



## بررسی خصوصیات ترموفیزیکی نانوسیالات بر پایه آب-اتیلن گلیکول با استفاده از روش‌های شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیر تعادلی و دینامیک سیالات محاسباتی

میر شهاب‌الدین ایزدخواه<sup>1</sup>، حمید عرفان نیا<sup>2\*</sup>، حامد مرادخانی<sup>1</sup>

1- کارشناسی ارشد، مهندسی شیمی، دانشگاه تبریز، تبریز

2- استادیار، گروه مهندسی شیمی، دانشگاه تبریز، تبریز

\*تبریز، صندوق پستی 5166616471، herfan@tabrizu.ac.ir

### اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 14 فرودین 1395

پذیرش: 27 اردیبهشت 1395

ارائه در سایت: 29 تیر 1395

کلید واژگان:

نانوسیال

اکسید تیتانیوم

دینامیک مولکولی غیر تعادلی

دینامیک سیالات محاسباتی

خواص ترموفیزیکی

### چکیده

نانوسیال ترکیبی است که با افزودن ذرات در مقیاس نانو (100 نانومتر) به یک سیال پایه باهدف بهبود انتقال حرارت حاصل می‌شود. یکی از کاربردهای نانوسیالات، استفاده در سیستم‌های انتقال حرارتی مانند ترانسفورماتورها و رادیاتور اتومبیل می‌باشد. این نانوسیالات باید دارای توانایی بالای انتقال حرارت و در برخی موارد عایق الکتریکی باشند. در این پروژه تحقیقاتی در ترکیب درصدهای مختلف اجزا تشکیل‌دهنده (اکسید تیتانیوم، اتیلن گلیکول و آب)، خواص تأثیرگذار برای نانوسیال به‌منظور بهبود انتقال حرارت مانند هدایت حرارتی، ویسکوزیته و دانسیته توسط روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیر تعادلی و مطالعات نظری مورد بررسی و بحث قرار می‌گیرد. داده‌های خروجی از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی به‌عنوان ورودی روش شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی مورد استفاده قرار گرفت تا تأثیر ترکیب درصدهای مختلف اجزا تشکیل‌دهنده نانوسیال در ضریب انتقال حرارت مورد بررسی قرار گیرد. نتایج به‌دست‌آمده نشان می‌دهد که اضافه کردن نانو ذرات به سیال پایه باعث بهبود هدایت حرارتی نانوسیال و همچنین افزایش دانسیته و ویسکوزیته سیال پایه می‌شود. مطالعات نظری انجام‌گرفته در این زمینه حاکی از دقت بالای شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی می‌باشد. لازم به ذکر است که روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیر تعادلی می‌تواند به‌عنوان روشی مؤثر و دقیق در بررسی نانوسیالات مورد استفاده قرار گیرد. کد استفاده‌شده در شبیه‌سازی‌های رسانش هدایتی، نوع جدید و بهبود یافته‌ای از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیر تعادلی می‌باشد که میزان خطا در شبیه‌سازی‌ها را به مقدار قابل توجهی کاهش می‌دهد. از دیگر مزیت‌های این کد می‌توان به کاهش چشمگیر زمان انجام شبیه‌سازی نسبت به روش‌های مشابه اشاره کرد چون شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی نیازمند صرف زمان زیاد برای انجام شبیه‌سازی‌ها می‌باشند.

## A study on the thermophysical properties of water/ethylene glycol based nanofluids using non-equilibrium molecular dynamics and computational fluid dynamics methods

MirShahabeddin Izadkhan, Hamid Erfan Niya\*, Hamed Moradkhani

Department of Chemical and Petroleum Engineering, University of Tabriz, Tabriz, Iran

\* P.O.B. 5166616471, Tabriz, Iran, herfan@tabrizu.ac.ir

### ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper  
Received 02 April 2016  
Accepted 16 May 2016  
Available Online 20 July 2016

#### Keywords:

Nanofluid  
titanium oxide  
non-equilibrium molecular dynamics  
computational fluid dynamics  
thermophysical properties

### ABSTRACT

Nanofluids are engineered by suspending nanoparticles with average sizes below 100 nm. The ever increasing thermal loads in such applications require advanced operational fluid characteristics, for example, high thermal conductivity dielectric oils in transformers and car radiators. These fluids require high thermal conduction, as well as electrical insulation. In the present work the thermophysical and rheological properties of the nanofluids such as thermal conductivity, viscosity and density are obtained from molecular dynamics simulations. These results serve as initial data for computational fluid dynamics simulations to calculate heat transfer coefficient. The results show that, adding titanium oxide nanosheet in the base fluid enhanced the thermal conductivity and increased the viscosity and density of the base fluid. The theoretical calculations confirmed the molecular dynamics simulation results and the simulation methods accuracy. The computational fluid dynamics results show that increasing the amount of titanium oxide nanosheet in the base fluid increases the heat transfer coefficient and increasing ethylene glycol ratio in base fluid leads to lower heat transfer coefficient. Also, non-equilibrium molecular dynamics method can be used as an effective and accurate method for nanofluids investigation. The coding that is used to obtain the thermal conductivity of nanofluid is a novel and modified type of non-equilibrium molecular dynamics method. By using this coding the error percentages of simulations is decreased. The other advantage of this code is reducing the simulation process, because the molecular dynamics simulations need a long time for processing.

Please cite this article using:

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

M. Sh. Izadkhan, H. Erfan Niya, H. Moradkhani, A study on the thermophysical properties of water /ethylene glycol based nanofluids using non-equilibrium molecular dynamics and computational fluid dynamics methods, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 16, No. 7, pp. 153-162, 2016 (in Persian)

## 1- مقدمه

یکی از ابزارهای توفیق در مسیر توسعه صنعتی، گسترش واحدهای بهره‌برداری و فرآیندی و کمک گرفتن از فناوری‌های روز دنیا جهت غلبه بر چالش‌های موجود هست. نمونه‌ای از چالش‌های عمده در واحدهای صنعتی، بحث انتقال حرارت در تجهیزاتی نظیر مبدل‌ها، راکتورها، ترانسفورماتورها و غیره می‌باشد. در دهه‌های اخیر، سیالات متداول نظیر آب، اتیلن گلیکول، روغن و غیره در سیستم‌های انتقال حرارت مورد استفاده قرار گرفته‌اند. این سیالات متداول، خواص ترموفیزیکی کافی از خود نشان نمی‌دهند که این امر موجب محدود شدن عملکرد سیستم‌های مذکور می‌شود. چگونگی بهبود عملکرد سیالات مورد استفاده در سیستم‌های انتقال حرارتی و به‌طور مشخص، بهبود هدایت حرارتی روزبه‌روز اهمیت بیشتری پیدا می‌کند. یکی از مؤثرترین روش‌ها جهت افزایش هدایت حرارتی، افزودن جامدات در ابعاد نانومتر به سیالات است که این جامدات می‌توانند فلزات، اکسیدهای فلزی، گرافیت و یا نانولوله‌های کربنی باشند. به این سیالات انتقال حرارتی، نانوسیال گفته می‌شود [1,2]. تکنولوژی نانوسیالات به دلیل هدایت حرارتی و توانایی بالاتر انتقال حرارت نسبت به سیالات انتقال حرارت مرسوم و یا سیالات حاوی ذرات در ابعاد میکرو، توجه تعداد زیادی از پژوهشگران را به خود معطوف نموده است. با استفاده از نانوسیالات در تجهیزات صنعتی می‌توان عملکرد حرارتی را به میزان قابل‌توجهی افزایش داد که در این صورت بهره‌وری هم به لحاظ صرفه‌جویی در مصرف انرژی و هم به لحاظ عملکرد بهتر تجهیزات، نصیب واحدهای صنعتی خواهد شد.

استفاده از نانوسیالات جهت انتقال حرارت، می‌تواند نقش مهمی در حوزه‌های گوناگون نظیر سیستم‌های انتقال قدرت و لتاژ بالا، اتومبیل‌ها، سلول‌های خورشیدی، انرژی هسته‌ای، میکروالکترونیک و فرایندهای دارویی و پزشکی ایفا کند. ساخت تجهیزات الکتریکی و الکترونیکی مورد نیاز این حوزه‌ها در ابعاد کوچک‌تر همراه باراندمان بالاتر، نیازمند سیستم‌های انتقال حرارت مؤثرتر جهت عملکرد مطلوب حرارتی آن‌هاست [3-7]. با افزایش روزافزون بار حرارتی در فرایندها و تجهیزات صنعتی، نیاز به سیالات فرایندی پیشرفته‌تر، احساس می‌شود. به‌عنوان مثال روغن‌های هادی حرارتی مورد استفاده در دستگاه‌های الکتریکی توزیع و قدرت مانند ترانسفورماتور، رگلاتور، راکتور، رکتیفایر و سایر دستگاه‌های مربوطه. این سیالات باید علاوه بر دارا بودن هدایت حرارتی بالا، به لحاظ الکتریکی عایق باشند [5,10-8].

یکی از راه‌های مطالعه مکانیسم‌های مؤثر بر خواص نانوسیالات استفاده از مطالعات نظری است. جهت مطالعات نظری خواص نانوسیالات از روش‌های مختلفی مانند شبیه‌سازی مولکولی، دینامیک سیالات محاسباتی و نظریه‌های شیمی و ترمودینامیک سطح می‌توان استفاده کرد [11,12]. مطالعات نظری علاوه بر کمک به فهم بهتر مکانیسم‌های حاکم، در صورت تطابق نتایج با مشاهدات تجربی، می‌تواند به‌عنوان ابزاری مفید جهت بررسی بیشتر و پیش‌بینی خواص نانوسیالات بدون نیاز به انجام آزمایش‌های تجربی مورد استفاده قرار گیرد.

کارهای تحقیقاتی [13,14] گسترده‌ای در مورد نانوسیالات انجام گرفته است. ولی به دلیل گستردگی این تحقیقات به‌مرور چند مورد در این مقاله بسنده شده است. سانکار و همکاران در سال 2008 کار تحقیقاتی با عنوان مدل‌سازی دینامیک مولکولی ضریب هدایت حرارتی بهبودیافته در سوسپانسیون‌های حاوی نانو ذرات فلزی انجام دادند [15]. پیش‌بینی ظرفیت حرارتی و ضریب رسانش حرارتی نانوسیال با ترکیب روش‌های شبیه‌سازی

دینامیک مولکولی تعادلی و غیرتعادلی عنوان مقاله‌ای است که توسط محبی در سال 2012 منتشر شده است [16]. کاربرد دینامیک سیالات محاسباتی برای نانوسیالات عنوان مقاله‌ای است که به‌طور کلی به بررسی روش‌های مدل‌سازی و کاربردهای نانوسیال می‌پردازد. این مقاله در سال 2012 توسط کامیار و همکاران به تحریر درآمده است [11].

در این پروژه تحقیقاتی نوآوری‌هایی در جهت بهبود نتایج حاصل کارهای تحقیقاتی پیشین انجام گرفته است که از جمله آن می‌توان به کد نویسی در جهت بهینه‌سازی روش دینامیک مولکولی غیر تعادلی رسانش هدایتی به‌منظور کاهش میزان خطای شبیه‌سازی و زمان صرف شده برای شبیه‌سازی‌ها اشاره کرد. در روش‌های مشابه به‌منظور به دست آوردن نتیجه مناسب، نیازمند انجام شبیه‌سازی‌های چند یا چند ده نانو ثانیه‌ای می‌باشد که این امر نیازمند صرف زمان بسیار زیاد برای انجام این شبیه‌سازی‌ها است. ولی در روش استفاده‌شده در این پروژه تحقیقاتی، شبیه‌سازی‌ها در 200 پیکوثانیه اول به نتیجه مطلوب و نزدیک به داده‌های آزمایشگاهی می‌رسد. ولی به دلیل حصول اطمینان بیشتر، زمان شبیه‌سازی‌ها کمی بالاتر در نظر گرفته شده است. از طرفی میزان خطا در این شبیه‌سازی‌ها اکثراً به زیر 5% رسیده است که نشانگر دقت بسیار بالای شبیه‌سازی‌ها می‌باشد. ارتباط بین روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با روش دینامیک سیالات محاسباتی نمونه‌ای دیگر از نوآوری‌های این پروژه تحقیقاتی می‌باشد.

در این کار تحقیقاتی نانوسیالات اکسید تیتانیوم تعلق شده در سیال پایه آب-اتیلن گلیکول مورد بررسی قرار گرفته است. این بررسی برای غلظت‌های 1، 2 و 3 درصد نانوذرات در سیال پایه با درصدهای 75/25 و 60/40 و 40/60 اتیلن گلیکول به آب انجام شده است.

## 2- روش‌ها و مدل‌های استفاده‌شده

## 1-1- مدل‌های تئوری

به‌منظور بررسی نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی غیر تعادلی از مدل‌های تئوری ارائه‌شده در منابع استفاده شده است. مدل‌های استفاده‌شده در زیر آورده شده است:

رابطه تئوری ارائه‌شده برای هدایت حرارتی نانوسیالات، که توسط ماکسول [17] ارائه شده است:

$$k_{nf} = k_{bf} \frac{k_s + 2k_{bf} + 2\varphi(k_s - k_{bf})}{k_s + 2k_{bf} - \varphi(k_s - k_{bf})} \quad (1)$$

که در این رابطه  $k_s$ ،  $k_{bf}$ ،  $k_{nf}$  و  $\varphi$  به ترتیب هدایت حرارتی نانوسیال، هدایت حرارتی سیال پایه، هدایت حرارتی نانوذرات و غلظت حجمی نانوذرات در سیال پایه می‌باشند.

دانسیته از روابط پاک و چو [18] به دست می‌آید:

$$\rho_{nf} = (1 - \varphi)\rho_{bf} + \varphi\rho_s \quad (2)$$

که در این روابط  $\rho_{nf}$ ،  $\rho_{bf}$  و  $\rho_s$  به ترتیب دانسیته نانوسیال، سیال پایه و نانوذرات می‌باشند.

$$\mu_{nf} = (1 + 2.5\varphi)\mu_{bf} \quad (3)$$

که در این رابطه  $\mu_{nf}$  و  $\mu_{bf}$  به ترتیب ویسکوزیته نانوسیال و سیال پایه می‌باشند.

## 2-2- شبیه‌سازی غیر تعادلی هدایت حرارتی نانوسیال

در این نوع از شبیه‌سازی ابتدا جعبه‌های شبیه‌سازی در غلظت‌های از پیش

ایوالد [29] استفاده شده است. این روش اولین بار برای محاسبه بخش برد بلند انرژی پتانسیل در مطالعه کریستال‌های یونی با شرایط مرزی متناوب ابداع شد. به دلیل انتخاب شعاع قطع در شبیه‌سازی‌ها که نیروهای الکترواستاتیکی در این محدوده محاسبه می‌شوند و همچنین به دلیل اینکه بعضی نیروهای برد بلند وجود دارند که در فاصله بیشتری از شعاع قطع انجام می‌شوند، برای کاهش این نیروهای برد بلند از روش جمع ایوالد استفاده می‌شود. در این روش به جای اینکه بار نقطه‌ای فرض شود به صورت ابر الکترونی در نظر گرفته می‌شود. همچنین بارها در دو فضای حقیقی و وارون در نظر گرفته می‌شوند که در حالت کلی همدیگر را خنثی می‌کنند و این باعث ایجاد حالت خنثی از نظر بار الکتریکی در جعبه شبیه‌سازی می‌شود [29-31].

### 2-2-1- مکانیسم کد نویسی استفاده شده

مطالعه هدایت حرارتی با استفاده از روش دینامیک مولکولی غیر تعادلی انجام می‌شود. در این روش، ابتدا جعبه شبیه‌سازی در یک جهت مشخص به  $N$  قطعه با ضخامت و حجم یکسان تقسیم می‌شود سپس دمای لحظه‌ای محلی جنبشی در هر قطعه محاسبه شده و پروفایل دما از طریق متوسط گیری زمانی حاصل می‌شود.

ابتدا دو قطعه به عنوان قطعات سرد و گرم در نظر گرفته می‌شوند. سپس، شار حرارتی از طریق معادله بردار سرعت دو اتم موجود در دو قطعه سرد و گرم ایجاد و به سیستم تحمیل می‌شود. این مبادله به گونه‌ای انجام می‌شود که دما در قطعه گرم افزایش و در قطعه سرد کاهش یابد. مکانیسم فوق سبب انتقال انرژی از قطعه سرد به قطعه گرم و ایجاد اختلاف دمایی در قطعه‌ها می‌شود. پس از توقف انجام انتقال حرارت و ثابت شدن دما در قطعات، انتقال انرژی تحمیل شده در اثر مبادله سرعت به وسیله انتقال حرارت در جهت مخالف جبران می‌شود. با معلوم بودن انرژی مبادله شده و گرادیان دمایی باقیمانده در سیستم، هدایت حرارتی از نسبت انرژی به گرادیان محاسبه می‌شود. این مقدار از فرمول زیر بدست می‌آید [32].

$$\lambda = - \frac{\sum_{\text{transfers}} (v_h^2 - v_c^2) \frac{M}{2}}{2tL_x L_y \left( \frac{\partial T}{\partial z} \right)} \quad (7)$$

که در آن  $v_c$  و  $v_h$  مربوط به سرعت ذرات گرم و سرد می‌باشد و  $L_x$  و  $L_y$  مربوط به منطقه عمود بر بعد انتقال حرارت،  $t$  مربوط به زمان شبیه‌سازی و  $M$  هم مربوط به جرم مولکولی ذرات می‌باشد.  $z$  نشان دهنده بعد مختصاتی می‌باشد و  $T$  نیز از رابطه 8 به دست می‌آید. نحوه عملکرد در شکل 1 آورده شده است.

$$T = \frac{1}{3n_k k_B} \sum_{i \in k} M_i v_i^2 \quad (8)$$

$M_i$  و  $v_i$  به ترتیب نشان دهنده سرعت و جرم مولکولی ذره  $i$ ،  $n_k$  نشان دهنده تعداد اتم‌ها در قطعه  $k$  و در نهایت  $k_B$  نشان دهنده ثابت بولتزمن می‌باشند.

### 2-2-3- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیر تعادلی خواص رئولوژیکی و دانسیته

در این قسمت شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیر تعادلی [25, 33, 34] برای به دست آوردن ویسکوزیته و دانسیته نانوسیال مورد بحث و بررسی قرار گرفته است.

شبیه‌سازی از نوع دینامیکی می‌باشد و ترتیب شبیه‌سازی‌ها به این منوال

تعیین شده ساخته می‌شود. برای ساخت جعبه شبیه‌سازی از مولکول‌های آب، اتیلن گلیکول و اکسید تیتانیوم بهینه شده استفاده شده است. برای شبیه‌سازی ضریب رسانش هدایتی کد نویسی در جهت بهبود روش‌های قبلی دینامیک مولکولی غیر تعادلی انجام گرفت. با توجه به مکانیسم کد استفاده شده در صرفه نظر کردن از دو بعد و انجام شبیه‌سازی برای بعد سوم، نوع جعبه از نوع تتراگونال انتخاب شد و جهتی که محاسبه هدایت حرارتی انجام می‌گیرد سه برابر جهات دیگر که صرف نظر می‌شود در نظر گرفته شد.

مکانیسمی که در شبیه‌سازی‌های هدایت حرارتی استفاده شده است به این نحو است که ابتدا  $1 \text{ ns}$  صرف به تعادل رسانی جعبه شبیه‌سازی می‌شود، بدین منظور از شبیه‌سازی دینامیکی استفاده شده است که نوع هنگردش از نوع هنگرد کانونیک است. در این نوع هنگرد دما، حجم و تعداد ذرات در جعبه شبیه‌سازی ثابت نگاه داشته می‌شود. به منظور ثابت نگاه داشتن دما یک ترموستات به سیستم شبیه‌سازی وصل می‌شود که با سیستم تبادل جزئی گرمایی می‌کند تا دما را ثابت نگه دارد. نوع ترموستاتی که در این شبیه‌سازی‌ها استفاده شده است نوز-هوفر می‌باشد. برای ایجاد شرایط واقعی و اعمال برهم کنش‌ها و پیوندها و شرایط محیطی، میدان نیروی کامپس [20] که هم‌خوانی بیشتری با نوع نانوسیال استفاده شده داشت انتخاب شد [21]. این نوع میدان نیرو برای مواد آلی، محلول‌های آبی، سوسپانسیون‌ها و مواد پلیمری ارائه شده است و نتایج به دست آمده از آن نیز دقیق و دارای کمترین میزان خطا نسبت به سایر میدان‌های نیرو می‌باشد. در این تابع، میدان نیرو از مجموع انرژی‌های پیوندی، غیر پیوندی و ممزوج به دست می‌آید [22].

بخش بعدی در شبیه‌سازی‌ها، انتخاب نوع پتانسیل مورد استفاده در شبیه‌سازی‌ها می‌باشد. بدین منظور از پتانسیل لنارد-جونز استفاده شده است. این پتانسیل نخستین بار توسط لنارد-جونز برای مطالعه خواص ترمودینامیکی گازهای نجیب به ویژه ضرایب ویریال پیشنهاد شد و از آن به بعد برای مطالعه سیستم‌های متنوعی به کار رفته است. پتانسیل لنارد جونز متداول‌ترین شکل این پتانسیل است که به صورت زیر نوشته می‌شود [23-25].

$$\phi(r_{ij}) = \begin{cases} 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] & (r_{ij} < r_{\text{cut}}) \\ 0 & (r_{ij} \geq r_{\text{cut}}) \end{cases} \quad (4)$$

که در آن  $\epsilon$  پارامتر انرژی و  $\sigma$  پارامتر طول است و از روابط زیر حاصل می‌شوند [26]:

$$\sigma_{ij} = \frac{(\sigma_{ii} + \sigma_{jj})}{2} \quad (5)$$

$$\epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_{ii} \epsilon_{jj}} \quad (6)$$

مقدار در نظر گرفته شده برای شعاع قطع در شبیه‌سازی‌ها  $18 \text{ \AA}$  می‌باشد و همچنین نرم‌افزار با توجه به اطلاعاتی که در پایگاه داده خود نسبت به مقادیر  $\epsilon$  و  $\sigma$  برای هر یک از اجزا تشکیل دهنده نانوسیال دارد به محاسبه کلی آن‌ها مطابق روابط (5) و (6) و جاگذاری در معادله اصلی لنارد جونز (فرمول 4) می‌پردازد. مقادیر  $\epsilon$  و  $\sigma$  برای مواد خالص در منابع [27] موجود می‌باشد.

پتانسیل لنارد جونز مناسب‌ترین نوع پتانسیل برای استفاده در محلول‌های آبی یا محلول‌هایی که بخش قابل توجه ساختار آن آب است، می‌باشد و همچنین استفاده از این نوع پتانسیل برای سوسپانسیون‌ها میزان خطا در شبیه‌سازی‌ها را به اندازه قابل توجهی کاهش می‌دهد [21, 26, 28].

پارامتر مهم بعدی در شبیه‌سازی‌ها بخش مربوط به نیروهای الکترواستاتیکی می‌باشد. بدین منظور در این شبیه‌سازی‌ها از روش جمع

#### 4-2- شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی

به‌منظور بررسی خواص انتقال حرارت نانوسیال موردبیت در این کار تحقیقاتی، سیستم رادیاتور اتومبیل طراحی و در شبیه‌سازی‌ها مورداستفاده قرار گرفت که در شکل 3 آورده شده است. طراحی به‌وسیله نرم‌افزار گمبیت<sup>1</sup> و باکیفیت مش بندی بسیار بالا صورت پذیرفت. ورودی سیستم از نوع سرعت ورودی<sup>2</sup> و خروجی از نوع جریان خروجی<sup>3</sup> انتخاب گردید. سیستم بعد از طراحی به نرم‌افزار فلونت<sup>4</sup> انتقال داده شد. نانوسیال با دمای ورودی 343.15 K وارد رادیاتور شده و رادیاتور در مجاورت هوای بیرون قرار گرفت. تأثیر سرعت ورودی نانوسیال بر روی ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی و عدد ناسلت دیگر پارامتری بود که موردبررسی قرار گرفت.

#### 1-4-2- مدل‌های استفاده‌شده در شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی

##### 1-1-4-2- معادله مومنتم سه‌بعدی

معادله حرکت در راستای  $x$ ،  $y$  و  $z$  به‌صورت ذیل می‌باشد:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \frac{\partial(-p + \tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial\tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial\tau_{zx}}{\partial z} + S_{Mx} \quad (9)$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \frac{\partial(-p + \tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial\tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial\tau_{zy}}{\partial z} + S_{My} \quad (10)$$

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = \frac{\partial(-p + \tau_{zz})}{\partial z} + \frac{\partial\tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial\tau_{yz}}{\partial y} + S_{Mz} \quad (11)$$

که در این معادلات  $S_{Mx} = S_{My} = 0$  و  $S_{Mz} = -\rho g$  می‌باشد [35].

##### 2-1-4-2- معادلات انرژی

معمولاً انرژی سیال، مجموع انرژی داخلی، انرژی جنبشی و انرژی پتانسیل می‌باشد. این تعریف، این دیدگاه را ایجاد می‌کند که ذرات سیال، انرژی پتانسیل گرانشی را ذخیره می‌کنند. این نیز امکان‌پذیر است که انرژی جنبشی یک نیروی وارد بر حجم تلقی شده و با انجام کار روی ذرات سیال باعث حرکت آن‌ها می‌شود.

مقدار انرژی در واحد حجم بر زمان را  $S_E$  تعریف می‌کنیم. بقای انرژی ذرات سیال از مجموع کار خالص انجام‌شده روی ذرات سیال، نرخ خالص حرارت منتقل‌شده به سیال و انرژی پتانسیل گرانشی به دست می‌آید.

$$\rho \frac{DE}{Dt} = [-\text{div}(pu)] + \left[ \frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} + \frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} + \frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(w\tau_{zz})}{\partial z} \right] \quad (12)$$

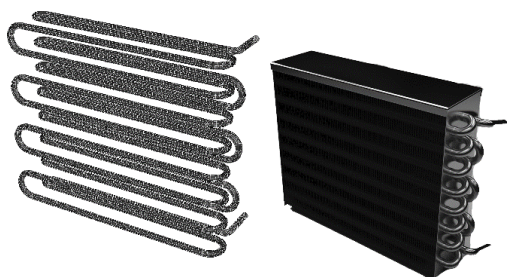


Fig. 3 The simulation system

شکل 3 سیستم شبیه‌سازی

<sup>1</sup> Gambit  
<sup>2</sup> Velocity inlet  
<sup>3</sup> Outflow  
<sup>4</sup> Fluent

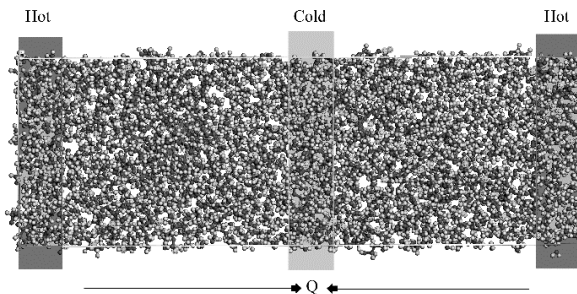


Fig. 1 The non-equilibrium molecular dynamics simulation method to obtain the thermal conductivity of nanofluid

شکل 1 روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیر تعادلی برای به دست آوردن هدایت حرارتی نانوسیال

است که ابتدا 1 ns شبیه‌سازی دینامیک مولکولی از نوع هنگرد دما ثابت استفاده می‌شود که این مرحله مربوط به تعادل رسانی سیستم می‌باشد. سپس برای به دست آوردن دانسیته نانوسیال 1 ns شبیه‌سازی از نوع دینامیک مولکولی از نوع دما و فشار ثابت استفاده شده است. سپس برای 1 ns شبیه‌سازی تنش برای به دست آوردن ویسکوزیته نانوسیال انجام شده است.

##### 1-3-2- مکانیسم استفاده‌شده

روش شبیه‌سازی مورد استفاده از نوع غیر تعادلی با تنش برشی (1/s) می‌باشد.

نوع شبیه‌سازی بدین منوال است که شرایط مرزی از نوع پرپودیک در نظر گرفته می‌شود و هر جعبه توسط جعبه‌های هم‌اندازه احاطه شده که این جعبه‌ها در تمامی جهات ادامه دارند.

همان‌طور که در شکل 2 نشان داده شده است، جعبه‌های بالایی و پایینی در جهت‌های مشخص شده حرکت داده می‌شوند و این باعث ایجاد یک حالت چرخشی در جعبه شبیه‌سازی می‌شود و باعث می‌شود وقتی ذره‌ای جعبه شبیه‌سازی را از نقطه  $p$  ترک می‌کند به‌جای اینکه از نقطه  $p'$  جایگزین شود از نقطه  $p''$  جایگزین می‌شود. برای ذرات دیگر هم این اتفاق می‌افتد. با اعمال حرکت به جعبه شبیه‌سازی و نحوه حرکت ذرات نرم‌افزار ویسکوزیته سیستم را تعیین می‌کند [25].

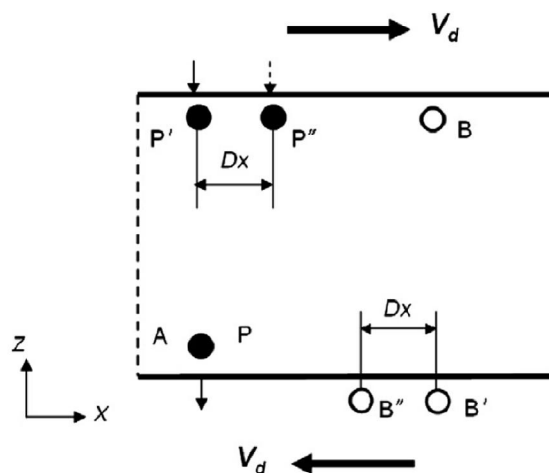


Fig. 2 The non-equilibrium molecular dynamics simulation method for viscosity and density

شکل 2 روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیر تعادلی برای ویسکوزیته و دانسیته

ناسلت (Nu) می‌باشد که از معادله زیر به دست می‌آید:

$$Nu = \frac{h(x) \cdot D}{k} \quad (18)$$

که  $D$  و  $k$  به ترتیب نشان‌دهنده قطر لوله و رسانش هدایتی سیال می‌باشند [35].

### 3- نتایج و بحث‌ها

#### 3-1- هدایت حرارتی نانوسیال

شبیه‌سازی‌های انجام‌گرفته در این قسمت متشکل از دو مرحله می‌باشد، مرحله اول مربوط به تعادل رسانی سیستم شبیه‌سازی می‌باشد که در بازه زمانی 1 نانوثانیه انجام‌گرفته است. همچنین با توجه به اینکه وقتی اجزا تشکیل‌دهنده نانوسیال در داخل جعبه شبیه‌سازی در کنار یکدیگر قرار می‌گیرند برهمکنش بین ذرات باعث افزایش انرژی سیستم، در نتیجه خروج سیستم از تعادل می‌شود. بنابراین ایجاد تعادل در سیستم‌های شبیه‌سازی امری ضروری قبل از انجام شبیه‌سازی اصلی است. نتایج حاصل در این قسمت مؤید ایجاد پایداری مناسب انرژی در جعبه‌های شبیه‌سازی بعد از 40 ps اول در پروسه شبیه‌سازی‌هاست.

بعد از به تعادل رسانی سیستم نوبت به مرحله اصلی شبیه‌سازی‌ها که همان شبیه‌سازی هدایت حرارتی نانوسیالات است، می‌رسد. نتایج صحت‌کد استفاده‌شده و ایجاد گرادیان دمایی مطابق اصول استفاده‌شده در شبیه‌سازی که همان شبیه‌سازی غیر تعادلی است را تأیید می‌کند.

نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی غیر تعادلی (متوسط گیری از سه بار شبیه‌سازی) و مقایسه آن‌ها با نتایج آزمایشگاهی [36] برای سیال پایه، در جدول 1 و مقایسه با نتایج حاصل از مدل تئوری برای نانوسیال مورد استفاده، در جدول 2 آورده شده است.

تأثیر نانوذرات اکسید تیتانیوم بر روی هدایت حرارتی نانوسیال مورد بررسی قرار گرفت. درسیال با دمای 343.15 K، با افزودن 1، 2 و 3 درصد از نانو ذرات اکسید تیتانیوم به سیال پایه آب (75%-) اتیلن گلیکول (25%)، هدایت حرارتی به ترتیب 0.026، 0.052 و 0.080 درصد افزایش می‌یابد. همچنین درسیال با دمای 343.15 K، با افزودن 1، 2 و 3 درصد از نانو ذرات اکسید تیتانیوم به سیال پایه آب (60%-) اتیلن گلیکول (40%)، هدایت حرارتی به ترتیب 0.027، 0.055 و 0.083 درصد افزایش می‌یابد. به‌طور مشابه در همان دما و با افزودن 1، 2 و 3 درصد از نانو ذرات اکسید تیتانیوم به سیال پایه آب (40%-) اتیلن گلیکول (60%)، هدایت حرارتی به ترتیب

جدول 1 نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی غیر تعادلی و نتایج

آزمایشگاهی [36] برای هدایت حرارتی سیال پایه

**Table 1** The obtained results for thermal conductivity of base fluids by non-equilibrium molecular dynamics (NEMD) simulations and experimental [36] results

رسانش هدایتی (W/mK)			
سیال‌ها	درصد	دینامیک	نتایج
	خطا	مولکولی	آزمایشگاهی
			[36]
سیال پایه 1: آب (75%-) اتیلن گلیکول (25%)	5.20%	0.563	0.5940
سیال پایه 2: آب (60%-) اتیلن گلیکول (40%)	6.25%	0.4020	0.4288
سیال پایه 3: آب (40%-) اتیلن گلیکول (60%)	2.93%	0.3401	0.3504

در این معادله  $E = i + \frac{1}{2}(u^2 + v^2 + w^2)$  می‌باشد.

معادله (12) یک معادله کاملاً مناسب برای انرژی و یک روش معمول برای محاسبه انرژی جنبشی و به‌دست آوردن معادله‌ای برای انرژی داخلی  $i$  یا دما می‌باشد. بخشی از معادله انرژی مربوط به انرژی جنبشی از مجموع ضرب معادله حرکت در جهت  $x$  با مؤلفه سرعت  $u$ ، معادله حرکت در جهت  $y$  با مؤلفه سرعت  $v$  و معادله حرکت در جهت  $z$  با مؤلفه سرعت  $w$  به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \rho \frac{D}{Dt} \left( \frac{1}{2}(u^2 + v^2 + w) \right) &= [-u \cdot \text{grad}(p)] \\ &+ u \left[ \frac{\partial(\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(\tau_{zx})}{\partial z} \right] \\ &+ v \left[ \frac{\partial(\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(\tau_{zy})}{\partial z} \right] \\ &+ w \left[ \frac{\partial(\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(\tau_{zz})}{\partial z} \right] \\ &+ u \cdot S_M \end{aligned} \quad (13)$$

با کم کردن رابطه (13) از (12) و معرفی ترم جدید  $S_M = S_E - u \cdot S_M$

معادله انرژی داخلی به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \rho \frac{D_i}{Dt} &= [-p \cdot \text{div}(u)] + \text{div}(k) \text{grad}(T) + \tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} \\ &+ \tau_{yx} \frac{\partial u}{\partial y} + \tau_{zx} \frac{\partial u}{\partial z} + \tau_{xy} \frac{\partial v}{\partial x} \\ &+ \tau_{yy} \frac{\partial v}{\partial y} + \tau_{zy} \frac{\partial v}{\partial z} + \tau_{xz} \frac{\partial w}{\partial x} \\ &+ \tau_{yz} \frac{\partial w}{\partial y} + \tau_{zz} \frac{\partial w}{\partial z} + S_i \end{aligned} \quad (14)$$

برای حالت خاصی از سیال تراکم‌ناپذیر:

$i = cT$  که  $c$  گرمای ویژه و  $\text{div}.u=0$  می‌باشد. این اجازه می‌دهد تا

معادله (14) را به معادله درجه حرارت بازنویسی کنیم [35]:

$$\begin{aligned} \rho c \frac{DT}{Dt} &= \text{div}(k) \text{grad}(T) + \tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_{yx} \frac{\partial u}{\partial y} \\ &+ \tau_{zx} \frac{\partial u}{\partial z} + \tau_{xy} \frac{\partial v}{\partial x} \\ &+ \tau_{yy} \frac{\partial v}{\partial y} + \tau_{zy} \frac{\partial v}{\partial z} \\ &+ \tau_{xz} \frac{\partial w}{\partial x} + \tau_{yz} \frac{\partial w}{\partial y} \\ &+ \tau_{zz} \frac{\partial w}{\partial z} + S_i \end{aligned} \quad (15)$$

#### 2-4-2- روش‌های حل عددی در دینامیک سیالات محاسباتی

ضریب انتقال حرارت ( $h$ ) به‌عنوان یک پارامتر که نشان‌دهنده میزان توانایی انتقال حرارت می‌باشد از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$h = \frac{q}{(T_s(x) - T_f(x))} \quad (16)$$

که  $x$  نشان‌دهنده فاصله از ورودی سیستم موردنظر،  $q$  نشان‌دهنده میزان شار گرمایی و  $T_s$  و  $T_f$  به ترتیب نشان‌دهنده گرمای دیواره و گرمایی که از رابطه (17) محاسبه می‌شود، می‌باشند.

$$T_f = T_{in} + \frac{E(x)}{MC_p} \quad (17)$$

که  $C_p$  نشان‌دهنده ظرفیت گرمایی،  $M$  و  $E(x)$  به ترتیب نشان‌دهنده دبی جرمی و میزان انرژی در ناحیه  $x$  می‌باشند.

دیگر پارامتر مهم که در این پروژه تحقیقاتی موردبررسی قرارگرفت، عدد

**جدول 4** نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی و مدل تئوری برای دانسیته نانوسیال

**Table 4** The obtained results for density of nanofluids by non-equilibrium molecular dynamics simulations and theoretical model

سیال‌ها	درصد خطا	دینامیک مولکولی	مدل تئوری
اکسید تیتانیوم 1% در سیال پایه 1	3.26%	1002.31	1036.09
اکسید تیتانیوم 2% در سیال پایه 1	3.01%	1036.22	1068.45
اکسید تیتانیوم 3% در سیال پایه 1	2.92%	1068.65	1100.80
اکسید تیتانیوم 1% در سیال پایه 2	4.46%	1025.34	1073.22
اکسید تیتانیوم 2% در سیال پایه 2	4.57%	1051.75	1102.20
اکسید تیتانیوم 3% در سیال پایه 2	4.46%	1086.39	1137.18
اکسید تیتانیوم 1% در سیال پایه 3	4.78%	1046.39	1098.87
اکسید تیتانیوم 2% در سیال پایه 3	5.09%	1072.96	1130.59
اکسید تیتانیوم 3% در سیال پایه 3	4.29%	1112.39	1162.30

نتایج آزمایشگاهی [36] برای سیال پایه، در جداول 3 و 5 و مقایسه با نتایج حاصل از مدل تئوری برای نانوسیال مورد استفاده، در جداول 4 و 6 آورده شده است.

تأثیر نانو ذرات اکسید تیتانیوم بر روی دانسیته نانوسیال مورد بررسی قرار گرفت. در سیال با دمای  $343.15\text{ K}$ ، با افزودن 1، 2 و 3 درصد از نانو ذرات اکسید تیتانیوم به سیال پایه آب (75%) - اتیلن گلیکول (25%)، دانسیته به ترتیب 0.046، 0.081 و 0.116 درصد افزایش می‌یابد. همچنین در سیال با دمای  $343.15\text{ K}$ ، با افزودن 1، 2 و 3 درصد از نانو ذرات اکسید تیتانیوم به سیال پایه آب (60%) - اتیلن گلیکول (40%)، دانسیته به ترتیب 0.041، 0.068 و 0.103 درصد افزایش می‌یابد. به‌طور مشابه در همان دما و با افزودن 1، 2 و 3 درصد از نانو ذرات اکسید تیتانیوم به سیال پایه آب (40%) - اتیلن گلیکول (60%)، دانسیته به ترتیب 0.023، 0.049 و 0.087 درصد افزایش می‌یابد.

تأثیر نانوذرات اکسید تیتانیوم بر روی ویسکوزیته نانوسیال مورد بررسی قرار گرفت. در سیال با دمای  $343.15\text{ K}$ ، با افزودن 1، 2 و 3 درصد از نانو ذرات اکسید تیتانیوم به سیال پایه آب (75%) - اتیلن گلیکول (25%)، ویسکوزیته به ترتیب 0.02، 0.041 و 0.06 درصد افزایش می‌یابد همچنین در سیال با دمای  $343.15\text{ K}$ ، با افزودن 1، 2 و 3 درصد از نانو ذرات اکسید تیتانیوم به سیال پایه آب (60%) - اتیلن گلیکول (40%)، ویسکوزیته به ترتیب

**جدول 5** نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی غیر تعادلی و نتایج

آزمایشگاهی [36] برای ویسکوزیته سیال پایه

**Table 5** The obtained results for viscosity of base fluids by non-equilibrium molecular dynamics simulations and experimental [36] results

سیال‌ها	درصد خطا	دینامیک مولکولی	نتایج آزمایشگاهی [36]
سیال پایه 1: آب (75%) - اتیلن گلیکول (25%)	19.80%	0.00900	0.00751
سیال پایه 2: آب (60%) - اتیلن گلیکول (40%)	10.30%	0.00126	0.00113
سیال پایه 3: آب (40%) - اتیلن گلیکول (60%)	11.46%	0.00139	0.00157

**جدول 2** نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی غیر تعادلی و مدل تئوری برای هدایت حرارتی نانوسیال

**Table 2** The obtained results for thermal conductivity of nanofluids by non-equilibrium molecular dynamics (NEMD) simulations and theoretical model

سیال‌ها	درصد خطا	دینامیک مولکولی	مدل تئوری
اکسید تیتانیوم 1% در سیال پایه 1	5.85%	0.574	0.6095
اکسید تیتانیوم 2% در سیال پایه 1	5.48%	0.591	0.6253
اکسید تیتانیوم 3% در سیال پایه 1	4.25%	0.614	0.6413
اکسید تیتانیوم 1% در سیال پایه 2	4.49%	0.4206	0.4404
اکسید تیتانیوم 2% در سیال پایه 2	4.42%	0.4323	0.4523
اکسید تیتانیوم 3% در سیال پایه 2	4.69%	0.4426	0.4644
اکسید تیتانیوم 1% در سیال پایه 3	2.77%	0.3501	0.3601
اکسید تیتانیوم 2% در سیال پایه 3	2.64%	0.3602	0.3700
اکسید تیتانیوم 3% در سیال پایه 3	1.97%	0.3726	0.3801

0.028، 0.06 و 0.085 درصد افزایش می‌یابد.

نتایج حاصل از شبیه‌سازی و محاسبات تئوری دارای روند یکسان و نزدیک به هم می‌باشند. مقایسه نتایج باهم و به دست آوردن میزان خطای شبیه‌سازی‌ها ایده آل نیست چون خود مدل‌های تئوری دارای میزان خطایی نسبت به نتایج آزمایشگاهی می‌باشند ولی به دلیل در دسترس نبودن داده‌های آزمایشگاهی برای نانوسیال استفاده‌شده و همچنین صرفاً به‌منظور مقایسه روند نتایج از این مدل استفاده شده است. نتایج حاصل از شبیه‌سازی سختیت بسیار زیادی با نتایج مدل استفاده‌شده دارند و میزان خطای بسیار پایینی را نشان می‌دهند که با توجه به کارهای تحقیقاتی که قبلاً انجام گرفته نتایج بسیار مناسب می‌باشند. افزودن نانو ذرات به سیال پایه باعث افزایش حرکت‌های براونی در سیستم و همچنین افزایش میزان نفوذ در سیستم نانوسیالات شده، در نتیجه باعث افزایش میزان هدایت حرارتی نانوسیال می‌شود که این میزان افزایش در دماهای بالاتر به دلیل تابعیت حرکت‌های براونی و نفوذ از دما، محسوس‌تر می‌باشد.

### 3-2- دانسیته و ویسکوزیته نانوسیال

نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی غیر تعادلی (متوسط گیری از سه بار شبیه‌سازی) برای دانسیته و ویسکوزیته و مقایسه آن‌ها با

**جدول 3** نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی و نتایج آزمایشگاهی

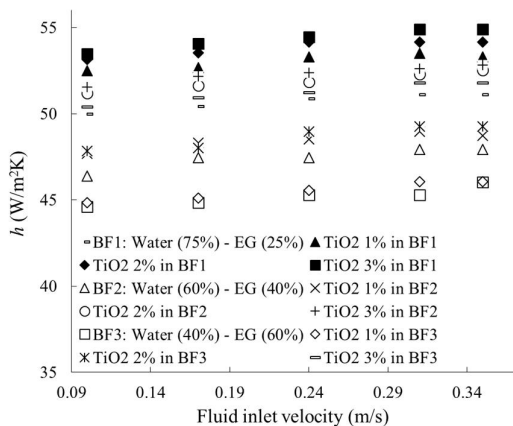
[36] برای دانسیته سیال پایه

**Table 3** The obtained results for density of base fluids by non-equilibrium molecular dynamics simulations and experimental [36] results

سیال‌ها	درصد خطا	دینامیک مولکولی	نتایج آزمایشگاهی [36]
سیال پایه 1: آب (75%) - اتیلن گلیکول (25%)	4.56%	957.94	1003.74
سیال پایه 2: آب (60%) - اتیلن گلیکول (40%)	5.40%	984.95	1041.24
سیال پایه 3: آب (40%) - اتیلن گلیکول (60%)	4.14%	1022.90	1067.14

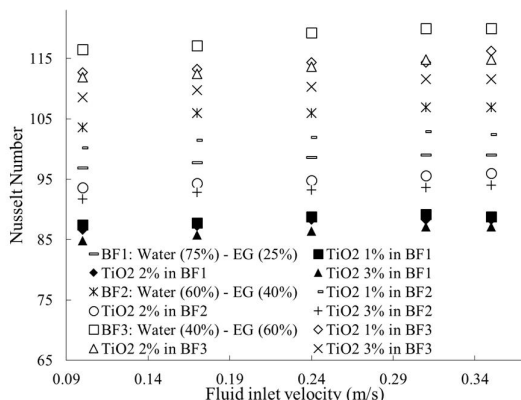
جدول 6 نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی غیر تعادلی و مدل تئوری برای ویسکوزیته نانوسیال

است. گرادیان سرعت ایجاد شده در سیستم شبیه‌سازی در شکل 6 آورده شده است.



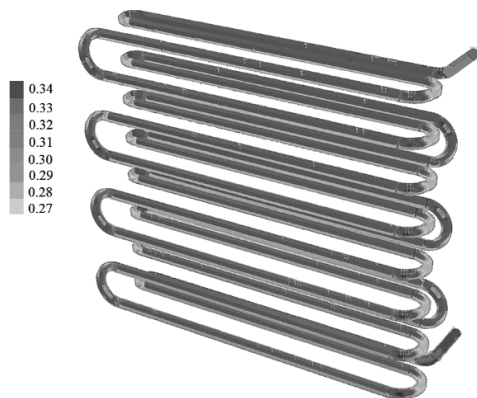
شکل 4 نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های دینامیک سیالات محاسباتی برای ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی

Fig. 4 The computational fluid dynamics simulation results for nanofluids heat transfer coefficient



شکل 5 نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های دینامیک سیالات محاسباتی برای عدد ناسلت.

Fig. 5 The computational fluid dynamics simulation results for nanofluids Nusselt numbers.



شکل 6 گرادیان سرعت (M/s) ایجاد شده در سیستم شبیه‌سازی

شکل 6 گرادیان سرعت (M/s) ایجاد شده در سیستم شبیه‌سازی

Table 6 The obtained results for viscosity of nanofluids by non-equilibrium molecular dynamics simulations and theoretical model

ویسکوزیته (kg/m·s)		درصد	سیال‌ها
مدل	دینامیک مولکولی	خطا	
0.00770	0.00918	19.21%	اکسید تیتانیوم 1% در سیال پایه 1
0.00790	0.00937	18.62%	اکسید تیتانیوم 2% در سیال پایه 1
0.00812	0.00954	17.48%	اکسید تیتانیوم 3% در سیال پایه 1
0.00116	0.00129	11.20%	اکسید تیتانیوم 1% در سیال پایه 2
0.00119	0.00131	10.08%	اکسید تیتانیوم 2% در سیال پایه 2
0.00122	0.00141	15.57%	اکسید تیتانیوم 3% در سیال پایه 2
0.00161	0.00143	11.18%	اکسید تیتانیوم 1% در سیال پایه 3
0.00165	0.00151	8.48%	اکسید تیتانیوم 2% در سیال پایه 3
0.00169	0.00162	4.14%	اکسید تیتانیوم 3% در سیال پایه 3

به‌طور مشابه در همان دما و افزودن 1، 2 و 3 درصد از نانو ذرات اکسید تیتانیوم به سیال پایه آب (40%) - اتیلن گلیکول (60%)، ویسکوزیته به ترتیب 0.029، 0.086 و 0.165 درصد افزایش می‌یابد. بررسی نتایج بیانگر کاهش ویسکوزیته و دانسیته با افزایش دما و افزایش آن‌ها با بیشتر شدن سهم اتیلن گلیکول در سیال پایه است. نتایج دینامیک مولکولی قرابت بسیار نزدیکی با داده‌های آزمایشگاهی را نشان می‌دهند. نتایج نشان می‌دهند که ویسکوزیته و دانسیته نانوسیال با افزایش میزان نانو ذرات سیر صعودی به خود می‌گیرند و همچنین با افزایش دما دانسیته و ویسکوزیته نانوسیالات کاهش پیدا می‌کنند. با افزایش دما سرعت حرکت ذرات زیادتر شده و باعث ایجاد یک حالت گستردگی در فاصله بین ذرات می‌شود و حجم سیستم افزایش می‌یابد در نتیجه دانسیته سیستم سیر نزولی به خود می‌گیرد. در مورد ویسکوزیته نانوسیالات هم می‌توان متذکر شد مایعات گرم ویسکوزیته کمتری نسبت به مایعات سرد دارند و دلیل آن لغزیدن راحت‌تر مولکول‌های تشکیل‌دهنده نانوسیال در اثر افزایش دما می‌باشد. البته به‌منظور بررسی دما باید داده‌های خروجی از شبیه‌سازی در طول به تعادل رسانی دما مورد بررسی قرار گیرد، ولی به دلیل تعداد بسیار زیاد داده‌ها به ذکر نتیجه بسنده شده است.

### 3-3- شبیه‌سازی‌های دینامیک سیالات محاسباتی

شبیه‌سازی‌های دینامیک سیالات محاسباتی برای ترکیب درصدهای مختلف نانوسیال و سیال پایه انجام گرفت. نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌ها برای ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی در شکل 4 آورده شده است.

بررسی نتایج نشان می‌دهد که افزایش میزان اتیلن گلیکول در سیال پایه باعث کاهش قابل توجه ضریب انتقال حرارت، و در نتیجه کاهش توانایی انتقال حرارت در سیال انتقال حرارتی می‌شود. افزودن نانوذره‌های اکسید تیتانیوم به سیال پایه باعث افزایش میزان ضریب انتقال حرارت و در نتیجه باعث بهبود توانایی انتقال حرارت در سیال انتقال حرارتی می‌شود. نانوسیالاتی که میزان نانو ذرات در آن زیاد است و سهم اتیلن گلیکول در سیال پایه آن کم است دارای توانایی بالاتر انتقال حرارتی می‌باشند. افزایش سرعت ورودی نانوسیالات به سیستم موردنظر باعث افزایش میزان ضریب انتقال حرارت شده و در نتیجه توانایی انتقال حرارت در آن را بهبود می‌دهد.

نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌ها برای عدد ناسلت در شکل 5 آورده شده



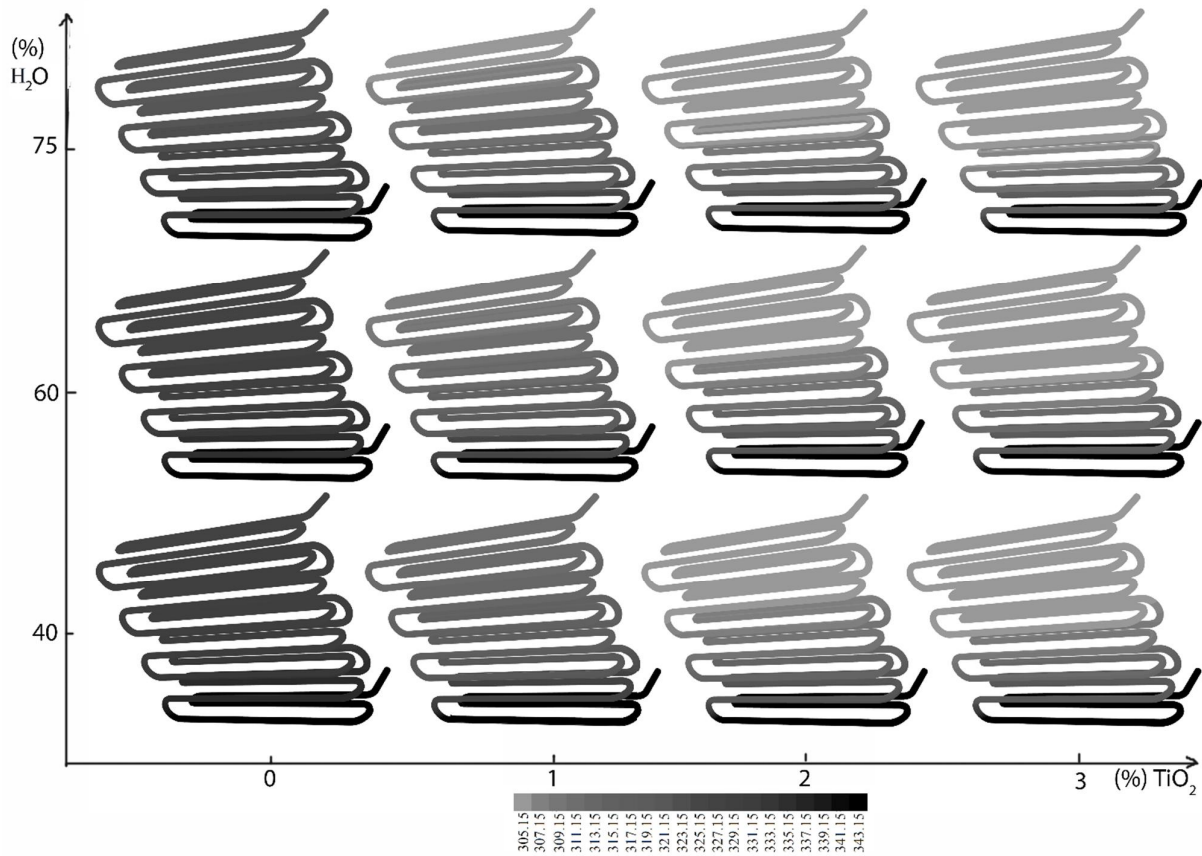


Fig. 7 The temperature gradient (K) in the simulations systems

شکل 7 گرادیان دمایی (K) ایجادشده در سیستم‌های شبیه‌سازی

با افزایش سرعت و غلظت، ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی افزایش می‌یابد که این افزایش به دلیل حرکت براونی نانوذرات، نفوذ حرارتی و ترموفورز می‌باشد [37].

با افزایش درصد اتیلن گلیکول عدد ناسلت به‌طور کلی افزایش می‌یابد. و این افزایش به دلیل پایین بودن رسانش گرمایی ( $k$ ) اتیلن گلیکول نسبت به آب می‌باشد.

با توجه به رابطه عدد ناسلت  $Nu = hd/k$  با افزایش درصد اکسید تیتانیوم، ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی و هدایت حرارتی نانو سیال افزایش می‌یابد. با توجه به اینکه میزان افزایش هدایت حرارتی نانو سیال نسبت به افزایش ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی بیشتر است  $(Nu = hd/k)$  مقدار عدد ناسلت با افزایش درصد اکسید تیتانیوم به‌طور کلی کاهش پیدا می‌کند.

با افزایش سرعت ورودی سیال، مقدار ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی افزایش و در نتیجه‌ی آن عدد ناسلت افزایش پیدا می‌کند.

چند نمونه از کارهای مشابهی که در زمینه بهبود انتقال حرارت با استفاده از نانوسیالات انجام‌شده‌اند و نتایجی مشابه با نتایج این کار تحقیقاتی به دست آورده‌اند در ادامه آورده شده است. احمد گزالتو و همکاران [38] پیغمبرزاده و همکاران [39] زینالی هریس و همکاران [40] که در همه کارهای تحقیقاتی ذکرشده به نتیجه بهبود انتقال حرارت با استفاده از نانوسیالات دست‌یافته‌اند.

نتایج حاصل از شکل 6 نشان‌دهنده افت سرعت در طول سیستم شبیه‌سازی، به‌خصوص در زانویی‌های ایجادشده در آن می‌باشد که در نتیجه می‌تواند باعث کاهش توانایی انتقال حرارت در این مناطق شود که در ادامه با بررسی گرادیان دمایی در سیستم‌های شبیه‌سازی به بررسی کلی آن می‌پردازیم.

به‌منظور مشاهده تأثیر عوامل پارامترهای مختلف در انتقال حرارت، سیستم‌های شبیه‌سازی مطابق شکل 7 در کنار هم قرار گرفته است.

با مشاهده شکل 7 می‌توان به توانایی بهتر نانوسیال حاوی مقدار محدودتر اتیلن گلیکول و مقدار بیشتر نانوذرات اکسید تیتانیوم در انتقال حرارت پی برد. چون فرایند سرد شدن سیال با سرعت بیشتری اتفاق افتاده است، فرآیندی که ویژگی مطلوب برای سیالات انتقال حرارتی مورد استفاده در رادیاتور اتومبیل محسوب می‌شود.

با بررسی نتایجی که در بالا ذکر شد می‌توان به نتایج کلی زیر دست‌یافت.

- با افزایش درصد اتیلن گلیکول، ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی ( $h$ ) به‌طور کلی کاهش می‌یابد و دلیل این کاهش، پایین بودن رسانش گرمایی اتیلن گلیکول نسبت به آب می‌باشد.
- ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی با افزایش درصد اکسید تیتانیوم، افزایش می‌یابد. دو دلیل برای افزایش ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی نانوسیال‌ها وجود دارد: تأخیر در تشکیل و وجود آشفته‌گی در لایه‌مرزی گرمایی و رسانش گرمایی بالای نانوسیال [37].



## 4- نتیجه‌گیری

در این پروژه تحقیقاتی نانوسیال آب/ اتیلن گلیکول در تماس با نانو ذرات اکسید تیتانیوم مورد بررسی توسط روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، دینامیک سیالات محاسباتی و همچنین بررسی‌های نظری قرار گرفت. بررسی‌های انجام گرفته در مورد شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی هدایت حرارتی نانوسیال حکایت از تأثیر بسیار مناسب نانو ذرات اکسید تیتانیوم در بهبود هدایت حرارتی و همچنین تأثیر منفی اتیلن گلیکول و کاهش هدایت حرارتی نانوسیال با افزودن آن به سیال پایه دارد. مطالعات نظری انجام گرفته در این قسمت نشان‌دهنده دقت مناسب شبیه‌سازی‌های انجام گرفته می‌باشد. شبیه‌سازی‌های انجام گرفته در خصوص ویسکوزیته و دانسیته نانوسیال و سیال پایه استفاده شده در این پروژه تحقیقاتی نشان‌دهنده افزایش این خاصیت‌ها با افزودن نانو ذرات اکسید تیتانیوم به سیال پایه می‌باشد که این نتایج با مطالعات نظری که در این خصوص و در این پروژه تحقیقاتی انجام گرفت قرابت مناسبی دارد.

نتایج حاصل از شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی نشان‌دهنده تأثیر مناسب افزودن نانو ذرات و تأثیر منفی اتیلن گلیکول در ضریب انتقال حرارت و در نتیجه توانایی انتقال حرارت سیال می‌باشد.

بررسی کلی نتایج به دست آمده که در بالا به آن اشاره شد می‌تواند معیاری مناسب در جهت تعیین نانوسیال با ترکیب درصد مناسب برای بهبود انتقال حرارت در رادیاتور اتومبیل یا هر کارایی دیگر باشد.

با توجه به الزامی بودن استفاده از اتیلن گلیکول در رادیاتور اتومبیل به منظور کاهش نقطه انجماد و جلوگیری از خوردگی در رادیاتور اتومبیل و با در نظر گرفتن این مسئله که اتیلن گلیکول تأثیر منفی در توانایی انتقال حرارتی آب می‌گذارد و با وجود افزایش بازه دمایی بین نقطه جوش و انجماد آب باعث کاهش ظرفیت گرمایی سیال پایه می‌شود و با اعمال گرمای کمتری این بازه دمایی طی می‌شود، می‌توان با استفاده از ذرات اکسید تیتانیوم که پایداری مطلوبی در ترکیب درصد‌های خاص اجزا تشکیل‌دهنده نانوسیال، دارند در جهت بهبود توانایی انتقال حرارت سیال استفاده شده قدم برداشت. چون این نانو ذرات علاوه بر تأثیر مثبت انتقال حرارتی، به عنوان یک ناخالصی باعث کاهش نقطه انجماد و افزایش نقطه جوش سیال پایه می‌شوند. البته لازم به ذکر است به دلیل وجود خوردگی و تأثیر و اهمیت آن استفاده از اتیلن گلیکول با ترکیب درصد مطلوب الزامی است.

روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی دارای توانایی مناسب در تشخیص پایداری سیالات و مواد دیگر و همچنین به دست آوردن خواص ترموفیزیکی و رئولوژیکی سیالات می‌باشد و می‌توان از این روش با توجه به ارزان بودن و قابلیت تکرار بالا به عنوان روشی مناسب در جهت بررسی مواد گوناگون استفاده کرد. البته لازمه استفاده کردن از این روش شبیه‌سازی داشتن سیستم‌های پیشرفته کامپیوتری با قابلیت پردازش بسیار بالا می‌باشد چون این شبیه‌سازی‌ها بسیار زمان گیر هستند.

## 5- فهرست علائم

C	گرمای ویژه (J/gr.°C)
D	قطر لوله
E	انرژی جنبشی (J)
h	ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی (W/m <sup>2</sup> K)
k	هدایت حرارتی (W/m.K)
k <sub>B</sub>	ثابت بولتزمن (J K <sup>-1</sup> )

## M جرم مولکولی ذرات

Nu	عدد ناسلت
n	تعداد ذرات
ns	نانوئانه
ps	پیکوئانه
q	شار گرمایی (W/m <sup>2</sup> )
Re	عدد رینولدز
S	مقدار انرژی در واحد حجم بر زمان
T	دما (K)
v	سرعت (m/s)
z	بعد مختصات

## علائم یونانی

ε	پارامتر انرژی
σ	پارامتر طول
μ	ویسکوزیته دینامیکی (kgm <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )
ρ	چگالی (kgm <sup>-3</sup> )
φ	غلظت حجمی نانوذرات

## زیر نویس‌ها

bf	سیال پایه
c	سرد
h	گرم
in	ورودی
nf	نانو سیال
s	نانوذرات

## 6- مراجع

- A. T. Samira Khanjani, D. Jalali Vahid, M. Nazari, Effect of cut twisted tape and Al2O3 nanofluid on heat transfer of double tube heat exchanger, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 11, pp. 181-190, 2016. (in Persian فارسی)
- M. M. Hoda Aslani, Experimental investigation and fuzzy logic modelling of nanofluid solidification behavior, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 11, pp. 284-292, 2016. (in Persian فارسی)
- T. T. Baby, R. Sundara, Synthesis and transport properties of metal oxide decorated graphene dispersed nanofluids, *The Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 115, No. 17, pp. 8527-8533, 2011.
- A. A. Balandin, Thermal properties of graphene and nanostructured carbon materials, *Nature Materials*, Vol. 10, No. 8, pp. 569-581, 2011.
- S. S. Botha, P. Ndungu, B. J. Bladergroen, Physicochemical properties of oil-based nanofluids containing hybrid structures of silver nanoparticles supported on silica, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Vol. 50, No. 6, pp. 3071-3077, 2011.
- J. Gao, R. Zheng, H. Ohtani, D. Zhu, G. Chen, Experimental investigation of heat conduction mechanisms in nanofluids. Clue on clustering, *Nano Letters*, Vol. 9, No. 12, pp. 4128-4132, 2009.
- C. Zhi, Y. Xu, Y. Bando, D. Golberg, Highly thermo-conductive fluid with boron nitride nanofillers, *ACS Nano*, Vol. 5, No. 8, pp. 6571-6577, 2011.
- C. Choi, H. Yoo, J. Oh, Preparation and heat transfer properties of nanoparticle-in-transformer oil dispersions as advanced energy-efficient coolants, *Current Applied Physics*, Vol. 8, No. 6, pp. 710-712, 2008.
- J. Li, Z. Zhang, P. Zou, S. Grzybowski, M. Zahn, Preparation of a vegetable oil-based nanofluid and investigation of its breakdown and dielectric properties, *Electrical Insulation Magazine, IEEE*, Vol. 28, No. 5, pp. 43-50, 2012.
- J. Taha-Tijerina, T. N. Narayanan, G. Gao, M. Rohde, D. A. Tsentlovich, M. Pasquali, P. M. Ajayan, Electrically insulating thermal nano-oils using 2D fillers, *ACS Nano*, Vol. 6, No. 2, pp. 1214-1220, 2012.
- A. Kamyar, R. Saidur, M. Hasanuzzaman, Application of computational fluid dynamics (CFD) for nanofluids, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 55, No. 15, pp. 4104-4115, 2012.
- K. L. Teng, P. Y. Hsiao, S. W. Hung, C. C. Chieng, M. S. Liu, M. C. Lu, Enhanced thermal conductivity of nanofluids diagnosis by molecular dynamics simulations, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, Vol. 8, No. 7, pp. 3710-3718, 2008.

- method, *Engineering analysis with boundary elements*, Vol. 32, No. 4, pp. 282-289, 2008.
- [27] R. C. Reid, J. M. Prausnitz, B. E. Poling, *The properties of gases and liquids*, Book 1987.
- [28] H. Kang, Y. Zhang, M. Yang, L. Li, Nonequilibrium molecular dynamics simulation of coupling between nanoparticles and base-fluid in a nanofluid, *Physics Letters A*, Vol. 376, No. 4, pp. 521-524, 2012.
- [29] U. Essmann, L. Perera, M. L. Berkowitz, T. Darden, H. Lee, L. G. Pedersen, A smooth particle mesh Ewald method, *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 103, No. 19, pp. 8577-8593, 1995.
- [30] M. J. Allen, V. C. Tung, R. B. Kaner, Honeycomb carbon: a review of graphene, *Chemical reviews*, Vol. 110, No. 1, pp. 132-145, 2009.
- [31] M. P. Allen, D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, pp. 242-249, Oxford university press, 1989.
- [32] F. Müller-Plathe, A simple nonequilibrium molecular dynamics method for calculating the thermal conductivity, *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 106, No. 14, pp. 6082-6085, 1997.
- [33] A. Lees, S. Edwards, The computer study of transport processes under extreme conditions, *Journal of Physics C: Solid State Physics*, Vol. 5, No. 15, pp. 1921, 1972.
- [34] A. Simmmons, P. Cummings, Non-equilibrium molecular dynamics simulation of dense fluid methane, *Chemical Physics Letters*, Vol. 129, No. 1, pp. 92-98, 1986.
- [35] F. Fluent, *6.3 user's guide*, Intelligent Email Acquisition, 2006; Accessed on 10 June 2015; <http://www.ansys.com/Products/Fluids/ANSYS-Fluent>.
- [36] ASHRAE Fundamentals Handbook, American society of heating, refrigerating and air-conditioning engineers, American National Standards Institute: Atlanta, GA, USA, 2009.
- [37] M. Mehrali, E. Sadeghinezhad, M. A. Rosen, A. R. Akhiani, S. T. Latibari, M. Mehrali, H. S. C. Metselaar, heat transfer and entropy generation for laminar forced convection flow of graphene nanoplatelets nanofluids in a horizontal tube, *International Communications in Heat and Mass Transfer*, Vol. 66, No. 3, pp. 23-31, 2015.
- [38] A. Ghozatloo, A. Rashidi, M. Shariaty-Niassar, Convective heat transfer enhancement of graphene nanofluids in shell and tube heat exchanger, *Experimental Thermal and Fluid Science*, Vol. 53, No. 14, pp. 136-141, 2014.
- [39] S. Peyghambarzadeh, S. Hashemabadi, S. Hoseini, M. S. Jamnani, Experimental study of heat transfer enhancement using water/ethylene glycol based nanofluids as a new coolant for car radiators, *International Communications in Heat and Mass Transfer*, Vol. 38, No. 9, pp. 1283-1290, 2011.
- [40] S. Z. Heris, M. N. Eshfahany, S. G. Etemad, Experimental investigation of convective heat transfer of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/water nanofluid in circular tube, *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Vol. 28, No. 2, pp. 203-210, 2007.
- [13] H. E. G. A. Sheikhzadeh, A. Aghaei, Numerical study of natural convection in nanofluid filled enclosure with central heat source presenting correlations for Nusselt number, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 13, No. 10, pp. 62-74, 2013. (in Persian فارسی)
- [14] M. G. R. Nouri, D. Domiri Ganji, Numerical investigation of magnetic field effect on forced convection heat transfer of nanofluid in a sinusoidal channel, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 13, No. 14, pp. 43-55, 2014. (in Persian فارسی)
- [15] N. Sankar, N. Mathew, C. Sobhan, Molecular dynamics modeling of thermal conductivity enhancement in metal nanoparticle suspensions, *International Communications in Heat and Mass Transfer*, Vol. 35, No. 7, pp. 867-872, 2008.
- [16] A. Mohebbi, Prediction of specific heat and thermal conductivity of nanofluids by a combined equilibrium and non-equilibrium molecular dynamics simulation, *Journal of Molecular Liquids*, Vol. 175, No. 15, pp. 51-58, 2012.
- [17] J. C. Maxwell, *A Treatise on Electricity and Magnetism*, pp. 146-175, Clarendon press, 1881.
- [18] B. C. Pak, Y. I. Cho, Hydrodynamic and heat transfer study of dispersed fluids with submicron metallic oxide particles, *Experimental Heat Transfer an International Journal*, Vol. 11, No. 2, pp. 151-170, 1998.
- [19] A. Einstein, Eine neue bestimmung der moleküldimensionen, *Annalen der Physik*, Vol. 324, No. 2, pp. 289-306, 1906.
- [20] H. Sun, COMPASS: an ab initio force-field optimized for condensed-phase applications overview with details on alkane and benzene compounds, *The Journal of Physical Chemistry B*, Vol. 102, No. 38, pp. 7338-7364, 1998.
- [21] Y. S. Lin, P. Y. Hsiao, C. C. Chieng, Thermophysical characteristics of ethylene glycol-based copper nanofluids using nonequilibrium and equilibrium methods, *International Journal of Thermal Sciences*, Vol. 62, No. 0, pp. 56-60, 12//, 2012.
- [22] J. Haile, *Molecular Dynamics Simulation*, pp. 106-129, New York: Wiley, 1992.
- [23] W. Cui, M. Bai, J. Lv, L. Zhang, G. Li, M. Xu, On the flow characteristics of nanofluids by experimental approach and molecular dynamics simulation, *Experimental Thermal and Fluid Science*, Vol. 39, No. 15, pp. 148-157, 2012.
- [24] L. Li, Y. Zhang, H. Ma, M. Yang, An investigation of molecular layering at the liquid-solid interface in nanofluids by molecular dynamics simulation, *Physics Letters A*, Vol. 372, No. 25, pp. 4541-4544, 2008.
- [25] C. Sun, W. Q. Lu, J. Liu, B. Bai, Molecular dynamics simulation of nanofluid's effective thermal conductivity in high-shear-rate Couette flow, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 54, No. 11, pp. 2560-2567, 2011.
- [26] W. Q. Lu, Q. M. Fan, Study for the particle's scale effect on some thermophysical properties of nanofluids by a simplified molecular dynamics