



## تأثیر نیروی دیواره بر توزیع دما در نانوکنالهای حاوی سیال لنارد-جونز به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

قاسم حیدری‌نژاد<sup>1\*</sup>، رضا ربانی<sup>2</sup>، ابراهیم شیرانی<sup>3</sup>

1- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران  
 2- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران  
 3- استاد، مهندسی مکانیک، موسسه آموزش عالی صنعتی فولاد، اصفهان  
 \* تهران، صندوق پستی 14115-143، gheidari@modares.ac.ir

### اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل  
 دریافت: 16 بهمن 1395  
 پذیرش: 14 فروردین 1396  
 ارائه در سایت: 30 اردیبهشت 1396  
 کلید واژگان:  
 اثرات سطح  
 گاز رقیق  
 پروفیل دما

### چکیده

در این مقاله انتقال گرما در گاز آرگون بین دو دیوار ساکن از کانال با ابعاد نانو، با استفاده از روش دینامیک مولکولی بررسی شده است. مقایسه بین دقت حل دوبعدی و سه‌بعدی نشان می‌دهد که برای مدل کردن اثر نیروی دیواره بر انتقال گرما، دقت حل دینامیک مولکولی دوبعدی کافی نیست. حل دوبعدی مقدار چگالی و دما در نزدیکی دیوارها را کمتر از مقادیر مربوط به حل سه‌بعدی پیش‌بینی می‌کند. در نظر گرفتن اثر ابعاد میدان بر دقت نتایج حل گرمایی نشان داد که ابعاد کانال در راستاهای تناوبی را باید حداقل به اندازه‌ی فاصله پویس آزاد مولکولی گاز در نظر گرفت تا نتایج مستقل از ابعاد میدان گردد. توزیع خواص سیال در عرض کانال نشان می‌دهد که مستقل از اختلاف دمای اعمال شده، وجود نیروی دیواره پروفیل دما و چگالی در گاز را تا فاصله‌ای حدود یک نانومتر از سطح دیوار به شدت تغییر می‌دهد. علاوه بر تغییرات چگالی ناشی از وجود نیروی دیوار در این ناحیه، اختلاف دما بین دیوارها نیز باعث تغییر در توزیع چگالی در مجاورت دیوار می‌شود. افزایش اختلاف دمای دو دیوار به بیشتر از 20 درجه کلونین، تغییر چگالی قابل توجهی به مقدار بیشتر از 5 درصد را نسبت به توزیع چگالی گاز در حالت دیوار همدم بوجود می‌آورد. تغییرات چگالی به وجود آمده در اثر اختلاف دما در مجاورت دیوار، منجر به عدم تطابق پروفیل توزیع دمای بی‌بعد و ضریب انتقال حرارت هدایتی محاسبه شده در گاز برای اختلاف دماهای مختلف می‌شود.

## The effect of wall force field on temperature distribution in nanochannel containing Lennard-Jones fluid by molecular dynamic simulation

Ghassem Heidarinejad<sup>1\*</sup>, Reza Rabani<sup>1</sup>, Ebrahim Shirani<sup>2</sup>

1- Department of Mechanical Engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran  
 2- Department of Mechanical Engineering, Foolad Institute of Technology, Fooladshahr, Isfahan, Iran  
 \* P.O.B. 14115-143, Tehran, Iran, gheidari@modares.ac.ir

### ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper  
 Received 04 February 2017  
 Accepted 03 April 2017  
 Available Online 20 May 2017

**Keywords:**  
 Surface effect  
 Rarefied gas  
 Temperature profile

### ABSTRACT

In this paper heat transfer through argon gas between two stationary walls of a nano sized channel is investigated by the use of molecular dynamic method. Comparison between two and three-dimensional solutions shows that for accurate modeling of wall force field on heat transfer, the accuracy of two-dimensional molecular dynamic solution is inadequate. Two-dimensional solution predicts the value for density and temperature less than the value of three-dimensional solution near each wall. Considering the effect of domain size on accuracy of thermal solution shows that domain size should be extended for at least one mean free path in periodic direction to have domain independent results. Distribution of fluid properties in the width of the channel shows that independent of implemented temperature difference, presence of the wall force field changes the temperature and density profile in one nanometer from each wall drastically. In addition to variation in density due to the wall force field, temperature difference between the walls causes additional variation in density profile near walls. Increasing the wall's temperature difference more than 20 degrees, makes a notable density variation of more than 5 percent in comparison with gas density distribution in the isothermal walls case. Variation in density near walls due to temperature differences leads to mismatch between the non-dimensional temperature profiles and calculated thermal conductivity coefficient of the gas for various temperature differences.

### 1- مقدمه

رفته در سیستم‌های میکرو/نانو الکترومکانیکی<sup>1</sup>، دستگاه‌های میکروسیالی<sup>2</sup> و هارد دیسک‌های کامپیوتری از اهمیت بالایی برخوردار است [1].

فهم دقیق رفتار هیدرودینامیکی و گرمایی سیال در شرایطی که سیال در ابعاد نانو محصور است، به دلیل استفاده گسترده به عنوان یکی از اجزاء به کار

<sup>1</sup> Micro/Nano Electro-Mechanical Systems  
<sup>2</sup> Microfluidic Device

### Please cite this article using:

Gh. Heidarinejad, R. Rabani, E. Shirani, The effect of wall force field on temperature distribution in nanochannel containing Lennard-Jones fluid by molecular dynamic simulation, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 17, No. 6, pp. 23-31, 2017 (in Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

مولکولی و اعمال مدل پرش دمایی بر روی مرزها در معادلات ناپرواستوکس به دست آورده و نشان دادند که مدل اصلاح شده ناپرواستوکس نتایج بسیار دقیقی در مقایسه با روش دینامیک مولکولی ارائه می‌دهد.

بررسی‌ها نشان می‌دهد که تأثیر نیروی بین سطح و دیوار بر توزیع خواص سیال در عرض نانوکنال‌ها، می‌تواند قابل توجه باشد [10]. به عنوان مثال جریان گاز آرگون (خنثی از نظر الکتریکی و تک اتمی) در کانالی به عرض  $H = 6.48 \text{ nm}$  در شرایط استاندارد  $\lambda = 64 \text{ nm}$  منجر به  $Kn = 10$  می‌شود که در رژیم جریان در این شرایط، آزاد مولکولی می‌باشد. با توجه به این که طول اثر نیروی عمل و عکس‌العمل وندروالس موجود بین سطح و گاز آرگون حدوداً  $1 \text{ nm}$  می‌باشد (حدود سه برابر قطر مولکول آرگون)، کاملاً مشخص است که این نیرو بر حدود یک‌سوم عرض کانال موثر بوده و خواص سیال را تغییر می‌دهد.

این امر در تئوری رژیم آزاد مولکولی که بر مبنای تئوری انرژی جنبشی به دست آمده است، قابل پیش بینی نمی‌باشد [10]. بنابراین ارزیابی دقیق تأثیر نیروی دیوار بر سیال و مشخص کردن مقدار اختلاف با پیش‌بینی‌های مبتنی بر تئوری جنبشی، از اهمیت خاصی در نانوکنال‌ها برخوردار است. روش دینامیک مولکولی را می‌توان به منظور مشخص کردن اثر برهم‌کنش گاز/دیوار در شبیه‌سازی‌های عددی به کار برد. بررسی تأثیر این میدان نیرو بر خصوصیات هیدرودینامیکی جریان با معرفی مدل دیوار هوشمند توسط باریسیک و همکاران [10]، با حل جریان کوئت در نانوکنال‌ها با عرض کمتر از  $10$  نانومتر در عدد نودسن  $10$ ، آغاز شد. در این مدل، تمام اتم‌های دیوار مدل نمی‌شوند و تنها تعدادی از آن‌ها که اتم گاز در آن نقطه به نزدیکی دیوار رسیده است، در هر لحظه مدل می‌شوند. بنابراین با استفاده از این روش، تعداد اتم‌های به کار رفته در مدل‌سازی دیواره‌ها به شدت کاهش یافته و در نتیجه زمان محاسبات به شکل قابل توجهی کاهش می‌یابد. نتایج این تحقیق نشان داد که حل معادله بولتزمن در ناحیه تأثیر نیروی دیوار، نتایج دقیقی ارائه نمی‌کند و برای حل دقیق پروفیل سرعت و ... باید الزاماً از روش دینامیک مولکولی استفاده شود. با عبور از ناحیه تأثیر نیروی دیوار، پروفیل سرعت گاز در کانال در جریان کوئت به صورت خطی در آمده و مقدار چگالی کاملاً یکنواخت می‌شود [10]. به منظور بررسی تأثیر نیروی دیوار بر توزیع تنش برشی درون سیال، باریسیک و بسکوک [11] اثر نیروی دیواره را بر توزیع تنش برشی درون سیال بررسی نمودند. در این تحقیق نشان داده شد که تنش ذره-ذره<sup>14</sup> بین مولکول‌های گاز با افزایش چگالی، افزایش می‌یابد. از طرف دیگر بین مولکول‌های دیوار و مولکول‌های گاز نزدیک به آن، در مجاورت دیواره تنش تحت عنوان تنش سطح-ذره<sup>15</sup> بوجود می‌آید که در نهایت موجب غیرهمگنی توزیع تنش عمودی در عرض نانوکنال‌ها می‌شود.

جریان کوئت گاز آرگون در رژیم گذرا و آزاد مولکولی درون نانوکنال‌ها توسط باریسیک و بسکوک [12] بررسی شده است. بررسی نتایج آن نشان می‌دهد که در تمامی موارد، مقدار عددی ضریب تطابق تماسی (TMAC) بین گاز و دیوار مستقل از عدد نودسن و خصوصیات سیال می‌باشد. در ادامه جریان پواری گاز آرگون درون نانوکنال‌ها در حالت سه بعدی به وسیله روش دینامیک مولکولی بررسی شده و نتایج به دست آمده با نتایج حاصل از تئوری جنبشی مقایسه شده است [13]. بررسی نتایج نشان داد که برای مقادیر محدود<sup>16</sup> پارامتر بی‌بعد  $\beta$ ، که به صورت طول نفوذ نیروی دیوار به عرض کانال تعریف می‌شود، "نشابه دینامیکی" بین جریان گاز در شرایط کم فشار

سیال محصور شده در ابعاد نانو به دلیل از بین رفتن فرضیه پیوستگی<sup>1</sup>، بوجود آمدن پدیده رقیق شدگی<sup>2</sup> و افزایش تأثیر میدان نیروی دیواره، فیزیک کاملاً متفاوتی نسبت به سیالات در ابعاد متداول مهندسی از خود نشان می‌دهد.

بنابراین برای توصیف سیال در این ابعاد از عدد نودسن<sup>3</sup> (نسبت فاصله پویش آزاد مولکولی گاز به طول مشخصه جریان) استفاده می‌شود. بسته به مقدار محلی عدد نودسن گاز، رژیم جریان مورد بررسی می‌تواند به صورت پیوسته<sup>4</sup> ( $Kn \leq 0.001$ )، لغزشی<sup>5</sup> ( $0.001 \leq Kn \leq 0.1$ )، گذرا<sup>6</sup> ( $0.1 \leq Kn \leq 10$ ) و یا آزاد مولکولی<sup>7</sup> ( $Kn > 10$ ) باشد [2]. این دسته‌بندی بر مبنای فرضیه "نشابه دینامیکی"<sup>8</sup> بین جریان گاز در محیط‌های کم فشار و فضاها با ابعاد کوچک بنا شده است که تا وقتی که اثر نیروی دیواره بر کل میدان حل قابل اغماض باشد، می‌توان از آن استفاده کرد. اثر رقیق‌شدگی به تنهایی چالش‌های فراوانی را بر فرمول‌بندی و اعمال شرایط مرزی در مدل‌های پیوسته‌ی مرتبه بالا ایجاد می‌کند. بنابراین جریان گاز در ابعاد میکرو و نانو به طور متداول با استفاده از تئوری جنبشی<sup>9</sup> بر مبنای معادله بولتزمن، مدل می‌گردد. حل عددی و تحلیلی معادله بولتزمن به دلیل پیچیدگی‌های بوجود آمده برای حل جمله‌ی برخورد و چند بعدی بودن معادله، بسیار چالش برانگیز است. به علاوه مدل برخورد اتم‌های گاز/دیوار معمولاً به وسیله قوانین ساده بازتاب پخشی<sup>10</sup> و آینه‌ای<sup>11</sup>، مدل می‌شوند. مدل‌های پیچیده‌تر برخورد گاز/دیوار مانند مدل پخش ماکسول [3] و مدل سرسیگناتی-لامپیس [4] نیز قابل استفاده می‌باشند. معادله بولتزمن را می‌توان به صورت تحلیلی در رژیم جریان آزاد مولکولی که برخورد بین مولکول‌ها قابل نظر است، حل نمود. علاوه بر آن می‌توان از روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو<sup>12</sup> (DSMC) که توسط برد [5] ارائه شد، برای شبیه‌سازی جریان در رژیم‌های لغزشی، گذرا و آزاد مولکولی استفاده کرد. این روش هم نیازمند مدل برخوردی است که باید از پیش مشخص باشد.

بر مبنای مطالعات صورت گرفته، تحقیقات فراوانی در زمینه جریان گاز و انتقال گرما در رژیم‌های جریان لغزشی، گذرا و آزاد مولکولی انجام شده است [6]. امکان ایجاد خزش گرمایی در سیالات چگال در نانولوله‌ها با استفاده از روش دینامیک مولکولی توسط صاحبی و عظیمیان [7] مورد بررسی قرار گرفت. آن‌ها نشان دادند که توزیع چگالی سیال، تحت تأثیر نیروی دیوار به صورت لایه لایه در می‌آید و این لایه لایه شدن به همراه گردآیدان دمایی اعمالی در طول نانولوله، موجب رانش سیال از سمت سرد به سمت گرم می‌گردد. مقدادی و همکاران [8] حل گرمایی و هیدرودینامیکی به دست آمده از مدل شبکه بولتزمن<sup>13</sup> توسعه یافته برای گاز آرگون را با نتایج دینامیک مولکولی برای جریان در ابعاد نانو در محیط متخلخل مقایسه کرده و نشان دادند که مدل پیشنهادی علاوه بر افزایش قابل توجه در سرعت محاسبات، نتایج بسیار دقیقی ارائه می‌کند. فرجی و همکاران [9] پروفیل دما برای جریان پواری مایع آرگون در ابعاد نانو را با استفاده از دو روش دینامیک

<sup>1</sup> Continuum Hypothesis

<sup>2</sup> Rarefaction

<sup>3</sup> Knudsen Number

<sup>4</sup> Continuum

<sup>5</sup> Slip

<sup>6</sup> Transition

<sup>7</sup> Free Molecular

<sup>8</sup> Dynamic Similarity

<sup>9</sup> Kinetic Theory

<sup>10</sup> Diffuse

<sup>11</sup> Specular

<sup>12</sup> Direct Simulation Monte Carlo Method

<sup>13</sup> Lattice Boltzmann Method

<sup>14</sup> Particle-Particle Virial

<sup>15</sup> Surface-Particle Virial

<sup>16</sup> Finite Value

و فضاها با ابعاد کوچک از بین می‌رود. مقایسه نتایج حل کامل دینامیک مولکولی با حل مبتنی بر توزیع ماکسول نشان می‌دهد که این توزیع علی‌رغم توانایی در محاسبه اثرات رقیق‌شدگی و غیرتعادلی، قادر به شبیه‌سازی اثرات ناشی از محصور شدن سیال در ابعاد نانو مثل تأثیر نیروی دیواره و جذب سطحی<sup>1</sup> نیست. جمع‌بندی نتایج حاصل شبیه‌سازی هیدرودینامیکی جریان تحت تأثیر نیروی دیواره به صورت زیر بیان می‌شود [14]:

- در ناحیه نزدیک دیواره، تغییرات شدیدی در چگالی و سرعت گاز وجود دارد و توزیع تنش برشی و عمودی به‌صورت غیریکنواخت می‌باشد.
- ویژگی‌های انتقال در ناحیه میانی کانال و نزدیک دیواره‌ها به واسطه پارامترهای تعاملی گاز-جامد و عدد نودسن مشخص می‌گردد.
- جذب سطحی اتم‌های گاز را می‌توان به‌عنوان تابعی از پارامترهای تعاملی گاز-جامد در نظر گرفت.
- مقایسه‌ی پروفیل سرعت به‌دست آمده از دینامیک مولکولی با حل صورت گرفته بر روی معادله خطی شده بولتزمن نشان از تطابق کامل این پروفیل در قسمت‌های میانی کانال دارد و این در حالی است که در نزدیکی دیواره، به دلیل وجود نیروی دیواره و افزایش زمان حضور مولکول‌های گاز در مجاورت آن، عدم تطابق وجود داشته و سرعت گاز در این ناحیه به سرعت دیواره نزدیک‌تر می‌گردد.

## 2- شبیه‌سازی سه‌بعدی دینامیک مولکولی

در کار حاضر گاز آرگون بین دو صفحه موازی که با یکدیگر  $H = 5.4\text{nm}$  فاصله دارند، مطابق شکل 1 قرار گرفته است. دو ناحیه‌ی مشخص شده با صفحه در مجاورت دیواره‌های بالایی و پایینی، مناطقی هستند که در آن‌ها تأثیر نیروی دیواره بر سیال قابل ملاحظه است و انتظار می‌رود که توزیع خواص مختلف سیال در آن ناحیه را تحت تأثیر قرار دهد. با عبور از این دو ناحیه و نزدیک شدن به مرکز کانال، تأثیر نیروی دیواره بر توزیع خواص مختلف سیال کاهش می‌یابد. در تمامی شبیه‌سازی‌ها دیواره بالایی، دیواره گرم و دیواره پایینی، دیواره سرد در نظر گرفته شده است. لازم به ذکر است که در جهت‌های محوری  $(x)$  و جانبی  $(z)$  شرایط مرزی تناوبی اعمال شده است و طول کانال در این راستاها به اندازه‌ی فاصله آزاد مولکولی (54nm) در نظر گرفته شده است. به منظور شبیه‌سازی نیروهای وندروالسی موجود بین مولکول‌های گاز-گاز و گاز-دیواره از تابع پتانسیل برش خورده‌ی لنارد-جونز<sup>4</sup> 6-12 (L-J) استفاده شده است. تابع پتانسیل لنارد-جونز، نیروی وان‌دروالس<sup>5</sup> موجود بین مولکول‌ها را شبیه‌سازی می‌کند و این تابع برای شرایطی که در آن با گاز تک اتمی غیر باردار همانند آرگون سروکار داریم، تقریب بسیار دقیقی از نیروی وان‌دروالس موجود بین مولکول‌ها ارائه می‌کند. در صورتی که به عنوان مثال شبیه‌سازی بر روی گاز اکسیژن ( $O_2$ ) انجام گردد، می‌بایست از تابع پتانسیلی استفاده گردد که اثر پیوند بین دو اتم را نیز بتواند در محاسبات وارد نماید. تابع پتانسیل لنارد جونز که به طور گسترده توسط سایر محققین [11-14] نیز برای شبیه‌سازی گاز آرگون مورد استفاده قرار گرفته است، به صورت رابطه (1) بیان می‌گردد:

$$\phi(r) = 4\epsilon \left( \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right) - \left( \left( \frac{\sigma}{r_c} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_c} \right)^6 \right) \quad (1)$$

در این رابطه قطر مولکول  $\sigma = 0.3405\text{nm}$ ، عمق چاه پتانسیل<sup>6</sup>  $\epsilon = 119.8 \times k_B$ ، ثابت بولتزمن  $k_B = 1.3806 \times 10^{-23} \text{J/K}$ ، فاصله بین مولکولی  $r_{ij}$  و شعاع قطع  $r_c = 1.08\text{nm}$  می‌باشد. در روند حل دینامیک مولکولی و از آنجایی که تابع پتانسیل لنارد جونز در مقادیر فواصل بین مولکولی بزرگ بسیار ناچیز می‌گردد، تنها اثر متقابل آن‌ها با مولکول‌هایی که در یک شعاع مشخص (شعاع قطع) قرار دارند محاسبه می‌گردد. در نتیجه نیروی بین مولکولی در شعاع قطع برش خورده و به مقدار صفر می‌رسد [16]. در این فاصله، قسمت جاذبه‌ی تابع پتانسیل لنارد-جونز به مقدار،  $0.00392\epsilon$  کاهش می‌یابد [12].

بررسی‌ها نشان می‌دهد که افزایش شعاع قطع با ضریب  $M$ ، زمان

مقایسه نتایج حل کامل دینامیک مولکولی با حل مبتنی بر توزیع ماکسول نشان می‌دهد که این توزیع علی‌رغم توانایی در محاسبه اثرات رقیق‌شدگی و غیرتعادلی، قادر به شبیه‌سازی اثرات ناشی از محصور شدن سیال در ابعاد نانو مثل تأثیر نیروی دیواره و جذب سطحی<sup>1</sup> نیست. جمع‌بندی نتایج حاصل شبیه‌سازی هیدرودینامیکی جریان تحت تأثیر نیروی دیواره به صورت زیر بیان می‌شود [14]:

- در ناحیه نزدیک دیواره، تغییرات شدیدی در چگالی و سرعت گاز وجود دارد و توزیع تنش برشی و عمودی به‌صورت غیریکنواخت می‌باشد.
- ویژگی‌های انتقال در ناحیه میانی کانال و نزدیک دیواره‌ها به واسطه پارامترهای تعاملی گاز-جامد و عدد نودسن مشخص می‌گردد.
- جذب سطحی اتم‌های گاز را می‌توان به‌عنوان تابعی از پارامترهای تعاملی گاز-جامد در نظر گرفت.
- مقایسه‌ی پروفیل سرعت به‌دست آمده از دینامیک مولکولی با حل صورت گرفته بر روی معادله خطی شده بولتزمن نشان از تطابق کامل این پروفیل در قسمت‌های میانی کانال دارد و این در حالی است که در نزدیکی دیواره، به دلیل وجود نیروی دیواره و افزایش زمان حضور مولکول‌های گاز در مجاورت آن، عدم تطابق وجود داشته و سرعت گاز در این ناحیه به سرعت دیواره نزدیک‌تر می‌گردد.

در تحقیقات مذکور و به دلیل استفاده از مدل دیواره هوشمند، دمای دیواره و سیال یکسان در نظر گرفته شده و گرمای تولیدی به دلیل پدیده اتلافات لزجی در سیال، به وسیله ترموستات از آن خارج شده است. از طرفی گرمای تولیدی به دلیل وجود پدیده اتلافات لزجی<sup>2</sup> در جریان همدما<sup>3</sup> درون درون میکرو و نانوکناال‌ها، بسیار قابل توجه است و باید به درستی در محاسبات در نظر گرفته شود تا اثر آن بر سایر پارامترهای جریان به طور دقیق مدل گردد [15]. به دلیل اینکه در شرایط واقعی، گرمای تولیدی به دیواره‌ها منتقل شده و قسمتی از آن توسط دیواره‌ها دفع و قسمت دیگر آن صرف افزایش دمای گاز می‌گردد، روش استفاده از ترموستات بر روی گاز تنها تقریبی از حل اصلی مسئله است. به علاوه در بسیاری از کاربردها، دمای بین دو دیواره در نانوکناال متفاوت است و انتقال گرما بین سیال و دیواره‌ها وجود دارد. بنابراین، بررسی تأثیر نیروی دیواره بر توزیع دما و پارامترهای انتقال گرما از اهمیت خاصی برخوردار است. با در نظر گرفتن مطالب بیان شده و مرور دقیق ادبیات فن، در این مقاله شبیه‌سازی دقیق فرایند انتقال گرما در گاز آرگون درون نانوکناال‌ها با در نظر گرفتن تأثیر نیروی دیواره بررسی می‌شود. در واقع توزیع مولکول‌های گاز تحت تأثیر همزمان انتقال گرما و نیروی دیواره برای اختلاف دماهای متفاوت برای نخستین بار در کار حاضر مورد بررسی قرار گرفته است. به این منظور و در ادامه، مطالب زیر به ترتیب بیان شده است.

در ابتدا جزئیات شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بیان شده و سپس صحت سنجی کد عددی مورد استفاده با مقایسه با نتایج به دست آمده توسط سایر محققین بررسی می‌شود. به دلیل حجم بسیار بالای محاسبات مورد نیاز و اهمیت کاهش در زمان حل، نتایج حل دو بعدی و سه بعدی با هم مقایسه شده و امکان استفاده از نتایج حل دوبعدی در پیش‌بینی رفتار سیال در شرایط مذکور بررسی می‌شود. پس از آن گام زمانی بیشینه‌ی ممکن برای

<sup>4</sup> Truncated Lennard-Jones Potential

<sup>5</sup> Van der waals

<sup>6</sup> Depth of Potential Well

<sup>1</sup> Surface Adsorption

<sup>2</sup> Viscous Dissipation

<sup>3</sup> Isothermal

به حل هیدرودینامیکی جریان، جزء مدل‌های دیوار سرد<sup>3</sup> محسوب شده که در آن‌ها در مکان خود به صورت صلب حضور دارند. بنابراین این مدل قابلیت شبیه‌سازی انتقال گرما از دیواره‌ها را ندارد [12].

به‌منظور شبیه‌سازی دقیق انتقال گرما از دیواره، کیم و همکاران مدل دیوار گرمایی تعاملی<sup>4</sup> را ارائه کردند که به دلیل دقت بالا، به صورت گسترده توسط سایر محققان مورد استفاده قرار گرفته است [17]. در این مدل بر تک‌تک ردیف اتم‌های به کار رفته در شبیه‌سازی دیوار، ترموستات اعمال می‌شود و ذرات اتم در دیوار با فنر به هم مرتبط بوده و ارتعاش می‌کنند. ترموستات اعمال شده با استفاده از روش مقیاس کردن سرعت‌ها عمل می‌کند. ترکیب این ارتعاش و ترموستات‌ها، دمای دقیق مورد نظر را برای دیوار تولید می‌کنند. ارتعاشات گرمایی مولکول‌های دیواره به وسیله مکانیزم برخورد، انرژی و مومنتم را از سیال جذب کرده و یا به آن انتقال می‌دهند. در این مدل دیواره‌ها به عنوان حمام گرمایی عمل کرده و تعادل گرمایی سیال را به همراه دارند. در نتیجه نیاز به اعمال هیچ‌گونه ترموستاتی بر روی معادلات حرکت اتم‌های سیال به منظور جلوگیری از افزایش یا کاهش درجه حرارت در طی فرایند حل وجود ندارد. ضریب فنر به کار رفته در این مدل به منظور شبیه‌سازی دیوار در تمامی شبیه‌سازی‌ها برابر با  $k = 500\epsilon\sigma^{-2}$  در نظر گرفته شده است [18].

به طور کلی در الگوریتم کلی حل به روش دینامیک مولکولی، ابتدا با استفاده از شرایط اولیه، مکان و سرعت هر ذره مشخص می‌شود. سپس نیروی وارد بر هر ذره با مشتق‌گیری از تابع پتانسیل محاسبه می‌شود. در ادامه و با استفاده از الگوریتم سرعت ورله<sup>5</sup>، مکان و سرعت هر ذره در انتهای گام زمانی زمانی بعد محاسبه شده و اگر هنوز به زمان مورد نظر نرسیده باشد، مراحل دو و سه تکرار می‌شود. در نهایت پس از اتمام حل اولیه و رسیدن به شرایط پایا، بر روی نتایج مولکولی میانگین‌گیری انجام می‌شود تا خواص میکروسکوپی سیال به دست آید. شبیه‌سازی‌ها از توزیع سرعت ماکسول-بولتزمن<sup>6</sup> در دمای مورد نظر برای اتم‌های گاز آغاز می‌شود.

بسته به اختلاف دماهای اعمالی بین دو دیوار، تعداد متفاوت از حل اولیه برای سپری کردن حالت گذرا و رسیدن به شرایط پایا و تعداد متفاوت از میانگین‌گیری برای به دست آوردن پروفیل دما از روی توزیع نتایج میکروسکوپی مورد نیاز است. به این ترتیب که با افزایش اختلاف دما، شار گرمایی افزایش یافته و شرایط گذرای اولیه زودتر سپری شده و حل سریعتر به حالت پایا می‌رسد. در کار حاضر و به منظور سپری کردن حالت گذرا در اختلاف دماهای 10K، 50K و 100K به ترتیب 10، 30 و 4 میلیون گام زمانی در نظر گرفته شده است و برای میانگین‌گیری از نتایج به ترتیب 100، 40 و 20 میلیون گام زمانی سپری شده است. لازم به ذکر است که در هر حالت و به منظور اطمینان از صحت نتایج، میانگین‌گیری بیشتر انجام شده و توزیع دما و چگالی با مقادیر مربوط به اعداد ذکر شده مقایسه گشته و نشان داده شده است که با افزایش میانگین‌گیری به مقادیر بیشتر، دقت نتایج افزایش خواهد یافت.

مقدار دقیق حل اولیه لازم به منظور رسیدن به حالت پایا و تعداد حل لازم برای به دست آوردن پروفیل توزیع دمای مناسب برای هر دما، در ادامه و در قسمت نتایج آورده شده است. برای میانگین‌گیری و به دست آوردن توزیع پارامترهای میکروسکوپی معادل در گاز، عرض کانال به 100 باریکه<sup>7</sup> مساوی

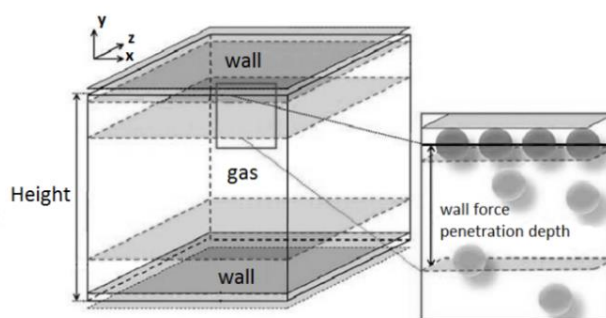


Fig. 1 The schematic sketch of simulation domain

شکل 1 طرح شماتیک از میدان حل

محاسباتی را به مقدار  $M^6$  افزایش می‌دهد زیرا هزینه محاسباتی در روش دینامیک مولکولی متناسب با مربع تعداد اتم‌های موجود در سلول است [11]. جرم هر اتم آرگون برابر با  $m = 6.63 \times 10^{-26} \text{kg}$  در نظر گرفته شده و در تمامی شبیه‌سازی‌ها دمای اولیه گاز برابر با 298K و چگالی گاز برابر با  $\rho = 1.896 \text{kg/m}^3$  می‌باشد. به منظور ساده‌سازی فرضیات حل، برای دیوار نیز مولکول‌هایی به جرم  $(m_{\text{wall}} = m_{\text{Ar}})$  و قطر معادل با مولکول‌های آرگون  $(\sigma_{\text{wall}} = \sigma_{\text{Ar}})$  در ساختار FCC<sup>1</sup> در نظر گرفته شده است. همچنین قدرت پتانسیل<sup>2</sup> در محاسبات نیروی بین مولکولی بین مولکول‌های دیوار-گاز برابر با قدرت پتانسیل مولکول‌های گاز-گاز  $(\epsilon_{\text{wall-Ar}} = \epsilon_{\text{Ar-Ar}})$  در نظر گرفته شده است. در تمامی شبیه‌سازی‌های صورت گرفته، اختلاف دمای مورد نظر را به صورت متقارن نسبت به دمای گاز در نظر گرفته و بر روی دیواره‌ها اعمال شده است. در طی فرایند حل، بر روی هر یک دیواره‌ها ترموستات قرار داده شده است و پارامترهای آن به گونه‌ای تنظیم گردیده‌اند، دمای دیوار در دمای مورد نظر ثابت باشد. به دلیل اینکه شعاع قطع در تابع پتانسیل لنارد-جونز برابر با  $r_c = 1.08 \text{nm}$  می‌باشد، به منظور شبیه‌سازی دقیق دیوار باید حداقل دو لایه ساختار FCC برای هر دیوار مدل گردد [10]. نمونه‌ای از ساختار FCC مورد استفاده در دیواره‌ها در شکل 2 به نمایش در آمده است.

همان‌گونه که پیشتر بیان شد، در حل هیدرودینامیکی از مدل دیوار هوشمند استفاده شده است. مدل دیوار به کار رفته علی‌رغم سرعت بخشیدن

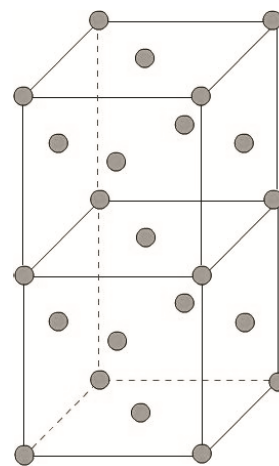


Fig. 2 The schematic sketch of two adjacent FCC structure

شکل 2 طرح شماتیک دولایه ساختار FCC مجاور

<sup>3</sup> Cold Wall Model

<sup>4</sup> Interactive Thermal Wall Model

<sup>5</sup> Velocity Verlet Algorithm

<sup>6</sup> Maxwell-Boltzmann Velocity Distribution

<sup>7</sup> Slab

<sup>1</sup> Face-Centered Cubic

<sup>2</sup> Potential Strength

چگالی و دما با یکدیگر مقایسه می‌گردد. سپس با توجه به لزوم کاهش هر چه بیشتر محاسبات، تلاش می‌شود که با در نظر گرفتن تغییرات در پروفیل دما، گام زمانی بیشینه و حداقل ابعاد لازم برای شبیه‌سازی مشخص گردد. در نهایت با اعمال اختلاف دمای متفاوت به دو دیوار، تغییرات پروفیل دما و چگالی در شرایط مذکور آورده شده است.

لازم به ذکر است که در تمامی نمودارها، برای بی بعد کردن توزیع چگالی در عرض کانال از مقدار چگالی در وسط کانال و برای بی بعد کردن توزیع دما از رابطه (2) استفاده شده است. با توجه به اینکه اختلاف دمای مورد نظر بین دو دیوار همواره به طور متقارن نسبت به دمای اولیه‌ی گاز (298K) به دو دیوار اعمال می‌گردد، استفاده از این رابطه همواره دمای دیوار بالایی (دیوار گرم) را به عدد یک و دیوار پایینی (دیوار سرد) را به منفی یک و دمای نهایی گاز را به طور متناسب به عددی بین این دو بی‌بعد کرده و این امر امکان مقایسه بهتر نتایج را فراهم می‌آورد. در این رابطه  $T(i)$  دمای گاز در باریکه شماره  $i$  است و  $\Delta T$  اختلاف دمای دو دیوار می‌باشد.

$$T(i) = (T(i) - 298) / (\Delta T / 2) \quad (2)$$

#### 4-1- نتایج حل دو و سه بعدی

در این قسمت در هر دو حالت دو و سه‌بعدی، اختلاف دمای یکسان (50K) به دو دیوار با فاصله‌ی  $H = 5.4\text{nm}$  وارد می‌شود. چگالی گاز در هر دو حالت به شکلی در نظر گرفته شده که عدد نودسن گاز برابر با 10 باشد [10]. به این منظور در حالت دوبعدی 268 اتم گاز در کانالی به طول 600 نانومتر و در حالت سه‌بعدی 450 اتم گاز در کانالی به ابعاد 54 نانومتر در راستاهای تناوبی در نظر گرفته شده است. توزیع دما و چگالی به صورت بی بعد در عرض کانال برای حالت‌های دو و سه بعدی به ترتیب در شکل‌های 4 و 5 با یکدیگر مقایسه شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌گردد در هر دو شکل، مقدار چگالی و دما در نزدیکی مرز در حالت دوبعدی بسیار کمتر از حالت سه‌بعدی است. در واقع حالت دوبعدی توانسته وجود نیروی دیواره در سیال را مدل نماید اما مقدار آن را کمتر از حل سه‌بعدی پیش‌بینی کرده است. این موجب شده است که مطابق شکل 5، پروفیل دما در میانه کانال نیز در حالت دوبعدی با سه‌بعدی متفاوت باشد.

دلیل این تفاوت از مقایسه شکل‌های 6 و 7 مشخص می‌گردد. در شکل 6، نمایی از حل دو بعدی و در شکل 7 نمایی از حل سه‌بعدی آورده شده

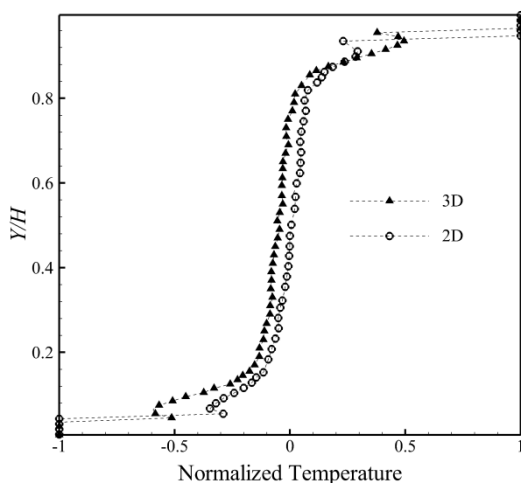


Fig. 4 Temperature profile between two walls in 2D and 3D cases

شکل 4 توزیع دما بین دو دیوار در دو حالت دوبعدی و سه‌بعدی

مساوی تقسیم شده است که عرض هر باریکه تقریباً معادل با  $\sigma/10$  می‌باشد. عرض بسیار کم برای میانگین‌گیری در این حل در هر کدام از باریکه‌ها، به منظور شبیه‌سازی دقیق رفتار سیال در نزدیکی دیواره مورد نیاز است. عرض کانال از مرکز اولین ردیف اتم دیوار مربوط به دیوار بالایی تا مرکز اولین ردیف اتم دیوار در دیوار پایینی در نظر گرفته می‌شود.

#### 3- صحت‌سنجی حل

از آنجا که در این پژوهش از کد عددی متن باز لمپس<sup>1</sup> به منظور شبیه‌سازی مسائل مورد نظر استفاده شده است، در این گام نتایج حاصل از کد عددی مذکور با نتایج موجود در پژوهش‌های پیشین مقایسه شده و صحت استفاده از کد عددی لمپس در این گونه مسائل بررسی خواهد شد.

به منظور صحت‌سنجی حل هیدرودینامیکی کد لمپس برای شرایط مذکور، پروفیل سرعت در نیمه پایینی کانال برای سه تنظیم متفاوت از پارامترهای ترموستات در جریان کوئت بدون انتقال گرما از دیواره‌ها، در شکل 3 با شرایط مشابه مرجع [12] مقایسه شده است. در حل مذکور سرعت مشخصه جریان کوئت  $U_w = 64\text{m/s}$  و عرض کانال برابر با  $H = 5.4\text{nm}$  در نظر گرفته شده است.

همان‌گونه که مشاهده می‌شود، پروفیل سرعت در نزدیکی دیوار برای هر سه حالت ترموستات، دقیقاً با نتایج حل انجام شده توسط باریسک و همکاران [12] تطابق دارد. همان‌گونه که مشخص است، در نزدیکی دیواره و مطابق انتظار، پروفیل سرعت به شدت از حالت خطی خارج شده است. بررسی نتایج نشان می‌دهد که روش مورد استفاده در این تحقیق به خوبی قادر به نشان دادن اثرات نیروی دیواره است و بنابراین می‌توان از این روش در ادامه کار استفاده کرد.

#### 4- نتایج

در ابتدا و با توجه به زمان بسیار زیاد لازم برای حل سه بعدی، حل دوبعدی انجام شده و با نتایج حل سه بعدی متناظر مقایسه می‌گردد تا امکان استفاده از آن در ادامه تحقیقات بررسی گردد. به این منظور در هر دو حالت دوبعدی و سه‌بعدی، اختلاف دمای یکسان به دو دیوار اعمال شده و توزیع پروفیل

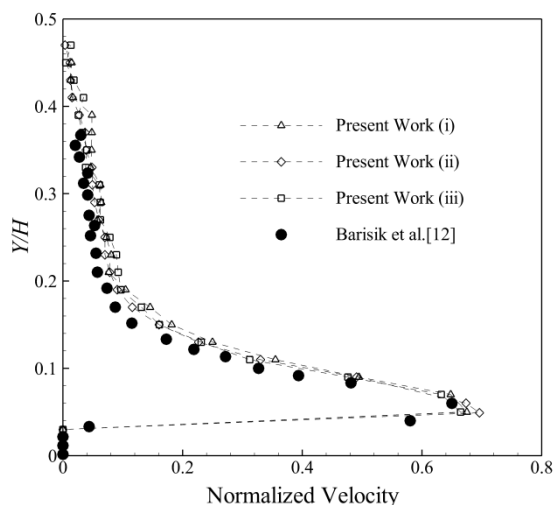


Fig. 3 Comparison of the present work normalized velocity profile with Ref. [12]

شکل 3 مقایسه‌ی پروفیل سرعت بی‌بعد نتایج حاضر با مرجع [12]

<sup>1</sup> LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)

مختلف A، B و C برابر با مقادیر جدول 1 در نظر گرفته شده است. در این شرایط فاصله پویس آزاد مولکولی گاز برابر با  $\lambda = 54\text{nm}$  می‌باشد بنابراین ابعاد در راستاهای تناوبی در سه حالت مورد بررسی به ترتیب نصف، برابر و دو برابر فاصله پویس آزاد مولکولی گاز در نظر گرفته شده است.

در شکل 8 پروفیل دما برای حالت A و B با هم مقایسه شده است. مشاهده می‌شود که در حالت A به دلیل اینکه ابعاد کانال در راستاهای تناوبی برابر نیمی از فاصله پویس آزاد مولکولی در نظر گرفته شده است، توزیع نهایی پروفیل دما بر حالتی که ابعاد کانال برابر با فاصله پویس آزاد مولکولی در نظر گرفته شده است، منطبق نمی‌باشد. از طرف دیگر مقایسه حالت B و C در شکل 9 نشان می‌دهد که افزایش ابعاد کانال در جهت تناوبی به دو برابر فاصله پویس آزاد مولکولی نیز نتایج را تغییر نمی‌دهد. بنابراین کاملاً مشخص است که ابعاد در راستاهای تناوبی حداقل به میزان یک فاصله پویس آزاد مولکولی باید در نظر گرفته شود تا نتایج به دست آمده مستقل از ابعاد میدان حل گردند. دلیل اصلی این امر این است که انتقال مومنتم و انرژی در گاز بین دو دیواره به واسطه برخورد بین اتم‌ها به وجود می‌آید و در واقع ابعاد در جهت‌های تناوبی می‌بایست به اندازه فاصله پویس آزاد مولکولی در نظر گرفته شوند تا امکان برخورد و در نتیجه تبادل مومنتم و انرژی به طور کامل بین اتم‌ها، وجود داشته باشد. در شرایطی که تنها نیمی از فاصله پویس آزاد مولکولی به عنوان ابعاد در جهت‌های تناوبی در نظر گرفته شود، مولکول قبل از طی کردن فاصله پویس آزاد مولکولی خود، به مرز تناوبی رسیده و گاز نمی‌تواند به طور کامل توسعه یابد.

در ادامه و به منظور کاهش هر چه بیشتر زمان محاسبات، لازم است که گام زمانی حل تا حد امکان بالاتر در نظر گرفته شود. به این منظور سه گام زمانی 1fs، 4fs و 10fs را در نظر گرفته و در سه حل جداگانه مطابق با شرایط مکانی B، مورد بررسی قرار گرفته است. شکل 10 تأثیر اندازه گام زمانی را بر توزیع پروفیل بی‌بعد دما درون گاز نشان می‌دهد. بررسی نتایج نشان می‌دهد که گام زمانی 4fs نتایجی منطبق بر گام زمانی 1fs ارائه می‌دهد. بنابراین لزومی به استفاده از گام زمانی کوچکتر وجود ندارد. اما افزایش گام زمانی به مقادیر بزرگتر مانند 10fs، دقت حل را به کلی تحت تأثیر قرار می‌دهد.

#### 4-3- توزیع پروفیل دما و چگالی در اختلاف دماهای مختلف

در این قسمت با اعمال اختلاف دماهای متفاوت بر دو دیواره، تأثیر آن بر توزیع پروفیل چگالی و دمای گاز در عرض کانال مورد بررسی قرار می‌گیرد. ابعاد کانال مورد بررسی معادل با  $54 \times 54 \times 54\text{nm}$  بوده و با استفاده از 450 اتم گاز آرگون، فرایند انتقال گرما در عدد نودسن 10 شبیه‌سازی می‌شود. در شکل 11 تأثیر اختلاف دمای اعمالی بر توزیع دمای بی‌بعد شده در گاز آورده شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌گردد پروفیل دما در نزدیکی مرزها تحت تأثیر نیروی دیواره‌ها قرار گرفته و دمای گاز به دمای دیواره نزدیک می‌شود. در واقع وجود این میدان نیرو به دلیل ایجاد نیروی جاذبه، زمان حضور<sup>1</sup>

جدول 1 مشخصات میدان حل برای طول‌های مختلف در جهت‌های تناوبی

ابعاد کانال (نانومتر)	تعداد اتم دیواره	تعداد اتم گاز	
$27 \times 5.4 \times 27$	51006	112	A
$54 \times 5.4 \times 54$	202006	450	B
$108 \times 5.4 \times 108$	812046	1800	C

<sup>1</sup> Residence Time

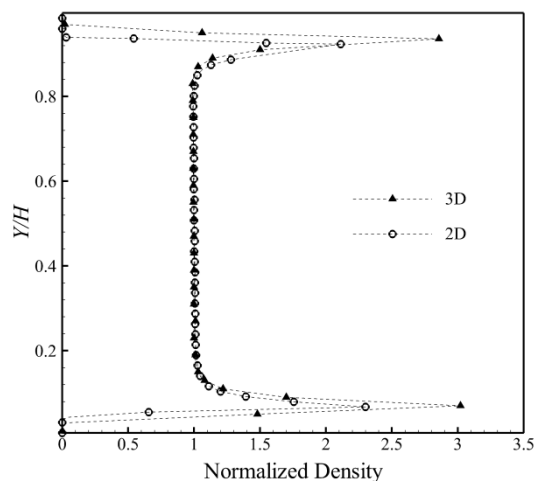


Fig. 5 Density profile between two walls in 2D and 3D cases

شکل 5 توزیع چگالی بین دو دیواره در دو دوبعدی و سه‌بعدی

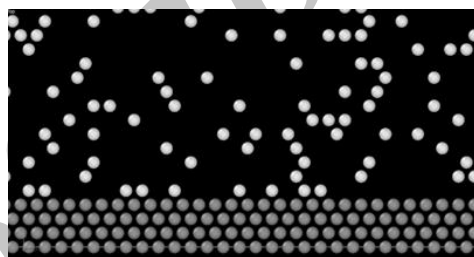


Fig. 6 Two dimensional solution domain

شکل 6 میدان حل دوبعدی

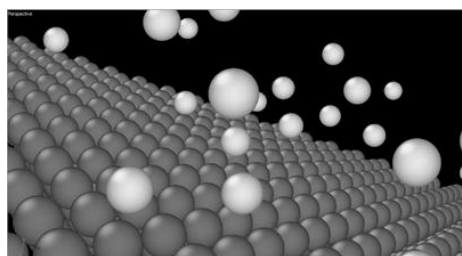


Fig. 7 Three dimensional solution domain

شکل 7 میدان حل سه‌بعدی

است. همان‌گونه که مشخص است، در حل دو بعدی وقتی یک اتم گاز نزدیک می‌گردد، نیروی دیواره از طرف حداکثر دو یا سه اتم دیواره به آن وارد می‌گردد. این در حالی است که در حالت سه بعدی، به هر اتم گاز در مجاور دیواره، از شش تا هفت اتم دیواره نیرو وارد می‌گردد. در واقع این امر نشان می‌دهد که در حالت دوبعدی، میدان نیروی دیواره به اندازه کافی وجود ندارد تا بتواند اثر خود را به طور کامل بر گاز بگذارد. به همین دلیل میزان افزایش ماکزیمم دما و چگالی گاز در نزدیک دیواره در حالت دو بعدی در حدود پنجاه درصد مقدار متناظر با حالت سه بعدی پیش‌بینی می‌گردد.

#### 4-2- تعیین کمینه ابعاد میدان در جهت تناوبی و گام زمانی بیشینه

در این قسمت به مشخص کردن کمینه ابعاد لازم جهت شبیه‌سازی در جهت تناوبی پرداخته خواهد شد. به این منظور در حالت سه‌بعدی برای عدد نودسن 10 در کانالی به عرض  $H = 5.4\text{nm}$  با اختلاف دمای (20K)، طول جهت‌های محوری ( $x$ ) و جانبی ( $z$ ) و تعداد اتم‌های دیواره در سه حالت

هر سه حالت اختلاف دمای زیاد (100K)، اختلاف دمای متوسط (50K) و اختلاف دمای کم (10K)، تغییرات در نزدیکی مرزها از دیوار آغاز شده و تا حدود یک پنجم ارتفاع کانال در نزدیک هر دیوار ادامه دارد. مشاهده می‌شود که ابعاد این ناحیه در هر سه حالت، مستقل از اختلاف دمای اعمالی می‌باشد و عرض ناحیه تأثیر در حدود  $3.17\sigma$  می‌باشد.

همچنین مشاهده می‌شود که در هر سه حالت در ناحیه میانی کانال، تغییرات دما مستقل از اتفاقات نزدیک دیوار است و پروفیل تغییرات دما در این ناحیه خطی است. نکته قابل توجه این است که علی‌رغم بی‌بعد شدن پروفیل توزیع دما در عرض کانال در این سه حالت، توزیع دما در عرض کانال بر هم منطبق نیستند. دلیل این امر تغییرات چگالی به وجود آمده در نزدیکی هر مرز به دلیل انتقال گرما از مرزها می‌باشد. در شکل 12 پروفیل تغییرات چگالی نزدیک دو دیوار در کنار مقادیر مربوط به حالت هم دما آورده شده است. مطابق شکل، با افزایش اختلاف دما و به دلیل افزایش بیشتر دما در نزدیکی دیوار بالایی، چگالی بیش از پیش کاهش می‌یابد. در واقع وجود انتقال گرما از دیوار بالایی به گاز، باعث می‌شود که انرژی جنبشی مولکول‌های گاز افزایش یافته و زمان حضور آن‌ها در میدان نیروی دیوار به طور قابل توجهی کاهش می‌یابد و در نتیجه چگالی گاز در مجاورت دیوار کاهش می‌یابد. در مورد دیوار پایینی که انرژی را از گاز دریافت می‌کند، انرژی جنبشی اتم‌های گاز در ناحیه مذکور کاهش یافته و در نتیجه انرژی لازم برای فرار از ناحیه نیروی دیوار کاهش می‌یابد. بنابراین زمان حضور آن‌ها در مجاورت دیوار افزایش می‌یابد که این امر موجب افزایش چگالی گاز در ناحیه مذکور می‌گردد. در شکل 13، پروفیل درصد تغییرات چگالی گاز در نزدیکی هر دیوار بر اثر اعمال اختلاف دما نسبت به توزیع چگالی در حالت هم‌دما برای دیوار سرد و گرم آورده شده است. بررسی این شکل نشان می‌دهد که در هر دو حالت (دیوار سرد و دیوار گرم)، اختلاف دمای اعمالی تا 20K، چگالی گاز نزدیک دیواره را کمتر از پنج درصد تغییر می‌دهد. در نتیجه کاملاً مشخص است که تا اختلاف دمای مذکور بین دو دیوار، با تقریب بسیار خوبی این تنها نیروی دیواره است که توزیع اتم‌ها در نزدیکی مرزها و در نتیجه در عرض کانال را مشخص می‌نماید. با افزایش اختلاف دما به مقادیر بالاتر، رفته رفته تأثیر دمای دیواره‌ها بر توزیع اتم‌های گاز در نزدیک دیواره‌ها بیشتر شده و در نتیجه این امر روند انتقال گرما بین دیواره‌ها را نسبت به

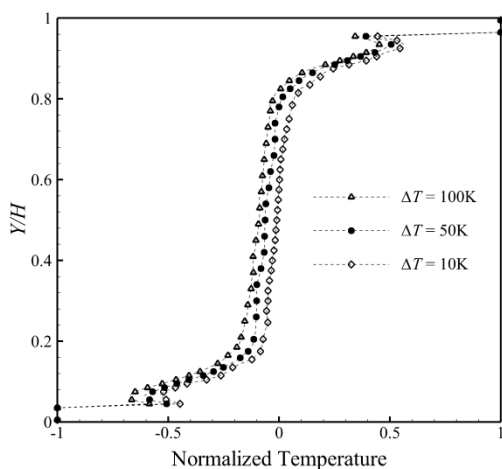


Fig. 11 Variation of temperature profile in gas with temperature difference between walls

شکل 11 تغییرات پروفیل دمای گاز نسبت به اختلاف دما اعمالی بین دو دیوار

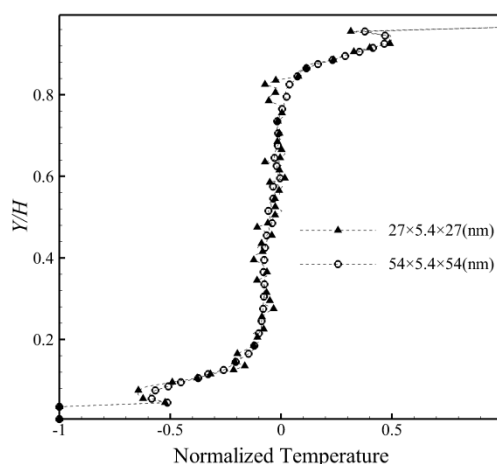


Fig. 8 Temperature profiles between two walls for cases A and B

شکل 8 پروفیل دمای گاز بین دو دیوار برای حالات A و B

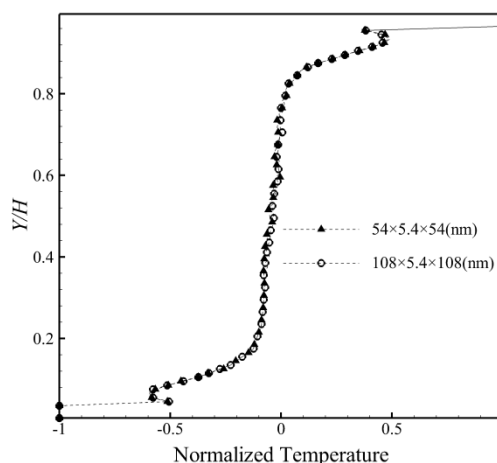


Fig. 9 Temperature profiles between two walls cases B and C

شکل 9 پروفیل دمای گاز بین دو دیوار برای حالات B و C

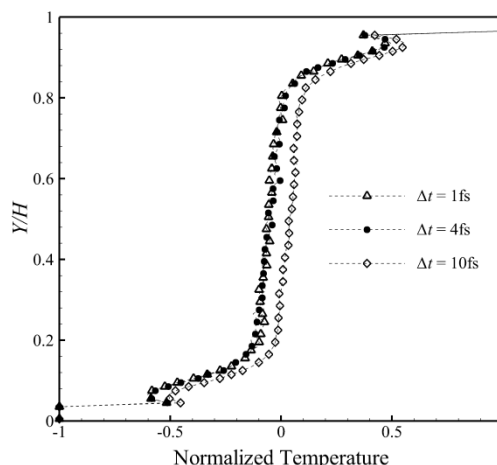


Fig. 10 Distribution of temperature profile in three different time step

شکل 10 توزیع دمای سیال در سه گام زمانی مختلف

اتم‌های گاز در مجاورت دیوار را افزایش داده و در نتیجه، انتقال گرما بین سیال و دیوار افزایش می‌یابد. به همین و همان‌گونه که مشاهده می‌گردد، دمای گاز به دمای دیوار نزدیک شده است. مشاهده می‌شود که در



دیواره‌ها ( $J_y$ )، در شکل 14 به نمایش در آمده است. همچنین گرادیان دمای وجود آمده در سیال را می‌توان از روی پروفیل دمای ارائه شده در شکل 11 برای اختلاف دماهای متفاوت محاسبه نمود.

با در نظر گرفتن شار گرمایی در جهت عمود بر دیواره و گرادیان دمای وجود آمده در عرض کانال، ضریب انتقال حرارت هدایتی سیال از رابطه فوریه محاسبه شده و در شکل 15 به نمایش در آمده است. همان‌گونه که ملاحظه می‌شود، ضریب انتقال حرارت هدایتی گاز آرگون با افزایش اختلاف دمای دو دیواره افزایش می‌یابد. افزایش اختلاف دمای بین دو دیواره مطابق با شکل 12، توزیع سیال در مجاورت دیواره‌های سرد و گرم را تغییر داده و این امر در مجموع موجب افزایش ضریب انتقال حرارت هدایتی سیال می‌گردد. بررسی شکل 15 نشان می‌دهد که افزایش اختلاف دما از 10K به 100K، مقدار ضریب انتقال حرارت هدایتی گاز را تا حدود 30 درصد افزایش می‌دهد.

### 5- جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

در بسیاری از جریان‌های گازی درون نانوکناها، تحلیل و محاسبه دقیق

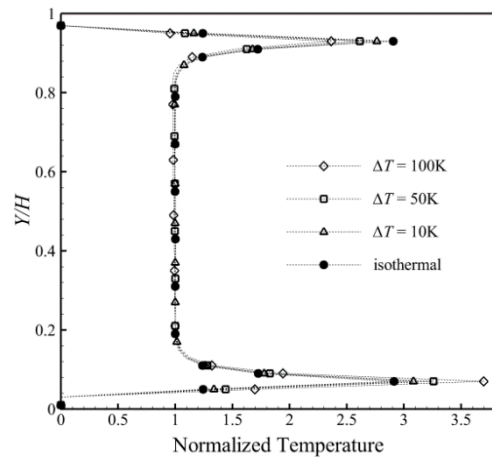


Fig. 12 Variation of density profile in gas with temperature difference between walls

شکل 12 تغییرات پروفیل چگالی گاز نسبت به اختلاف دما اعمالی بین دو دیواره

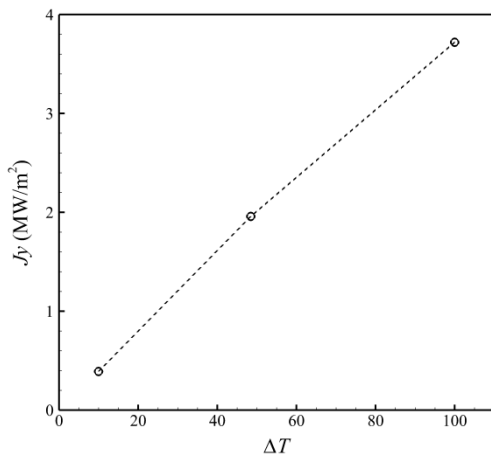


Fig. 14 Variation of heat flux through the gas with temperature difference between walls

شکل 14 تغییرات شار گرمایی عبوری از گاز نسبت به اختلاف دما اعمالی بین دو دیواره

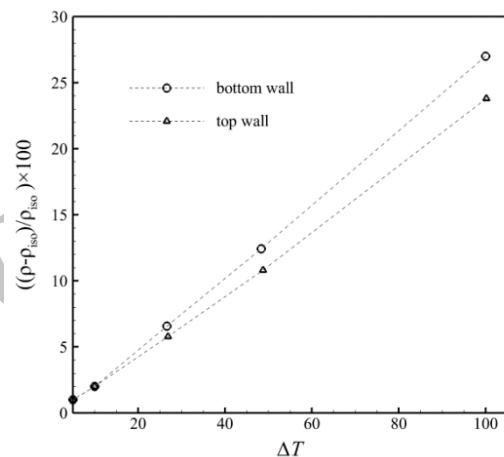


Fig. 13 Percentage of gas density variation near wall with temperature difference

شکل 13 درصد تغییرات چگالی گاز نزدیک دیواره نسبت به اختلاف دما اعمالی حالت قبل تغییر می‌دهد.

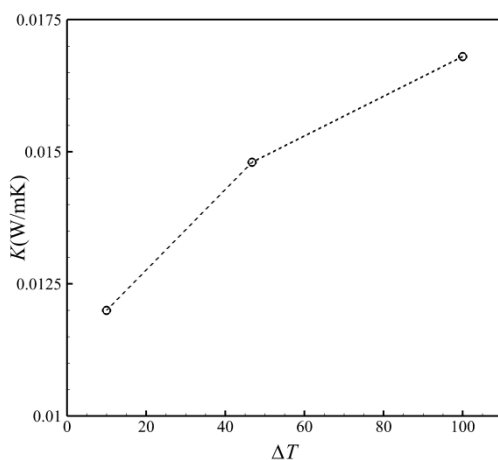


Fig. 15 Variation of thermal conductivity coefficient of gas with temperature difference between walls

شکل 15 تغییرات ضریب انتقال حرارت هدایتی گاز نسبت به اختلاف دما اعمالی بین دو دیواره

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

اعمال دماهای متفاوت به دیواره‌ها موجب ایجاد گرادیان و در نتیجه شار گرمایی مختلف بین دو دیواره می‌گردد. بردار شار گرمایی با استفاده از عبارت ایروینگ-کِرک‌وود<sup>1</sup> مطابق روابط (4,3) محاسبه می‌گردد [19]:

$$J_l = \frac{1}{Vol} \left\langle \sum_i V_i^i E_{tot}^i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} r_{ij}^{ij} (f^{ij} \cdot V^i) \right\rangle \quad (3)$$

$$E_{tot}^i = \frac{1}{2} m^i \left( (V_x^i)^2 + (V_y^i)^2 + (V_z^i)^2 \right) + \mathcal{O}^i \quad (4)$$

که در آن علامت جمع بر روی تمام اتم‌های گاز آرگون انجام شده است. با در نظر گرفتن  $l$  به عنوان محور مختصات کارتزین، در روابط فوق  $V^i$  بیانگر مولفه سرعت ذره  $i$  در جهت  $l$  می‌باشد. به علاوه  $E_{tot}^i$  و  $\mathcal{O}^i$  به ترتیب انرژی کل و پتانسیل ذره  $i$  می‌باشند و  $r_{ij}^{ij}$  بردار فاصله ذره  $i$  از  $j$  می‌باشد. همچنین  $f^{ij}$  بردار نیروی بین ذره‌های اعمالی بر ذره  $i$  از ذره  $j$  بوده و  $V^i$  بردار سرعت ذره  $i$  می‌باشد. مولفه‌ی عمودی شار گرمایی در راستای عمود بر

<sup>1</sup> Irving-Kirkwood



انتقال گرما از دیوارها به سیال و همچنین تأثیر نیروی دیواره بر توزیع پارامترهای گرمایی سیال از اهمیت بالایی برخوردار است. در این مقاله با مقایسه حل دوبعدی و سه‌بعدی، نشان داده شد که حل دوبعدی فرایند انتقال گرما بین دو دیوار کانال و گاز آرگون، مقدار افزایش دما و چگالی در مجاورت دیوار را در حدود پنجاه درصد کمتر از مقادیر مربوط به حل سه بعدی محاسبه می‌کند. در واقع در شرایط دوبعدی، تعداد اتم‌های کمتری از دیوار به اتم گاز نیرو وارد می‌کنند که این امر باعث یکسان نبودن میدان نیروی تولیدی توسط دیوار در حالت دو و سه‌بعدی می‌گردد. همچنین بررسی نتایج نشان داد که به منظور از بین بردن اثر مرزها بر نتایج، در جهت‌های تناوبی باید ابعاد کانال به اندازه فاصله پویس آزاد مولکولی در نظر گرفته شود و حداکثر گام زمانی مورد نظر در شرایط مذکور نمی‌تواند از 4fs بیشتر گردد. با توجه به نتایج به دست آمده از حل دینامیک مولکولی نشان داده شد که مستقل از اختلاف دمای اعمالی بین دو دیوار، وجود نیروی دیواره پروفیل توزیع دما را تا حدود فاصله یم نانومتر از هر دیوار به شدت تغییر می‌دهد. در واقع حل‌های مبتنی بر تئوری جنبشی نمی‌توانند تأثیر نیروی دیواره را در روند حل خود لحاظ کنند، بنابراین قادر به پیش‌بینی دقیق رفتار گاز در مجاورت دیوار و نشان دادن افزایش دما و چگالی در نزدیکی مرزها نمی‌باشند. همچنین نشان داده شد که علاوه بر تغییر چگالی سیال در نزدیکی دیوارها، دمای دو دیوار نیز می‌تواند مقدار چگالی نزدیک هر دیوار را تحت تأثیر قرار دهد. بررسی نتایج نشان داد که برای اختلاف دما بیشتر از 20 درجه بین دو دیوار، چگالی سیال در مجاورت دیوار نسبت به توزیع چگالی در حالت دیوار همدم، بیشتر از 5% تغییر می‌کند و اگر این اختلاف دما به مقادیر نظیر 100 درجه برسد، اختلاف چگالی به مقدار بیشتر از 25% در نزدیکی هر دیوار مشاهده می‌گردد. با محاسبه شار گرمایی عبوری از گاز و در نظر گرفتن گرادیان دما در عرض کانال، ضریب هدایت حرارتی سیال تغییر محاسبه و نشان داده شد که با افزایش اختلاف دما بین دیوارها، ضریب هدایت حرارتی سیال تا 30% درصد افزایش می‌یابد.

## 6- فهرست علائم

عدد نودسن	Kn
ضریب افزایش شعاع قطع	M
ارتفاع کانال (nm)	H
دما (K)	T
جرم (kg)	m
اختلاف دمای دو دیوار	$\Delta T$
ثابت بولتزمن (J/K)	$k_B$
ثابت فنر	k
سرعت دیوار	$U_w$
شعاع قطع	$r_c$
فاصله اتم‌ها از یکدیگر	$r_{ij}$
حل دوبعدی	2D
حل سه‌بعدی	3D
فمتو ثانیه	Fs
ضریب انتقال حرارت هدایتی	K
بردار شار گرمایی	J
انرژی	E
سرعت	V

## علائم یونانی

$\lambda$	فاصله پویس آزاد مولکولی (nm)
$\rho$	چگالی ( $\text{kgm}^{-3}$ )
$\beta$	طول نفوذ نیروی دیوار (nm)
$\sigma$	قطر مولکول (nm)
$\varepsilon$	عمق چاه پتانسیل (J/K)
$\phi(r)$	تابع پتانسیل

## زیر نویس‌ها

tot	کل (مجموع انرژی جنبشی و پتانسیل)
l	جهت محور مختصات
Ar	آرگون
Wall	دیوار
Ar – Ar	آرگون-آرگون
Wall – Ar	دیوار-آرگون

## بالا نویس‌ها

i	شمارنده ذره
j	شمارنده ذره

## 7- مراجع

- G. Karniadakis, A. Beskok, A. Narayan, *Microflows And Nanoflows*, pp. 34-37, New York: Springer-Verlag, 2005.
- R. W. Barber, D. R. Emerson, Challenges in Modeling Gas-Phase Flow in Microchannels: From Slip to Transition, *Heat Transfer Engineering*, Vol. 27, No. 4, pp. 3-12, 2006.
- J. C. Maxwell, On stresses in rarified gases arising from inequalities of temperature, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, Vol. 170, No., pp. 231-256, 1879.
- C. Cercignani, M. Lampis, Kinetic models for gas-surface interactions, *Transport Theory and Statistical Physics*, Vol. 1, No. 2, pp. 101-114, 1971.
- G. A. Bird, Monte Carlo Simulation of Gas Flows, *Annual Review of Fluid Mechanics*, Vol. 10, No. 1, pp. 11-31, 1978.
- P. Rosa, T. G. Karayiannis, M. W. Collins, Single-phase heat transfer in microchannels: The importance of scaling effects, *Applied Thermal Engineering*, Vol. 29, No. 17-18, pp. 3447-3468, 2009.
- M. Sahebi, A. Azimian, Molecular dynamics investigation of the mechanisms of thermal creep flow in nanotubes, *Moderes Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 10, pp. 225-232, 2015. (in Persian)
- A. H. Meghdadi Isfahani, I. Tasdighi, A. Karimpour, E. Shirani, M. Afrand, A joint lattice Boltzmann and molecular dynamics investigation for thermohydraulic simulation of nano flows through porous media, *European Journal of Mechanics - B/Fluids*, Vol. 55, No. 10, pp. 15-23, 2016.
- F. Faraji, A. Rajabpour, F. Kowsary, Temperature profile for nanoscale Poiseuille flow: A multiscale study, *Journal of Mechanical Science and Technology*, Vol. 30, No. 2, pp. 803-807, 2016.
- M. Barisik, B. Kim, A. Beskok, Smart wall model for molecular dynamics simulations of nanoscale gas flows, *Communications in Computational Physics*, Vol. 7, No. 5, pp. 977-993, 2010.
- M. Barisik, A. Beskok, Equilibrium molecular dynamics studies on nanoscale-confined fluids, *Microfluid. Nanofluidics*, Vol. 11, No. 3, pp. 269-282, 2011.
- M. Barisik, A. Beskok, Molecular dynamics simulations of shear-driven gas flows in nano-channels, *Microfluid Nanofluidics*, Vol. 11, No. 5, pp. 611-622, 2011.
- M. Barisik, A. Beskok, Scale effects in gas nano flows, *Physcs of Fluids*, Vol. 26, No. 5, pp. 52003, 2014.
- M. Barisik, A. Beskok, Law of the nano-wall in nano-channel gas flows, *Microfluid Nanofluidics*, Vol. 20, No. 3, pp. 1-9, 2016.
- M. H. Saidi, A. Sadeghi, Heat Transfer at Microscale, pp. 497-526, Croatia: INTECH Open Access Publisher, 2011.
- M. P. Allen, D. J. Tildesley, *Computer simulation of liquids*, pp. 27-32, New York: Oxford university press, 1987.
- B. H. Kim, A. Beskok, T. Cagin, Thermal interactions in nanoscale fluid flow: Molecular dynamics simulations with solid-liquid interfaces, *Microfluid Nanofluidics*, Vol. 5, No. 4, pp. 551-559, 2008.
- N. Asproulis, D. Drikakis, Boundary slip dependency on surface stiffness, *Physical Review E*, Vol. 81, No. 6, pp. 1-5, 2010.
- J. H. Irving, J. G. Kirkwood, The statistical mechanical theory of transport processes IV, the equations of hydrodynamics, *The Journal of chemical physics*, Vol. 18, No. 6, pp. 817-829, 1950.