ngoài và bên trong. *Hình 4.8c* thể hiện độ cao nảy lên ổn định, độ cao nảy lên lớn nhất và thời gian mà hạt chất lỏng tiếp xúc với bề mặt rắn. *Hình 4.8d* và e thể hiện hình dạng của hạt chất lỏng đã lớp, trường vận tốc và trường nhiệt độ xung quanh hạt chất lỏng tại các giá trị Bo khác nhau và tại các thời điểm khác nhau.

Ở giai đoạn đầu, khi tăng giá trị của Bo , trọng lực khiến hạt chất lỏng bên ngoài bị biến dạng nhiều hơn theo phương hướng kính khi chịu tác động của vận tốc ban đầu (*Hình 4.8d*). Điều này kéo theo hạt chất lỏng bên trong cũng bị biến dạng nhiều hơn (*Hình 4.8d*). Độ biến dạng cực đại của hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài tăng. Ở giai đoạn sau và giai đoạn khi hạt chất lỏng cân bằng, khi tăng giá trị Bo , lực mao dẫn nhiệt tác động lên hạt chất lỏng đã lớp là không đổi (*Hình 4.8e*). Vì vậy, chúng ta dễ hiểu rằng độ biến dạng ổn định của hạt chất lỏng bên ngoài tăng (*Hình 4.8a*). Tuy nhiên, do hạt chất lỏng bên ngoài bị biến dạng theo phương ngang nhiều với giá trị Bo lớn, xoáy sinh ra từ trường nhiệt độ ép hạt chất lỏng bên trong bị biến dạng theo phương hướng trục (hình bên phải của *Hình 4.8e*). Do đó, độ biến dạng ổn định của hạt chất lỏng bên trong giảm (*Hình 4.8b*).



Hình 4.8 Kết quả đánh giá ảnh hưởng của số Bond

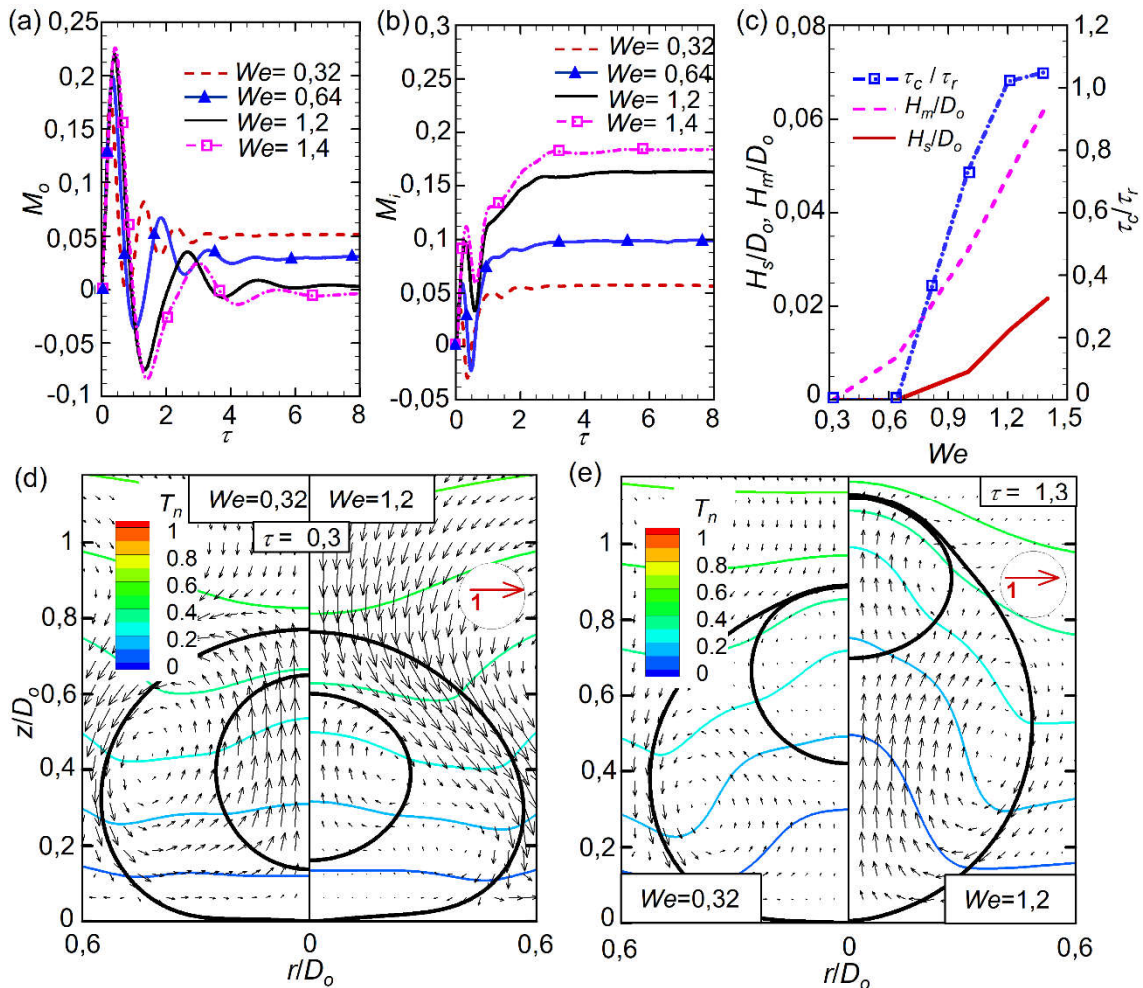
Hình 4.8c đưa ra ảnh hưởng của số Bo đến chiều cao nảy lên và thời gian mà hạt chất lỏng đa lớp tiếp xúc với bề mặt rắn. Khi tăng giá trị Bo , trọng lực của hạt chất lỏng bên ngoài tăng. Điều này dẫn đến lực mao dẫn nhiệt sẽ càng khó nâng hạt chất lỏng đa lớp lên khỏi bề mặt rắn (hình bên phải Hình 4.8e). Do đó, chiều cao nảy lên cao nhất và chiều cao nảy lên ổn định của hạt chất lỏng đa lớp giảm. Khi trọng lực của hạt chất lỏng bên ngoài đủ lớn ($Bo > 1,0$), lực mao dẫn nhiệt không đủ để giữ hạt chất lỏng cân bằng ở một độ cao so với bề mặt rắn và hạt chất lỏng ổn định ở trên bề mặt rắn. Sự gia tăng trọng lực của hạt chất lỏng bên ngoài đồng thời làm hạt chất lỏng nảy lên chậm hơn (giá trị τ_c/τ_r giảm khi tăng giá trị Bo).

4.2.5. Ảnh hưởng của số Weber

Mục này đánh giá ảnh hưởng của số Weber đến độ biến dạng, chiều cao nảy lên (H_m, H_s), và thời gian hạt chất lỏng đa lớp tiếp xúc với bề mặt rắn. Số Weber được thay đổi trong phạm vi 0,32 - 1,4, các tham số khác bao gồm $Ma = 250, Re = 10,0$,

$Bo = 1,0$, $We = 1,0$, $V_{io} = 0,125$. Hình 4.9a và b thể hiện độ biến dạng của hạt chất lỏng đa lớp bên ngoài và bên trong. Hình 4.9c thể hiện độ cao nảy lên ổn định, độ cao nảy lên lớn nhất và thời gian mà hạt chất lỏng tiếp xúc với bề mặt rắn. Hình 4.9d và e thể hiện hình dạng của hạt chất lỏng đa lớp, trường vận tốc và trường nhiệt độ xung quanh hạt chất lỏng tại các giá trị We khác nhau và tại các thời điểm khác nhau.

Khi tăng giá trị We , lực quán tính ban đầu của hạt chất lỏng bên ngoài tăng, hạt chất lỏng bên ngoài biến dạng theo phương hướng kính nhiều hơn (Hình 4.9d). Đồng thời, tác động từ hạt chất lỏng bên ngoài kéo theo hạt chất lỏng bên trong bị biến dạng theo hướng tương tự. Do đó, giá trị độ biến dạng cực đại của hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài tăng (Hình 4.9a và b). Ở giai đoạn sau và giai đoạn hạt chất lỏng đa lớp cân bằng, khi tăng giá trị We , lực ma dẫn nhiệt tác động lên hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài tăng (Hình 4.9e). Tác động của hạt chất lỏng bên trong làm hạt chất lỏng bên ngoài biến dạng nhiều theo phương hướng trục. Đồng thời, việc cản trở từ hạt chất lỏng bên ngoài khiến hạt chất lỏng bên trong bị nén lại và biến dạng nhiều theo phương hướng kính (hình bên phải của Hình 4.9e). Vì vậy, giá trị độ biến



Hình 4.9 Kết quả đánh giá ảnh hưởng của số Weber

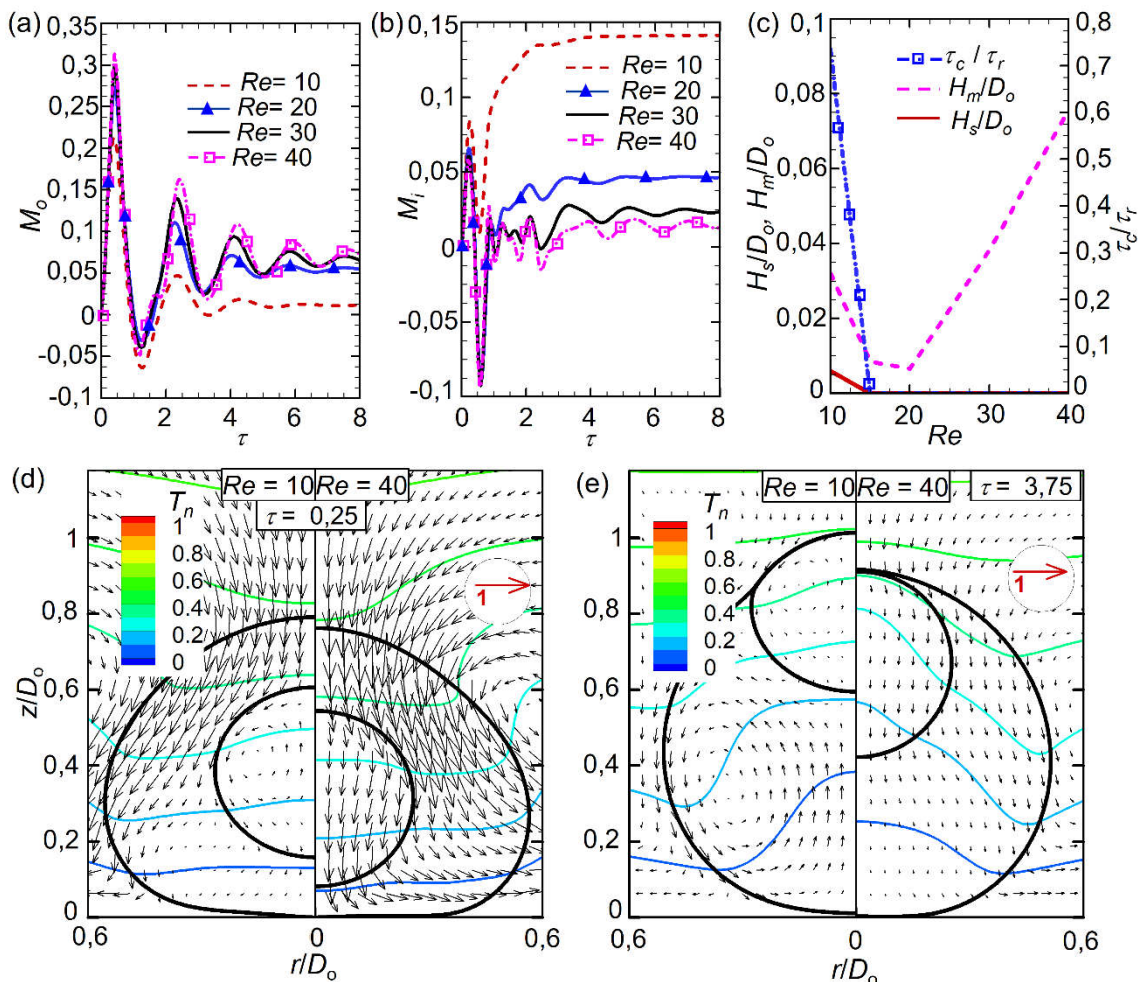
dạng ổn định của hạt chất lỏng bên ngoài giảm. Ngược lại, giá trị này của hạt chất lỏng bên trong tăng.

Hình 4.9c thể hiện ảnh hưởng của số Weber đến độ cao nảy lên (H_s và H_m), và thời gian hạt chất lỏng đa lớp tiếp xúc với bề mặt rắn. Khi giá trị của $We > 0,64$, hạt chất lỏng đa lớp có thể nảy lên và cân bằng ở một độ cao nhất định so với bề mặt rắn. Khi tăng giá trị của số We từ $We = 0,64$, độ cao nảy lên lớn nhất và độ cao khi hạt chất lỏng cân bằng tăng. Đồng thời, thời gian hạt chất lỏng tiếp xúc của hạt chất lỏng với bề mặt rắn giảm. Bởi vì khi giá trị của We lớn, lực mao dẫn nhiệt tác động lên các hạt chất lỏng tăng (*Hình 4.9e*). Do đó, hạt chất lỏng nảy cao hơn và cân bằng ở một khoảng cách cao hơn so với bề mặt rắn. Việc gia tăng lực mao dẫn nhiệt cũng đồng nghĩa với việc hạt chất lỏng đa lớp dễ dàng nảy lên hơn. Do đó, thời gian tiếp xúc với bề mặt rắn giảm.

4.2.6. Ảnh hưởng của số Reynolds

Hình 4.10 đưa ra kết quả mô phỏng đánh giá ảnh hưởng của số Reynolds đến độ biến dạng, chiều cao nảy lên (H_m , H_s), và thời gian tiếp xúc của hạt chất lỏng với bề mặt rắn. Giá trị của số Re được thay đổi trong phạm vi từ 10 đến 40. Các tham số mô phỏng khác bao gồm $Ma = 250$, $Bo = 1,0$, $We = 1,0$, và, $V_{io} = 0,125$, $Re = 10,0$. *Hình 4.10a* và *b* thể hiện độ biến dạng của hạt chất lỏng đa lớp bên ngoài và bên trong. *Hình 4.10c* thể hiện độ cao nảy lên ổn định, độ cao nảy lên lớn nhất và thời gian mà hạt chất lỏng tiếp xúc với bề mặt rắn. *Hình 4.10d* và *e* thể hiện hình dạng của hạt chất lỏng đa lớp, trường vận tốc và trường nhiệt độ xung quanh hạt chất lỏng tại các giá trị Re khác nhau và tại các thời điểm khác nhau.

Ở thời điểm ban đầu, khi tăng giá trị của Re , lực cản nhớt của hạt chất lỏng bên ngoài giảm. Điều này làm cho hạt chất lỏng bên ngoài bị biến dạng theo phương hướng kính nhiều hơn dưới tác động của vận tốc ban đầu (*Hình 4.10d*). Vì vậy, giá trị độ biến dạng cực đại của hạt chất lỏng bên ngoài trong giai đoạn này tăng (*Hình 4.10a*). Giá trị độ biến dạng cực đại trong giai đoạn này của hạt chất lỏng bên trong giảm (*Hình 4.10b*). Ở giai đoạn sau và khi hạt chất lỏng đa lớp cân bằng, với giá trị Re lớn, lực nhớt của hạt chất lỏng bên ngoài nhỏ khiến nó biến dạng theo phương ngang nhiều hơn (hình bên phải của *Hình 4.10*). Ngoài ra, lực mao dẫn nhiệt cũng không khác nhau lớn khi thay đổi giá trị của Re . Vì vậy, giá trị độ biến dạng ổn định của hạt chất lỏng bên ngoài tăng. Đối với hạt chất lỏng bên trong, khi tăng giá trị Re , lực mao dẫn nhiệt tác động làm hạt chất lỏng bên trong bị ép theo phương ngang ít hơn (hình bên phải *Hình 4.10*), giá trị độ biến dạng ổn định của hạt chất lỏng bên trong giảm (*Hình 4.10b*).



Hình 4.10 Kết quả đánh giá ảnh hưởng của số Reynolds

Hình 4.10c đưa ra ảnh hưởng của số Reynolds đến chiều cao nảy lên (H_m , H_s) và thời gian tiếp xúc của hạt chất lỏng đa lớp với bề mặt rắn. Khi tăng giá trị Re , hạt chất lỏng đa lớp khó cân bằng ở phía trên bề mặt rắn. Bởi vì xu hướng của hạt chất lỏng bên ngoài là giãn ra theo phương hướng tâm với giá trị Re lớn (hình bên phải Hình 4.10). Vì vậy, lực ma dẫn nhiệt khó nâng hạt chất lỏng đa lớp lên khỏi bề mặt rắn cũng như cân bằng ở một độ cao nào đó. Với giá trị Re lớn, thời gian biến dạng của hạt chất lỏng đa lớp lâu hơn (Hình 4.10d). Do đó, hạt chất lỏng đa lớp tiếp xúc với bề mặt rắn lâu hơn.

4.2.7. Biểu đồ trạng thái

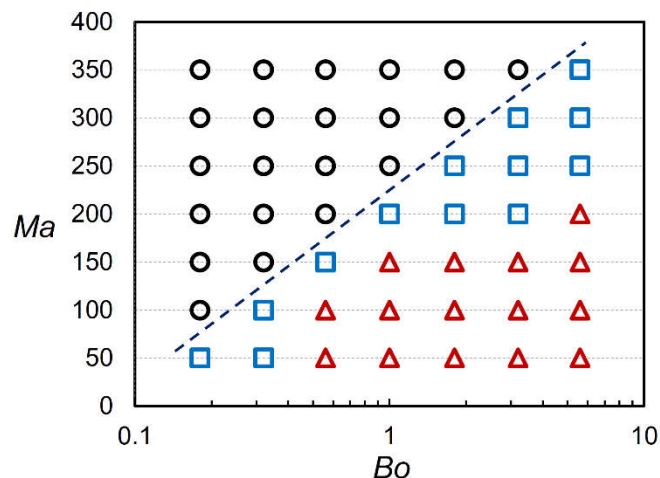
Trong mục trước, luận án đã phân tích ảnh hưởng của các tham số không thứ nguyên tới động lực học của hạt chất lỏng đa lớp. Theo đó, tương tác của hạt chất lỏng đa lớp với bề mặt rắn được chia thành ba trường hợp sau:

- Trường hợp 1: Hạt chất lỏng đa lớp nảy lên và cân bằng ở một vị trí cách bề mặt rắn một khoảng nhất định;

- Trường hợp 2: Hạt chất lỏng đa lớp nảy lên nhưng rơi xuống và cân bằng trên bề mặt rắn;
- Trường hợp 3: Hạt chất lỏng không nảy lên và cân bằng trên bề mặt rắn.

Những kết quả phân tích ở các mục trước cho thấy rằng tham số không thứ nguyên Ma và Bo có ảnh hưởng lớn đến việc nảy lên của hạt chất lỏng đa lớp. Tuy nhiên, khi thay đổi giá trị của Ma , giá trị của số Bo là cố định và ngược lại. Ở mục này, NCS thực hiện mô phỏng với giá trị Ma thay đổi trong phạm vi 50 – 350, với bước giá trị là 50. Tương ứng mỗi giá trị Ma , giá trị của Bo thay đổi trong phạm vi từ 0,18 đến 5,6. Việc mô phỏng này nhằm mục đích đưa ra biểu đồ sự chuyển tiếp trạng thái của hạt chất lỏng đa lớp phụ thuộc vào cả hai tham số trên. Kết quả về biểu đồ trạng thái được thể hiện ở Hình 4.11. Kết quả cho thấy rằng với các giá trị của Ma lớn và Bo nhỏ (góc trái của biểu đồ), hạt chất lỏng đa lớp nảy lên và cân bằng ở vị trí có độ cao cách bề mặt rắn một khoảng nhất định. Điều này là do với các giá trị của Ma và Bo này, lực mao dẫn nhiệt của các hạt chất lỏng lớn và trọng lực của hạt chất lỏng là nhỏ. Với các giá trị Bo lớn và Ma nhỏ (góc phía dưới bên phải của biểu đồ), hạt chất lỏng không thể nảy lên khỏi bề mặt rắn. Nguyên nhân là, ở vùng này lực mao dẫn nhiệt tác động nên các hạt chất lỏng là nhỏ và trọng lực của hạt chất lỏng là lớn. Vùng còn lại trên biểu đồ đưa ra những cặp giá trị của Ma và Bo mà hạt chất lỏng đa lớp nảy lên khỏi bề mặt rắn nhưng lại rơi xuống và cân bằng trên bề mặt rắn.

4.3. KẾT LUẬN CHƯƠNG 4



- Hạt chất lỏng đa lớp nảy lên khỏi bề mặt rắn nhưng rơi xuống và cân bằng trên bề mặt rắn.
- △ Hạt chất lỏng không thể nảy lên khỏi bề mặt rắn.
- Hạt chất lỏng đa lớp nảy lên khỏi bề mặt rắn và cân bằng ở một độ cao nhất định so với bề mặt rắn

Hình 4.11 Biểu đồ sự thay đổi trạng thái của hạt chất lỏng đa lớp

Chương này đã trình bày động lực học tương tác của hạt chất lỏng đa lớp với bề mặt rắn không dính ướt dưới tác động của mao dẫn nhiệt. Luận án đã đánh giá ảnh hưởng của các tham số không thứ nguyên như Ma , Bo , Re , We , V_{io} , và σ_{io} . Các kết quả quan trọng được tóm tắt lại như sau:

+ Sau khi tương tác với bề mặt rắn, nhờ tác động của gradient nhiệt độ, hạt chất lỏng đa lớp có thể ở những trạng thái sau:

- Hạt chất lỏng đa lớp nảy lên khỏi bề mặt rắn, cân bằng ở phía trên bề mặt rắn.
- Hạt chất lỏng đa lớp không nảy lên.
- Hạt chất lỏng đa lớp nảy lên, tuy nhiên sau đó rơi xuống và nằm ở bề mặt rắn.

+ Sự thay đổi của số Marangoni ảnh hưởng lớn đến chiều cao nảy lên lớn nhất và chiều cao nảy lên ổn định của hạt chất lỏng đa lớp. Kết quả cho thấy rằng với giá trị Ma nhỏ hơn 150, hạt chất lỏng đa lớp không thể nảy lên khỏi bề mặt rắn. Với giá trị Ma trong khoảng 150 đến 250, hạt chất lỏng nảy lên, nhưng sau đó rơi xuống và nằm cân bằng trên bề mặt rắn. Với giá trị $Ma > 250$, hạt chất lỏng nảy lên và cân bằng ở một độ cao nhất định so với bề mặt rắn.

+ Khi tăng kích thước của hạt chất lỏng bên trong sẽ làm giảm chiều cao nảy lên của hạt chất lỏng đa lớp. Với thể tích của hạt chất lỏng bên trong lớn hơn 0,216, hạt chất lỏng có thể nảy lên nhưng sau đó rơi xuống và ổn định trên bề mặt rắn.

+ Khi thay đổi tỷ lệ sức căng bề mặt của chất lỏng bên trong với chất lỏng bên ngoài sẽ ảnh hưởng nhiều đến độ biến dạng của hạt chất lỏng bên trong. Tuy nhiên, sự thay đổi này không ảnh hưởng nhiều đến thời gian mà hạt chất lỏng đa lớp tiếp xúc với bề mặt rắn trước khi nó nảy lên cũng như chiều cao mà hạt nảy lên.

+ Tăng giá trị số Bo làm cho hạt chất lỏng khó nảy lên khỏi bề mặt rắn. Với giá trị Bo lớn hơn 1,0, hạt chất lỏng đa lớp cân bằng trên bề mặt rắn.

+ Khi tăng giá trị của số Weber, với giá trị $We > 0,64$, làm tăng chiều cao nảy lên ổn định của hạt chất lỏng đa lớp.

+ Khi giảm giá trị của số Re , hạt chất lỏng đa lớp sẽ dễ nảy lên hơn.

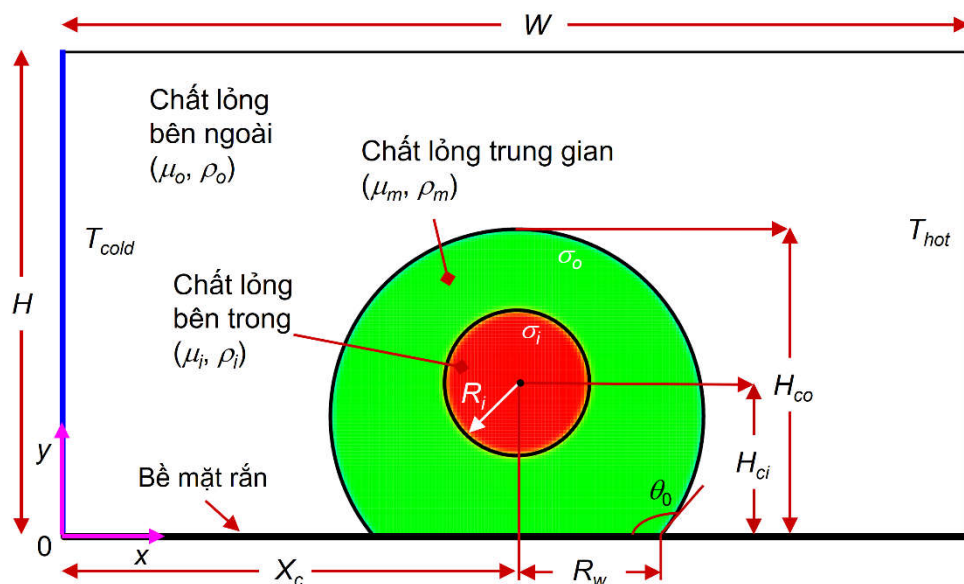
Chương 4 đã chỉ ra động lực học của hạt chất lỏng tương tác với bề mặt rắn không dính ướt dưới tác động của mao dẫn nhiệt. Nghiên cứu trạng thái của hạt chất lỏng đa lớp so với bề mặt rắn có thể được ứng dụng nhiều trong việc chế tạo các bề mặt tự làm sạch, bảo vệ các bề mặt trong các ngành công nghiệp hóa học, và đưa ra phương pháp mới di chuyển hạt chất lỏng đa lớp trong các mạch vi lỏng.

Chương 5. MÔ PHỎNG CHUYỂN ĐỘNG CỦA HẠT CHẤT LỎNG TRÊN BỀ MẶT DÍNH ƯỚT DƯỚI TÁC ĐỘNG CỦA MAO DẪN NHIỆT

Ở Chương 4, luận án đã đưa ra tương tác trực tiếp của hạt chất lỏng và bề mặt rắn. Tuy nhiên, bề mặt rắn là không dính ướt hoàn toàn và gradient nhiệt độ có phương thẳng đứng. Trong Chương 5, hạt chất lỏng đa lớp tương tác trực tiếp với bề mặt dính ướt với gradient nhiệt độ được đặt theo phương ngang.

5.1. MÔ HÌNH BÀI TOÁN VÀ PHƯƠNG PHÁP MÔ PHỎNG

Hình 5.1 đưa ra mô hình hai chiều của bài toán hạt chất lỏng đa lớp di chuyển trên bề mặt rắn. Bài toán bao gồm hạt chất lỏng đa lớp (hai lớp) được đặt dính ướt một phần trên bề mặt rắn. Góc dính ướt ban đầu của hạt chất lỏng bên ngoài với bề mặt rắn là θ_0 , với bán kính dính ướt là R_w và chiều cao là H_{co} . Hạt chất lỏng bên ngoài có thể tích tương đương với một hạt chất lỏng hình cầu có bán kính là R_o . Hạt chất lỏng bên trong có bán kính là R_i . Trọng tâm của hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài cùng đặt trên một đường thẳng song song với trục y . Tại thời điểm ban đầu, trục này cách trục y một đoạn là X_c . Trọng tâm của hạt chất lỏng bên trong cách trục x một khoảng là H_{ci} . Bài toán đặt ra bao gồm ba chất lỏng. Các chỉ số dưới “ i ”, “ o ”, và “ m ” kí hiệu cho chất lỏng bên trong, chất lỏng bên ngoài, và chất lỏng trung gian. Hệ số sức căng bề mặt của chất lỏng bên trong và chất lỏng trung gian được kí hiệu là σ_i . Hệ số sức căng bề mặt của chất lỏng trung gian và chất lỏng bên ngoài được kí hiệu là σ_o . Hạt chất lỏng chịu tác động của lực mao dẫn nhiệt được gây ra bởi một trường nhiệt độ có nhiệt độ cao hơn (T_{hot}) ở phía bên phải của hạt chất lỏng và nhiệt độ thấp



Hình 5.1 Mô hình hóa bài toán hạt chất lỏng đa lớp di chuyển trên bề mặt rắn

hơn ở phía bên trái của hạt chất lỏng (T_{cold}) (Hình 5.1). Miền tính toán có kích thước là $W \times H$.

Phương trình toán học của bài toán bao gồm phương trình (2.1), (2.2), (2.4). Các hạt chất lỏng trong bài toán có kích thước nhỏ (từ vài trăm μm đến một vài mm). Do đó, đại lượng \mathbf{g} trong phương trình bảo toàn động lượng có giá trị nhỏ và có thể bỏ qua. Các chất lỏng cũng được giả thiết là không hợp lại với nhau. Giả thiết này đã được sử dụng trong các nghiên cứu trước đó [14,54].

Phương trình năng lượng đã được đề cập ở **Chương 2** [phương trình 2.2 và 2.5]. Điều kiện biên không trượt được áp dụng ở biên bên trái, bên phải và bên trên của miền tính toán. Đối với biên bên dưới (bề mặt rắn), luận án sử dụng mô hình góc tiếp động được đề xuất bởi Muradoglu và Tasoglu [44]. Chi tiết về mô hình đã được đưa ra ở **Chương 2**, mục 2.2.5.

Bán kính tương đương của hạt chất lỏng bên ngoài R_o được chọn là chiều dài tham chiếu. Vận tốc U_c được chọn làm vận tốc tham chiếu. Vận tốc này được xác định như sau:

$$U_c = \frac{\sigma_T R_o \nabla T}{\mu_o} \quad (5.1)$$

Trong đó, ∇T là gradient nhiệt độ, $\nabla T = (T_{hot} - T_{cold})/H$. Theo đó, thời gian không thứ nguyên τ được xác định dựa trên giá trị của R_o và U_c , $\tau = tR_o/U_c$. Các tham số không thứ nguyên được đưa ra như sau:

$$Ma = \frac{U_c R_o}{\alpha_m}, \quad Oh = \frac{\mu_m}{\sqrt{\rho_m \sigma_o R_o}}, \quad Pr = \frac{\mu_m c_m}{k_m}, \quad (5.2)$$

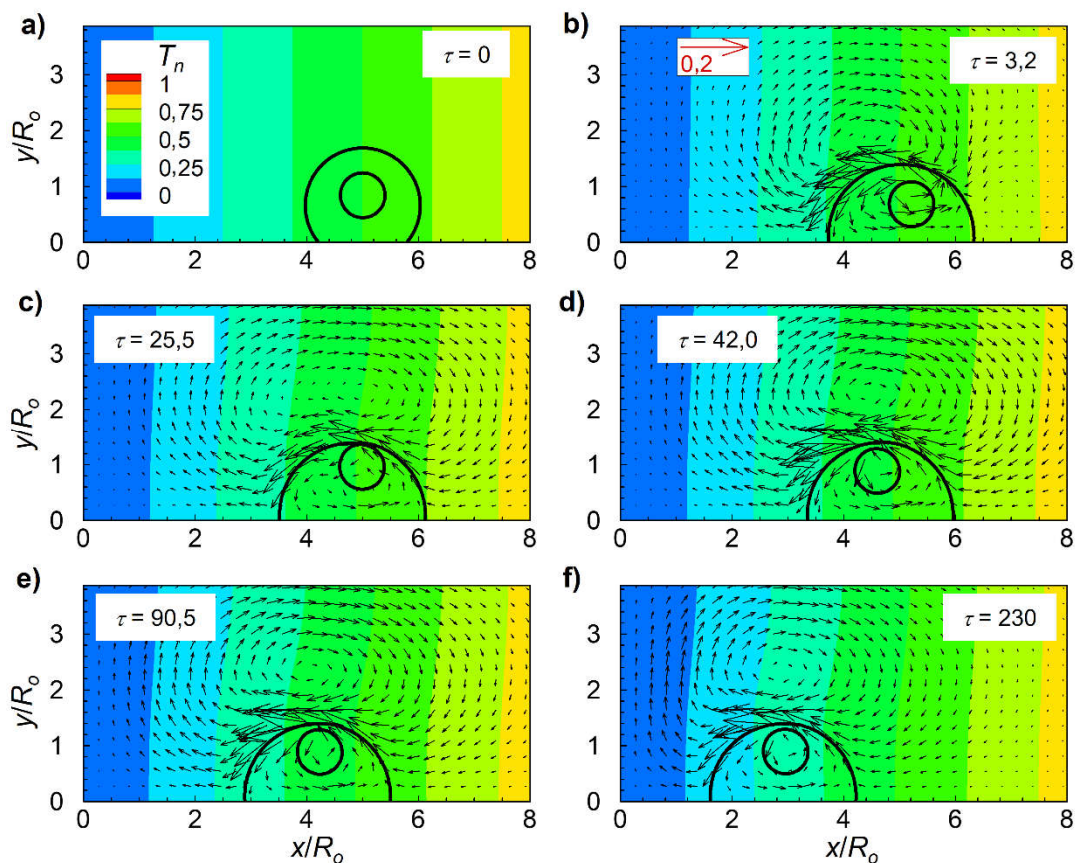
$$\frac{\rho_o}{\rho_m}, \frac{\rho_i}{\rho_m}, \frac{\mu_o}{\mu_m}, \frac{\mu_i}{\mu_m}, \frac{k_i}{k_m}, \frac{k_o}{k_m}, \frac{c_o}{c_m}, \frac{c_i}{c_m}, \sigma_{io} = \frac{\sigma_i}{\sigma_o}, R_{io} = \frac{R_i}{R_o} \quad (5.3)$$

Trong đó, Ma , Oh , Pr , lần lượt là số Marangoni, số mao dẫn, số Ohnesorge, số Prandtl, số Reynolds. Hệ số khuếch tán nhiệt được kí hiệu là α , $\alpha = k/\rho c$. Các tham số không thứ nguyên và phạm vi giá trị của chúng được đưa ra dựa trên các nghiên cứu trước đó về hạt chất lỏng đơn lớp [1,2].

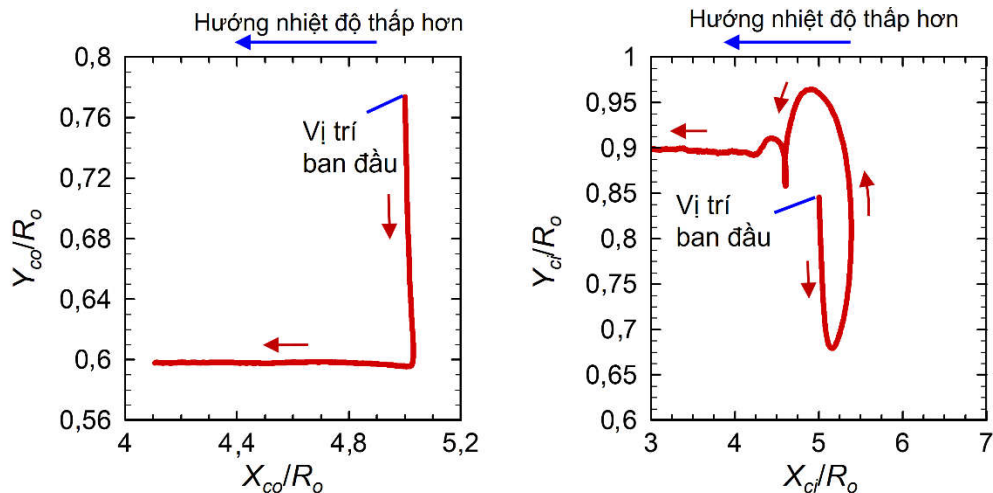
Hạt chất lỏng di chuyển sang phía có nhiệt độ thấp hơn hay nhiệt độ cao hơn được biểu hiện thông qua quỹ đạo của trọng tâm của các hạt chất lỏng. Vì vậy, luận án đưa ra tham số nghiên cứu đó là quỹ đạo chuyển động của trọng tâm của hạt chất lỏng bên trong và hạt chất lỏng bên ngoài. Tọa độ trọng tâm của hạt chất lỏng bên trong được kí hiệu là (X_{ci}, Y_{ci}) . Tương tự, tọa độ trọng tâm của hạt chất lỏng bên ngoài được kí hiệu là (X_{co}, Y_{co}) .

5.2. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Hình 5.2 đưa ra chuyển động của hạt chất lỏng đa lớp trên bề mặt rắn với tham số mô phỏng bao gồm $Ma = 0,72$, $Pr = 0,5$, $Oh = 0,2$, $R_{io} = 0,4$, $\mu_{om} = 0,1$, $\rho_o/\rho_m = 2,0$, $\rho_l/\rho_m = 1,0$, $\mu_l/\mu_m = 1,0$, $k_o/k_m = 1,0$, $k_l/k_m = 1,0$, $c_o/c_m = 1,0$, và $c_l/c_m = 1,0$, $\theta_e = 93^\circ$. Ban đầu hạt chất lỏng đa lớp được đặt dính ướt một phần trên bề mặt rắn ($\theta = 130^\circ$). Sau đó, hạt chất lỏng đa lớp chịu tác động của trường nhiệt. Hạt chất lỏng bên ngoài di chuyển sang phía có nhiệt thấp hơn. Trong khi đó, hạt chất lỏng bên trong có xu hướng di chuyển sang phía có nhiệt cao hơn. Hai hạt chất lỏng có xu hướng chuyển động ngược hướng nhau (Hình 5.2b). Khi hạt chất lỏng bên trong tiến dần tới bề mặt của hạt chất lỏng bên ngoài, hạt chất lỏng bên trong di chuyển theo xoáy xuất hiện quanh biên dạng của hạt chất lỏng bên ngoài [sự chênh lệch vận tốc trên biên phân cách của hạt chất lỏng bên ngoài tại nơi có nhiệt độ cao hơn và nơi có nhiệt độ thấp hơn tạo ra dòng xoắn ngược lại (xoáy) (Hình 5.2b)]. Vì vậy, quỹ đạo của hạt chất lỏng bên trong có dạng xoáy (Hình 5.3b). Trong khi đó, hạt chất lỏng bên ngoài tiếp



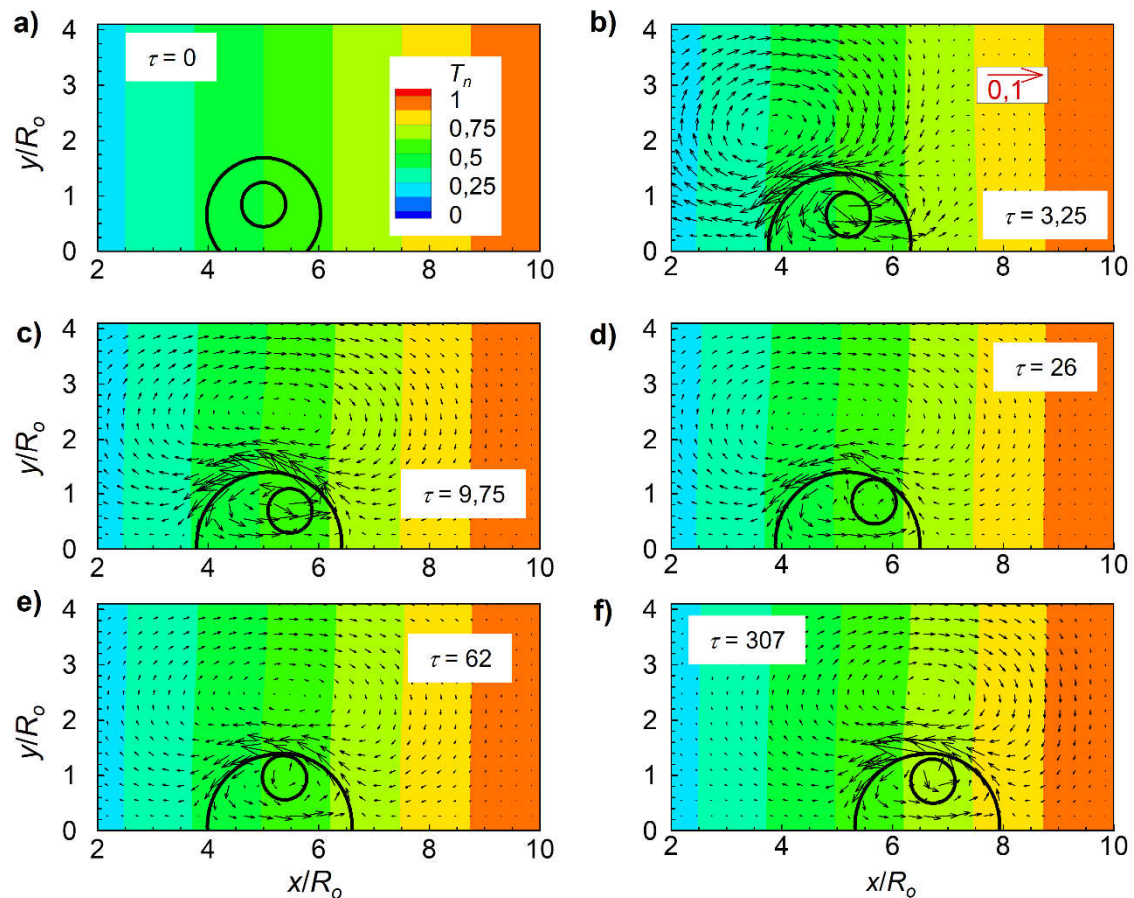
Hình 5.2 Chuyển động của hạt chất lỏng tại các thời điểm khác nhau, trường vận tốc được không thứ nguyên hóa bằng U_c . Trường áp suất được không thứ nguyên hóa bởi $0,5\rho_m U_c^2$. Nhiệt độ không thứ nguyên $T_n = (T - T_{cold}) / (T_{hot} - T_{cold})$



Hình 5.3 Quỹ đạo chuyển động của (a) hạt chất lỏng bên ngoài (b) hạt chất lỏng bên trong

tục di chuyển sang phía có nguồn nhiệt thấp hơn. Chuyển động xoáy của hạt chất lỏng bên trong dần dần biến mất khi hạt chất lỏng bên trong hoàn toàn chuyển động theo hạt chất lỏng bên ngoài. Cả hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài đều di chuyển sang phía có nhiệt thấp hơn. Quỹ đạo của chúng gần như ổn định (Hình 5.2f và Hình 5.3).

Các nghiên cứu trước đó đã chỉ ra rằng hạt chất lỏng đơn lớp có thể di chuyển sang phía có nhiệt độ thấp hơn hoặc phía có nhiệt độ cao hơn [1,2]. Kết quả mô phỏng của luận án cũng cho thấy hiện tượng tương tự. Các tham số giống với tham số được đưa ra ở Hình 5.3. Tuy nhiên, với giá trị tỷ số độ nhớt giữa chất lỏng bên ngoài và chất lỏng trung gian $\mu_{om} = 0,8$, hạt chất lỏng đa lớp di chuyển sang phía có nhiệt cao hơn. Chuyển động của hạt chất lỏng đa lớp theo thời gian trong trường hợp này được thể hiện ở Hình 5.4. Hạt chất lỏng bên ngoài và bên trong ngay lập tức di chuyển cùng hướng, sang phía có nhiệt độ cao hơn (Hình 5.4b). Hạt chất lỏng bên trong có quỹ đạo xoáy tương tự với trường hợp ở Hình 5.2. Điều này là do chuyển động xoáy của hạt chất lỏng bên trong được gây ra bởi xoáy được tạo ra từ lực mao dẫn nhiệt tác động vào hạt chất lỏng bên ngoài (Hình 5.4c,d, và e và Hình 5.5). Khi hạt chất lỏng đa lớp chuyển động ra xa phía có nhiệt độ thấp hơn, quỹ đạo của chúng dần trở lên ổn định. Xu hướng chuyển động của hạt chất lỏng đa lớp phụ thuộc vào nhiều yếu tố khác nhau như tính dính ướt của bề mặt rắn, kích thước hạt chất lỏng bên trong, và góc tiếp xúc tĩnh của hạt chất lỏng với bề mặt rắn, v.v... Ở các mục sau, chúng ta sẽ xem xét ảnh hưởng của các tham số không thứ nguyên như tỷ số độ nhớt của chất lỏng bên ngoài và chất lỏng trung gian, tỷ số bán kính của hạt chất lỏng bên trong và bán kính tương đương của hạt chất lỏng bên ngoài, và góc tiếp xúc tĩnh của hạt chất

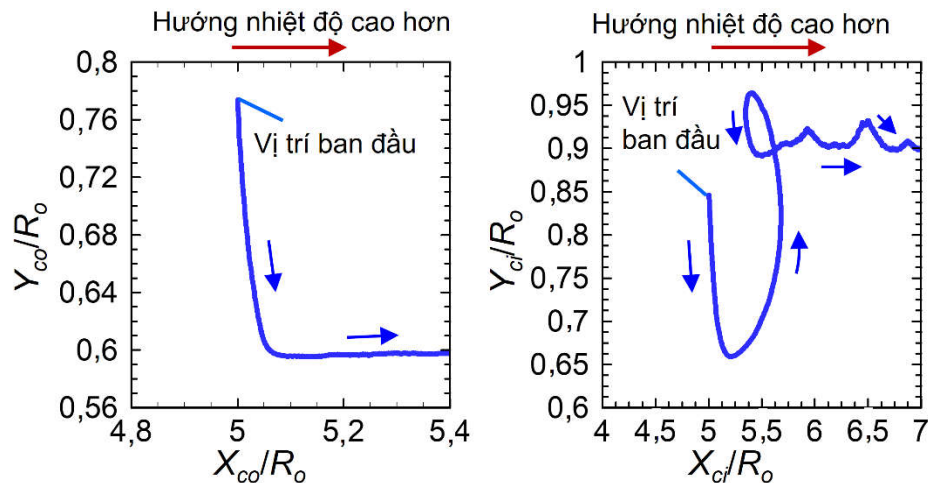


Hình 5.4 Chuyển động của hạt chất lỏng đa lớp tại các thời điểm khác nhau. Hạt chất lỏng di chuyển sang phía có nhiệt độ cao hơn

lỏng bên ngoài với bề mặt rắn đến quỹ đạo di chuyển của hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài. Các tham số khác có giá trị không thay đổi.

5.2.1. Ảnh hưởng của tỷ số độ nhớt giữa chất lỏng bên ngoài và chất lỏng trung gian

Các nghiên cứu trước đó [1,2] đã chỉ ra rằng hướng di chuyển của hạt chất lỏng phụ thuộc vào tổng hợp lực tại đường thẳng tiếp xúc của hạt chất lỏng với bề mặt rắn. Khi tỷ số độ nhớt nhỏ, hạt chất lỏng đơn lớp di chuyển sang phía có nhiệt độ thấp hơn do tác động của trường nhiệt độ. Tuy nhiên, khi tỷ số độ nhớt đủ lớn, tổng hợp lực tại đường tiếp xúc giữa hạt chất lỏng và bề mặt rắn đổi hướng và hạt chất lỏng di chuyển về phía có nhiệt độ cao hơn. Mục này đưa ra ảnh hưởng của tỷ số độ nhớt giữa chất lỏng bên ngoài và chất lỏng trung gian đến quỹ đạo di chuyển của các hạt chất lỏng. Hình 5.6a và b thể hiện quỹ đạo của hạt chất lỏng bên ngoài và hạt chất lỏng bên trong. Hình 5.8c và d thể hiện hình dạng hạt chất lỏng đa lớp, trường vận tốc, và trường nhiệt độ tại các giá trị μ_{om} .

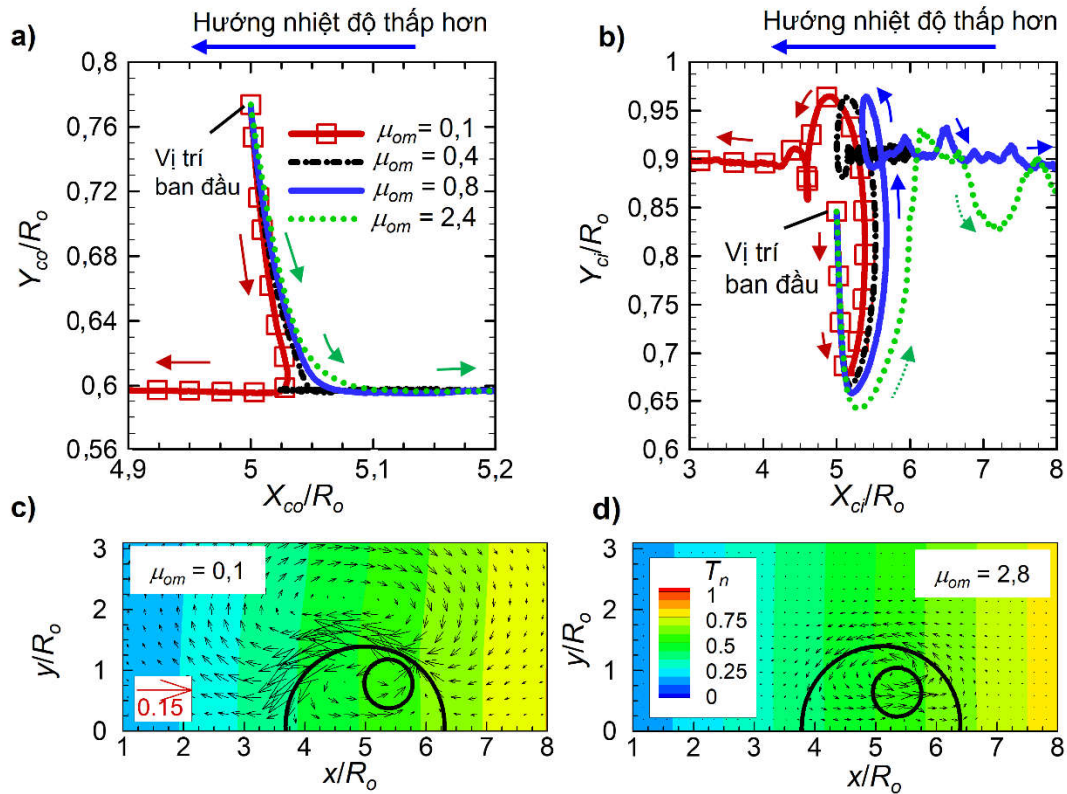


Hình 5.5 Quỹ đạo chuyển động của (a) hạt chất lỏng bên ngoài (b) hạt chất lỏng bên trong

Tỷ số độ nhớt thay đổi trong phạm vi từ 0,1 đến 2,4 với các tham số không thứ nguyên khác bao gồm $Ma = 0,72$, $Pr = 0,5$, $Oh = 0,2$, $R_{io} = 0,4$, và $\theta_e = 93^\circ$. Kết quả cho thấy rằng khi tỷ số độ nhớt nhỏ hơn 0,4, hạt chất lỏng đa lớp có xu hướng di chuyển sang phía có nhiệt độ thấp hơn. Điều này được thể hiện thông qua trường vận tốc quanh biên dạng của hạt chất lỏng bên ngoài (Hình 5.6c). Khi hạt bên trong có kích thước nhỏ, nó chuyển động theo hạt chất lỏng bên ngoài. So sánh với nghiên cứu về hạt đơn lớp, Sui [1] quan sát thấy với tỷ số độ nhớt nhỏ hơn 0,1 và góc tiếp xúc tĩnh bằng 90° , hạt chất lỏng đơn lớp di chuyển sang phía có nhiệt độ thấp hơn.

Khi tỷ số độ nhớt μ_{om} bằng 0,4, xu hướng di chuyển của hạt chất lỏng bên ngoài là chưa rõ ràng ở thời điểm đầu. Tuy nhiên, sau đó nó di chuyển về phía có nhiệt độ cao hơn. Lúc này hạt chất lỏng đa lớp không đứng yên như được tìm thấy bởi Sui [1]. Điều này là do hạt chất lỏng bên trong luôn có xu hướng kéo hạt chất lỏng bên ngoài sang phía có nhiệt độ cao hơn. Hạt chất lỏng bên trong chuyển động xoáy và sau đó dao động lên xuống tại một vị trí gần với vị trí ban đầu.

Khi tỷ số độ nhớt μ_{om} lớn hơn 0,4, hạt chất lỏng bên ngoài có xu hướng di chuyển sang phía có nhiệt độ cao hơn rõ ràng hơn. Điều này là do sự thay đổi của xoáy (về hướng) xung quanh biên dạng của hạt chất lỏng bên ngoài (Hình 5.6c và d). So sánh với hạt chất lỏng đơn lớp, Sui [1] đã thấy rằng hạt chất lỏng đơn lớp di chuyển sang phía có nhiệt độ cao hơn khi tỷ số độ nhớt là 4,0 và góc tiếp xúc là 90° . Fath and Bothe [2] cũng đã cho thấy kết quả tương tự với giá trị của tỷ số độ nhớt là 1,0 và góc tiếp xúc tĩnh là 90° . Hạt chất lỏng bên trong chuyển động xoáy và sau đó dao động lên xuống. Khi tỷ số độ nhớt này càng lớn, mức độ dao động của hạt chất lỏng bên



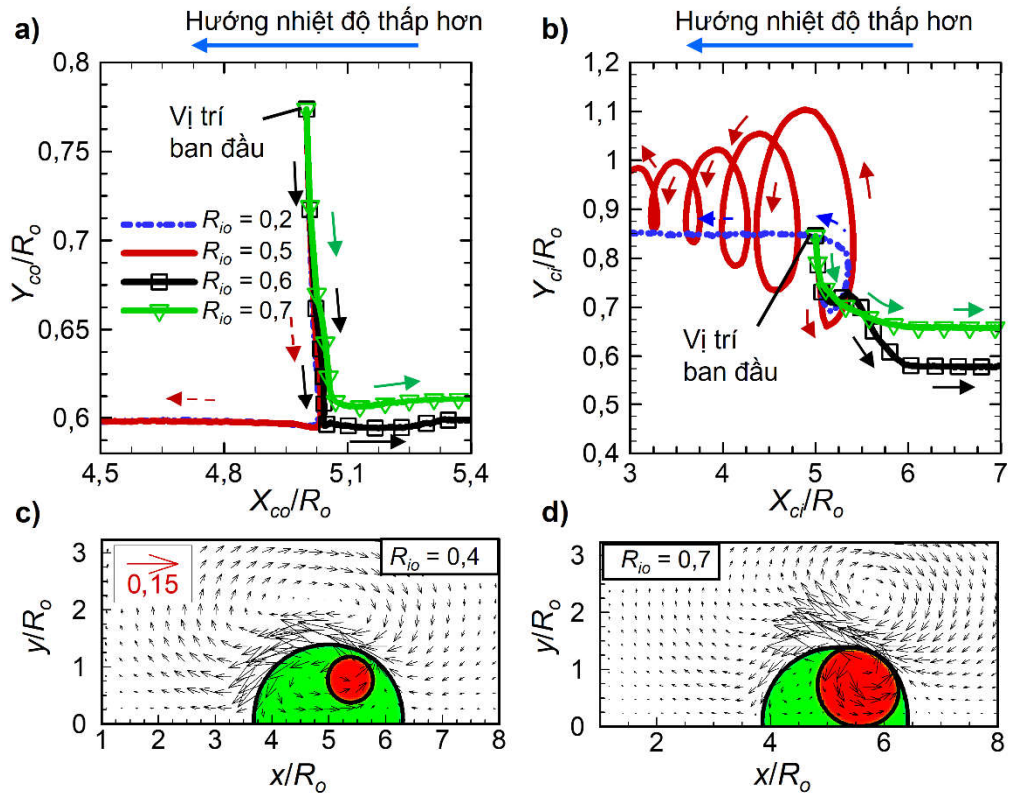
Hình 5.6 Ảnh hưởng của tỷ số độ nhớt

trong càng lớn (Hình 5.6b). Điều này là do sự thay đổi của xoáy hình thành bên trong hạt chất lỏng bên ngoài (Hình 5.6d) khi thay đổi tỷ số độ nhớt.

5.2.2. Ảnh hưởng của tỷ số bán kính tương đương của hạt chất lỏng bên ngoài và bán kính hạt chất lỏng bên trong

Hình 5.7 đưa ra ảnh hưởng của tỷ số bán kính giữa hạt chất lỏng bên trong và bán kính tương đương của hạt chất lỏng bên ngoài tới quỹ đạo chuyển động của hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài. Tỷ số bán kính này thay đổi trong phạm vi từ 0,2 đến 0,7. Các tham số không thứ nguyên khác bao gồm $Ma = 0,72$, $Pr = 0,5$, $Oh = 0,2$, $\mu_{om} = 0,1$, $\theta_e = 93^\circ$. Hình 5.7a và b thể hiện quỹ đạo của hạt chất lỏng bên ngoài và hạt chất lỏng bên trong. Hình 5.7c và d thể hiện hình dạng hạt chất lỏng đa lớp, trường vận tốc, và trường nhiệt độ tại các giá trị R_{io} .

Kết quả cho thấy rằng khi kích thước hạt chất lỏng bên trong nhỏ ($R_{io} < 0,6$), hạt chất lỏng đa lớp có xu hướng di chuyển sang phía có nhiệt độ thấp hơn. Chuyển động của hạt chất lỏng bên trong ít xoáy hơn khi tăng giá trị R_{io} (Hình 5.7b). Khi kích thước của hạt chất lỏng bên trong lớn ($R_{io} \geq 0,6$), cả hạt chất lỏng bên trong và bên ngoài có xu hướng di chuyển sang phía của nhiệt độ cao hơn. Quỹ đạo chuyển động của hạt chất lỏng bên trong không bị xoáy và ít dao động. Bởi vì khi hạt chất lỏng bên trong có kích thước nhỏ, chuyển động mao dẫn nhiệt của hạt chất lỏng đa lớp phụ



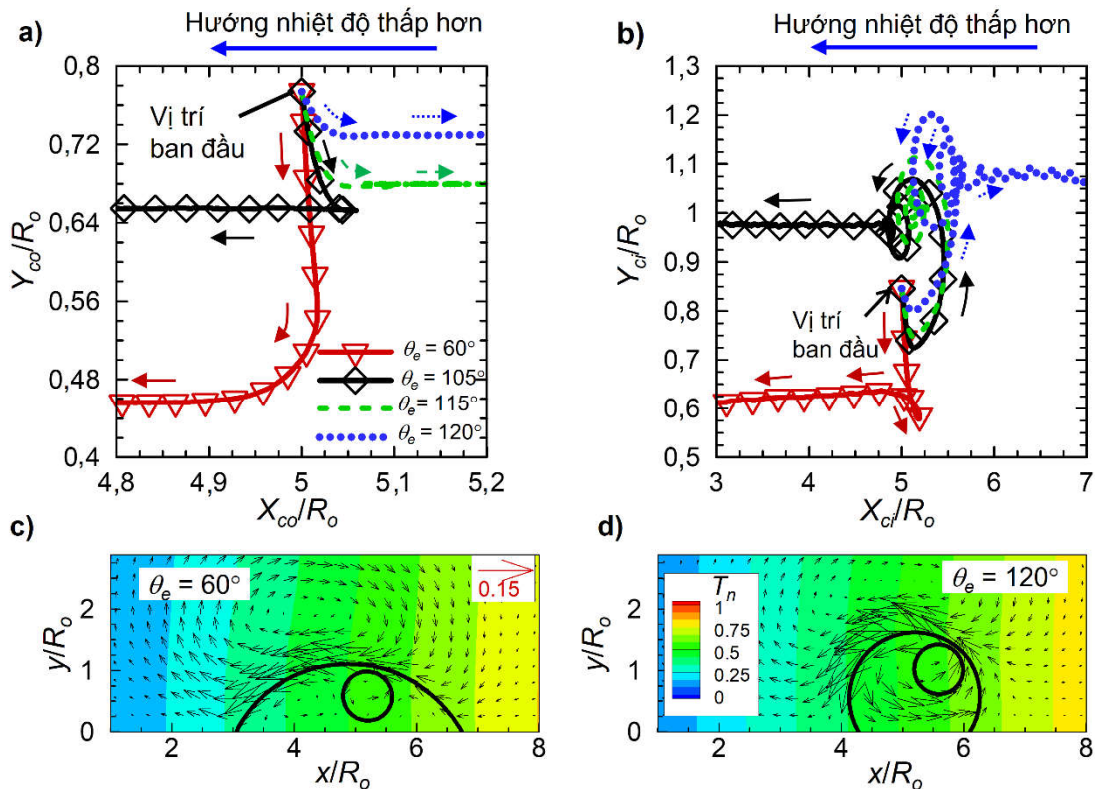
Hình 5.7 Ảnh hưởng của tỷ số bán kính của hạt chất lỏng bên trong và hạt chất lỏng bên ngoài

thuộc vào chuyển động của hạt chất lỏng bên ngoài. Do đó, lực mao dẫn nhiệt của hạt chất lỏng bên trong không đủ để đảo chiều chuyển động của hạt chất lỏng đa lớp. Tuy nhiên, khi hạt chất lỏng bên ngoài có kích thước đủ lớn ($R_{io} \geq 0,6$), lực mao dẫn nhiệt của hạt chất lỏng bên trong đủ lớn khiến hạt chất lỏng đa lớp di chuyển về phía có nhiệt độ cao hơn (Hình 5.7b). Lúc này, hạt chất lỏng bên ngoài chuyển động theo hạt chất lỏng bên trong. Do đó, cả hai hạt chất lỏng đều di chuyển sang phía có nhiệt độ cao hơn.

5.2.3. Ảnh hưởng của góc tiếp xúc tĩnh

Ở mục này, NCS thực hiện mô phỏng với góc tiếp xúc tĩnh lần lượt là: 60° , 90° , 105° , 115° , và 120° . Các tham số không thứ nguyên khác bao gồm $Ma = 0,72$, $Pr = 0,5$, $Oh = 0,2$, $\mu_{om} = 0,1$, $R_{io} = 0,4$. Hình 5.8a và b thể hiện quỹ đạo của hạt chất lỏng bên ngoài và hạt chất lỏng bên trong. Hình 5.8c và d thể hiện hình dạng hạt chất lỏng đa lớp, trường vận tốc, và trường nhiệt độ tại các giá trị θ_e khác nhau.

Kết quả cho thấy rằng khi góc tiếp xúc tĩnh $\theta_e < 115^\circ$, hạt chất lỏng đa lớp ban đầu di chuyển sang phía có nhiệt độ cao hơn. Tuy nhiên, sau đó nó di chuyển sang phía có nhiệt độ thấp hơn. Sui [1] tìm ra kết quả tương tự với góc tiếp xúc tĩnh $\theta_e < 120^\circ$ khi mô phỏng đối với hạt chất lỏng đơn lớp. Hạt chất lỏng bên trong chuyển



Hình 5.8 Ảnh hưởng của góc tiếp xúc tĩnh

động xoáy tương tự như các trường hợp ở bên trên. Khi giá trị góc tiếp xúc tĩnh $\theta_e = 115^\circ$, hạt chất lỏng bên ngoài di chuyển sang phía có nhiệt độ cao hơn và hạt chất lỏng bên trong chuyển động xoáy quanh một vị trí gần vị trí ban đầu. Kết quả mô phỏng cho thấy không có trường hợp nào mà hạt chất lỏng đứng yên như được tìm thấy bởi Fath và Bothe [2]. Bởi vì, hạt chất lỏng bên trong luôn có xu hướng di chuyển sang phía có nhiệt độ cao hơn.

Khi góc tiếp xúc tĩnh $\theta_e > 115^\circ$, hạt chất lỏng đa lớp di chuyển sang phía có nhiệt độ cao hơn. Điều này là do khi giá trị góc tiếp xúc tĩnh lớn, xoáy được sinh ra từ trường nhiệt độ bị đảo chiều (Hình 5.8c và d). Xoáy này gây ra chuyển sang phía có nhiệt độ cao hơn của hạt chất lỏng bên ngoài. Hiện tượng này cũng được đề cập ở những nghiên cứu trước đó [2].

5.2.4. Biểu đồ trạng thái

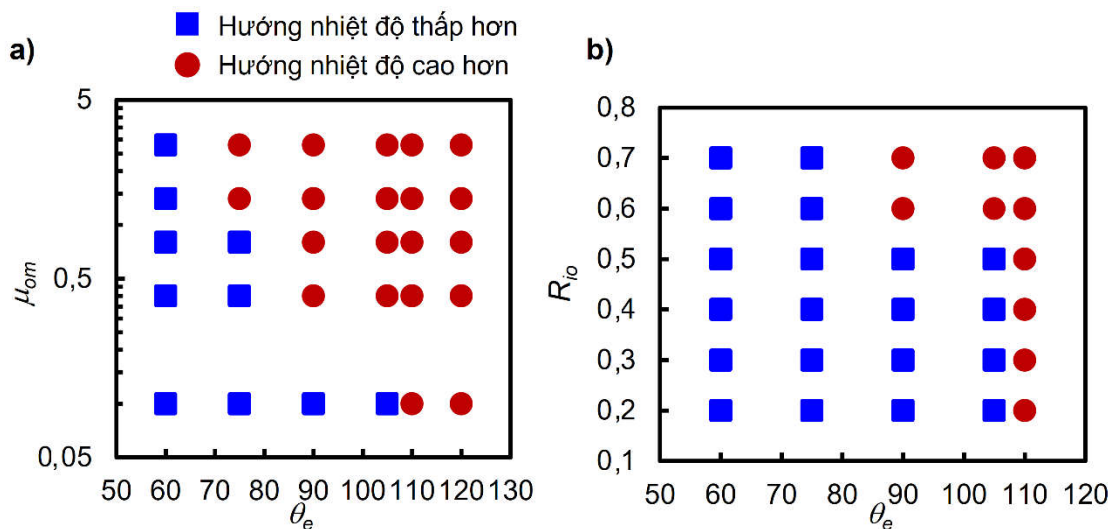
Ở các mục trước đó, luận án đã đưa ra xu hướng di chuyển của hạt chất lỏng đa lớp phụ thuộc vào giá trị góc tiếp xúc tĩnh của hạt chất lỏng bên ngoài với bề mặt rắn và tỷ số độ nhớt giữa chất lỏng bên ngoài và chất lỏng trung gian. Tuy nhiên, khi thay đổi giá trị của một trong hai tham số, các tham số còn lại có giá trị không thay đổi. Do đó, bức tranh tổng thể về xu hướng di chuyển của hạt chất lỏng đa lớp phụ thuộc vào hai tham số này là chưa được rõ ràng. Trong mục này, NCS thực hiện mô

phông ứng với mỗi giá trị của một tham số, tham số khác sẽ được thay đổi trong phạm vi đã được đặt ra. Ví dụ, ứng với mỗi giá trị góc tiếp xúc tĩnh $\theta_e = 60^\circ$, các giá trị của tỷ số độ nhớt μ_{om} thay đổi trong phạm vi từ 0,1 đến 2,8. Mô phỏng tương tự với các góc tiếp xúc tĩnh khác. Do đó, chúng ta có một ma trận giá trị của hai tham số này. Kết quả của mô phỏng được thể hiện ở Hình 5.9. Kết quả cho thấy rằng khi góc tiếp xúc tĩnh nhỏ ($\theta_e = 60^\circ$), hạt chất lỏng có xu hướng di chuyển sang phía có nhiệt độ thấp hơn ở mọi giá trị của tỷ số độ nhớt trong phạm vi đặt ra. Tuy nhiên, khi góc tiếp xúc tĩnh lớn và tỷ số độ nhớt lớn, hạt chất lỏng có xu hướng di chuyển sang phía có nhiệt độ cao hơn.

5.3. KẾT LUẬN CHƯƠNG 5

Chương 5 đã trình bày nghiên cứu về chuyển động của hạt chất lỏng đa lớp trên bề mặt rắn dính ướt dưới tác động của mao dẫn nhiệt: quỹ đạo trọng tâm các hạt chất lỏng và xu hướng di chuyển của hạt chất lỏng đa lớp với sự thay đổi của các tham số như góc tiếp xúc tĩnh của hạt chất lỏng đa lớp với bề mặt rắn, tỷ số bán kính của hạt chất lỏng bên trong với hạt chất lỏng bên ngoài, và tỷ số độ nhớt của hạt chất lỏng bên ngoài và chất lỏng trung gian được đưa ra. Các kết quả chính được tóm tắt lại như sau:

- Hạt chất lỏng đa lớp có thể di chuyển sang phía có nhiệt độ thấp hơn hoặc phía có nhiệt độ cao hơn phụ thuộc vào giá trị góc tiếp xúc tĩnh của hạt chất lỏng và bề mặt rắn, tỷ số độ nhớt μ_{om} , và kích thước của hạt chất lỏng bên trong.
- Khi tăng tỷ số độ nhớt của chất lỏng bên ngoài và chất lỏng trung gian, hạt chất lỏng đa lớp có xu hướng di chuyển sang phía có nhiệt độ cao hơn.



Hình 5.9 Biểu đồ trạng thái thể hiện sự chuyển tiếp xu hướng di chuyển của hạt chất lỏng đa lớp

- Khi hạt chất lỏng bên trong có bán kính lớn ($R_{io} \geq 0,6$), hạt chất lỏng bên ngoài có xu hướng di chuyển sang phía có nhiệt độ cao hơn. Quỹ đạo chuyển động của hạt chất lỏng bên trong ổn định và không bị xoáy.
- Khi góc tiếp xúc tĩnh của hạt chất lỏng bên ngoài và bề mặt rắn lớn ($\theta_e \geq 115^\circ$), hạt chất lỏng đa lớp có xu hướng di chuyển sang phía có nhiệt độ cao hơn.

Chương này đã chỉ ra xu hướng và quỹ đạo di chuyển của một hạt chất lỏng đa lớp trên bề mặt rắn. Xu hướng di chuyển của hạt chất lỏng là khác nhau khi hạt chất lỏng ở trong những điều kiện khác nhau. Mục tiêu và ý nghĩa của nghiên cứu đã được chỉ ra ở phần MỞ ĐẦU. Bài toán được mô phỏng dựa trên phương pháp theo dấu biên. Việc kiểm chứng độ chính xác của phương pháp mô phỏng đã được đưa ra ở **Chương 2**, mục 2.4.2.

KẾT LUẬN CHUNG

Luận án đã trình bày chi tiết nghiên cứu tương tác của hạt chất lỏng trên bề mặt rắn dưới tác động của mao dẫn nhiệt. Các kết quả của Chương 3, Chương 4, và Chương 5 đã được công bố trên các tạp chí quốc tế uy tín thuộc danh mục SCIE (ISI), tương ứng các công trình số 1, 2, và 4 trong DANH MỤC CÔNG TRÌNH CỦA NCS. Mở rộng nghiên cứu của Chương 3 cho bài toán hạt tương tác với bề mặt rắn (có mao dẫn nhiệt) và hạt chất lỏng tương tác với biên dạng sóng của một kênh dẫn đã được công bố trong công trình ISI số 3 và số 5. Luận án đã đạt được các kết quả sau:

1. NCS đã kế thừa chương trình mô phỏng bài toán hạt chất lỏng đơn lớp và phát triển chương trình mô phỏng tương tác của hạt chất lỏng đa lớp trên bề mặt rắn dưới tác động của mao dẫn nhiệt. Đây là đóng góp quan trọng của NCS trong luận án trong sự phát triển và mở rộng phương pháp mô phỏng.

2. Luận án đã đưa ra động lực học chuyển động của một hạt chất lỏng đa lớp trong kênh dẫn thắt lại có dạng hình sin. Luận án cũng đã chỉ ra một hiện tượng hoàn toàn mới đó là sự cân bằng của hạt chất lỏng trên bề mặt rắn dưới tác động của mao dẫn nhiệt khi hạt chất lỏng tương tác với bề mặt rắn không dính ướt.

3. Luận án đã đưa ra quỹ đạo chuyển động của một hạt chất lỏng đa lớp trên bề mặt rắn dưới sự tác động của mao dẫn nhiệt. Hạt chất lỏng đa lớp di chuyển sang phía có nhiệt độ cao hơn khi hạt chất lỏng bên trong đủ lớn. Hạt chất lỏng bên ngoài lúc này chuyển động theo hạt chất lỏng bên trong. Ngoài ra, luận án cũng phân tích các yếu tố khác ảnh hưởng đến quỹ đạo chuyển động của từng hạt chất lỏng của hạt chất lỏng đa lớp.

HƯỚNG PHÁT TRIỂN TƯƠNG LAI

Trong **Chương 5** của luận án, bài toán được mô phỏng là hai chiều. Tuy nhiên, tính chính xác của phương pháp mô phỏng đã được so sánh với thực nghiệm. Mặc dù vậy, việc mô phỏng ba chiều và thực nghiệm đối với bài toán đặt ra vẫn là cần thiết. Vì vậy, hướng phát triển trong tương lai đó là xây dựng thí nghiệm và xây dựng chương trình mô phỏng ba chiều cho bài toán trong **Chương 5**.

Các bài toán ở **Chương 3** và **Chương 4** được mô phỏng bán ba chiều (mô phỏng hai chiều trên hệ tọa độ trụ), kết quả theo phương góc của hệ tọa độ trụ (θ) là không đổi. Điều này chưa thực sự chuẩn xác đối với bài toán trong thực tế. Vì vậy, các bài toán này cũng cần được mô phỏng ba chiều cũng như tiến hành thực nghiệm.

Nghiên cứu mới dừng lại ở việc mô phỏng, cần áp dụng các nghiên cứu trong luận án vào một ứng dụng cụ thể trong thực tế.

DANH MỤC CÔNG TRÌNH CỦA NCS

Tạp chí quốc tế SCIE (ISI):

1. **Hoe D. Nguyen**, Truong V. Vu, Phan H. Nguyen, Binh D. Pham, Nang X. Ho, Cuong T. Nguyen & Vinh T. Nguyen, “Numerical study of the indentation formation of a compound droplet in a constriction,” *J Mech Sci Technol*, Mar. 2021, <https://doi.org/10.1007/s12206-021-0316-7>. (SCIE, IF2020 = 1.734, Q2).
2. **Hoe D. Nguyen**, Truong V. Vu, Phan H. Nguyen, Binh D. Pham, Vinh T. Nguyen, Hung V. Vu, Cuong T. Nguyen, Duong K. Tran, "A numerical study of an impacting compound droplet undergoing thermocapillary convection" *Acta Mechanica*, 2022, <https://doi.org/10.1007/s00707-022-03230-6> (SCIE, IF2020 = 2.698, Q1).
3. **Hoe D. Nguyen**, Truong V. Vu, Nang. Ho Xuan. “Impact of Two Successive Compound Droplets Undergoing Thermal Convection”, *Iranian Journal of Science and Technology, Transactions of Mechanical Engineering*, 2023, <https://doi.org/10.1007/s40997-023-00673-7>, (SCIE, IF2021 = 1.53, Q2).
4. **Hoe D. Nguyen**, Truong V. Vu, Nang X. Ho, Phan H. Nguyen, Anh D. Le, “Thermocapillary migration of a compound droplet on a substrate” *Journal of European Journal of Mechanics/ B fluids*, 103 (2023) 1–10, <https://doi.org/10.1016/j.euromechflu.2023.08.003> (SCI, IF2023 = 2.598, Q2)
5. Hung V. Vu, Truong V. Vu, Binh D. Pham, **Hoe D. Nguyen**, Vinh T. Nguyen, Hoa T. Phan, Cuong T. Nguyen, Deformation of a compound droplet in a wavy constricted channel, *J Mech Sci Technol*. 37 (2023) 191–202. <https://doi.org/10.1007/s12206-022-1220-5>. (SCIE, IF2020 = 1.734, Q2).

Hội nghị:

1. **Nguyễn Đình Hòa**, Vũ Văn Trường, Nguyễn Hồng Phan, Phạm Duy Bình, Nguyễn Tuấn Vinh, Vũ Văn Hưng, Nguyễn Tiến Cường, Trần Khánh Dương, “*Tương tác của hạt lưu chất đa lớp với bề mặt rắn không thấm ướt dưới tác động của mao dẫn nhiệt*”, Hội nghị khoa học Cơ học Thủy khí toàn quốc lần thứ 25

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Sui, Y., 2014, “Moving towards the Cold Region or the Hot Region? Thermocapillary Migration of a Droplet Attached on a Horizontal Substrate,” *Phys. Fluids*, **26**(9), p. 092102.
- [2] Fath, A., and Bothe, D., 2015, “Direct Numerical Simulations of Thermocapillary Migration of a Droplet Attached to a Solid Wall,” *Int. J. Multiphase Flow*, **77**, pp. 209–221.
- [3] Le, T.-L., Chen, J.-C., Shen, B.-C., Hwu, F.-S., and Nguyen, H.-B., 2015, “Numerical Investigation of the Thermocapillary Actuation Behavior of a Droplet in a Microchannel,” *Int. J. Heat Mass Transfer*, **83**, pp. 721–730.
- [4] Smith, M. K., 1995, “Thermocapillary Migration of a Two-Dimensional Liquid Droplet on a Solid Surface,” *J. Fluid Mech.*, **294**, pp. 209–230.
- [5] Gomba, J. M., and Homsy, G. M., 2010, “Regimes of Thermocapillary Migration of Droplets under Partial Wetting Conditions,” *J. Fluid Mech.*, **647**, pp. 125–142.
- [6] McClements, D. J., 2012, “Advances in Fabrication of Emulsions with Enhanced Functionality Using Structural Design Principles,” *Curr. Opin. Colloid Interface Sci.*, **17**(5), pp. 235–245.
- [7] Shah, R. K., Shum, H. C., Rowat, A. C., Lee, D., Agresti, J. J., Utada, A. S., Chu, L.-Y., Kim, J.-W., Fernandez-Nieves, A., Martinez, C. J., and Weitz, D. A., 2008, “Designer Emulsions Using Microfluidics,” *Mater. Today*, **11**(4), pp. 18–27.
- [8] Vu, T. V., Takakura, H., Wells, J. C., and Minemoto, T., 2010, “Production of Hollow Spheres of Eutectic Tin-Lead Solder through a Coaxial Nozzle,” *Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering*, **4**(10), pp. 1530–1538.
- [9] deMello, A. J., 2006, “Control and Detection of Chemical Reactions in Microfluidic Systems,” *Nature*, **442**(7101), pp. 394–402.
- [10] Noireaux, V., and Libchaber, A., 2004, “A Vesicle Bioreactor as a Step toward an Artificial Cell Assembly,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **101**(51), pp. 17669–17674.
- [11] Iwanaga, S., Saito, N., Sanae, H., and Nakamura, M., 2013, “Facile Fabrication of Uniform Size-Controlled Microparticles and Potentiality for Tandem Drug Delivery System of Micro/Nanoparticles,” *Abbreviation Title Colloids Surf., B*, **109**, pp. 301–306.
- [12] Tasoglu, S., Gurkan, U. A., Wang, S., and Demirci, U., 2013, “Manipulating Biological Agents and Cells in Micro-Scale Volumes for Applications in Medicine,” *Chem. Soc. Rev.*, **42**(13), pp. 5788–5808.
- [13] Sohrabi, S., kassir, N., and Keshavarz Moraveji, M., 2020, “Droplet Microfluidics: Fundamentals and Its Advanced Applications,” *RSC Adv.*, **10**(46), pp. 27560–27574.
- [14] Utada, A. S., 2005, “Monodisperse Double Emulsions Generated from a Microcapillary Device,” *Science*, **308**(5721), pp. 537–541.
- [15] Zhao, Y., Liu, F., and Chen, C.-H., 2011, “Thermocapillary Actuation of Binary Drops on Solid Surfaces,” *Appl. Phys. Lett.*, **99**(10), p. 104101.
- [16] Bretherton, F. P., 1961, “The Motion of Long Bubbles in Tubes,” *J. Fluid Mech.*, **10**(02), p. 166.

- [17] Schwartz, L. W., Princen, H. M., and Kiss, A. D., 1986, "On the Motion of Bubbles in Capillary Tubes," *J. Fluid Mech.*, **172**, pp. 259–275.
- [18] Olbricht, W. L., and Kung, D. M., 1992, "The Deformation and Breakup of Liquid Drops in Low Reynolds Number Flow through a Capillary," *Phys. Fluids A*, **4**(7), pp. 1347–1354.
- [19] He, L., Luo, Z., and Bai, B., 2019, "Release of a Trapped Droplet in a Single Micro Pore Throat," *J. Colloid Interface Sci.*, **554**, pp. 1–8.
- [20] Liu, J., Yap, Y. F., and Nguyen, N.-T., 2009, "Behavior of Microdroplets in Diffuser/Nozzle Structures," *Microfluid Nanofluid.*, **6**(6), pp. 835–846.
- [21] Tsai, T. M., and Miksis, M. J., 1994, "Dynamics of a Drop in a Constricted Capillary Tube," *J. Fluid Mech.*, **274**, pp. 197–217.
- [22] Nath, B., Biswas, G., Dalal, A., and Sahu, K. C., 2017, "Migration of a Droplet in a Cylindrical Tube in the Creeping Flow Regime," *Phys. Rev. E*, **95**(3), p. 033110.
- [23] Borthakur, M. P., Biswas, G., and Bandyopadhyay, D., 2018, "Dynamics of Deformation and Pinch-off of a Migrating Compound Droplet in a Tube," *Phys. Rev. E*, **97**(4), p. 043112.
- [24] Vu, T. V., Bui, D. T., Nguyen, Q. D., and Pham, P. H., 2020, "Numerical Study of Rheological Behaviors of a Compound Droplet in a Conical Nozzle," *Int. J. Heat Fluid Flow*, **85**, p. 108655.
- [25] Ford, M. L., and Nadim, A., 1994, "Thermocapillary Migration of an Attached Drop on a Solid Surface," *Phys. Fluids*, **6**(9), pp. 3183–3185.
- [26] Dai, Q., Khonsari, M. M., Shen, C., Huang, W., and Wang, X., 2016, "Thermocapillary Migration of Liquid Droplets Induced by a Unidirectional Thermal Gradient," *Langmuir*, **32**(30), pp. 7485–7492.
- [27] Dai, Q., Huang, W., and Wang, X., 2017, "Micro-Grooves Design to Modify the Thermo-Capillary Migration of Paraffin Oil," *Meccanica*, **52**(1–2), pp. 171–181.
- [28] Jiao, Z. J., Huang, X. Y., and Nguyen, N.-T., 2008, "Manipulation of a Droplet in a Planar Channel by Periodic Thermocapillary Actuation," *J. Micromech. Microeng.*, **18**(4), p. 045027.
- [29] Nguyen, H.-B., and Chen, J.-C., 2010, "A Numerical Study of Thermocapillary Migration of a Small Liquid Droplet on a Horizontal Solid Surface," *Phys. Fluids*, **22**(6), p. 062102.
- [30] Le, T.-L., Chen, J.-C., and Nguyen, H.-B., 2017, "Numerical Study of the Thermocapillary Droplet Migration in a Microchannel under a Blocking Effect from the Heated Upper Wall," *Appl. Therm. Eng.*, **122**, pp. 820–830.
- [31] Nguyen, H.-B., and Chen, J.-C., 2010, "Numerical Study of a Droplet Migration Induced by Combined Thermocapillary-Buoyancy Convection," *Phys. Fluids*, **22**(12), p. 122101.
- [32] Šikalo, Š., Wilhelm, H.-D., Roisman, I. V., Jakirlić, S., and Tropea, C., 2005, "Dynamic Contact Angle of Spreading Droplets: Experiments and Simulations," *Physics of Fluids*, **17**(6), p. 062103.
- [33] Le, T.-L., Chen, J.-C., and Nguyen, H.-B., 2021, "Numerical Investigation of the Forward and Backward Thermocapillary Motion of a Water Droplet in a Microchannel by Two Periodically Activated Heat Sources," *Numer. Heat Transfer, Part A*, **79**(2), pp. 146–162.

- [34] Nguyen, V. T., Vu, T. V., Nguyen, P. H., Ho, N. X., Pham, B. D., Nguyen, H. D., and Vu, H. V., 2021, “Thermocapillary Migration of a Fluid Compound Droplet,” *J Mech Sci Technol*, **35**(9), pp. 4033–4044.
- [35] Le, T.-L., Chen, J.-C., Hwu, F.-S., and Nguyen, H.-B., 2016, “Numerical Study of the Migration of a Silicone Plug inside a Capillary Tube Subjected to an Unsteady Wall Temperature Gradient,” *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **97**, pp. 439–449.
- [36] Le, T. L., Chen, J. C., and Nguyen, H. B., “Numerical Study of a Small Droplet Movement in a Microchannel under Heat Source,” **894**.
- [37] Tryggvason, G., Scardovelli, R., and Zaleski, S., 2011, *Direct Numerical Simulations of Gas-Liquid Multiphase Flows*, Cambridge University Press, Cambridge ; New York.
- [38] Nas, S., and Tryggvason, G., 2003, “Thermocapillary Interaction of Two Bubbles or Drops,” *Int. J. Multiph. Flow*, **29**(7), pp. 1117–1135.
- [39] Darvishi, M. T., and Hessari, P., 2006, “Symmetric SOR Method for Augmented Systems,” *Appl. Math. Comput.*, **183**(1), pp. 409–415.
- [40] Wang, X., Peng, X., and Lee, D., 2003, “Dynamic Wetting and Stress Singularity on Contact Line,” *Sci. China Ser. E-Technol. Sci.*, **46**(4), pp. 407–417.
- [41] Cox, R. G., 1998, “Inertial and Viscous Effects on Dynamic Contact Angles,” *J. Fluid Mech.*, **357**, pp. 249–278.
- [42] Chen, Y., Liu, S., Kulenovic, R., and Mertz, R., 2013, “Experimental Study on Macroscopic Contact Line Behaviors during Bubble Formation on Submerged Orifice and Comparison with Numerical Simulations,” *Phys. Fluids*, **25**(9), p. 092105.
- [43] Kistler SF, ed., 1993, *Hydromatic of Wetting. In:*, Berg JC editor. Wettibility, New York: Marcel Dekker.
- [44] Muradoglu, M., and Tasoglu, S., 2010, “A Front-Tracking Method for Computational Modeling of Impact and Spreading of Viscous Droplets on Solid Walls,” *Comput. Fluids*, **39**(4), pp. 615–625.
- [45] Jiang, T.-S., Soo-Gun, O. H., and Slattery, J. C., 1979, “Correlation for Dynamic Contact Angle,” *J. Colloid Interface Sci.*, **69**(1), pp. 74–77.
- [46] Shin, S., Chergui, J., and Juric, D., 2018, “Direct Simulation of Multiphase Flows with Modeling of Dynamic Interface Contact Angle,” *Theor. Comput. Fluid Dyn.*, **32**(5), pp. 655–687.
- [47] Yokoi, K., Vadillo, D., Hinch, J., and Hutchings, I., 2009, “Numerical Studies of the Influence of the Dynamic Contact Angle on a Droplet Impacting on a Dry Surface,” *Phys. Fluids*, **21**(7), p. 072102.
- [48] Unverdi, S. O., “A Front-Tracking Method for Viscous, Incompressible, Multi-Fluid Flows,” p. 13.
- [49] Wu, Z.-B., and Hu, W.-R., 2012, “Thermocapillary Migration of a Planar Droplet at Moderate and Large Marangoni Numbers,” *Acta Mech*, **223**(3), pp. 609–626.
- [50] Young, N. O., Goldstein, J. S., and Block, M. J., 2006, “The Motion of Bubbles in a Vertical Temperature Gradient,” *J. Fluid Mech.*, **350–356**(2), p. 7.
- [51] Kalichetty, S. S., Sundararajan, T., and Pattamatta, A., 2019, “Thermocapillary Migration and Interaction Dynamics of Droplets in a Constricted Domain,” *Phys. Fluids*, **31**(2), p. 022106.

- [52] Šikalo, Š., Wilhelm, H.-D., Roisman, I. V., Jakirlić, S., and Tropea, C., 2005, “Dynamic Contact Angle of Spreading Droplets: Experiments and Simulations,” *Phys. Fluids*, **17**(6), p. 062103.
- [53] Sung, J. H., Wang, Y. I., Narasimhan Sriram, N., Jackson, M., Long, C., Hickman, J. J., and Shuler, M. L., 2019, “Recent Advances in Body-on-a-Chip Systems,” *Anal. Chem.*, **91**(1), pp. 330–351.
- [54] Abate, A. R., Thiele, J., and Weitz, D. A., 2011, “One-Step Formation of Multiple Emulsions in Microfluidics,” *Lab Chip*, **11**(2), pp. 253–258.
- [55] Zolfaghari, H., Izbassarov, D., and Muradoglu, M., 2017, “Simulations of Viscoelastic Two-Phase Flows in Complex Geometries,” *Computers & Fluids*, **156**, pp. 548–561.
- [56] Vu, T. V., and Pham, P. H., 2020, “Numerical Study of a Compound Droplet Moving toward a Rigid Wall in an Axisymmetric Channel,” *Int J Heat Fluid Flow*, **82**, p. 108542.
- [57] Han, X., Li, J., Tang, X., Li, W., Zhao, H., Yang, L., and Wang, L., “Droplet Bouncing: Fundamentals, Regulations, and Applications,” *small*, **n/a**(n/a), p. 2200277.
- [58] Che, J., Ceccio, S. L., and Tryggvason, G., 2004, “Computations of Structures Formed by the Solidification of Impinging Molten Metal Drops,” *Appl. Math. Modell.*, **28**(1), pp. 127–144.
- [59] Karbalaei, A., Kumar, R., and Cho, H., 2016, “Thermocapillarity in Microfluidics—A Review,” *Micromachines*, **7**(1), p. 13.
- [60] Moezzi, M., 2023, “Thermally Driven Marangoni Effects on the Spreading Dynamics of Droplets,” *International Journal of Multiphase Flow*.
- [61] Nagy, P. T., and Neitzel, G. P., 2008, “Optical Levitation and Transport of Microdroplets: Proof of Concept,” *Phys. Fluids*, **20**(10), p. 101703.
- [62] Won, B., Lee, W., and Song, S., 2017, “Estimation of the Thermocapillary Force and Its Applications to Precise Droplet Control on a Microfluidic Chip,” *Sci. Rep.*, **7**.