ماهنامه علمى پژوهشى



mme.modares.ac.ir

تاثیر تغییر ثابت فنر دیوار بر توزیع سیال لنارد-جونز در نانوکانال به روش شبیهسازی ديناميك مولكولي

رضا ريانى¹، قاسم حيدرىنژاد²*، ايراهيم شيرانى³،

1- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران

2- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران

3- استاد، مهندسي مكانيك، موسسه أموزش عالى صنعتى فولاد، اصفهان

* تهران، صندوق پستی gheidari@modares.ac.ir ،14115-143

چکیدہ	اطلاعات مقاله
به منظور شبیهسازی عددی فرآیند انتقال گرما از ساختار دیوار به سیال در نانوکانالها، بازهی وسیعی از ثابت فنر بسته به جنس دیوار مورد استفاده قرار میگیرد. در این مقاله تاثیر تغییر ثابت فنر دیوار بر انتقال گرما و توزیع خواص ماکروسکوپیک مختلف سیال بررسی شده است. به این منظور، انتقال حرارت در گاز آرگون با عدد نودسن 10 بین دو دیوار ساکن از یک نانوکانال با عرض 5.4 نانومتر با استفاده از روش دینامیک	مقاله پژوهشی کامل دریافت: 02 تیر 1396 پذیرش: 02 مرداد 1396 ارائه در سایت: 17 شهریور 1396
مولکولی شبیهسازی شده است. مقایسهی نتایج نشان میدهد که با کاهش ثابت فنر دیوار، دامنه نوسانات اتههای دیوار افزایش یافته و این امر امکان نزدیکتر شدن اتههای گاز به سطح دیوار را افزایش میدهد که در نتیجه شار حرارتی عبوری از گاز و متناظر با آن ضریب هدایت حرارتی افزایش مییابد. بررسی نتایج افزایش ضریب هدایت حرارتی گاز در عرض نانوکانال از 0.21 mW/m – K به 0.11 mW/m – K را برای کاهش مقدار ثابت فنر از ks = 1100ɛσ ⁻² به ks = 100ɛơ ⁻² منشان میدهد. به علاوه نزدیکتر شدن اتههای گاز به سطح، پرش	<i>کلید واژگان:</i> انتقال گرما گاز رقیق ثابت فنر دیوار
دمایی بر روی مرز را کاهش داده که این امر موجب افزایش هر چه بیشتر چگالی گاز در مجاورت دیوار سرد و کاهش آن در مجاورت دیوار گرم میگردد. مقایسهی پروفیل توزیع دما، چگالی و فشار در عرض نانوکانال نشان میدهد که مستقل از تغییرات ثابت فنر، مقدار بیشینهی کمیتهای مذکور در فاصله 7/2 از دیواره اتفاق میافتد.	

The wall spring constant variation effect on distribution of Lennard-Jones fluid in nanochannel by molecular dynamic simulation

Reza Rabani¹, Ghassem Heidarinejad ^{1*}, Ebrahim Shirani²

1- Department of Mechanical Engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran

2- Department of Mechanical Engineering, Foolad Institute of Technology, Fooladshahr, Isfahan, Iran

* P.O.B. 14115-143, Tehran, Iran, gheidari@modares.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

ABSTRACT

In order to simulate the heat transfer process from wall to fluid in nanochannel numerically, extensive Original Research Paper Received 23 June 2017 range of spring constants with regard to wall material is used. In this paper, the effect of variation in Accepted 24 July 2017 wall spring constant on the heat transfer and distribution of the macroscopic properties of fluid is Available Online 08 September 2017 investigated. In this regard, heat transfer in argon gas between two stationary walls of a 5.4 nm nanochannel with Knudsen number 10 has been simulated using the molecular dynamic method. Comparison between the results shows that by reducing the wall spring constant, the amplitude of wall atoms vibration increased, causing the gas atoms to become closer to the wall surface which results in wall spring constant an increase in the heat flux and thermal conductivity coefficient of the gas. Evaluating the result reveals that while the spring constant reduces from $k_s = 1100\varepsilon\sigma^{-2}$ to $k_s = 100\varepsilon\sigma^{-2}$, the thermal conductivity coefficient of the gas changes from 0.11 mW/m - K to 0.27 mW/m - K. Furthermore, the reduced distance between the gas atoms and wall surface results in a decrease in the temperature jump on the wall so it increases the gas density near the cold wall while it decreases near the warm wall. Comparison between temperature, density and pressure profiles in the nanochannel height shows that regardless of the amount of spring constant variation, the maximum of these properties has occurred at $\sigma/2$ from the walls

الكترومكانيكي، ، شناخت دقيق مكانيزم انتقال مومنتم و حرارت در گاز درون میکرو و نانوکانالها مورد توجه محققین قرار گرفته است. محصور شدن سیال در ابعاد نانو^۲ در نانوکانال و نانوحفرهها^۱، موجب افزایش قابل ملاحظهی فاصله

1- مقدمه

به دلیل پیشرفت چشمگیر تکنولوژی ساخت در ابعاد میکرو و نانو در سالهای اخیر و در نتیجه توسعهی گستردهی سیستمهای میکرو/نانو

Please cite this article using:

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

Keywords:

Heat transfer

rarefied gas

¹ Micro/Nano Electromechanical System

² Nano Confinement

پویش آزاد مولکولی در مقایسه با طول مشخصه میدان شده که این امر موجب از بین رفتن فرضیهی پیوستگی^۲ و تعادل ترمودینامیکی میشود و درنتیجه رفتار سیال با تئوریهای متداول به درستی قابل پیش بینی نمی باشد.

برای توصیف سیال در این شرایط از عدد بی بعد نودسن^۲ (نسبت فاصله پویش آزاد مولکولی گاز به طول مشخصه جریان) استفاده می شود. رژیم های جریان در ابعاد میکرو/نانو بر اساس این عدد طبقه بندی شده است [1]:

 جریان پیوسته^۶ (0.001 ≥ Kn): فرضیات پیوستگی سیال و تعادل ترمودینامیکی برقرار هستند و معادلات ناویر –استوکس و شرط مرزی عدم لغزش در آن معتبر است. گاد –ال–هاک [2] نشان داد که فرض تعادل ترمودینامیکی در نادسنهای بالاتر از 0.001 برقرار نیست، پس بهتر است مرز این ناحیه در عدد نادسن 0.001 باشد.

• جریانهای لغزشی^۵ ($0.1 \ge Kn \ge 0.00$): معادلات ناویراستوکس را میتوان همچنان برای تودهی سیال مورد استفاده قرار داد، اما هنگامی که به مرز جامد نزدیک میشویم، سیال رفتار متفاوتی از خود نشان میدهد و شرایط تعادل در نزدیک مرز برقرار نیست. با این حال کماکان امکان استفاده از معادلات ناویر-استوکس به همراه شرط مرزی سرعت لغزشی و پرش دمایی وجود دارد [3].

 جریانهای گذرا³: اثر رقیق شدن در جریان غالب شده و فرضیات پیوستگی سیال و تعادل ترمودینامیکی به طور کامل از بین می روند. در این ناحیه رابطه بین تنش و کرنش درون لایه نادسن غیر خطی می باشد و معادلات ناویر -استوکس اعتبار خود را از دست داده و باید از معادله بولتزمن و یا برنت استفاده نمود [4]. معادله برنت⁹ فرم تعمیم یافته معادلات ناویر -استوکس است که با در نظر گرفتن جملات مرتبه دوم عدد نادسن در تابع توزیع احتمال ذرات بدست می آیند [3].

 جریانهای آزاد مولکولی^۸: برخوردهای بین مولکولی در مقابل برخورد مولکولها با دیواره جامد بسیاری ناچیز بوده و معادله حاکم، معادله بولتزمن غیر برخوردی⁴ میباشد.

در این دستهبندی از فرضیه "تشابه دینامیکی"^{۱۰} بین جریان گاز در محیطهای کم فشار و فضاها با ابعاد کوچک استفاده شده است بنابراین تا وقتی که اثر نیروی دیواره بر کل میدان حل قابل اغماض باشد، میتوان از آن استفاده کرد. افزایش عدد نودسن چالشهای فراوانی را بر فرمول بندی و اعمال شرایط مرزی در مدلهای پیوستهی مرتبه بالا^{۱۱} ایجاد میکند. جریان گاز در ابعاد میکرو و نانو به طور متداول با استفاده از تئوری جنبشی^{۱۰} بر مبنای معادله بولتزمن، مدل میگردد. حل عددی و تحلیلی معادله بولتزمن به دلیل پیچیدگیهای بوجود آمده برای حل جملهی برخورد و چند بعدی بودن معادله، بسیار چالش برانگیز است. علاوه بر روشهای مذکور، میتوان از روش شبیهسازی مستقیم مونتکارلو^{۱۳} ارائه شده توسط برد [5] برای شبیهسازی جریان در رژیمهای لغزشی، گذرا و آزاد مولکولی استفاده کرد که این روش به

مانند روشهای مذکور، نیازمند مدل برخوردی از پیش مشخص شده میباشد. بررسی دقیق تحقیقات صورت گرفته در این زمینه، نشان میدهد که مطالعات فراوانی در زمینه جریان گاز و انتقال گرما در رژیمهای جریان لغزشی، گذرا و آزاد مولکولی انجام شده است.

با استفاده از روش شبیهسازی مستقیم مونتکارلو، جریان درون نانو کانالها و میکرو/نانو پلهها توسط دربندی و روحی [6] در گسترهی وسیعی از اعداد نودسن مورد بررسی قرار گرفت و نشان داده شد که در اعداد نودس بالا پروفیل سرعت به حالت خطی در میآید. همچنین نشان داده شد که تغییرات خواص سیال در ناحیهی میانی رژیم جریان گذرا و رژیم جریان آزاد مولکولی بسیار آرامتر از تغییر خواص در ناحیهی جریان گذرا و رژیم ریان ابتدای رژیم جریان گذرا میاشد. تاثیر زبری و فرورفتگی سطح در جریان پوازی آرگون مایع توسط بخشان و جهرمی [7] مورد برسی قرار گرفت. زا فرورفتگی متناظر خود بر توزیع پروفیل سرعت و چگالی سیال دارد و همچنین زبری ایجاد شده تنش برشی دیوار پایینی تاثیر میال دارد و برشی دیوار بالایی را کاهش میدهد. این در حالی است که فرورفتگی بر روی دیوار پایینی تنها تنش برشی دیوار افزایش میدهد.

علاوه بر پیچیدگیهای به وجود آمده به دلیل افزایش عدد نودسن، در صورت کاهش عرض کانال تاثیر نیروی دیواره بر توزیع خواص سیال قابل توجه است. با توجه به این که طول اثر نیروی عمل و عکسالعمل وندروالس موجود بین سطح و گاز آرگون حدودا nnn میباشد (حدود سه برابر قطر مولکول آرگون)، کاملا مشخص است که در صورت وجود کانالی به عرض ملکول آرگون)، کاملا مشخص است که در صورت وجود کانالی به عرض عرض کانال موثر بوده و خواص سیال را تغییر میدهد که این امر در تئوری عرض کانال موثر بوده و خواص سیال را تغییر میدهد که این امر در تئوری قابل پیش بینی نمیباشد [8]. بنابراین ارزیابی دقیق تاثیر نیروی دیوار بر سیال و مشخص کردن مقدار اختلاف با پیش بینیهای مبتنی بر تئوری جنبشی، از اهمیت خاصی در نانوکانالها برخوردار است. روش دینامیک مولکولی را میتوان به منظور مشخص کردن اثر برهم کنش گاز/دیوار در شبیه ایزیهای عددی به کار برد.

باریسیک و همکاران [8] با معرفی مدل دیوار هوشمند به منظور شبیهسازی مولکولهای دیوار، حل جریان کوئت در نانوکانالها با عرض در حدود 5 و 10 نانومتر در اعداد نودسن بالا (رژیم آزاد مولکولی) را انجام داده و نادند. در این مدل به جای مدل کردن تمامی مولکولهای دیواره، تنها تعدادی از آنها که مولکول گاز در آن نقطه به نزدیکی دیوار رسیده است، در هر لحظه مدل میشوند. بنابراین تعداد مولکولهای به کار رفته در مدلسازی دیوارهها به شدت کاهش یافته و در نتیجه زمان محاسبات به شکل قابل توجهی کاهش می ابد. نتایج این تحقیق نشان داد که حل معادله بولترمن در ناحیه تاثیر نیروی دیوار، نتایج دقیقی ارائه نکرده و برای حل دقیق پروفیل سرعت و ... باید الزاما از روش دینامیک مولکولی استفاده شود.

به منظور بررسی تاثیر نیروی دیوار بر توزیع تنش برشی درون سیال، باریسیک و بسکوک [9] اثر نیروی دیواره را بر توزیع تنش برشی درون سیال بررسی نمودند. در این تحقیق نشان داده شد که تنش ذره-ذره^{۱۴} بین مولکولهای گاز با افزایش چگالی، افزایش مییابد. از طرف دیگر بین

Nano pores

² Continuum assumption ³ Knudsen Number

⁴ Continuum

⁵ Slip

⁶ Transition

Burnett Equation Free Molecular

Collisionless Boltzmann Equation

 ¹⁰ Dynamic Similarity
 ¹¹ High Order Continuum Method

¹² Kinetic Theory

¹³ Direct Simulation Monte Carlo Method (DSMC)

¹⁴ Particle-Particle Virial

مهندسی مکانیک مدرس، آذر 1396، دورہ 17 شمارہ 9

مولکولهای دیوار و مولکولهای گاز نزدیک به آن، در مجاورت دیواره تنشی تحت عنوان تنش سطح-ذره بوجود میآید که در نهایت موجب غیرهمگنی توزيع تنش عمودي در عرض نانو کانالها مي شود.

بررسی نتایج جریان کوئت گاز آرگون در رژیم گذرا و آزاد مولکولی درون نانوکانالها توسط باریسیک و بسکوک [10] نشان میدهد که در تمامی موارد، مقدار عددی ضریب تطابق تماسی بین گاز و دیوار مستقل از عدد نودسن و خصوصیات سیال میباشد. در ادامه جریان پوازی گاز آرگون درون نانوکانالها در حالت سه بعدی به وسیله روش دینامیک مولکولی بررسی شده و مقایسه نتایج به دست آمده با نتایج حاصل از تئوری جنبشی نشان داد که برای مقادیر محدود^۲ نسبت طول نفوذ نیروی دیوار به عرض کانال، "تشابه دینامیکی" بین جریان گاز در شرایط کم فشار و فضاها با ابعاد کوچک از بین می رود و این در حالی است که با کاهش این مقدار به سمت صفر، فرضیه تشابه مولکولی برقرار و حل مبتنی بر روش تئوری جنبشی مقادیر صحیحی را برای شرایط مذکور ارائه میکند [11].

مقایسه نتایج حل کامل دینامیک مولکولی با حل مبتنی بر توزیع ماکسول نشان میدهد که این توزیع علی رغم توانایی در محاسبه اثرات رقیقشدگی و غیرتعادلی، قادر به شبیهسازی اثرات ناشی از محصور شدن سیال در ابعاد نانو مثل تاثیر نیروی دیواره و جذب سطحی^۳ نیست. جمعبندی نتایج حاصل از شبیهسازی هیدرودینامیکی جریان تحت تاثیر نیروی دیواره نشان میدهد که در ناحیه نزدیک دیوار، تغییرات شدیدی در چگالی و سرعت گاز وجود دارد و توزیع تنش برشی و عمودی به صورت غیریکنواخت می باشد و جذب سطحی مولکولهای گاز را میتوان بهعنوان تابعی از پارامترهای تعاملی گاز-جامد در نظر گرفت. به علاوه مقایسه ی پروفیل سرعت بهدست آمده از دینامیک مولکولی با حل صورت گرفته بر روی معادله خطی شده بولتزمن نشان از تطابق كامل این پروفیل در قسمتهای میانی کانال دارد و این در حالی است که در نزدیکی دیواره، به دلیل وجود نیروی دیواره و افزایش زمان حضور مولکول های گاز در مجاورت آن، عدم تطابق وجود داشته و سرعت گاز در این ناحیه به سرعت دیوار نزدیکتر می گردد [12]. در تحقیقات مذکور و با توجه به استفاده از مدل دیوار هوشمند، دمای دیوار و سیال یکسان در نظر گرفته شده و گرمای تولیدی در سیال به دلیل پدیدهی اتلافات لزجی، به وسیله ترموستات از آن خارج شده است. از طرفی حرارت تولیدی به دلیل وجود پدیده اتلافات لزجی^۴ در جریان همدما^ه درون میکرو و نانوکانالها، بسیار قابل توجه است و باید به درستی در محاسبات در نظر گرفته شود تا اثر آن بر سایر پارامترهای جریان به طور دقیق مدل گردد. در مسئله فیزیکی در شرایط واقعی، گرمای تولیدی به دیواره ها منتقل شده و قسمتی از آن توسط دیوارهها دفع و قسمت دیگر آن صرف افزایش دمای گاز می گردد و این نشان میدهد که روش استفاده از ترموستات بر روی گاز تنها تقریبی از حل اصلی مسئله است. به علاوه در بسیاری از کاربردها، دمای بین دو دیوار در نانوکانال متفاوت است و انتقال گرما بین سیال و دیوارهها وجود دارد. همانگونه که مشاهده می گردد و با توجه به کاربردهای مختلف بررسی تاثیر نیروی دیواره بر توزیع دما و پارامترهای انتقال گرما از اهمیت خاصی برخوردار است.

در مطالعهی پیشین [13] گامهای ابتدایی در شبیهسازی دقیقتر انتقال

مهندسی مکانیک مدرس، آذر 1396، دورہ 17 شمارہ 9

گرما از سیال به دیوارهها با در نظر گرفتن اثر نیروی دیواره بر آن در اعداد نودسن بالا، با استفاده از مدل دیوار گرمایی تعاملی^۶ برداشته شده است. پس از صحت سنجی کد عددی مورد استفاده با مقایسه با نتایج جریان کوئت در ابعاد نانو، نتایج حل دو بعدی و سه بعدی در تحقیق مذکور مقایسه شد و نشان داده شد که به منظورشبیهسازی دقیق حل گرمایی، نیاز به حل سه بعدی می باشد. همچنین با مقایسه نتایج به دست آمده نشان داده شد که ابعاد شبکه در راستاهای تناوبی میبایست حداقل به اندازه فاصله پویش آزاد مولکولی باشد تا جریان سیال به درستی توسعه یابد. همچنین با مقایسه سه گام زمانی مختلف نشان داده شد که حداکثر گام زمانی مجاز در شرایط مذکور 4fs می باشد. بررسی نتایج نشان داد که مستقل از اختلاف دمای اعمال شده بین دو دیوار، پروفیل دما و چگالی در فاصله یک نانومتر از سطح دیوار به شدت تغییر می کند و افزایش اختلاف دمای دو دیوار به مقادیر بالاتر از 20 درجه، تغییر چگالی قابل ملاحظهای را نسبت به پروفیل مذکور در حالت همدما ایجاد میکند که این امر میبایست در تعیین ضریب انتقال حرارت هدایتی گاز مورد توجه قرار گیرد. در واقع اعمال اختلاف دمای بالاتر تا 20 درجه بین دو دیوار میتواند مقدار ضریب هدایت حرارتی محاسبه شده را تا 50 درصد نسبت به مقدار واقعی آن در دمای مذکور افزایش دهد.

در مطالعه مذکور و به منظور شبیهسازی دقیق انتقال گرما از دیواره از مدل دیوار گرمایی تعاملی، ارائه شده توسط کیم و همکاران [14] استفاده شده و مقدار ثابت فنر برابر با $k_{
m s} = 500 arepsilon \sigma^{-2}$ در نظر گرفته شده است. در این مدل مطابق با شکل 1، بر تکتک ردیف اتمهای به کار رفته در شبیه سازی دیوار ترموستات اعمال می شود و مولکول ها در دیوار با فنر به هم مرتبط بوده و ارتعاش میکنند. همچنین ترموستات اعمال شده بر روی ديوارهها با استفاده از روش مقياس كردن سرعتها عمل مىكند. تركيب اين ارتعاش و ترموستاتها، دمای دقیق مورد نظر را برای دیوار تولید میکنند. ارتعاشات گرمایی مولکولهای دیواره به وسیله مکانیزم برخورد، انرژی و مومنتم را از سیال جذب کرده و یا به آن انتقال میدهند. در این مدل دیوارهها به عنوان حمام گرمایی عمل کرده و تعادل گرمایی سیال را به همراه دارند. در نتیجه نیاز به اعمال هیچگونه ترموستاتی بر روی معادلات حرکت مولکول های سیال به منظور جلوگیری از افزایش و یا کاهش درجه حرارت در طی فرآیند حل وجود ندارد. بررسی مطالعات پیشین نشان میدهد که در جریانهای گازی در میکرو/نانوکانالها، مقدار ضریب مذکور بسته به مادهی انتخابی در ساختار دیوار وابسته، ضریب ثابت فنری معادل در محدودهی اعداد $k_{\rm s} = 100 \varepsilon \sigma^{-2}$ تا $k_{\rm s} = 1200 \varepsilon \sigma^{-2}$ را دارا میباشند $k_{\rm s} = 100 \varepsilon \sigma^{-2}$ این محدوده دقیقا معادل با موادی است که برای ساخت دیوارهها در تجهیزات میکرو/نانو سیالی^۷ از آن استفاده میشود.

با در نظر گرفتن مطالب بیان شده و مرور دقیق ادبیات فن، در این مقاله تاثیر تغییر ثابت فنر معادل با انتخاب مواد مختلف جهت شبیهسازی دیواره بر توزيع خواص سيال نظير پروفيل دما، چگالي، فشار، شار گرمايي عبوري از سیال و ضریب هدایت حرارتی سیال تحت تاثیر نیروی دیواره مورد بررسی قرار خواهد گرفت. لازم به ذکر است که برای محاسبهی فشار سیال و شار هدایتی حرارتی عبوری از سیال از رابطهی ایرویینگ-کرکوود^ استفاده شده است. در مقالهی حاضر ابتدا جزئیات شبیهسازی دینامیک مولکولی بیان می گردد. پس از آن مراحل حل به روش مذکور و پارامترهای در نظر گرفته شده

DOR: 20.1001.1.10275940.1396.17.9.26.2

Surface-Particle Virial ² Finite Value

Surface Adsorption

Viscous Dissipation

⁵ Isothermal

⁶ Interactive Thermal Wall Model

⁷ Micro/Nano fluidic 8 Irving-Kirkwood



Fig. 1 Schematic figure of thermal wall model [14] شکل 1 شکل شماتیکی از مدل دیوار حرارتی [14]

برای ابعاد جریان و خواص فیزیکی سیال و دیوار بیان شده و سپس صحت سنجی کد عددی مورد استفاده با مقایسهی نتایج به دست آمده با دادههای ارائه توسط سایر محققین بررسی می شود. در ادامه تاثیر همزمان تغییر ثابت فنر و نیروی دیواره بر سیال و توزیع پارامترهای مختلف در آن بررسی شده و تاثیر همزمان این دو پارامتر بر توزیع دما، فشار، چگالی، شارحرارتی عبوری از گاز و ضریب هدایت حرارتی گاز آرگون مورد بررسی قرار گرفته است. بر مبنای بررسیهای انجام شده توسط نویسندگان در ادبیات فن، تاکنون تاثیر همزمان پارامترهای ثابت فنر و نیروی دیوار بر توزیع خواص در گاز آرگون در اعداد نودسن بالا مورد بررسی قرار نگرفته است و در واقع کار حاضر برای اولین بار انجام شده و نتایج آن در این مقاله ارائه شده است. پروفیل دما، چگالی و فشار ارائه شده میتواند در تعیین ضریب تطابق انرژی سیال و دیوار مورد استفاده قرار گیرد. در نهایت ضریب انتقال حرارت هدایتی سیال با محاسبه شار حرارتی عبوری از گاز و در نظر گرفتن تغییرات پروفیل دما با استفاده از قانون فوریه محاسبه شده و برای ثابت فنر مختلف ارائه گردیده و جمعبندی مطالب مذکور بیان شده است.

2- شبيه سازى سه بعدى ديناميك مولكولى

H = 5.4 nm در کار حاضر گاز آرگون بین دو صفحه موازی که با یکدیگر فاصله دارند، مطابق شكل 2 قرار گرفته است. بر طبق مشاهدات صورت گرفته در پژوهشهای پیشین، در فاصله یک نانومتر از هر سطح تاثیر نیروی دیوار بر توزیع دما و چگالی در سیال قابل ملاحظه است و انتظار می ود که توزیع سایر خواص سیال نظیر فشار و ... در این ناحیه تحت تاثیر نیروی دیواره قرار گیرد. با عبور از این دو ناحیه و نزدیک شدن به مرکز کانال، تاثیر نیروی دیواره بر توزیع خواص مختلف سیال کاهش مییابد. در تمامی شبیهسازیها دیوار بالایی، دیوار گرم و دیوار پایینی، دیوار سرد در نظر گرفته شده است. لازم به ذکر است که در جهتهای محوری (x) و جانبی (z) شرایط مرزی تناوبی اعمال شده است و طول کانال در این راستاها به اندازهی فاصله آزاد مولکولی (54nm) در نظر گرفته شده است. به منظور شبیهسازی نیروهای وندروالسی موجود بین مولکولهای گاز-گاز و گاز-دیوار از تابع پتانسیل برش خوردهی لنارد- جونز L-J) 6-12) استفاده شده است. تابع پتانسیل لنارد-جونز، نیروی واندروالس موجود بین مولکولها را شبیهسازی میکند و این تابع برای شرایطی که در آن با گاز تک اتمی غیر باردار همانند آرگون سروکار داریم، تقریب بسیار دقیقی از نیروی وندروالس موجود بین مولکولها ارائه مىكند. تابع پتانسيل لنارد جونز كه به طور گسترده توسط ساير محققين [12-8] نیز برای شبیهسازی گاز آرگون مورد استفاده قرار گرفته است، به صورت رابطه (1) بيان مي گردد:

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} 4\varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right) - V(r_{\rm C}), & r \le r_{\rm C} \\ 0, & r > r_{\rm C} \end{cases}$$
(1)

arepsilon=0.3405nm برای این رابطه قطر مولکول $\sigma=0.3405$ nm برای این رابطه قطر مولکول بين، فاصله $k_{\rm b} = 1.3806 \times 10^{-23} \, {
m J/K}$ نابت بولتزمن $k_{\rm b} = 1.3806 \times 10^{-23} \, {
m J/K}$ میباشد. در روند حل دینامیک $r_{\rm c} = 1.08$ nm مولکولی r_{ij} و شعاع قطع مولکولی و از آنجایی که تابع پتانسیل لنارد جونز در مقادیر فواصل بین مولکولی بزرگ بسیار ناچیز می گردد، تنها اثر متقابل آنها با مولکولهایی که در یک شعاع مشخص (شعاع قطع) قرار دارند محاسبه می گردد. در نتیجه نیروی بین مولکولی در شعاع قطع برش خورده و به مقدار صفر میرسد.

بررسیها نشان میدهد که افزایش شعاع قطع با ضریب M، زمان محاسباتی را به مقدار M⁶ افزایش میدهد زیرا هزینه محاسباتی در روش دینامیک مولکولی متناسب با مربع تعداد مولکول های موجود در سلول است و]. جرم هر اتم آرگون برابر با $m = 6.63 \times 10^{-26} \mathrm{kg}$ در نظر گرفته شده و در تمامی شبیهسازیها دمای اولیه گاز برابر با 298K و چگالی گاز برابر با میباشد. به منظور سادهسازی فرضیات حل، برای دیوار $ho = 1.896 \, {
m kg/m^3}$ نيز مولكولهايي به جرم $(m_{
m wall}=m_{
m Ar})$ و قطر معادل با مولكولهاي آرگون در نظر گرفته شده است. همچنین قدرت ($\sigma_{\rm wall} = \sigma_{\rm Ar}$) در ساختار $\sigma_{\rm wall} = \sigma_{\rm Ar}$ پتانسیل^۳ نیروی بین مولکولی بین مولکولهای دیوار-گاز برابر با قدرت پتانسیل مولکولهای گاز-گاز ($\varepsilon_{wall-Ar} = \varepsilon_{Ar-Ar}$) در نظر گرفته شده است. در تمامی شبیهسازیهای صورت گرفته، اختلاف دمای مورد نظر به صورت متقارن نسبت به دمای گاز در نظر گرفته و بر روی دیوارهها اعمال شده است. در طی فرآیند حل، بر روی هر یک از دیوارهها ترموستات قرار داده شده است و پارامترهای ترموستات مذکور به گونهای تنظیم گردیدهاند که دمای دیوار در دمای مورد نظر ثابت باشد. به دلیل اینکه شعاع قطع در تابع پتانسیل لنارد جونز برابر با $r_{\rm C} = 1.08$ nm میباشد، به منظور شبیه سازی دقیق هر یک – از دیوارهها از دو لایه ساختار FCC برای مدل کردن هر دیوار استفاده شده است [8]. همان گونه که پیشتر بیان شد، در حل هیدرودینامیکی از مدل دیوار هوشمند استفاده شده است که این مدل علی رغم سرعت بخشیدن به حل هیدرودینامیکی جریان، جزء مدلهای دیوار سرد^۴ محسوب شده که در آن مولکول ها در مکان خود به صورت صلب حضور داشته و امکان ارتعاش را ندارند. بنابراین این مدل قابلیت شبیهسازی انتقال گرما از دیوارهها را ندارد [10] و به همین دلیل در کار حاضر از مدل دیوار گرمایی تعاملی به جهت شبیه سازی انتقال حرارت صورت گرفته از دیواره ها استفاده شده است.

به طور کلی در الگوریتم کلی حل به روش دینامیک مولکولی، ابتدا با استفاده از شرایط اولیه، مکان و سرعت هر ذره مشخص می شد. سپس نیروی وارد بر هر ذره با مشتق گیری از تابع پتانسیل لنارد جونز محاسبه می شود و



¹ Depth of Potential Well

² Face-Centered Cubi ³ Potential Strength

⁴ Cold Wall Model

با استفاده از نیروی به دست آمده و با توجه به جرم هر مولکول، شتاب حرکت هر ذره مشخص می گردد. در ادامه و با استفاده از الگوریتم سرعت ورله^۱، مکان و سرعت هر ذره در انتهای گام زمانی بعد محاسبه شده و اگر هنوز به زمان مورد نظر نرسیدهایم، مراحل دو و سه تکرار می شود. در نهایت پس از اتمام حل اولیه و رسیدن به شرایط پایا، بر روی نتایج مولکولی میانگین گیری انجام می شود تا خواص ماکروسکوپیک سیال به دست آید. شبیه سازی ها از توزیع سرعت ماکسول - بولتزمن^۲ در دمای مورد نظر برای مولکول های گاز آغاز می شود. برای تمامی مقادیر ضریب فنر در نظر گرفته شده به منظور شبیه سازی دیوار، اختلاف دمای 20K بین دو دیوار اعمال شده است تا بتوان علاوه بر مشاهده تغییرات خواص مختلف سیال تحت تاثیر تغییر ثابت فنر، مقدار ضریب انتقال حرارت هدایتی را نیز برای دمای 298K محاسبه کرد.

در اختلاف دمای مذکور بین دو دیوار، گام زمانی نیز برابر با 4fs در نظر گرفته شده است و برای هر حل، تعداد 25 میلیون گام زمانی برای سپری شدن حالت گذرای اولیه و رسیدن به شرایط پایا^۳ انجام شده است و سپس تعداد 100 میلیون گام زمانی جهت میانگین گیری از نتایج مولکولی و به دست آوردن توصیف ماکروسکوپیک از سیال نظیر پروفیل دما، چگالی و ... در نظر گرفته شده است. لازم به ذکر است که در هر حالت و به منظور اطمینان از صحت نتایج، میانگین گیری برای گامهای زمانی بیشتری نیز انجام شده و توزیع دما و چگالی با مقادیر مربوط به اعداد ذکر شده مقایسه گشته و نشان داده شده است که با افزایش میانگین گیری به مقادیر بیشتر، دقت نتایج افزایش نخواهد یافت. برای میانگین گیری و به دست آوردن توزیع پارامترهای ماکروسکوپیک معادل در گاز از روی نتایج میکروسکوپیک، عرض کانال به 100 باریکه^{[†] مساوی تقسیم شده است که عرض هر باریکه تقریبا معادل با} می باشد. عرض بسیار کم برای میانگین گیری در این حل در هر کدام $\sigma/10$ از باریکهها، به منظور شبیهسازی دقیق رفتار سیال در نزدیکی دیواره مورد نیاز است. عرض کانال از مرکز اولین ردیف اتم دیوار مربوط به دیوار بالایی تا مرکز اولین ردیف اتم دیوار در دیوار پایینی در نظر گرفته میشود. با توجه به اینکه نمایش تمامی 100 نقطه در عرض کانال به منظور بیان توزیع پروفیل دما و چگالی و ... برای چندین ثابت فنر مختلف، نمودار را تا حدی غیر قابل فهم مینماید، تنها تعدادی از این نقاط برای هر ثابت فنر به نمایش در آمده است.

3- صحتسنجی حل

از آنجا که در این پژوهش از کد عددی متن با ز^ه لمپس^۶ به منظور شبیهسازی مسائل مورد نظر استفاده شده است، در این گام نتایج حاصل از کد عددی مذکور با نتایج موجود در پژوهشهای پیشین مقایسه شده و صحت استفاده از کد عددی لمپس در این گونه مسائل بررسی خواهد شد.

به منظور صحتسنجی حل هیدرودینامیکی کد لمپس برای شرایط مذکور، پروفیل سرعت و چگالی در نیمه پایینی کانال برای سه تنظیم متفاوت از پارامترهای ترموستات در جریان کوئت بدون انتقال گرما از دیوارهها، به ترتیب در شکل 3 و شکل 4 با شرایط مشابه مرجع [10] مقایسه

شده است. در حل مذکور سرعت مشخصه جریان کوئت $U_w = 64 \text{ m/s}$ و عرض کانال برابر با H = 5.4 nm در نظر گرفته شده است. همان گونه که مشاهده میشود، پروفیل سرعت در نزدیکی دیوار برای هر سه حالت ترموستات، دقیقا با نتایج حل انجام شده توسط باریسیک و همکاران [10] تطابق دارد. همان گونه که بررسی شکلها نشان میدهد، مشخص است که در نزدیکی دیواره و مطابق انتظار پروفیل سرعت و چگالی از توزیع خود در ناحیه میانی کانال دور شدهاند. بررسی نتایج نشان میدهد که روش مورد استفاده در این تحقیق به خوبی قادر به نشان دادن اثرات نیروی دیواره است و بنابراین میتوان از این روش در ادامه کار استفاده کرد.

4- نتايج

در تمامی حلهای صورت گرفته در این مقاله و به منظور امکان مشاهده تاثیر ثابت فنر بر توزیع سیال و همچنین امکان محاسبه ضریب انتقال حرارت هدایتی در دمای مورد نظر، دمای ابتدایی گاز برابر 298K در نظر گرفته شده است و به منظور اعمال اختلاف دمای 20K بین دو دیوار، دمای دیوار بالایی (دیوار گرم) برابر با 308K و دمای دیوار پایینی (دیوار سرد) برابر با 288K در



Fig. 3 Comparison of the present work's velocity profile in channel width with Ref.[10]

شكل 3 مقايسه پروفيل سرعت نتايج حاضر با نتايج مرجع [10]



Fig. 4 Comparison of the present work's normalized density profile with Ref.[10]

شکل 4 مقایسه پروفیل چگالی بیبعد نتایج حاضر با نتایج مرجع [10]

¹ Velocity Verlet Algorithm

 ² Maxwell-Boltzmann Velocity Distribution
 ³ Steady State Condition

⁴ Slab

⁵ Open Source

⁶ LAMMPS(Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)

نظر گرفته شده است. بدیهی است که در صورت افزایش اختلاف درجه حرارت بین دیوارهها، دمای بسیار بالا یا بسیار پایین در نزدیکی دیواره خود موجب تغییر توزیع سیال در مجاورت دیواره شده و در آن صورت امکان مشاهده تاثیر تغییر ثابت فنر بر توزیع خواص سیال به تنهایی وجود ندارد پس در این شرایط میبایست از اختلاف دماهای کم استفاده نمود تا تاثیر پارامتر مورد نظر به تنهایی لحاظ گردد.

1-4- توزيع دما

نمودار توزیع دما در عرض کانال برای مقادیر گوناگونی از ثابت فنر به کار رفته در شبیه سازی دیوار در شکل 5 ارائه شده است. همانگونه که ملاحظه می شود برای تمامی مقادیر این ضریب، در فاصله ۱۳ از هر دیوار پروفیل دما از توزیع خطی موجود در ناحیه یمیانی کانال^۱ فاصله گرفته و به دمای دیوار نزدیک تر می شود. همچنین مطابق این شکل، رفتار پروفیل دما در ناحیه یمیانی کانال مستقل از ضریب فنر اعمالی بر روی دیوار است. مقایسه میزان تغییرات دما در ناحیه میانی کانال و نزدیک دیواره است. مقایسه میزان تغییرات دما در ناحیه میانی کانال و نزدیک دیواره است. مقایسه ضرایب فنر استفاده شده نشان می دهد که قسمت عمده تغییرات دما در عرض کانال در نزدیکی دیواره ها رخ می دهد و در قسمت میانی کانال تغییرات دمای بسیار کمتری مشاهده می گردد. این امر نشان می دهد که در توجهی از کانال را پوشش می دهد، تاثیر نیروی دیواره بر انتقال حرارت بسیار بیشتر از پدیده ی رقیق شدگی (عدد نودسن) می باشد و به همین علت می بایست به دقت مورد بررسی قرار گیرد.

در شکل 6 و شکل 7، توزیع دما در مجاورت دیوار بالایی و پایینی به ترتیب نشان داده شده است. همانگونه که مشاهده میگردد مستقل از ضریب فنر به کار رفته برای مدلسازی دیوار، بیشینه دما در نزدیکی هر دیوار در فاصله 2/0 از دیواره روی میدهد. در واقع با افزایش فاصله از سطح دیوار، رفته رفته تاثیر نیروی دیواره بر پروفیل دما کاهش یافته و در فاصله اسا از هر دیوار تاثیر نیروی دیواره بر توزیع دما تا حد زیادی از بین میرود. به علاوه ملاحظه میگردد که در نزدیکی هر دو دیوار سرد و گرم، کاهش ضریب فنر به کار رفته در شبیه سازی دیوار موجب نزدیکتر شدن دمای گاز به دمای دیوار میشود.

در واقع در مدل دیوار گرمایی تعادلی به کار گرفته شده در شبیه سازی ها، اتم های دیواره حول نقطه تعادل خود^۲ ارتعاش می کنند. برای ثابت های فنر کوچکتر، دامنه ی⁷ نوسانات اتم ها افزایش یافته و فرکانس^۴ نوسانات کاهش می یابد [15]. این امر موجب شده است که مولکول های گاز بتوانند تا مسافت بیشتری به اتم های دیوار نزدیک شوند و در نتیجه انتقال حرارت بیشتری بین آن ها صورت پذیرد و دمای گاز به دمای دیواره نزدیک تر گردد. بر خلاف مطالب بیان شده با افزایش ثابت فنر، فرکانس نوسانات بیشتر شده و در نتیجه امکان نزدیک تر شدن بیشتر مولکول های گاز به دیواره وجود ندارد در نتیجه امکان نزدیک تر شدن بیشتر مولکول های گاز به دیواره وجود ندارد در نتیجه دمای گاز نمی تواند به دمای دیواره نزدیک گردد.

در شکل 8 تغییرات بیشینه دمای گاز در مجاورت دیواره بر حسب ثابت فنر به کار رفته در شبیه سازی آن به نمایش در آمده است. همانگونه که بیان شد با کاهش ثابت فنر، دمای گاز به دمای هر دو دیوار نزدیک تر شده و مطابق این شکل بیشینه اختلاف دمای تجربه شده توسط گاز در کانال

افزایش مییابد. بر طبق شکل 8 بیشینه اختلاف دمای تجربه شده توسط گاز $k_{\rm s} = k_{\rm s}$ برای $k_{\rm s} = 1100 \varepsilon \sigma^{-2}$ است که با کاهش ضریب فنر به $k_{\rm s} = 1100 \varepsilon \sigma^{-2}$ برای مقدار به 11.96K می سد. در واقع افزایش دامنه و کاهش فرکانس نوسانات بیشینه اختلاف دمای تجربه شده توسط گاز را در حدود 40% افزایش داده است.



Fig. 5 Distribution of temperature profile for different spring constant شكل 5 توزيع پروفيل دما براى ضرايب فنر متفاوت



Fig. 6 Distribution of temperature profile in upper channel's half شکل 6 توزیع پروفیل دما در نیمه بالایی کانال



Fig. 7 Distribution of temperature profile in upper channel's half شكل 7 توزيع پروفيل دما در نيمه ي پاييني كانال

^{. . .}

¹ Bulk Region ² Equilibrium Position

³ Amplitude ⁴ Frequency



Fig. 8 maximum temperature of gas near upper and bottom wall شکل 8 بیشینه دمای گاز در مجاورت دیوار بالایی و پایینی

4-2- توزيع چگالی

نمودار توزیع چگالی در عرض کانال برای مقادیرگوناگونی از ثابت فنر در شکل 9 ارائه شده است. ملاحظه می شود که برای تمامی مقادیر این ضریب، شکل 9 ارائه شده است. ملاحظه می شود که برای تمامی مقادیر این ضریب، در فاصله 1nm از هر دیوار پروفیل چگالی از توزیع یکنواخت موجود در ناحیه ی میانی کانال فاصله گرفته و در فاصله 2 $\sigma/2$ از دیواره، به حداکثر مقدار خود می رسد. همچنین مشاهده می گردد که به دلیل کاهش سرعت اتم ها حین برخورد با دیوار سرد، چگالی گاز در مجاورت دیوار پایینی (دیوار سرد) از چگالی گاز در مجاورت دیوار پایینی (دیوار سرد) زمان کاهش سرعت در شکل سرد) از چگالی گاز در مجاورت دیوار بالایی (دیوار مرد) بیشتر است. در شکل سرد) از چگالی گاز در مجاورت دیواره بر حسب ثابت فنر به کار رفته در شبیه سازی آن به نمایش در آمده است. همانگونه که بیان شد با کاهش ثابت فنر و در نتیجه افزایش دامنه و کاهش فرکانس نوسانات، اتم گاز در میوازیش می یابد. مطابق شکل 10 بیشینه اختلاف چگالی گاز در این ناحیه افزایش می یابد. مطابق شکل 10 بیشینه اختلاف چگالی گاز در این ناحیه گاز در کانال برای 2-5مای 1.57 kg/m³ می رسد.

4-3- توزيع فشار

رابطه ایروینگ-کرکوود برای محاسبهی مولفههای تانسور تنش مطابق با



Fig. 9 Distribution of Density profile for different spring constant شکل 9 توزیع پروفیل چگالی برای ضرایب فنر متفاوت



Fig. 10 maximum density of gas near upper and bottom wall شکل 10 بیشینه چگالی گاز در مجاورت دیوار بالایی و پایینی

روابط 2 و 3 آورده شده است [16]:

$$S_{kl} = \frac{1}{Vol} \langle \sum_{l} m^{l} (V_{l}^{i} - \bar{V}_{k}^{i}) (V_{l}^{i} - \bar{V}_{l}^{i}) + W_{kl} \rangle$$
(2)

$$W_{kl} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} (r_k^j - r_k^i) f_l^{i,j}$$
(3)

که در رابطهی $2 \cdot W_{kl}$ مولفه غیرجنبشی تنش و \overline{V}_k^i بیانگر سرعت متوسط در باریکه i ام در جهت k است. همچنین در رابطهی i j مولفه نیرو در جهت k است که توسط ذر k است که توسط ذره j ام وارد می شود.

پس از محاسبهی تکتک جملات تنش از رابطهی (3)، در نهایت برای فشار خواهیم داشت:

$$P = \frac{S_{xx} + S_{yy} + S_{zz}}{2}$$
(4)

در شکل 11 نمودار توزیع فشار در عرض نانوکانال برای مقادیر مختلف از ثابت فنر آورده شده است. مطابق این شکل فشار کلی سیال در مجاورت دیوار بالایی از فشار سیال در نزدیکی دیوار پایینی کمتر است که دلیل آن افزایش فشار سیال در نزدیکی دیوار سرد (دیوار پایینی) به دلیل چگالی بیشتر سیال در ناحیه مذکور است. علاوه بر آن مشاهده میشود که در ناحیه میانی کانال فشار سیال ثابت است و این در حالی است که در نزدیکی دیوار و به دلیل وجود نیروی دیواره مقدار آن در فاصله α/2 ز دیواره به مقدار بیشینه خود



Fig. 11 Distribution of pressure profile for different spring constant شكل 11 توزيع پروفيل فشار براى ضرايب فنر متفاوت



Fig. 13 Variation of heat flux through the gas with variation of the spring constant of the walls

شکل 13 تغییر توزیع شار حرارتی درون گاز با تغییر ثابت فنر دیوار



Fig. 14 Variation of thermal conductivity through the gas with variation of the spring constant of the walls

شکل 14 توزیع ضریب هدایت حرارتی گاز با تغییر ثابت فنر دیوار

هدایت حرارتی را از 0.27 mW/m – K به 0.11 mW/m – K افزایش میدهد.

ژانگ رابطهی (7) را به منظور بیان تغییرات ضریب هدایت حرارتی بر حسب عدد نودسن ارائه داد [17].

$$K_{\rm eff} = \frac{K}{\left(1 + {\rm Kn}\frac{(2-\alpha_T)}{\alpha_T}\frac{(9\gamma-5)}{(\gamma+1)}\right)}$$
(7)

 α_T که در این رابطه و برای گاز آرگون 1.67 = γ و ضریب هدایت گرمایی α_T بسته به نوع سطح متغییر خواهد بود. مطابق رابطهی (7) در 10 = k مقدار ضریب هدایت حرارتی موثر برای 1 = α_T برابر با K – K تغییر می ابد. همانگونه که این مقدار به MW – K برای 2000 برای 2000 ج π_T تغییر می ابد. همانگونه که مشاهده می شود، ضریب هدایت حرارتی برای ثابتهای فنر مختلف در شکل 14 در بازهای بین اعداد ارائه شده توسط ژانگ برای ضرایب هدایت گرمایی مختلف قرار دارد که این ام محالی در محالم شده می ابد. محالیت محاولی مختلف در مخل

5- جمع بندی نتایج

به منظور شبیهسازی انتقال حرارت از دیواره به سیال در روش دینامیک مولکولی، مدل دیوار گرمایی تعاملی به طور گسترده توسط پژوهشگران مورد میرسد. در شکل 12 تغییرات بیشینه فشار گاز در مجاورت دیواره بر حسب ثابت فنر به کار رفته در شبیهسازی آن به نمایش در آمده و مشاهده می شود که با کاهش ثابت فنر اختلاف فشار موجود بین دو ناحیه نزدیک دیواره به مرور افزایش می ابد. مطابق این شکل بیشینه اختلاف فشار تجربه شده توسط گاز در کانال برای $s_s = 1100\varepsilon\sigma^{-2}$ برابر با 18 kPa است که با کاهش ضریب فنر به $s_s = 100\varepsilon\sigma^{-2}$.

4-4- شار عبوری و ضریب انتقال حرارت هدایتی سیال

اعمال ثابتهای فنر متفاوت برای شبیهسازی دیوارهها موجب ایجاد گرادیان و در نتیجه شار گرمایی مختلف بین دو دیوار میگردد. بردار شار گرمایی با استفاده از عبارت ایروینگ-کرکوود مطابق روابط (5) و (6) محاسبه میگردد [16]:

$$J_l = \frac{1}{Vol} \left\langle \sum_i V_l^i E_{\text{tot}}^i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} r_l^{ij} (f^{ij} V^i) \right\rangle \tag{5}$$

$$E_{\text{tot}}^{i} = \frac{1}{2}m^{i}\left((V_{x}^{i})^{2} + (V_{y}^{i})^{2} + (V_{z}^{i})^{2}\right) + \phi^{i}$$
(6)

که در آن علامت جمع برروی تمام اتمهای گاز آرگون انجام شده است. با در نظر گرفتن l به عنوان محور مختصات کارتزین، در روابط فوق V_l^i بیانگر مولفه سرعت ذره i در جهت l میباشد. به علاوه E_{tot}^i و ϕ^i بهترتیب انرژی کل و پتانسیل ذره i میباشند و r_l^{ij} بردار فاصله ذره i از j میباشد. همچنین *f^{ij}* بردار نیروی بین ذرهای اعمالی بر ذره *i* از ذره *j* بوده و *Vⁱ* بردار سرعت ذره i میباشد. مولفهی عمودی شار گرمایی در راستای عمود بر دیوارهها (J_y) ، در شکل 13 به نمایش در آمده است. همچنین گرادیان دمای بوجود آمده در سیال را میتوان از روی پروفیل دمای ارائه شده در شکل 12 برای اختلاف دماهای متفاوت محاسبه نمود. با در نظر گرفتن شار گرمایی در جهت عمود بر دیواره و گرادیان دمای بوجود آمده در عرض کانال، ضریب انتقال حرارت هدایتی سیال از رابطه فوریه محاسبه شده و در شکل 14 به نمایش در آمده است. همانگونه که ملاحظه می شود، ضریب انتقال حرارت هدایتی گاز آرگون با کاهش ثابت فنر اعمالی به دیوار افزایش می یابد. کاهش ضریب فنر به کار رفته در شبیهسازی دیوار با افزایش دامنه نوسانات اتمهای دیوار، امکان حضور اتم گاز در ناحیهای نزدیکتر به دیوار را ایجاد میکند و در نتيجه قابليت انتقال حرارت گاز افزايش مىيابد. همانطور كه مشاهده مىشود، کاهش مقدار ثابت فنر از $k_{
m s}=1100arepsilon\sigma^{-2}$ به $k_{
m s}=100arepsilon\sigma^{-2}$ ضریب



Fig. 12 maximum pressure of gas near upper and bottom wall شکل 12 بیشینه فشار گاز در مجاورت دیوار بالایی و پایینی

استفاده قرار می گیرد. با توجه به استفاده از فنر برای اتصال اتمهای دیوار در این روش میبایست ضریب فنر معادل با مادهی مورد نظر در ساخت دیوار در شبیهسازیها در نظر گرفته شود. در این مقاله با تغییر ضریب فنر به کار رفته در شبیهسازی دیوار در بازهی وسیعی از مقادیر مورد استفاده در ساخت دیوارهها در میکرو/نانوکانالها، اثر تغییر پارامتر مذکور را در شرایطی که نیروی دیواره فضای قابل توجهی از نانوکانال را اشغال مینماید مورد بررسی قرار گرفته است. با کاهش ضریب فنر دیواره، دامنه ارتعاش اتمهای دیوار افزایش یافته بنابراین امکان نزدیکتر شدن اتم گاز به اتم دیواره وجود داشته و این امر انتقال حرارت بین سیال و دیوار را افزایش میدهد. با افزایش ثابت فنر و کاهش دامنه ارتعاش اتمهای دیوار، فاصله نفوذ اتم گاز به نزدیکی ديواره كاهش يافته و اين امر انتقال حرارت را به شدت كاهش مىدهد. در واقع کاهش مقدار ثابت فنر از $s^{-2}=100arepsilon\sigma^{-2}$ به $k_{
m s}=100arepsilon\sigma^{-2}$ ، علاوه بر افزایش شار عبوری از سیال از 0.450 MW/m² به 1.045 MW/m²، ضریب هدایت حرارتی میانگین گاز در عرض نانوکانال را نیز از 0.11 mW/m – K به 0.27 mW/m - K افزایش میدهد. بررسی پروفیل توزیع دما در عرض نانوكانال نشان مىدهد كه افزايش انتقال حرارت مذكور، موجب نزديكتر شدن دمای گاز به دمای دیوار شده و در واقع پرش دمایی موجود بر روی مرز کاهش مییابد. با نزدیکتر شدن دمای گاز به دمای دیوار، چگالی گاز در مجاورت ديوار سرد افزايش و در مجاورت ديوار گرم كاهش مىيابد. در واقع بیشینه اختلاف چگالی تجربه شده توسط گاز در $k_{
m s} = 1100 arepsilon \sigma^{-2}$ برابر با است که با کاهش ضریب فنر به $k_{
m s} = 100 arepsilon \sigma^{-2}$ است که با کاهش ضریب فنر به $k_{
m s} = 100 arepsilon \sigma^{-2}$ 1.57 kg/m³ افزایش می یابد. بررسی نتایج نشان میدهد که برای تمامی ثابتهای فنر به کار رفته در شبیهسازی و مطابق انتظار، توزیع پروفیل فشار در عرض نانوکانال رفتاری مشابه با توزیع پروفیل چگالی از خود نشان میدهد و در آن بیشینه اختلاف فشار تجربه شده توسط گاز بین دیوار سرد و گرم در . و معادل با $k_{
m s}=100arepsilon\sigma^{-2}$ و معادل با $k_{
m s}=100arepsilon$

6- فهرست علايم

- *E* انرژی (J)
- f نیروی بین مولکولی (N)
 - Fs فمتو ثانيه
 - H ارتفاع کانال (nm)
- J بردار شار گرمایی (MW/m²)
- K ضریب انتقال حرارت هدایتی (mW/m K)
 - $\left({
 m J/K}
 ight)$ ثابت بولتزمن $k_{
 m b}$
 - Kn عدد نودسن
 - (N/m) ثابت فنر (N/m)
 - m جرم (kg)
 - nm) شعاع قطع r_C
 - (nm) فاصله اتمها از یکدیگر (nm
 - S تنش (N/m²)
 - T دما (K)
 - V سرعت (m/Sec)
 - (m/Sec) سرعت متوسط \overline{V}
 - (N/m²) مولفه غیرجنبشی تنش (W

- ΔT اختلاف دمای دو دیوار (K) 2D حل دوبعدی
 - 3D حل سەبعدى
 - علائم يوناني
 - ^α ضريب تطابق
 - ۲ ضرفیت گرمایی
- ^ع عمق چاه پتانسیل (J/K)
- (nm) فاصله پویش آزاد مولکولی λ
 - (kgm⁻³) چگالی (kgm⁻³)
 σ
 - σ قطر مولکول (nm) .
 - تابع پتانسيل ϕ

زيرنويسها

- آر گون Ar آرگون-آرگون Ar – Ar جهت محور مختصات k جهت محور مختصات l Т گرمایی Tot کل (مجموع انرژی جنبشی و پتانسیل) ديوار Wall ديوار –آر گون Wall – Ar جهت محور مختصات Х
 - Y جهت محور مختصات
 - Z جهت محور مختصات

بالانويسها

- i شمارنده ذره
- ز شمارنده ذره

7- مراجع

- S. Colin, Rarefaction and compressibility effects on steady and transient gas flows in microchannels, *Microfluidics and Nanofluidics*, Vol. 1, No. 3, pp. 268–279, 2005.
- [2] M. Gad-el-hak, The fluid mechanics of microdevices the freeman scholar lecture, *Journal of Fluids Engineering*, Vol. 121, No. 1, pp. 5–33, 1999.
- [3] G. Karniadakis, A. Beskok, A. Narayan, *Microflows and Nanoflows*, pp. 1-41, New York: Springer-Verlag, 2005.
- [4] R. W. Barber, D. R. Emerson, challenges in modeling gas-phase flow in microchannels: from slip to transition, *Heat Transfer Engineering*, Vol. 27, No. 4, pp. 3–12, 2006.
- [5] G. A. Bird, Recent advances and current challenges for DSMC, *Computers & Mathematics with Applications*, Vol. 35, No. 1–2, pp. 1–14, 1998.
- [6] M. Darbandi, E. Roohi, DSMC simulation of subsonic flow through nanochannels and micro/nano backward-facing steps, *International Communications in Heat and Mass Transfer*, Vol. 38, No. 10, pp. 1443– 1448, 2011.
- [7] Y. Bakhshan, A. Shadloo Jahromi, Molecular dynamic simulation of surface specifics effects on the nanoscale fluid flow, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 5, pp. 176-184, 2015. (in Persian, فارسي)
- [8] M. Barisik, B. Kim, A. Beskok, Smart wall model for molecular dynamics simulations of nanoscale gas flows, *Communications in Computational Physics*, Vol. 7, No. 5, pp. 977–993, 2010.
- [9] M. Barisik, A. Beskok, Equilibrium molecular dynamics studies on nanoscaleconfined fluids, *Microfluidics and Nanofluidics*, Vol. 11, No. 3, pp. 269–282, 2011.

DOR: 20.1001.1.10275940.1396.17.9.26.2

- [14] B. H. Kim, A. Beskok, T. Cagin, Thermal interactions in nanoscale fluid flow: Molecular dynamics simulations with solid-liquid interfaces, *Microfluidics and Nanofluidics*, Vol. 5, No. 4, pp. 551–559, 2008.
- [15] N. Asproulis, D. Drikakis, Boundary slip dependency on surface stiffness, *Physical Review E*, Vol. 81, No. 6, pp. 1–5, 2010.
- [16] J. H. Irving, J. G. Kirkwood, The statistical mechanical theory of transport processes. iv. the equations of hydrodynamics, *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 18, No. 6, pp. 817–829, 1950.
- [17] G. Zhang, Nano/microscale Heat Transfer, Vol. 1, pp. 130-131, New York: McGraw-Hill, 2007.
- [10] M. Barisik, A. Beskok, Molecular dynamics simulations of shear-driven gas flows in nano-channels, *Microfluidics and Nanofluidics*, Vol. 11, No. 5, pp. 611–622, 2011.
- [11] M. Barisik, A. Beskok, Scale effects in gas nano flows, *Physics of Fluids*, Vol. 26, No. 5, pp. 52003, 2014.
- [12] M. Barisik, A. Beskok, Law of the nano-wall in nano-channel gas flows, *Microfluidics and Nanofluidics*, Vol. 20, No. 3, pp. 1–9, 2016.
- [13] Gh. Heidarinejad, R. Rabani, E. Shirani, The effect of wall force field on temperature distribution in nanochannel containing Lennard-Jones fluid by molecular dynamic simulation, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 17, No. 6, pp. 23-31, 2017. (in Persian)