



مروری بر روش های شبیه سازی عددی جریان سیالات چندفازی در حضور سورفکتانت ها

چکیده: در مقاله حاضر روش های شبیه سازی جریان چندفازی در حضور سورفکتانت ها در ۳ دسته مبتنی بر نایر-استوکس، تابع توزیع و مبتنی بر نیروهای بین مولکولی طبقه بندی و هر یک جداگانه تشریح شده است. روش های مبتنی بر نایر-استوکس در دو دسته روش های ردیابی سطح مشترک و روش های صید سطح مشترک قرار می گیرند. روش های مبتنی بر نیروهای بین مولکولی به عنوان روش های ذره مینا و با دیدگاه لاگرانژی در برخورد با میدان جریان عمل می کنند. مدل های پرکاربرد در روش های مبتنی بر تابع توزیع نیز در انتها معرفی شده اند. گستره وسیعی از روش های عددی انتخاب های زیادی را پیش روی پژوهشگران قرار داده است. شناخت و درک قابلیت ها و جزئیات این روش ها کمک خواهد کرد تا با توجه به امکانات سخت افزاری، مناسب ترین روش عددی انتخاب و نتایج قابل اعتماد و مقرون به صرفه ای حاصل شود.

واژه های راهنما: سورفکتانت ها، جریان سیالات چندفازی، نایر-استوکس، روش دینامیکی مولکولی، روش شبکه بولتزمن

یاسر جعفری

دانشجوی دکتری

محمد طیبی رهنی

استاد،

دانشکده مهندسی هوافضا،

دانشگاه صنعتی شریف، تهران

محمد رضا سلیمی*

استادیار، پژوهشگاه هوافضا،

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری

رینهارد میلر

استاد، گروه بیوفیزیک ماده نرم،

دانشگاه صنعتی دامشتارت،

آلمان

مقاله مروری

دریافت: ۱۴۰۲/۰۲/۰۵

پذیرش: ۱/۰۳/۳۰

Yaser Jafari

Ph.D. Student

Mohammad

Taeibi Rahni

Professor, Faculty of

Aerospace

Engineering,

Sharif University of

Technology, Tehran

Mohammad Reza

Salimi*

Assistant Professor,

Space Science Group,

Astronautic Department,

Aerospace Research

Institute of Iran, Tehran

Reinhard Miller

Professor, TU

Darmstadt, Department

of Soft Matter

Biophysics, Germany

An overview of the numerical simulation methods of multiphase flow in the presence of surfactants

Abstract: In this article, the simulation methods of multiphase flow in the presence of surfactants are classified into 3 categories based on Navier-Stokes, distribution function, and based on intermolecular forces, and each one is described separately. Navier-Stokes-based methods fall into two categories: interface tracking methods and interface capture methods. Methods based on intermolecular forces act as particle-based methods with a Lagrangian perspective in dealing with the flow field. The widely used models in the methods based on the distribution function are also introduced at the end. A wide range of numerical methods has put many choices in front of researchers. Knowing and understanding the capabilities and details of these methods will help to select the most appropriate numerical method and obtain reliable and cost-effective results according to the hardware facilities.

Keywords: Surfactants, Multiphase flow, Navier-Stokes, Molecular Dynamics Method, Lattice Boltzmann Method

۱- مقدمه

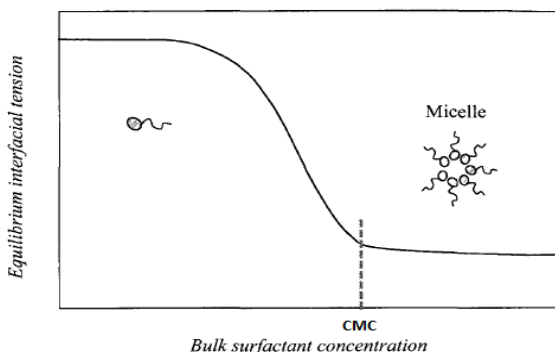
در انواع مختلفی از فرآیندها و محصولات استفاده می شوند و بخشی ضروری از زندگی روزمره هستند [۱۰]. مطالعات قبلی به تأثیر سورفکتانت ها در طیف وسیعی از هندسه های جریان مختلف، از جمله تغییر شکل قطره ای، پل ها و رشته های مایع^۵، باریکه های سیال^۶، تشکیل رشته های مکرر^۷، جریان های لایه نازک^۸ و دینامیک قطع شدن جت های پیوسته^۹، ضخامت لایه در جریان های پوششی^{۱۰}، پراکندگی امواج سطحی^{۱۱}، دینامیک و ضخامت لایه نازک سیال پخش شده^{۱۲}، طول عمر حباب ها، رفتار امواج سطح مشترک، اتمیزه کردن، ادغام و پدیده های فروپاشی قطره، پایداری فوم ها و امولسیون ها پرداخته اند [۲ و ۱۱-۱۲]. از مهم ترین کاربردهای سورفکتانت ها در موارد زیست پزشکی [۱۳] مانند پوست، دارورسانی، درمان ضد سرطان، درمان سورفکتانت، فرمولاسیون واکسن، محصولات مراقبت بهداشتی شخصی و سورفکتانت های طبیعی تولید شده در سیستم تنفسی [۱۰] است. حتی در همه گیری ویروس کووید-۱۹ (کورونا) از سورفکتانت های خاصی که هم پاسخ های ایمنی با واسطه سلولی و هم آنتی بادی را افزایش می دهد، در تولید واکسن و از برخی دیگر سورفکتانت ها در داروهای بهبود و کاهش عوارض این بیماری استفاده شده است. سایر کاربردهای مهم عبارتند از: همجوشی قطره ای [۱۴-۱۶]، حرکت قطره ای خودپیشران [۱۰]، تثبیت کننده امولسیون ها [۱۷ و ۲۰-۱۸]، فوم های آتش نشانی [۲۱]، پاکسازی آلودگی لکه های نفتی ناشی در دریا [۲۲-۲۳]، استخراج مواد معدنی [۲۴]، بازیابی بهبود یافته نفت [۲۵-۲۷]، ریزراکتورها ستون حبابی [۸]، تراشه های تشخیصی [۲۸]، چاپ جوهر افشان [۲۹] و قطرات فوق پخش شونده [۳۰]. مطالعاتی نشان می دهد که حتی سورفکتانت ها در پیش بینی وضع آب و هوا و شرایط جوی می تواند نقش اساسی داشته باشد [۳۱]. بررسی چنین سیستم پیچیده ای مستلزم مدلسازی رفتار تکاملی دو سیال در مجاورت هم و سطح مشترک ایجاد شده، انتقال جرم سورفکتانت در سیالات، و برهمکنش های بین سطح مشترک دو سیال و سورفکتانت است [۴]. اهمیت عملی سورفکتانت ها مبتنی بر توانایی این مولکول ها برای رسیدن سریع به حالت تعادل در سطح

عوامل فعال سطحی (سورفکتانت ها)، مولکول های آمفیفیل^۲ هستند که در جریان سیالات چندفازی تمایل به مهاجرت به سطح مشترک سیال دارند و در نتیجه کشش سطحی را تغییر می دهند و باعث تغییرات قابل توجهی در خواص سطحی مخلوط سیال می شوند [۱-۵]. آمفیفیل یک ترکیب شیمیایی است که دارای هر دو خاصیت آب دوست (هیدروفیل)^۳ و آب گریز (لیپوفیل)^۴ است. سورفکتانت ها آنها ساختار مولکولی با زنجیره بلند دارند که به دو بخش قطبی و غیر قطبی تقسیم می شود [۳]. بخش قطبی میل یا تنش قوی نسبت به حلال های قطبی نشان می دهد که به آن بخش سر آبدوست و به قسمت غیرقطبی دم آبریز گفته می شود [۱ و ۶]. دم آبریز به طور معمول یک زنجیره هیدروکربنی طولانی است که در سیال غیرقطبی قرار می گیرد [۱ و ۶]. سورفکتانت ها بر اساس بار گروه سر قطبی (سر آبدوست) به عنوان آنیونی، کاتیونی، غیر یونی و زویتریونی (آمفوتریک) طبقه بندی می شوند [۳ و ۷]. وجود سورفکتانت ها در سیستم های چند فازی، چه به صورت ناخالصی های اجتناب ناپذیر یا به عنوان مواد افزودنی، تأثیر زیادی بر شکل و دینامیک سطح مشترک دارد [۸].

سورفکتانت ها به ترتیب توسط حرکت سیال و مکانیسم های مولکولی در امتداد سطح مشترک منتقل و منتشر می شوند [۹]. کشش سطحی به توزیع سورفکتانت از طریق معادله حالت مرتبط می شود. مناطق با غلظت سورفکتانت بالاتر کشش سطحی کمتری دارند. غلظت غیریکنواخت سورفکتانت در امتداد یک سطح مشترک، نیروهای غیریکنواخت کپیلاری (عمودی) و مارانگونی (مماسی) را در سیال ایجاد می کند. این به نوبه خود بر سرعت سیال تأثیر می گذارد که بطور متقابل روی توزیع سورفکتانت تأثیر می گذارد. به عنوان مثال، جابجایی سورفکتانت به سمت نقاط سکون در نوک یک قطره تمایل به کاهش کشش سطحی در آنجا و افزایش تغییر شکل قطره دارد. از سوی دیگر، نیروهای مارانگونی در برابر همرفت سورفکتانت به سمت نوک قطره مقاومت می کنند و در نتیجه تغییر شکل قطره را مهار می کنند. فشرده/کشش کردن سطح مشترک منجر به افزایش/کاهش متناظر در غلظت سورفکتانت می شود. عوامل سطحی فعال یا معمولاً به عنوان سورفکتانت شناخته می شوند،

⁵ Liquid Bridges and Threads⁶ Filaments⁷ Repeated Thread Formation⁸ Thin Film Flows⁹ Pinch-off Dynamics of Continuous Jets¹ Coating Flows¹ Dispersion of Surface Waves¹ Dynamics and Thicknesses of Spreading Films¹ Surface Active Agents (Surfactants)² Amphiphiles³ Hydrophilic (Hydrophile)⁴ Hydrophobe (Lipophile)

حجمی سورفکتانت ها، تنش سطحی تعادل کاهش می یابد تا زمانی که به یک مقدار ثابت در یک غلظت بحرانی خاص که به عنوان غلظت بحرانی میسل^۱ شناخته می شود، کاهش می یابد. فراتر از CMC، سورفکتانت ها شروع به تجمع می کنند و میسل هایی را در داخل حجم محلول تشکیل می دهند که منجر به تنش سطحی تقریباً ثابت می شود [۱]. تشکیل میسل یک پدیده مهم است، زیرا مولکول های سورفکتانت بسته به اینکه در میسل ها وجود داشته باشند یا به صورت مونومر آزاد (تکی) رفتار بسیار متفاوتی دارند. میسل ها بر حلالیت هیدروکربن های آلی و روغن ها در محلول آبی تأثیر می گذارند و همچنین بر خاصیت مهمی به نام ویسکوزیته محلول تأثیر می گذارند [۳۳]. اندازه میسل با عدد تجمعی که تعداد مولکو های سورفکتانت مرتبط با یک میسل است اندازه گیری می شود. فقط مونومرهای سورفکتانت به کاهش تنش سطحی کمک می کنند. تغییر خواص چندفازی مانند ترشوندگی و تشکیل کف توسط غلظت مونومرهای آزاد در محلول کنترل می شود.



شکل ۱ روند کاهش تنش سطحی برحسب غلظت سورفکتانت [۱]

کاهش تنش سطحی در حضور سورفکتانت ها یک پدیده وابسته به زمان است که در آن تغییر در تنش سطحی توسط تحرک مولکول های سورفکتانت پخش شده در سطح مشترک دوفاز ایجاد شده، سرعت جذب، غلظت حجمی و دینامیک میسلی کنترل می شود [۳]. بسیاری از این ویژگی ها به نوع سورفکتانت بکار برده شده بستگی دارد [۲]. مدل های فیزیکی اولیه تنش سطحی دینامیکی بر این فرض استوار بود که وابستگی زمانی تنش سطحی ناشی از انتقال مولکول ها در محلول حجمی به سطح مشترک یعنی توسط جذب است [۳۴]. از آن زمان، تحلیل های نظری زیادی از تنش سطحی دینامیکی در محلول های سورفکتانت منحصراً بر اساس ایده

مشترک دو فاز سیال ایجاد شده است، در نتیجه کشش سطحی را از مقدار مشخص در حالت بدون سورفکتانت به مقدار تعادل در سطح کاهش می دهد [۱۱]. این کاهش کشش سطحی، کشش سطحی دینامیکی^۱ نامیده می شود. به طور کلی، کشش سطحی تعادل محلول های سورفکتانت عادی معمولاً در چند ثانیه اول پس از تشکیل یک سطح تازه به دست می آید. بنابراین، روش های تجربی سریع برای اندازه گیری کشش سطحی دینامیکی مورد نیاز است. روش های مختلفی از جمله جت نوسانی، حداکثر فشار حباب، قطره آویزان و روش های سریع تشکیل قطره پیشنهاد و استفاده شده است. با این حال، این روش ها به تجهیزات و تکنیک های پیچیده ای نیاز دارند و بنابراین همیشه با اهداف مهندسی برای به دست آوردن کشش سطحی دینامیکی به روشی ساده مطابقت ندارند. از طرفی، سورفکتانت ها بر جریان تأثیر می گذارند و تنش های کپیلاری و مماسی غیر یکنواخت را ایجاد می کنند [۷]. همزمان با این اتفاق میدان جریان سورفکتانت را تحت تأثیر قرار می دهد و بر توزیع آن تأثیر می گذارد و در نتیجه مسئله را پیچیده تر می کند. از این رو، بهره گیری از روش های شبیه سازی عددی برای مطالعه چندفازی در حضور سورفکتانت ها ضروری به نظر می رسد. بنابراین در این مقاله روش های عددی بکار گرفته شده برای شبیه سازی این نوع جریان مطالعه، دسته بندی و گزارش شده است.

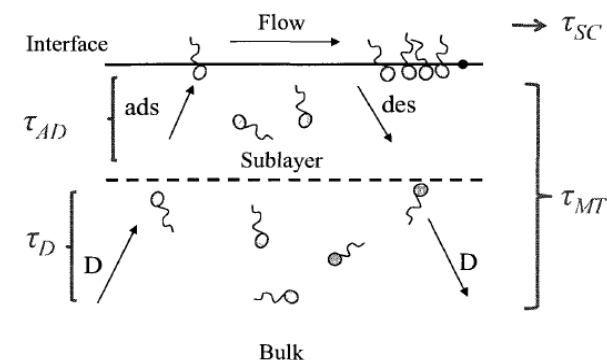
۲- مقدمات لازم برای شبیه سازی عددی مورد نیاز برای جریان های چندفازی حاوی سورفکتانت ها

همانطور که در بخش مقدمه توضیح داده شد، حضور سورفکتانت ها باعث کاهش کشش سطحی از مقدار مشخص در حالت بدون سورفکتانت به مقدار تعادل در سطح می شود. اگر سورفکتانت ها زمان کافی برای جذب روی سطح مشترک داشته باشند و به تعادل برسند، تنش سطحی به مقدار تعادل خود یعنی σ_{eq} کاهش می یابد که کمتر از σ_0 است [۱ و ۳۲]. تنش سطحی تعادل σ_{eq} به غلظت حجمی سورفکتانت ها بستگی دارد. اگر آزمایش هایی برای تعیین تنش سطحی تعادل برای غلظت های مختلف سورفکتانت حجمی انجام شود، نموداری مشابه شکل (۱) به دست می آید. برای غلظت های حجمی کوچک سورفکتانت، تنش سطحی تعادل تقریباً مشابه تنش سطحی اولیه (تمیز) باقی می ماند. با افزایش غلظت

^۲ Critical Micelle Concentration (CMC)

^۱ Dynamic Surface Tension (DST)

به طور مثال، اگر انتقال سورفکتانت به اندازه کافی سریع باشد، سطح هیچ رفتار ارتجاعی از خود نشان نمی دهد و یا اگر پدیده چندفازی به قدری سریع اتفاق بیافتد که سورفکتانت ها زمان کافی برای جذب در سطح مشترک را نداشته باشند، حضور سورفکتانت تاثیری در دینامیک مسئله ندارد.



شکل ۲ شماتیک مقیاس های زمانی و مکانی سورفکتانت ها در حجم سیال و سطح مشترک [۱]

جدول ۱ رفتار محلول یا نامحلول بودن سورفکتانت ها بر حسب مقایسه مقیاس های زمانی

$\tau_{MT} \ll \tau_{SC}$	$\tau_{MT} \gg \tau_{SC}$	$\tau_{SC} \sim \tau_{MT}$	
		$\tau_{AD} \gg \tau_D$	$\tau_{AD} \ll \tau_D$
محلول	نامحلول	نامحلول	محلول

طبق تعریف محلول یا نامحلول بودن، سورفکتانت در امتداد سطح مشترک منتقل و منتشر می شود و ممکن است جذب/دفع سورفکتانت از/به حجم به/از سطح مشترک وجود داشته باشد که در شبیه سازی عددی برای آن راهکار مناسبی را انتخاب کرد [۳۲]. از این رو، در روش های شبیه سازی عددی با دیدگاه اوپلری (در بخش بعدی دسته بندی این روش ها از دیدگاه متفاوت بیان خواهد شد) برای حل میدان جریان، با توجه به قید محلول یا نامحلول بودن دو حالت برای در نظر گرفتن اثرات سورفکتانت ها وجود دارد. در حالت اول، با فرض محلول بودن سورفکتانت ها یک معادله بقا برای انتقال سورفکتانت ها از حجم سیال به سطح مشترک دو فاز و یک معادله همرفت-پخش در سطح مشترک دو فاز برای بدست آوردن توزیع سورفکتانت ها حل می شود [۳۷]. در واقع، در این حالت جذب و دفع سورفکتانت ها در سطح مشترک دوفاز از حجم سیال در نظر گرفته خواهد شد. در حالت دوم، با فرض نامحلول بودن نیازی به حل معادله بقا برای انتقال سورفکتانت ها از حجم سیال به سطح مشترک دو

جذب، با موفقیت قابل توجهی انجام شده است. با این حال، نظریه جذب با زمان تکامل یافته و نیاز به رابطه دیگری بین غلظت سطحی مولکول های جاذب و غلظت توده ای مولکول ها در نزدیکی و سطح داشت. علاوه بر این، تنش سطحی دینامیکی به دست آمده توسط تئوری جذب شامل پارامترهای متعددی است که باید از قبل تعیین شوند و استفاده از آن برای اهداف مهندسی ساده نبود.

یکی دیگر از ویژگی های مهم سورفکتانت ها حلالیت آنهاست [۷]. سورفکتانت های محلول می توانند هم در سطح مشترک و هم در قسمت حجم وجود داشته باشند. بنابراین، هنگامی که رفتار سورفکتانت مورد مطالعه قرار می گیرد، تبادل ثابت بین حجم سیال و سطح مشترک باید در نظر گرفته شود. در مورد سورفکتانت های نامحلول، سورفکتانت ها فقط در سطح مشترک وجود دارند. این رفتار را می توان یا توسط ماهیت سورفکتانت مشاهده کرد، یا زمانی که مقیاس های زمانی پخش و تبادل در مقایسه با تولید سطح مشترک بسیار کوچک است. در مورد دوم، سورفکتانت ها به طور موثر نامحلول عمل می کنند. در حالت نامحلول هیچ تبادل انبوه سورفکتانت ها بین سطح مشترک فازها و حجم سیال وجود ندارد.

توزیع غیر یکنواخت سورفکتانت ها در سطح مشترک به مقیاس های زمانی نسبی پخش، همرفت و جذب-دفع در مسئله بستگی دارد [۱ و ۷ و ۳۵-۳۶]. علاوه بر اینکه سورفکتانت ها در امتداد سطح مشترک انتقال همرفتی و پخش دارند، توسط جذب-دفع و پخش بین سطح مشترک و حجم سیال منتقل می شوند [۱]. شکل (۲) شماتیکی از مقیاس های زمانی مختلف برای رفتار غیرتعادلی سورفکتانت ها در سطح مشترک با جریان سطحی را نشان می دهد. همرفت در فصل مشترک منجر به تجمع موضعی سورفکتانت ها در نقاط سکون می شود. مقیاس زمانی برای همرفت سطحی τ_{SC} به سرعت مماسی در مرز مشترک بستگی دارد. مقیاس زمانی انتقال جرم سورفکتانت ها بین مرز مشترک و حجم محلول τ_{MT} ، به مقیاس زمانی جذب و دفع سورفکتانت ها بین زیرلایه و مرز مشترک τ_{AD} و مقیاس زمانی پخش حجمی سورفکتانت ها بین حجم و زیرلایه (عمق تخلیه) τ_D بستگی دارد. در جدول (۱) خلاصه رفتار محلول یا نامحلول بودن سورفکتانت ها بطور خلاصه بر حسب مقایسه مقیاس های زمانی تعریف شده عنوان شده است. بسته به غلظت سورفکتانت و شرایط جریان، سیستم دو فازی همراه با سورفکتانت مشابه ممکن است رفتار متفاوتی داشته باشد [۲۸].

¹ Debye Layer (Depletion Depth)

بندی و از لحاظ دیدگاه می توانند اویلری یا لاگرانژی باشند. جدول (۲) روش های شبیه سازی برای جریان سیالات چند فازی در حضور سورفکتانتها با توجه به پژوهش های پیشین براساس نوع معادله و مقیاس مشخص شده اند. علاوه بر این، شکل های (۳) و (۴) به ترتیب نشان دهنده دیدگاه های اویلری و لاگرانژی این روش ها برای حل میدان جریان است. دسته اویلری برای روش های شبیه سازی چند فازی را می توان به دو طبقه با عنوان روش های اویلری-اویلری یا اویلری-لاگرانژی بیان کرد [۳۸]. در روش اویلری-اویلری، سیالات و ذرات همگی به صورت پیوسته در نظر گرفته می شوند و با کسر حجمی مربوطه خود در هر سلول شبکه شبیه سازی نشان داده می شوند. این شبیه سازی ها سطح مشترک فاز را حل نمی کنند. در نقطه مقابل روش های اویلری-لاگرانژی، با یک شبکه یا نقاط نشانگر سطح مشترک دو فاز را مشخص و ردیابی می کنند.

جدول ۲ طبقه بندی روش های شبیه سازی عددی جریان سیالات چند فازی در حضور سورفکتانتها باتوجه به نوع معادلات و مقیاس

مقیاس	روش عددی	معادله حل شده
ماکروسکوپیک	حجم سیال (VOF)	مبتنی بر ناویر-استوکس
	تنظیم سطح (LS)	
	میدان فاز (PF)	
	ردیابی جبهه (FT)	
	انتگرال مرزی (BIM)	
	مرز غوطه ور (IBM)	
	لاگرانژی-اویلری دلخواه (ALE)	
مزوسکوپیک	هیدرودینامیک هموار ذرات (SPH)	مبتنی بر تابع توزیع (معادله تقریب زده شده بولتزمن)
	شبکه بولتزمن (LBM)	
	دینامیک ذرات پراکنده (DPD)	مبتنی بر نیروهای بین مولکولی
	مارتینی (MARTINI)	
	مونت کارلو (MC)	
تئوری سیالات مرتبط اماری (SAFT- γ)		
میکروسکوپیک	مدل های تمام اتمی (AA)	

فاز نیست و تنها یک معادله همرفت-پخش در سطح مشترک دو فاز برای بدست آوردن توزیع سورفکتانت ها بدون جذب و دفع در سطح مشترک دوفاز از حجم سیال حل می شود [۳۴].

۳- روش های شبیه سازی عددی جریان سیالات چند فازی در حضور سورفکتانتها

همانطورکه در انتهای بخش مقدمه بیان شد، روش های تجربی از کارایی کافی برای شناخت و درک کامل فرآیند های رخ داده در جریان سیالات چند فازی در حضور سورفکتانتها برخوردار نیستند [۷]. از این رو، پژوهشگران به شبیه سازی عددی این مسائل مختلف شامل این جریان با استفاده از روش های گوناگون پرداخته اند. روش های شبیه سازی عددی به دلیل تنوع در رویکرد برخورد با مسائل این چینی ابزار بسیار مفیدی به حساب می آیند. زیرا که جنبه ها و ابعاد مختلفی در مسائل شامل جریان سیالات چند فازی در حضور سورفکتانتها وجود دارد که با توجه به گستردگی روش های شبیه سازی عددی می توان از هر لحاظ به شناخت آنها پرداخت. بنابراین، مطابق آنچه در مقدمه توضیح داده شد و با توجه به کاربرد وسیع سورفکتانت ها در صنعت و استفاده های حیاتی و روزمره می توان با تکیه بر دانش حاصل شده از روش های شبیه سازی عددی، استفاده از سورفکتانت ها را بهینه کرد.

شبیه سازی عددی مستقیم^۱ برای جریان سیالات چند فازی در حضور سورفکتانتها نیاز به حل طیف وسیعی از مقیاس های طولی و زمانی دارد [۲۴]. هزینه های محاسباتی بالای چنین شبیه سازی هایی، آنها را برای کاربردهای واقعی غیرممکن می سازد. از این رو، روش های شبیه سازی مختلفی توسعه داده شده اند. روش های شبیه سازی مفید و استفاده شده برای جریان سیالات چند فازی در حضور سورفکتانتها را می توان از جنبه های مختلف طبقه بندی کرد که از آن جمله می توان به نوع معادلات، مقیاس و دیدگاه حل شده اشاره کرد. این روش ها در مورد نوع معادلات در ۳ دسته مبتنی بر ناویر-استوکس، مبتنی بر تابع توزیع (معادله تقریب زده شده بولتزمن) و مبتنی بر نیروهای بین مولکولی قرار می گیرند. همچنین، از لحاظ مقیاس در ۳ حالت ماکروسکوپیک، مزوسکوپیک و میکروسکوپیک دسته

¹ Direct Numerical Simulation (DNS)

سطح مشترک استفاده می کنند. از این رو، اگرچه میدان جریان سیال بصورت اویلری حل می شود، ولی سطح مشترک دوفاز بصورت لاگرانژی تکامل می یابد. محبوب ترین روش ها از این خانواده عبارتند از: ردیابی جبهه^۴ [۳۲]، انتگرال مرزی^۵ [۳۷] و [۳۹]، مرز غوطه ور^۶ [۱۱] و [۴۰] و لاگرانژی-اویلری دلخواه^۷ [۴۱]. این روش ها که در ابتدا برای سورفکتانت های نامحلول توسعه یافتند، سپس به سورفکتانت های محلول گسترش یافتند. در حالی که این رویکرد ها دقت خوبی را ارائه می دهند، مدیریت تغییرات توپولوژیکی سطح مشترک به الگوریتم های پیچیده نیاز دارد، به ویژه زمانی که در فیزیک مسئله با ادغام یا شکست سطح مشترک در حالت سه بعدی سروکار داریم. روش های صید سطح مشترک مبتنی بر استفاده از یک تابع نشانگر برای نمایش ضمنی سطح مشترک در یک شبکه اویلری است. این امر گسسته سازی و مدیریت تغییرات توپولوژیکی را بسیار ساده می کند. در میان روش های صید سطح مشترک، می توان به حجم سیال^۸ [۳]، تنظیم سطح^۹ [۴۲-۴۴] و روش به نسبت جدیدتر میدان فاز^{۱۰} [۴-۵] و [۱۰] اشاره کرد. در چارچوب این روش ها، رویکرد هایی که در ابتدا برای سورفکتانت های نامحلول توسعه یافتند سپس به سورفکتانت های محلول و جریان های سه بعدی گسترش یافتند. روش میدان فاز یک مدل طبیعی برای سطح مشترک پخش^{۱۰} است [۱۰]. مطالعه تحولات توپولوژیکی پیچیده و جفت شدن آن با جریان کامل هیدرودینامیکی بدون ردیابی صریح سطح مشترک بسیار ساده است. روش های میدان فاز معمولاً مبتنی بر انرژی آزاد سطحی سیستم هستند. مزایای مدل های میدان فاز نسبت به سایرین عبارتند از: توسعه نسبتاً آسان با استفاده از آرگومان های تقارن ساده و قوانین بقا، در دسترس بودن مقیاس های زمان و طول مزوسکوپی تا ماکروسکوپی، شکل گیری طبیعی سطح مشترک دو فاز و شرایط غیر تعادلی، سهولت نسبی اجرای عددی و امکان کار تحلیلی از طریق تکنیک های طرح ریزی [۱۰]. علاوه بر این، جهت افزایش کارایی سایر روش های این گروه یعنی حجم سیال و تنظیم سطح، رویکرد های جایگزین با ترکیبی از روش های صید/ردیابی سطح مشترک یا استفاده از چارچوب های مختلف مانند ترکیب تنظیم سطح-مرز غوطه ور [۹]، حجم



شکل ۳ روش های شبیه سازی عددی جریان سیالات چند فازی در حضور سورفکتانت ها با دیدگاه اویلری برای حل میدان جریان



شکل ۴ روش های شبیه سازی عددی جریان سیالات چند فازی در حضور سورفکتانت ها با دیدگاه لاگرانژی برای حل میدان جریان

۳-۱- روش های شبیه سازی عددی جریان سیالات چند فازی در حضور سورفکتانت ها مبتنی بر ناویر-استوکس

این قبیل روش ها (به جز روش هیدرودینامیک هموار ذرات) را می توان به دو دسته تقسیم کرد که عبارتند از: روش های ردیابی سطح مشترک^۱ و روش های صید سطح مشترک^۲ [۵]. روش های ردیابی سطح مشترک از یک شبکه یا مش جداگانه برای ردیابی

⁴ Front-Tracking (FT)

⁵ Boundary Integral Method (BIM)

⁶ Immersed Boundary Method (IBM)

⁷ Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE)

⁸ Volume-Of-Fluid (VOF)

⁹ Level-Set (LS)

¹ Phase Field Method (PFM) ⁰

¹ Diffusive Interface ¹

¹ Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)

² Interface Tracking

³ Interface Capturing

حال، محدودیت های محاسباتی شدیدی برای شبیه سازی دینامیک مولکولی وجود دارد [۱۷]. اول، تعداد مولکول های سورفکتانت در یک سیستم معمولی حتی در غلظت های رقیق بسیار زیاد است. از این رو، نمی توان حرکت مولکول های سورفکتانت را به طور صریح همراه با حرکت سطح مشترک دو فاز شبیه سازی کرد. دوم، مرحله زمانی شبیه سازی باید بسیار کوچک باشد تا بتوان به طور مناسب از پتانسیل تعامل بین سطوح مشترک دو فاز نمونه برداری کرد. سوم، در فیزیک های مانند قطرات با اندازه کوچک حرکت براونی را به دلیل برهمکنش حرارتی خود با حلال نشان می دهند. این باید در معادله حرکت آنها در نظر گرفته شود. چهارم، شبیه سازی رفتار قطره ها در فیزیک های مانند امولسیون با استفاده از پتانسیل ثابت همانطور که در دینامیک مولکولی انجام می شود، ممکن نیست. پتانسیل برهمکنش با گذشت زمان در نتیجه جذب سورفکتانت و کاهش تدریجی مساحت سطحی امولسیون به دلیل ادغام قطره ها تغییر می کند. این مستلزم محاسبه مکرر خواص سطحی است که نیروهای بین ذرات را تعیین می کند.

روش های دینامیک مولکولی می توانند مولکول ها را در هر زمانی تحت شرایط کنترل شده در طول شبیه سازی ردیابی کنند. امروزه، وجود میدان های نیرو قابل اعتماد برای سیستم های سورفکتانت محلول مبتنی بر مدل های تمام اتمی^۲ و درشت دانه^۳ شبیه سازی واقعی چنین سیستم هایی را ممکن می سازد [۴۹]. شبیه سازی های درشت دانه پلی بین دنیای اتمی و ماکروسکوپی ایجاد می کنند. رویکرد شبیه سازی، خوشه هایی از اتم ها یا مولکول ها را به عنوان ذرات منفرد به نام دانه ها، در نظر می گیرد. در مقایسه با تمام اتمی، مدل های درشت دانه تعداد درجات آزادی و در نتیجه زمان محاسباتی مربوطه را با جمع کردن نیروهای شیمیایی دقیق به شکل پارامترهای برهمکنش کاهش می دهند [۳۶]. مدل های درشت دانه را می توان به عنوان مدل های پیوسته یا شبکه طبقه بندی کرد [۵۱-۵۲]. مدل های پیوسته واقعی تر هستند، اما مدل های شبکه از نظر محاسباتی کارآمدتر هستند [۵۱-۵۲]. مدل های شبکه دینامیک مولکولی که مهمترین آنها مونت کارلو است، برخلاف طبقه بندی جدول (۲) از معادله بولتزمن استفاده می کنند، اما شامل دو قسمت اصلی حرکت و برخورد ذرات است که جدا از هم بررسی می شوند.

سیال-ردیابی جبهه [۱ و ۴۶]، رهیافت لاگرانژی المان محدود^۱ [۲ و ۷] توسعه یافته اند. جدول (۳) پیشینه روش های شبیه سازی عددی جریان سیالات چندفازی در حضور سورفکتانتها مبتنی بر ناویر-استوکس را نشان می دهد.

علاوه بر روش های بیان شده، یک روش به نسبت جدید وجود دارد که از ذرات برای حل میدان جریان استفاده می کند اما برخلاف حل های دینامیک مولکولی مبتنی بر ناویر-استوکس است. روش هیدرودینامیک هموار ذرات، یک روش لاگرانژی بدون شبکه است که برای مسائل چند فازی نیازی به صید یا ردیابی سطح مشترک خاصی ندارد و می تواند هندسه های پیچیده و همچنین تغییرات توپولوژی را مدیریت کند [۴۷-۴۸]. در این روش هر ذره نشان دهنده یک عنصر لاگرانژی از سیال است که تمام خواص فاز محلی را دارد. دینامیک سورفکتانت را به شکل بقایی معرفی و از شارهای جرمی برای در نظر گرفتن تبادل سورفکتانت بین سطح مشترک و فاز توده استفاده می شود. در لایه نازک سطح مشترک، معادله پخش برای سورفکتانت حل و به دلیل ماهیت روش لاگرانژی، ادوکنش به طور طبیعی گنجانده شده است.

۳-۲- روش های شبیه سازی عددی جریان سیالات چند فازی در حضور سورفکتانتها مبتنی بر نیروهای بین مولکولی

در مطالعه برخی مسائل جریان سیالات چند فازی در حضور سورفکتانتها مانند تغییر خواص ترشوندگی سیال در مجاورت سطح جامد رفتار میکروسکوپی و ساختار مولکول های سورفکتانتها حائز اهمیت است [۵۰]. درک جامع از نقش میکروسکوپی مولکول های سورفکتانت در گسترش پدیده ها همچنان چالش برانگیز است. در حالی که مطالعات تجربی و نظری مکانیسم های احتمالی انتشار برای قطرات مملو از سورفکتانت را مورد بحث قرار داده اند، شبیه سازی های در مقیاس مولکولی برای ثبت رفتار میکروکوپپی سورفکتانت های مرتبط با آن مکانیسم ها ضروری هستند [۳۰]. در حالی که شبیه سازی و تئوری عددی رایج در دینامیک سیالات محاسباتی سنتی قادر به توصیف رفتار میکروسکوپی سیستم ها نیستند. از این رو، به تحقیقات به سمت گسترش روش های دینامیک مولکولی به عنوان روش های ذره مینا، لاگرانژی و مبتنی بر نیروهای بین مولکولی سوق پیدا کرده است. با این

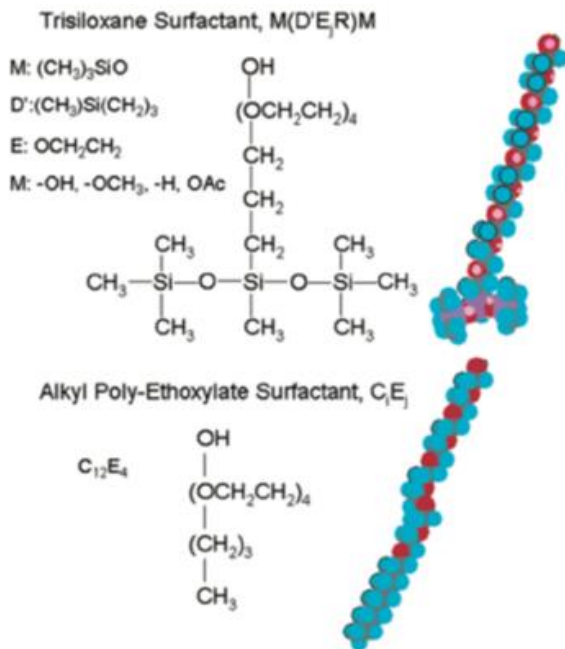
² All Atom

³ Coarse Grained (CG)

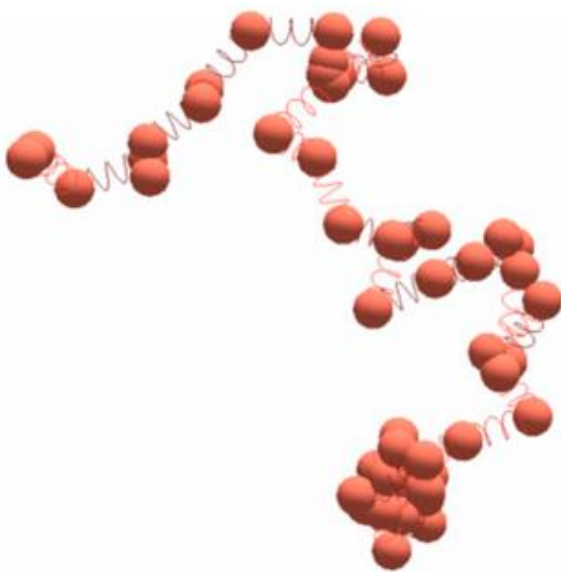
¹ Lagrangian Finite Element Scheme

۲ پیشینه روش های شبیه سازی عددی جریان سیالات چندفازی در حضور سورفکتانت ها مبتنی بر ناپیر-استوکس

نوع	مرجع	سال	روش عددی	نوع سورفکتانت	معادله حالت	نحوه برخورد با سورفکتانت	فیزیک	
میدان مشترک	Teigen et al. [۴۴]	(2010)	Level-Set Method	نامحلول	لگاریتمی	در سطح مشترک دو فاز معادله پخش-همرفت	قطره در حال سقوط تحت میدان الکتریکی	
	Piedfert et al. [۴۳]	(2018)			خطی		ارتعاش قطره صعودکننده	
	Atasia et al. [۴۲]	(2020)			لگاریتمی		رسیدن حباب به سطح	
	Sanjeev et al. [۳]	(2008)	Volume-Of-Fluid	نامحلول	نیازی نبوده	برخورد قطره با سطح	از طریق نمودار زمانی کاهش کشش سطحی و سورس ترم	
	Tariq [۱۰]	(2012)	Phase Field Method	مشخص نکرده (هم محلول و هم نامحلول)	بدون معادله حالت	معادله بقا برای سورفکتانت نوشته با استفاده از انرژی آزاد	انعقاد قطره در حضور جریان برشی	
	Teng et al. [۴]	(2012)		محلول	فیزیک مشخصی را حل نکرده			
	Soligo et al. [۵]	(2018)		محلول	انعقاد قطره در حضور جریان برشی			
	Soligo et al. [۴۵]	(2019)		لگاریتمی	تغییر شکل قطره در جریان برشی			
	ردیابی مرز مشترک	Yulianti et al. [۳۲]	(2013)	Front-Tracking Method	نامحلول	لگاریتمی	در سطح مشترک دو فاز معادله پخش-همرفت	افتادن یک قطره روی سطح
		Lai et al. [۴۰]	(2010)	Immersed boundary method	نامحلول	لگاریتمی	در سطح مشترک دو فاز معادله پخش-همرفت	حرکت خط تماس ۳ فاز
Wang et al. [۳۹]		(2014)	محلول		تغییر شکل قطره و حباب			
Bazhlekov and Vasileva [۱۱]		(2015)	خطی	معادله بقا برای غلظت سورفکتانت ها و در سطح مشترک دو فاز معادله پخش-همرفت حل شده	شبیه سازی اثر یک سورفکتانت محلول در آخرین مرحله ادغام قطره (تشکیل لایه، زهکشی و گسیختگی)			
Palsson et al. [۳۷]	(2019)	Boundary Integral Method	نامحلول	لگاریتمی	در سطح مشترک دو فاز معادله پخش-همرفت حل شده	قطره در جریان استوکس		
تربیتی	Xu et al. [۹]	(2006)	Level Set Method, Immersed Interface Method	نامحلول	لگاریتمی و خطی	در سطح مشترک دو فاز معادله پخش-همرفت حل شده	تاثیر جریان برشی روی یک دو یا چند قطره	
	Drumright-Clarke [۴۹]	(2004)	A Hybrid Volume-of-Fluid Method with a Continuous-Surface-Stress (Vof-Css)	نامحلول	خطی	اثر سورفکتانت رو بصورت سورس ترم وارد معادله ناپیر-استوکس کرده است	شکست قطره در جریان برشی	
	Cui [۱]	(2011)	A Hybrid Volume-of-Fluid Method with a Front-Tracking	محلول-نامحلول	لگاریتمی	در سطح مشترک دو فاز معادله پخش-همرفت حل شده	تشکیل قطره در یک لوله تو در تو با سیال بیرونی دارای جریان	
	Martin and Blanchette [۴۶]	(2015)		نامشخص (از روی حل نامحلول)	خطی		ادغام حباب صابون که با یک فیلم صابون معلق	
	Ganesan [۴۹]	(2015)	An Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) approach	محلول	خطی	معادله بقا برای غلظت سورفکتانت ها نوشته شده و در سطح مشترک دو فاز معادله پخش-همرفت حل شده	تاثیر سورفکتانت ها بر حرکت خط تماس سه فاز	
	Steinhausen [۲۴]	(2018)	Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) Interface-Tracking method	محلول	لگاریتمی	معادله بقا برای غلظت سورفکتانت ها نوشته شده و در سطح مشترک دو فاز معادله پخش-همرفت حل شده	مسیر صعود یک حباب	
	Young et al. [۳۹]	(2009)		نامحلول	لگاریتمی	در سطح مشترک دو فاز معادله پخش-همرفت حل شده	جدایش قطره	
	Antonopoulou et al. [۲]	(2021)	Lagrangian finite element scheme	نامشخص (از روی حل نامحلول)	لگاریتمی	در سطح مشترک دو فاز معادله پخش-همرفت حل شده	چکیدن و جدایش قطره	
	Antonopoulou [۷]	(2020)						



شکل ۵ دو نوع مدل تمام اتمی سورفکتانت [۴۹]



شکل ۶ مدل مهره-فنر [۵۴]

مدل مارتینی: مزیت قابل توجه میدان نیروی مدل مارتینی^۲ مقایسه با سایر مدل های درشت دانه، توانایی در نظر گرفتن هویت شیمیایی گروه های اتمی را دارد [۵۰]. رویکرد «لگو» اتخاذ شده در مدل مارتینی امکان شبیه سازی طیف گسترده ای از مولکول های متنوع را بدون نیاز به اصلاح پارامترهای میدان نیرو فراهم می کند. از این رو، بطور عملی دقت مدل تمام اتم را ارائه می دهد، در حالی که از نظر محاسباتی به اندازه یک مدل درشت دانه ارزان است. این به دلیل تعداد کمتر مکان های اندرکنش (محاسبات نیروی کمتر مورد

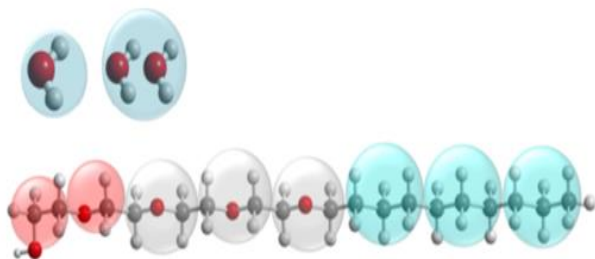
در واقع این نوع حل نقطه مشترک بین دو دسته از حل های مبتنی بر نیروهای بین مولکولی و معادله تقریب زده شده بولتزمن است و می توان جزئی هر دو دسته تقسیم بندی کرد. این روش جریان های رقیق دو و سه بعدی را می تواند مدل کند. از این رو، در شبیه سازی جریان های چندفازی همراه با سورفکتانت ها کاربرد گسترده ای جز در موارد خاص مانند حرکت و تشکیل مسیل ها ندارد [۵۱-۵۲]. در ادامه انواع حل های دینامیک مولکولی به طور مختصر توضیح داده خواهد شد.

مدل های تمام اتمی: تعدادی مدل تمام اتمی وجود دارد (شکل ۵) که می تواند در مورد سیستم های سورفکتانت محلول اعمال شود [۵۰]. با این حال، این مدل ها به آزمایش نیاز دارند تا تأیید شود که ویژگی های کلیدی سیستم به خوبی بازتولید شده اند. چنین خواصی ممکن است شامل رفتار فازی سیستم سورفکتانت آب، کشش سطحی و خواص دینامیکی مانند انتشار، ضرایب جذب و غیره باشد. تعداد مطالعات تمام اتمی نسبت به حالت درشت دانه کم است. زیرا این شبیه سازی ها از نظر محاسباتی نیازمند محدودیت های شدید در اندازه سیستم هستند و تفسیر نتایج شبیه سازی ممکن است در گستره محدودی باشد. با این حال، میدان های نیروی تمام اتمی عموماً عملکرد خوبی دارند، زیرا از داده های با وضوح بالا، برای مثال محاسبات مکانیک کوانتومی به دست می آیند.

مدل های مهره-فنر: یک مدل مهره-فنر^۱ ساده می تواند ویژگی های سیستم های پیچیده، از جمله سیستم های سورفکتانت محلول را به تصویر بکشد [۵۰]. این مدل یک مدل درشت دانه برای مطالعه انتقال سورفکتانت های محلول و نامحلول در یک سطح مشترک دو فاز گاز-مایع با شبیه سازی دینامیک مولکولی است. این مدل تلاشی برای ارائه یک مدل مولکولی واقعی برای مولکول های سورفکتانت زنجیره ای تری سیلوکسان و خطی ندارد، بلکه هدف آن تقلید از یک سیستم مشابه براساس پتانسیل کوتاه برد است. علاوه بر این، هزینه ها نادیده گرفته می شوند. با این حال، استفاده از این نوع مدل های درشت دانه مهره-فنر امکان کاوش سیستم های بزرگ تر را در زمان های شبیه سازی طولانی تر نسبت به هر مدل تمام اتمی وجود دارد. در شکل (۶) یک مدل مهره-فنر نمایش داده شده است.

² MARTINI¹ Bead-Spring Models

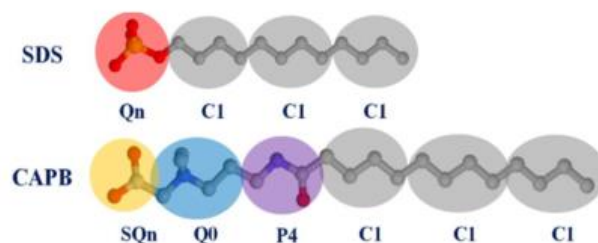
مانند مدل مارتینی نشان می دهند. در مورد میدان نیرو SAFT- γ ، پارامترهای میدان نیرو یک گروه عملکردی خاص از اتم ها باید توسط تئوری مشتق شده و برای هر مورد داده های تجربی را بازتولید کنند. همچنین، این رویکرد می تواند سیالات زنجیره ای ناهمگن را که توسط گروه های عملکردی مختلف تشکیل شده اند، توصیف کند. شکل (۸) یک نوع سورفکتانت در مدل SAFT در حضور مولکول های آب را نشان می دهد.



شکل ۸ یک نوع سورفکتانت در مدل SAFT در حضور مولکول های آب [۵۰]

مدل دینامیک ذرات اتلافی: دینامیک ذرات اتلافی^۳ یک روش مناسب برای مدل سازی یک سیستم درشت دانه است. این مدل یک تکنیک مدل سازی مزوسکوپی است که برای شبیه سازی سیالات پیچیده توسعه یافته است [۶ و ۲۷]. این مدل از سه نوع متمایز نیروی فعال بین ذرات تشکیل شده است که نشان دهنده نیروهای بقایی، نیروهای بیانگر خواص ترمودینامیکی سیستم، نیروهای اتلاف کننده کوپل شده و نیروهای تصادفی برای حفظ دمای ثابت است. معادله حرکت نیوتن که تمام نیروهای موجود در سیستم را در نظر می گیرد. یک جنبه حیاتی از تکنیک DPD زمانی است که نیروهای هیدرودینامیکی حالت های غالب در سیستم دارد. در مقایسه با شبیه سازی های دینامیکی رایج مانند شبیه سازی های دینامیکی مولکولی، استفاده از اندرکنش های نرم^۴ در DPD به عنوان یک مزیت عمده نسبت به شبیه سازی های دیگر در نظر گرفته می شود. در این مدل خوشه ای از ذرات بصورت مهره ها نشان داده می شود و پتانسیل نرم موجود اجازه استفاده از مقیاس های زمان و طول نسبتاً بزرگتر از مقیاس هایی معمول در سایر تکنیک های شبیه سازی دینامیک مولکولی را می دهد. ساختار ذرات در یک سیستم آب-نفت حاوی سورفکتانت در مدل دینامیک ذرات اتلافی در شکل (۹) نمایش داده شده است.

نیاز در کد دینامیک مولکولی) که از عملکردی ساده شکل گرفته از برهمکنش پتانسیل ها با نقطه قطع کوچک و افزایش سرعت اضافی که عموماً از چشم انداز هموارتر انرژی در مورد مدل های درشت دانه ناشی می شود. در موارد اخیر با حالت های کندتر از مهره های سنگین تر درشت دانه باعث یک گام زمانی بزرگ تر و در نتیجه زمان های شبیه سازی واقعی تر طولانی تر می شود. رویکرد نوآورانه «لگو» که زیربنای میدان نیروی مارتینی است، گروه های عاملی اتمی را بسته به بار و قطبیت آن ها به چهار دسته اصلی تقسیم می کند: قطبی، غیرقطبی، آپولار (بدون دوقطبی) و باردار. سپس هر دسته به زیرمجموعه هایی تقسیم می شود تا اندرکنش ها را اصلاح کنند، که منجر به ده سطح اساسی در اندرکنش های مدل اصلی مارتینی می شود. همه گروه های شیمیایی مشابه، صرف نظر از اینکه بخشی از یک لیپید، پروتئین، زنجیره اسید نوکلئیک یا هر مولکول دیگری باشند، توسط دانه هایی بیان می شوند که از طریق این دانه ها تعداد اندرکنش ها محدود می شود. این سطوح اندرکنش دائماً اصلاح می شوند و انواع جدیدی از مهره ها نیز اضافه می شوند تا بتوان طیف وسیع تری از مولکول های مختلف را شبیه سازی کرد. شکل (۷) دو نوع سورفکتانت در مدل مارتینی را نشان می دهد.



شکل ۷ دو نوع سورفکتانت در مدل مارتینی [۵۵]

مدل تئوری سیالات مرتبط آماری: مدل درشت دانه تئوری سیالات مرتبط آماری^۱ از معادله حالت مبتنی بر مولکولی SAFT- γ مشتق شده است که می تواند داده های تجربی-تحلیلی را توصیف کند [۳۰]. در عمل، معادله حالت تناسب دقیقی را برای پارامترهای میدان نیرو ارائه می کند که در آن اندرکنش های کلیدی غیر پیوندی با استفاده از پتانسیل می^۲ بیان می شوند. خواص ترموفیزیکی مشاهده شده ماکروسکوپی که از فعل و انفعالات سیال-سیال و سیال-جامد ناشی می شود، به خوبی توسط مدل بازتولید می شود، که نتیجه مستقیم تطابق نزدیک بین نظریه و همپلتونین زیربنایی سیستم است. رویکرد SAFT پتانسیل های قوی و قابل انتقال دانه های مؤثر را استخراج می کند که گروه هایی از اتم ها را

³ Dissipative Particle Dynamics (DPD)

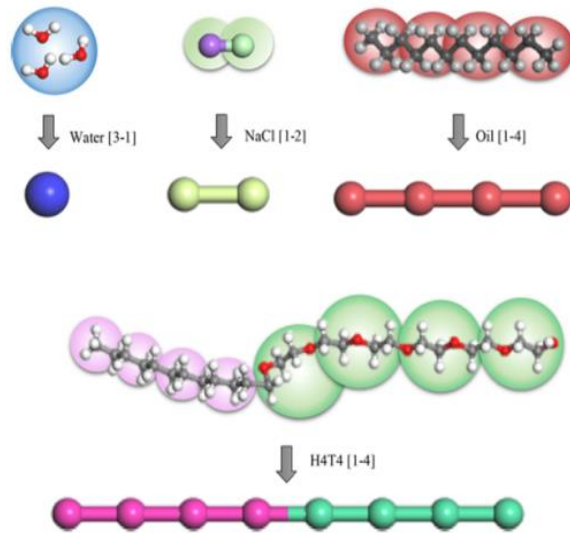
⁴ Soft Interactions

¹ Statistical Associating Fluid Theory Model

² Mie

(خوشه های محاسباتی) ایده آل می باشد. از طرفی، کار در سطح مزوسکوپی به ویژه روش بولتزن برای تجزیه و تحلیل سیستم های شبکه سیالی پیچیده شامل دینامیک سطحی و انتقال فاز مناسب است. از این رو، روش شبکه بولتزن یک روش شبیه سازی مناسب برای جریان های چندفازی به حساب می آید. مزیت اصلی روش شبکه بولتزن در شبیه سازی جریان های چندفازی این است که ردیابی و جابجایی سطح مشترک صریح دو فاز ضروری نیست و توپولوژی های سطحی پیچیده در جریان های بسیار پویا را قابل ترمیم می کند [۳۳]. مدل های معروف و پرکاربرد چند فازی پیشنهاد شده اند که می توان آنها را به چهار دسته اصلی طبقه بندی کرد که عبارتند از: مدل گرادیان رنگ، مدل مبتنی بر مدل پتانسیل بین ذره ای (شبه پتانسیل)، انرژی آزاد و مدل تئوری جنبشی [۵۶].

مدل گرادیان رنگ برای در نظر گرفتن سیالات با چگالی و ویسکوزیته متفاوت از رنگ های مختلف (آبی و قرمز) برای ذرات سیال استفاده می شود. دو تابع توزیع و برای نمایش دو سیال مختلف استفاده شد. تابع توزیع کل به عنوان جمع دو تابع توزیع تعریف می شود. اپراتورهای برخورد و جریان برای هر دو سیال در نظر گرفته می شوند. در مدل پتانسیل بین ذره ای جداسازی فاز را می توان با در نظر گرفتن رفتار سیال غیر ایده آل تک جزء شیمیایی (تک جزئی چند فازی) یا دفع متقابل اجزای شیمیایی مختلف (چند فازی چند جزئی) تحقق بخشید. این مدل افزودن برهمکنش های مولکولی بین توزیع های ذرات در مقیاس مزو می تواند جداسازی فاز خود به خود را شبیه سازی کند. این مدل به عنوان «مدل شبه پتانسیل» نامیده می شود. نیروی برهمکنش بین مولکول ها عمدتاً به چگالی سیال بستگی دارد. مدل انرژی آزاد ابتدا با استفاده از تابع انرژی برای ترکیب اثرات کشش سطحی به روشی سازگار ترمودینامیکی پیشنهاد شد. بعداً، دو مدل انرژی آزاد جدید برای شبیه سازی چند فازی با نسبت چگالی بالاتر (تا ۱۰۰۰) پیشنهاد شد. در رویکرد انرژی آزاد، چگالی کل و اختلاف چگالی مانند روش های گرادیان رنگ و مدل پتانسیل بین ذره ای (شبه پتانسیل) به عنوان پارامترهای شبیه سازی به جای چگالی هر فاز در نظر گرفته می شوند. از لحاظ تاریخی، نظریه جنبشی برای اولین بار برای مطالعه انتقال گاز ایده آل توسعه یافت. برای گسترش کاربرد آن در انتقال فاز و جریان های



شکل ۹ ساختار ذرات در یک سیستم آب-نفت حاوی سورفکتانت در مدل دینامیک ذرات اتلافی [۵۰]

۳-۳- روش های شبیه سازی عددی جریان سیالات چند فازی در حضور سورفکتانتها مبتنی بر تابع توزیع (معادله تقریب زده شده بولتزن)

روش شبکه بولتزن شکاف بین مقیاس میکرو و ماکرو را از بین برده است. در واقع این روش در مقیاس مزوسکوپی می باشد که از طرفی، تمام مزایای شبیه سازی در هر دو مقیاس ماکرو و میکرو را حفظ کرده و از طرف دیگر، بر بسیاری از محدودیت های آنها از جمله پیچیدگی و غیر خطی بودن معادلات و هزینه محاسبات بالا غلبه کرده است [۳۵]. ایده اساسی روش شبکه بولتزن براساس ایجاد مدل های جنبشی ساده ای می باشد که فیزیک مورد نیاز در فرایندهای میکروسکوپی و خواص ماکروسکوپی متوسط که از معادلات ماکروسکوپی مورد نظر پیروی می کند، را با هم ترکیب کند. دلیل اینکه چرا مدل های جنبشی ساده می تواند مورد استفاده قرار گیرد این است که دینامیک ماکروسکوپی یک سیال نتیجه رفتار جمعی بسیاری از ذرات میکروسکوپی در سیستم می باشد. در این روش خاصیت مجموعه ای از ذرات توسط توابع توزیع گوناگون نشان داده می شود. دلیل اینکه چرا روش شبکه بولتزن روز به روز در زمینه دینامیک سیالات محاسباتی محبوب تر می شود، این واقعیت است که این روش مسئله را به صورت محلی حل می کند. عدم حضور ترم های غیرخطی در معادلات بکار گرفته شده روش شبکه بولتزن و شبه خطی بودن این معادلات سبب شده است که این روش دارای درجه بالایی از توازی باشد، از این رو، این روش برای دستگاه های محاسباتی دارای قابلیت پردازش موازی

¹ Color Gradient

² Free Energy

³ Inter-particle Potential (Pseudo-Potential)

⁴ Kinetic Theory

ج) توسعه مدل برای سیستم های پیچیده تر، مانند محلول های سورفکتانت یونی آسان نیست.

د) پایداری عددی برای جریان های با تغییرات توپولوژیکی بزرگ مانند شکستن قطرات و ادغام به یک چالش تبدیل می شود.

بر خلاف مدل های دارای سطح مشترک نازک، روش میدان فاز که می تواند ساختار سطح مشترک را از طریق عملکرد انرژی آزاد مناسب شبیه سازی کند، پتانسیل زیادی برای شبیه سازی مشکلات جریان چند فاز نشان داده است [۶۷-۷۳]. این مدل علاوه بر اینکه در حالت مبتنی بر معادله ناویر استوکس وجود دارد، بلکه از مدل های چندفازی توسعه یافته برای روش شبکه بولتزمن نیز هست. اساس این مدل به روش های انرژی آزاد نشات می گیرد و در خانواده مدل های انرژی آزاد دسته بندی می شود. در یک مدل میدان فاز، انرژی آزاد نه تنها خواص تعادل را تعیین می کند، بلکه به شدت بر دینامیک سیستم چند فاز تأثیر می گذارد. انتقال مقادیر فیزیکی را می توان با یک نظریه هیدرودینامیکی تعمیم یافته به انرژی آزاد مرتبط کرد. از این رو، مدل های میدان فاز یک مبنای فیزیکی محکم برای جریان های چند فاز دارند، که در تضاد با روش های دینامیک سیالات محاسباتی سنتی است [۶۸]. کل انرژی آزاد سیستم میدان فاز برحسب پارامترهای مشخص کننده فازهای مختلف سیال و غلظت سورفکتانت از سه بخش تشکیل شده که عبارتند از [۷۲]: انرژی آزاد کان-هیلیارد (مربوط به پارامتر مربوط به فازهای مختلف سیال و مشخص کردن مرز مشترک پخش دو فاز)، آنتروپی برای اختلاط ایده آل سورفکتانت و کوپلینگ انرژی سورفکتانت-سطح مشترک. در مدل میدان فاز، راه حل تعادلی هنگامی که سیستم در تعادل است، پتانسیل های شیمیایی که به عنوان مشتقات عملکردی انرژی آزاد با توجه به پارامترهای مشخص کننده فازهای مختلف سیال و غلظت سورفکتانت تعریف شده، به برخی از ثابت ها تبدیل می شوند. در این مدل نیز مانند مدل شبه پتانسیل شان و چن، ۳ تابع توزیع در نظر گرفته می شود که به مربوط به میدان جریان، متغیر میدان فاز و سورفکتانت می شود. از این رو، نیازی به نوشتن معادله بقا در حجم سیال و معادله همرفت-پخش در سطح مشترک برای سورفکتانت نیست و این مدل به راحتی از پس شبیه سازی سورفکتانت های محلول و نامحلول بر می آید. در شکل (۱۰) مدل های چندفازی پرکاربرد روش شبکه بولتزمن برای شبیه سازی جریان سیالات چند فاز در حضور سورفکتانت ها دسته بندی شده است.

چندفازی، باید برهمکنش های مولکولی را که با افزایش چگالی در بیشتر سیالات اهمیت فزاینده ای پیدا می کنند، ترکیب کرد. با بررسی پیشینه شبیه سازی عددی جریان سیالات چند فاز در حضور سورفکتانت ها، استفاده از روش شبکه بولتزمن مدل تئوری جنبشی در این زمینه مرسوم نیست [۵۷]. مدل گرادیان رنگ اغلب برای حل جریان چند فاز در حضور سورفکتانت نامحلول استفاده می شود [۵۸-۶۴]. از این رو، در چنین شبیه سازی هایی تنها از یک معادله همرفت-پخش^۱ سورفکتانت در سطح مشترک استفاده که با روش تفاضل محدود حل می شود. در واقع این مدل به تعداد توابع توزیع اضافه نمی کند و توزیع سورفکتانت های بدست آمده از حل معادله سطحی همرفت-پخش تنها با تأثیر بصورت سورس ترم مربوط به اثرات تنش سطحی و مارانگونی در توابع توزیع جریان، در حل استفاده می شود. در مدل پتانسیل بین ذره ای (شبه پتانسیل) معرفی شده توسط شان و چن، افزودن برهمکنش های مولکولی بین توزیع های ذرات در مقیاس مزو می تواند جداسازی فاز خود به خود را شبیه سازی کند [۳۸ و ۶۷-۶۵]. از این رو، در چنین حل هایی ۳ تابع توزیع در نظر گرفته که دو تابع توزیع مانند روش گرادیان مشخص کننده هر یک از فازها و سومی برای سورفکتانت است. تنها تفاوت معادله تقریب زده شده بولتزمن برای این توابع توزیع در سورس ترم اعمال شده است که از برهمکنش های مولکولی بین توزیع های ذرات در فاز مختلف باهم و با سورفکتانت ها ناشی می شود. به دلیل اینکه این نوع شبیه سازی تطابق خوبی با فیزیک مسئله دارد، به راحتی می توان از آن برای حالت محلول و نامحلول استفاده کرد. این دو مدل مانند بسیاری از مدل های حالت اوپلری شبیه سازی جریان چندفازی مبتنی بر معادله ناویر استوکس سطح مشترک دو فاز را بصورت نازک^۲ در نظر می گیرند. این فرض در مواجهه با جریان چندفازی همراه با سورفکتانت ها ممکن است با معایبی روبرو شود که عبارتند از [۶۸]:

الف) کشش سطحی دینامیکی متکی بر یک معادله حالت تعادلی است که فرض می شود در فراتر از حالت تعادل نیز معتبر است.

ب) برای جریان های سطحی با سورفکتانت های محلول، انتقال جرم بین سطح مشترک و حجم سیالات نیاز به یک شرایط مرزی خارجی دارد که نمی تواند به طور منحصر به فرد از خود مدل ناشی شود.

¹ Convection-Diffusion

² Sharp

17, No. 4, pp. 1289-1307, DOI: 10.3934/dcdsb.2012.17.1289, (2012).

- [5] Soligo, G., Roccon, A., and Soldatia, A., Coalescence of surfactant-laden drops by Phase Field Method, *Journal of Computational Physics*, Vol. 376, pp. 1292-1311, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.021>, (2019).
- [6] Goodarzi, F. and Zendejboudi, S., Effects of salt and surfactant on interfacial characteristics of water/Oil systems: Molecular dynamic simulations and Dissipative Particle Dynamics, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Vol. 58, pp. 8817-8834, DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.9b00504>, (2019).
- [7] Antonopoulou, E., The role of surfactants in jet break-up for inkjet printing, Doctor of Philosophy in Mechanical Engineering, *University of Leeds*, Leeds, United Kingdom, (2020).
- [8] Haghnegahdar, M., Boden, S., and Hampel, S., Investigation of surfactant effect on the bubble shape and mass transfer in a milli-channel using high-resolution microfocus X-ray imaging, *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 87, pp. 184-196, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2016.09.010>, (2016).
- [9] Xu, J.-J., Li, Z., Lowengrub, J., and Zhao, H., A level-set method for interfacial flows with surfactant, *Journal of Computational Physics*, Vol. 212, pp 590-616, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2005.07.016>, (2006).
- [10] Tariq, A., Phase-Field simulation of surfactant adsorption onto flat and droplet interfaces, Master of Science in Mechanical Engineering, *Shanghai Jiao Tong University*, Shanghai, China, (2012).
- [11] Bazhlekov, I., Numerical simulation of drop coalescence in the presence of film soluble surfactant, *AIP Conference Proceedings*, Vol. 1487, pp. 351-359, DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4758978>, (2012).
- [12] Hayashi, K., Motoki, Y., van der Linden, M. J. A., Deen, N. G., Hosokawa, S., and Tomiyama, A., Single contaminated drops falling through stagnant liquid at low Reynolds Numbers, *Fluids*, Vol. 7, No. 2, pp. 55-78, DOI: <https://doi.org/10.3390/fluids7020055>, (2021).
- [13] Das, B., Kumar, B., Begum, W., Bhattarai, A., Mondal, M. H., and Saha, B., Comprehensive review on applications of surfactants in vaccine formulation, therapeutic and cosmetic pharmacy and prevention of pulmonary failure due to covid-19, *Chemistry Africa*, Vol. 5, pp. 459-480, DOI: <https://doi.org/10.1007/s42250-022-00345-0>, (2022).
- [14] Hao, Y., Jin, N., Wang, Q., Zhou, Y., Zhao, Y., Zhang, X., and Lü, H., Dynamics and controllability of droplet fusion under gas-liquid-liquid three-phase flow in a



شکل ۱۰ مدل‌های چندفازی پرکاربرد روش شبکه بولتزمان برای شبیه‌سازی جریان سیالات چندفازی در حضور سورفکتانت‌ها

۴- نتیجه گیری

در این مقاله روش‌های شبیه‌سازی عددی جریان سیالات چندفازی در حضور مواد فعال سطحی (سورفکتانت‌ها) مطالعه شد. با توجه به گستردگی کاربرد این نوع جریان، شبیه‌سازی عددی یکی از ابزارهای مفید برای شناسایی فیزیکی و بهبود کاربرد سورفکتانت‌ها است. از طرفی، گستره وسیعی از روش‌های عددی انتخاب‌های زیادی را پیش روی پژوهشگران قرار داده است. شناخت و درک قابلیت‌ها و جزئیات این روش‌ها کمک خواهد کرد تا با توجه به امکانات سخت‌افزاری، مناسب‌ترین روش عددی انتخاب و نتایج قابل اعتماد و مقرون به صرفه‌ای حاصل شود.

۵- مراجع

- [1] Cui, Y., A computational fluid dynamics study of two-phase flows in the presence of surfactants, Doctor of Philosophy in Chemical Engineering, *University of New Hampshire*, Durham, England, (2011).
- [2] Antonopoulou, E., Harlen, O. G., Rump, M., Segers, T., and Walkley, M. A., Effect of surfactants on jet break-up in drop-on-demand inkjet printing, *Physics of Fluids*, Vol. 33, No. 7, pp. 072112, DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0056803>, (2021).
- [3] Sanjeev, A., Jog, M. A., and Manglik, R. M., Computational simulation of surfactant-induced interfacial modification of droplet impact and heat transfer, in *ILASS Americas, 21st Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*, Orlando, FL, May 18-21, USA, (2008).
- [4] Teng, C.-H., Chern, I.-L., and Lai, M.-C., Simulating binary fluid-surfactant dynamics by a phase field model, *Discrete and Continuous Dynamical Systems-B*, Vol.

- Open-Water Surfaces, *Offshore Technology Conference*, Houston, Texas, USA, 7–9 Feb. (2011).
- [24] Steinhausen, M., Numerical simulation of single rising bubbles influenced by soluble surfactant in the spherical and ellipsoidal regime, Master of Science in Mathematics Mathematical Modelling and Analysis, *Technical University Darmstadt*, Darmstadt, Germany, (2018).
- [25] Druetta, P. and Picchioni, F., Simulation of surfactant oil recovery processes and the role of phase behaviour parameters, *Energies*, Vol. 12, pp. 983-1013, DOI: <https://doi.org/10.3390/en12060983>, (2019).
- [26] Adila, A. S., Al-Shalabi, E. W., and Alameri, W., Geochemical investigation of hybrid Surfactant and low salinity/engineered water injections in carbonates: A numerical study, *Journal of Petroleum Science and Engineering*, Vol. 208, pp. 109367, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2021.109367>, (2022).
- [27] Sabirgalieva, N., Skartlien, R., and Rojas-Solorzano, L., DPD simulation of surface wettability alteration by added water-soluble surfactant in the presence of indigenous oil-soluble surfactant, *Chemical Engineering Transactions*, Vol. 57, pp. 1489-1494, DOI: <https://doi.org/10.3303/CET1757249>, (2022).
- [28] Jin, F., Gupta, N. R., and Stebe, K. J., The detachment of a viscous drop in a viscous solution in the presence of a soluble surfactant, *Physics of Fluids*, Vol. 18, pp. 022103, DOI: <https://doi.org/10.1063/1.2172003>, (2006).
- [29] Young, Y.-N., Booty, M. R., Siegel, M., and Li, J., Influence of surfactant solubility on the deformation and breakup of a bubble or capillary jet in a viscous fluid, *Physics of Fluids*, Vol. 21, pp. 072105, DOI: <https://doi.org/10.1063/1.3176462>, (2009).
- [30] Theodorakis, P. E., Müller, E. A., Craster, R. V., and Matar, O. K., Modelling the superspreading of surfactant-laden droplets with computer simulation, *Soft Matter*, Vol. 11, pp. 9254-9261, DOI: <https://doi.org/10.1039/C5SM02090E>, (2015).
- [31] Prisle, N. L., Asmi, A., Topping, D., Partanen, A.-I., Romakkaniemi, S., Dal Maso, M., Kulmala, M., Laaksonen, A., Lehtinen, K. E. J., McFiggans, G., and Kokkola, H., Surfactant effects in global simulations of cloud droplet activation, *Geophysical Research Letters*, Vol. 39, pp. L05802, DOI: <https://doi.org/10.1029/2011GL050467>, (2012).
- [32] Yulianti, K., Gunawan, A. Y., Soewono, E., and Mucharam, L., Effects of an insoluble surfactant on the deformation of a falling drop towards a solid surface, *Journal of Computer Science & Computational Mathematics*, Vol. 3, No. 1, pp. 7-12, DOI: <https://doi.org/10.20967/jcscm.2013.01.002>, (2013).
- microfluidic reactor, *RSC Adv.*, Vol. 10, pp. 14322-14330, DOI: <https://doi.org/10.1039/D0RA00913J>, (2020).
- [15] Gao, G., Chen, F.-J., Zhou, L., Su, L., Xu, D., Xu, L., and Li, P., Control of lipid droplet fusion and growth by CIDE family proteins, *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Molecular and Cell Biology of Lipids*, Vol. 1862, No. 10, pp. 1197-1204, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.bbalip.2017.06.009>, (2017).
- [16] Whitby, C. P. and Bahuon, F., Droplet fusion in oil-in-water pickering emulsions, *Front. Chem.*, Vol. 6, pp. 213-227, DOI: <https://doi.org/10.3389/fchem.2018.00213/full>, (2018).
- [17] Urbina-Villalba, G., an algorithm for emulsion stability simulations: Account of flocculation, coalescence, surfactant adsorption and the process of ostwald ripening, *Int. J. Mol. Sci.*, Vol. 10, pp. 761–804, DOI: <https://doi.org/10.3390/ijms10030761>, (2009).
- [18] Posocco, P., Perazzo, A., Preziosi, V., Laurini, E., Priola, S., and Guido, S., Interfacial tension of oil/water emulsions with mixed non-ionic surfactants: comparison between experiments and molecular simulations, *RSC Adv.*, Vol. 6, pp. 4723-4729, DOI: <https://doi.org/10.1039/C5RA24262B>, (2016).
- [19] Zhang, X., Wu, J. -y., and Niu, J., PCM-in-water emulsion for solar thermal applications: The effects of emulsifiers and emulsification conditions on thermal performance, stability and rheology characteristics, *Solar Energy Materials and Solar Cells*, Vol. 147, pp. 211-224, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2015.12.022>, (2016).
- [20] Laurén, S., Evaluation of emulsion stability by interfacial rheology measurements, *biolinscientific.com*, Nov. 10, (2020): <https://www.biolinscientific.com/blog/evaluation-of-emulsion-stability-by-interfacial-rheology-measurements>.
- [21] Yu, X., Jiang, N., Miao, X., Zong, R., Sheng, Y., Li, C., and Lu, S., Formation of stable aqueous foams on the ethanol layer: Synergistic stabilization of fluorosurfactant and polymers, *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, Vol. 591, pp. 124545, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2020.124545>, (2020).
- [22] Gupta, D. Sarker, B., Thadikaran, K., John, V., Maldarelli, C., and John, G., Sacrificial amphiphiles: Eco-friendly chemical herders as oil spill mitigation chemicals, *Science Advances*, Vol. 1, No. 5, pp. e1400265., DOI: 10.1126/sciadv.1400265, (2015).
- [23] Kjeilen-Eilertsen, G., Jersak, J. M., and Westerlund, S., Developing Treatment Products for Increased Microbial Degradation of Petroleum Oil Spills across

- [43] Piedfert, A.R., Lalanne, B., Masbernat, O., and Risso, F., Numerical simulations of a rising drop with shape oscillations in the presence of surfactants, *Physical Review Fluids*, Vol. 3, No. 10, pp. 103605, DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevFluids.3.103605>, (2018).
- [44] Teigen, K.E., Lervåg, K.Y., and Munkejord, S.T., Sharp interface simulations of surfactant-covered drops in electric fields, V European Conference on Computational Fluid Dynamics ECCOMAS CFD (2010), Lisbon, Portugal, 14-17 June (2010).
- [45] Soligo, G., Roccon, A., and Soldati, A., Deformation of clean and surfactant-laden droplets in shear flow, *Meccanica*, Vol. 55, pp. 371–386, DOI: <https://doi.org/10.1007/s11012-019-00990-9>, (2020).
- [46] Martin, D.W., and Blanchette, F., Simulations of surfactant effects on the dynamics of coalescing drops and bubbles, *Physics of Fluids*, Vol. 27, pp. 012103, DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4905917>, (2015).
- [47] Adami, S., Hu, X.Y., and Adams, N.A., 3D Drop deformation and breakup in simple shearflow considering the effect of insoluble surfactant, *5th international SPHERIC workshop*, Manchester, UK, 23-25 June, (2010).
- [48] Adami, S., Hu, X.Y., and Adams, N.A., A conservative SPH method for surfactant dynamics, *Journal of Computational Physics*, Vol. 229, pp. 1909–1926, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2009.11.015>, (2010).
- [49] Drumright-Clarke, M.A. and Renardy, Y., The effect of insoluble surfactant at dilute concentration on drop breakup under shear with inertia, *Physics of Fluids*, Vol. 16, No. 1, pp. 14-23, DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1628232>, (2004).
- [50] Theodorakis, P. E., Smith, E. R., Craster, R.V., Müller, E. A., and Matar, O. K., Molecular dynamics simulation of the superspreading of surfactant-laden droplets. A review, *Fluids*, Vol. 4, No. 176, pp. 1-23, DOI: <https://doi.org/10.3390/fluids4040176>, (2019).
- [51] Khodadadi, Z., Mousavi-Khoshdeld, S.M., Gharibi, H., Hashemianzadeh, S.M., and Javadian, S., Monte Carlo simulation of binary surfactant/contaminant/water systems, *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, Vol. 36, pp. 20-29, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmkgm.2012.03.003>, (2012).
- [52] Khodadadi, Z., Mousavi-Khoshdeld, S.M., and Gharibi, H., Monte Carlo simulation and theoretical approach to mixed surfactant system consisting gemini and conventional surfactants in aqueous solutions, *Fluid Phase Equilibria*, Vol. 406, No. 25, pp. 175-180, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2015.07.051>, (2015).
- [33] Dave, N. and Joshi, T., A concise review on surfactants and its significance, *International Journal of Applied Chemistry*, Vol. 13, No. 3, pp. 663-672, DOI: <https://doi.org/10.37622/IJAC/13.3.2017.663-672>, (2017).
- [34] Hasegawa, T., Karasawa, M., and Narumi, T., Modeling and measurement of the dynamic surface tension of surfactant solutions, *J. Fluids Eng.*, Vol. 130, No. 8, pp. 081505, DOI: <https://doi.org/10.1115/1.2956597>, (2008).
- [35] Mukherjee, S., Berghout, P., and Van den Akker, H. E. A., A lattice boltzmann approach to surfactant-laden emulsions, *American Institute of Chemical Engineers Journals*, Vol. 65, No. 2, pp. 811-828, DOI: <https://doi.org/10.1002/aic.16451>, (2019).
- [36] Venkataramani, V., Jin, F. and Stebe, K.J., Injected Drops with Surfactants: A Priori Scaling for Predicting Impeded Drop Necking. In *The 2008, AIChE Annual Meeting*, 16-21 November 2008, Philadelphia, Pennsylvania, USA, (2008).
- [37] Palsson, S., Siegel, M., and Tornberg, A.-K., Simulation and validation of surfactant-laden drops in two-dimensional Stokes flow, *Journal of Computational Physics*, Vol. 386, pp. 218-247, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.12.044>, (2019).
- [38] Mukherjee, S., Zarghami, A., Haringa, C., Van As, K., Kenjeres, S., and Van den Akker, H. E. A., Simulating liquid droplets: A quantitative assessment of lattice Boltzmann and Volume of Fluid methods, *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Vol. 70, pp. 59-78, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatfluidflow.2017.12.00>, (2019).
- [39] Wang, Q., Siegel, M., and Booty, M.R., Numerical simulation of drop and bubble dynamics with soluble surfactant, *Physics of Fluids*, Vol. 26, pp. 052102, DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4872174>, (2014).
- [40] Lai, M.-C., Tseng, Y.-H., and Huang, H., Numerical simulation of moving contact lines with surfactant by immersed boundary method, *Commun. Comput. Phys.*, Vol. 8, No. 4, pp. 735-757, DOI: <https://doi.org/10.4208/cicp.281009.120210a>, (2010).
- [41] Ganesan, S., Simulations of impinging droplets with surfactant-dependent dynamic contact angle, *Journal of Computational Physics*, Vol. 301, pp. 178–200, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2015.08.026>, (2015).
- [42] Atasia, O., Legendre, D., Haut, B., Zenit, R., and Scheida, B., Lifetime of surface bubbles in surfactant solutions, *Langmuir*, Vol. 36, pp. 7749-7764, DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.9b03597>, (2020).

- 11, No. 6, pp. 1246-1252, DOI: <https://doi.org/10.5281/zenodo.1131445>, (2017).
- [63] Farhat, H., Celiker, F., Singh, T., and Lee, J.S., A hybrid lattice Boltzmann model for surfactant-covered droplets, *Soft Matter*, Vol. 7, No. 6, pp. 1968-1986, DOI: <https://doi.org/10.1039/C0SM00569J>, (2011).
- [64] Hasan, W., Surfactants, thermal and surface energy effects on emulsions' transport properties: A study using lattice boltzmann method, Doctor of Philosophy in Mechanical Engineering, *Wayne State University*, Detroit, USA, (2018).
- [65] Furtado, K. and Skartlien, R., Derivation and thermodynamics of a lattice Boltzmann model with soluble amphiphilic surfactant, *Physical Review E*, Vol. 81, pp. 066704, DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.81.066704>, (2010).
- [66] Choi, J.S., A multiphase lattice boltzmann model for colloidal particles and surfactant in an evaporating droplet with a pinned contact line, Master of Science in Mechanical Engineering, *Graduate School of UNIST*, Ulsan, Republic of Korea, (2018).
- [67] Skartlien, R., Furtado, K., Sollum, E., Meakina, P., and Kralov, I., Lattice-Boltzmann simulations of dynamic interfacial tension due to soluble amphiphilic surfactant, *Physica A*, Vol. 390, pp. 2291-2302, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physa.2011.02.022>, (2011).
- [68] Liu, H. and Zhang, Y., Phase-field modeling droplet dynamics with soluble surfactants, *Journal of Computational Physics*, Vol. 229, pp. 9166-9187, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2010.08.031>, (2010).
- [69] van der Sman R.G.M. and Meinders, M.B.J., Analysis of improved Lattice Boltzmann phase field method for soluble surfactants, *Computer Physics Communications*, Vol. 199, pp. 12-21, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2015.10.002>, (2016).
- [70] Zong, Y., Zhang, C., Liang, H., Wang, L., and Xu, J., Modeling surfactant-laden droplet dynamics by lattice Boltzmann method, *Phys. Fluids*, Vol. 32, pp. 122105, DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0028554>, (2020).
- [71] Kian Far, E., Gorakifard, M., and Fattahi, E., Multiphase phase-field lattice boltzmann method for simulation of soluble surfactants, *Symmetry*, Vol. 13, No. 6 pp. 10-19, DOI: <https://doi.org/10.3390/sym13061019>, (2021).
- [72] Shi, Y., Tang, G.H., Cheng, L.H., and Shuang, H.Q., An improved phase-field-based lattice Boltzmann model for droplet dynamics with soluble surfactant, *Computers and Fluids*, Vol. 179, pp. 508-520, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2018.11.018>, (2019).
- [53] Zapata, C.P., Casanova, H., and Restrepo, J., Monte Carlo simulation of the self-assembly process of nonionic surfactants (type HXTY) considering second-neighbor interaction between surfactant molecules, *Progr. Colloid Polym. Sci.*, Vol. 128, pp. 146-150, DOI: <https://doi.org/10.1007/b97118>, (2004).
- [54] Masubuchi, Y., Molecular Modeling for Polymer Rheology, *Reference Module in Materials Science and Materials Engineering*, DOI: <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-803581-8.02178-0>, Elsevier Inc., (2016).
- [55] Zhou, J., and Ranjith, P.G., Self-assembly and viscosity changes of binary surfactant solutions: A molecular dynamics study, *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 585, pp. 250-257, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2020.11.022>, (2021).
- [56] Sudhakar, T., and Das, A.K., Evolution of Multiphase Lattice Boltzmann Method: A Review, *J. Inst. Eng. India Ser. C*, Vol. 101, pp. 711-719, DOI: <https://doi.org/10.1007/s40032-020-00600-8>, (2020).
- [57] Wei, B., Houa, J., Sukop, M.C., and Liu, H., Pore scale study of amphiphilic fluids flow using the Lattice Boltzmann model, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 139, pp. 725-735, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.05.056>, (2019).
- [58] Hasan, W. and Farhat, H., Hybrid thermal lattice Boltzmann model to study the transportation of surfactants contaminated emulsions in parabolic flows, *Journal of Petroleum Science and Engineering*, Vol. 166, pp. 85-93, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2018.03.005>, (2018).
- [59] Zhang, J., Liu, H., and Ba, Y., Numerical study of droplet dynamics on a solid surface with insoluble surfactants, *Langmuir*, Vol. 166, pp. 85-93, DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.9b00495>, (2018).
- [60] Liu, H., Ba, Y., Wu, L., Li, Z., Xi, G., and Zhang, Y., A hybrid lattice Boltzmann and finite difference method for droplet dynamics with insoluble surfactants, *J. Fluid Mech.*, Vol. 837, pp. 381-412, DOI: <https://doi.org/10.1017/jfm.2017.859>, (2018).
- [61] Choi, S.B., Kondaraju, S., and Lee, J.S., Study for optical manipulation of a surfactant-covered droplet using lattice Boltzmann method, *Biomicrofluidics*, Vol. 8, pp. 024104, DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4868368>, (2014).
- [62] Hasan, W., and Farhat, H., Alhilo, A., and Tamimi, L., Hybrid quasi-steady thermal lattice boltzmann model for studying the behavior of oil in water emulsions used in machining tool cooling and lubrication, *International Scholarly and Scientific Research & Innovation*, Vol.