کنفرانس سراسری مهندسی مکانیک ایران
موسسه بین المللی آموزشی و پژوهشی خوارزمی – ۸ اسفند ۱۳۹۲
The First National Conference on Mechanical Engineering of Iran
27 February 2014
Shiraz - Iran

مشخصات جریان درون نانو کانال‌های حاوی محیط متخلل با استفاده از روش‌های شبیه-سازی دینامیک مولکولی و شبکه بولتزمن

امیر همایون مقدادی اصفهانی[۱] ایمان تصدیقی[۲]، ابراهیم شیرانی[۳]
[۱]دانشگاه آزاد اسلامی، واحد نجف آباد، گروه مهندسی مکانیک، اصفهان، ایران amir_meghdadi@pmc.iaun.ac.ir
[۲]مؤسسه آموزش عالی صنعتی فولاد، فولاد شهر، اصفهان، کد پستی ۸۴۱۵۶۸۳۱۱۱، iman.tasdighi@gmail.com
[۳]مؤسسه آموزش عالی صنعتی فولاد، فولاد شهر، اصفهان، کد پستی ۸۴۱۵۶۸۳۱۱۱، eshirani@gmail.com

چکیده – در این پژوهش، از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و شبکه بولتزمن، برای محاسبه خواص جریان پوازی گاز آرگون در یک نانو کانال با هندسه متخلخل بهره می‌بریم. مشخصات جریان پوازی در چندین نوع کانال با تخلخل‌های متفاوت مورد بررسی قرار می‌گیرد. تأثیر پارامترهای مختلفی از قبیل عدد نادسن، نسبت تخلخل و نیروهای اعمالی، بر روی پروفیل‌های سرعت، دما بحث می‌شوند. نتایج جالبی از حل این دو روش استخراج می‌شود. نتایج بیان می‌کنند که روش دینامیک مولکولی و روش شبکه بولتزمن اصلاح شده، قادر هستند پدیده‌های مربوط به جریان-های مختلف مانند گذردهی و جریان دارسی را به خوبی پیش بینی کند. با افزایش نیروی اعمالی به کانال، نسبت تخلخل و عدد نادسون شاهد افزایش سرعت متوسط و نرخ جریان خواهیم بود. با افزایش سرعت متوسط افزایش دمای مقطع عرضی نانو کانال را نیز شاهد هستیم.
کلید واژه- جریان پوازی، دینامیک مولکولی، شبکه بولتزمن، نانو کانال متخلخل

۱- مقدمه

امروزه روش‌های محاسباتی یکی از ابزارهای مفید درجهت مدل‌سازیِ سیستم‌هایی است که ساخت تجهیزات آزمایشگاهی برای بررسی خواص آن‌ها، مقرون به‌صرفه نیست. روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و روش شبکه بولتزمن دو مورد از کاربردی‌ترین روش‌های عددی ارائه شده در مقیاس میکرو و نانو، می‌باشند.

در این پژوهش، جریان پوازی گاز ارگون درون نانو کانال-های متخلخل با استفاده از دو روش دینامیک مولکولی و شبکه بولتزمن در نسبت‌های تخلخل مختلف که در ادامه بدان اشاره خواهد شد، بررسی خواهد شد. در شبیه‌سازی-های انجام شده در زمینه کانل‌ها، از روش شبکه بولتزمن در بررسی خواص جریان در کانال‌های متخلخل بهره برده شده است اما از روش دینامیک مولکولی در به دست آوردن خواص تاکنون استفاده نشده است.

۲- روش شبکه بولتزمن

در سالهای اخیر تلاش زیادی به منظور استفاده از روش شبکه بولتزمن برای شبیه سازی جریان در رژیم لغزشی انجام شده اما صرفاً تعداد بسیار اندکی از مقالات را می‌توان ذکر نمود که از این روش برای شبیه‌سازی جریان در رژیم گذرا استفاده کرده باشند و روش‌هایی که توسط همین تعداد اندک از مقالات ارائه شده عموماً توانایی شبیه سازی تمام رژیم‌های جریان را ندارند و به علاوه دارای پیچیدگی‌هایی هستند که استفاده از آنها برای محیط‌های متخلخل را غیر ممکن می‌سازد. در مقالات قبلی [۱ و ۲] ما با انجام اصلاحی بر روی زمان آرامش هیدرودینامیکی و گرمایی، توانایی روش شبکه بولتزمن در مدلسازی جریان در مقیاس نانو – که معمولاً منطبق با رژیم گذرا می‌باشد- را افزایش دادیم که خوانندگان محترم می‌توانند جهت آشنایی با روش شبکه بولتزمن و نحوه انجام تصحیحات به

مقالات مذکور مراجعه نمایند.

۳- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

پایه و اساس روش دینامیک مولکولی، معادله دوم نیوتن است. در ابتدا نیروهای وارد بر ذرات توسط تابعی به نام تابع پتانسیل محاسبه می‌شوند و سپس با انتگرال گیری زمانی از این روابط معادله حرکت حل شده و موقعیت و سرعت جدید ذرات واقع در دامنه حل به دست می‌آیند و این روند تا زمانی ادامه می‌یابد که سیستم به حالت تعادل برسد.

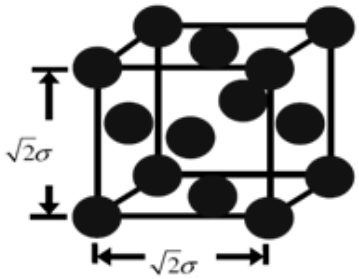
تقابل‌های بین مولکولی با استفاده از تابع پتانسیل بیان می‌شود. تابع پتانسیل ورودی اصلی هر شبیه‌سازی دینامیک مولکولی است. یکی از توابع پتانسیل معروف و ساده‌ای که تقابل میان دو مولکول را تشریح می‌کند، تابع پتانسیل لنارد – جونز است که برای شبیه‌سازی مایعات ساده و جامدات استفاده قرار می‌گیرد. این تابع پتانسیل برای اولین بار توسط لنارد و جونز در سال ۱۹۲۴ معرفی شد. با مشتق گیری از این تابع نیروی وارد بر ذرات به دست می‌آید. این تابع در معادله (۱) نشان داده شده است.

$$\varphi(r_{ij}) = 4\varepsilon[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{6}] \qquad , r < r_c \qquad (۱)$$

که در آن σ قطر ذره، ε عمق انرژی و r_{ij} فاصله بین دو ذره است. اغلب فاصله بین دو ذره را برابر شعاع قطع یا r_c در نظر گرفته می‌شود. نکته قابل ذکر ان است که در فاصله-های بزرگتر از شعاع قطع مقدار نیروی بین دو ذره بسیار ناچیز و قابل صرفنظر کردن می‌شود. مقدار نیروی بین ذرات از مشتق‌گیری از این تابع پتانسیل حاصل می‌شود.

امروزه نرم‌افزارهای منبع باز در شاخه‌های مختلف علمی، به یکی از پرطرفدارترین نرم‌افزارهای روز دنیا مبدل شده است. در زمینهٔ مدل‌سازی سیستم‌های مولکولی نیز این-گونه نرم‌افزارها در حال رشد و تکامل هستند. از جمله پرطرفدارترین آن‌ها نرم افزار لمپس[1]، است [۱۷].

در شبیه‌سازی‌ها از تابع پتانسیل لنارد-جونز (مطابق با پارامترهای جدول (۱))، الگوریتم سرعت ورله برای انتگرال‌گیری زمانی، ترموستات مقیاس بندی سرعت و ساختار شبکه FCC با ثابت شبکه ۰/۸۱ استفاده می‌کنیم. نمایی از شبکه FCC را در شکل (۱) مشاهده می‌کنید.



شکل ۱: نمایی از شبکه با ساختار FCC

از شرط مرزی تناوبی در راستای حرکت جریان (X) استفاده می‌نمائیم. استفاده از کمیت‌های بی‌بعد در حین شبیه‌سازی، یکی از روش‌هایی است که در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بهره می‌بریم. در ادامه، بالانویس *، بیانگر کمیت بی‌بعد است. برای شروع شبیه‌سازی نیازمند تخصیص سرعت اولیه به ذرات هستیم که این کار با استفاده از توزیع سرعت ماکسول-بولتزمن حاصل می-شود. نمونه‌برداری و محاسبه خواص ماکروسکوپی توسط رابطهٔ (۱۵) انجام می‌شود.

جدول ۱- پارامترهای استفاده شده در پتانسیل لنارد-جونز

قطر اتم (σ)	عمق انرژی (ε)	برهم‌کنش بین ذرات

[1] LAMMPS

آرگون – آرگون	$۱/۶۷\times۱۰^{-۲۱}$	$۳/۴\times۱۰^{-۱۰}$
پلاتین	$۰/۸۹۴\times۱۰^{-۲۱}$	$۳/۰۸۵\times۱۰^{-۱۰}$
آرگون – پلاتین	$۱/۱۰۵۳۸\times۱۰^{-۲۱}$	$۳/۲۴۲۵\times۱۰^{-۱۰}$

$$\kappa = \frac{1}{N_{tot}} \sum_{i=1}^{N_{tot}} (\kappa_{i,x} + \kappa_{i,y} + \kappa_{i,z}) \qquad (۱۵)$$

در این رابطه κ کمیت مورد نظر در شبیه‌سازی است. در این شبیه‌سازی‌ها گام زمانی بی‌بعد (t^*) برابر $۰/۰۰۲\tau$ ($\tau = \sigma\sqrt{m/\varepsilon} = ۲/۱۶\times۱۰^{-۱۲}$) در نظر گرفته شد.

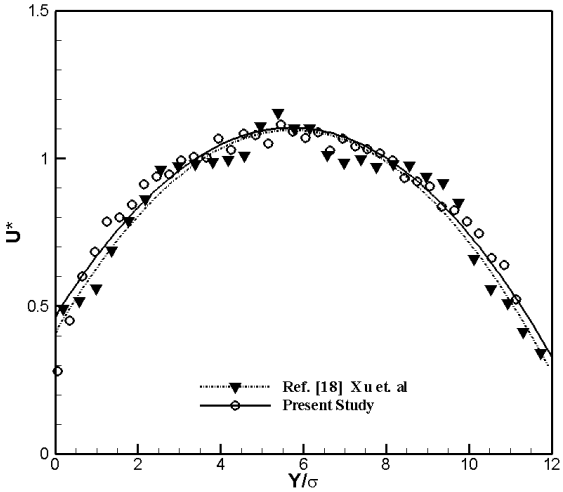
روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در مطالعه محیط‌های متخلخل بیشتر در زمینه بررسی جریان در غشاءها مورد استفاده قرار گرفته است. چانگ و لی [۲۱] با ترکیب روش‌های دینامیک مولکولی و مونت کارلو جریان گازهای هلیوم، نیتروژن و دی‌اکسید کربن را درون یک غشاء متخلخل سیلیکونی مورد بررسی قرار داده و تأثیر فشار، دما و ترکیب گازها بر جریان را ذکر نمودند. پل و همکارش [۲۳] نیز به کمک روش دینامیک مولکولی جریان پوازی گازهای هلیوم، هیدروژن و آرگون را درون غشاءهای سیلیکونی متخلخل مدل نموده و به این وسیله، خاصیت غربالگری غشاءهای زئولیتی میکرومتخلخل را با غشاءهای سیلیکونی آمورف[۱] ساخته شده به کمک روش سل ژل مقایسه نمودند. در پژوهشی دیگر چانگ و همکارش[۱] پدیده جذب سطحی و دیفیوژن سطحی درون غشاء سیلیکونی را به کمک روش دینامیک مولکولی و از طریق شمارش تعداد اتم‌های جذب شده مورد مطالعه قرار داده و نفوذپذیری گاز دی اکسید کربن را بررسی نمودند. همچنین زانگ و همکاران [۲۴] با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، ویسکوزیته برشی مایع آرگون درون محیط متخلخل را به ازای دما، چگالی و تخلخل‌های مختلف محاسبه نموده و روابطی را برای پیش‌بینی ویسکوزیته مایعات ساده در محیط‌های متخلخل به صورت تابعی از دما، چگالی و تخلخل ارائه نمودند.

در مجموع می‌توان گفت که به کمک روش دینامیک مولکولی، مدلسازی‌های متعددی برای جریان در مقیاس نانو انجام شده و اثرات بوجود آمده در جریان در محیط‌های غیر پیوسته بررسی شده است. با کاهش طول مشخصه (عرض کانال) اثرات ناپیوستگی بیشتر شده و متناسب با آن انحراف از ناویر استوکس افزایش می‌یابد. همچنین تحقیقات ارائه شده نشان می‌دهند که روش دینامیک مولکولی از توانایی خوبی جهت بررسی پدیده‌های مختلف جریان در محیط‌های متخلخل نظیر نفوذپذیری، پدیده جذب سطحی و دیفیوژن سطحی برخوردار است.

۴- شبیه‌سازی و نتایج

در ابتدا بایستی صحت سنجی کد مورد استفاده انجام گیرد و سپس به شبیه‌سازی خود بپردازیم. ژو و همکاران [۱۸]، به مدلسازی سه‌بعدی جریان آرگون مطابق با جدول (۱)، پرداختند. بر اساس مشخصات ذکر شده به شبیه-سازی جریان مورد نظر می‌پردازیم. ۱۶۰۰ ذره در دیواره و ۱۳۷۲ ذره در ناحیه وسط جریان و با اعمال نیروی بی‌بعد ۰/۱ مدل‌سازی شد و نتایج با تطابق مناسبی به دست آمد. پروفیل سرعت هر دو شبیه‌سازی در شکل (۲)، نشان داده شده است. همانگونه که ملاحظه می‌کنید این نتایج تقریباً مطابق بر یکدیگر هستند. بنابراین درستی کد مورد استفاده در این شبیه‌سازی‌ها حاصل می‌شود.

[۱] کریستال‌های بدون ساختار (بی‌شکل) را آمورف می‌گویند.



شکل ۲: پروفیل سرعت، در جهت جریان با اعمال مدل حرارتی ماکسول و نیروی بی‌بعد ۰/۱ و مقایسه با مرجع [۱۸]

عامل مهم دیگر در شبیه‌سازی جریان درون نانوکانال-ها عدد نادسن است. همانگونه که می‌دانید، عدد نادسن در مقیاس مهندسی (محیط پیوسته) کوچکتر از ۰/۰۱ و در محیط گسسته یا مولکولی بزرگتر از ۰/۰۱ است. در هر شبیه‌سازی این عدد باید محاسبه گردد. عدد نودسن در شبیه‌سازی دوبعدی جریان پوازی مایع آرگون درون نانوکانال پلاتینی با در نظر گرفتن پارامتر شبکه ۰/۸، به صورت رابطهٔ (۱) برابر ۰/۱۸، به دست می‌آید.

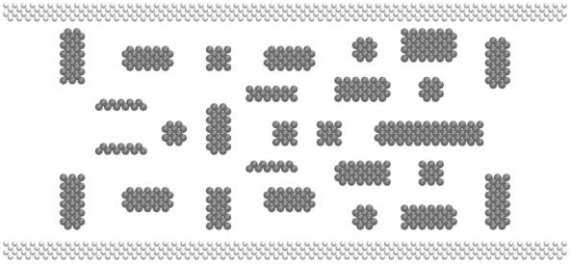
$$kn = \frac{1}{2\sqrt{2}\pi n\, l_y d_i^2} = ۰/۱۸ \qquad (۱)$$

که در آن n تعداد ذرات در دامنه حل، l_y عرض کانال و d_i قطر ذرات است. که در ادامه برای به دست اوردن عدد نادسن کانال‌های مختلف، از رابطهٔ (۱) بهره می‌بریم.

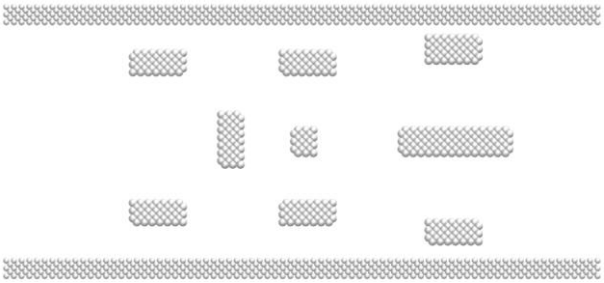
شکل‌های (۲)، (۳) و (۴)، ساختار هندسه نانو کانال-های مورد استفاده در شبیه‌سازی‌ها را به ازای مقادیر نسبت تخلخل (ε) ۰/۸۸۱، ۰/۸۰۵ و ۰/۷۳۲ نشان می‌دهد. نسبت طول به عرض کانال‌ها برابر ۲/۵ است. عرض کانال نیز ۴۰ برابر قطر ذرات آرگون (۴۰σ) در نظر گرفته شده است. جنس دیواره و محیط متخلخل از پلاتین و جنس سیال گاز آرگون در نظر گرفته شده است. پارامتر ε یا نسبت تخلخل نسبت فضای خالی نانو کانال به کل فضای آن است که توسط رابطهٔ (۲) نیز بیان می‌شود:

$$\varepsilon_s = (V - V_s)/V \qquad (۲)$$

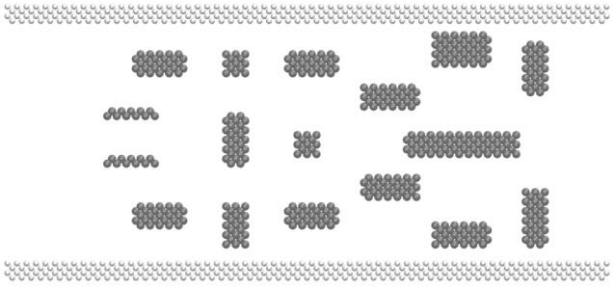
که در آن V حجم کلی دامنه حل و V_s حجم بلوک-های جامد درون نانو کانال یا دامنه حل است.



شکل ۲: نانو کانال متخلخل با نسبت تخلخل $\varepsilon_s = 0.732$



شکل ۳: نانو کانال متخلخل با نسبت تخلخل $\varepsilon_s = 0.881$

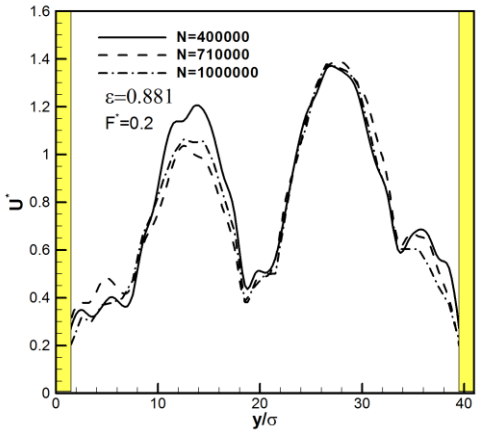


شکل ۴: نانو کانال متخلخل با نسبت تخلخل $\varepsilon_s = 0.805$

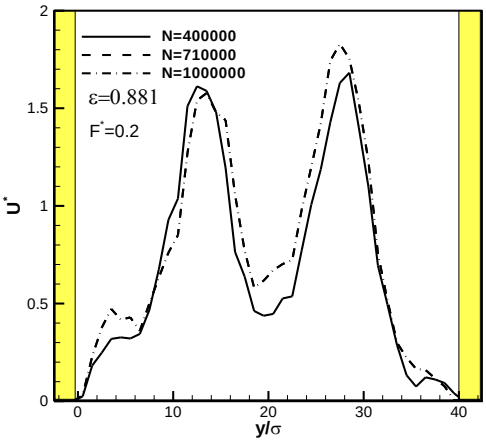
برای شبیه‌سازی جریان پوازی درون نانوکانال‌های متخلخل، ابتدا مختصات ذرات در دامنهٔ حل مشخص می‌شوند، سپس مقدار دهی اولیه سرعت با استفاده از توزیع ماکسول-بولتزمان، انجام شده و با استفاده از پتانسیل لنارد-جونز و الگوریتم سرعت ورله، مقادیر نیروها در گام‌های زمانی مختلف محاسبه می‌گردند. در این

شبیه‌سازی نیروهای بی‌بعد مختلفی به ناحیه سیال در هر گام زمانی به عنوان یک نیروی خارجیِ بی‌بعد F^* برابر با مقادیر مختلف ۰/۰۳/۰۴و ۰/۰۲ وارد می‌شود ($F = F^* \frac{\varepsilon}{\sigma^2}$). در این میان، با اعمال دماپای تصحیح سرعت، دمای بی‌بعد سیال T^* برابر ۱/۰ ($T = T^* \frac{\varepsilon}{k_B}$) ثابت نگه داشته می‌شود.

در شکل‌های (۵) و (۶) نتایج مربوط به سرعت در مقاطع مختلف نانو کانالِ حاوی محیط متخلخل با تخلخل ۰/۸۰۵ نشان داده شده است. با افزایش تکرار از ۷۱۰/۰۰۰ به ۱/۰۰۰/۰۰۰ تغییر قابل توجهی در نتایج ایجاد نشده و بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که جریان پس از ۱/۰۰۰/۰۰۰ تکرار به حالت تعادل می‌رسد و خواص ماکروسکوپی در این تکرار استخراج می‌شوند.



شکل ۵: بررسی همگرایی در خروجی کانال با تخلخل ۰/۸۸۱



شکل ۶: بررسی همگرایی در $X = 0.25$ کانال با تخلخل ۰/۸۸۱

همانگونه که اشاره شد، در شبیه‌سازی به روش شبکه بولتزمن، اساساً توانایی مدل نمودن جریان در رژیم گذرا را ندارد. علت این امر آن است که ویسکوزیته مورد استفاده در روش شبکه بولتزمن صرفاً برخورد مولکول‌ها با یکدیگر را در نظر می‌گیرد اما در رژیم‌های لغزشی و گذرا برخورد مولکول‌ها با دیواره نیز حایز اهمیت است. به منظور افزایش توانایی روش شبکه بولتزمن در مدل نمودن جریان‌های گذرا، ویسکوزیته جریان به صورت رابطه زیر تصحیح می‌شود.

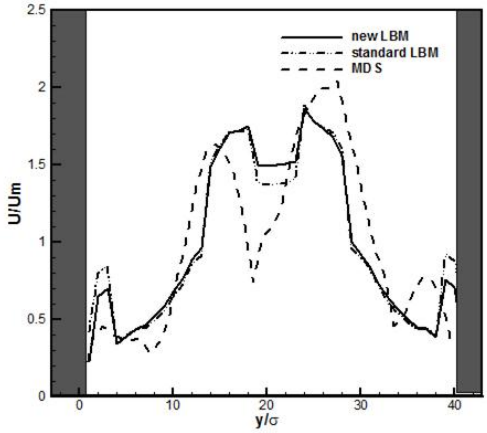
$$\mu_{eff} = \frac{\mu_0}{1+\alpha Kn} \qquad (۳)$$

با تصحیح ویسکوزیته، پارامتر زمان آرامش نیز که تابعی از ویسکوزیته می‌باشد، به صورت زیر تصحیح می‌گردد:

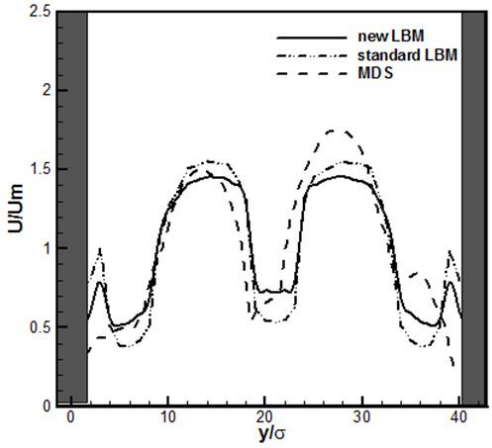
$$\tau_{eff} = \sqrt{\frac{6}{\pi}} \frac{Kn}{1+\alpha Kn} N \qquad (۴)$$

برای روش شبکه بولتزمن هیدرودینامیکی از شرط مرزی فشار معین در ورودی و خروجی و شرط مرزی لغزش روی مرزهای جامد استفاده شده است. برا شبکه بولتزمن گرمایی از شرط مرزی دمای معین در ورودی و توسعه یافتگی حرارتی در خروجی استفاده شده است. مرزهای جامد نیز دما ثابت بوده و از شرط مرزی پرش دمایی استفاده شده است. شکل (۷) نشان می‌دهد که روش شبکه بولتزمن جدید برای محیط‌های متخلخل نیز نتایج بهتری را نسبت به روش شبکه بولتزمن متداول در محدوده رژیم گذرا ارائه می‌نماید زیرا نتایج آن تطابق بهتری با نتایج دینامیک مولکولی برخوردار می‌باشند و قله‌های جریان و لغزش روی دیواره را بهتر مدل می‌نمایند. همچنین با کاهش تخلخل تعداد موانع موجود و پیچیدگی هندسه جریان افزایش یافته و اختلاف نتایج بیشتر می‌شود.

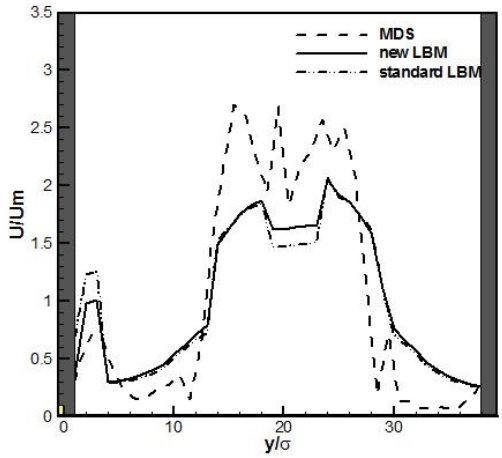
در شکل (۸) کانتور سرعت افقی برای کانال حاوی محیط متخلخل با استفاده از دو روش دینامیک مولکولی و روش شبکه بولتزمن رسم شده است. مقایسه نتایج نشان می‌دهد که به طور کلی روش شبکه بولتزمن نواحی دارای سرعت ماکزیمم را بیشتر از روش دینامیک مولکولی پیش‌بینی می‌نماید. این امر به دلیل اختلاف روش شبکه بولتزمن و دینامیک مولکولی در ارضا شرط مرزی لغزش روی موانع صلب اتفاق می‌افتد. لازم به ذکر است که در رابطه شرط مرزی لغزش مورد استفاده در روش شبکه بولتزمن فرض بر این است که سطح کاملاً دیفیوز باشد که همان‌طور که نتایج دینامیک مولکولی نشان می‌دهند، این فرض برای آرگون و پلاتین تا حدودی دارای خطا می‌باشد.



(الف)

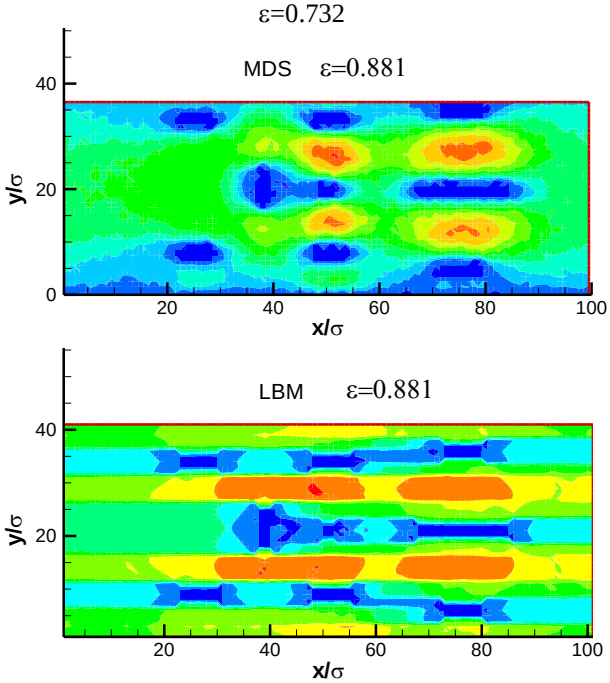


(ب)



(ج)

شکل ۷: پروفیل سرعت در سه روش بولتزمن، بولتزمن اصلاح شده و دینامیک مولکولی با kn=0.2، (الف) ε=0.805 (ب) ε=0.818 (ج) ε=0.732

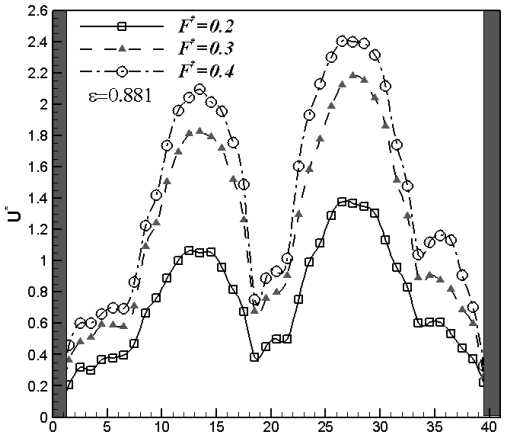


شکل ۸: کانتورهای سرعت افقی، بالایی: روش دینامیک مولکولی، پائینی: شبکه بولتزمن اصلاح شده

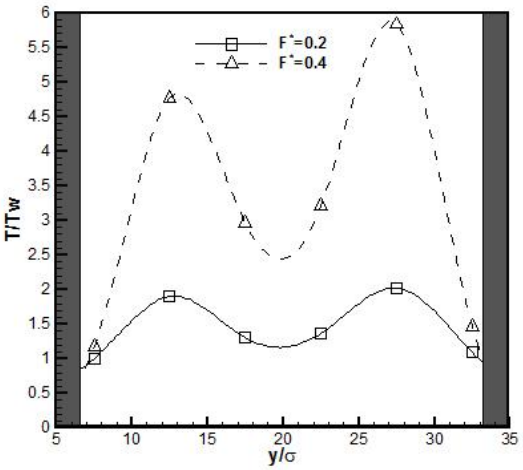
در شکل (۹) اثر تغییر نیرو بر توزیع سرعت در خروجی کانال برای عدد نادسن ۰/۲ و نسبت تخلخل ۰/۸۸۱، نشان داده شده است. همانگونه که مشاهده می‌شود با افزایش نیرو ، با توجه به معادله قانون دوم نیوتن شتاب ذرات بیشتر شده و به سبب آن سرعت میکروسکوپی و ماکروسکوپی ذرات افزایش می‌یابد و در نتیجه دبی جریان

نیز بیشتر می‌شود. از آنجایی که انرژی جنبشی با توان دوم سرعت رابطه مستقیم دارد و از طرفی انرژی نیز رابطه مستقیم با دما دارد، پس می‌توان نتیجه گرفته که با افزایش نیرو، سرعت و به تبع آن دما افزایش پیدا خواهد کرد. که در شکل (۱۰) بیان شده است.

شکل (۱۱) اثر تغییر نیرو بر سرعت متوسط برای هر سه محیط متخلخل به ازای نادسن ۰/۲ نشان داده شده است. در حالتی که نیرو به اندازه کافی کوچک باشد، رینولدز کوچک بوده ($Re<<1$) و جریان خزشی می‌باشد. در این حالت که به رژیم دارسی معروف است، رابطه سرعت با گرادیان فشار به صورت خطی می‌باشد. با توجه به تغییرات نیرو در شکل مذکور، سرعت نیز تغییر می‌کند اما در نواحی خطی، رینولدز در محدوده ۰/۰۱ تا ۰/۱ قرار دارد. بنابراین رژیم جریانی دارسی برقرار است و نمودار سرعت بر حسب نیرو حالت خطی دارد. با افزایش نیرو رژیم جریان به رژیم فورشیمر تبدیل می‌شود و نمودار حالت خطی نخواهد داشت. این نمودار نشان می‌دهد که

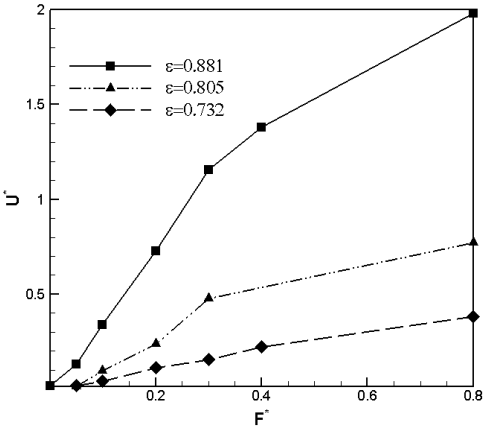


شکل ۹: پروفیل سرعت استخراج شده در روش دینامیک مولکولی برای نیروهای مختلف در ε=0.881



شکل ۱۰: پروفیل دما استخراج شده در روش دینامیک مولکولی برای نیروهای مختلف در ε=0.881

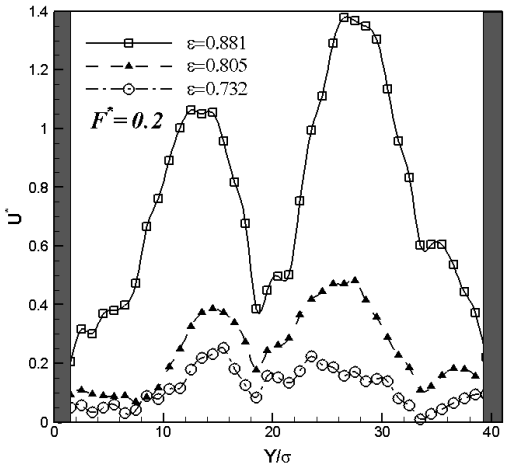
روش دینامیک مولکولی بخوبی توانسته است رژیم‌های مختلف جریان در محیط متخلخل را مدل نماید. همچنین نمودار نشان می‌دهد که با افزایش تخلخل انحراف از حالت خطی زودتر اتفاق می‌افتد. علت این پدیده آن است که با افزایش تخلخل سرعت افزایش می‌یابد و در نتیجه جریان زودتر از حالت خزشی خارج می‌شود.



شکل ۱۰: مدلسازی نواحی جریان دارسی و فورشیمر به کمک روش دینامیک مولکولی

اثر تخلخل بر توزیع سرعت در خروجی کانال در شکل (۱۱) نشان داده شده است. با توجه به افزایش تخلخل یا موانع موجود در مسیر جریان، سطح مقطع جریان کاهش می‌یابد و در نتیجه سرعت افزایش می‌یابد. در این پژوهش تغییر عدد نادسن از طریق تغییر تعداد ذرات سیال اعمال شده است. در شکل (۱۲) اثر تغییر عدد نادسن بر توزیع

سرعت در خروجی کانال نشان داده شده است. تغییر تعداد ذرات سیال نیز به کمک تغییر در پارامتر شبکه انجام می‌گیرد. جدول زیر پارامترهای در نظر گرفته شده برای هر حالت به همراه Kn مربوطه را نشان می‌دهد.

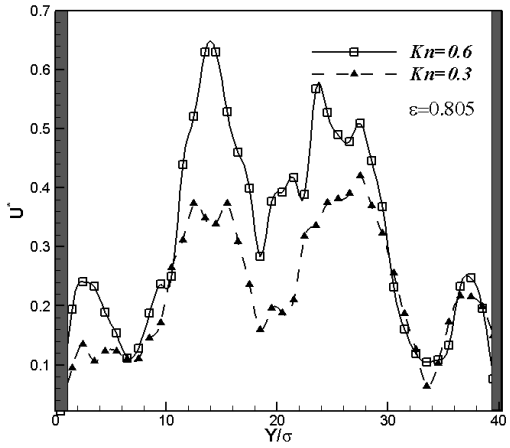


شکل ۱۱: اثر تخلخل بر توزیع سرعت در خروجی کانال

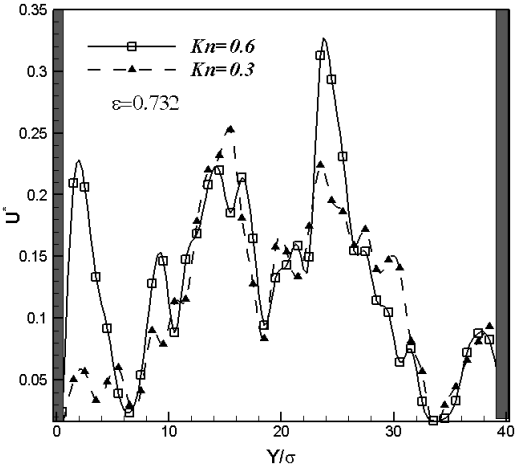
نیروی اعمال شده در کد دینامیک مولکولی به مجموع ذرات وارد می‌شود. با افزایش Kn سرعت افزایش پیدا می‌کند، اما از آنجا که تعداد ذرات دیواره نیز تغییر می‌نماید بنابراین برخورد ذرات با دیواره نیز دستخوش تغییر می‌گردد و مقداری نوسان در سرعت نزدیک دیواره ایجاد می‌شود.

جدول ۲: پارامترهای متعلق به نمودارهای شکل ۱۲

porosity	Lattice parameter	Number of atoms	Kn
$\varepsilon = 0.881$	0.5	1707	0.5
$\varepsilon = 0.881$	0.8	2895	0.3
$\varepsilon = 0.805$	0.5	1545	0.6
$\varepsilon = 0.805$	0.8	2720	0.3
$\varepsilon = 0.732$	0.5	1390	0.6
$\varepsilon = 0.732$	0.8	2558	0.3



(الف)



(ب)

شکل ۱۲: اثر تغییر عدد نادسن بر توزیع سرعت در خروجی کانال

۵- نتیجه‌گیری

در این پژوهش، جریان پوازی گاز آرگون درون نانوکانال-های متخلخل با استفاده از روش‌های دینامیک مولکولی و شبکه بولتزمن، شبیه‌سازی شد. پارامترهای مختلف از قبیل نیروهای وارد دامنه حل، اعداد نودسن متفاوت و نسبت تخلخل‌های گوناگون مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که روش بولتزمن اصلاحی تطابق بهتری با نتایج حاصل شده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی دارند و خواص جریان را بهتر توصیف می‌کند. در نهایت می‌توان

نتیجه گرفت که روش بولتزمت اصلاح شده جهت شبیه-سازی جریان‌ها در مقیاس نانو مناسبتر است.

مراجع

[1] A. Homayoon, A.H. Meghdadi Isfahani, E. Shirani, M. Ashrafizadeh, A novel modified lattice Boltzmann Method for simulation of gas flows in wide range of Knudsen number, International Communications in Heat and Mass Transfer 38 (2011) 827–832.

[2] H. Shokouhmand, A. H. Meghdadi Isfahani, An improved thermal lattice Boltzmann model for rarefied gas flows in wide range of Knudsen number, International Communications in Heat and Mass Transfer 38 (2011) 1463–1469.

[3] A. Kundt and E. Warburg;, "UeberReibung und Wrmelcitung verdnnter GruiC," Fogg.Ann.Df'TPhysik, Vol. 155, pp. 337-365, 1875.

[4] Maxwell, J. C., On Stresses in Rarified Gases Arising from Inequalities of Temperature.Philosophical Transactions of the Royal Society of London, 170: pp. 231-256, 1879.

[5] Barwinkel, K. Physical Parameters Governing Slip-Conditions and Their Influence onMomentum and Energy Transfer. in Second Symposium: Fluid Solid Surface Interaction. Bethesda, Maryland, 1974.

[6] George Wayne Finger, “Estimation of Tangential Momentum Accommodation Coefficient using Molecular Dynamics Simulation”, PHD Thesis, 2005.

[7] Millikan. R. A. “Coefficients of Slip in Gases and the Law of Reflection of Molecules from the Surfaces of Solids and Liquids”, Physical Review, 21(3), pp. 217–238, 1923.

[8] Lord, U. G. “Application of the two-temperature Maxwellian model to describe re-emission of gas molecules from surfaces”, J. Phys. D: Appl. Phys. Vol. 25, pp. 327-330, 1992.

[9] Collins, F. G., "Free Molecule Flow Gas/Surface Interactions at Orbital Conditions," Remtech, Inc., RTC 211-01, Vol. II, Huntsville, AL, April 1992.

[10] Nocilla, S., "On the Interaction between Stream and Body in Free-Molecule Flow," Rarefied Gas Dynamics, Proceedings of the Second International Symposium, Academic Press, New York, pp. 169-208, 1961.

[11] Sharipov, F, “Application of the Cercignani–Lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows. I. Plane flow between two parallel plates”, Eur. J. Mech. B/Fluids 21, pp. 113–123, 2002.

[12] Sharipov, F, “Application of the Cercignani–Lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows. III. Poiseuille flow and thermal creep through a long tube”, Eur. J. Mech. B/Fluids 22, pp. 145–154, 2003.

[13] Sharipov, F. and Bertoldo, G, “Heat transfer through a rarefied gas confined between two coaxial cylinders with high radius ratio”, J. Vac. Sci. Technol. A, 24, 6, pp. 2087-2093, 2006.

[14] Cercignani, C. and Lampis, M, “Kinetic models for gas-surface interactions”, Transport theory and statistical physics, 1(2), pp. 101-114, 1971.

[15] J. Matsui and Y. Matsumoto, “Study of scattering process in gas-surface interactions,” in *Progress in Astronautics and Aeronautics*, edited by A. R. Seebass, Rarefied Gas Dynamics Vol. 158, edited by B. D. Shizgal and D. P. Weaver _AIAA, Washington, DC, 1993.

[16] Yamamoto, Kyoji. Takeuchi, Hideki and Hyakutake, Toru, “Characteristics of reflected gas molecules at a solid surface”, PHYSICS OF FLUIDS **18**, 046103, 2006.

[17] Spijker Peter, Albert J. Markvoort, Silvia V. Nedea, and Peter A. J. Hilbers, “Computation of accommodation coefficients and the use of velocity correlation profiles in molecular dynamics simulations”, PHYSICAL REVIEW E **81**, 011203, pp. 1-15, 2010.

[18] Alexander A. and Garcia A. "Direct Simulation Monte Carlo", F, *Computers in Physics*, pp. 588-593, 1997.

[19] WWW.SANDIA.LAMMPS.GOV

[20] Xu. J. L, Zhou. Z. Q, “Molecular dynamics simulation of liquid argon flow at platinum surfaces, Journal of Heat and Mass transfer, 40 pp. 859–869, 2004.