مجله مهندسی مکانیک مدرس، مهر 1394، دوره 15، شماره 7، ص‌ص 119-130

ماهنامه علمی پژوهشی

مهندسی مکانیک مدرس

mme.modares.ac.ir

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی رفتار جریان کوئت درون نانو کانال با دیواره صاف و زبر

حامد رحمتی پور[1]، احمدرضا عظیمیان[2*]

1- دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک ، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد نجف آباد، نجف آباد، ایران

2- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد خمینی شهر، خمینی شهر، ایران

* خمینی شهر، صندوق پستی 8418148499، azimian@iaukhsh.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 01 فروردین 1394

پذیرش: 02 اردیبهشت 1394

ارائه در سایت: 03 خرداد 1394

کلید واژگان:

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

جریان کوئت

زبری سطح

نانو کانال

چکیده

در زمینه فناوری نانو، انتقال سیال در مجاری از اهمیت بالایی برخوردار است و با توجه به محدودیت‌های آزمایشگاهی در تحلیل رفتار جریان در مقیاس نانو از شبیه‌سازی‌های عددی استفاده می‌شود. از این رو در این پژوهش با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی که یک روش دقیق برای سیستم‌های مولکولی بر مبنای قانون دوم نیوتن است برای بررسی رفتار جریان سیال آرگون در جریان کوئت پایدار درون نانوکانال‌های صاف و زبر مورد مطالعه قرار گرفته است. شبیه‌سازی‌های این پژوهش با استفاده از نرم‌افزار لمپس انجام شده است. در تحقیق حاضر، به‌منظور بررسی تغییرات سرعت سیال و لغزش سیال در جریان کوئت پایدار تأثیر عوامل مختلفی چون سرعت دیواره، ارتفاع کانال، چگالی دیواره، برهم-کنش بین ذرات سیال-دیوار و همچنین تغییر هندسه زبری سطح از جمله زبری مستطیلی و مثلثی در ابعاد و اندازه های مختلف بررسی شده است. بر اساس نتایج بدست آمده در این پژوهش افزایش سرعت دیواره، لغزش سرعت سیال را افزایش می‌دهد. به‌ازای مقادیر ثابت سرعت دیواره، افزایش ارتفاع کانال باعث کاهش لغزش سرعت سیال می‌شود. برای جریان کوئت پایدار کاهش چگالی دیوار، باعث کاهش لغزش سرعت سیال می‌شود. با کاهش پارامتر انرژی، لغزش سرعت سیال افزایش و با کاهش پارامتر طولی، لغزش سرعت سیال کاهش پیدا می‌کند. اعمال زبری‌های مستطیلی و مثلثی به دیوار پایین باعث کاهش لغزش سرعت سیال می‌شود، همچنین با افزایش ارتفاع زبری لغزش سرعت سیال بیشتر کاهش می‌یابد.

Molecular dynamics simulation of Couette flow behavior in smooth and rough nanochannels

Hamed Rahmatipour[1], Ahmad Reza Azimian[2*]

1- Department of Mechanical Engineering, Najafabad Branch, Islamic Azad University, Najafabad, Iran.

2- Department of Mechanical Engineering, Islamic Azad University, Khomeinishahr Branch, Iran.

* P.O.B. 8418148499, Khomeinishahr, Iran, azimian@iaukhsh.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 21 March 2015
Accepted 22 April 2015
Available Online 24 May 2015

Keywords:
Molecular Dynamics Simulation
Couette Flow
Surface Roughness
Nanochannel

ABSTRACT

Fluid flow through channels and ducts in nano scales is an important issue which requires numerical simulations for better analysis of fluid behavior because of the limitations of experimental methods. Hence, in the present study Molecular Dynamics simulation is used as a precise method for molecular scale problems to investigate fluid behavior. This method, which is based on Newton's second law, is applied to investigate liquid Argon flow in steady Couette flows through smooth and rough nanochannels. Simulations were performed using LAMMPS software. In the present study, the fluid velocity and fluid slip in steady Couette flows were obtained to investigate various effects including: wall velocity, channel height, wall density, fluid-wall interaction, and surface roughness with different shapes such as rectangular and triangular in different dimensions. Based on the results, an increase in wall velocity increases the fluid slip velocity. For velocity constant values, an increase of channel height will decrease the fluid slip velocity. In steady Couette flow, decrease of wall density will result in decrease of fluid slip velocity. Reducing the energy parameter between fluid and wall will increase the fluid slip velocity and, on the other hand, decreasing the fluid-wall length parameter will decrease the fluid slip velocity. The rectangular and triangular roughness at the bottom wall reduces the fluid slip velocity, and an increase of roughness height further decreases the fluid slip velocity.

1- مقدمه

علی‌رغم پیشرفت علم، عدم توانایی بشر در حل دقیق بسیاری از معادلات و روابط حاکم بر طبیعت به خصوص در علوم مربوط به سیالات، به روش‌های عددی در حل ریاضیات منجر شده است. روشی که سال‌های اخیر برای حل این معادلات شهرت زیادی یافته، دینامیک سیالات محاسباتی[1] است که بر پایه محاسبات عددی بنا شده است.

مهم‌ترین دلیل استفاده از روش‌های عددی، عدم توانایی حل مسائل

1- Computational Fluid Dynamics (CFD)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

Please cite this article using:

H. Rahmatipour, A. R. Azimian, Molecular dynamics simulation of Couette flow behavior in smooth and rough nanochannels, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 7, pp. 119-130, 2015 (In Persian)

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-04-19]

[DOR: 20.1001.1.10275940.1394.15.7.32.0]

سیالاتی موجود به روش تحلیلی است. تنها تعدادی از مسائل ساده موجود در طبیعت را می‌توان به روش تحلیلی حل کرد. روش‌های عددی، روش‌هایی هستند که با اعمال تقریب‌های مؤثر، مسائل را از محیط پیوسته به محیط گسسته منتقل می‌کنند. کارایی بالای روش‌های عددی در کنار هزینه بسیار پایین استفاده از آن‌ها، به رشد روزافزون و نفوذ غیر قابل انکار این روش‌ها در علوم مختلف امروزی منجر شده است. مزیت دیگر آن کاهش زمان انجام محاسبات نسبت به انجام آزمایش درون آزمایشگاه است.

امروزه با رشد چشم‌گیر رایانه‌ها، دانشمندان از طریق شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای امکان آن را یافته‌اند که فرایندهای مختلف را از جنبه‌های گوناگون با دقت بیش‌تری مورد مطالعه قرار دهند و پاسخ پرسش‌های خود را آسان‌تر بیابند. شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای نقش با ارزشی در فراهم آوردن نتایج دقیق برای برخی مسائل در مکانیک آماری ایفا می‌کنند، مسائلی که ممکن است با روش‌های دیگر قابل حل نباشند و یا فقط بتوان آن‌ها را با روش‌های تقریبی حل کرد.

تا به امروز روش‌های بسیار متنوعی به عنوان شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای ابداع شده‌اند. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی[1] از جمله روش‌های لاگرانژی است که در برخی مسائل نسبت به روش‌های دیگر برتری دارد. در کار حاضر، به دلیل ابعاد نانو در مسأله از این روش استفاده شده است، به این دلیل که از یک طرف معادلات معمول جریان سیال از جمله معادلات ناویر استوکس به دلیل ناپیوسته بودن سیال برقرار نبوده، شرط عدم لغزش سیال بر روی جامد برقرار نبوده و از طرف دیگر می‌توان به کمک این روش اطلاعات جزئی از رفتار ذرات بدست آورد. در حالی‌که به دلیل کوچک بودن ابعاد مسأله، استفاده از روش‌های تجربی عملاً غیرممکن بوده و روش‌های معمول CFD نیز به دلیل ناپیوسته بودن فیزیک مسأله و فرض‌های ساده شونده متعدد به جواب غیرمعقول و نادرست منجر خواهند شد.

در ادامه به شرح بیشتری از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پرداخته می‌شود تا اهمیت استفاده از این روش در اینگونه مسائل مشخص شود.

در روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با اعمال معادلات حرکت نیوتن، مجموعه‌ای از موقعیت‌های اتمی به صورت پی‌درپی به‌دست می‌آید. دینامیک مولکولی یک روش تعینی است به این مفهوم که حالت سیستم در هر زمان آتی را می‌توان از حالت فعلی آن پیش‌بینی کرد. در هر گام نیروهای وارد بر اتم‌ها محاسبه و با موقعیت‌ها و سرعت‌های فعلی ترکیب می‌شود تا موقعیت‌ها و سرعت‌های جدید در یک زمان کوتاه جلوتر به‌دست آید، فرض می‌شود که نیروی عمل کننده روی هر اتم طی این بازه زمانی ثابت است. بنابراین، اتم‌ها به موقعیت‌های جدید جابه‌جا می‌شوند و فرایند تکرار می‌شود. به این ترتیب، یک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، یک مسیر محاسبه می‌کند که توصیف کننده چگونگی تغییر متغیرهای دینامیکی با زمان است.

جریان کوئت[2] از جمله جریان‌های بسیار مهم بوده که در بسیاری از تجهیزات میکرو و نانو بکار می‌رود. از جمله آن‌ها می‌توان به جریان هوا بین صفحات هارددیسک رایانه، پمپ‌های گریز از مرکز با دور بالا، و برخی میکرو پمپ‌ها و نانو پمپ‌ها اشاره کرد. در مقاله حاضر به بررسی تأثیر پارامترهای سرعت دیواره، ارتفاع کانال، چگالی دیواره، مقدار برهم‌کنش[3] بین ذرات سیال-دیوار و همچنین تغییر هندسه زبری سطح، بر روی رفتار جریان کوئت پرداخته شده است.

در 30 سال گذشته شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بطور گسترده به بررسی ارتباط بین ساختار سیالات ساده در تماس با سطوح اتمی صاف و لغزش شرایط مرزی مورد مطالعه قرار گرفته که در ذیل به بخشی از آن‌ها اشاره شده است.

لی و کیم [1] جریان کوئت مغشوش را برای عدد رینولدز 6000 شبیه‌سازی کردند. آن‌ها انواع آمار مغشوش از جمله تمام شرایط در معادلات انتقال از تنش‌های رینولدز، توابع چگالی احتمال از سرعت و ورتیسیته اجزاء و انرژی جنبشی را گردآوری کردند، همچنین این نتایج را با ال تلبانی و رینولدز [2] و کیم و همکارانش [3] که قبلاً در مورد جریان پوازیه بحث کرده بودند، مقایسه کردند.

گالیه و آتارد [4] یک مطالعه اصولی[4] برای بررسی اثر زبری جامد در شرط مرزی لغزش در جریان برشی ارائه دادند. آن‌ها زبری اتمی را با استفاده از تغییردادن اندازه و فاصله بین اتم‌های جامد در بسته‌بندی کسری ثابت مدل کردند در حالی که پارامترهای تعامل و حالت ترمودینامیکی مایع ثابت نگه‌داری می‌شوند. این محققین شبیه‌سازی را برای جریان لنارد- جونز در جریان کوئت انجام دادند و نتیجه گرفتند که ساختار سیال به عنوان دامنه نوسانات چگالی با افزایش صافی سطوح افزایش می‌یابد. آن‌ها نشان دادند که لغزش برای هر دو سطح صاف و زبر رخ می‌دهد.

کائو و همکاران [5] اثر زبری سطح در جریان لغزشی برای گاز آرگون در یک کانال پلاتینی مادون میکرون[5] را با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک ملکولی غیرتعادلی مورد بررسی قرار دادند. آن‌ها هندسه زبری سطح را توسط اشکال مثلثی، مستطیلی، امواج سینوسی و به صورت تصادفی مثلثی مدل کردند و نیز برای شبیه‌سازی از تابع پتانسیل لنارد-جونز استفاده کردند. نتایج آن‌ها نشان داد که شرایط مرزی سرعت لغزش، از جمله لغزش، عدم لغزش و لغزش منفی، نه تنها به عدد نادسن[6] بلکه به زبری سطحی هم بستگی دارد. آن‌ها نتیجه گرفتند که ضریب اصطکاک نه تنها با کاهش عدد نادسن بلکه با افزایش زبری سطح افزایش می‌یابد.

جیا و همکاران [6] به مطالعه خواص جریان در نانو کانال پرداختند و توزیع دما، سرعت و چگالی را در پنج درجه سرمایش مختلف بدست آوردند. آن‌ها مشاهده کردند که درجه سرمایش در دیواره جامد بر روی شرط لغزش سیال روی دیواره مؤثر است، بدین ترتیب که با افزایش درجه سرمایش لغزش در دیواره‌های جامد کاهش می‌یابد. بعلاوه با تغییر دمای دیواره پروفیل چگالی داخل نانو کانال تغییر خواهد کرد.

مارتینی و همکاران [7] با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیرتعادلی در یک جریان کوئت، مکانیسم‌های مولکولی لغزش مایع را مورد بررسی قرار دادند. آن‌ها برای کنترل دمای دیوار از ترموستات نوُز-هوور استفاده کردند و نتیجه گرفتند که لغزش سراسری به افزایش تعداد اتم لغزش و در نتیجه افزایش طول لغزش منجر می‌شود. آن‌ها نتیجه گرفتند که برای مقادیر بسیار زیاد نیرو، طول لغزش یک مقدار ثابت می‌شود که نتایج آن‌ها در توافق با نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی است.

کائو و همکاران در سال [8] مروری بر حمل و نقل حرکت مولکولی در سطح اشتراک سیال- جامد برای میکرو سیال‌ها و نانو سیال‌ها در سیستم‌های میکرو و نانو الکترومکانیکی انجام دادند. آن‌ها به این نتیجه رسیدند که نانولوله‌های کربنی با راندمان کم انتقال سیال، و همچنین خواص الکتریکی،

1- Molecular Dynamics Simulation
2- Couette
3- Interaction
4- systematic study
5- Submicron
6- Knudsen number

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-04-19]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1394.15.7.32.0]

نوری، حرارتی و مکانیکی خوب، در آینده سکوی امیدوار کننده‌ای برای میکرو سیالات و نانو سیالات مهندسی خواهد بود.

نیاورانی و پریژو [9] تاثیر تفاوت نرخ برشی و زبری سطح در جریان لغزشی از یک سیال نیوتنی را با استفاده از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی و پیوستار مورد مطالعه قرار دادند. آن‌ها برای شبیه‌سازی از تابع پتانسیل لنارد-جونز استفاده کردند و نتیجه گرفتند که هر دو مقدار طول لغزش مؤثر و شیب آن در حضور زبری سطح متناوب به میزان قابل توجهی کاهش می‌یابد. همچنین نتیجه گرفتند که نتایج آن‌ها با مطالعات دینامیک ملکولی قبلی در توافق است که، طول لغزش در نرخ برش کم تقریباً ثابت است و برای یک نرخ برش نزدیک به یک مقدار بحرانی، طول لغزش به سرعت رشد می‌کند.

کمالی و خوارزمی [10] با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، اثرات زبری سطح در جریان نانو کانال برای جریان پوازیه را مورد بررسی قرار دادند. آن‌ها برای برهم‌کنش ذرات از پتانسیل لنارد- جونز و برای معادله حرکت ذرات از رابطه با مرتبه پنج استفاده کردند و زبری را بر روی دیوار پایین کانال قرار دادند. نتایج شبیه‌سازی آن‌ها نشان داد که هر دو سطح اشتراک دیوار-سیال و زبری سطح مهم هستند و باید به طور همزمان در تعیین نانو ساختارها و پروفیل‌های جریان، سیال تک اتمی در نانو کانال در نظر گرفته شوند.

نوریان و همکاران [11] با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی اثرات هندسه زبری سطح شطرنجی در جریان آرگون مایع داخل نانو کانال که زبری بر روی دیوار پایین کانال قرار دارد را مورد مطالعه قرار دادند. آن‌ها برای برهم‌کنش بین ذرات از پتانسیل لنارد- جونز استفاده کردند و شرایط مرزی در جهت جریان را متناوب در نظر گرفتند. نتایج آن‌ها نشان داد که با افزایش انرژی جذب سطحی یا افزایش ارتفاع زبری، لایه‌بندی چگالی در نزدیکی دیوار با مقادیر بالاتر یا پدیده لایه‌بندی ثانویه افزایش می‌یابد.

امین فر و رزم آرا [12] جریان پوازیه حاوی مایع آرگون درون یک نانو کانال با اعمال نیروی خارجی روی ذرات سیال، برای تابع پتانسیل‌های مختلف را با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار دادند. این محققان برای محاسبه برهم‌کنش‌های بین اتم‌ها از سه مدل تابع پتانسیل لنارد-جونز مختلف، استفاده کردند و نتیجه گرفتند که مشخصات و رفتار هیدرودینامیکی جریان به نوع پتانسیل برهم‌کنش وابسته بوده و پیش‌بینی‌های پروفیل سرعت برای مدل پتانسیل لنارد-جونز 6-9 بیشتر از پتانسیل های لنارد-جونز 6-12 و لنارد-جونز هموار است. علت این امر ناشی از ضرایب توانی مدل پتانسیل لنارد-جونز 6-9 اعمال شده بین مولکول‌ها و به واسطه نیروهای متوسط‌گیری شده بزرگ در جریان درون نانو کانال می‌باشد و انرژی جنبشی مربوط به این تابع پتانسیل بیشتر از دو مدل دیگر است، لذا باعث افزایش سرعت مولکول‌ها می‌شود. همچنین، در شرایط یکسان با اعمال مدل تابع پتانسیل لنارد-جونز 6-9، زمان همگرا شدن انرژی کل سیستم از دو مدل دیگر بیشتر است که این امر موجب افزایش زمان محاسبات می‌شود. به دلیل این که انرژی جنبشی این مدل پتانسیل لنارد-جونز 6-9 بیشتر از دو مدل دیگر است که باعث می‌شود دیرتر به تعادل برسد. نتایج حاصل از تحقیق آن‌ها، تأثیر مدل نیروی برهم‌کنش بین مولکولی را در تحلیل و فهم جریان‌های با مقیاس نانو نشان می‌دهد.

در کار حاضر با بررسی چگالی سیال بهتر می‌توان اثر زبری را در سرعت-های مختلف بررسی کرد و همچنین با تغییر چگالی دیوار در سرعت‌های مختلف دیواره، اثر آن بر روی پروفیل سرعت سیال بررسی می‌شود. بعلاوه اثر آب‌گریزی و آب‌دوستی در سرعت‌های مختلف دیواره به همراه اثر تغییر هندسی زبری بر روی رفتار سیال بررسی شده است که تمامی این موارد بدین جامعیت تاکنون بررسی نشده و مؤید نوآوری کار حاضر است.

2- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

سیال از ذرات مایع آرگون انتخاب شده است که بین دو دیواره با ساختار FCC (111) با فاصله طولی در ابعاد نانو جریان دارد، شکل 1، جریان کوئت و طرز قرار گرفتن ذرات آرگون را نشان می‌دهد. چگالی ذرات آرگون بر اساس دمای شبیه‌سازی درنظر گرفته شده است که برابر با $\rho\sigma^3 = 0.81$ و تعداد ذرات بدست آمده آرگون، براساس شبکه استاندارد FCC و چگالی درنظر گرفته شده برابر با $N_f = 7350$ خواهد بود. اتم‌های دیوارها در شبکه ثابت شده‌اند؛ به گونه‌ای که نسبت به یکدیگر حرکتی ندارند. ضمناً تعداد اتم‌های هر دو دیوار براساس چگالی دیوار و شبکه در نظر گرفته شده برابر با $N_w = 2236$ و چگالی آن‌ها برابر با $\rho_w\sigma^3 = 2.73$ است که ساختار آن FCC 111 در جهت z است.

همان‌طور که در شکل 1، مشاهده می‌شود، هرکدام از دیوارها، از دو لایه اتم تشکیل شده‌اند. ابعاد کانال در مختصات سه بعدی در جهت‌های x، y و z به ترتیب برابر با $L_x = 29.7\sigma$، $L_y = 10.04\sigma$ و $L_z = 31.48\sigma$ است. ارتفاع کانال برابر با $h = 30\sigma$ و در جهت z است. شرایط مرزی پریودیک در جهت-های x و y به دیوارهای بالا و پایین اعمال شده‌است و دیوارها در جهت z ثابت هستند؛ بطوریکه نسبت به یکدیگر هیچ‌گونه حرکتی نداشته و دیوار بالا تنها با یک سرعت ثابت در جهت x حرکت می‌کند و دیوار پایین در مکان خود ساکن است.

جرم اتم‌های دیوار 4 برابر جرم اتم‌های سیال ($m_w = 4m$) در نظر گرفته شده است. این مقدار جرم و چگالی در نظر گرفته شده برای اتم‌های دیواره از لحاظ عملی تقریباً معادل با یک جسم فلزی است که در غالب کاربردها نیز از خواص مربوط به فلزات به عنوان دیواره استفاده می‌شود. در شبیه‌سازی برای برهم‌کنش بین ذرات سیال-سیال و سیال-دیوار از تابع پتانسیل لنارد-جونز که در معادله (1) آورده شده استفاده شده است:

$$U(r) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{6}\right] \qquad ; r_{ij} \le r_c \tag{1}$$

در رابطه (1) r_{ij} فاصله بین دو مولکول است و برای مایع آرگون، پارامتر طولی معادله برابر با $\sigma = 3.405 \times 10^{-10}$ m = 0.34 nm و پارامتر انرژی برابر با $\varepsilon = 1.67 \times 10^{-21}$ J است [13] و شعاع قطع برابر با $r_c = 2.5\sigma$ است. در این شبیه‌سازی پارامترهای برهم‌کنش بین ذرات سیال و دیوار بصورت $\varepsilon_{wf}/\varepsilon = 0.9, \sigma_{wf}/\sigma = 1$ مورد استفاده قرار گرفته است. دمای بی‌بعد ذرات سیال در کل شبیه‌سازی‌های انجام شده برابر $T^* = k_B T/\varepsilon = 1.1$ است که k_B ثابت بولتزمن و برابر $k_B = 1.38 \times 10^{-23}$ J/K و دما برابر $T = 133.16$ K است. مقیاس زمان برابر $\tau = 2.16 \times 10^{-12}$ s است.

توزیع سرعت اوّلیه ذره‌ها از یک توزیع ماکسول-بولتزمن در دمای مورد نظر با استفاده از رابطه (2) بدست می‌آید:

$$p(v_{ix}) = \left(\frac{m_i}{2\pi k_B T}\right)^{1/2}\exp\left[-\frac{1}{2}\frac{m_i v_{ix}^2}{k_B T}\right] \tag{2}$$

معادله بالا احتمال این‌که سرعت اتم i با جرم m_i در دمای T برابر v_{ix} باشد را پیش‌بینی می‌کند. سرعت‌های اولیه معمولاً طوری تنظیم می‌شوند که اندازه حرکت کل سیستم صفر باشد. برای این‌کار باید مجموع مؤلفه‌های اندازه حرکت اتم‌ها در راستای سه محور مختصات محاسبه شود. بدین ترتیب که

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-04-19]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1394.15.7.32.0]

اندازه حرکت کل سیستم در هر جهت بدست می‌آید که بعد از تقسیم آن بر جرم کل، از سرعت‌های اتمی کم می‌شود تا اندازه حرکت کلی صفر شود.

در کار حاضر، از ترموستات لانگوین [14] برای ثابت نگه‌داشتن دمای سیال استفاده شده است. لازم به ذکر است که برای جلوگیری از تأثیر غیرفیزیکی اعمال ترموستات در رفتار سیال، این ترموستات صرفاً به مؤلفه سرعت سیال در جهت y وارده شده تا بخصوص مؤلفه محوری سرعت سیال (جهت x) با اعمال ترموستات و در نتیجه تغییر سرعت منجر به نتایج نادرست نشود. بدین ترتیب دمای سیال تقریباً در محدوده مورد نظر باقی خواهد ماند، بدون آن‌که رفتار سیال دچار تغییرات غیرفیزیکی شود. معادلات حرکت مولکول‌های آرگون مایع به‌صورت (3-5) هستند:

$$m\ddot{x}_i = -\sum_{i\neq j}\frac{\partial V_{ij}}{\partial x_i} \quad (3)$$

$$m\ddot{y}_i + m\Gamma\dot{y}_i = -\sum_{i\neq j}\frac{\partial V_{ij}}{\partial y_i} + f_i \quad (4)$$

$$m\ddot{z}_i = -\sum_{i\neq j}\frac{\partial V_{ij}}{\partial z_i} \quad (5)$$

در معادله (4) $\Gamma = 1.0\tau^{-1}$ ضریب اصطکاک است و f_i نیروی تصادفی با میانگین صفر و واریانس $\langle f_i(0)f_i(t)\rangle = 2mk_{\mathrm{B}}\mathrm{T}^{*}\Gamma\delta(t)\delta_{ij}$ است [15].

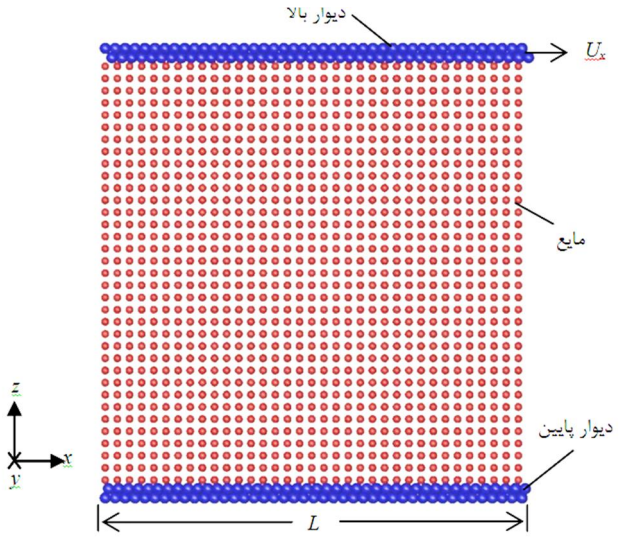
گام زمانی شبیه‌سازی برابر $\Delta t = 0.005\tau$ است که $\tau = \sqrt{m\sigma^2/\varepsilon}$ است. زمان لازم برای رسیدن جریان سیال به شرایط تعادل برای شبیه‌سازی‌های صورت گرفته برابر $5 \times 10^4\tau$، البته در جریان کوئت صفحه‌ای گرادیان فشار وجود ندارد و سیستم در تعادل مکانیکی است. مدت زمان اجرای شبیه‌سازی‌های انجام شده برابر $1.2 \times 10^6\tau$ است.

برای رسم پروفیل چگالی سیال، مقدار ضخامت ناحیه‌های اندازه‌گیری خواص سیال در راستای z برابر $\Delta z = 0.01\sigma$ و برای ترسیم پروفیل سرعت این ضخامت برابر $\Delta z = 0.2\sigma$ است. همچنین برای رسم پروفیل‌های سرعت برای جریان کوئت پایدار، مقدار میانگین‌گیری برابر $1 \times 10^5\tau$ است.

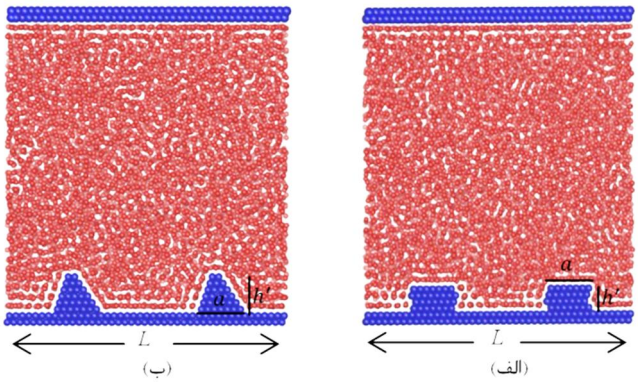
در شبیه‌سازی مربوط به سطوح زبر، با اعمال زبری به سطح دیوار پایین، تأثیر این زبری‌ها بر روی لغزش سیال بررسی شده‌اند. برای همین منظور از دو نوع زبری مستطیلی و مثلثی استفاده شده است که برای هرکدام از زبری-های سطح، دو ارتفاع در نظر گرفته شده، ارتفاع زبری با حرف h' معرفی شده و شماتیکی از آن در شکل 2، آورده شده است. برای زبری سطح مستطیلی ارتفاع‌ها برابر $h' = 0.6\sigma$ و $h' = 2.6\sigma$ و برای زبری سطح مثلثی، ارتفاع‌های $h' = 2.6\sigma$ و $h' = 4.5\sigma$ اعمال شده است. مقدار دامنه زبری که در شکل 2، با حرف مشخص a شده است برای هردو زبری مثلثی و مستطیلی یکسان و برابر $a = 5\sigma$ است و زبری ها بر روی سطح دیواره پایینی به فواصل 10σ از یکدیگر قرار دارند. مقادیر در نظر گرفته شده براساس ایجاد یک یا چندین لایه زبری است که در برابر جریان سیال قرار خواهد گرفت. تعداد لایه ها مشابه با کارهای انجام شده قبلی بوده که براساس چگالی دیواره و شبکه آن تعیین می‌شود.

3- نتایج

در این بخش ابتدا به صحت‌سنجی جریان کوئت پرداخته شده است بدین صورت که برای اطمینان از صحت و درستی نتایج شبیه‌سازی‌های انجام گرفته، یکی از کارهای گذشته با استفاده از نرم‌افزار لمپس [16] شبیه‌سازی شده و نتایج آن با کار گذشته مورد مقایسه قرار گرفته است. پس از آن در



شکل 1 شماتیکی از جریان کوئت



شکل 2 شماتیکی از زبری‌ها، (الف) زبری مستطیلی شکل (ب) زبری مثلثی شکل

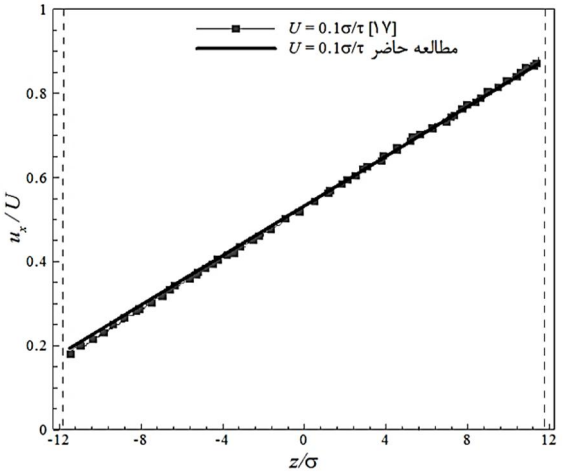
بخش‌های بعدی نتایج سرعت و چگالی جریان کوئت پایدار برای بررسی تأثیر پارامترهای اثر سرعت دیواره، اثر ارتفاع کانال، اثر چگالی، اثر برهم‌کنش ذرات و اثر نوع و ارتفاع زبری سطح بر روی لغزش سیال آورده شده است.

پس از انجام این شبیه‌سازی نتایج آن با نتایج کار گذشته مقایسه می‌شود که در صورت معقول بون نتایج می‌توان به نتایج شبیه‌سازی‌ها اطمینان نمود. پارامترهای موجود در این شبیه‌سازی با استفاده از مقاله پریژو [17] عبارتند از:

- ابعاد کانال $L_x = 25.03\sigma$، $L_y = 9.63\sigma$ و $h = 23.58\sigma$.
- سیال آرگون است که چگالی آن برابر $0.81\sigma^{-3}$ است.
- چگالی دیوار برابر $2.73\sigma^{-3}$ است که ساختار آن FCC 111 است.
- برای شبیه‌سازی از پتانسیل لنارد-جونز استفاده شده است.
- شعاع قطع برابر 2.5σ است.
- برای کنترل دما در مقدار $T = 1.1\varepsilon/k_{\mathrm{B}}$ از ترموستات لانگوین در جهت y استفاده شده است.
- گام زمانی برابر $\Delta t = 0.005\tau$ است.

نمودارهای سرعت کار حاضر و مقاله پریژو [17] برای سرعت $U = 0.1\sigma/\tau$ در شکل 3، آورده شده است و همان‌طور که مشاهده می‌شود پروفیل‌های سرعت کار حاضر و مقاله پریژو [17] بر روی هم منطبق شده‌اند که نشان از دقت بالای شبیه‌سازی انجام شده است. با توجه به این نتایج، می‌توان به نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های صورت گرفته در کل این مقاله

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-04-19]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1394.15.7.32.0]



شکل 3 نمودار سرعت مقاله پریژو [17] و کار حاضر برای سرعت $U = 0.1\sigma/\tau$

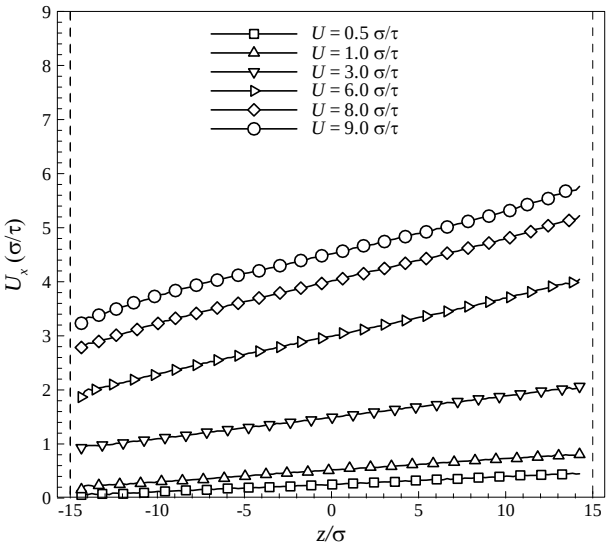
اعتماد کرد و این صحت‌سنجی، صحه بر قابل اطمینان بون نتایج شبیه‌سازی‌هایی که در این پژوهش آورده شده است، می‌گذارد.

3- 1- اثر سرعت دیواره

در این بخش پروفیل‌های سرعت و چگالی برای کانال صاف با سرعت‌های اعمالی به دیوار بالا برابر $0.5\sigma/\tau$، $1.0\sigma/\tau$، $3.0\sigma/\tau$، $6.0\sigma/\tau$، $8.0\sigma/\tau$ و $9.0\sigma/\tau$ آورده شده است. دیگر پارامترهای استفاده شده برای شبیه‌سازی این بخش عبارتند از چگالی سیال برابر $\rho\sigma^3 = 0.81$، چگالی دیوار برابر $\rho\sigma^3 = 2.73$، ارتفاع کانال برابر $h = 30\sigma$ و پارامترهای برهم‌کنش ذرات بین سیال و دیوار برابر $\varepsilon_{wf}/\varepsilon = 0.9$, $\sigma_{wf}/\sigma = 1.0$ است.

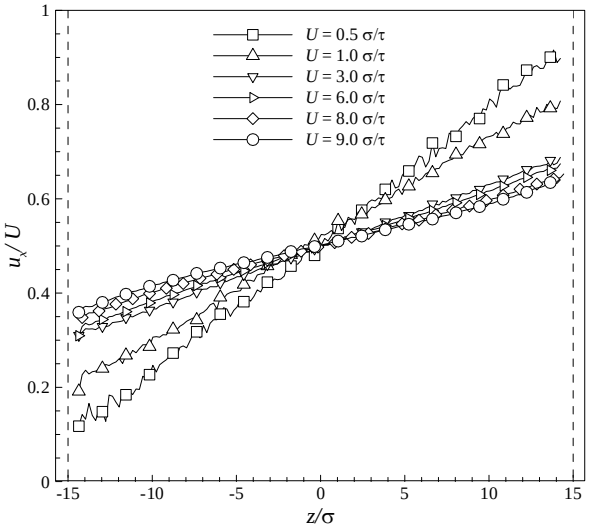
پروفیل‌های سرعت به ازای سرعت‌های $0.5\sigma/\tau$ تا $9.0\sigma/\tau$ در شکل 4- الف، آورده شده است. در این شکل مشاهده می‌شود که با افزایش سرعت دیواره، لغزش سرعت سیال افزایش پیدا کرده است. خط‌چین‌های عمودی در شکل به سطح اشتراک سیال- جامد مربوط است که مقدار آن برای دیوار پایین برابر $z = -15.0\sigma$ و برای دیوار بالا برابر $z = +15.0\sigma$ است.

پروفیل‌های سرعت به‌ازای مقادیر مختلف سرعت دیواره بالا به‌صورت نرمالیزه شده[1] در شکل 4- ب، آورده شده‌است. همان‌طور که انتظار می‌رود پروفیل‌های سرعت سیال در مرکز کانال (z=0) بر هم منطبق شده اند. در این



(الف)

1- normalize

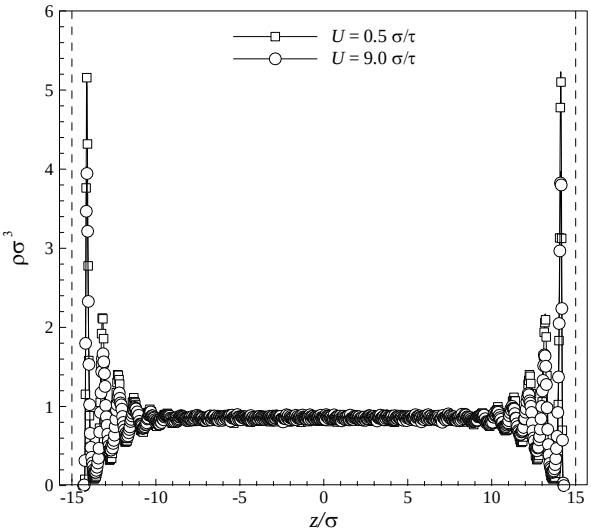


(ب)

شکل 4 اثر سرعت دیواره بر روی پروفیل‌های سرعت سیال، (الف) برای سرعت‌های مختلف دیواره (ب) برای سرعت‌های مختلف دیواره بصورت نرمالیزه شده

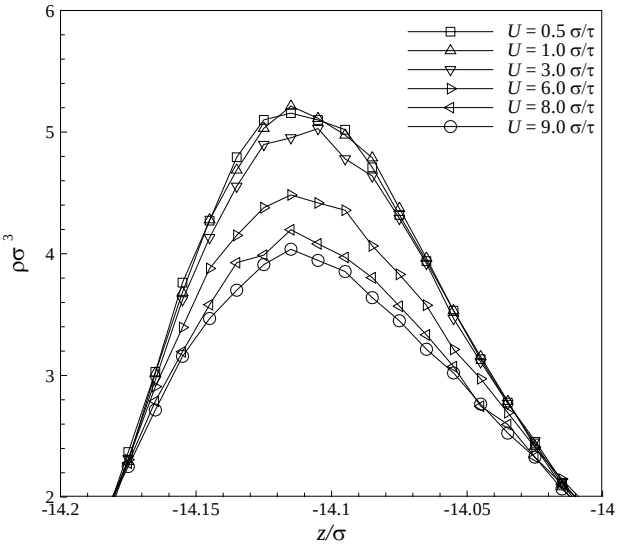
شکل به وضوح پیداست که کمترین سرعت اعمالی به دیوار یعنی $0.5\sigma/\tau$ که با نماد مربع نشان داده شده است دارای کمترین لغزش سرعت سیال است و بالعکس بیشترین سرعت که برابر $9.0\sigma/\tau$ است و با نماد دایره در شکل مشخص شده است، بیشترین لغزش سرعت سیال را دارد. خط‌چین‌های عمودی در شکل هم به سطح اشتراک سیال- جامد مربوط است.

پروفیل‌های چگالی سیال برای دو سرعت $0.5\sigma/\tau$ و $9.0\sigma/\tau$ دیواره در شکل 5- الف آورده شده است و همان‌طور که انتظار می‌رفت نوسانات چگالی سیال نزدیک دیواره‌های بالا وپایین اتفاق می‌افتد که به تدریج به مقدار یکنواختی تنزل می‌یابد. در این شکل می‌توان مشاهده کرد که چگالی در ارتفاع $z = -8\sigma$ به مقدار یکنواخت رسیده است. همچنین با افزایش سرعت دیواره مقدار ماکزیمم چگالی سیال کاهش پیدا کرده است. این امر در شکل 5- ب که به اولین قله چگالی مربوط است واضح‌تر نشان داده شده است که با افزایش تدریجی سرعت دیوار، از مقدار ماکزیمم چگالی کاسته شده است، به دلیل این که با زیاد شدن سرعت دیواره، تنش برشی اعمالی به دیوار افزایش پیدا می‌کند که در نتیجه آن تنش برشی بیشتری به ذرات سیال اعمال می‌شود که به کاهش نوسانات چگالی منجر می‌شود.



(الف)

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-04-19]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1394.15.7.32.0]



(ب)

شکل 5 اثر سرعت دیواره بر روی پروفیل‌های چگالی سیال، (الف) پروفیل‌های چگالی سیال برای سرعت‌های $0.5\sigma/\tau$ و $9.0\sigma/\tau$ (ب) ماکزیمم مقدار (اولین قله) چگالی سیال برای سرعت‌های مختلف دیواره

3- 2- اثر ارتفاع کانال

در این بخش به بررسی اثر ارتفاع کانال پرداخته شده است به‌طوری که ارتفاع کانال در این بخش نسبت به بخش قبلی به مقدار 10σ افزایش پیدا کرده است و شبیه‌سازی برای ارتفاع کانال برابر $h = 40\sigma$ و سرعت دیواره برابر دو مقدار $1.0\sigma/\tau$ و $6.0\sigma/\tau$ انجام شده است و پارامترهای دیگر مثل بخش قبلی است.

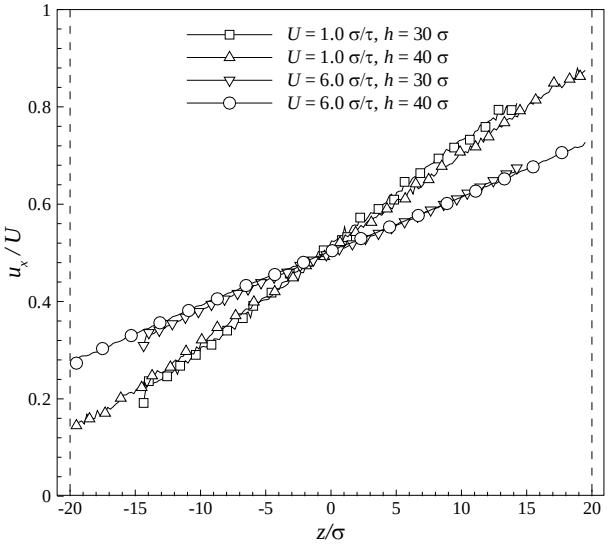
پروفیل‌های نرمالیزه شده سرعت برای این شبیه‌سازی برای دو مقدار سرعت دیواره $1.0\sigma/\tau$ و $6.0\sigma/\tau$ و برای ارتفاع کانال برابر دو مقدار $h = 30\sigma$ و $h = 40\sigma$ در شکل 6، آورده شده است. همان‌طور که در این شکل مشاهده می‌شود پروفیل‌ها برای یک سرعت یکسان بر روی هم منطبق شده‌اند، با این تفاوت که لغزش سرعت سیال برای ارتفاع کانال $h = 40\sigma$ کاهش پیدا کرده است. سرعت لغزشی که اختلاف سرعت دیواره و سرعت سیال در کنار دیواره است، با توجه به شکل در ارتفاع بیشتر، لغزش سرعت سیال کمتر شده و سرعت سیال به سرعت دیواره نزدیک‌تر شده است. دلیل کاهش لغزش سرعت سیال این است که با افزایش ارتفاع کانال، طبق رابطه تنش برشی، تنش اعمالی به دیوار کاهش می‌یابد که به کاهش لغزش سرعت سیال منجر می‌شود. خط‌چین‌های عمودی در شکل به سطح اشتراک سیال-دیوار برای ارتفاع $h = 40\sigma$ مربوط است که مقادیر آن برای دیوار بالا و پایین برابر $z = \pm 20\sigma$ است.

پروفیل‌های چگالی سیال برای دو ارتفاع کانال $h = 30\sigma$ و $h = 40\sigma$ و به ازای سرعت دیواره $1.0\sigma/\tau$ در شکل 7، آورده شده است. از مقایسه پروفیل‌های برای دو ارتفاع $h = 30\sigma$ و $h = 40\sigma$ مشاهده می‌شود که با افزایش ارتفاع کانال، نوسانات چگالی در نزدیکی دیوارها افزایش می‌یابد که علت آن افزایش ارتفاع کانال است که به کاهش تنش برشی منجر می‌شود و افزایش نوسانات چگالی را درپی دارد، اما در مقداری که چگالی به مقدار یکنواخت می‌رسد تفاوتی دیده نمی‌شود و ارتفاع کانال تأثیری بر این مقدار ندارد به دلیل این که نوسانات چگالی فقط در نزدیکی دیوارهای بالا و پایین اتفاق می‌افتد و مقدار یکنواخت آن تغییری نمی‌کند.

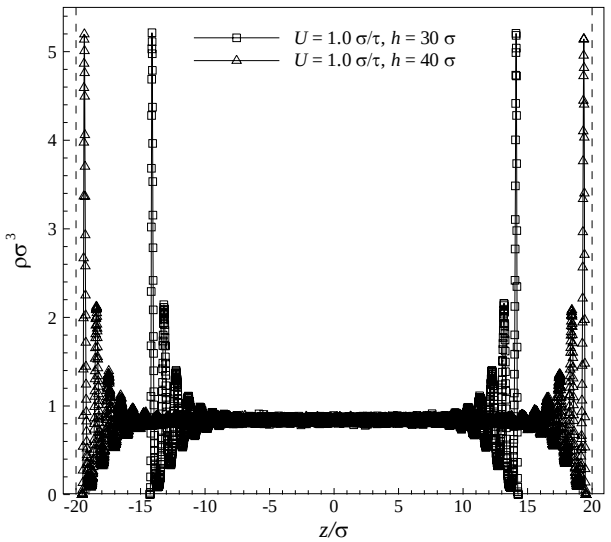
3- 3- اثر چگالی دیواره

در این بخش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای دو چگالی متفاوت صورت گرفته است؛ بدین صورت که پارامترهای استفاده شده در شبیه‌سازی‌ها برای سیال و دیواره مانند بخش 3-1 است، با این تفاوت که چگالی دیوارها در یک شبیه‌سازی برابر $\rho = 0.81\sigma^{-3}$ و در شبیه‌سازی دیگر برابر $\rho = 3.24\sigma^{-3}$ است و سرعت دیوار برابر دو مقدار $U = 1.0\sigma/\tau$ و $U = 6.0\sigma/\tau$ است.

در شکل 8، پروفیل‌های نرمالیزه شدهٔ سرعت سیال برای سرعت‌های دیواره برابر $U = 1.0\sigma/\tau$ و $U = 6.0\sigma/\tau$ و برای دو چگالی $\rho = 0.81\sigma^{-3}$ و $\rho = 2.73\sigma^{-3}$ آورده شده است و همان طور که ملاحظه می‌شود اختلاف پروفیل‌ها در سرعت یکسان خصوصاً در سرعت $U = 6.0\sigma/\tau$ زیاد است. در چگالی برابر $\rho = 0.81\sigma^{-3}$ به دلیل یکی بودن چگالی دیوار و سیال، ابتدای و انتهای پروفیل‌های سرعت بر روی سطح اشتراک سیال- جامد قرار گرفته است و برای سرعت سیال، لغزشی دیده نمی‌شود. بر اساس این شکل می‌توان مشاهده کرد که تغییر چگالی دیواره در سرعت بالاتر به شدت بر روی پروفیل سرعت تأثیر گذاشته و لغزش سیال در کنار دیواره ها مشخصاً تغییر

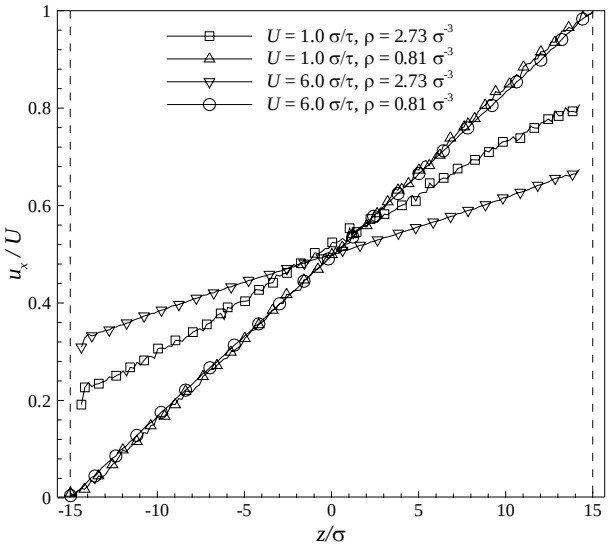


شکل6 پروفیل‌های نرمالیزه شده سرعت سیال برای دو ارتفاع $h = 30\sigma$ و $h = 40\sigma$



شکل 7 پروفیل‌های چگالی سیال برای سرعت دیواره $U = 1.0\sigma/\tau$ در کانال صاف با ارتفاع‌های $h = 30\sigma$ و $h = 40\sigma$

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-04-19]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1394.15.7.32.0]



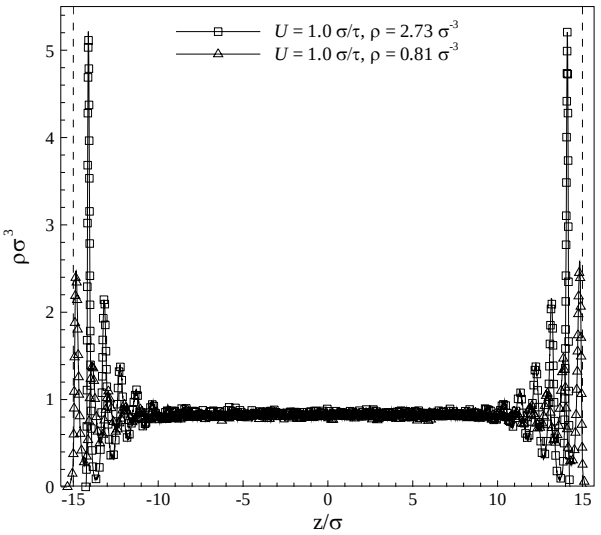
شکل 8 پروفیل‌های نرمالیزه شده سرعت سیال برای سرعت دیواره $U = 1.0\sigma/\tau$ و $U = 6.0\sigma/\tau$ و دو چگالی $\rho = 0.81\sigma^{-3}$ و $\rho = 2.73\sigma^{-3}$

خواهد کرد. در حالی که در مقدار سرعت کمتر دیواره، اثر تغییر چگالی دیواره کمتر است. علت این امر به نرخ برشی جریان نیز مربوط است که در سرعت بیشتر دیواره، نرخ برش به واسطه سرعت بیشتر دیواره، مقدار بیشتری است و در این وضعیت تغییر چگالی دیواره می‌تواند عامل حساس تری در جریان باشد. به گونه‌ای که در نرخ برشی کمتر این نوع تغییر در هندسه دیواره نمی‌تواند بر لغزش سیال تا بدین حد تأثر بگذارد. علت دیگر کاهش لغزش سرعت سیال این است که در مقدار چگالی کمتر، چون فاصله ذرات دیواره از یکدیگر بیشتر است و تراکم کمتری دارند، مشابه با حالتی است که دیوار زبر است، در حالی که در چگالی بیشتر ذرات دیواره فاصله کمتری داشته و در کنار یکدیگر یک سطح صاف را تشکیل می‌دهند. همان‌طور که پیش‌بینی می‌شود در سطح صاف لغزش بیشتر بوده که در چگالی بیشتر $\rho = 2.73\sigma^{-3}$، در این شکل نیز این پدیده ملاحظه شده است. سطح اشتراک سیال- جامد بر روی دیوار پایین برابر $z = -15.0\sigma$ و سطح اشتراک برای دیوار بالا برابر $z = +15.0\sigma$ است.

پروفیل‌های چگالی سیال برای دو چگالی مختلف $\rho = 0.81\sigma^{-3}$ و $\rho = 2.73\sigma^{-3}$ و سرعت دیواره $U = 1.0\sigma/\tau$ در شکل 9، آورده شده است. همان‌طور که در این شکل دیده می‌شود با کاهش چگالی دیواره مقدار چگالی سیال در نزدیکی دیواره‌های بالا و پایین کاهش پیدا کرده است و همچنین شروع پروفیل چگالی سیال برای چگالی کمتر یعنی $\rho = 0.81\sigma^{-3}$ زودتر اتفاق افتاده است و از ناحیه سطح اشتراک سیال- جامد شروع شده است.

همان‌طور که گفته شد شبیه‌سازی دیگری برای چگالی $\rho = 3.24\sigma^{-3}$ انجام شده است که در این‌جا نتایج آن آورده شده است و با نتایج چگالی $\rho = 2.73\sigma^{-3}$ مقایسه شده است. در شکل 10، پروفیل‌های نرمالیزه شده سرعت سیال برای دو سرعت دیواره $U = 1.0\sigma/\tau$ و $U = 6.0\sigma/\tau$ و برای دو چگالی ذکر شده آورده شده است و آنچه مشاهده می‌شود این است که با افزایش اندک چگالی دیوار، لغزش سرعت سیال مقدار کمی افزایش پیدا کرده است که علت آن صاف‌تر شدن سطح اشتراک سیال- دیوار است که باعث شده لغزش سیال افزایش یابد.

در شکل 11، پروفیل‌های چگالی سیال برای زمانی که چگالی دیواره برابر $\rho = 2.73\sigma^{-3}$ و $\rho = 3.24\sigma^{-3}$ باشد آوره شده که از مقایسه این پروفیل‌ها

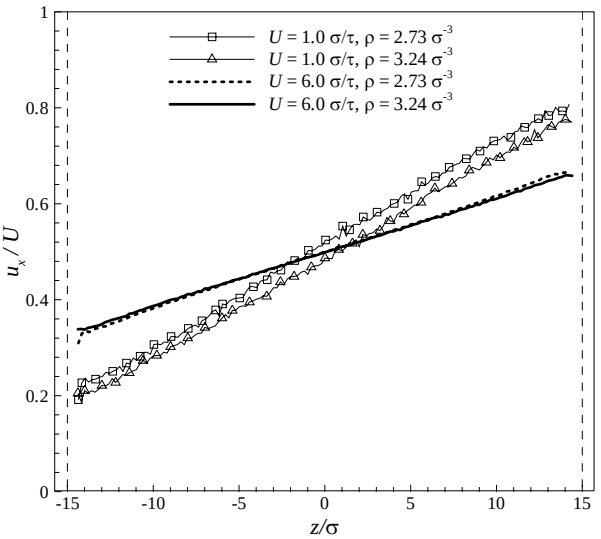


شکل 9 پروفیل‌های چگالی سیال برای سرعت دیواره $U = 1.0\sigma/\tau$ در کانال صاف برای دو چگالی $\rho = 0.81\sigma^{-3}$ و $\rho = 2.73\sigma^{-3}$

مشاهده می‌شود که افزایش چگالی دیواره باعث افزایش مقدار ماکزیمم چگالی سیال شده است و این مقدار ماکزیمم به دیواره‌ها نزدیک‌تر شده است. ولی این افزایش چگالی دیواره تأثیری بر روی مقدار یکنواخت چگالی سیال ندارد، این موضوع در زمانی هم که چگالی دیواره کاهش پیدا کرد دیده شد. پس نتیجه می‌شود که کاهش یا افزایش چگالی دیواره تأثیری بر روی مقدار یکنواخت چگالی سیال ندارد.

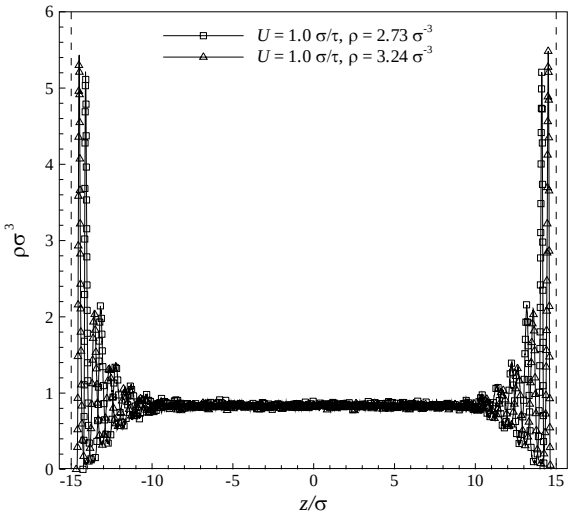
3- 4- اثر برهم‌کنش بین ذرات

در این بخش دو سری شبیه‌سازی به‌منظور بررسی اثر پارامترهای برهم‌کنش بین ذرات سیال و دیوار صورت گرفته است. در شبیه‌سازی اوّل پارامتر انرژی برای برهم‌کنش ذرات سیال-دیوار برابر $\varepsilon_{wf} = 0.7\varepsilon$ است و در شبیه‌سازی دوم پارامتر انرژی و پارامتر طولی برای برهم‌کنش ذرات سیال-دیوار به ترتیب برابر $\varepsilon_{wf} = 0.7\varepsilon$ و $\sigma_{wf} = 0.8\sigma$ است و سرعت دیواره بالا برابر $U = 1.0\sigma/\tau$ و $U = 6.0\sigma/\tau$ است و دیگر پارامترهای مورد استفاده در شبیه‌سازی برابر پارامترهایی است که در بخش 3-1 آورده شد.



شکل 10 پروفیل‌های نرمالیزه شده سرعت سیال برای سرعت‌های دیواره $1.0\sigma/\tau$ و $6.0\sigma/\tau$ و دو چگالی $\rho = 2.73\sigma^{-3}$ و $\rho = 3.24\sigma^{-3}$

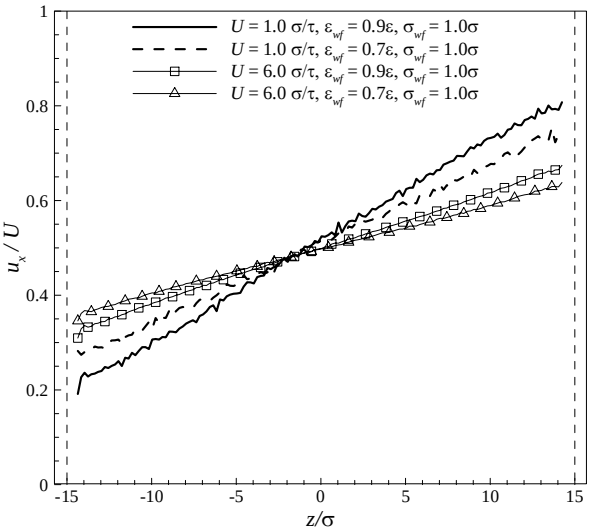
[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-04-19]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1394.15.7.32.0]



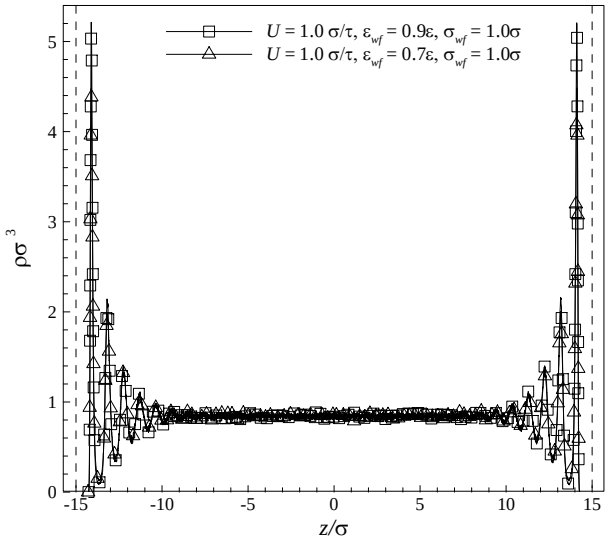
شکل 11 پروفیل‌های چگالی سیال برای سرعت دیواره $1.0\sigma/\tau$ در کانال صاف برای دو چگالی $\rho = 2.73\sigma^{-3}$ و $\rho = 3.24\sigma^{-3}$

در شکل 12، پروفیل‌های نرمالیزه شده سرعت سیال برای سرعت‌های دیواره $1.0\sigma/\tau$ و $6.0\sigma/\tau$ در یک کانال صاف برای دو پارامتر انرژی سیال-دیوار $\varepsilon_{wf} = 0.9\varepsilon$ و $\varepsilon_{wf} = 0.7\varepsilon$ آورده شده است. در این شکل مشاهده می‌شود که با کاهش پارامتر انرژی سیال-دیوار یا به تعبیر دیگر با کاهش برهم‌کنش ذرات سیال-دیوار، لغزش سرعت سیال افزایش پیدا کرده است. این افزایش در سرعت کمتر یعنی $U = 1.0\sigma/\tau$ بیشتر است. کاهش پارامتر انرژی معادل نیروی برهم‌کنش کمتر بین ذرات سیال و دیواره است که به افزایش لغزش سیال منجر می‌شود. در سرعت بیشتر دیواره نیز به دلیل نیروی برشی بیشتر وارده از طرف دیوار به سیال، تا حدی لغزش کمتر می‌شود و در نتیجه آن در سرعت کمتر دیواره (نرخ برشی کمتر) ذرات سیال آزادی بیشتری داشته و لغزش نیز در آن حالت افزایش بیشتری خواهد داشت.

در شکل 13، پروفیل‌های چگالی سیال برای سرعت دیواره $U = 1.0\sigma/\tau$ در یک کانال صاف برای دو پارامتر انرژی سیال-دیوار $\varepsilon_{wf} = 0.9\varepsilon$ و $\varepsilon_{wf} = 0.7\varepsilon$ آورده شده است، با مقایسه این دو پروفیل مشاهده می‌شود که کاهش پارامتر انرژی، باعث کاهش مقدار نوسانات چگالی شده است.

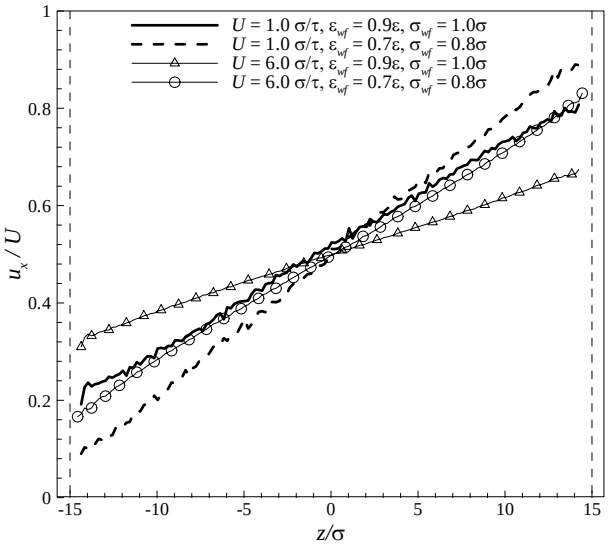


شکل 12 پروفیل‌های نرمالیزه شده سرعت سیال برای سرعت‌های دیواره $1.0\sigma/\tau$ و $6.0\sigma/\tau$ و دو پارامتر انرژی سیال-دیوار $\varepsilon_{wf} = 0.9\varepsilon$ و $\varepsilon_{wf} = 0.7\varepsilon$



شکل 13 پروفیل‌های چگالی سیال برای سرعت دیواره $U = 1.0\sigma/\tau$ در کانال صاف برای دو پارامتر انرژی سیال-دیوار $\varepsilon_{wf} = 0.9\varepsilon$ و $\varepsilon_{wf} = 0.7\varepsilon$

در شکل 14، پروفیل‌های نرمالیزه شده سرعت سیال برای سرعت‌های دیواره $U = 1.0\sigma/\tau$ و $U = 6.0\sigma/\tau$ در یک کانال صاف برای دو پارامتر انرژی سیال-دیوار $\varepsilon_{wf} = 0.9\varepsilon$ و $\varepsilon_{wf} = 0.7\varepsilon$ و دو پارامتر طولی $\sigma_{wf} = 1.0\sigma$ و $\sigma_{wf} = 0.8\sigma$ آورده شده است. در این شکل مشاهده می‌شود که کاهش پارامتر انرژی و کاهش پارامتر طولی باعث کاهش لغزش سرعت سیال شده است و با توجه به شکل 12، که کاهش پارامتر انرژی منجربه افزایش لغزش سرعت سیال شد، نتیجه می‌شود که دلیل کاهش لغزش سرعت سیال در شکل 14، تأثیر کاهش پارامتر طولی بوده است. در این شکل مشاهده می‌شود که کاهش پارامتر طولی بر روی سرعت بیشتر یعنی $6.0\sigma/\tau$ تأثیر بیشتری دارد و لغزش سرعت را بیشتر کاهش داده است، این موضوع برای زمانی که فقط پارامتر انرژی کاهش پیدا کرد، نتیجه عکس این شد و لغزش سرعت سیال برای سرعت کمتر، بیشتر کاهش پیدا کرد و لذا نتیجه می‌شود که در سرعت‌های بالا می‌توان با کاهش پارامتر طولی برهم‌کنش ذرات سیال-دیوار، لغزش سرعت سیال را کاهش داد.



شکل 14 پروفیل‌های نرمالیزه شده سرعت سیال برای سرعت‌های دیواره $1.0\sigma/\tau$ و $6.0\sigma/\tau$ و دو پارامتر انرژی سیال-دیوار $\varepsilon_{wf} = 0.9\varepsilon$ و $\varepsilon_{wf} = 0.7\varepsilon$ و دو پارامتر طولی $\sigma_{wf} = 1.0\sigma$ و $\sigma_{wf} = 0.8\sigma$

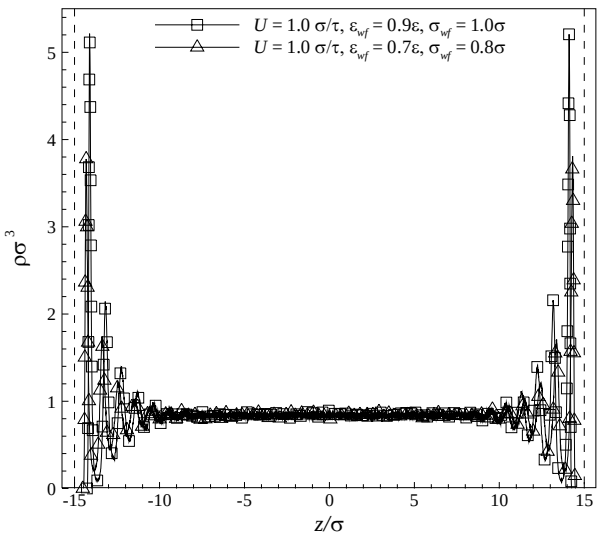
[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-04-19]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1394.15.7.32.0]

در شکل 15، پروفیل‌های چگالی سیال برای سرعت دیواره $U = 1.0\sigma/\tau$ در کانال صاف برای دو پارامتر انرژی سیال-دیوار $\varepsilon_{wf} = 0.9\varepsilon$ و $\varepsilon_{wf} = 0.7\varepsilon$ و دو پارامتر طولی $\sigma_{wf} = 1.0\sigma$ و $\sigma_{wf} = 0.8\sigma$ آورده شده است. در این شکل مشاهده می‌شود که با افزایش پارامتر انرژی نوسانات پروفیل چگالی افزایش می‌یابد و نه لزوماً تعداد اتم‌های سیال نزدیک دیواره، به عنوان مثال در صورتی که پارامتر انرژی خیلی کم باشد اتفاقاً اتم‌های سیال بسیار به دیواره نزدیک و بعضاً در آن نفوذ می‌کنند. با کاهش پارامتر انرژی و پارامتر طولی تغییری در مقدار یکنواخت چگالی سیال ایجاد نمی‌شود.

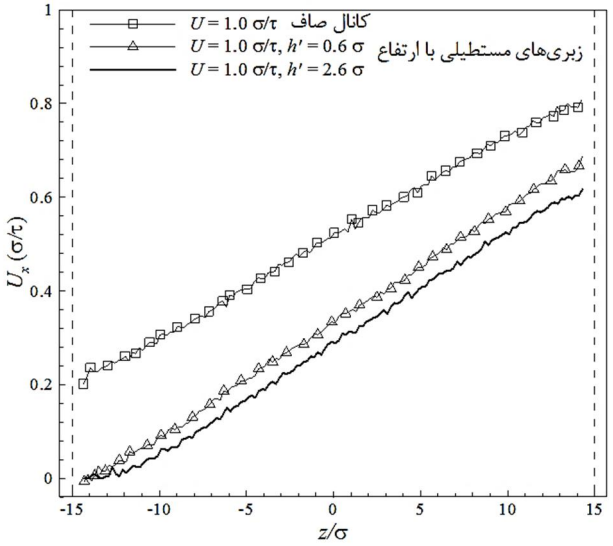
3- 5- اثر نوع و ارتفاع زبری سطح

در این بخش به دیوار پایین زبری‌های مستطیلی و مثلثی اعمال شده است و با تغییر ارتفاع و نوع زبری‌ها تأثیر آن‌ها بر روی لغزش سیال مورد بررسی قرار گرفته است. پارامترهای مورد استفاده برای شبیه‌سازی این بخش مانند بخش 3-1 است و سرعت‌های اعمال شده به دیوار بالا برابر دو مقدار $U = 1.0\sigma/\tau$ و $U = 6.0\sigma/\tau$ است. ارتفاع‌های زبری مستطیلی شکل برابر $h' = 0.6\sigma$ و $h' = 2.6\sigma$ و ارتفاع‌های زبری مثلثی برابر $h' = 2.6\sigma$ و $h' = 4.5\sigma$ است.

در شکل 16، پروفیل‌های سرعت سیال برای نانو کانال صاف و زبر با سرعت دیواره $U = 1.0\sigma/\tau$ آورده شده است. کانال زبر به وسیله زبری‌های مستطیلی با ارتفاع‌های $h' = 0.6\sigma$ و $h' = 2.6\sigma$ که بر روی دیوار پایین اعمال شده‌اند زبر شده است. در این شکل مشاهده می‌شود که اعمال زبری به دیوار پایین باعث کاهش لغزش سرعت سیال در نزدیکی دیوار پایین و افزایش لغزش سرعت سیال در نزدیکی دیوار بالا شده است، این نتیجه مطابق نتایج پریژو و تروئیان [18] است، بدین صورت که هنگامی که زبری فقط بر روی دیوار پایین اعمال شد لغزش سرعت سیال فقط در نزدیکی دیوار پایین کاهش یافت. از مقایسه دو پروفیلی که برای ارتفاع‌های زبری مستطیلی $h' = 0.6\sigma$ و $h' = 2.6\sigma$ رسم شده است، نتیجه می‌شود که هرچقدر ارتفاع زبری بیشتر باشد، لغزش سرعت سیال را بیشتر کاهش می‌دهد. با توجه به شکل دیده می‌شود زبری مستطیلی با ارتفاع $h' = 2.6\sigma$ در نزدیکی دیوار پایین از سطح اشتراک سیال-دیوار تا ارتفاع $z = -13\sigma$ اجازه نمی‌دهد سیال حرکت کند و در این محدوده سرعت سیال تقریباً برابر صفر است.



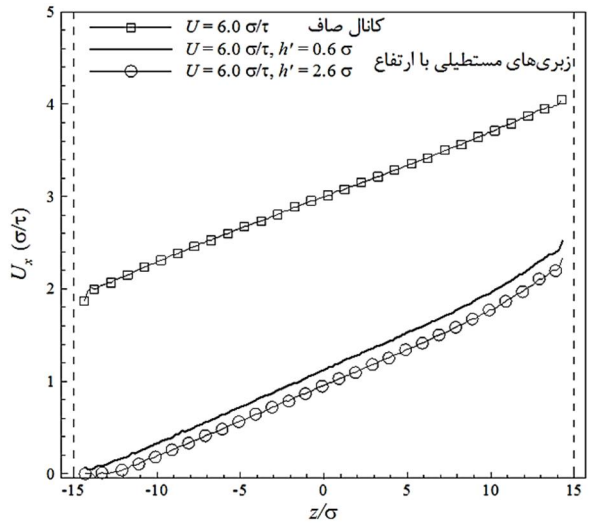
شکل 15 پروفیل‌های چگالی سیال برای سرعت دیواره $U = 1.0\sigma/\tau$ در کانال صاف برای دو پارامتر انرژی سیال-دیوار $\varepsilon_{wf} = 0.9\varepsilon$ و $\varepsilon_{wf} = 0.7\varepsilon$ و دو پارامتر طولی $\sigma_{wf} = 1.0\sigma$ و $\sigma_{wf} = 0.8\sigma$



شکل 16 پروفیل‌های سرعت سیال با سرعت دیواره $U = 1.0\sigma/\tau$ در کانال صاف و زبر با زبری مستطیلی با ارتفاع‌های $h' = 0.6\sigma$ و $h' = 2.6\sigma$

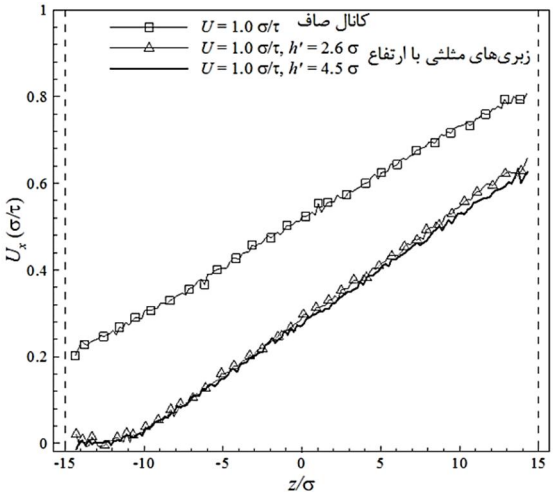
در شکل 17، پروفیل‌های سرعت سیال برای سرعت دیواره $6.0\sigma/\tau$ در کانال صاف و زبر با زبری مستطیلی با ارتفاع‌های $h' = 0.6\sigma$ و $h' = 2.6\sigma$ آورده شده است. در این شکل مشاهده می‌شود که با اعمال زبری، لغزش سرعت سیال در نزدیکی دیوار پایین کاهش می‌یابد و با افزایش ارتفاع زبری از لغزش سرعت سیال در نزدیکی دیوار پایین بیشتر کاسته می‌شود. این موضوع در شکل 16، برای سرعت دیواره $U = 1.0\sigma/\tau$ هم مشاهده شد.

در شکل 18، پروفیل‌های سرعت سیال با سرعت دیواره $U = 1.0\sigma/\tau$ در کانال صاف و زبر با زبری مثلثی با ارتفاع‌های $h' = 2.6\sigma$ و $h' = 4.5\sigma$ آورده شده است. در این شکل مشاهده می‌شود که اعمال زبری مثلثی شکل به دیوار پایین، به کاهش لغزش سرعت سیال در ناحیه‌ای که زبری اعمال شده است منجر می‌شود. دو ارتفاعی که برای زبری مثلثی شکل در نظر گرفته شده است، رفتار تقریباً یکسانی دارند با این تفاوت که لغزش سرعت سیال در نزدیکی دیوار بالا برای زبری با ارتفاع $h' = 4.5\sigma$ بیشتر افزایش پیدا کرده است.



شکل 17 پروفیل‌های سرعت سیال با سرعت دیواره $U = 6.0\sigma/\tau$ در کانال صاف و زبر با زبری مستطیلی با ارتفاع‌های $h' = 0.6\sigma$ و $h' = 2.6\sigma$

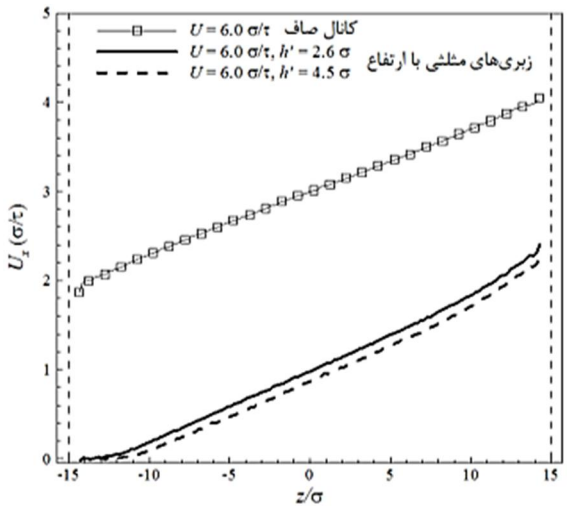
[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-04-19]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1394.15.7.32.0]



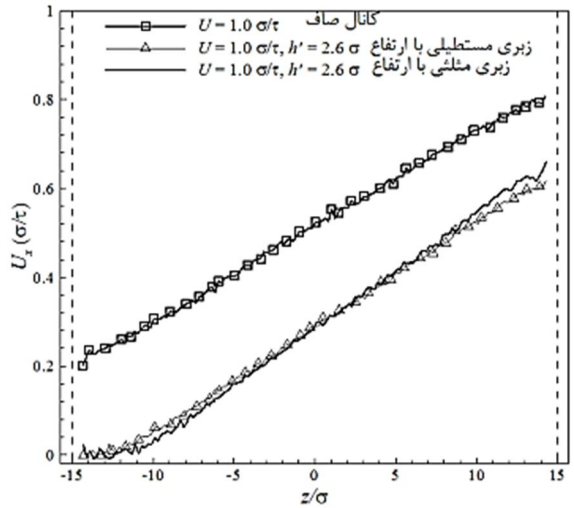
شکل 18 پروفیل‌های سرعت سیال با سرعت دیواره $U = 1.0\sigma/\tau$ در کانال صاف و زبر با زبری مثلثی با ارتفاع‌های $h' = 2.6\sigma$ و $h' = 4.5\sigma$

در شکل 19، پروفیل‌های سرعت سیال با سرعت دیواره $U = 6.0\sigma/\tau$ در کانال صاف و زبر که به وسیله زبری مثلثی با ارتفاع‌های $h' = 2.6\sigma$ و $h' = 4.5\sigma$ زبر شده، آورده شده است. زبری اعمال شده به دیوار پایین فقط باعث کاهش لغزش سرعت سیال در نزدیکی دیوار پایین شده و لغزش سرعت سیال در نزدیکی دیوار بالا را کاهش نداده، بلکه باعث افزایش لغزش سرعت سیال شده است. پروفیل‌های سرعتِ رسم شده برای دو ارتفاع متفاوت زبری نشان می‌دهد که ارتفاع زبری بیشتر، یعنی $h' = 4.5\sigma$ باعث شده تا لغزش سرعت سیال بیشتر کاهش پیدا کند.

در شکل 20، پروفیل‌های سرعت سیال با سرعت دیواره $U = 1.0\sigma/\tau$ در کانال صاف و زبر با زبری‌های مستطیلی و مثلثی با ارتفاع‌های مشابه $h' = 2.6\sigma$ به منظور بررسی اثر نوع زبری آورده شده است. زبری مثلثی شکل نسبت به زبری مستطیلی در نزدیکی دیوار پایین لغزش سرعت سیال را بیشتر کاهش داده است و در این ناحیه اجازه نمی‌دهد تا ذرات سیال حرکت کنند. در نزدیکی دیواره بالایی هر دو زبری باعث افزایش لغزش سرعت سیال شده‌اند و زبری مستطیلی شکل که با نماد دلتا نشان داده شده لغزش سرعت سیال را بیشتر افزایش داده است که نسبت به زبری مثلثی ضعیف‌تر عمل کرده است.



شکل 19 پروفیل‌های سرعت سیال با سرعت دیواره $U = 6.0\sigma/\tau$ در کانال صاف و زبر با زبری مثلثی با ارتفاع‌های $h' = 2.6\sigma$ و $h' = 4.5\sigma$



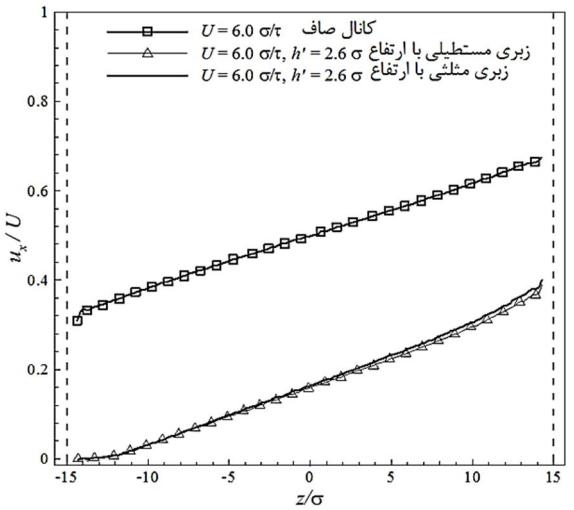
شکل 20 پروفیل‌های سرعت سیال با سرعت دیواره $U = 1.0\sigma/\tau$ در کانال صاف و زبر با زبری‌های مستطیلی و مثلثی با ارتفاع‌های مشابه $h' = 2.6\sigma$

پروفیل‌های سرعت سیال با سرعت دیواره $U = 6.0\sigma/\tau$ در کانال صاف و زبر با زبری‌های مستطیلی و مثلثی با ارتفاع‌های مشابه $h' = 2.6\sigma$ در شکل 21، آورده شده است. همان‌طور که برای سرعت دیوار $U = 1.0\sigma/\tau$ تفاوت زبری مستطیلی شکل و مثلثی شکل بررسی شد در این‌جا هم برای سرعت دیواره $U = 6.0\sigma/\tau$ این تفاوت بررسی می‌شود. در شکل 21، مشاهده می‌شود که پروفیل‌های سرعت مربوط به هر دو زبری از دیوار پایین تا موقعیت $z = +1.0\sigma$ برهم منطبق هستند و از این موقعیت تا دیوار بالا اندکی باهم تفاوت دارند، اما در شکل 20، که به سرعت دیواره $U = 1.0\sigma/\tau$ مربوط است تفاوت دو پروفیل کانال زبر زیادتر بود. در شکل 21، لغزش سرعت سیالِ پروفیل‌های نانو کانال زبر نسبت به نانو کانال صاف در نزدیکی دیوار بالا، افزایش پیدا کرده است که پروفیل مربوط به زبری مستطیلی بیشتر افزایش پیدا کرده است.

برای محاسبه طول لغزش از معادله (6) استفاده شده است:

$$l_s = V_s / (\frac{dV(z)}{dz}) l_w \qquad (6)$$

که V سرعت سیال و V_s برابر سرعت سیال در دیوار جامد و زیر نویس w معرف دیوار جامد است.



شکل 21 پروفیل‌های سرعت سیال با سرعت دیواره $U = 6.0\sigma/\tau$ در کانال صاف و زبر با زبری‌های مستطیلی و مثلثی با ارتفاع‌های مشابه $h' = 2.6\sigma$

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-04-19]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1394.15.7.32.0]

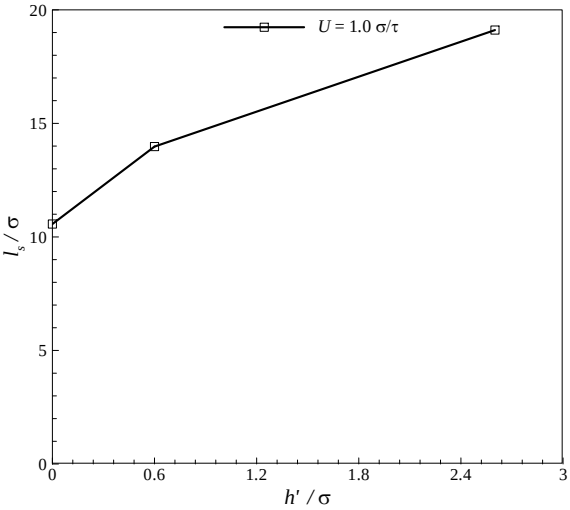
نمودارهای طول لغزش برحسب پارامتر زبری برای زبری مستطیلی شکل با ارتفاع‌های $h' = 0.6\sigma$ و $h' = 2.6\sigma$ و برای زبری مثلثی شکل با ارتفاع‌های $h' = 2.6\sigma$ و $h' = 4.5\sigma$ و با سرعت دیواره برابر $U = 1.0\sigma/\tau$، در شکل‌های 22 و 23، آورده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود با زبر کردن سطح دیوار پایین و با افزایش ارتفاع زبری، طول لغزش برای دیوار بالا افزایش پیدا کرده است به دلیل این که فقط دیوار پایین زبر شده است.

از مقایسه شکل‌های 22 و 23، با نتایج مرجع [19] نتیجه می‌دهد که در مرجع [19] با زبر کردن سطوح دیوار بالا و پایین و همچنین با افزایش ارتفاع زبری طول لغزش برای دیوار بالا کاهش پیدا کرده اما در شکل‌های 22 و 23، طول لغزش افزایش پیدا کرده است و برای اینکه طول لغزش برای دیوار بالا هم کاهش یابد باید سطح دیوار بالا را هم زبر کرد.

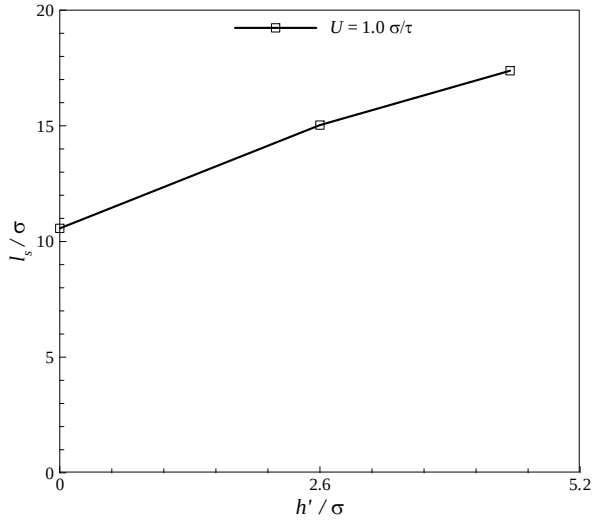
4- نتیجه‌گیری

در این مقاله با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی رفتار جریان سیال آرگون در جریان کوئت پایدار درون نانوکانال‌های صاف و زبر مورد مطالعه قرار گرفته است. افزایش سرعت دیواره بالایی، باعث افزایش لغزش سرعت سیال می‌شود؛ همچنین باعث خطی‌تر شدن پروفیل سرعت سیال می‌شود. با افزایش سرعت دیواره، ماکزیمم مقدار چگالی در نزدیکی دیوارها کاهش می‌یابد. افزایش ارتفاع کانال به‌ازای سرعت دیواره ثابت باعث کاهش لغزش سیال سرعت می‌شود، در واقع با زیاد شدن فاصله بین دو دیواره ساکن و متحرک تغییرات سرعت ذرات سیال کمتر می‌شود.

چگالی دیواره بر روی سرعت سیال نقش بسزایی دارد که با توجه به نتایج کار حاضر می‌توان نتیجه گرفت که کاهش چگالی دیواره و یکسان کردن مقدار آن با مقدار چگالی سیال به ازای سرعت دیواره ثابت، لغزش سرعت سیال را به‌شدت کاهش می‌دهد و حتی لغزش سرعت سیال را به صفر می‌رساند، سیال کاهش یافته که باعث می‌شود ذرات سیال آزادانه‌تر حرکت کنند که به همچنین افزایش چگالی دیواره باعث افزایش لغزش سرعت سیال می‌شود. نتیجه می‌شود که کاهش یا افزایش چگالی دیواره تأثیری بر روی مقدار یکنواخت چگالی سیال ندارد. با کاهش پارامتر انرژی سیال-دیوار و ثابت نگه‌داشتن پارامتر طولی، لغزش سرعت سیال افزایش پیدا می‌کند. دلیل آن این است که برهم‌کنش ذرات سیال با ذرات دیوار کاهش یافته و آبدوستی ذرات افزایش لغزش سرعت ذرات سیال منجر می‌شود. همچنین کاهش



شکل 22 نمودار طول لغزش برای زبری مستطیلی در دو ارتفاع زبری $h' = 0.6\sigma$ و $h' = 2.6\sigma$



شکل 23 نمودار طول لغزش برای زبری مثلثی در دو ارتفاع زبری $h' = 2.6\sigma$ و $h' = 4.5\sigma$

پارامتر انرژی برای سرعت دیواره پایین‌تر لغزش سرعت سیال را بیشتر افزایش می‌دهد. کاهش پارامتر طولی بین ذرات سیال-دیوار، لغزش سرعت ذرات سیال را به‌شدت کاهش می‌دهد. برای سرعت دیواره بالاتر، کاهش پارامتر طولی، لغزش سرعت سیال را بیشتر کاهش می‌دهد.

زبر کردن دیوار پایین با زبری‌های مستطیلی و مثلثی شکل، باعث کاهش لغزش سرعت سیال در نزدیکی دیوار پایین و افزایش لغزش سرعت سیال در نزدیکی دیوار بالا می‌شود که برای کاهش لغزش سرعت سیال در نزدیکی دیوار بالا باید دیواره متحرک را هم زبر کرد. همچنین افزایش ارتفاع زبری باعث کاهش بیشتر لغزش سرعت سیال می‌شود، حتی برای ارتفاع‌های زبری بلند، سرعت ذرات سیال در نزدیکی دیواره پایین برابر صفر یا منفی است. برای سرعت دیواره کوچک، در نزدیکی دیوار پایین برای ارتفاع یکسان زبری، زبری مثلثی شکل نسبت به زبری مستطیلی شکل، لغزش سرعت سیال را بیشتر کاهش می‌دهد و در نزدیکی دیوار بالا، زبری مستطیلی شکل، لغزش سرعت سیال را بیشتر افزایش می‌دهد. اما برای سرعت دیواره بالاتر هر دو زبری مستطیلی و مثلثی با ارتفاع یکسان، از نزدیکی دیوار پایین تا مرکز کانال رفتار یکسانی دارند و تنها در نزدیکی دیوار بالا رفتار متفاوتی دارند که زبری مستطیلی، لغزش سرعت سیال را کمی بیشتر افزایش می‌دهد.

5- فهرست علایم

f_i	نیروی تصادفی
k_B	ثابت بولتزمن (J/K)
M	جرم (kg)
N_f	تعداد اتم‌های سیال
N_w	تعداد اتم‌های دیوار
r_c	شعاع قطع (nm)
r_{ij}	فاصله بین مولکول i و j (nm)
T	دما (K)
v_{ix}	سرعت ذره i ام
x_i, y_i, z_i	مختصات ذره i ام
$\ddot{x}_i$	شتاب ذره i ام در جهت x
$\ddot{y}_i$	شتاب ذره i ام در جهت y
$\ddot{z}_i$	شتاب ذره i ام در جهت z

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-04-19]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1394.15.7.32.0]

علایم یونانی

ε انرژی

ρ چگالی سیال (kg/m^3)

ρ_w چگالی دیوار (kg/m^3)

σ قطر ذره (nm)

τ ثابت زمانی

زیرنویس‌ها

f سیال

w دیوار

wf سیال-دیوار

6-مراجع

[1] M. J. Lee, J. Kim, The structure of turbulence in a simulated plane couette flow, *In 8th Symposium on Turbulent Shear Flows,* Munich, pp. 5-3-1 - 5-3-6, 1991.

[2] M. M. M. El Telbany, A. J. Reynolds, Turbulence in plane channel flows, *Journal of Fluid Mechanics,* vol. 111, pp. 283-318, 1981.

[3] J. Kim, P. Moin, R. D. Moser, Turbulence statistics in fully developed channel flows at low Reynolds number, *Journal of Fluid Mechanics,* vol. 177, pp. 133-166, 1987.

[4] T. M. Galea, P. Attard, Molecular dynamics study of the effect of atomic roughness on the slip Length at the fluid-solid boundary during shear flow, *Langmuir,* Vol. 20, No. 8, pp. 3477-3482, 2004.

[5] B.-Y. Cao, M. Chen, Z.-Y. Guo, Effect of surface roughness on gas flow in microchannels by molecular dynamics simulation, *International Journal of Engineering Science,* Vol. 44, pp. 927-937, 2006.

[6] Y. Jia, H. Liu, L. Yu, Molecular dynamics studies of the flow properties of liquids in nanochannel, *Proceedings of the IEEE International Conference on Automation and Logistics,* pp. 2546-2549, Qingdao, China, 2008.

[7] A. Martini, A. Roxin, R. Q. Snurr, Q. Wang, S. Lichter, Molecular mechanisms of liquid slip, *Journal of Fluid Mechanics,* vol. 600, pp. 257–269, 2008.

[8] B.–Y. Cao, J. Sun, M. Chen, Z. –Y. Guo, Molecular momentum transport at fluid-solid interfaces in MEMS/NEMS: a review, *International Journal of Molecular Sciences,* Vol. 10, pp. 4638-4706, 2009.

[9] Anoosheh Niavarani, Nikolai V. Priezjev, Modeling the combined effect of surface roughness and shear rate on slip flow of simple fluids, *Physical Review E,* Vol. 81, pp. 011606-1-011606-10, 2010.

[10] R. Kamali, A. Kharazmi, Molecular dynamics simulation of surface roughness effects on nanoscale flows, *International Journal of Thermal Sciences,* Vol. 50, No. 3, pp. 226-232, 2011.

[11] H. Noorian, D. Toghraie, A. R. Azimian, Molecular dynamics simulation of Poiseuille flow in a rough nano channel with checker surface roughnesses geometry, *Heat Mass Transfer,* Vol. 50, No. 1, pp.105-113, 2013.

[12] H. Aminfar, N. Razmara, Molecular dynamics simulation of liquid argon flow in nanochannels using different potential functions, *Modares Mechanical Engineering,* Vol. 13, No. 6, pp. 114-125, 2013. (In Persian)

[13] P. Yi, D. Poulikakos, J. Walther, G. Yadigaroglu, Molecular dynamics simulation of vaporization of an ultra-thin argon layer on a surface, *International Journal Heat and Mass Transfer 45,* pp. 2087-2100. 2002.

[14] N. Asproulis, M. Kalweit, D. Drikakis, A hybrid molecular continuum method using point wise coupling, *Advances in Engineering Software,* Vol. 46, pp. 85–92, 2010.

[15] P. A. Thompson, M. O. Robbins, Shear flow near solids: Epitaxial order and flow boundary conditions, *Physical Review A.* Vol.41, No. 12, pp.6830-6837, 1990.

[16] http://lammps.sandia.gov

[17] N. V. Priezjev, "Molecular dynamics simulations of oscillatory couette flows with slip boundary conditions", *Microfluid Nanofluid,* pp. 225-233, 2012.

[18] N .V. Priezjev, S. M. Troian, Influence of periodic wall roughness on the slip behaviour at liquid/solid interfaces: molecular-scale simulations versus continuum predictions, *Journal Fluid Mechanical,* vol. 554, pp. 25–46, 2006.

[19] Chengbin Zhang, Yongping Chen, Slip behavior of liquid flow in rough nanochannels, *Chemical Engineering and Processing* 85, pp. 203–208, 2014.

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-04-19]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1394.15.7.32.0]