مجله مهندسی مکانیک مدرس، دی 1396، دوره 17، شماره 10، ص‌ص 249-258

ماهنامه علمی پژوهشی

مهندسی مکانیک مدرس

mme.modares.ac.ir

بررسی تغییرات شعاع ذرات در روش دینامیک ذره استهلاکی با اندازه و نوع نیروی بقایی بین ذرات

الناز زهروی[1]، ابراهیم شیرانی[2*]، احمدرضا پیشه ور[3]

1- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان
2- استاد، مهندسی مکانیک، موسسه آموزش عالی صنعتی فولاد، فولادشهر
3- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان
* اصفهان، صندوق پستی 8491663763، eshirani@ictp.it

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل
دریافت: 09 اردیبهشت 1396
پذیرش: 21 شهریور 1396
ارائه در سایت: 05 آبان 1396

کلید واژگان:
دینامیک ذره استهلاکی
شعاع ذره
تابع توزیع شعاعی
نیروی بقایی

چکیده

در مقاله حاضر به بررسی تغییرات شعاع ذرات در روش دینامیک ذره استهلاکی با تغییر نوع و اندازه نیروی بقایی پرداخته می‌شود. در اکثریت مطالعات گذشته ذرات در روش دینامیک ذره استهلاکی به عنوان نقاط دافعی (بدون شعاع) در نظر گرفته شده‌اند در صورتی که فقط در حالت نیروی بقایی صفر یا حالت گاز ایده‌آل نقطه ای بودن ذرات معنی‌دار است و با افزایش نیروی بقایی اندازه ذاتی ذرات در روش دینامیک ذره استهلاکی که توسط یک ناحیه کروی قابل نفوذ احاطه شده اطرافشان بیان می‌شود بزرگتر خواهد شد. در ابتدا نیاز به تعریف روش مناسب محاسبه شعاع داریم. روش‌های مختلف محاسبه شعاع از جمله روابط استوکس-اینشیتین، استوکس و تابع توزیع شعاعی بررسی می‌شوند و به این نتیجه می‌رسیم که با توجه به محدودیت‌های روابط استوکس و استوکس-اینشتین استفاد از تابع توزیع شعاعی روش مناسب محاسبه شعاع می‌باشد. در ادامه به روند تغییرات شعاع ذرات و پخش آن‌ها در سیستم با تغییر ضرایب نیروی بقایی خطی استاندارد و نیروی بقایی نمایی پرداخته می‌شود. در نهایت نشان داده می‌شود که با استفاده از نیروی بقایی هیبریدی نمایی- خطی و انتخاب ضرایب مناسب می‌توان بدون هزینه محاسباتی اضافه تر، به شبیه‌سازی ذرات بزرگتر در محلول‌های کلوییدی با توزیع مناسب وهمگن پرداخت.

Study the effect of conservative force size and type on particles radios in Dissipative Particle Dynamics method

Elnaz Zohravi[1], Ebrahim Shirani[2*], Ahmad Reza Pishevar[1]

1- Department of Mechanical Engineering, Isfahan University of technology, Isfahan, Iran
2-Department of Mechanical Engineering, Foolad Institute of Technology, Fooladshahr, Iran
* P.O.B. 84916 63763, Isfahan, Iran, eshirani@ictp.it

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 29 April 2017
Accepted 12 September 2017
Available Online 27 October 2017

Keywords:
Dissipative Particle Dynamics
Particle radios
Radial distribution function
Conservative force

ABSTRACT

The radios of particles in Dissipative Particle Dynamics (DPD) method is investigated numerically taking into account size and type of conservative force. In the most of previous studies, the DPD particles have been considered as a point center of repulsion with zero radios and hence sphere size is prescribed by the creation of a structure of frozen DPD particles. Although only in ideal gas state or zero conservative force the DPD point particle is meaningful and with conservative force the DPD particles have an intrinsic size which is assigned by the spherical impenetrable domain occupied by each particle when immersed in a sea of other particles. At first the appropriate method should be define to calculate the size of DPD particle. Different methods including Stokes-Einstein relation, Stokes law and radial distribution function (RDF) are studied and it is concluded that according to limitation of Stokes-Einstein and Stokes relations the RDF is the best method for evaluation of DPD particle size. In the following, the trend of DPD particle size changing and their distribution in the system with linear and exponential conservative force examined. At the end we demonstrate that the employing of exponential conservative forces for the colloid-colloid and colloid-solvent interactions but keep the conventional linear force for the solvent-solvent interactions achieve a well-dispersed suspension with different particle sizes without extra computation.

1- مقدمه

روش دینامیک ذره استهلاکی (دی-پی-دی) [1] یک مدل مولکولی دانه‌بندی[2] درشت جهت شبیه‌سازی پدیده‌های در مقیاس مزو[3] می‌باشد و اولین‌بار در سال 1992 توسط کوئلمن و هوگربراگ [1] معرفی شد. در این روش به دلیل دانه‌بندی کردن ذرات نسبت به روش دقیق دینامیک مولکولی[4]، تعداد ذرات به‌طور قابل ملاحظه‌ای کاهش یافته که منجربه کاهش چشمگیری در هزینه محاسباتی خواهد شد. از این روش جهت شبیه‌سازی سیستم‌هایی همانند

[1] Dissipative Particle Dynamics (DPD)
[2] Coarse graining
[3] Mesoscale
[4] Molecular Dynamic (MD)

Please cite this article using:

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

E. Zohravi, E. Shirani, A. R. Pishevar, Study the effect of conservative force size and type on particles radios in Dissipative Particle Dynamics method, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 17, No. 10, pp. 249-258, 2017 (in Persian)

محلول‌های پلیمری، گلبول‌های قرمز [2]، سوسپانسیون‌های کلوییدی و چربی‌های دو لایه‌ای[1] [3] استفاده می‌شود. در مطالعات گذشته جهت مدل کردن ذرات بزرگ کلوییدی از فریز کردن ذرات دی-پی-دی استفاده شده است [5,4]، که تعداد کل ذرات دی-پی-دی را به شدت بالا می‌برد و در نتیجه هزینه محاسبات نیز زیاد می‌شود.

پن [7,6] اشاره کرد که شعاع ذرات دی-پی-دی را می‌توان توسط پارامتر نیروی بقایی کنترل کرد. در واقع با افزایش نیروی دافعه بین ذرات دی-پی-دی می‌توان شعاع موثر آن‌ها را زیاد کرد. البته با استفاده از نیروی بقایی خطی استاندارد به دلیل کلاستر شدن ذرات در ضریب نیروهای بقایی بالا با محدودیت افزایش شعاع روبرو هستیم. پن [6] پیشنهاد نیروی بقایی هیبریدی خطی-نمایی را داد. در این نیرو از تابع وزنی نمایی[2] بین کلوییدها و تابع وزنی خطی استاندارد بین ذرات حلال استفاده می‌شود. پن با تعریف این نوع از نیرو امکان ایجاد ذرات بزرگ‌تر را تنها با افزایش ضریب نیروی بقایی نمایی ایجاد کرد. با این کار در عین داشتن یک محلول کاملا همگن تعداد کل ذرات نیز بسیار کاهش می‌یابد.

نکته مهم در این‌جا تعیین صحیح شعاع ذرات است. از آنجایی که ذرات دی-پی-دی به‌عنوان نقاط دافعی در نظر گرفته می‌شوند، ارتباط تعاملات نیرویی در دی-پی-دی و هیدرودینامیک تنها از طریق تعریف یک شعاع ذاتی برای آن‌ها میسر است. در واقع ذرات دی-پی-دی یک سایز ذاتی دارند که توسط یک ناحیه کروی قابل نفوذ احاطه شده اطرافشان بیان می‌شود. به‌علاوه با استفاده از تابع وزنی نمایی بین ذرات کلویید و همچنین روش‌های توسعه یافته دی-پی-دی همچون دینامیک ذره منفرد استهلاکی[3] [8] و مدل ذره سیال[4] [9] نیاز مبرم به تعریف صحیحی از شعاع ذرات در روش دی-پی-دی داریم.

پن روش‌های مختلفی را برای به‌دست آوردن شعاع ذرات دی-پی-دی بیان کرد [6]. وی با استفاده از روابط استوکس-اینشتین و استوکس به محاسبه سایز ذرات دی-پی-دی پرداخت و نشان داد که این دو شعاع با یکدیگر برابرند. نکته‌ای که وی به آن اشاره نکرد محدودیت‌های موجود در این روش‌ها است که به خصوص با افزایش ضریب نیروی بقایی با آن روبه‌رو می‌شویم.

مای-دوی و همکارانش روی اثرات سایز ذره در محلول کلوییدی دی-پی-دی تحقیق کردند [10]. آن‌ها در غیاب نیروی بقایی، از روابط به‌دست آمده از تئوری جنبشی برای ضریب خود دیفیوز و ویسکوزیته استفاده کردند و با جایگذاری در رابطه استوکس-اینشتین شعاع موثر ذره را محاسبه کردند و در نهایت عنوان کردند که این نتایج فقط به‌عنوان تقریب استفاده می‌شوند و ناحیه غیرقابل نفوذ اطراف ذره را می‌توان توسط تابع توزیع شعاعی بیان کرد. آن‌ها همچنین اثر پارامترهای شعاع برشی[5]، دما و چگالی را روی شعاع ذرات (از طریق تابع توزیع شعاعی) بررسی کردند ولی مطالعه مستقیمی روی تغییرات سایز ذره با ضریب نیروی بقایی انجام ندادند.

برخلاف مطالعات اندکی که بر روی بحث تغییرات شعاع ذرات با پارامترهای سیستم در روش دی-پی-دی انجام شده است [10,7,6]، تحقیقات زیادی در راستای اثر این پارامترها از جمله ضریب نیروی استهلاکی، شعاع برشی، دما و چگالی بر روی خواص انتقالی (ویسکوزیته و ضریب خود دیفیوز) و رئولوژی[6] سیستم انجام گرفته است [11,9-21]. با این حال این مطالعات نیز اکثرا برای حالت گاز ایده‌آل یا حالت نیروی بقایی صفر انجام شده اند.

تروفیمو [12] با تغییر نوع نیروی بقایی و افزایش ضریب آن، مسئله انجماد و تغییر فاز سیال دی-پی-دی را از طریق بررسی نمودار دیفیوژن بررسی کرد. ولی اشاره ای به ارتباط تغییر شعاع ذرات با نیروی بقایی نکرد.

در این مقاله هدف این است که برای ضرایب نیروی بقایی بزرگ به محاسبه صحیح شعاع ذرات دی-پی-دی پرداخته شود. به این منظور با محاسبه ضریب خود دیفیوز[7] (حل تعادلی)، ویسکوزیته سیستم (حل غیرتعادلی) و از طریق رابطه استوکس-اینشتین برای ضرایب نیروی بقایی مختلف شعاع را محاسبه و با شعاع به‌دست آمده از تابع توزیع شعاعی[8] سیستم در حالت تعادل مقایسه می‌کنیم. با مقایسه نتایج ضمن انتخاب روش مناسب جهت محاسبه شعاع به روند تغییرات شعاع با اندازه نیروی بقایی و چگالی هم پرداخته می‌شود. در ادامه به روند تغییرات شعاع ذرات و پخش آن‌ها در سیستم با تغییر ضرایب نیروی بقایی خطی استاندارد و نیروی بقایی نمایی پرداخته می‌شود. درنهایت نشان داده می‌شود که با استفاده از نیروی بقایی هیبریدی نمایی- خطی و انتخاب ضرایب مناسب می‌توان بدون هزینه محاسباتی اضافه‌تر به شبیه‌سازی ذرات بزرگتر در محلول‌های کلوییدی با توزیع مناسب و همگن پرداخت.

در این مقاله بعد از مقدمه‌ای که در مورد اهمیت محاسبه شعاع ذرات روش دی-پی-دی و کارهای انجام شده تاکنون ذکر شد، در بخش دوم، روش دینامیک ذره استهلاکی در قالب معادلات حاکم معرفی خواهد شد و همچنین روند حل معادلات حاکم و کد مورد استفاده به اختصار بیان می‌شوند. در بخش سوم شرایط و پارامترهای استفاده شده در شبیه‌سازی‌ها توضیح داده می‌شوند. در بخش چهارم صحت‌سنجی روش مورد استفاده شرح داده می‌شود. در بخش پنجم راجع به روش‌های مختلف محاسبه شعاع بحث می‌شود. در بخش ششم در مورد انتخاب تابع توزیع شعاعی به‌عنوان روش مناسب محاسبه شعاع شرح داده می‌شود. در بخش هفتم نتایج مربوط به توابع وزنی مختلف نیروی بقایی آورده شده به تفسیر و تحلیل آن‌ها می‌پردازیم. در آخر در قسمت نتیجه‌گیری، نتیجه کلی و اصلی حاصل از این کار را شرح داده‌ایم.

2- روش دینامیک ذره استهلاکی یا دی-پی-دی

این روش اولین بار در سال 1992 توسط کوئلمن و هوگربراگ [1] در مقیاس مزو برای بررسی پدیده‌های هیدرودینامیکی معرفی شد. برخلاف روش دینامیک مولکولی گروهی از اتم‌ها یا مولکول‌ها، یک ذره دی-پی-دی را تشکیل می‌دهند. بنابراین ذرات دی-پی-دی براساس قوانین خاصی با یکدیگر واکنش می‌دهند. مزیت آن نسبت به روش دینامیک مولکولی در این است که قادر است مقیاس‌های مکانی و زمانی بزرگ‌تر را شبیه‌سازی کند. به دلیل دانه‌بندی درشت در این روش، طبیعت سخت- هسته[9] بودن در پتانسیل بین-ذره‌ای از بین می‌رود و در مقابل پتانسیل نرم-هسته[10] را خواهیم داشت.

در روش دینامیک ذره استهلاکی معادلات قانون دوم نیوتون برای سیستمی شامل N ذره با موقعیت مکانی r_i، جرم m_i و سرعت v_i مطابق

[1] Lipid bilayer
[2] Exponential weight function
[3] Single DPD Particle
[4] Fluid Particle Model (FPM)
[5] Cut-off Radius
[6] Rheology
[7] Self-diffusion coefficient
[8] Radial distribution function (RDF)
[9] Hard-Core Potential
[10] Soft-Core Potential

رابطه (1) حل می‌شوند:

$$\frac{dr_i}{dt} = v_i, \qquad \frac{dv_i}{dt} = \frac{1}{m}\sum F_{ij} \tag{1}$$

نیروی بر هم کنش بین این ذرات از سه قسمت تشکیل شده‌اند. این نیروها شامل نیروی استهلاکی[1] F^D، نیروی تصادفی[2] F^R و نیروی بقایی[3] F^C است.

شکل نیروی استهلاکی بین ذرات i و j به صورت زیر است [13]:

$$F_{ij}^D = -\gamma\omega^D(r_{ij})(\vec{e}_{ij}.\vec{v}_{ij})\vec{e}_{ij} \tag{2}$$

در عبارت بالا γ، دامنه ی نیروی استهلاکی ω^D تابع وزنی مربوط به نیروی استهلاکی، $\vec{e}_{ij}$، بردار واحد داده شده با $\vec{e}_{ij} = \vec{r}_{ij}/r_{ij}$ که $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$ و r_{ij} مقدار بردار $\vec{r}_{ij}$ و $\vec{v}_{ij} = \vec{v}_i - \vec{v}_j$ است. تابع وزنی به صورت زیر تعریف شده است [13]:

$$\omega^D = \begin{cases} \left(1 - \frac{r}{r_c}\right)^2 & r < r_c \\ 0 & r \geq r_c \end{cases} \tag{3}$$

که r فاصله‌ی بین ذرات در حال برهم کنش است و r_c شعاع برشی است که فاصله‌ی تأثیر ذرات را تعریف می‌کند. در مطالعه حاضر به‌دلیل سهولت نمایش نتایج در تمامی شبیه‌سازی‌ها از r_c=m=1 استفاده می‌شود. دامنه‌ی γ به دامنه‌ی نیروی تصادفی ربط دارد، که مقدار آن با اعمال تئوری نوسانی-استهلاکی[4] که بعداً توضیح داده می‌شود و با استفاده از مقدار دامنه‌ی نیروی تصادفی که ثابت است، بدست می‌آید.

نیروی تصادفی عبارتی است که سیستم را گرم نگه می‌دارد، اما نیروی استهلاکی سعی در سرد کردن سیستم دارد. وقتی که این دو نیرو با هم عمل می‌کنند، شرایط تعادل فراهم می‌شود. نیروی تصادفی به فرم زیر است [13]:

$$F_{ij}^R = \sigma\omega^R(r_{ij})\xi_{ij}\vec{e}_{ij} \tag{4}$$

که σ، دامنه‌ی نیروی تصادفی، و ω^R، تابع وزنی برای نیروی تصادفی و ξ_{ij}، متغیر تصادفی گوسی با متوسط صفر و واریانس واحد، می‌باشد.

شکل کلی برای نیروی بقایی به صورت زیر است:

$$F_{ij}^C = a_{ij}\omega^C(r_{ij})\vec{e}_{ij} \tag{5}$$

که a_{ij}، ضریب نیروی بقایی، و ω^C، تابع وزنی آن و r_{ij}، فاصله‌ی بین ذرات می‌باشد.

انتخاب استاندارد برای نیروی بقایی به فرم زیر است[13]:

$$F_{ij}^C = \begin{cases} a_{ij}(1 - r_{ij})\vec{e}_{ij} & r < r_c \\ 0 & r \geq r_c \end{cases} \tag{6}$$

اسپانول و وارن [22] در سال 1995 اثبات کردند برای رسیدن به تعادل لازم است، رابطی زیر برقرار باشد:

$$\{\omega^D(r) = (\omega^R(r))^2$$
$$\gamma = \frac{\sigma^2}{2k_BT} \tag{7}$$

که این معادله بیان کننده‌ی تئوری نوسانی-استهلاکی برای یک سیستم دی-پی-دی است. این تئوری توابع وزنی نیروهای استهلاکی و نوسانی و همین طور دامنه‌های آن‌ها را نیز به هم مرتبط می‌کند.

2-1- روند حل روش دینامیک ذره استهلاکی

برای حل معادلات در روش دینامیک ذره استهلاکی ابتدا یک توزیع منظم یا تصادفی برای مکان ذرات در دامنه حل در نظر گرفته می‌شود. سپس مومنتوم این ذرات براساس تابع گوس به آن‌ها اعمال می‌شود. به کمک این مکان و سرعت‌های اولیه و با استفاده از روابط (2)، (4) و (6)، نیروهای استهلاکی، تصادفی و بقایی برای تمامی ذرات سیستم محاسبه می‌شوند. در هر گام زمانی موقعیت‌ها و سرعت‌ها در زمان قبلی با استفاده از یک الگوریتم انتگرال‌گیری زمانی محاسبه می‌شوند. در کار حاضر از الگوریتم اصلاح شده سرعت ورلت[5] استفاده می‌شود. دراین الگوریتم، در گام اول مکان ذرات در گام زمانی $t + \Delta t$ به کمک مکان و سرعت در زمان t محاسبه می‌شود. سپس سرعت پیش‌بینی شده برای گام زمان $t + \Delta t$ بدست می‌آید و درگام بعد نیروی وارد بر ذرات در این گام زمانی براساس مکان جدید و سرعت پیش‌بینی شده، محاسبه شده و نهایتاً سرعت در گام زمانی جدید برای تمامی ذرات به‌دست می‌آید. از این پس الگوریتم سرعت ورلت آنقدر تکرار می‌شود که مساله به پایداری برسد. معیار پایداری در این روش رسیدن به k_BT انتخاب شده در ابتدای شبیه‌سازی برای گام‌های زمانی متوالی است. به این معنی که آنقدر باید تکرار انجام شود که نمودار k_BT برحسب زمان با صرف نظر از نوسانات کوچک، به‌صورت خطی افقی درآید. اگر فرض ثابت بودن شتاب ذرات در گام زمانی Δt به‌کار گرفته شود، معادلات به‌کار رفته در این الگوریتم به‌صورت زیر به‌دست می‌آیند:

$$\vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \Delta t\vec{v}_i(t) + \frac{1}{2}(\Delta t)^2\vec{f}_i(t),$$
$$\tilde{\vec{v}}_i(t + \Delta t) = \vec{v}_i(t) + \lambda\Delta t\vec{f}_i(t),$$
$$\vec{f}_i(t + \Delta t) = \vec{f}_i[\vec{r}_i(t + \Delta t) + \tilde{\vec{v}}_i(t + \Delta t)],$$
$$\vec{v}_i(t + \Delta t) = \vec{v}_i(t) + \frac{1}{2}\Delta t[\vec{f}_i(t) + \vec{f}_i(t + \Delta t)] \tag{8}$$

در مطالعه حاضر از کد شبیه‌ساز دینامیک مولکولی لمپس[6] [23] استفاده می‌شود که قابلیت حل به‌صورت موازی را داشته و امکان شبیه‌سازی سیستم‌هایی در فاز جامد، مایع و گاز با تعداد اتم‌های بسیار زیاد را فراهم می‌کند. لمپز قادر است سیستم‌های اتمی، پلیمری، بیولوژیکی، فلزی، دانه‌ای[7] و درشت دانه[8] را با استفاده از انواع مختلف نیرو (پتانسیل بین ذره‌ای) و شرایط مرزی، مدل کند. یکی از انواع پتانسیل‌های موجود در بسته نرم افزاری لمپس که در مطالعه حاضر مورد استفاده قرار می‌گیرد، پتانسیل دی-پی-دی می‌باشد. که البته فقط نیروهای استاندارد روش دی-پی-دی را شامل می‌شود و در مورد کار حاضر نیروی بقایی نمایی که جز نیروهای استاندارد این روش نمی‌باشد، به کد لمپس اضافه گردید.

3- شرایط و پارامترهای استفاده شده در شبیه‌سازی‌ها

شبیه‌سازی‌ها جهت محاسبه ضریب خود دیفیوز از طریق حل تعادلی و همچنین ویسکوزیته از طریق روش غیرتعادلی پریودیک پویسویل[9] همگی در یک جعبه پریودیک به ابعاد $L_x = L_y = L_z = 20$ انجام می‌گیرند. ضریب استهلاکی، γ در همه شبیه‌سازی‌ها همواره مقدار ثابت 4.5 راخواهد داشت. انتخاب مقادیر مختلف دما و چگالی نیز در هر شبیه‌سازی به‌طور جداگانه بیان می‌شود. گام زمانی استفاده شده مقدار Δt=0.02 را خواهد داشت و همچنین تعداد 200000 گام زمانی جهت رسیدن به همگرایی لازم در نتایج موردنیاز است.

ضریب نیروی بقایی خطی حاضر در روش دینامیک ذره استهلاکی استاندارد مطابق با معادله حالت سیال دی-پی-دی و تعریف تراکم‌پذیری بی‌بعد تعیین می‌شود. معادلات اصلی به فرم زیر می‌باشند [24,16].

$$p = \rho k_BT + \alpha a\rho^2(\alpha = 0.101 \pm 0.001) \tag{9}$$

[1] Dissipative Force
[2] Random Force
[3] Conservative Force
[4] Fluctuation-dissipation Theorem

[5] Velocity verlet algorithm
[6] LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)
[7] Granular
[8] Coarse-grained
[9] Periodic poiseuille flow method

$$\kappa^{-1} = \frac{1}{k_BT}\left(\frac{\partial P}{\partial \rho_{DPD}}\right)_T \left(\frac{\partial \rho_{DPD}}{\partial n}\right) = \frac{1}{N_m}\left(1 + 2\alpha \frac{a_{\rho_{DPD}}}{k_BT}\right)$$

$$a = k_BT \frac{\kappa^{-1}N_m - 1}{2\alpha\rho_{DPD}} \quad (10)$$

همان‌طور که در رابطه (10) مشاهده می‌شود، ضریب نیروی بقایی براساس پارامتر دانه‌بندی[1] N_m و ضریب تراکم‌پذیری κ^{-1} آب، دما، k_BT و چگالی، ρ [16] محاسبه می‌شود. در واقع افزایش ضریب نیروی بقایی به معنای عدد دانه‌بندی بزرگتر می‌باشد.

4- صحت‌سنجی روش مورد استفاده

جهت صحت‌سنجی روش مورد استفاده، مقایسه نتایج تابع توزیع شعاعی کار حاضر و کار گیچوچا [14] برای دو مقدار مختلف ضریب نیروی بقایی، چگالی ρ =3 ، γ=4.5 و دمای k_BT =1 انجام شده است. همان‌طور که در "شکل 1" مشاهده می‌شود تطابق نسبتا خوبی بین نتایج وجود دارد.

5-روش‌های محاسبه شعاع

5-1- رابطه استوکس- اینشتین

پن و همکاران [25] ادعا کردند که شعاع موثر ذرات دی-پی-دی برابر شعاع استوکس-اینشین R_{SE} به‌دست آمده از حاصل‌ضرب ضریب خود دیفیوز و ویسکوزیته سیال دی-پی-دی می‌باشد. مطابق رابطه (11), D ضریب خود دیفیوز یک ذره است که در معرض حرکت براونی در یک محلول رقیق قرار گرفته است و η ویسکوزیته محلول می‌باشد. R_{SE} شعاع کره‌ایست که به‌طور موثر توسط یک تک ذره منفرد دی-پی-دی احاطه شده است.

$$R_{SE} = \frac{k_BT}{6\pi\eta D} \quad (11)$$

پن نشان داد شعاع به‌دست آمده از این روش با شعاع محاسبه شده از قانون استوکس در رژیم رینولدز پایین جریان عبوری از یک تک ذره دی-پی-دی برابر است. این شعاع با محاسبه نیروی درگ وارد بر یک تک ذره ثابت دی-پی-دی هنگامی که ذرات دیگر از روی آن عبور می‌کنند به دست می‌آید [25]. زمانی که نیروی وارد بر ذره ساکن، سرعت آزاد جریان ذرات عبوری از روی آن و ویسکوزیته سیال مشخص شد با فرض قانون استوکس می‌توان به محاسبه شعاع هیدرودینامیکی ذره از رابطه (12) پرداخت.

$$R_s = \frac{F}{C\pi\eta U_\infty} \quad (12)$$

مسئله‌ای که در این مقاله به آن پرداخته می‌شود این است که این روابط تحت چه شرایطی برای سیال دی-پی-دی برقرار هستند. پن نشان داد که این روابط مقیاس مناسبی از شعاع ذرات را به ما می‌دهند. با وجودی که وی اذعان داشت پارامتر نیروی بقایی تنها عامل تغییر شعاع ذرات می‌باشد و تغییر پارامتر نیروی استهلاکی تاثیری روی شعاع موثر ذارت ندارد [6-8]، ولی تغییرات شعاع ذرات با نیروی بقایی را از طریق روابط مذکور بررسی نکرد. برای مثال اگر هدف این باشد که با تغییر نوع و اندازه نیروی بقایی ذرات با شعاع متفاوت مدل کنیم، طبیعتا سیال با خواص جدید و با امکان تغییر فاز خواهیم داشت [12] (ساختار سیال توسط نیروی بقایی تعیین می‌شود.) و امکان برقراری روابط استوکس-اینشین و استوکس ضعیف خواهد بود.

رابطه استوکس-اینشتین یکی از روابط معمول جهت محاسبه ضریب خود دیفیوز ذرات با داشتن شعاع آن‌ها در محیط پیوسته می‌باشد. دقتی که این رابطه در محاسبه ضریب خود دیفیوز دارد فقط حدود 20 درصد می‌باشد [27,26]. هنگامی که شعاع ذره دیفیوزکننده بیشتر از 5 برابر شعاع ذرات حلال باشد می‌توان ادعا کرد که ضریب خود دیفیوز با معکوس ویسکوزیته سیال مرتبط است و این رفتار را می‌توان توسط رابطه استوکس-اینشین تایید کرد، زیرا این رابطه با فرض دیفیوژن یک ذره کروی صلب در یک حلال با محیط پیوسته به‌دست‌آمده است. بنابراین رابطه (11) برای ذره دیفیوز کننده بزرگ در یک حلال کوچک صحیح می‌باشد و زمانی که شعاع ذره دیفیوز کننده کمتر از 5 برابر شعاع ذره حلال باشد، صادق نمی‌باشد [28]. با کوچکتر شدن شعاع ذره دیفیوز کننده این رابطه هر چه بیشتر صحت خود را از دست می‌دهد. به‌دلیل محدودیت رابطه استوکس-اینشتین در سایزهای کوچک ذره دیفیوز کننده، محققان زیادی سعی در به‌دست آوردن اصلاحاتی روی رابطه استوکس-اینشتین داشته اند تا برای سایزهای یکسان حلال و ذره دیفیوز کننده قابل استفاده باشد. با توجه به نتایج قابل قبولی که از روابط آن‌ها می‌توان گرفت ولی به‌دلیل پیچیدگی بالای روابط اصلاح شده به ندرت مورد استفاده قرار می‌گیرند [29]. از طرفی در حلال با ویسکوزیته بالا ضریب خود دیفیوز از ویسکوزیته حلال مستقل می‌شود (برای مثال دیفیوژن شکر در آب با دیفیوژن آن در ژله بسیار نزدیک است) و در نتیجه خطا در این رابطه برای حلال شدیدا ویسکوز بالا است [26].

با توجه به محدودیت‌های ذکر شده برای روش استوکس-اینشتین این رابطه صحت کافی را برای محاسبه شعاع روش دینامیک ذره استهلاکی ندارد. مضاف بر این‌که اگر بتوان محدودیت‌ها را برطرف کرد، مشکلات خاص روش‌های مبنا ذره‌ای از جمله محاسبه ضریب خود دیفیوز و ویسکوزیته با خطای بسیاری روبرو است و به عوامل مختلفی از جمله غلظت ذرات دیفیوز کننده و فاز حلال بستگی دارد. در جدول 1 مقادیر محاسبه شده شعاع استوکس-اینشین با استفاده از مقادیر اندازه گیری‌شده ویسکوزیته و ضریب خود-دیفیوز برای ضرایب نیروی بقایی مختلف a، چگالی ρ=3، γ=4.5 و دمای k_BT =1 آورده شده است. لازم به ذکر است که ویسکوزیته از طریق روش پریودیک پویسویل محاسبه می‌شود [30]. از طرفی همزمان با محاسبه ضریب خود دیفیوز از طریق حل تعادلی به محاسبه شعاع از نمودار تابع توزیع شعاعی (در ادامه به آن اشاره می‌شود) نیز می‌پردازیم تا بتوانیم مقایسه ای

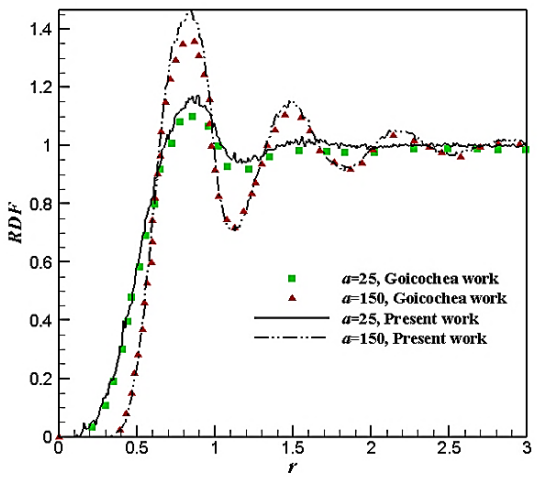


Fig. 1 Radial distribution function of present work in comparison with Goicochea work for two different conservative force parameters [14]

شکل 1 مقایسه نتایج تابع توزیع شعاعی کار حاضر و کار گیچوچا [14] برای دو مقدار مختلف ضریب نیروی بقایی

[1] Coarse-graining

بین دو شعاع داشته باشیم. همان‌طور که در جدول 1 مشاهده می‌شود با افزایش ضریب نیروی بقایی a، شعاع استوکس- اینشتین محاسبه شده از طریق داده‌های شبیه‌سازی هیچ روند افزایشی نشان نمی‌دهد و با داده‌های به‌دست آمده از نمودار تابع توزیع شعاعی نیز هم‌خوانی ندارد.

5-2- رابطه استوکس

در استفاده از رابطه استوکس علاوه بر محدودیت‌های ذکر شده برای روش استوکس- اینشتین با مشکل دیگری روبرو می‌شویم. در شبیه‌سازی سیال دی-پی-دی جریان گذرنده از روی تک ذره ساکن در یک جریان استوکس بدون مرز با همان پیچیدگی‌هایی آزمایشات فیزیکی این روش، یعنی اثرات اینرسی و دیواره روبرو هستیم [31]. برای این مشکل همانند روش استوکس- اینشتین نیز اصلاحیه‌ای در مورد تصحیح سرعت جریان آزاد انجام گرفته است [32]، که استفاده از این رابطه را بسیار سخت می‌کند. در کل از آنجایی که روابط بالا برای محیط‌های پیوسته به دست آمده‌اند ارتباط برقرار کردن بین آن‌ها و روش‌های ذره‌ای مشکلات خاص و محدودیت‌هایی دارد که اجازه نمی‌دهد بتوان از آن‌ها به صورت عام استفاده کرد و ترجیح آن است که به دنبال روشی باشیم که محدویت‌های فوق را نداشته باشد.

5-3- تابع توزیع شعاعی

تابع توزیع شعاعی به طور متوسط نشان می‌دهد که ذرات در یک سیستم چگونه به‌صورت شعاعی در کنار یکدیگر جمع شده‌اند. این تابع به طرز موثری ساختار متوسط سیستم‌های مولکولی نامنظم مثل مایعات را توضیح می‌دهد. همچنین نشان می‌دهد که در کجا حرکت پیوسته‌ای از اتم‌ها داریم. که به صورت ریاضی به فرم رابطه (13) بیان می‌شود [33].

$$g(r) = \frac{n(r)}{4\pi\rho r^2 \Delta r} \tag{13}$$

در رابطه (13) $g(r)$ همان تابع توزیع شعاعی، $n(r)$ تعداد متوسط اتم‌ها در هر پوسته به ضخامت Δr و در مکان r، ρ چگالی متوسط اتم‌ها می‌باشند. در این روش نیاز به محدود شدن به یک اتم نمی‌باشد و همه اتم‌ها را می‌توان انتخاب کرد و به منظور بهبود تخمین تابع توزیع شعاعی میان تعداد زیادی از اتم‌ها میانگین‌گیری انجام داد. تابع توزیع شعاعی به طور معمول به‌صورت تابعی از فاصله بین اتمی رسم می‌شود و خصوصیات مهمی از سیستم را نشان می‌دهد. از جمله خصوصیات مهم این تابع می‌توان به موارد زیر اشاره کرد.

1- در فواصل کوتاه تابع توزیع شعاعی صفر خواهد بود. از آن‌جایی که اتم‌ها نمی‌توانند نزدیک‌تر از این فاصله به یکدیگر بشوند این فاصله پهنای موثر اتم‌ها را نشان می‌دهد.

جدول 1 محاسبه شعاع استوکس-اینشتین با توجه به مقادیر ضریب خود دیفیوز و ویسکوزیته برای ضرایب نیروی بقایی مختلف a، چگالی ρ=3، γ=4.5 و دمای k_BT =1

Table 1 Computation of Stokes-Einstein radios according to self-diffusion coefficient and viscosity for different conservative force parameters a, ρ=3 ,γ=4.5 and k_BT =1

ضریب نیروی بقایی a	ضریب خود دیفیوز D	ویسکوزیته η	شعاع استوکس- اینشتین R_{SE}	شعاع محاسبه شده از نمودار تابع توزیع شعاعی
0	0.71	1.25	0.06	0
25	0.3	0.85	0.21	0.11
50	0.19	1	0.28	0.16
78	0.14	1.55	0.24	0.185
100	0.11	2	0.24	0.19
126	0.09	2.67	0.22	0.205
152	0.07	3.3	0.22	0.21
178	0.06	4	0.21	0.22

2- تعداد مشخصی قله در نمودار تابع توزیع شعاعی مشاهده می‌شود که نشان می‌دهد اتم‌ها به‌صورت متمرکز در کنار یکدیگر در پوسته‌های همسایه جمع شده‌اند. وقوع قله‌ها در فاصله طولانی نشان‌دهنده ترتیب منظم اتم‌ها است. معمولا در دماهای بالا قله‌ها به صورت عریض هستند که نشان دهنده حرکت حرارتی می‌باشد در صورتی که در دماهای پایین قله‌ها بسیار تند هستند. قله‌ها به خصوص در مواد متبلور (کریستالی) بسیار تند هستند، حالتی که اتم‌ها به شدت در مکان خودشان مستقر شدند. در فاصله طولانی هر تابع توزیع شعاعی به مقدار 1 متمایل می‌شود زیرا در این فاصله تابع توزیع شعاعی نشان دهنده چگالی متوسط سیستم می‌باشد.

3- تابع توزیع شعاعی برای یک مایع حد واسط آن برای گاز و جامد است. در "شکل 2" فرم معمولی از تابع توزیع شعاعی برای گاز، مایع و جامد نشان داده شده است [33]. همان‌طور که مشخص است برای سیال گازی فقط یک قله با ارتفاع کم مشاهده می‌شود و هر چه به سمت فاز مایع پیش می‌رویم تعداد قله‌ها بیشتر ولی با فواصل منظم کوتاه و در نهایت به یک مقدار ثابت دائمی در فاصله طولانی ختم می‌شود. در فاز جامد بی‌نهایت قله مشاهده می‌شود که ارتفاع و فاصله جدایی آن‌ها از مشخصات شبکه جامد است.

با توجه به تعاریف بالا از تابع توزیع شعاعی می‌توان از فاصله کوتاهی که تابع توزیع شعاعی در ابتدا صفر می‌باشد به‌عنوان تعبیری از شعاع ذرات استفاده کرد.

6-تعریف نهایی شعاع براساس تابع توزیع شعاعی

به‌منظور داشتن معیار مشخص از شعاع ذرات تعریف زیر را در نظر می‌گیریم. نصف فاصله مرکز اتم تا جایی که تابع توزیع شعاعی کمتر از 0.05 می‌باشد، به عنوان شعاع ذره در نظر می‌گیریم. به‌منظور فهم بیشتر حل یک سیالِ دی-پی-دی همراه با تک کلویید در جعبه پریودیک را بررسی می‌کنیم که مشخصات آن مطابق جدول 2 می‌باشد. به غیر از پارامتر نیروی بقایی بقیه پارامترها برای کلویید مشابه ذرات حلال می‌باشد.

در "شکل 3" نمودار تابع توزیع شعاعی جریان اطراف ذره حلال و جریان حلال اطراف ذره کلویید نشان داده شده است. شعاع ذره حلال بنا بر تعریف تابع توزیع شعاعی برابر است با:

$$Rs_{\text{eff}} = \frac{r_0}{2} = \frac{0.21}{2} \tag{14}$$

در رابطه (14) r_0 فاصله ای است که در آن $g(r)$ کمتر از 0.05 می‌باشد و Rs_{eff} شعاع موثر ذره حلال می‌باشد.

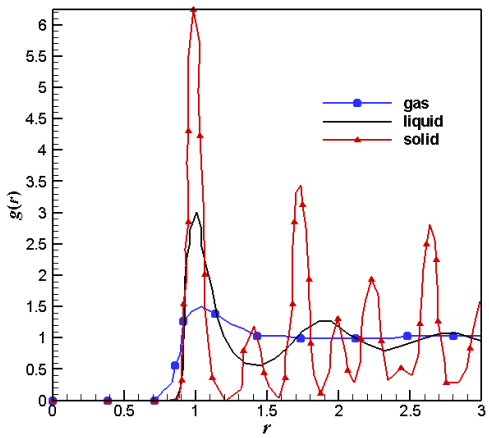


Fig. 2 The general form of radial distribution function for gas, liquid and solid states [33]

شکل 2 فرم کلی تابع توزیع شعاعی برای سه حالت گاز، مایع و جامد [33]

جدول 2 خواص سیال مورد استفاده در حل تعادلی پریودیک به منظور محاسبه تابع توزیع شعاعی

Table 2 Properties of flow in periodic simulation box for mean of RDF calculation

پارامتر	مقادیر
k_BT	1
r_c	1
اندازه دامنه	10×10×10
γ	4.5
گام زمانی	0.02
ρ	3
ضریب نیروی بقایی بین ذرات حلال	a_{ss}=25
ضریب نیروی بقایی بین ذرات حلال و کلویید	a_{sc}=203

و شعاع ذره کلویید که از روی نمودار تابع توزیع شعاعی "شکل 3" تعریف می‌شود به‌صورت زیر می‌باشد:

$$Rc_{\text{eff}} \cong r_0 - Rs_{\text{eff}} \cong 0.75 - .0105 \cong 0.645 \quad (15)$$

در رابطه (15) Rc_{eff} شعاع موثر ذره کلویید می‌باشد. در واقع چون $g(r)$ فاصله مرکز تا مرکز ذرات را نشان می‌دهد جهت محاسبه شعاع ذرات حلال باید r_0 را بر عدد 2 تقسیم کرد و برای محاسبه شعاع کلویید باید شعاع ذره حلال را از r_0 کم کرد.

با استفاده از تعریف شعاع به بررسی روند تغییر شعاع ذرات دی-پی-دی با ضریب نیروی بقایی و چگالی‌های مختلف، مطابق با جدول 1 می‌پردازیم.

در "شکل 4" شعاع ذرات برای ضرایب نیروی بقایی مختلف (که برحسب رابطه (10) محاسبه می‌شوند) و همچنین چگالی‌های مختلف رسم شده‌اند. همان طورکه مشاهده می‌شود با افزایش ضریب نیروی بقایی شعاع ذرات افزایش می‌یابد و با افزایش چگالی کاهش می‌یابد. در واقع با افزایش ضریب نیروی بقایی ناحیه غیرقابل نفوذ اطراف ذرات بزرگتر می‌شود که می‌توان از آن به اندازه شعاع ذره تعبیر کرد.

7-تفسیر و تحلیل نتایج

7-1- نیروی بقایی خطی با ضرایب متفاوت بین حلال و کلویید

در این بخش هدف این است که با استفاده از نیروی بقایی هیبریدی خطی-خطی با ضرایب متفاوت بین حلال و کلویید به شبیه‌سازی ذرات کلویید در کنار ذرات حلال پرداخته شود. در ابتدا در یک حل تعادلی با مشخصات

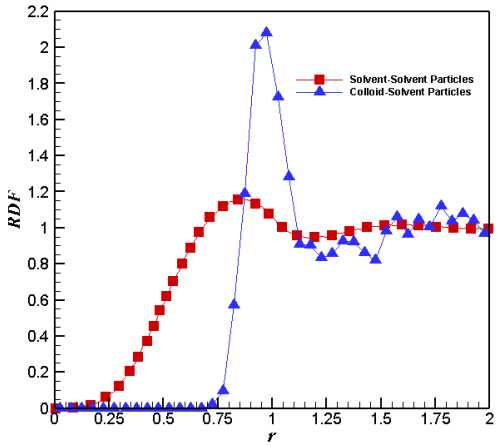


Fig. 3 Equilibrium radial distribution function of solvent particles and colloid particle

شکل 3 نمودار تابع توزیع شعاعی جریان اطراف ذره حلال و جریان حلال اطراف ذره کلویید

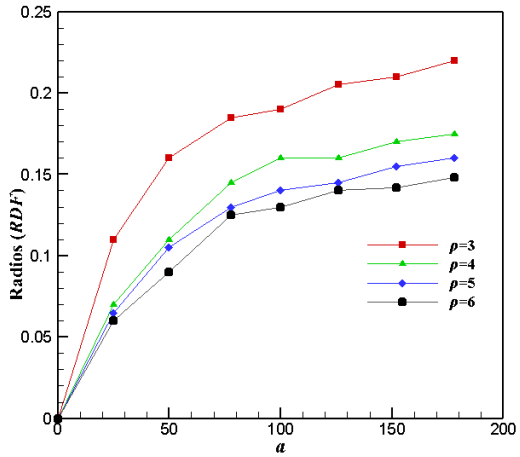


Fig. 4 Radios of particles (computed from RDF) as a function of conservative force parameter for different density numbers and k_BT =1

شکل 4 شعاع ذرات (محاسبه شده از نمودار تابع توزیع شعاعی) برحسب ضریب نیروی بقایی، چگالی‌های مختلف و k_BT =1

جدول 2 به محاسبه شعاع ذرات کلویید و حلال در غلظت ϕ =0.1 از کلوییدها می‌پردازیم و ضریب نیروی بقایی برای کلویید-حلال a_{cs} کلویید-کلویید a_{cc} را از 50 تا 3000 تغییر می‌دهیم و به بررسی نمودار تابع توزیع شعاعی می‌پردازیم. از روی نمودار تابع توزیع شعاعی علاوه بر بررسی تغییر شعاع کلوییدها با ضریب نیروی بقایی به بررسی وضعیت قرارگیری کلوییدها و پخش آن‌ها پرداخته می‌شود. و همچنین حد ماکزیمم ضریب نیروی بقایی کلوییدها را متوجه می‌شویم. در "شکل 5" نمودار تابع توزیع شعاعی ذرات حلال برای ضرایب نیروی بقایی مختلف برای کلوییدها رسم شده‌اند.

همان‌طور که از "شکل 5" مشخص است با تغییر ضریب نیروی بقایی کلوییدها نمودار تابع توزیع شعاعی مربوط به ذرات حلال تغییر نمی‌کند که به معنای ثابت ماندن شعاع ذرات حلال است.

در "شکل 6" نمودار تابع توزیع شعاعی مربوط به ذرات کلویید برای ضرایب a=50-1000 و در "شکل 7" برای ضرایب a=1500-3000 نشان داده شده است. با افزایش ضریب نیروی بقایی مابین کلوییدها شعاع ذرات کلویید نیز افزایش می‌یابد. قله نمودار تابع توزیع شعاعی تا مقدار a=1500 روند

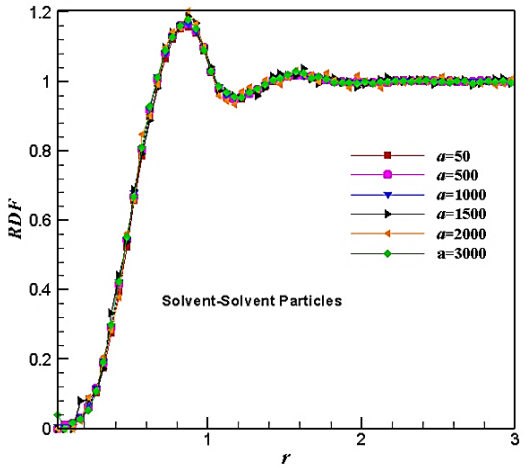


Fig. 5 Equilibrium radial distribution function of solvent particles with different conservative parameter a, between colloid particles

شکل 5 نمودار تابع توزیع شعاعی ذرات حلال-حلال با تغییر ضریب نیروی بقایی کلوییدها

افزایشی دارد و بعد از آن کاهش می‌یابد. در واقع اندازه قله در نمودار تابع توزیع شعاعی معرف شدت تجمع کلوییدها می‌باشد. برای مقادیر a<50 کلوییدها (برای a=25 شبیه نمودار تابع توزیع شعاعی برای حلال است) پراکندگی نسبتا خوبی دارند و همچنین نمودار تابع توزیع شعاعی برای کلوییدها شبیه نمودار تابع توزیع شعاعی ذرات حلال است. این یکدستی بین دو نمودار برای ذرات حلال و کلویید در مقادیر کوچک a نشان‌دهنده این است که هر چه ضریب نیروی بقایی کلوییدها به مقدار آن برای حلال نزدیک‌تر باشد همگنی در سیستم بیشتر است و توزیع یکنواختی از ذرات کلویید در کنار ذرات حلال وجود دارد. برای 50<a<1500 با افزایش قله نمودار تابع توزیع شعاعی ناهمگنی در سیستم به وجود می‌آید و منجر به یک سیستم نامتعادل می‌شود.که با افزایش مقدار a افزایش می‌یابد. بعد از آن برای مقادیر a>1500 این روند معکوس می‌شود. ولی ناهمگنی در سیستم همچنان مشاهده می‌شود.

با بررسی روند نمودارهای تابع توزیع شعاعی مشاهده شد که با افزایش ضریب نیروی بقایی خطی شعاع ذرات کلویید افزایش می‌یابد در عین حال

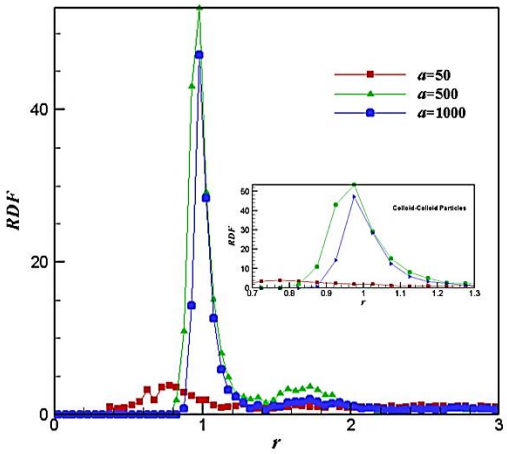


Fig. 6 Equilibrium radial distribution function of colloid-colloid particles with different conservative parameter a, between colloid particles a=50-1000

شکل 6 نمودار تابع توزیع شعاعی ذرات کلویید-کلویید با تغییر ضریب نیروی بقایی کلوییدها a=50-1000

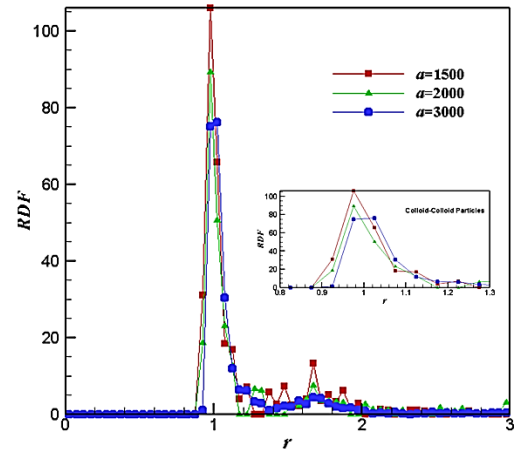


Fig. 7 Equilibrium radial distribution function of colloid-colloid particles with different conservative parameter a, between colloid particles a=1500-3000

شکل 7 نمودار تابع توزیع شعاعی ذرات کلویید-کلویید با تغییر ضریب نیروی بقایی کلوییدها a=1500-3000

شاهد ایجاد تراکم شدید کلوییدها می‌باشیم و ناهمگنی در سیستم ایجاد می‌شود.

7-2- نیروی بقایی نمایی

همان‌طور که در بخش قبل اشاره شد در صورت استفاده از نیروی بقایی خطی در محلول‌های کلوییدی با پدیده کلاستر شدن ذرات کلویید روبرو هستیم. برای رفع این مشکل پن [6] تابع وزنی نمایی بین ذرات کلویید-کلویید و کلویید-حلال و تابع وزنی خطی استاندارد (رابطه (6)) بین حلال-حلال را پیشنهاد داد. در واقع استفاده از نیروی بقایی هیبریدی نه تنها باعث پخش مناسب کلوییدها می‌شود بلکه دافعه سخت بین کلوییدها ایجاد می‌کند و بدون این‌که مشابه روش دینامیک مولکولی مجبور به استفاده از گام زمانی کوچکتر باشیم. شکل نیروی بقایی نمایی پیشنهادی پن به فرم رابطه زیر می‌باشد [6]:

$$F_{ij}^{C} = \frac{a_{ij}}{1-e^{-b_{ij}}}\left(e^{\frac{-b_{ij}r_{ij}}{r_c}} - e^{-b_{ij}}\right) \qquad (16)$$

در رابطه فوق a و b پارامترهای تغییر پذیر در این نیرو هستند. در "شکل 8" مقایسه بین این نیرو و نیروی بقایی خطی انجام شده است. می‌توان با تغییر پارامتر a سایز ذره را کنترل کرد و همچنین با تغییر علامت ضریب b می‌توان نیروی بقایی سخت بین کلوییدها و یا نیروی بقایی خیلی نرم بین کلویید و حلال ایجاد کنیم.

در واقع هر ذره کلوییدی توسط یک تک ذره دی-پی-دی مدل می‌شود. تنها با این تفاوت که سایز این ذرات را می‌توان توسط انتخاب صحیح ضریب a نیروی بقایی نمایی رابطه (16) کنترل کرد. پن [6] نشان داد که با انتخاب مناسب نیروی بقایی هیبریدی نمایی-خطی بدون نیاز به استفاده از گام زمانی کوچکتر می‌توان فاز یکنواختی از حلال-کلویید ایجاد کرد. به‌منظور محاسبه سایز ذره بررسی از طریق نمودار تابع توزیع شعاعی انجام می‌گیرد.

نکته مهم در استفاده از نیروی بقایی نمایی این است که به دلایلی که در ادامه ذکر می‌شود نمی‌توان به تنهایی با استفاده از این نوع نیرو و فقط از طریق تغییر اندازه a، ذرات با سایزهای مختلف مدل کنیم و لزوم مدل‌سازی یک سیستم همگن استفاده از نیروی بقایی هیبریدی نمایی-خطی می‌باشد. طبق رابطه (16) در نیروی بقایی نمایی اگر ضریب b>0 باشد، نیروی بقایی فوق العاده نرم خواهدبود و از نیروی بقایی خطی نیز نرم‌تر می‌باشد.

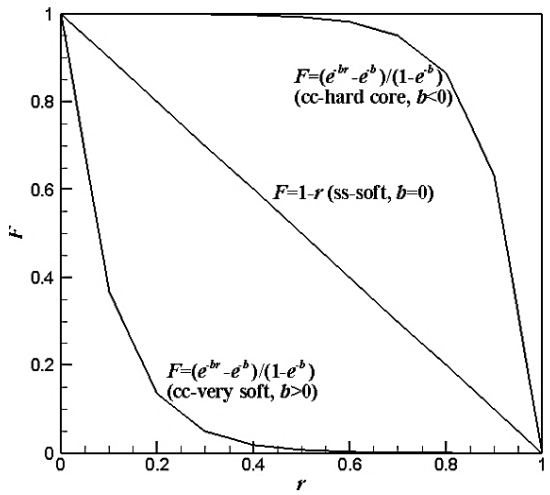


Fig. 8 Comparison between linear conservative force, hard and soft exponential conservative force. Here, $r = r_{ij}/r_c$ and $F = F_{ij}^{C}/a$ [6]

شکل 8 مقایسه نیروهای بقایی خطی، نمایی خیلی سخت وخیلی نرم [6]

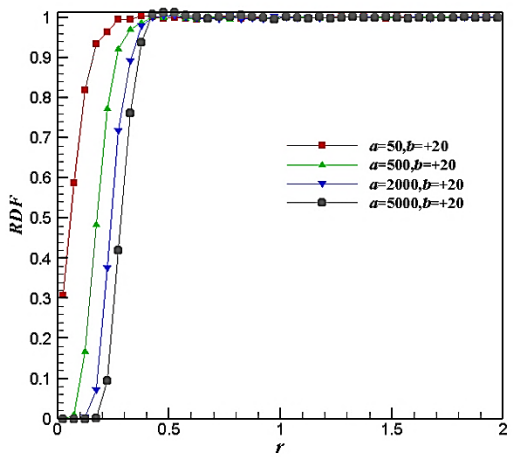


Fig. 9 Equilibrium radial distribution function of particles with exponential conservative force b=+20 and different a

شکل 9 نمودار تابع توزیع شعاعی ذرات با نیروی بقایی نمایی خالص b=+20 و ضرایب a مختلف

با رسم نمودار تابع توزیع شعاعی در "شکل 9" برای حل تعادلی سیالی که فقط نیروی بقایی نمایی با b>0 بین ذرات آن‌ها برقرار است مشاهده می‌شود که تابع توزیع شعاعی حتی برای ضریب نیروی بقایی بزرگ a هم به شکل گازی باقی می‌ماند. در واقع با استفاده از نیروی بقایی نمایی نرم و گام زمانی کوچک می‌توانیم گاز ایده آل داشته‌باشیم. با افزایش ضریب این نیرو یعنی a، تغییرات ضریب خود دیفیوز ذرات و فشار سیستم بسیار کم است و فاز آن همان گاز باقی می‌ماند. در واقع وقتی تابع وزنی نیروی بقایی بسیار نرم باشد حتی با افزایش ضریب نیروی بقایی a چون فقط در فاصله کمی از ذرات این نیرو زیاد می‌شود و در فاصله بیشتری این نیرو تقریبا صفر است، شبیه‌سازی بسیار نزدیک به گاز ایده‌آل می‌باشد که در آن هیچ نیرویی بین ذرات وجود ندارد و فقط ذرات برخورد دارند و اندازه ذرات نسبت به مسیر آزاد میانگین[1] ناچیز است. این تابع وزنی برای شبیه‌سازی گاز ایده‌آل با دقت خوبی عمل می‌کند. انتگرال عددی فشار ویریال نیز تایید کننده این مطلب است. زیرا انتگرال فشار ویریال رابطه (17) (در آن $f(r)$ همان رابطه نیروی بقایی (16) می‌باشد) بسیار کوچک می‌شود.

$$p = \rho k_B T + \frac{2\pi}{3}\rho^2 \int_0^1 r f(r) g(r) r^2 dr \tag{17}$$

البته اندازه ضریب b موثر است و هر چه بزرگتر باشد به سیال گاز ایده آل نزدیکتر می‌شویم و هر چه کوچکتر باشد به حالت خطی نیروی بقایی نزدیک می‌شویم. ولی تفاوتی که با حالت خطی نیروی بقایی دارد در این است که برای حالت خطی با افزایش ضریب نیروی بقایی a به‌دلیل ایجاد فازهای مختلف ناهمگنی در سیستم ایجاد می‌شود در صورتی که با استفاده از تابع وزنی نمایی با ضریب b >0 می‌توان با تغییر اندازه a بین ذرات، محلول همگنی از گازها با شعاع‌های مختلف ایجاد کرد بدون این‌که تغییر فاز داشته باشیم.

زمانی که b<0 باشد، به دلیل نیروی دافعه سخت هسته بین ذرات دیفیوژن بسیار پایین داریم و ذرات هیچ حرکتی ندارند. در واقع به فاز جامد می‌رسیم. و فشار سیستم شدیدا بالا می‌رود که باز هم به دلیل بزرگ شدن انتگرال تابع ویریال است. در این حالت نمی‌توان ضریب a را خیلی افزایش داد زیرا به دلیل دافعه شدید ذرات فرار می‌کنند و سیستم نامتعادل ایجاد می‌شود. در "شکل 10" نمودار تابع توزیع شعاعی ذرات با نیروی بقایی نمایی خالص b=-3 و a=50 نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود سیستم در این حالت در فاز جامد قرار دارد. به‌دلیل محدودیت در افزایش a فقط برای یک مقدار a نمودار تابع توزیع شعاعی رسم شده است.

در کل با تغییر علامت و اندازه b مطابق جدول 3 می‌توان فازهای مختلفی ایجاد کرد که در شرایطی که قدر مطلق b خیلی کوچک باشد چه مثبت چه منفی به تابع بقایی خطی نزدیک می‌شویم. با ضریب b مثبت فاز-های گازی مختلف در یک محلول همگن می‌توان ایجاد کرد در صورتی که با ضریب b منفی به دلیل ایجاد نیروی دافعه شدید بین ذرات محدودیت افزایش ضریب a را داریم.

3-7- نیروی بقایی هیبریدی نمایی-خطی با ضرایب متفاوت بین حلال و کلویید

در این بخش هدف این است که با استفاده از نیروی بقایی هیبریدی خطی-نمایی با ضرایب متفاوت بین حلال و کلویید به شبیه‌سازی ذرات کلویید در کنار ذرات حلال پرداخته شود. به این منظور در یک حل تعادلی با مشخصات جدول 4 و در غلظت‌های 0.3 0.2 ,0.1 ,0.05=ϕ از کلوییدها به بررسی تابع توزیع شعاعی می‌پردازیم. از روی نمودار تابع توزیع شعاعی علاوه بر بررسی شعاع کلوییدها با ضریب نیروی بقایی به بررسی وضعیت قرارگیری کلوییدها و پخش آن‌ها پرداخته می‌شود. و با حالت نیروی بقایی خطی مقایسه می‌شود.

همان‌طور که از نمودارهای تابع توزیع شعاعی "شکل 11" مشاهده می-شود، با توجه به مقادیر در نظر گرفته شده برای ضرایب نیروی بقایی نمایی و خطی مطابق جدول 4، شعاع ذرات کلویید 0.45 و شعاع ذرات حلال 0.12 می‌باشند. در این قسمت ذرات کلویید بزرگتر (با بزرگ‌تر کردن ضریب نیروی

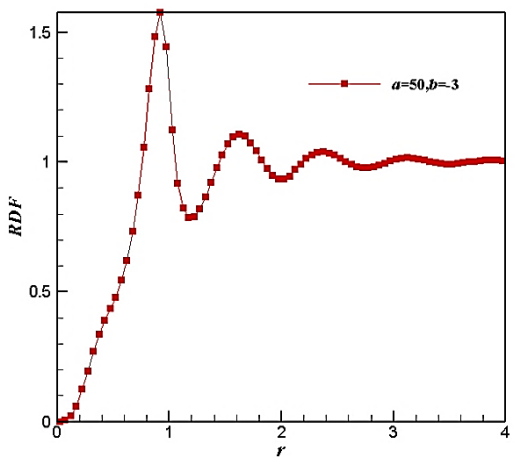


Fig. 10 Equilibrium radial distribution function of particles with exponential conservative force b=-3 and a=50

شکل 10 نمودار تابع توزیع شعاعی ذرات با نیروی بقایی نمایی خالص b=-3 و a=50

جدول 3 فازهای مختلف ایجاد شده توسط نیروی بقایی نمایی با تغییر علامت ضریب b

Table 3 Different phases created by exponential conservative force and changing sign of b

$F_{ij}^C = \frac{a_{ij}}{1-e^{-b_{ij}}}(e^{-b_{ij}r_{ij}/r_c} - e^{-b_{ij}})$		
گاز ایده آل	$\lvert b\rvert \gg 0$	b مثبت
جامد	$\lvert b\rvert \ll 0$	b منفی
مایع	$\lvert b\rvert \cong 0$	b مثبت یا منفی

[1] Mean free path

بقایی نمایی بین کلوییدها و ذرات حلال) تعریف نمی‌شوند زیرا شعاع کوچک‌تر برای ذرات کلویید امکان مطالعه سیستم با تعداد ذرات کلویید بیشتر در غلظت‌های یکسان و توزیع یکنواخت‌تری از سیستم می‌دهد. با دانستن شعاع کلوییدها می توان به تعریف صحیحی از غلظت کلوییدها در محلول رسید. در کار حاضر تعداد ذرات کلویید، N_c= 130 –780 در نظر گرفته می‌شوند که مطابق با غلظت‌های ϕ = 0.05 - 0.3 می‌باشند و غلظت حجمی کلوییدها مطابق با رابطه $\phi = (N_c \times V_c)/V_{box}$ تعریف می‌شود. که در این رابطه V_c حجم ذره کلویید می باشد.

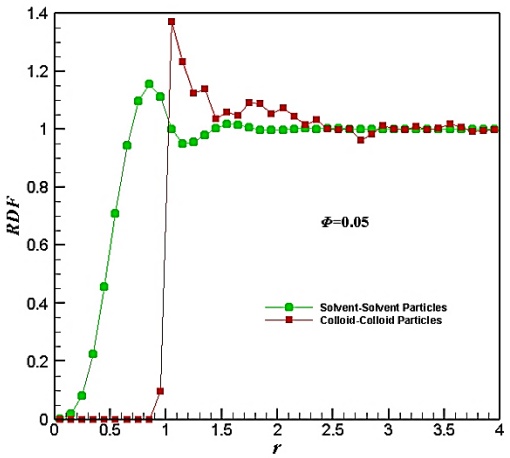
همان‌طور که در "شکل 11" مشاهده می‌شود علاوه بر این‌که با تغییر ضریب a بین کلوییدها نسبت به حلال ذرات کلویید با شعاع بزرگتر ایجاد شده‌است، در مقایسه با نیروی بقایی خالص خطی پخش مناسبی از ذرات کلویید در کنار ذرات حلال پدید آمده که نشان‌دهنده سیستم همگن می‌باشد. همچنین با افزایش غلظت کلوییدها اندازه قله‌های دوم و سوم در نمودار تابع توزیع شعاعی نیز افزایش می‌یابد ولی همچنان توزیع همگنی از ذرات کلویید در کنار ذرات حلال را خواهیم داشت.

در واقع فقط با استفاده از انتخاب مناسب نیروی بقایی هیبریدی خطی-نمایی بین ذرات سیستم کاملا همگن و با پخش مناسب از ذرات کلویید در کنار ذرات حلال ایجاد شد و هم این‌که بدون هزینه محاسبات زیاد (برای مدل کردن ذرات دی-پی-دی فریز شده به منظور ایجاد ذرات بزرگتر) ذرات کلویید با سایز بزرگتر از ذرات حلال را شاهد هستیم.

جدول 4 خواص سیال مورد استفاده در حل تعادلی پریودیک با نیروی بقایی هیبریدی خطی-نمایی به‌منظور محاسبه تابع توزیع شعاعی

Table 4 Properties of flow in periodic simulation box with hybrid linear-exponential conservative force for mean of RDF calculation

پارامتر	مقادیر
k_BT	0.1
r_c	1
سایز دامنه	10×10×10
γ	4.5
گام زمانی	0.0001
ρ	3
ϕ	0.05, 0.1, 0.2, 0.3
ضریب نیروی بقایی خطی بین ذرات حلال	a_{ss}=2.5
ضرایب نیروی بقایی نمایی بین ذرات حلال و کلویید	a_{sc}=250 b_{sc}=+20
ضرایب نیروی بقایی نمایی بین ذرات کلویید و کلویید	a_{cc}=250 b_{cc}=-20



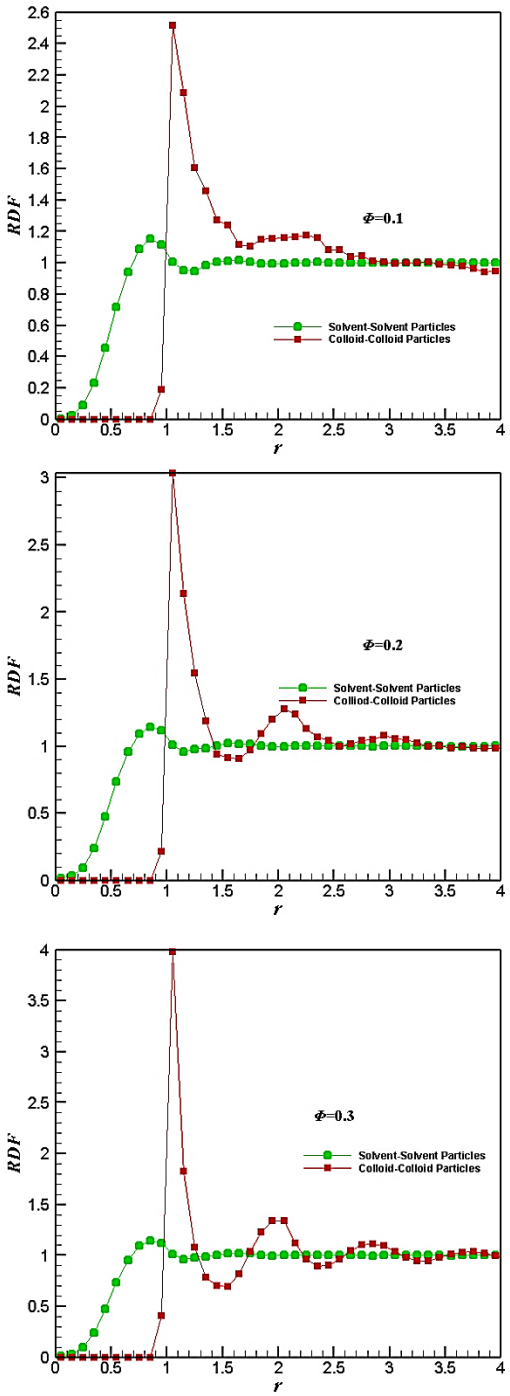


Fig. 11 Equilibrium radial distribution function of colloid-colloid and solvent-solvent particles with exponential conservative force between colloids and linear between solvent for different concentrations of colloid according to Table. 4

شکل 11 نمودار تابع توزیع شعاعی ذرات کلویید-کلویید و حلال-حلال با نیروی بقایی نمایی بین کلوییدها و خطی بین ذرات حلال برای غلظت‌های مختلف کلویید مطابق مشخصات جدول 4

8- نتیجه‌گیری

در این تحقیق به بررسی تغییرات شعاع ذرات با نوع و ضریب نیروی بقایی در روش دینامیک ذره استهلاکی پرداخته شد. به این منظور روش مناسب جهت محاسبه شعاع مورد تحقیق قرار گرفت و از بین روش‌های موجود تابع توزیع شعاعی به‌عنوان مناسب‌ترین روش انتخاب شد و نشان داده شد که شعاع

ذرات با افزایش نیروی بقایی افزایش می‌یابند. سپس اثرات تغییر ضریب نیروی بقایی خطی بین کلوییدها در محلول با نیروی بقایی خطی خالص مورد بررسی قرار گرفت و مشاهده شد که با افزایش این ضریب بین ذرات کلویید شاهد ناهمگنی در سیستم و ایجاد تمرکز شدید ذرات کلویید هستیم. همچنین با استفاده از نیروی بقایی نمایی خالص نشان داده شد که می‌توان نیروی بقایی فوق‌العاده نرم و فوق‌العاده سخت هسته فقط از طریق تغییر علامت b جهت شبیه‌سازی فازهای گازی و یا جامد ایجاد کرد. درنهایت توسط نیروی بقایی هیبریدی نمایی- خطی با ضرایب متفاوت بین حلال و کلویید و غلظت‌های مختلف کلویید، محلول کاملا همگن و با توزیع مناسب ذرات کلویید (با شعاع حدود 4 برابر ذرات حلال) و حلال ایجاد شد.

9- تقدیر و تشکر

نویسندگان مراتب تقدیر و تشکر صمیمانه خود از استفاده از امکانات پردازشی مرکز ابررایانش ملی شیخ بهایی را اعلام می‌نمایند. این مرکز تحت حمایت معاونت علمی و فناوری ریاست جمهوری و دانشگاه صنعتی اصفهان می‌باشد.

10- مراجع

[1] P. J. Hoogerbrugge, J. M. V. A. Koelman, Simulating microscopic hydrodynamics phenomena with dissipative particle dynamics, *Europhysics Letters*, Vol. 19, No. 3, pp. 155, 1992.

[2] I. V. Pivkin, G. E. Karniadakis, Accurate coarse-grained modeling of red blood cells, *Physical review letters*, Vol. 101, No. 11, pp. 118105, 2008.

[3] S. Y. Koopaei, A. R. Pishevar, M. S. Saidi, Y. Afshar, S. Mokhtarian, Calculation the diffusion coefficient for water and lipid through the biological cell bilayer membranes using dissipative particle dynamics method, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 14, No. 5, pp. 102-110, 2014. (In Persian فارسی)

[4] S. Chen, N. Phan-Thien, B. C. Khoo, X. J. Fan, Flow around spheres by dissipative particle dynamics, *Physics of Fluids* ,Vol. 18, No. 10, pp. 103605, 2006.

[5] I. V. Pivkin, *Algorithms for Continuum and Atomistic Modeling of Blood Platelet Phenomena*, PhD Thesis, Brown University, 2006 .

[6] W. Pan, *Single particle DPD: Algorithms and Applications*, PhD Thesis, Brown University, 2010.

[7] W. Pan, D. A. Fedosov, G. E. Karniadakis, B. Caswell, Hydrodynamic interactions for single dissipative-particle-dynamics particles and their clusters and filaments, *Physical Review E*, Vol. 78, No. 4, pp. 046706, 2008.

[8] W. Pan, I. Pivkin, G. Karniadakis, Single-particle hydrodynamics in DPD: A new formulation, *Europhysics Letters*, Vol. 84, No. 1, pp. 10012, 2008.

[9] P. Espanol, A Fluid Particle Model, *Physical Review E*, Vol. 57, No. 3, pp. 2930, 1998.

[10] N. Mai-Duy, N. Phan-Thien ,B. C. Khoo, Investigation of particles size effects in dissipative particle dynamics (DPD) modelling of colloidal suspensions, *Computer Physics Communications*, Vol. 189, pp. 37-46, 2015.

[11] A. Moshfegh, A. Jabbarzadeh, Dissipative particle dynamics: effects of parameterization and thermostating schemes on rheology, *Soft Materials*, Vol. 13, No. 2, pp. 106-117, 2015.

[12] S. S. Trofimov, *Thermodynamic consistency in dissipative particle dynamics*, PhD Thesis, Eindhoven University of Technology, 2003 .

[13] R. D. Groot, P. B. Warren, Dissipative particle dynamics: Bridging the gap between atomistic and mesoscopic simulation, *Chemical Physics*, Vol. 107, No. 11, pp. 4423-4435, 1997.

[14] A. G. Goicochea, M. Romero-Bastida, R. López-Rendón, Dependence of thermodynamic properties of model systems on some dissipative particle dynamics parameters, *Molecular Physics*, Vol. 105, No. 17-18, pp. 2375-2381, 2007.

[15] S. Jamali, *Rheology of Colloidal Suspensions: A Computational Study*, PhD Thesis, Case Western Reserve University, 2015.

[16] E. E. Keaveny, I. V. Pivkin, M. Maxey, G. Em Karniadakis, A comparative study between dissipative particle dynamics and molecular dynamics for simple-and complex-geometry flows, *Chemical physics*, Vol. 123, No. 10, pp. 104107, 2005.

[17] A. Kumar, Y. Asako, E. Abu-Nada, M. Krafczyk, M. Faghri, From dissipative particle dynamics scales to physical scales: a coarse-graining study for water flow in microchannel, *Microfluidics and Nanofluidics*, Vol. 7, No. 4, pp. 467, 2009.

[18] C. A. Marsh, G. Back, M. H. Ernst, Fokker-Planck-Boltzmann equation for dissipative particle dynamics, *Europhysics Letters*, Vol. 38, No. 6, pp. 411, 1997.

[19] A. J. Masters, P. B. Warren, Kinetic theory for dissipative particle dynamics: The importance of collisions, *Europhysics Letters*, Vol. 48, No. 1, pp. 1, 1999.

[20] I. Pagonabarraga, M. H. J. Hagen, D. Frenkel, Self-consistent dissipative particle dynamics algorithm, *Europhysics Letters*, Vol. 42, No. 4, pp. 377, 1998.

[21] I. V. Pivkin, G. E. Karniadakis, Coarse-graining limits in open and wall-bounded dissipative particle dynamics systems, *Chemical Physics*, Vol. 124, No. 18, pp. 184101, 2006.

[22] P. Espanol, P. Warren, Statistical mechanics of dissipative particle dynamics, *Europhysics Letters* ,Vol. 30, No. 4, pp. 191, 1995.

[23] S. Plimpton, Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics, *Computational Physics*, Vol. 117, No. 1, pp. 1-19, 1995.

[24] R. D. Groot, K. Rabone, Mesoscopic simulation of cell membrane damage, morphology change and rupture by nonionic surfactants, *Biophysical*, Vol. 81, No. 2, pp. 725-736, 2001.

[25] D. A. F. W. Pan, G. E. Karniadakis, B. Caswell, Hydrodynamic interactions for single dissipative-particle-dynamics particles and their clusters and filaments, *Physical Review E*, Vol. 78, No. 4, pp. 046706 2008.

[26] E. L. Cussler, *Diffusion: Mass Transfer in Fluid Systems*, pp. 126-129, New York: Cambridge University Press, 2009.

[27] B. E. Poling, J. M. Prausnitz, J. P. O'connell, *The Properties of Gases And Liquids*, Fifth Edition, pp. 11.1-11.5, New York: Mcgraw-hill 2001.

[28] D. Evans, T. Tominaga, H. Davis, Tracer diffusion in polyatomic liquids, *Chemical Physics*, Vol. 74, No. 2, pp. 1298-1305, 1981.

[29] C. Wilke, P. Chang, Correlation of diffusion coefficients in dilute solutions, *AIChE*, Vol. 1, No. 2, pp. 264-270, 1955.

[30] J. A. Backer, C. P. Lowe, H. C. J. Hoefsloot, P. D. Iedema, Poiseuille flow to measure the viscosity of particle model fluids, *Chemical physics*, Vol. 122, No. 15, pp. 154503, 2005.

[31] I. V. Pivkin, G. E. Karniadakis, A new method to impose no-slip boundary conditions in dissipative particle dynamics, *Computational Physics*, Vol. 207, No. 1, pp. 114-128, 2005.

[32] J. Happel, H. Brenner, *Low Reynolds Number Hydrodynamics with Special Application to Particulate Media*, First Edittion, pp. 43-52, Leiden, Boston: Martinus Nijhoff, 1983.

[33] J. P. Hansen, I. R. McDonald, *Theory of simple liquids: with applications to soft matter*, Forth Edittion., pp. 35-40, Cambridge: Academic Press, 2013.