



شبیه‌سازی زنجیره پلیمری دوسرگیردار در میکروکانال با استفاده از روش دینامیک ذرات اتلافی

رامین ذاکری*

هیئت علمی، دانشگاه صنعتی شاهرود، دانشکده مکانیک

مقاله مستقل، تاریخ دریافت: ۱۳۹۸/۰۱/۲۳؛ تاریخ بازنگری: ۱۳۹۸/۰۴/۰۵؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۸/۰۶/۰۳

چکیده

در این مقاله، از روش دینامیک ذرات اتلافی جهت شبیه‌سازی زنجیره پلیمری دوسرگیردار در یک میکروکانال با توجه به حرکت سیال توسط میکروپمپ الکترواسموتیک استفاده می‌شود. در این بررسی جایجایی یک زنجیره پلیمر ثابت شده در دو انتها در جریان الکترواسموتیک در یک میکرو کانال ساده پرداخته شده و اثر پارامترهای موثر بر جایجایی زنجیره پلیمری بررسی خواهد شد. پارامترهای متاثر مانند غلظت یونی، میدان الکتریکی اعمال شده، اثر جنس سطح یا زتا پتانسیل بررسی و تحلیل و با نتایج تحلیلی مقایسه شده است. در ادامه، یک زنجیره پلیمری در کانال قرار داده شده، بصورتی که دو انتهای آن ثابت است و جریان سیال سبب خواهد شد که زنجیره پلیمری با حرکت رفت و برگشتی جابجا شود. نشان داده شده است که با تغییر میدان الکتریکی از ۵۰ به ۱۵۰ ولت بر متر به‌ازای ۲۰ گوی میزان جایجایی زنجیره دوبرابر افزایش نموده، در حالی که اگر تعداد گوی‌ها به ۴۰ عدد اضافه شود، در ولتاژ ۱۰۰ ولت بر متر میزان جایجایی حدود ۳ برابر افزوده خواهد شد؛ همچنین با تغییر موقعیت نصب از مختصات عمودی ۴ و -۴ به ۹/۵ و -۹/۵، به ازای جایجایی زنجیره یکسان، میزان میدان الکتریکی به نصف کاهش یافته و میزان نوسان کمتر می‌شود.

کلمات کلیدی: دینامیک ذرات اتلافی؛ جریان الکترواسموتیک؛ میکرو کانال؛ زنجیره پلیمر.

Simulation of Fixed Two Ends Micro Polymer Chain in Microchannel Using Dissipative Particle Dynamics

R. Zakeri

¹ Assistant Professor, Mechanical Engineering, Shahrood University of Technology, Shahrood, Iran.

Abstract:

In this paper, DPD method is used to simulate the polymer chain in a micrometers channel with respect to fluid motion using electroosmotic micro pump. In this study, the displacement of a polymeric chain at the two fixed ends in an electro-osmotic flow in a simple microchannel is investigated and the influence of the effective parameters are studied on the displacement of the polymeric chain. In the following, a two fixed ends polymeric chain is placed in the channel and the fluid flow will cause the polymer chain to move reciprocatingly. It has been shown that with the change of electric field from 50 to 150 V / m with 20 beads, the amount of chain movement would be twice, while if the number of beads is added to 40, at electric field of 100 V / m, the displacement rate will be increased approximately 3 times. Also, the effect of the position of the installation has been checked and shown by changing the position of the installation from the vertical coordinates 4 and 4 to 9.5 and -9.5, with consideration of the same chain movement, the electric field strength decreased by half, and the amount of oscillation decreases.

Keywords: Dissipative Particle Dynamics; Electro-Osmotic Flow; Micro Channel; Polymer Chain.

* نویسنده مسئول؛ تلفن: ۰۲۳۳۲۳۰۰۲۵۸؛ فکس: ۰۲۳۳۰۰۲۴۰
آدرس پست الکترونیک: r_zakeri@shahroodut.ac.ir

۱- مقدمه

تخت ایجاد شده در کانال، پراکندگی نمونه‌های گسسته را کاهش می‌دهد. (کارنیداکیس و همکاران ۲۰۰۵).

جریان الکترواسموتیک همچنین، مزایای مهم دیگری نیز دارد؛ مانند روش ساخت ساده، قابلیت اطمینان کافی، فاقد سر و صدا و قابلیت کنترل پذیری را فراهم می‌کند. این روش برای انتقال سیال و انتقال ممنوم به میکرو عملگر و کاربردهای گوناگون، گزینه مناسبی است. برای مثال، در پمپاژ مایعات از طریق نانوکانال‌ها، به طور گسترده از EOF استفاده شده است (تی سنگ و همکاران ۲۰۱۳، مارونی ۲۰۱۴، دی ۲۰۱۵، صادقی و همکاران ۲۰۱۷) یا میکروکانال‌ها (وانگ و همکاران ۲۰۰۹، کائو و همکاران ۲۰۱۲، ژائو و گیوی ۲۰۱۶، ۲۰۱۴) از دیدگاه‌های مختلف، در هدایت جریان از طریق نانوپودرها (بونوم و همکاران ۲۰۱۷)، آنالیز تزریق جریان (داسگوپتا و لیو ۱۹۹۴)، عملگرهای میکرومکانیکی (کربای و همکاران ۲۰۰۲)، تزریق سوخت در نانو ساختارها (پاتل و همکاران ۲۰۰۸). پیاسنا (پیاسنا و همکاران ۲۰۱۸) از روش الکترواسموتیک، جهت پمپاژ و راه اندازی یک عملگر میکرو استفاده نموده‌اند. آنها نشان دادند که جریان الکترواسموتیک، جابجایی یک عملگر مکانیکی را بخوبی دارا است.

این برنامه‌های کاربردی متعدد، محققان بیشتری را به کار جدی‌تر در آنالیز دقیق جریان الکترواسموتیک و یا شبیه‌سازی‌های دیگر ترغیب کرده است. بدیهی است، شبیه‌سازی جریان الکترواسموتیک، برای کنترل کارایی و طراحی بهینه چنین دستگاه‌هایی در مقیاس نانو / میکرو بسیار مهم است (دانگ هونگ و همکاران ۲۰۰۸).

علاوه بر تجزیه و تحلیل‌های نظری و کارهای تجربی، تلاش‌های عددی متعددی برای شبیه‌سازی الکترواسموتیک و کاربردهای عملگر برای میکروکانال ساده و هندسه‌های مختلف میکرون صورت گرفته است (بیانچی و همکاران ۲۰۰۰، ژائو و همکاران ۲۰۰۵، شاملو و همکاران ۲۰۱۷). با این حال چنین مطالعاتی، مربوط به بررسی‌های جریان پیوسته بود. همانطور که مشخص است، معادلات ناویر استوکس نمی‌توانند دقیقاً پدیده‌های حقیقی را توصیف کند که در موارد جریان الکترواسموتیک غیرپیوسته اتفاق می‌افتد. این مسئله محققان را به جستجوی مدل‌های جایگزین دیگری برای رفتار نمونه‌های جریان الکترواسموتیک ناپیوسته

با توجه به اهمیت طراحی و ساخت عملگرهای میکرو در صنعت پیشرفته نوین همچون، کاربرد در صنایع هوافضا، رباتیک و صنایع خودرو، محققان بسیاری در این زمینه کارهای متفاوتی ارائه نموده‌اند (لیزر و همکاران ۲۰۰۴). هدف در تمامی این کارها، ایجاد جابجایی در اندازه ریز بوده و از روش‌های مختلفی استفاده شده است (بوگین ۲۰۰۶). روش‌هایی همچون روش‌های شیمیایی میکرو احتراق، الکترولیز، تبدیل فاز که عمر این نوع عملگرها در مقایسه با روش‌های غیرشیمیایی مانند، دیفیوژن یونی بر مبنای روش پلیمر فعال الکترودی کمتر است. روش مذکور با استفاده از میدان الکتریکی قابلیت جابجایی را بوجود می‌آورد (هیلبر ۲۰۱۶).

در بسیاری از فعالیت‌های محققین، استفاده از میدان الکتریکی مرسوم شده است. میدان الکتریکی با قابلیت دسترسی آسان و کنترل مناسب، گزینه مناسبی جهت طراحی و ساخت سنسورهای مکانیکی یا عملگر جهت جابجایی در ابعاد میکرو شده است (هیلبر ۲۰۱۶، بورین ۲۰۰۰). مهمترین مسئله در ایجاد جابجایی عملگر که بر مبنای حرکت سیال طراحی و ساخته خواهد شد، نحوه حرکت سیال و انتقال ممنوم است (اسکی و همکاران ۲۰۱۱).

یکی از روش‌های انتقال سیال استفاده از اثر میدان الکتریکی، در میکروکانال‌ها و نانو کانال‌ها در پدیده جریان الکترواسموتیک (EOF^۱) است. به طور کلی، جریان الکترواسموتیک حرکت توده‌ای مولکول‌های مایع را نزدیکی سطح جامد توصیف کرده و در پاسخ به یک میدان الکتریکی به موازات سطح مورد نظر اعمال می‌شود. الکترواسموتیک برای کوچک‌سازی مناسب است و کاربردهای فراوانی در سیستم‌های میکرو و نانو الکترومکانیکی^۲ دارد. جریان الکترواسموتیک، مزایای زیادی نسبت به رویکردهای جریان معمولی تحت فشار دارد، زیرا استفاده از بخش متحرک را کاهش می‌دهد. علاوه بر این، پروفیل سرعت شبیه به صفحه

¹ Electroosmotic Flow

² MEMS/NEMS

بررسی شده است؛ همچنین نتایج برای کانال ساده بدون پلیمر اعتبارسنجی و جریان با حضور زنجیره پلیمر در یک میکرو مجاری توسعه و ارزیابی می‌شود.

۲- معادلات حاکم

در این بخش معادلات حاکم بر جریان الکترواسموتیک به‌عنوان نیروی خارجی، معادلات دینامیک ذرات اتلاfi، به‌عنوان ذرات سیال (نیروی داخلی) و زنجیره پلیمر، به‌عنوان عملگر میکرو را مختصراً بررسی خواهند شد.

۲-۱- فیزیک جریان الکترواسموتیک

پدیده الکتروکینتیک می‌تواند زمانی اتفاق بیفتد که میدان الکتریکی خارجی به طور مناسب، به ذرات مایع در میدان جریان اعمال شود. اگرچه از نقطه نظر الکترواستاتیسی سیال خنثی است، اما در نزدیکی مرز جامد در EDL اینگونه نیست. در حقیقت یون‌های مخالف در نزدیکی مرز جامد غالب هستند. تاثیر EDL را می‌توان به طور تقریبی با طول دبی λ_D یا k^{-1} پیش بینی کرد که بستگی به غلظت مولی مایع یونیزه شده دارد. با توجه به نظریه Debye-Hückel طول دبی یا طول λ_D می‌توان از (۱) محاسبه کرد (کارنیاداکیس و همکاران ۲۰۰۵):

$$k^{-1} = \lambda_D = \left(\frac{\epsilon k_B T}{2e^2 z^2 n_\infty} \right)^{\frac{1}{2}} = (8\pi e^2 \lambda_B z^2 n_\infty)^{-1/2} \quad (1)$$

k_B (JK⁻¹) ثابت بولتزمن است T (K) دمای مطلق است e (C) ثابت بار بنیادی و ϵ عدد ثابت است. z ظرفیت یون‌ها و n_∞ عدد بالک که نشان دهنده غلظت یونهاست و ممکن است، مقادیر مختلفی داشته باشد. بدیهی است که مقادیر مختلف آن به طول دبی‌های مختلف منجر می‌شود. علاوه بر این λ_B طول Bjerrum یا لایه دوتایی الکتریکی EDL است. به طور کلی، تعامل میدان الکتریکی اعمال شده با یون‌های سیال مثبت در EDL، نیروی EOF خالص را تولید می‌کند. فرض بر این است که میدان الکتریکی اعمال شده بر ذرات سیال در یک کانال ساده در جهت x است. نیروی حاصل از نیروی خارجی از (۲) بدست می‌آید:

تشویق کرده است (زیمران و همکاران در سال ۲۰۰۶). رفتار یک سیال ناپیوسته را در میکروکانال T شکل با استفاده از روش المان محدود و مطالعه خواص رئولوژی جریان الکترواسموتیک شبیه‌سازی کردند.

از دیدگاه مزوسکوپیک، تلاش‌های متعددی برای استفاده از روش‌های مختلف از قبیل، دینامیک مولکولی (تسیر و اسلاتر ۲۰۰۵) یا لتیزبولتزمن (LBM) بکار گرفته شده است. یکی دیگر از روش‌های مزوسکوپیک، روش دینامیک ذرات اتلاfi یا ^۱DPD گسترش یافته است (هاگربرگ و کالمن ۱۹۹۲) که برای جریان در مقیاس‌های بزرگتر مناسب است. این روش شبیه‌سازی به منابع محاسباتی کمتری نسبت به روش شبیه‌سازی مولکولی نیاز دارد (استینر و همکاران). روش DPD، می‌تواند بطور بالقوه شکاف بین اتومیستیک و توصیف جریان سیال پیوسته را از بین ببرد (گروت و وارن ۱۹۹۷). ذرات DPD، نشان دهنده گروهی از مولکولها هستند که با هم تحت عنوان پتانسیل درجه دوم حرکت می‌کنند. برخلاف روش شبیه‌سازی مولکولی، روش DPD قادر به استفاده از گام‌های زمانی بزرگتر و محاسبه اندازه ذرات بزرگتر اثر متقابل ذرات نرم است. دانگ هونگ و همکاران ۲۰۰۸، جریان الکترواسموتیک را در نانوکنال‌های T شکل با استفاده از DPD شبیه‌سازی کردند. آنها نشان دادند که هزینه محاسباتی مورد نیاز در مقایسه با شبیه‌سازی مولکولی، معقولانه بنظر می‌رسد. شبیه‌سازی حرکت زنجیره پلیمر به روش دینامیک ذرات اتلاfi در جریان گرادیان فشار و الکترواسموتیک نیز، توسط ذاکری و همکاران ۲۰۱۳ بررسی شده است. آنها نشان دادند که جریان الکترواسموتیک، قابلیت حرکت یک زنجیره پلیمر را داراست.

در این مقاله با توجه به کارهای گذشته نویسندگان، علاوه بر بررسی جریان الکترواسموتیک در میکرو کانال، یک پلیمر دو سرگیر دار در کانال قرار داده شده و تحت تاثیر جریان الکترواسموتیک شروع به حرکت خواهد نمود و به عنوان نوآوری این مقاله مطرح است. اینگونه جابه‌جایی‌ها در طراحی میکرو سنسور یا جابجایی مکانیکی می‌تواند کاربردی باشد. نشان داده می‌شود که پارامترها موثر شامل، پارامترهای الکترواسموتیک و پارامترهای پلیمر هستند و هر دو مورد

² Electric Double Layer (EDL)

¹ Dissipative Particle Dynamics

نیروی داخلی اعمال شده به ذره i توسط ذره j است. این نیرو توسط معادله (۸) محاسبه می‌شود:

$$\sum_{j \neq i} \mathbf{f}_{ij} = \sum_{j \neq i} [\mathbf{F}_{ij}^C + \mathbf{F}_{ij}^D + \mathbf{F}_{ij}^R] \quad (8)$$

جایی که \mathbf{F}_{ij}^C نیروی بقا است، \mathbf{F}_{ij}^D نیروی اضمحلالی است و \mathbf{F}_{ij}^R نیروهای تصادفی هستند. نیروی بقا با استفاده از رابطه ۹ بدست می‌آید.

$$\mathbf{F}_{ij}^C = \begin{cases} a_{ij}(1 - \frac{r_{ij}}{r_c})\hat{\mathbf{r}}_{ij}, & r_{ij} < r_c \\ 0, & r_{ij} \geq r_c \end{cases} \quad (9)$$

که در آن $a_{ij} = 75k_B T / \rho$ حداکثر مقاومت بین ذرات i و j و ρ چگالی سیستم است و r_c شعاع برش است. قابل توجه است که \mathbf{r}_{ij} مربوط به فشرده‌سازی سیستم ایزوترمال است که ارتباط بین اتوموستیک و توصیف (mesoscale) جریان سیال را برقرار می‌کند (ماخوپادهیای و آبراهام ۲۰۰۹). علاوه بر این نیروی جاذب و نیروی تصادفی به ترتیب با روابط (۱۰) محاسبه می‌شوند:

$$\mathbf{F}_{ij}^D = -\gamma \omega^D(r_{ij})(\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})(\hat{\mathbf{r}}_{ij}) \quad (10)$$

$$\mathbf{F}_{ij}^R = \sigma \omega^R(r_{ij})\theta_{ij}\hat{\mathbf{r}}_{ij}$$

در آن θ_{ij} یک تابع تصادفی با خواص میانگین صفر و واریانس واحد است (گروت و وارن ۱۹۹۷). در معادلات بالا σ و γ ، به ترتیب، ضریب قدرت برای تسریع و نیروهای تصادفی $\mathbf{v}_{ij} = (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)$ و ω^D و ω^R دو تابع وزن می‌باشند که با استفاده از رابطه (۱۱) محاسبه می‌شوند:

$$\omega^D(r_{ij}) = [\omega^R(r_{ij})]^2 = \begin{cases} \sqrt{1 - \frac{r_{ij}}{r_c}}, & r_{ij} < r_c \\ 0, & r_{ij} \geq r_c \end{cases} \quad (11)$$

تکامل زمان ذرات DPD را می‌توان با استفاده از قانون نیوتن توصیف کرد، با توجه به معادلات ۲ و ۸ می‌توانیم بنویسیم:

$$\mathbf{F}_i = \mathbf{v}_i dt \quad (12)$$

$$d\mathbf{v}_i = \frac{1}{m}(\mathbf{F}_i^C dt + \mathbf{F}_i^D dt + \mathbf{F}_i^R \sqrt{dt} + \mathbf{F}_i^e dt) \quad (13)$$

$$\mathbf{F}_i^e = \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \frac{dv_x}{dy} \right] = \frac{\partial}{\partial y} \left[m \left(-\frac{dv_x}{dy} \right)^{n-1} \frac{dv_x}{dy} \right] \quad (14)$$

الگوریتم وارلت سرعت DPD، برای ادغام معادلات حرکت استفاده می‌شود (نیکون و همکاران ۲۰۰۳).

$$F_x = E_0 \rho_e \quad (2)$$

که در آن E_0 قدرت میدان الکتریکی، ρ_e چگالی خالص شارژ است. در حالت یک بعد معادله ی پواسون که رابطه پتانسیل الکتریکی سطح با چگالی شارژ خالص است، به صورت رابطه (۳) نوشته می‌شود:

$$\varepsilon \frac{d^2 \Psi}{dy^2} = -\rho_e \quad (3)$$

در آن Ψ پتانسیل الکتریکی و y فاصله از سطح شارژ شده است. فرض می‌کنیم، توزیع بولتزمن برای یون‌ها و پتانسیل زتای کوچک در نظر گرفته شده و پروفیل پتانسیل الکتریکی می‌توان از معادله خطی شده پواسون-بولتزمن (PBE) بدست آورد:

$$\frac{d^2 \Psi}{dy^2} = k^2 \Psi \quad (4)$$

در آن k معکوس طول دبی است (معادله ۱). اگر h برابر با نیمی از ارتفاع کانال باشد، نتیجه می‌شود:

$$\rho_e = -k^2 \varepsilon \Psi \quad (5)$$

۲-۲- روش عددی DPD

سیال DPD یا ذرات DPD به مولفه‌های درشت دانه مربوط می‌شود که مجموعه‌ای از مولکول‌ها یا گروه‌های مولکولی را بجای اتم‌های فردی نشان می‌دهند (چاترجی و همکاران ۲۰۰۸). دانه‌های درشت منجر به پتانسیل جفتی نرم می‌شوند که ذرات را باهم همپوشانی می‌کنند. با استفاده از DPD بجای MD می‌توانیم گام‌های زمانی بزرگتری را در نظر بگیریم، در نتیجه هزینه محاسباتی نسبت به روش MD کمتر است (ژاو و همکاران ۲۰۱۲). DPD (کارنیاداکیس و همکاران ۲۰۰۵) یک سیستم شامل ذرات را توصیف می‌کند که دارای حجم می‌باشند. موقعیت \mathbf{r}_i و سرعت‌های \mathbf{v}_i ، تداخل بین ذرات i و j ترکیبی از ذرات بقا، اضمحلالی و نیروهای تصادفی روی ذره i توسط ذره j اعمال می‌شود که با رابطه زیر مشخص می‌شود:

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i \quad (6)$$

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_{j \neq i} \mathbf{f}_{ij} + \mathbf{F}^e \quad (7)$$

در اینجا فرض می‌کنیم، جرم هر ذره واحد است. در (۷)، \mathbf{F}^e نیروی خارجی (نیروی الکترواستاتیک) است. $\sum_{j \neq i} \mathbf{f}_{ij}$

جدول ۱- پارامترهای شبیه سازی شده در جریان الکترواسموتیک با استفاده از روش دینامیک ذرات اتلافی

پارامتر	ε	μ_0	z	γ	$k_b T$	a_{wij}	a_{ij}	r_c
واحد	[C/Vm]	[Pa s]	-	[N/nm]	[N/K]	[N/nm]	[N/nm]	[nm]
بزرگی	7×10^{-10}	9×10^{-3}	1.0	4.5	1.0	5.0	18.75	1.0

۳-۱- جریان الکترواسموتیک در میکروکانال

شرایط شبیه سازی با در نظر گرفتن ۴۰۰۰ ذره شبیه ساز و سیال یونی شده در جدول ۱ آورده شده است. منظور از یونی نمودن سیال این است که مقداری ماده یونی (در این مقاله ماده KCL) اضافه نموده تا قابلیت رسانایی سیال بیشتر شود. اندیس ij مربوط به برخورد ذره i به ذره j و اندیس W مربوط به برخورد ذره سیال به دیواره است. در این تحقیق پارامترهای مهمی چون kh، قدرت میدان الکتریکی و پتانسیل زتا را به عنوان سه پارامتر اصلی بررسی شده و متاثر بر نرخ حجمی EOF می باشند. تغییرات این سه پارامتر در این مطالعه بدقت بررسی شده است. نتایج این تحقیق می تواند ملاحظات مهمی در طراحی و ساخت دستگاه های EOF با کارایی بالا ارائه دهد.

تاثیر سه پارامتر ذکر شده بر میزان دبی جریان و یا عبارتی سرعت جریان خواهد بود و بهمین دلیل، پروفیل سرعت بررسی شده است. جهت بررسی سرعت جریان الکترواسموتیک مقایسه ای مابین دو نتیجه در دو حالت مختلف در شکل ۱ آورده شده است. با توجه به میدان ثابت ۵۰۰ ولت بر متر، پروفیل سرعت محوری برای دو پارامتر مختلف kh (معیاری جهت نشان دادن غلظت یونی با توجه به ثابت بودن ارتفاع کانال) برابر ۰/۸۲ و ۸/۲ و همچنین زتا پتانسیل ۲۵- میلی ولت نشان می دهد. همانطور که انتظار می رود، با افزایش قدرت میدان الکتریکی سرعت جریان نیز هم در نتایج عددی و هم در نتایج تصویری بیشتر می شود. به طور معمول انتظار می رود، زیرا قدرت میدان الکتریکی بالاتر باعث به وجود آمدن نیروی قوی تر روی هر ذره DPD در کانال می شود. توجه شود اثر تجزیه شیمیایی در نظر گرفته نشده است و در حالتی که سیال بسیار یونی شود امکان تجزیه شیمیایی وجود دارد، ولی در محدوده در نظر گرفته

بعد از استنتاج میدان سرعت، سرعت جریان حجمی Q را می توان به راحتی از آن محاسبه کرد (ژائو و همکاران).

$$Q = 2\bar{V}H \quad (15)$$

در این معادله می توان سرعت متوسط جریان \bar{V} را با محاسبه سرعت متوسط ذرات، طبق رابطه (۱۶) به دست آورد:

$$\bar{V} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V_{x_i} \quad (16)$$

۳-۲- زنجیره پلیمر

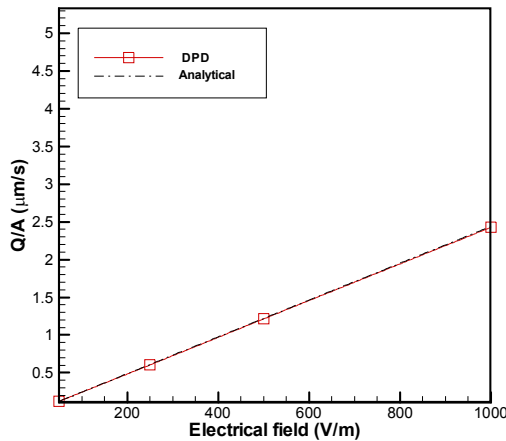
زنجیره پلیمر شامل تعدادی گوی است که توسط فنر به هم متصل شده است. در اثر برخورد ذرات سیال و یا ذرات گوی به یکدیگر سبب جابجایی ذرات گوی نسبت به هم می شوند و فنر عاملی جهت کنترل میزان الاستیسته زنجیره پلیمر می شود که توسط رابطه زیر به نیروی F_{ij}^c اضافه می شود که $k(r_{ij})_p$ ضریب سختی فنری است (ذاکری و همکاران: ۲۰۱۳):

$$F_{ij}^p = k(r_{ij})_p r_{ij} \quad (17)$$

۳- نتایج

در این بخش، به بررسی نتایج شبیه سازی DPD پرداخته شده است. در ابتدا نتایج در یک میکروکانال ساده بدون حضور پلیمر اعتبارسنجی شده است و رفتار سیال در حضور جریان الکترواسموتیک با در نظر گرفتن پارامترهای موثر بررسی شده است و در ادامه زنجیره پلیمر دوسر گیردار را در کانال قرار گذاشته شده و پارامترهای موثر بر میزان جابجایی پلیمر بررسی شده است.

میدان الکتریکی در شکل ۲ پرداخته شده است. همانطور که انتظار داشتیم، با افزایش میدان الکتریکی دبی جریان بصورت تقریبی خطی در حال افزایش است. علت این تغییر در بیشتر شدن میدان الکتریکی و تمایل سیال یونی شده در تعقیب خطوط الکتریکی در سیال است.

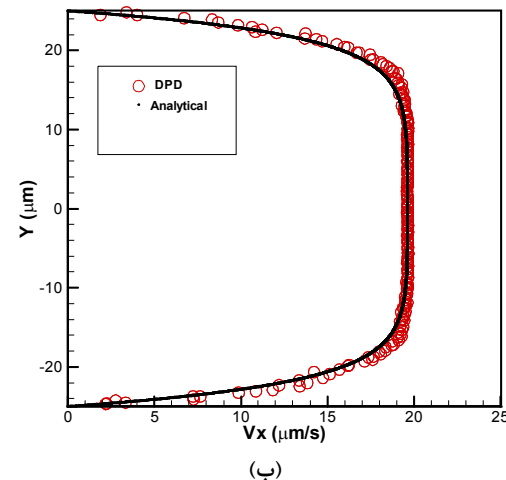
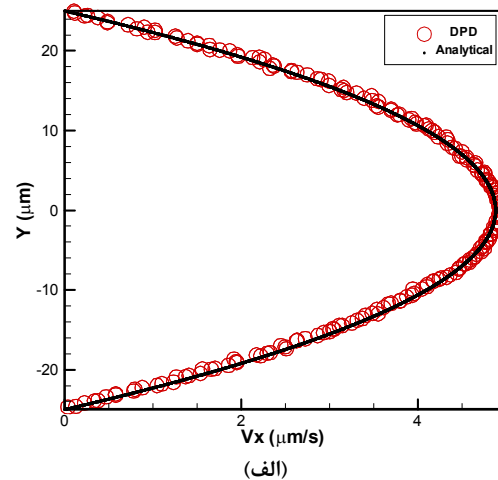


شکل ۲- تغییرات دبی جریان با تغییر میدان الکتریکی

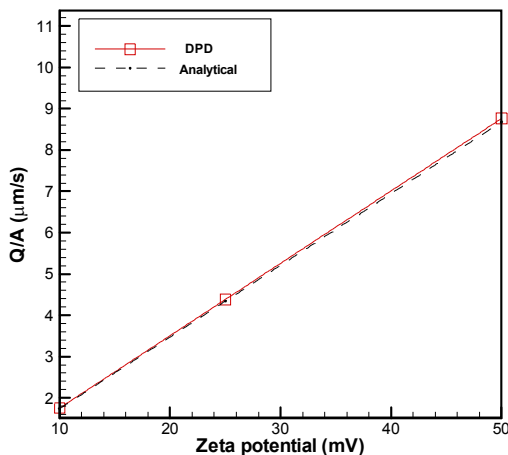
در شکل ۳ بررسی نتایج در حالتی که میکروپمپ برای زتا پتانسیل ۵۰- میلی ولت با در نظر گرفتن پارامتر kh برابر ۱۶ و ولتاژ اعمالی ۲۵۰ ولت در نظر گرفته شده است. همانطور که می‌دانیم، زتا پتانسیل متأثر از نوع ماده دیواره میکرو کانال است و با توجه به شکل هر چقدر زتا پتانسیل بیشتر باشد، مقدار جریان نیز افزایش می‌یابد. این بدین دلیل است که با افزایش زتا پتانسیل، لایه دوتایی یا لایه electric double layer قویتر شده و در برابر میدان الکتریکی سریعتر واکنش داده و جریان سرعت بالاتری می‌یابد. در ادامه، جهت بررسی بیشتر مقادیر دبی جریان در واحد سطح به تغییرات زتا پتانسیل در شکل ۴ نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می‌شود، با افزایش زتا پتانسیل دبی نیز افزایش می‌یابد.

در شکل ۵ تاثیر پارامتر kh نیز بررسی و اعتبارسنجی شده است. همانطور که مشاهده می‌شود، با افزایش kh پروفیل سرعت تمایل به تخت شدن نشان می‌دهد و مقدار سرعت جریان نیز زیاد خواهد شد. علاوه بر این، در شکل ۶ میزان دبی نسبت به پارامترهای مختلف kh نیز تغییر کرده و رفتاری

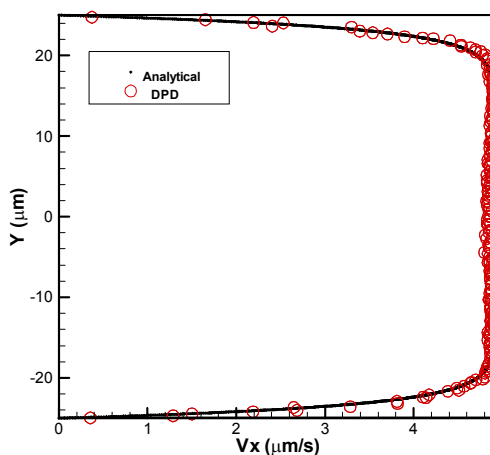
شده براساس مرجع (تیان و همکاران ۲۰۰۴) فرضیه جریان بدون تجزیه شیمیایی می‌توان در نظر گرفت. در ادامه شکل ۱ همانطور که مشاهده می‌شود، با افزایش پارامتر kh پروفیل سرعت تخت‌تر خواهد شد. علت این پدیده در این است که با افزایش پارامتر kh لایه الکتریکی دوتایی در طول کمتر ولی قویتر عمل نموده و حرکت جریان از همین لایه شروع خواهد شد. مابقی پروفیل بدلیل حرکت در لایه الکتریکی دوتایی حرکت نموده و پروفیل سرعت تختی را بوجود می‌آورد. در ادامه به بررسی تغییرات دبی حجمی جریان نسبت به سطح مقطع با در نظر گرفتن مقادیر مختلف



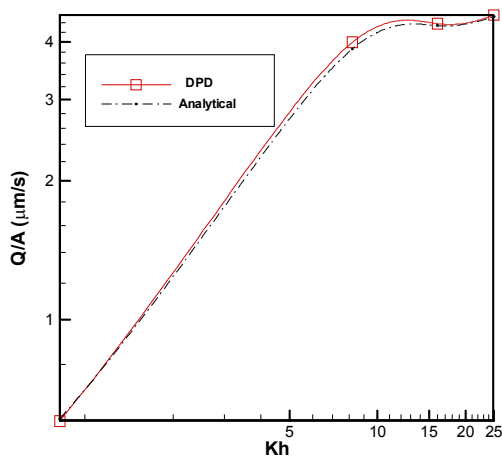
شکل ۱- پروفیل سرعت جریان الکترواسموتیک در میدان الکتریکی ۵۰۰ ولت بر متر در kh برابر ۰/۸۲ و ۸/۲ (الف و ب)



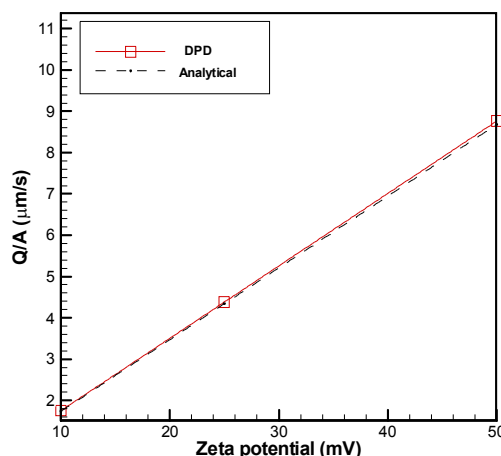
شکل ۵- پروفیل سرعت جریان الکترواسموتیک در پارامتر kh مختلف kh برابر $0/82$ (منحنی) و kh برابر ۲۵ (تخت)



شکل ۳- پروفیل سرعت جریان الکترواسموتیک در زتا پتانسیل ۵۰ میلی ولت در kh برابر ۱۶



شکل ۶- تغییرات دبی جریان با تغییر پارامتر



شکل ۴- تغییرات دبی جریان با تغییر زتا پتانسیل

تقسیم بر مقدار تحلیلی است. مورد ۱ استفاده از تمامی ثوابت اجرا در شکل ۱ به ازای kh برابر با $0/82$ و مورد ۲ به ازای kh برابر ۱۶ در شکل ۳ و مورد ۳ با توجه به شکل ۵ به ازای kh برابر ۲۵ است. باید توجه داشت که هزینه محاسباتی شامل، دو پارامتر است؛ پارامتر اول تعداد ذرات است که با افزایش تعداد ذرات محاسبات بشدت زیاد خواهند شد و روندی غیر خطی است. پارامتر دوم انتخاب kh پارامتر است که هر چقدر بیشتر شود، تعداد تکرار افزایش یافته و روند همگرایی کندتر است. اضافه شدن تعداد تکرار روندی خطی است. مابین تعداد ذرات شبیه ساز و خطای نتایج و زمان اجرا

غیرخطی را نتیجه می‌دهد. این نتیجه برخلاف تغییرات خطی ولتاژ و زتا پتانسیل است؛ چراکه تغییر یونی بودن سیال یا پارامتر ارتفاع تاثیر مستقیمی بر لایه دوتایی الکتریکی خواهد گذاشت. تمامی نتایج ارائه شده در شکل‌های ۱ تا ۶ با نتایج تحلیلی مقایسه و اعتبارسنجی شده است؛ همچنین اثر تعداد ذرات شبیه‌ساز در اجراهای مختلف و محاسبه خطا و زمان اجرا به ازای موردهای مختلف (در شکل ۱ تا ۶) در جدول ۲ آورده شده است. کامپیوتر مورد استفاده، سیستم معمول شخصی با مشخصات پردازش ۴ هسته‌ای، ۴ گیگ رم است. خطا شامل حاصل تفریق مقدار تحلیلی از مقدار عددی و

در ابتدا، برای یک زنجیره پلیمر شامل ۲۰ گوی و ثابت هارمونی ۵۰۰۰ نیوتون بر متر بطول اولیه ۸ میکرومتر در محل نصب ۴ و ۴- است. جریان الکترواسموتیک در میدان الکتریکی مختلف هر ۴ ثانیه تغییر جهت داده و متقابلاً جهت جریان سیال تغییر و جهت حرکت پلیمر نیز تغییر خواهد کرد. حرکت رفت و برگشتی پلیمر وابسته به جهت حرکت سیال است. در حالتی که سیال به سمت مشخصی حرکت می‌کند، نیروی برخورد ذرات سیال به پلیمر سبب حرکت گوی‌های پلیمر در راستای جریان شده و با عوض شدن جهت میدان و نهایتاً جهت سیال، این عمل در راستای عکس انجام می‌شود و عمل رفت و برگشتی نتیجه شده است. نتایج حرکت زنجیره پلیمر در شکل ۷ در یک سیکل کامل رفت و برگشتی آورده شده است. همانطور که نشان داده شده است، با افزایش میدان الکتریکی از ۵۰ ولت بر متر به ۱۵۰ ولت بر متر میزان جابجایی حدود دو برابر افزایش خواهد یافت. به عبارتی با افزایش نیروی الکترواسموتیک و تمایل سیال برای حرکت با سرعت بیشتر، ممنوم بیشتری به زنجیره پلیمر وارد خواهد شد و جابجایی بیشتری را نتیجه می‌دهد. در ادامه، در شکل ۸ نتیجه تغییر اندازه و جهت میدان الکتریکی در کل زمان حرکت رفت و برگشتی آورده شده است. همانطور که مشاهده می‌شود، در میدان قویتر، بدلیل افزایش نیروی الکترواسموتیک و نهایتاً سرعت بیشتر سیال و برخورد قویتر، حرکت گوی‌ها سریعتر شده و میزان جابجایی آنها نیز با ارتعاش بیشتری همراه است؛ همچنین، مقداری بیشتری تاخیر در تغییر جهت سیال خواهیم داشت که بدلیل تمایل سیال به حفظ وضعیت اولیه خود است؛ در حالی که تکانه بالاتری در میدان الکتریکی قویتر دارد و نوسانات بیشتری نتیجه خواهد شد.

چنین مطالعه‌ای برای تغییر زتا پتانسیل و kh پارامتر انجام شده است. تغییر زتا پتانسیل از ۲۵- به ۵۰- میلی ولت حدود ۱/۵ برابر ازدیاد و تغییر به ۷۵- میلی ولت حدود دو برابر در جابجایی زنجیره پلیمر تاثیر داشته و روند خطی خطی حاکم است؛ همچنین تغییر kh پارامتر از ۱ تا ۱۰ حدود ۴ برابر تغییر در جابجایی بصورت غیر خطی در بر دارد و با افزایش kh پارامتر تغییر خاصی مشاهده نشده است.

حالت بهینه متناسب با سیستم مورد استفاده باید در نظر گرفته شود. نتایج حاصل از جدول ۲، نشان دهنده این است که انتخاب ۴۰۰۰ ذره شبیه ساز برای این شبیه‌سازی با توجه به هزینه‌های محاسباتی و خطا مناسب است. روش حاضر، روشی مناسب برای شبیه‌سازی انواع میکروکانال در جریان الکترواسموتیک است و می‌توان در حالات مختلف خواص جریان را بدون نیاز به ساخت اولیه، طراحی و شبیه سازی کرد.

۳-۲- حرکت زنجیره پلیمر در میکروکانال

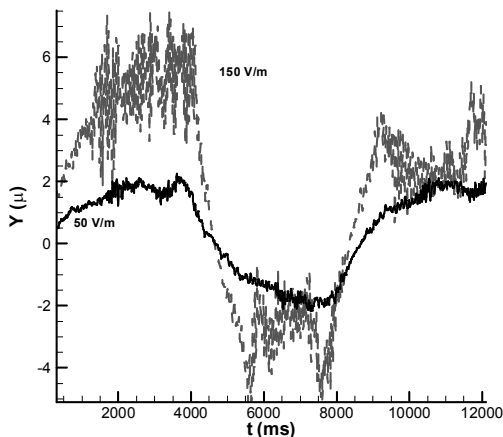
در ادامه، جهت توسعه نتایج یک زنجیره پلیمر دو سرگیردار درون کانال قرار داده و تحت تاثیر جریان الکترواسموتیک و حرکت سیال، متقابلاً زنجیره نیز حرکت خواهد نمود. جدول ۳ اطلاعات جریان سیال و مشخصات زنجیره پلیمر را در یک کانال ۲۰ در ۲۰ میکرومتر نشان می‌دهد. در این بخش نیز، همانند بخش ۳-۱ پارامترهایی بررسی می‌شود که در جابجایی زنجیره پلیمر موثر خواهند بود.

جدول ۲- مقایسه تعداد ذرات شبیه ساز و خطا

پارامتر	مورد	۱۰۰۰ ذره	۳۰۰۰ ذره	۴۰۰۰ ذره	۶۰۰۰ ذره
خطا (درصد)	۱	۸	۳	۱	۰/۵
زمان اجرا (ساعت)	۱	۰/۴۱	۳/۹۱	۷/۱۶	۲۱/۴۵
خطا (درصد)	۲	۱۲	۵	۲	۱
زمان اجرا (ساعت)	۲	۳/۲۹	۳۱/۳۴	۵۷/۳۴	۱۷۱/۶۴
خطا (درصد)	۳	۱۹	۶	۲	۱
زمان اجرا (ساعت)	۳	۸/۲۳	۷۸/۲۹	۱۴۳/۲۷	۴۲۹/۴۶

جدول ۳- ثوابت بکار رفته در شبیه سازی حرکت پلیمر دو سرگیردار

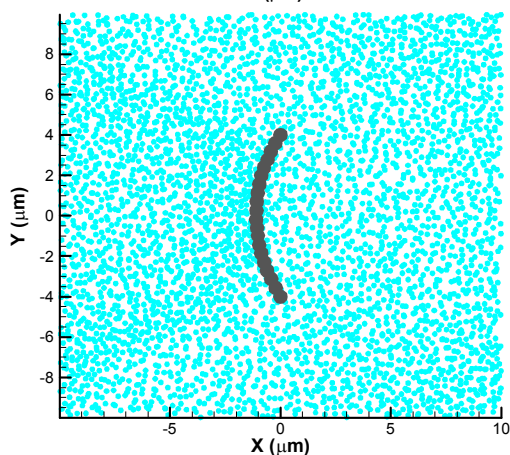
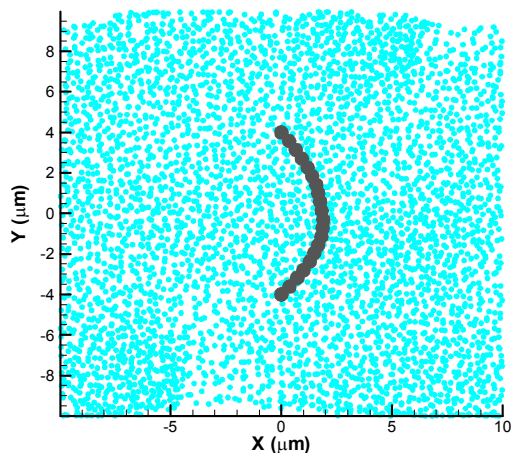
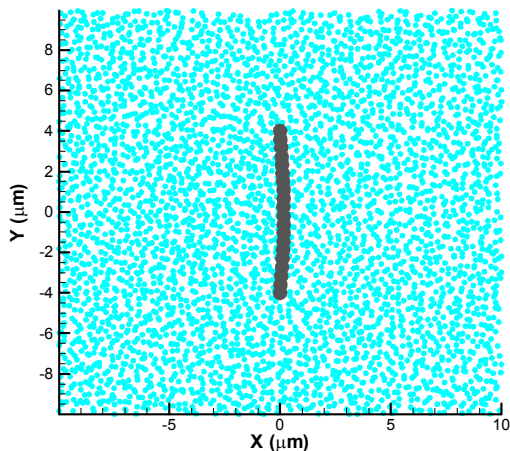
پارامتر	ثابت هارمونیک	تعداد گوی‌ها	a_{pp}	a_{pF}
اندازه	5000	20	75	10



شکل ۸- نمودار جابجایی- تعداد گام زمانی برای زنجیره پلیمر در میدان الکتریکی مختلف ۵۰ و ۱۵۰ ولت بر متر

یکی از پارامترهای مهم در زنجیره پلیمر، تعداد گوی‌ها است؛ بنابراین دلیل در شکل ۹، تعداد گوی‌ها از ۲۰ به ۴۰ عدد افزوده شده است؛ همچنین، میدان الکتریکی ۱۰۰ ولت بر متر در نظر گرفته شده و تغییرات حرکت رفت و برگشتی در یک سیکل کامل مورد بررسی قرار گرفته است. با افزایش تعداد گوی‌ها، ذرات سیال شانس کمتری برای حرکت از میان گوی‌های پلیمر خواهند داشت و ذرات بیشتری به زنجیره ممنوم وارد نموده و نتیجتاً جابجایی بیشتری نسبت به زنجیره با پلیمر کمتر، خواهیم داشت؛ همچنین بدلیل کاهش ذرات در جلوی زنجیره پلیمر و شرط مرزی برای خروج ذرات، حضور ذرات در خارج از پلیمر یکنواخت‌تر نسبت به حضور ذرات در زنجیره پلیمر است. در شکل ۱۰ مقایسه‌ای مابین روند حرکت زنجیره پلیمر در یک سیکل کامل رفت و برگشتی در دو حالت ۴۰ و ۲۰ گوی انجام شده است. همانطور که مشاهده می‌شود، در حالت ۴۰ گوی جابجایی بیشتر و کنترل ضعیف‌تر بدلیل انتقال ممنوم بالاتر به زنجیره و تمایل سیال به حفظ حالت خود است. حدود ۳ برابر افزایش جابجایی نتیجه شده است. در جدول ۴ نتایج به ازای مقادیر مختلف تعداد گوی‌های زنجیره آورده شده است.

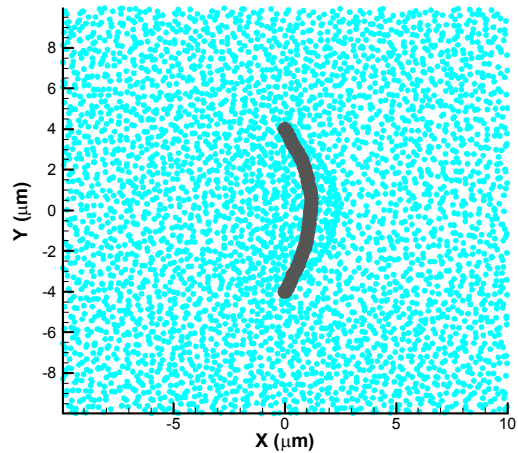
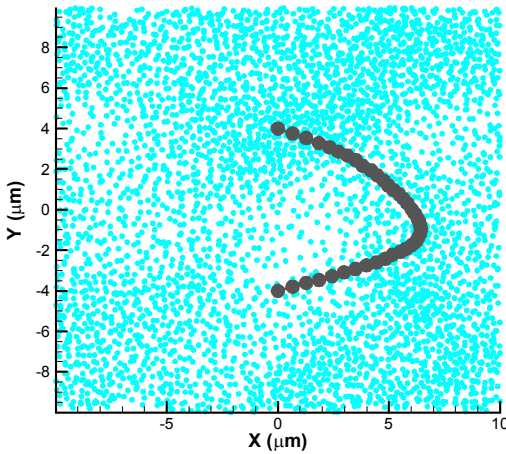
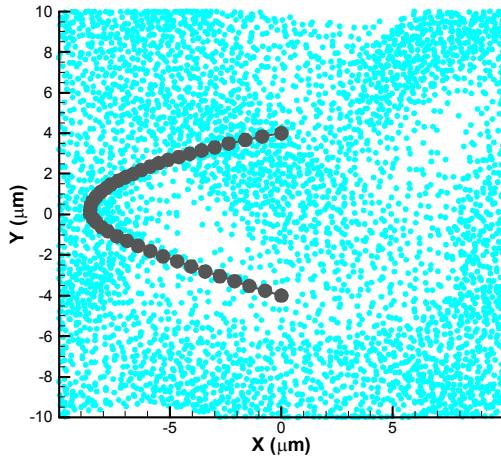
یکی دیگر از پارامترهای موثر در جابجایی، موقعیت نصب دوسر گیردار است. در شکل ۱۱ موقعیت نصب از ۴ و -۴ به ۹/۵ و -۹/۵ تغییر پیدا نموده است. همانطور که مشاهده



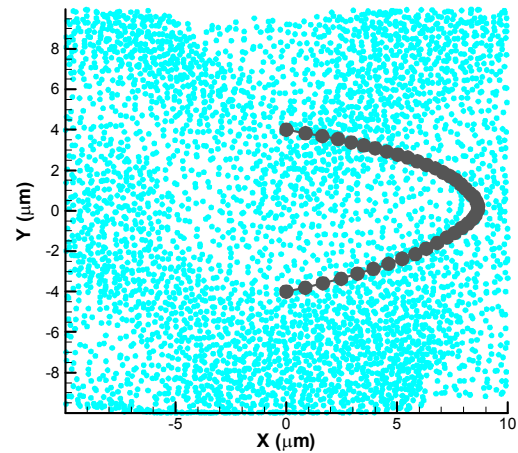
شکل ۷- سیکل کامل رفت و برگشتی جابجایی و تغییر جهت زنجیره پلیمر در هر ۴ ثانیه در میدان الکتریکی ۵۰ ولت بر متر با تعداد ۲۰ گوی

جدول ۴- جابجایی زنجیره پلیمر به ازای افزایش تعداد گوی‌ها

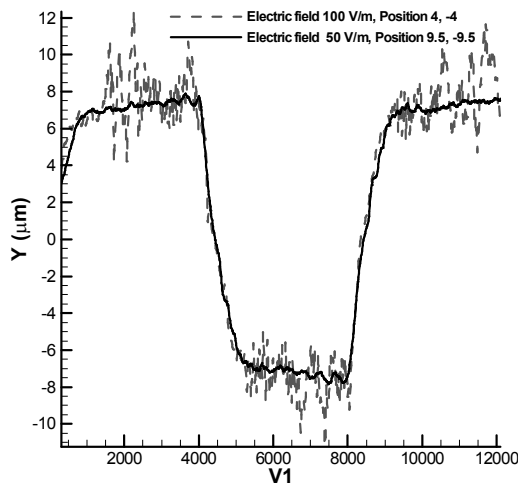
جابجایی	تعداد گوی‌ها
۱/۸۶	۱۰
۳/۱۱	۲۰
۵/۷۹	۳۰
۸/۳۲	۴۰
۱۱/۸۲	۵۰
۱۶/۷۳	۶۰



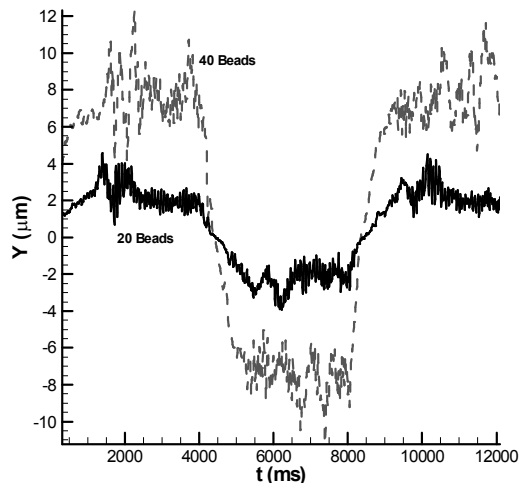
شکل ۹- سیکل کامل رفت و برگشتی جابجایی و تغییر جهت زنجیره پلیمر در هر ۴ ثانیه در میدان ۱۰۰ ولت بر متر با تعداد ۴۰ گوی



می‌شود، جابجایی بیشتری نتیجه شده است؛ زیرا ممنوم بیشتری به گوی‌ها وارد می‌شود. در شکل ۱۲ میزان جابجایی و نحوه رفتار زنجیره با تغییر جهت جریان نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می‌شود، در این حالت تغییر جهت جریان با نرمی بیشتر انجام شده و با میدان الکتریکی نصف همان مقدار جابجایی را نتیجه می‌دهد؛ چراکه ذرات بیشتر برخورد نموده و ممنوم بالاتری را منتقل می‌کند. به وضوح روشن است که با افزایش میدان الکتریکی نه تنها میزان جابجایی بیشتر شده بلکه امکان کنترل جهت جریان وجود دارد. سایر پارامترهای موثر شامل پارامترهای

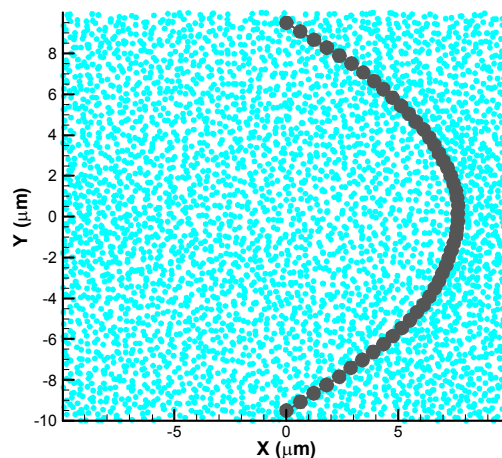


شکل ۱۲- نمودار جابجایی - تعداد گام زمانی برای زنجیره پلیمر در موقعیت نصب مختلف در میدان الکتریکی ۵۰ ولت بر متر



شکل ۱۰- نمودار جابجایی - تعداد گام زمانی برای زنجیره پلیمر در تعداد گوی مختلف ۲۰ و ۴۰ در میدان الکتریکی ۱۰۰ ولت بر متر

اتلافی پرداخته شد. پارامترهای بی‌بعد در جریان خالص الکترواسموتیک پارامتر kh است و در جریان الکترواسموتیک به‌همراه پلیمر دو سرگیردار بغیر از kh شامل، تعداد ذرات پلیمر است. در حالت اول نشان داده شده که با افزایش پارامتر kh از ۰/۸۲ تا ۲۵ میزان سرعت حدود ۵ برابر بیشتر و شکل پروفیل تخت خواهد شد و روندی غیر خطی حاکم است (شکل ۶). در حالت دوم نشان داده شد که افزایش تعداد ذرات از ۲۰ به ۴۰ جابجایی حدود سه برابر را نتیجه می‌دهد (جدول ۴). در ادامه، پارامترهای متاثر در کانال ساده بدون حضور پلیمر همانند تأثیر ولتاژ، زتا پتانسیل و پارامتر kh بررسی و اعتبارسنجی شد. نتایج نشان دادند که اثر افزایش ولتاژ یا زتا پتانسیل بصورتی خطی بر دبی جریان است؛ در حالی که اثر تغییر غلظت یا عرض کانال (پارامتر kh) غیرخطی است (شکل ۲ و ۴). تمامی نتایج با نتایج تحلیلی مقایسه و دقت مناسب نتیجه شده است؛ همچنین حضور پلیمر علاوه بر تعداد گوی‌ها که اشاره شد، میزان جابجایی متاثر از پارامترهای الکترواسموتیکی و همچنین پارامترهای پلیمری است. در حالت اول با افزایش میدان یا زتا پتانسیل افزایش تقریبی خطی در زنجیره پلیمر بوجود می‌آید و با افزایش پارامتر kh افزایش غیر خطی نتیجه می‌شود (بخش ۳-۲). حدود دو برابر افزایش در جابجایی با افزایش



شکل ۱۱- جابجایی زنجیره پلیمر در موقعیت نصب ۹/۵ و ۹/۵ در میدان ۵۰ ولت بر متر با تعداد ۴۰ گوی

جریان الکترواسموتیک همانند زتا پتانسیل، اثر kh پارامتر و یا پارامترهای پلیمری همانند تعداد گوی‌ها و موقعیت نصب نیز می‌تواند موثر باشد.

۴- جمع بندی

در این بررسی، به شبیه‌سازی یک پلیمر دو سرگیردار در میکروکانال در جریان الکترواسموتیک بروش دینامیک ذرات

- [15] Gao M, Gui L (2014) A handy liquid metal based electroosmotic flow pump. *J Lab Chip* 14: 1866-1872.
- [16] Bonome EL, Cecconi F, Chinappi M (2017) Electroosmotic flow through an hemolysin nanopore. *J MicrofluidNanofluidics* 21: 96.
- [17] Dasgupta PK, Liu S (1994) Electroosmosis: A reliable fluid propulsion system for flow injection analysis. *J Anal Chem* 66:1792-1798.
- [18] Kirby BJ, Shepodd TJ, Hasselbrink F (2002) Voltage-addressable on/offmicrovalves for high-pressure microchip separations. *J Chromatogr A* 979: 147-154.
- [19] Patel KD, Bartsch MS, McCrink MH (2008) Electro kinetic pumping of liquid propellants for small satellite microthrusterapplications. *J Sensors Actuators B* 132: 461-470.
- [20] Piyasena ME, Newbya R, Millera TJ, Shapiro B, Smelaa E (2009) Electroosmotically driven microfluidic actuators. *Sens Actuators B: Chem* 141(1).
- [21] Duong-Hong D, Wang J-S, Liu GR (2008) Dissipative particledynamics simulations of electroosmotic flow in nano-fluidic devices. *J MicrofluidNanofluidics* 4: 219-225.
- [22] Bianchi F, Ferrigno R, Girault HH (2000) Finite element simulation of anelectroosmotic-driven flow division at a T-junction of micro scaled imensions. *J Anal Chem* 72: 1987-1993.
- [23] Gao Y, Wong TN, Chai JC (2005) Numerical simulation of two-fluidelectroosmotic flow in microchannels. *J Int J Heat Mass Transf* 48: 5103-5111.
- [24] Shamloo A, Madadelahi M, Abdorahimzadeh S (2017) Three-dimensional numerical simulation of a novel electroosmotic micromixer. *J Chem Eng Process Intensif* 119: 25-33.
- [25] Zimmerman WB, Rees JM, Craven TJ (2006) Rheometry of non-newtonian electrokinetic flow in a microchannel T-junction. *J Microfluid Nanofluidics* 2: 481-492.
- [26] Tessier F, Slater G (2005) Control and quenching of electroosmoticflowwith end-grafted polymer chains. *J Macromolecules* 38: 6752-6754.
- [27] Hoogerbrugge PJ, Koelman JMVA (1992) Simulating microscopic hydrodynamic phenomena with dissipative particle dynamics. *J Europhys Lett* 19: 155-160.
- [28] Steiner T, Cupelli C, Zengerle R (2009) Simulation of advanced microfluidic systems with dissipative particle dynamics. *J Microfluid Nanofluidics* 7: 307-323.
- [29] Groot RD, Warren PB (1997) Dissipative particle dynamics: bridging the gap between atomistic and mesoscopic simulation. *J Chem Phys* 107: 4423-4435.
- [30] Duong-Hong D, Phan-Thien N, Fan X (2004) An implementation of noslipboundary conditions in DPD. *J Comput Mech* 35: 24-29.
- میدان از ۵۰ به ۱۵۰ ولت برمتر، ۱/۵ برابر جابجایی با افزایش زتا پتانسیل از ۲۵- میلی ولت به ۵۰- میلی ولت و بازای جابجایی یکسان در نصب زنجیره بطول ۸ و همچنین ۱۹، میدان نصف برای حالت طول بیشتر نتیجه شد.

۵ مراجع

- [1] Laser DJ, Santiago JG (2004) A review of micropumps. *J Micromech Microeng* 14: 6.
- [2] Buguin A, Li MH, Silberzan P, Ladoux B, Keller P (2006) Micro-actuators: when artificial muscles made of nematic liquid crystal elastomers meet soft lithography. *J Am Chem Soc* 128: 1088-1089.
- [3] Hilber W (2016) Stimulus-active polymer actuators for next-generation microfluidic devices. *J Apply Phys* 122: 751.
- [4] Bruin GJM (2000) Recent developments in electrokinetically driven analysis on microfabricated devices. *J Electrophoresis* 21: 3931-3951.
- [5] Ilievski F, Mazzeo AD, Shepherd RF, Chen X, Whitesides GM (2011) Soft robotics for chemists. *J Angew Chem Int Ed* 50: 1890-1895.
- [6] Karniadakis G, Beskok A, Aluru N (2005) Microflows and nanoflows fundamentals and simulation. Textbook, Springer, New York.
- [7] Tseng S, Tai Y-H, Hsu J-P (2013) Electrokinetic flow in a pH-regulated,cylindrical nanochannel containing multiple ionic species. *J Microfluid Nanofluidics* 15: 847-857.
- [8] Marconi UMB, Monteferrante M, Melchionna S (2014) Electro-osmoticflow in coated nanocapillaries: A theoretical investigation. *Phys Chem* 16: 25473-25482.
- [9] De S, Bhattacharyya S, Hardt S (2015) Electroosmotic flow in a slit nanochannel with super hydrophobic walls. *J MicrofluidNanofluidics* 19: 1465-1476.
- [10] Sadeghi M, Saidi MH, Sadeghi A (2017) Electroosmotic flow and ionic conductance in a pH-regulated rectangular nanochannel. *J Phys Fluids* 29: 62002.
- [11] Wang M, Kang Q (2009) Electrokinetic Transport in Microchannels with Random Roughness. *J Anal Chem* 81: 2953-2961.
- [12] Wang X, Cheng C, Wang S (2009) Electroosmotic pumps and their applications in microfluidic systems. *J Microfluid Nanofluidics* 6: 145-162.
- [13] Cao Z, Yuan L, Liu Y-F, (2012) Microchannel plate electro-osmotic pump. *J Microfluid Nanofluidics* 13: 279-288.
- [14] Gao M, Gui L (2016) Electroosmotic flow pump by and advances in micro fluidics–new applications in biology, energy, and materials sciences.

- dissipative particle dynamics simulations. *J Mol Simul* 38(12): 961-969.
- [34] Mukhopadhyay S, Abraham J (2009) A particle-based multiscale model for submicron fluid flows. *J Phys Fluids* 21: 027102.
- [35] Nikunen P, Karttunen M, Vattulainen I (2003) How would you integrate the equations of motion in dissipative particle dynamics simulations? *J Comput Phys Commun* 153: 407-423.
- [36] Tian F, Li B, Kwok Y (2004) Lattice Boltzmann simulation of electroosmotic flows in micro- and nanochannels. In: *Proceedings of International Conference on MEMS, NANO and Smart Systems (ICMENS)*. Alberta, Canada, pp 294–299.
- [31] Zakeri R, Lee ES (2014) Simulation of nano polymer chain sensor in electroosmotic flow using dissipative particle dynamics (DPD) method. ASME, International Mechanical Engineering Congress and Exposition, Montreal, Quebec, Canada.
- [32] Chatterjee A, Wu L (2008) Predicting rheology of suspensions of spherical and non-spherical particles using dissipative particle dynamics (DPD): methodology and experimental validation. *J Mol Simul* 34(3): 243-250.
- [33] Zhou Y, Long X, Zeng Q (2012) Effect of the angular potential on the temperature control in