



گروه سيالات

مدلسازی جریان برشی سیال مگنتورئولوژیکال با استفاده از روش دینامیک ذره استهلاکی

آرش جعفرى غريبوند

دانشجو:

اساتيد راهنما:

دكتر محمود نوروزى

دكتر محمد محسن شاهمردان

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

بهمن ۱۳۹۴

شمارہ: تاریخ:	بسمه تعالى	PD Martin	
ويرايش:		مديريت تحصيلات تكميلي	

فرم شماره ۶: صور تجلسه دفاع از پایان نامه تحصیلی دوره کار شناسی ار شد

با تأییدات خداوند متعال و با استعانت از حضرت ولی عصر (عج) ارزیابی جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد آقای **آرش جعفری غریبوند** به شماره دانشجویی۹۲۰۴۳۷۴ رشته مکانیک گرایش تبدیل انرژی تحت عنوان مدل سازی جریان برشی سیال مگنتورئولوژیکال با استفاده از روش دینامیک ذره استهلاکی که در تاریخ ۱۳۹۴/۱۱/۱۷ با حضور هیأت محترم داوران در دانشگاه صنعتی شاهرود برگزار گردید به شرح ذیل اعلام می گردد:

مردود 🗌	دفاع مجدد 🗌	19,0	ول (با درجه : مالحی _ امتیاز	قبو
	ب (۱۸/۹۹ ـ ۱۸) , (۱۴ ـ ۱۵/۹۹)	۲_ بسیار خود ۴_ قابل قبول	۱_ عالی (۲۰ _ ۱۹) ۳_ خوب (۱۷/۹۹ _۱۶)	

۵- نمره کمتر از ۱۴ غیر قابل قبول

	امضاء	مرتبهٔ علمی	نام ونام خانوادگی	عضو هيأت داوران
	T	استادیار	دکتر محمود نوروزی	۱_ استادراهنمای اول
2	011,02	دانشيار	دکتر محمدمحسن شاهمردان	۲- استادراهنمای دوم
				۳- استاد مشاور
		دانشيار	دکتر محسن نظری	۴- نماینده شورای تحصیلات تکمیلی
	tot	استاد	دکتر محمدحسن کیهانی	۵- استاد ممتحن اول
	and I	استادیار	دکتر علی خالقی	۶- استاد ممتحن دوم

رئیس دانشکده: ٨

... تقدیم به خانواده غریزم

که در تام مراحل زندگی مثوق ویاور من بوده اند. . .

بالشكر از اسانيد بزركوارم بالشكر از اسانيد بزركوارم

که در تامی این سالها مرا از نعمت دانش برخور دار کردند.

٥

تعهد نامه

اینجانب **آرش جعفری غریبوند** دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته **تبدیل انرژی** دانشکده مهندسی مکانیک

دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه مدلسازی جریان برشی سیال مگنتورئولوژیکال با استفاده از روش

دینامیک ذره استهلاکی تحت راهنمائی **دکتر محمود نوروزی و دکتر محمدمحسن شاهمردان** متعهد می شوم.

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
 - در استفاده از نتایج پژوهشهای محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدر ک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است.
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه شاهرود می باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه صنعتی شاهرود » و یا « Shahrood University of Technology» به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایح اصلی پایان نامه تأثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می گردد.
 - در کلیه مراحل انجام این پایان نامه ، در مواردی که از موجود زنده (یا بافتهای آنها) استفاده شده است ضوابط و اصول
 اخلاقی رعایت شده است.
 - در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری ، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است

تاريخ

امضای دانشجو

مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه های رایانه ای، نرم افزار ها و تجهیزات ساخته شده است) متعلق به دانشگاه شاهرود می باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
 - * متن این صفحه نیز باید در ابتدای نسخه های تکثیر شده پایان نامه وجود داشته باشد .

چکیدہ:

سیال مگنتورئولوژیکال ^۱ (MR) مادهای هوشمند است که از توزیع ذرات جامد و مغناطیس پذیر در یک حلال پایه ساخته شده است. این سیال به دلیل داشتن تنش تسلیم و لزجت قابل کنترل بهوسیله میدان مغناطیسی خارجی، کاربردهای فراوانی یافته است. با توجه به کاربردهای روزافزون نظیر میراگرها، کلاچها، تجهیزات پزشکی و ... محققان زیادی تمرکز پژوهشهای خود را بر روی این سیال قراردادهاند تا سیالی کارآمدتر و کاربردهایی بیشتر ارائه دهند. حجم زیادی از این تحقیقات را کارهای آزمایشگاهی تشکیل میدهد. اما هزینهبر بودن ساخت سیالات و آزمونهای آزمایشگاهی از مشکلات این پژوهشها میباشد. از سویی دیگر مدلهای تحلیلی نتایج کامل و جامعی را در اختیار قرار نمی -دهند. همچنین دو روش آزمایشگاهی و تحلیلی جزئیاتی از ساختار ایجاد شده در سیال ارائه نمی-دهند. درحالی که اطلاعات ساختاری میتواند کمک شایانی به شناخت ما از این مواد کرده و در طراحی بهینهتر آنها مفید واقع شود.

روشهایی که بر مبنای ذرات تشکیل دهنده ماده هستند می توانند اطلاعات ساختاری خوبی در اختیار ما قرار دهند. یکی از این روشها دینامیک ذره استهلاکی^۲ (DPD) است، که با برقراری نیرو-های بین ذره ای یک سیال را مدل سازی می کند. این روش که حاصل در شت دانه کردن محیط حل در مقایسه با دینامیک مولکولی است، در گروه روش های مقیاس مزو قرار می گیرد. از کاربردهای آن می-توان در زمینه پلیمرها، سیالات چند فازی، بایو و سوسپانسیون ها نام برد.

در این پژوهش با استفاده از روش دینامیک ذره استهلاکی به بررسی رفتار سیال مگنتورئولوژیکال پرداخته شده است. برای مدلسازی سیال پایه از نیروهای حاکم بر روش DPD و برای مدلسازی ذرات مغناطیسی از مدل مغناطش ذره^۳ استفاده شده است، همچنین برای ارتباط بین ذرات جامد و مایع

¹ Magnetorhological Fluid

² Dissipative Particle Dynamics

³ Particle magnetization model

پتانسیل لنارد-جونز^۱ به کار رفته است. این سیال مرکب با استفاده از شرط مرزی لیـز -ادواردز^۲ تحت جریان برشی ساده قرار گرفته و برای اولین بار پروفیل سرعت در حالت انتقال از جامد بـه مـایع ارائـه شده است. به دست آوردن خواص سیال یکی دیگر از ویژگیهای این روش است که با محاسبه تانسور تنش برای سیال مگنتورئولوژیکال محقق شده است. تأثیر کسر حجمی ذرات مغناطیسی و مغناطیس-پذیری آنها بر خواص سیال به دست آمده است که افزایش هر دو ایـن پارامترها با افـزایش لزجـت سیال همراه میشود. همچنین تاثیر افزایش لزجت سیال پایه بر روی خواص این سیال مـورد مطالعـه قرار گرفته است. این در حالی است که در بسیاری از روشهای عددی خواص این سیال مـورد مطالعـه پوازیه پریودیک^۲ تحت جریان پوازیه نیز مدلسازی شده است. همچنین با ترکیب شرایط مرزی جریان ساده و پوازیه سیال MR در حالت ترکیبی¹ نیز بررسی گردیده. نتایج همه این مدلسازیها مطابق مشاهدات صورت گرفته از این سیال در تحقیقات پیشین میباشد.

كليدواژهها: سيال مگنتورئولوژيكال، ديناميک ذره استهلاكی، روش درشتدانه، پلاستيک بينگهام، رقيق شونده برشی.

¹Lennard-Jones

² Lees-Edwards

³ Periodic Poiseuille Flow

⁴ Mixed-mode

مقالات مستخرج از پایاننامه:

۱		ل:	فصل او
۱			مقدمه .
۲	گفتار	پيش	1-1
۲	لات هوشمند	سيا	۲-۱
۳	کرد سیال MR	عمل	۳-۱
٣	منابع ميدان مغناطيسي	-۳-	١
۴	رفتار مواد مغناطیسی	۲-۳-	١
۶	ساختار سيال MR	۳-۳-	١
۷	ردهای سیال MR	كارب	4-1
۹	ينه پژوهش در زمينه سيال MR	پيش	۵–۱
٩	پژوهشهای آزمایشگاهی	۱-۵-	١
۱۱.	پژوهشهای تحلیلی	۲-۵-	١
۱۳.	پژوهشهای عددی	۳-۵-	١
١۶.	فی دینامیک ذرہ استھلاکی(DPD)	معر	۶-۱
۱۷.	کاربردهای روش دینامیک ذره استهلاکی (DPD)	۱-۶-	١
۲٣.	فى تحقيق حاضر	معرا	۷–۱
۲۵.		وم:	فصل دو
۲۵.	ک ذرہ استھلاکی (DPD)	يناميك	روش د

۲۶	ئفتار	پیشگ	1-1
٢۶	لات حاکم بر دینامیک ذره استهلاکی	معاد	۲-۲
۲۸	نيروهای ديناميک ذره استهلاکی	۱-۲-	٢
۳۱	قضيه نوسان-استهلاك:	۲-۲-	٢
۳۴	سازى ذرات مغناطيسى	مدل	۳-۲
۳۶	سازی برهمکنش بین ذرات مغناطیسی و ذرات DPD	مدل	4-1
۳۷	های یکپارچەسازی معادلات:	روش	۵-۲
۳۸	روش اویلر	۱-۵-	٢
۳۸	الگوريتم ورله	۲-۵-	٢
۳۹	الگوريتم سرعت-ورله	۳-۵-	٢
۳۹	الگوريتم سرعت-ورله اصلاح شده براي DPD	۴-۵-	٢
۴۱		وم:	فصل س
۴۱	ردی در دینامیک ذره استهلاک	ی کاربر	روشها
۴۲	ئفتار	ۑؽۺڴ	۲-۳
۴۲	ط اوليه	شرايو	۲-۳
۴۲	مكان اوليه	۱-۲-	٣
۴۳	سرعت اوليه	۲-۲-	٣
۴۴	شرط مرزی پریودیک	۳-۲-	٣
۴۷	شرط مرزی لیز ادواردز	4-7-	٣

49	شرط مرزی جریان پوازیه پریودیک	۵-۲-	-٣
۵۰	سبه خواص سیال	محاد	۳-۳
۵١	تعريف ميكروسكوپي تنش	۱-۳-	۳-
۵۳	روش برازش عددی	۲-۳-	-٣
۵۳	های کاهش زمان محاسباتی	روش	۴-۳
54	فاصله برش	1-4-	-٣
۵۵	روش شاخص سلول	7-4-	-٣
۵۷	روش فهرست همسایگی ورله	۳-۴-	-٣
۵۹		هارم:	فصل چہ
۵۹		بحث	نتايج و و
۶.	سازى	مدل	1-4
۶۱	ﺘﺮﮬﺎﻯ ﺷﺒﯿﻬﺴﺎﺯﻯ	پارام	۲-۴
۶۳	ت سنجی	صح	۳-۴
۶٣	سيال DPD	-۳-	-4
99	سيال مگنتورئولوژيکال در شرايط تعادلي	۲-۳-	-4
۶٨	ىل بە تعادل رسيدن سيال MR تحت ميدان	مراح	F -F
۷۴	ل MR تحت جریان برشی MR	سيال	۵-۴
۸۱	ِ مغناطیس پذیری فاز جامد بر لزجت سیال MR	تاثير	۶-۴
۸۲	لزجت سیال پایه بر سیال MR	تاثير	۷-۴

۴–۸ مدلسازی جریان پوازیه ۸۴
۴–۹ مدلسازی جریان ترکیبی ۸۷
فصل پنجم:
نتیجه گیری۹۱
۱-۵ پیشنهادات:

فهرست اشکال:

۴۳	شکل۳- ۱- ساختار شبکه مکعبی ساده [۳۹]
۴۴	شکل۳-۲- توزیع سرعت در حالت تعادلی [۳۹]
۴۵	شکل۳- ۳- شماتیک شرط مرزی پریودیک [۳۹]
۴۷	شکل۳- ۴- جریان برشی ساده [۳۹]
۴۹	شکل۳– ۵- شرط مرزی لیز –ادواردز [۳۹]
۵۰	شکل۳- ۶- شرط مرزی جریان پوازیه پریودیک [۷۹]
۵۵	شکل۳-۷- پتانسیل لنارد-جونز [۳۹]
۵۶	شکل۳- ۸- روش شاخص سلول برای بدست آوردن همسایگی ذرات [۳۹]
۵۷	شکل۳- ۹- روش لیست همسایگی ورله [۳۹]

۶۴	شکل۴- ۱- نمودار لزجت سیال پایه بر حسب نرخ برش
۶۵	شکل۴- ۲- نمودار سرعت برای سیال DPD تحت جریان برشے
99	شکل۴-۳- نمودار سرعت سیال DPD در جریان پوازیه
مازی در پـژوهش حاضـر (ب)	شکل۴-۴- سیال مغناطیسی تحت میدان خارجی(الف) شبیه
ی DPD (ت) شـبیهسـازی بـا	عکس از سیال مگنتورئولوژیکال [۸۴] (پ) شبیهسازی با استفاده از رون

ستفاده از روش مونت-کارلو (ث) شبیهسازی با روش دینامیک براونی (ج) شبیهسازی با استفاده	١
وش ديناميک استوکسی [۴۱]	ر
شکل۴- ۵- مراحل به تعادل رسیدن یک سیال MR با کسر حجمی ۱۹٫۶٪ (بر اساس واحد	
مانی)	ز
شکل۴- ۶- مراحل به تعادل رسیدن یک سیال MR با کسر حجمی ۳۳٫۲٪ (بر اساس واحد	
مانی)۳	ز
شکل۴-۷- پروفیل سرعت در نرخ برشی ۰٫۲ برای کسرهای حجمی متفاوت۵	
شکل۴– ۸- پروفیل سرعت سیال مگنتورئولوژیکال در کسر حجمی ۳۳٫۲٪ و نرخهای برشے	
يتفاوت۵	Q
شکل۴- ۹- نمودار نرخ برش برحسب X سیال مگنتورئولوژیکال با کسر حجمی ۳۳٫۲٪۶	
شکل۴- ۱۰- نمودار نرخ برش برحسب X سیال مگنتورئولوژیکال با کسر حجمی ۱۹٫۶٪ ۷	
شکل۴- ۱۱- مقایسه پروفیل نرخ برش برای دو کسر حجمی متفاوت	
شکل۴- ۱۲- نمودار لزجت بر اساس نرخ برش برای شش کسر حجمی متفاوت و سیال پایـ	
يوتنى٩	ن
شکل۴-۱۳- نمودار لزجت بر حسب کسر حجمی	
شکل۴-۴- نمودار اختلاف تنش نرمال اول بر حسب نرخ برش	
شکل۴– ۱۵- نمودار ویسکوزیته بر حسب نرخ برش برای سـه مـاده بـا گشـتاور مغناطیسے	
تفاوت	۵
شکل۴- ۱۶- نمودار لزجت سیال MR برای دو سیال پایه متفاوت در کسر حجمی ۱۹٫۶٪ ۳	
شکل۴- ۱۷- نمودار لزجت سیال MR برای دو سیال پایه متفاوت در کسر حجمی ۳۸٫۵٪۴	
شکل۴– ۱۸– میراگر مگنتورئولوژیکال در حالت جریان پوازیه	
شکل۴– ۱۹- پروفیل سرعت جریان پوازیه سیال مگنتورئولوژیکال با کسر حجمی ۱۹٫۶٪۶	



فهرست جداول:

جدول ۱–۱–انواع مواد مغناطيسي [۸۵]

جدول۴- ۱- متغیرهای نیروی برهمکنش ذارت جامد-جامد و جامد-مایع

فهرست علائم:

علائم لاتين	
پارامتر دافعه	a
قطر ذره (فاصله برش)	d _c
بردار یکه	e
نيروى پايستار	\mathbf{F}^{C}
نيروى اتلافى	\mathbf{F}^{D}
نیروی تصادفی	\mathbf{F}^{R}
نيروى مغناطيسي	$\mathbf{F}^{(m)}$
نیروی لایه پوششی	$\mathbf{F}^{(\mathbf{V})}$
نیروی کل وارد بر ذره	f
نیروی خارجی	f ^{ext}
نیروی داخلی (بین ذرمای)	f ^{int}
تابع توزيع	g
ثابت بولتزمن	k _B
گشتاور مغناطیسی	m
اندازه گشتاور مغناطیسی	m ₀
جرم ذره استهلاکی	m _d
جرم ذره مغناطیسی	m _m
فشار	р
مکان	r

تانسور تنش	S
دمای سیستم	Т
زمان	t
انرژی پتانسیل بین ذرات و میدان مغناطیسی	u ^(H)
انرژی پتانسیل بین ذرات مغناطیسی	u ^(m)
انرژی پتانسیل در اثر همپوشانی لایه پوششی	u ^(V)
سرعت	V
تابع وزن نیروی اتلافی	w ^D
تابع وزن نیروی تصادفی	W ^R

علائم يونانى	
ضریب نیروی اتلافی	γ
نرخ برش	Ϋ́
دلتای دیراک	δ
چگالی	ρ
شدت پتانسیل لنارد-جونز	ε
عدد تصادفی	ζ
لزجت	η
تابع توزيع گوسين	θ
تراکم پذیری	к
تراکم پذیری همدما	κ _T
شدت برهم کنش لایه پوشش و سایر ذرات	$\lambda_{ m v}$
چگالی عددی ذرات استهلاکی	ρ
ضریب نیروی تصادفی	σ
تنش تسليم	$ au_{y}$
كسرحجمي ذرات مغناطيسي	$\phi_{ m v}$

فصل اول:

مقدمه

۱–۱ پیشگفتار

برای شناخت بهتر سیالات هوشمند در ابتدا انواع آنها معرفی می شود. سپس عملکرد مواد مغناطیسی و سیالات مگنتورئلوژیکال (MR) تحت میدان مغناطیسی ارائه شده و بعد از آن کاربردهای این سیال و تحقیقات صورت گرفته در این زمینه ارئه می گردد.

در بخش دینامیک ذره استهلاکی (DPD) معرفی مختصری درباره این روش و صورت می-گیرد با قابلیتهای آن معرفی میشود. در نهایت هدف از این تحقیق، اهمیت و چگونگی آن بیان خواهد شد.

۲-۱ سیالات هوشمند

انسان امروز، با پیشرفت روزافزون تکنولوژی در همه زمینههای، به سمت تولید ابزار و تجهیزات هوشمند گام برمیدارد. این رشد و شکوفایی در کنار بالابردن رفاه و آسایش زندگی نیازمند مواد اولیه جدید و همچنین هوشمند است. دسته بزرگی از این مواد را سیالات هوشمند تشکیل میدهند که شامل سیالات فرو⁽، سیالات مگنتورئلوژیکال (MR) و سیالات الکترورئولوژیکال^۲ (ER) می شود.

سیالات فرو سوسپانسیونهایی کلوئیدی^۳ با ذرات مغناطیسی کوچکتر از ۱۰nm هستند که در یک سیال حامل مناسب مانند آب، نفت سفید، هیدروکربنها، اترها و... شناور میباشند. در حضور یک میدان مغناطیسی خارجی لزجت^۴ این سیالات افزایش پیدا میکند، لزجت با شدت موضعی میدان مغناطیسی متناسب است.

¹ Ferro fluids

² Electrorhological Fluids

³ Colloidal Suspensions

⁴ Viscosity

سیالات الکترورئولوژیکال و مگنتورئولوژیکال سوسپانسیونهای غیرکلوئیدی با ذراتی در مقیاس میکرون (۲µm-۱۰) هستند که بر خلاف سیالات فرو حرکت براونی^۱ در آنها دیده نمیشود. کشف این سیالات به دههی ۱۹۴۰ برمیگردد.

سیالات ER و MR به ترتیب به میدانهای الکتریکی و مغناطیسی با تغییر شدید در رفتار رئولوژیکی پاسخ میدهند. مهمترین ویژگی این سیالات تغییر فاز از حالت مایع به نیمه جامد است، که تنش تسلیم آنها به سرعت با اعمال میدان الکتریکی و یا مغناطیسی قابل کنترل است. این سیالات در حضور میدان رفتار ویسکوالاستیک^۲ از خود نشان میدهند در حالی که در غیاب آن عمدتا رفتاری نیوتنی دارند. هنگامی که میدان الکتریکی یا مغناطیسی خارجی اعمال میشود ذرات جامد دو قطبی شده و بمنظور کاهش سطح انرژی در جهت میدان خارجی قرار میگیرند و مجموعههایی زنجیروار با سطح انرژی پایین را تشکیل میدهند. از آنجایی که میدان اعمال شده عمود بر جهت جریان است، این زنجیرهها نیز عمود بر جریان واقع شده و مانع حرکت سیال میشوند. این فرایند باعث تغییر در مکانیکی مورد نیاز برای شکست این زنجیرهها با افزایش میدان خارجی، تا حالت اشباع، افزایش می-میانیکی مورد نیاز برای شکست این زنجیرهها با افزایش میدان خارجی، تا حالت اشباع، افزایش می-یابد. این کنترل پذیری خواص و سرعت بالای پاسخگویی سیالات MR و ER آنها را به موادی مالسب برای ارتباط بین سیستمهای مکانیکی و الکتریکی مبدل کرده است.

MR عملکرد سیال ۳-۱

1-۳-۱ منابع میدان مغناطیسی

سه نوع آهنربا وجود دارد که میتوانند دیگر قطعات آهنی یا فولادی را جذب کنند، این آهنرباها عبارتند از آهنربای دائمی، آهنربای موقتی و آهنربای الکتریکی. خاصیت مغناطیسی یک

¹ Brownian Motion

² Viscoelastic

آهنربای دائمی از حرکت و برهمکنش الکترونهای آن ناشی میشود و دارای وادارنـدگی^۱ مغناطیسی بالا است که باعث مانـدگاری خاصیت مغناطیسی آن بـرای مـدت طـولانی مـیگـردد. وادارنـدگی مغناطیسی را میتوان بصورت شدت میدان مغناطیسی لازم برای کاهش خاصیت مغناطیسی آن مـاده به صغر بعد از رسیدن آن ماده به حالت اشباع مغناطیسی، توصیف کرد [۱]. یـک آهـنربـای مـوقتی دارای وادارندگی مغناطیسی کم است که به راحتی قابل مغناطیس شدن میباشد اما میدان ایجاد شده توسط آنها بسیار کوچک است. این مواد به راحتی قابل مغناطیس شدن میباشد اما میدان ایجاد شده شوند. آهنرباهای الکتریکی را میتوان با پیچیدن حلقهای از سیم به دور یک هستهی آهن نرم تولیـد کرد. میدان مغناطیسی تنها در زمانی که جریان الکتریکی در داخل سیم پیچی وجود دارد ایجاد می-گردد. قدرت این نوع آهنرباها بوسیلهی گشتاور مغناطیسی^۲ بیان میشود، این گشتاور حاصل حرکت چرخشی الکترونها به دور هسته است. منبـع گشتاور الکترومغناطیسی بوسـیله خاصیت مکانیکی کوانتومی بیان میگردد. گشتاور مغناطیسی کل اتم، مجموع خالص گشتاورهای مغناطیسی هر کدام از الکترونها بطور مجزا میباشد .گشتاور مغناطیسی خالص ناشی از تمایل دوقطبیهای مغناطیسی در خالتوی با بیکدیگر جهت کاهش انرژی خالص میباشد.

1-۳-۱ رفتار مواد مغناطیسی

رفتار مواد مغناطیسی را می توان بصورت زیر طبقهبندی کرد:

- ۲- دیامغناطیس
 ۲- پارامغناطیس
- ۳- فرومغناطیس^۵

¹ Coercivity

² Magnetic moment

³ Diamagnetic

⁴ Paramagnetic

⁵ Ferromagnetic

۴- غیرفرمغناطیس
 ۵- فریمغناطیس

در جدول ۱ – ۱ خواص این مواد ارائه شده است. مغناطیس پذیری^۲ میزان مغناطیس شدن یک ماده در اثر اعمال میدان مغناطیسی میباشد. در دمای اتاق، مواد دیامغناطیس و پارامغناطیس، هیچکدام دارای پسماند مغناطیسی نیستند. پسماند یک خاصیت سیستم است که به هنگام اعمال نیرو به سیستم بلافاصله نسبت به آن واکنش نشان نمیدهد، در عوض بطور آهسته واکنش نشان می-دهد یا بطور کامل به حالت اصلی خود باز نمی گردد. مواد دیامغناطیس، مغناطیس شوندگی منفی بسیار کوچکی از خود نشان میدهند. این مواد از اتمهایی تشکیل میشوند که تقریباً گشتاور مغناطیسی خالص ندارند، نفوذپذیری مغناطیسی^۲ توانایی ماده در مغناطیس شدن در میدانهای مغناطیسی تقریباً ضعیف است. نفوذپذیری نسبی را میتوان نسبت نفوذپذیری مادهی مغناطیسی به مغناطیسی نود که تعریف کرد. از اینرو، نفوذپذیری نسبی در مواد دیامغناطیس در پاسخ به میدان مغناطیسی خارجی اندکی کمتر از صفر است. در مقابل، مواد پارامغناطیس با بینظمی در گشتاور مغناطیسی خارجی اندکی کمتر از صفر است. در مقابل، مواد پارامغناطیس با بینظمی در گشتاور مغناطیسی مناطیس قرد گری نامی می است. این مواد دارای نفوذپذیری ماده می مناطیسی اندکی

مواد فرومغناطیس موادی با نفوذپذیری مغناطیسی بالا هستند که میتوانند به مقدار زیاد مغناطیسی شوند و میتوانند گشتاور مغناطیسی دائمی را حفظ کنند. دوقطبیهای مغناطیسی اولیه داخل محدودهها همگی موازی یکدیگر قرار میگیرند، اما هنگامیکه محدودهها همگی بر خلاف جهت یکدیگر قرار میگیرند، به این ماده غیرفرومغناطیس گفته میشود. اگر محدودهی خالص یک سیستم مساوی صفر نباشد، به این ماده فریمغناطیس گفته میشود. فریمغناطیسها همه ویژگیهای

¹Anti-ferromagnetic

² Ferrimagnetic

³ Magnetic Susceptibility

⁴ Magnetic Permeability

رفتاری مواد فرومغناطیس را دارند اما در نظم مغناطیسی تفاوتهای زیادی با هم دارند.

نوع ماده مغناطیسی	رفتار مغناطیسی	مغناطيسپذيرى	مثالها
ديامغناطيس		کم و منفی	مس، نقره، طلا و آلومينا
پارامغناطیس		کم و مثبت	آلومینیوم، تیتانیوم و آلیاژهای مس
فرومغناطيس	↑ ↑	خیلی زیاد و مثبت، تابع میدان اعمالی، وابسته به میکروساختار	آهن، نيکل و کبالت
غيرفرومغناطيس		کم و مثبت	منگنز، کروم، اکسید منگنز و اکسید نیکل
فرىمغناطيس		زیاد و مثبت، تابع میدان اعمالی، وابسته به میکروساختار	فريتها

جدول ۱ - ۱ - انواع مواد مغناطیسی [۸۵]

MR ساختار سیال ۳-۳-۱

سیال MR از ذراتی دارای نفوذپذیری مغناطیسی در اندازه میکرونی که در یک سیال حامل پراکنـده

شدهاند تشکیل شده است. برای ساخت این سیال عموما از ذرات فرومغناطیس و فریمغناطیس در سیالات پایه ای مانند آب، روغنه ای صنعتی و سیالاتی خواه قطبی یا ناقطبی و . . . استفاده می شود، اما بیشتر محققین از ذرات آهن کربونایل در سیالات روغنی، مانند روغن سیلیکون [۲ – ۵]، روغن هیدرو کربن [۶]، روغن معدنی و روغن هیدرولیک استفاده کردهاند. پودر آهن بدلیل اشباع مغناطیسی هیدرو کربن [۶]، روغن معدنی و روغن هیدرولیک استفاده کردهاند. پودر آهن بدلیل اشباع مغناطیس از یک همیدرو کربن [۶]، روغن معدنی و روغن هیدرولیک استفاده کردهاند. پودر آهن بدلیل اشباع مغناطیسی معدرولیک استفاده کردهاند. پودر آهن بدلیل اشباع مغناطیسی ابالا متداول ترین ماده در ساخت سیال MR بشمار می ود. این ذرات در یک جهت مناسب از یک قطب تا قطب دیگر آهن با یک زنجیره ی بسیار قوی تشکیل می دهند [۷]. ابتدا در غیاب میدان مغناطیسی، ذرات آهن در فضای بین دو دیواره حرکتی بی قید دارند. اما در حضور میدان، این ذرات مغناطیسی، ذرات آهن در فضای بین دو دیواره حرکتی بی قید دارند. اما در حضور میدان، این ذرات مغناطیسی مغناطیسی، ذرات آهن در فضای بین دو دیواره حرکتی بی قید دارند. اما در حضور میدان، این ذرات در امتداد میدان مغناطیسی، خرات آهن در فضای بین دو دیواره حرکتی بی قید دارند. اما در حضور میدان، این ذرات من در امتداد میدان مغناطیسی اعمال شده مرتب می شوند [۸]. زنجیره های تش به در امتدان مغناطیسی اعمال شده مرتب می شوند [۸]. زنجیره مای در منای که تنش به در امتداد میدان مغناطیسی اعمال شده مرتب می شوند [۸]. زنجیره می گویند. بعد از آن جریان سیال در حضور میدان مغناطیسی همچنان ادامه دارد، که به این تنش تسلیم می گویند. بعد از آن جریان سیال در حضور میدان مغناطیسی همچنان ادامه دارد [۹].

MR کاربردهای سیال ۴-۱

بهدلیل ویژگیهای بیان شده، سیالات هوشمند، از جمله سیال MR، کاربردهای زیادی پیدا کردهاند. گستره این کاربردها از مهندسی مکانیک، خودروسازی و مهندسی عمران تا پزشکی را شامل می شود [۱۰]. سیال MR انتخاب مناسبی برای سیستمهای کنترل فعال ارتعاشات و انتقال گشتاور می باشد. کاربردهای معمول آن در کمک فنرها، ترمزها، کلاچها، شیرهای کنترل و میراگرهای ارتعاش زمین لرزه است [۱۱].

در زمینه دمپرها گردانی نژاد و همکاران [۱۲] در سال ۲۰۰۰ یک جاذب ضربهی قابل کنترل نیمهفعال حاوی سیال مگنتورئولوژیکال برای اتومبیلهای خارج از جاده و با قابلیت باربری بالا را مورد مطالعه قرار دادند، مطالعات تئوری و آزمایشگاهی بر روی این دمپر صورت گرفت. در سال ۲۰۰۳ گراوات^۱ [۱۳] کاربرد دمپر MR بر روی چرخ جلوی موتورسیکلتها را مورد بررسی قرار داد. در همین سال گردانینژاد و همکاران [۱۴] یک ضربهگیر قابل کنترل نیمهفعال حاوی سیال مگنتورئولوژیکال برای سیستم تعلیق چرخ عقب یک موتورسیکلت خارج از جاده را بصورت تئوری و آزمایشگاهی مورد بررسی قرار دادند. همچنین در سال ۲۰۰۸ احمدخانلو [۱۵] یک میراگر MR برای سیستمهای تله-رباتیک طراحی و مدلسازی نمود. هدف این پژوهش توسعهی نسل بعدی سیستمهای بازخورد نیرو، بوسیلهی ترکیب سیستمهای مگنتورئولوژیکال جدید با تحلیل میکروساختاری و طراحی سیستمهای کنترل پیشرفته است. در سال ۲۰۰۹ لینگ^۲ و همکاران یک میراگر مگنتورئولوژیکال برای وسایل نقلیه ریلی طراحی کردند.

استفاده از میراگرهای MR در خودروهای مدرن را میتوان تجاریترین کاربرد این سیستمها دانست. شرکت لُرد^۳ بزرگترین تولید کننده این سیستمها، از سال ۲۰۰۲ با نام تجاری دلفی مگن راید^۴ اقدام به نسب سیستم تعلیق مگنتورئولوژیکال بر روی خودروها کرده است، که میتوان از کارخانههای خودروسازی کادیلاک^۵، شورولت⁴، آئودی^۷ و فراری^۸ بعنوان مشتریان این شرکت نام برد. همچنین شرکت لُرد از سیال MR برای ساخت سیستم تعلیق ماشینهای سنگین، ترمزهای دیسکی با امکان تغییر نیروی ترمزی کارجانه ای در این شرکت نام برد. با امکان تغییر نیروی ترمزی، کلاچهایی با قابلیت کنترل نیروی انتقالی و همینطور دمپرهای غول آسا برای مقابله با زمین لرزه در سازههای بزرگ نام برد [۱۶].

سیال MR کاربردهای دیگری در زمینههای مهندسی بایو، مهندسی پزشکی، انتقال انرژی حرارتی، صیقل دادن نوری، انتشار صوت، جابجایی مغناطیسی همدما و ... دارد [۱۱].

- ¹ Gravatt
- ² Ling
- ³ LORD Corporation
- ⁴ Delphi MagneRideTM
- ⁵ Cadillac
- ⁶ Chevrolet
- ⁷ Audi
- 8 Ferrari

در زمینه مهندسی بایو، لیو^۱ و همکارانش [۱۷] در سال ۲۰۰۱ به بررسی کاربرد سیالات مغناطیسی در آببندی رگهای خونی، منعقدسازی خون و همچنین قابلیت این سیالات برای درمان سرطان پرداختند. آنها برای ساخت سیال مغناطیسی از ذرات آهن و اکسید آهن در حاملهایی متفاوت بهره بردند.

در سال ۲۰۱۱ اوه^۲ و پارک^۳ [۱۸] تحقیقی برروی مواد نانو پلیمر فوق مغناطیسی بر پایه اکسید آهن انجام دادند. آنها این مواد را طراحی و تولید کرده و کاربردهای آن را در زمینههای مهندسی پزشکی، شامل بالابردن کیفیت تصاویر MRI^{*}، دارورسانی هدف گذاری شده، تب مصنوعی، جداسازی زیستی، عدمتحرک پروتئین و حسگرهای زیستی بررسی کردند.

صیقل دادن نوری که اولین بار توسط کردونسکی^۵ و جاکوبس^۶ [۱۹] ابداع شد یکیدیگر از کاربردهای مهم سیالات MR است. این سیال MR صیقل دهنده مغناطیسی میباشد که تحت جریان برشی ذرات غیرمغناطیسی ساینده، سطح ماده را صیقل میدهند. متداول ترین ترکیب ماده ساینده و مایع حامل برای صیقل دادن نوری تمام شیشهها و کریستالها ترکیب اکسیدسریوم و آب است. مواد سایندهای همچون آلومینا و الماس برای موادی به غیر از شیشهها استفاده میشود.

MR پیشینه پژوهش در زمینه سیال MR

۱-۵-۱ پژوهشهای آزمایشگاهی

در سالهای اخیر به دلیل کاربردهای فراوان و رو به افزایش سیالات MR تمرکز تحقیقات برروی این نوع از مواد هوشمند نیز افزایش یافته است. بخش عمدهای از این پژوهشها را تحقیقات آزمایشگاهی

¹Liu

 $^{^{2}}_{2}$ Oh

³ Park

⁴ Magnetic Resonance Imaging

⁵ Kordonski ⁶Jacobs

تشکیل میدهد. این تحقیقات عمدتاً به بررسی سیالات MR با ترکیبات مختلفی از ذرات مغناطیسی، سیال پایه و افزودنیها میپردازند، تا سیالی با قیمت مناسب و پایدار از نظر دمایی و تهنشینی و همچنین تنش تسلیم بالا در حضور میدان مغناطیسی ارائه دهند.

جولی و همکارانش [۲۰] در سال ۱۹۹۹ خواص مغناطیسی و رئولوژیکال چندین نـوع سـیال مگنتورئولوژیکال تجاری را مورد بحث و بررسی قرار دادند. این سیالات به کمک نمودارهای مختلف با یکدیگر مقایسه شدهاند. همچنین بعضی از کاربردهای کنونی ایـن سـیالات بررسـی شـده اسـت. ایـن کاربردها نشان میدهند چگونه باید خواص مواد گوناگون تنظیم شوند تا عملکرد بهینه برای یک کاربرد خاص حاصل گردد. گنکالوز^۲ [۲۱] در سال ۲۰۰۵ رفتار سیالات مگنتورئولوژیکال را در سرعتها و نرخ های برش بالا مورد بررسی قرار داد. در این پژوهش رفتار سیال بـرای حالـت غیرفعـال و فعـال بوسیلهی رئومتر بررسی شده است. در همین سال ویوتا^۳ و همکارانش [۲۲] در مورد ساخت سوسپانسیون های مگنتورئولوژیکال و پایداری آن ها تحقیق کردند. ورلی ٔ و همکاران [۲۳] در سال ۲۰۰۶ چند نمونه سیال MR دو جزئی با استفاده از ذرات آهن در اندازه نانومتر و میکرومتر ساختند، در حالی که سیالات مگنتورئولوژیکال متدوال فقط از ذراتی در مقیاس میکرون تشکیل می شود. در سال ۲۰۰۸ روز کوفسکسی⁶ و همکارانش [۲۴] لزجت سیال MR را تحت میدان مغناطیسی اندازگیری کردند. هدف این پژوهش تعیین لزجت سیال MR در مقادیر میدانهای مختلف و تعیین پارامترهای موثر در توقف جریان سیال در یک لولیه مویین بوده است. در همین سال ژانگ و همكارانش [۲۵] چند نمونه سیال مگنتورئولوژیكال با سیالات پایه گوناگون تهیه كردند و خواص آنها را مورد بررسی قرار دادند. مازلان^۷ [۱] در پایاننامه دکتری خویش رفتار سیالات مگنتورئولوژیکال در

¹ Jolly

² Gonclaves

³₄Viota

⁴₅ Wereley

⁵ Roszkowski

⁶ Zhang

⁷ Mazlan

مد فشاری را مورد بررسی قرار داده است. وی در این پژوهش رفتار سه نوع سیال مگنتورئولوژیکال را آزمایش کرد که یکی از آنها پایه-آبی و دو سیال دیگر پایه-هیـدروکربنی بودند. نتایج آزمایشگاهی نشان دادند که رفتار سیالات MR به حرکت نسبی بین ذرات جامد مغناطیسی و سیال حامل بستگی دارد. در تحقیقی دیگر در سال Mr.۲ ترکزین^۱ و کیوک^۲ [۲۶] چند نمونه سیال مگنتورئولوژیکال تهیه کردند. در این پژوهش خواص اصلی سیالات MR، مانند پاسخ آنها به میدان خارجی و پایداریشان مورد بررسی قرار گرفته است. علاوه بر این، نتایج مربوط به اثر پایدارکنندگی افزودنیهای مختلف در ایس پژوهش ارائه شده است. در سال ۲۰۱۲ کیم⁷ و همکارانش [۲۷] سیال مشخصات رئولوژیکالی را به کمک ذرات آهن کربونایل پخش شده در محلول پلیمری تهیه کردند و مشخصات رئولوژیکای را به کمک ذرات آهن کربونایل پخش شده در محلول پلیمری تهیه کردند و محلول پلیمری پایه آبی ساخته شده از اکسید پلی اتیلن بهعنوان سیال حامل و آهن کربونیل (I) میتفاده شده است. در همین سال ماهندران^۴ و همکارانش خواص مکانیکی سیالات MR پایه را استفاده شده است. در همین سال ماهندران^۴ و همکارانش خواص مکانیکی سیالات MR پایه را در دی رود پژوهش قرار دادند. ایشان برای ساخت سیال MR از روغن سیلیکون (OKs) و پودر آهن استفاده کردند و برای جلوگیری از تهنشینی ذرات آهن از گریس استفاده شده است.

1-۵-۲ پژوهشهای تحلیلی

در کنار پژوهشهای آزمایشگاهی صورت گرفته در زمینه سیالات MR، مطالعاتی تحلیلی برای مدل-سازی رفتار این سیال صورت گرفته است. به دلیل وجود تنش تسلیم در حضور میدان برای مدل سازی سیال از مدل هایی غیرنیوتنی متفاوتی (نظیر هرشل-بالکلی، بای ویسکوز و پلاستیک-بینگهام) استفاده شده است [۸۸]. مدل پلاستیک-بینگهام بدلیل سادگی در حل و دقت قابل قبول در این بین به پر کاربردترین مدل مبدل شده است [۲۹]. این مدل به دلیل شباهت رفتار سیالات MR و RR برای هر

¹ Turczyn

² Kciuk

³ Kim

⁴ Mahendran

دو نمونه قابل استفاده میباشد [۳۰].

 $au = au_y(field)sgn(\dot{\gamma}) + \eta\dot{\gamma} \quad au \geq au_y$ (۱-۱) η ، در رابطه (۱-۱) field مقدار عددی میدان الکتریکی یا مغناطیسی، $\dot{\gamma}$ نـرخ بـرش سـیال، η لزجت پلاستیک (در میدان صفر) و au_y تنش تسلیم است.

ورلی و پانگ^۱ [۳۱] در سال ۱۹۹۸ به بررسی میراگرهای MR و ER با استفاده از مدل بینگهام پرداختند. آنها با فرض شبه تعادلی حالتهای برش، جریان و ترکیب این دو را بین دو صفحه موازی حل نمودند، شکل ۱-۱ بصورت شماتیک سه حالت ذکر شده برای میراگرها را نمایش میدهد.



شکل ۱-۱-شماتیک سه نوع میراگر در حالتهای برشی، جریان و ترکیبی [۳۱] در سال ۲۰۰۴، چن^۲ و همکارانش [۳۲] سیال مگنتورئولوژیکال را در جریانهای ناپایا و با دبیهای مختلف مورد بررسی قرار دادند. آنها به این نتیجه رسیدند که درصورت صفر بودن تنش

¹ Pang ² Chen

تسلیم رفتار سیال MR یک رفتار نیوتنی خواهد بود.

ورلی و همکارانش [۲۸] در سال ۲۰۰۸، سیال مگنتورئولوژیکال را در حالت برشی برای دمپرهای خطی، استوانهای دوار و دیسکی دوار بصورت تئوری بررسی کردند. آنها مدلهای هرشل-بالکلی، بایویسکوز و بینگهام-پلاستیک را بکار برده و با یک دیگر مقایسه نمودند. در سال ۲۰۰۸، هُنگ^۱ و همکارانش [۲۹] مد ترکیبی دمپرهای مگنتورئولوژیکال را با استفاده مدل بینگهام حل کرده و کار خود را با نتایج آزمایشگاهی صحت سنجی کردند. یو^۲ و همکارانش [۳۳] در سال ۲۰۱۳، دمپر مگنتورئولوژیکال را با استفاده از مدلهای هرشل-بالکلی و بینگهام پلاستیک برای جریان اسیلاتوری در حالت ناپایا تحلیل و بررسی کردند. در سال ۲۰۱۴ استکی و همکارانش [۳۳] دمپرهای سیلاتوری MR و RT را در مد جریان و ترکیبی تحلیل کردند. آنها علاوه بر حل تحلیل از روش المان محدود نیز در تحقیق خود بهره بردند.

۱-۵-۳ پژوهشهای عددی

با توجه به هزینههای بالای تحقیقات آزمایشگاهی و محدودیت حله ای تحلیلی برخی از محققین برای شبیهسازی سیالات مگنتورئولوژیکال و الکترورئولوژیکال از روشهای عددی استفاده کردهاند، که البته این حوزه از پژوهش تا امروز سهم بسیار کمتری به نسبت پژوهشهای آزمایشگاهی و حتی تحلیلی را به خود اختصاص داده است. دسته بندیهای متفاوتی برای روشهای عددی وجود دارد. یکی از آنها تقسیمبندی به دو گروه پیوسته و گسسته است.

۱–۵–۳ روشهای پیوسته

در دیدگاه پیوسته، معادلات دیفرانسیل عادی و یا جزئی را میتوان با استفاده از بقای جرم، مومنتم و

¹ Hong

²Yu

انرژی برای یک حجم کنترل بدست آورد. اما بدلیل محدودیتهایی نظیر معادلات غیرخطی، شرایط مرزی پیچیده، هندسههای پیچیده و ... حل آنها مشکل و در بعضی شرایط امکان ناپذیر است. از اینرو با استفاده از روشهای عددی مانند حجم محدود[']، المان محدود^۲ و اختلاف محدود^۳ و ... معادلات دیفرانسیل با شرایط اولیه و مرزی مشخص به معادلات جبری تبدیل میشوند. این معادلات با روشهای تکراری تا رسیدن به همگرایی حل میگردند.

در زمینه سیالات MR نیز مدلسازیهایی هرچند محدود با استفاده روشهای ذکر شده صورت گرفته است. در سال ۲۰۰۸، گرتزوس⁴ و همکارانش [۳۵] یک ژورنال بیرینگ هوشمند را با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی⁶(CFD) شبیهسازی کردند. آنها با استفاده از مدل پلاستیک-بینگهام پاسخهایی منطبق بر نتایج آزمایشگاهی و همچنین تحلیلی بدست آوردند که برای طراحان این تجهیزات هوشمند مفید خواهد بود. امیدبیگی و هاشمآبادی [۳۶] در سال ۲۰۱۲ پژوهشی با استفاده از دو روش تجربی و محاسباتی بر روی استوانههای دارای خروج از مرکز انجام دادند. آنها تاثیر کسر حجمی، شدت میدان مغناطیسی، نرخ برش و میزان انحراف از مرکز برروی خواص رئولوژیکال و مغناطیسی سیال MR را بررسی کردند.

۱-۵-۳-۲ روشهای گسسته

از سوی دیگر، دامنه حل را میتوان تا ابعاد اتمها و مولکولها کوچک کرد به گونهای که باید برای شبیه سازی، حرکت و برخورد این ذرات را مورد توجه قرار داد. این شیوه که در مقیاسهای میکرومتر و نانومتر است، دینامیک مولکولی^۶ (MD) نام دارد. برای کار با این روش نیازمند دانستن توابع نیرویی بین ذارت تشکیل دهنده ماده هستیم تا بتوان با استفاده از قانون دوم نیوتن رفتار ذرات و در نهایت

¹ Finite Volume

² Finite Element

³ Finite Difference

⁴ Gertzos

⁵ Computational Fluid Dynamics

⁶ Molecular Dynamics

رفتار کلی ماده را در شرایط مسئله شبیهسازی کرد. روش MD در کنار نتایج صحیح و همینطور دقت بالا در نمایش جزئیات پدیدهها دارای هزینه محاسباتی زیادی است که عملا شبیه سازی را برای مقیاسهای زمانی و طولی بزرگ ناممکن میکند.

به همین جهت محققان رو به ابداع و استفاده از شیوههای درشت دانه ^۱ برای رفع این مشکل آوردهاند. روشهایی که علاوه بر نتایج فیزیکی و توجیه پذیر اطلاعات مفیدی از جزئیات پدیدهها در اختیار قرار دهد. بدین منظور روشهای مقیاس مزو^۲ –بین مقیاسهای میکرو و ماکرو– برای حل این معضل ایجاد شدند. روش شبکه گاز سلول خودکار ^۳(LGCA) و روش شبکه بولتزمن^۹ (LBL) از این دست میباشند که در گروه روشهای دارای شبکه^۵ قرار می گیرند [۳۷ و ۲۸]. در هر دو این روشها ذرات تشکیل دهنده سیال در مکانی محدود و مسیرهای تعیین شده به حرکت درمی آیند. نوع دیگری از مدلها در مقیاس مزو را روشهای بدون شبکه^۹ تشکیل می دهند. در این گروه از مدلسازی ذرات ماده می توانند حرکتی آزادانه در محیط محاسباتی داشته باشند که می توان از روش دینامیک براونی ^۷(BD) و دینامیک ذره استهلاکی (DPD) به عنوان روشهای شاخص مدلسازی بدون شبکه در مقیاس مزو نام برد [۳۹].

در سال ۲۰۰۴، شیرایشی[^] و همکارانش [۸] با استفاده از روش سلول خودکار سیال مگنتورئولوژیکال را مدلسازی کردند. آنها در ابتدا زنجیرههای ایجاد شده توسط ذرات مغناطیسی را با نتایج آزمایشگاهی مقایسه کرده و سپس نفوذپذیری معادل سیال MR را با استفاده از نتایج بدست آوردند.

¹ Coarse Grained

² Meso Scale

³ Lattice-Gas Cellular Automata

⁴ Lattice Boltzmann Method

⁵ On-Lattice

⁶ Off-Lattice

 ⁷ Brownian Dynamics
 ⁸ Shiraishi

هان^۱ و همکارانش [۴۰] در سال ۲۰۱۰، سیال مگنتورئولوژیکال را با استفاده از روش شبکه بولتزمن مدلسازی کردند. آنها ساختارهای ایجاد شده در کسرهای حجمی ۵٪، ۱۰٪، ۲۰٪ و ۳۰٪ را در گذر زمان بررسی کردند. همچنین تاثیر میدان مغناطیسی را بر لزجت سیال گزارش دادند که نتایج نشان از کاهش لزجت سیال با افزایش نرخ برش داشته است.

از جمله مطالعات محدودی که با استفاده از روشهای بدون شبکه انجام شده می توان از پژوهش ساتو^۲ و چنترل^۳ [۴۱] نام برد. آنها با استفاده از روش دینامیک ذره استهلاکی(DPD) سیال مغناطیسی را مدلسازی کرده و قابلیت این روش را در مدلسازی پدیدههای مغناطیسی نشان دادنـد. آنها تاثیر پارامترهای مختلف از جملـه جـرم و قطـر ذرات مغناطیسی را بـر زمـان برخـورد دو ذره مغناطیسی که در فاصلهای معین درون سیال غوطهور بودنـد را بررسـی کردنـد کـه در نهایـت نتایج فیزیکی و قابل توجیهای را ارائه دادند. البته بجز این پژوهش که در حالت تعادلی انجـام شـده است، فعالیت چشمگیر دیگری برروی سیالات مغناطیسی با استفاده از روش DPD صورت نگرفتـه است و حال ما درنظر داریم تا با توسعه این روش گامهای جدیدی را در بررسی سیالات مغناطیسی برداریم.

(DPD) معرفی دینامیک ذره استهلاکی (DPD)

شود.

همانطور که پیشتر نیز اشاره شد بهدلیل هزینههای بالای آزمایشگاهی و محدودیتهای موجود بر روشهای تحلیلی دانشمندان بر آن شدند تا با استفاده از روشهای عددی مسائل و پدیدههای پیچیده فیزیکی را شبیهسازی کنند. یکی از این روشها که ریشه در ذرات تشکیل دهنده (اتمها و مولکولها) مواد دارد دینامیک مولکولی است این روش با وجود قابلیت شگرف خود در شبیهسازی رفتار مواد دارای هزینه محاسباتی بالایی است که یکی از عوامل محدود کننده مهم در این روش محسوب می

¹ Han

² Satoh

³ Chantrell
یکی از راههای حل این مشکل استفاده از روش های درشت دانه است. بدین ترتیب که تعدادی از اتمها و یا مولکولهای سازنده ماده را در یک دسته و یا خوشـه قـرار داده و نیـز نیروهـای مناسبی برای برهمکنشهای بین این دستهها تعیین شود، تا با این کار از حجم محاسبات لازم برای شبیهسازی کاسته شود و در عین حال رفتار ذرات با جزئیات خوبی به نمایش درآید. هـوگربراگ و کوئلمن^۲ [۴۲] در سال ۱۹۹۲ روش دینامیک ذره استهلاکی (DPD) را بر همین اساس پایهریزی کردند. در این روش که ایده آن از ترکیب دو روش شبکه گاز خودکار (LGA) و دینامیک مولکولی (MD) بهدست آمده، سیال بهوسیلهی یک سیستم از ذرات (ذرات DPD) که تحت قانون دوم نیوتن حرکت میکنند مدلسازی میشود. این روش بدون شبکه^{^۲ بوده و از مشکلات ایجاد شـبکه در روش-} های دارای شبکه معاف است. در ضمن نیروهای بین ذرات DPD بگونهای هستند که پایستگی جرم و مومنتم بصورت همزمان رعایت میشود. به همین دلیل با وجود اینکه مبنای این روش ذرهای است اما می تواند منحصر به مقیاس مزو نباشد و برای گستره مقیاسی بیشتری استفاده شود. این در حالیست که در روشی مانند دینامیک براونی (BD) تضمینی بر پایستگی مومنتم وجود ندارد. روش DPD به-دلیل انعطاف پذیری بالا برای مدلسازی ساختارهای پیچیده بسیار کار آمد است که آن را به گزینه مناسبی برای مدلسازی در زمینه سوسپانسیونها، سیالات چند فازی، پلیمرها و بایو در سالهای اخیر مبدل کرده است [۴۳]. در ادامه توضیحات بیشتری درباره کاربرد روش DPD ارائه می شود.

I-8-1 کاربردهای روش دینامیک ذره استهلاکی (DPD)

۱-۶-۱ سوسپانسیونها

فهمیدن خواص رئولوژیکال سوسپانسیونهای کلوئیدی با ذراتی با اندازههای متفاوت، اشکال و ترکیباتی که در حاملهای مختلف و شرایط متنوع معلق هستند، یکی از موضوعات کلیدی در

¹Hoogerbrugge

² Koelman

³ Off-lattice

شبیهسازی و مدلسازی آنهاست. برای کاربردهای صنعتی این محدوده از سوسپانسیونها علاوه بر روشهای مبتنی بر محیطهای پیوسته مانند دینامیک براونی [۴۴] یا دینامیک استوکسی که هزینه محاسباتی زیادی برای نرخ برش بالا دارد [۴۵]، روشهای جایگزین مزوسکوپیک مانند شبکه بولتزمن (LBM) و DPD وجود دارند. شبیهسازی DPD سوسپانسیونها یکی از راههای ممکن بهجای هیدرودینامیک محیط پیوسته در مقیاسهای طولی بزرگ است که درعینحال آن را قادر به دریافت بعضی از درجات جزئیات مولکولی میکند.

کوئلمن و هوگربراگ [۴۶] در سال ۱۹۹۳، یک سیستم سوسپانسیونی با ذرات سخت را تحت جریان برشی شبیهسازی کردند. آنها با استفاده از روش DPD که خود مبدع آن بودند لزجت این نـوع از سیال را تا کسر حجمی ۳۵٪ محاسبه کردند که انطباق خوبی با نتایج تجربی داشت.

بوئک و همکارانش [۴۵] در سال ۱۹۹۷، ویژگیهای رئولوژیکال سوسپانسیونها با ذرات معلق مانند کره، میله و دیسک را در یک مایع بررسی کردند. آنها یک روش DPD با کارآمدی بالا برای محاسبه فعلوانفعالات هیدرودینامیکی در مقایسه با مدلهای محیط پیوسته، برای حلالها یافتند. در کارهای بوئک و همکاران [۴۷ و ۴۸] با استفاده از روش DPD لزجت بهعنوان تابعی از نرخ برش و کسر حجمی ذرات معلق محاسبه شد و نتایج برای سوسپانسیونهای رقیق میله و دیسک انطباق عالی با پیشبینیهای نظری داشت. علاوه بر این، برای جریانهای نیمه رقیق، آنها رفتار مقیاسی مشابه «دویی-ادواردز^۱» [۴۹] برای سوسپانسیونهای مشابه یافتند. در یک توضیح برای موضوعات و پیچیدگیهای استفاده از DPD برای شبیهسازی کلوئیدها، ویتل^۲ و دیکنسون^۳ [۰۵] برای موضوعات و پیچیدگیهای استفاده از DPD برای شبیهسازی کلوئیدها، ویتل^۲ و دیکنسون^۳ [۰۵] رفتن برهم کنشهای هیدرودینامیکی انتظار میرود، اما ایـن مسئله با افـزایش تعـداد کـل ذرات و رفتن برهم کنشهای هیدرودینامیکی انتظار میرود، اما ایـن مسئله با افـزایش تعـداد کـل ذرات و

¹ Doi-Edwards

² Whittle

³ Dickinson

بوئک و وندراسکوت^۱ [۴۸] جریان سیال از میان یک آرایه تکراری از کرهها را، برای فهمیدن خواص رئولوژیکال آزمایش کردند. آنها فهمیدند که برای مسئله جریان سیال از میان آرایهها، اندازه سیستم تأثیری بر نیروی پسا بیبعد ندارد، درحالی که برای کسر حجمی بالاتر جامد، نیاز به افزایش اندازه سیستم برای اجتناب از تأثیرات اندازه محدود و تراکم میباشد.

گیبسون^۲ و همکاران [۵۱] از DPD برای شبیهسازی کارآمد جذب ذرات کلوئیدی بر روی یک سطح پوشش پلیمری استفاده کردند و نتایج به دست آمده انطباق خوبی با پیش بینی های تئوری داشت که با افزایش اندازه نسبت پلیمر به ذرات کلوئیدی یا به طور مشابه افزایش چگالی پلیمر، جذب ذرات بر سطح نیز کاهش خواهد یافت. ون در کویج^۳ و همکاران [۵۲] نتایج خوبی برای لزجت ذاتی سوسپانسیون های صفحه تخت بامطالعه رئولوژی سوسپانسیون های رقیق این کلوئیدهای صفحه مانند سخت از طریق ترکیب اندازه گیری های رئولوژیکال تثبیت شده با مدل سازی DPD برای دیسک ها به دست آوردند.

کیم[†] و فیلیپس^۵ [۵۳] جریانهای پیرامون کرهها و سیلندرها در عدد رینولدز محدود با یک اینرسی سیال محدود را در شبیهسازی DPD مورد مطالعه قراردادند. جریان حول اجسام بی *حرک*ت و جابجایی و چرخش اجسام متحرک موردبررسی قرار گرفت و نشان داده شد شبیهسازیهای DPD ازنظر کمی تا رینولدز ۵۰ تا ۱۰۰ دقیق هستند و عدم دقت در اعداد رینولدز بالاتر را میتوان به اثرات تراکم نسبت داد. پسازآن، چن⁵ و همکاران [۵۴] نیروی پسا و گشتاور یکنواخت و جریان برشی پیرامون یک کره ایستا را با بهکارگیری شبیهسازی DPD برآورد کردند. آنها اهمیت ضریب نیروی اتلافی را بر روی مقادیر نتایج نیروی پسا و گشتاور را مشاهده نمودند.

¹ Van Der Schoot

² Gibson

³ Van Der Kooij

⁴ Kim

⁵ Phillips ⁶ Chen

n

در تحقیق داریاس و همکاران [۵۵] سوسپانسیونهای محدودشده در هندسههای استوانهای با استفاده از DPD بررسی شده است. در این مدل DPD، کرههای نرم معلق از طریق یک نیروی پایستار نرم در تعامل هستند، درحالی که ذرات فاز محیط پیوسته از طریق نیروهای DPD برهم کنش می کنند. پریامیتسین و گانسان [۵۶] یک روش ساده با استفاده از DPD برای مدل ماکرو ذرات در حلالهای پیچیده ابداع کردند، و بعلاوه آنها قادر به ردیابی حرکت و پدیده دینامیکی مرتبط به مدل سوسپانسیونشان شدند. پس از آن، دی پالما و همکاران [۵۷] روش DPD را برای شبیه سازی جریان به حرکت در آمده با یک میکروپمپ که شامل چندی ناحیه کلوئیدی است به کاربردند و یک شرح مفصلی از ویژگیهای محلی جریان که در مقایسه با داده های آزمایشگاهی منطقی و دقیق بوده ارائه کردند.

مارتیس^۵ [۵۸] یک سری شبیهسازی به منظور مقایسه نتایج DPD مدلهای مختلف سوسپانسیون با سایر پیش بینی های تئوری انجام داد. او فهمید که روش اصلی DPD در بازیابی رژیم سیستم های سوسپانسیونی رقیق به غلیظ خوب عمل می کند. بااین حال، در کسر حجمی و عدد پکلت^۶ بالاتر، متوجه شد، DPD به منظور در نظر گرفتن پدیده های مهم، حل باید در گام زمانی و طول مقیاس کم انجام گیرد. برای شبیه سازی سازه های کلوئیدی خواسته شده، دزوینل^۴ و همکاران [۵۹] و دزوینل و یوئن^۸ [۶۰] از یک نوع تابع پتانسیل لنارد – جونز^۴ برای تعریف ذرات کلوئیدی بهره برده و نیز ذرات DPD را برای تقلید رفتار حلال استفاده کردند. فاز گذارِ ذرات و ایجاد خود به خودی میسل های^{۲۰} کروی و کرم مانند^{۱۱} و تبلور در ساختارهای شش ضلعی پایدار و کرم مانند مشاهده شد.

- ¹ Darias
- ² Pryamitsyn
- ³ Ganesan
- ⁴ De Palma
- ⁵ Martys
- ⁶ Peclet
- ⁷_o Dzwinel
- ⁸ Yuen
- ⁹ Lennard-Joens
- ¹⁰ Micelle
- ¹¹ Worm-Like

علاوه بر این، خواص به شدت متغیر مانند لزجت و فشار نسبی حلال DPD یافت شد که در تعیین سرعت تبلور حیاتی است.

1−8−1 سیالات چند فازی

در این بخش چندین کاربرد، مانند تجزیه جت مایع، برخورد قطره، ترکیب شدن و جریانهای چند فازی در میکرو کانالها که در آنها جریان شامل فازهای مختلف است معرفی شده است. موضوع کلیدی در کاربرد جریان چند فازی فیزیک بین فازهای مختلف مایع، گاز و جامد است. روش DPD، با توجه به ویژگیهای مزوسکوپی خود، میتواند یک روش شبیهسازی بسیار مفید در این زمینه باشد.

نوویک^۱ و کووینی^۲ [۶۸] در سال ۱۹۹۷ با تعریف ذرات DPD به عنوان قطرات ترکیب ناپذیر برای اولین بار سیالات چندفازی را مدل کردند. بر اساس تئوری میدان اصلی، تیواری^۳ و آبراهام^۴ [۶۲] یک مدل DPD برای جریانهای دوفازی شامل گاز و مایع ارائه کردهاند. در اعتبار سنجی مدل پیشنهادی خود، آنها شبیهسازی مسائل با سطح مشترک دینامیکی را انجام دادند، مانند نوسانات دامنه کوچک و بزرگِ سیلندر مایع و امواج مویینگی. ویزر^۵ [۶۳] سه روش بهمنظور بکار بردن عامل اصطکاک برای برهمکنش بین ذرات و سیالات در سیستمهای چند-لزجتی ارائه داد. قابلیت DPD در ثبت اثرات کیفی در حین تزریق سرامیک توسط هلدله^۶ و همکاران [۶۴] گزارششده است.

لیو^۷ و همکاران [۶۵] ترکیبی از برهم *ک*نشهای دافعه برد کوتاه و جاذبه برد بلند برای مدلسازی DPD سیستمهای چند فازی را معرفی کردند و از این مدل برای مطالعه رفتار قطرههای مایع در گاز استفاده نمودند. بعداً یک مدل مشابه برای شبیهسازی جریان مایع چند فازی در شبکه

¹ Novik

- ² Coveney ³ Tiwari
- ⁴ Abraham
- ⁵ Visser
- ⁶ Heldele
- 7 Liu

میکروکانالها توسط لیو وهمکاران استفاده شد [۶۶]، آنها برای مدلسازی اتصالات شکستگی غیراشباع [۶۶] و محیط متخلخل [۶۷] که به دلیل اثر لزجت، نیروهای مویینگی و گرانشی، هندسه میکروکانال و شرایط جریان پیچیده است از روش DPD استفاده کردند. نرخهای تزریق مختلف و قدرت اثرات متقابل مایع-مایع و مایع-دیوار و نیروهای خارجی، حالتهای مختلف جریان مانند جریان فیلم نازک، جریانهای مرطوبکننده و غیر مرطوبکننده، توسط لئو و همکاران [۶۶] مشاهده شد. این تأیید عملی بودن استفاده از روش DPD درزمینهٔ شبیهسازی چند فازی بود.

1–9–1–۳ پلیمرها

برای اولین بار در سال ۱۹۹۷، کونگ^۱ و همکارانش [۶۸] با اتصال ذرات DPD توانستند رشتههای پلیمری را مدلسازی کنند. آنها رفتار رشتههایی با طولهای مختلف را درون یک سیال بررسی کرده و نتایجی مانند شعاع ژیراسیون رشته پلیمری و زمان آسایش دینامیکی را بدست آوردند که انطباق خوبی با نتایج آزمایشگاهی داشت.

در ادامه فعالیت این محققان پیشرو کارهای دیگری در زمینه شبیهسازی پلیمرها صورت گرفت. با بهبود نظریه فلوری-هاگینس^۲ برای پارامترهای DPD، میتی^۳ و همکارانش [۶۹] توانستند یک تعادل ساختارشناسی برای کامپوزیتهای پلیمر-نانوتیوب به دست بیاورند. پسازآن، وستوکت^۴ و همکارانش [۶۹] محاسبات ساختارشناسی مقیاس مزو این کامپوزیتها را به یک شبکه المان محدود مدل کردند و رسانایی حرارتی الکتریکی فیلمها را برآورد کردند. به منظور پیشبینی ساختار نانو کامپوزیتهای پلیمر-خاک رس (PCN)، کامپوزیتهای نانوتیوب-پلیمر و ترکیبات پلیمری (PCN)، فرمگلیا^۵ و پریسل^۱ [۷۰] و اسکوچی^۲ [۱۷ و ۲۲] یک روش سلسله مراتبی که پل بین شبیهسازیهای

¹ Kong

² Flory-Huggins

³ Maiti

⁴ Westcott

⁵ Fermeglia

اتمی و مزوسکوپی است را گزارش دادند. آنها پارامترهای مدل مزوسکوپی DPD را با نگاشت مقادیر اندازه گیری شده انرژی از شبیهسازی MD محاسبه کردند.

۷-۱ معرفی تحقیق حاضر

همانطور که بیان شد، به دلیل اهمیت فراوان سیالات مگنتور ئولوژیکال در صنعت و فناوری، تحقیقات در این زمینه رو به افزایش است. اما مسئله ای که در مورد آثار گذشته به چشم می خورد عدم فعالیات شایان توجه برای شناخت جزئیات میکروسکوپی این سیالات در حالته ای غیر تعادلی است. همچنین با توجه به هزینه های بالای پژوهش های آزمایشگاهی بر روی سیالات مگنتور ئولوژیکال و نیز محدودیت تحقیقات تئوری، نیاز به پژوهش های عددی احساس می شود. از سوی دیگر در میان روش-های عددی، مدل های ذره ای بدلیل نمایش جزئیات میکروسکوپی اطلاعات جدیدی را در اختیار ما قرار خواهند داد. به همین جهت برآن شدیم تا از این زاویه نسبتا پنهان به این سیالات مدرن بنگریم. همانطور که بیان شد، بررسی های انجام شده بر روی روش دینامیک ذره استهلاکی نشان داد این روش برای شبیه سازی سیالات پیچیده به ویژه سوسپانسیون ها کار آمد می باشد. ویژگی که این روش

در این پژوهش سیال MR تحت چند نرخ برش ثابت با استفاده از روش دینامیک ذره استهلاکی مدلسازی میشود. همچنین علاوه بر مسئله ذکر شده در موضوع پایاننامه به بررسی این سیال در حالتهای جریان پوازیه و ترکیبی پرداخته میشود. در این پژوهش سیال پایه با استفاده از دینامیک ذره استهلاکی و ذرات مغناطیسی شناور در آن با استفاده از مدل مغناطیش ذره مدلسازی شده است. همچنین برای مدلسازی نیروهای بین ذرات جامد و مایع از پتانسیل لنارد-جونز بهره برده شده است. در این تحقیق سیالات مغناطیسیای با کسرهای حجمی جامد ما بین ۱۵٪ تا ۳۹٪ برای بررسی این پارامتر مهم بر خواص سیال نظیر لزجت و اختلاف تنش نرمال اول ^۱ مدلسازی شده است. همچنین برای اولین بار پروفیل سرعت این سیالات در بازهای غیر خطی بین آغاز تسلیم و تسلیم کامل این سیالات ارائه شده است. این کار در چندین نرخ برش صورت گرفته تا نوع سیالات مورد مطالعه مشخص شود، نتیجه کار نیز مانند پژوهشهای پیشین حاکی از رقیق شونده برشی^۲ بودن این سیالات داشت. پس از آن با تغییر جنس ذرات مغناطیسی تاثیر این پارامتر نیز بر خواص سیالات MR بررسی گردیده است. سپس با تغییر لزجت سیال پایه نقش این پارامترها بر لزجت سیال MR بدست

باید یاد آور شد مدلسازی سیال MR با استفاده از روش DPD در حالت غیرتعادلی که برای اولین بار در این پژوهش صورت گرفته که در نهایت نشان از قابلیت این روش در شبیه سازی سیالات MR میباشد.

در فصل دوم به معرفی معالات حاکم بر روش DPD و ذرات مغناطیسی که در این پژوهش استفاده شدهاند بیان میشود. در فصل سوم روشها اعمال شده برای این مدلسازی به مانند چگونگی محاسبه نیروهای بین ذرات، شرط مرزی و محاسبه لزجت را معرفی میشود. در فصل چهارم نتایج بدست آمده از مدلسازی و در فصل آخر نتیجه گیری این تحقیق ارائه خواهد شد.

¹ First Normal Stress Difference

² Shear Thinning

فصل دوم:

روش دینامیک ذره استهلاکی (DPD)

۱-۲ پیشگفتار

این فصل به معرفی روش استفاده شده برای مدلسازی سیال مگنتورئولوژیکال میپردازد. بـرای مـدل سازی دو فاز مایع و جامد نیاز به سه دسته نیروی بین ذرهای هست. دسته اول که ذرات مایع را مدل میکند. دسته دوم که ذرات جامد مغناطیسی را مدلسازی میکند. و دسته سوم که بـرهمکنشهای بین ذرات مایع و جامد را بیان مـیدارد. در ایـن پـژوهش بـرای مـدلسازی ذرات مـایع از معـادلات استاندارد دینامیک ذره استهلاکی بهره برده شده است. از روش مـدل مغناطیسی ذرات بـرای مـدل-سازی ذرات جامد استفاده شده و در نهایت برای برقراری ارتبـاط بـین ذرات مـایع و جامـد پتانسـیل لنارد-جونز به کار رفته است. در ادامه روشهای استفاده شده در این مدل سازی به تفضیل بیان خواهد شد.

۲-۲ معادلات حاکم بر دینامیک ذره استهلاکی

دینامیک ذره استهلاکی یا DPD یک روش مبتنی بر ذرات درشت دانه است که برای حل مسائل دینامیک سیالات در مقیاس مزو مورد استفاده قرار می گیرد. معادلات ناویر -استوکس را می توان از روی معادلات DPD استخراج کرد [۲۳]. در این روش، گروهی از اتمها و یا مولکولها را بهعنوان یک ذره DPD در نظر می گیرند. سپس این ذرات بر مبنای قوانین خاصی در تماس با یک دیگر قرار داده می شوند. به دلیل درشت دانه بودن ذرات، جزئیات مولکولها از دست می رود، اما هنوز اطلاعات لازم در سطح مزو خواهد شد. دینامیک ذره استهلاکی در حقیقت نسخهی درشت دانه دینامیک مولکولی است که ما را قادر به شبیه سازی مقیاس های بزر گتری از نظر طول و زمان می سازد. ذرات درشت دانه باعث از بین رفتن بر خوردهای سخت بین ذرات شده و باعث نرم شدن هسته می گردند. سخت شدگی هسته به پتانسیل های بین ذرهای (مانند لنارد – جونز) بر می گردد که وقتی فاصله بین ذرات در مقایسه با قطر اتمها کوچک میشود، مقادیر عددی بسیار بالایی را اختیار می کند. نرم شدن هسته بدین معناست که چون انرژی پتانسیل نمیتواند از یک حد بیشینه فراتر برود نوعی پتانسیل معتدل برای نیروی بین ذرهای بوجود میآید. این در واقع از پیامدهای درشت دانه بودن ذره به شمار میرود. از آنجا که DPD به لحاظ ماهیتی دارای هسته نرم است، امکان استفاده از بازههای زمانی بزرگتر در الگوریتم یکپارچهسازی^۱ آن وجود دارد.

هرچه ذرات درشت دانه تر باشند رژیم مسئله مورد حل به رژیم ماکرو که در آن معادلات نویر-استوکس برقرار هستند نزدیکتر خواهد بود. توالی درشت شدن بافت ناحیه محاسباتی در شکل۲- ۱ نشان داده شده است.



شکل۲- ۱- شماتیک بافت ذرات، از مقیاس نانو تا ماکرو

در روش DPD که برای مدلسازی سیال پایه استفاده شده است، توجه ما عمدتا معطوف به حل معادلات تکامل برای سیستم دارای N ذره میباشد. نیروی برهم کنش میان این ذرات از سه جزء تشکیل میشود که عبارتند از نیروی استهلاکی، \mathbf{F}^{D} ، نیروی تصادفی، \mathbf{F}^{R} و نیروی پایستار \mathbf{F}^{C} . هدف از اعمال نیروی استهلاکی، کاهش سرعت نسبی بین ذرات DPD و ایجاد لزجت سیال است. نیروی تصادفی به جای درجات آزادی حذف شده اعمال میشود. این حذف درجات آزادی به جهت درشت دانه بودن ذرات ایجاد میشود. نیروی پایستار نیز به علت غیرایده آل بودن سیستمی که در دست

¹ Integrator

شبیهسازی شدن است، وارد می گردد. سیستمهای غیر ایدهآل به سیستمهایی گفته می شود که میان ذرات آنها برهم کنشی غیر از برخورد برقرار است. این برهم کنش می تواند برای مثال ناشی از نیروی واندروالس میان ذرات موجود در سیستم باشد. در صورتی که اگر برهم کنش ذرات، مانند گاز ایده آل تنها در هنگام برخورد آنها صورت بگیرد نیروی پایستار وجود نخواهد داشت. بطور کلی در روش استاندارد DPD می توان نیروهای وارد بر ذره *i* را اینگونه بیان کرد:

$$\mathbf{f}_{i} = \sum_{i \neq j} (\mathbf{F}_{ij}^{C} + \mathbf{F}_{ij}^{D} + \mathbf{F}_{ij}^{R})$$
(1-7)

نکته مهم دیگری که باید ذکر شود این است که این روش به لحاظ ماهیت، روشی با دامنه محدود به شمار میآید. یعنی هریک از ذرات تنها میتواند با ذرات مجاور خود که دارای فاصله مشخصی از یکدیگرند برهم کنش داشته باشد. این خاصیت باعث میشود تا محاسبه نیروی بین ذرات آسان تر شود و هزینه محاسباتی کاهش یابد. البته این فرمولاسیون با دامنه محدود در مورد سیستم-

۲-۲-۱ نیروهای دینامیک ذره استهلاکی

در این بخش هر یک از نیروهای دینامیک ذره استهلاکی تشریح میشود و سپس دستورالعمل مشخصی درباره نحوه انتخاب پارامترهایی که در این اجزا دخالت دارند، ارائه خواهد شد.

$$\mathbf{F}_{ij}^{C} = \begin{cases} a_{ij} \left(1 - \frac{r_{ij}}{d_c}\right) \boldsymbol{e}_{ij}, & r_{ij} \leq d_c \\ 0, & r_{ij} > d_c \end{cases}$$
(٢ - ٢)
در اینجا a_{ij} بیشینه نیروی دافعه بین ذرات i و j است. r_{ij} فاصله بین دو ذره و \boldsymbol{e}_{ij} بردار یکه
متصل کننده ذرات است. d_c قطر ظاهری ذرات DPD و یا همان شعاع تاثیر گذاری (شعاع بـرش) هـر

ذره می باشد. d_c با توجه به کارهای گذشته برابر واحد در نظر گرفته شده است. در شکل ۲- ۲ نحوه اعمال نیروی پایستار بر دو ذره همسایه نشان داده شده. ارتباط خطی بین فاصله نسبی دو ذره و نیروی پایستار بیانگر نرم بودن این نیروی دافعه دارد.



$$p =
ho k_B T + lpha a_{ij}
ho^2 (lpha = 0.101 \pm 0.001),$$
 (۳-۲)
در اینجا p فشار سیستم مورد بررسی میباشد. ho چگالی عددی، k_B ثابت بولتزمن، a_{ij}
ضریب دافعه که در معادله (۲- ۳) نیز به چشم میخورد و T نیز معرف دمای سیستم است. زمانی که
معادله حالت معلوم باشد، تراکمپذیری بدون بعد سیال DPD با فرمول زیر محاسبه میگردد:

$$\kappa^{-1} = \frac{1}{\rho k_B T \kappa_T} = \frac{1}{k_B T} \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_T, \qquad (f - T)$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\partial p}{\partial \rho} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\partial$$

همانطور که پیش از این بیان شد، نیروی اتلافی
$$\mathbf{F}^{ ext{D}}$$
 به منظور کاسـتن از سـرعت نسـبی میـان ذرات
اعمال میشود. این امر باعث ایجاد اثر لزجت میگردد. و به بیانی دیگر میتوان گفت این نیرو سیستم
را سرد میکند. نیروی اتلافی میان ذرات i و j در فرمول زیر ارائه شده است:

$$\mathbf{F}_{ij}^{D} = -\gamma w_{D}(r_{ij})(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})\mathbf{e}_{ij},$$
 (۵ - ۲)
بطوریکه γ بزرگی نیروی اتلافی و w_{D} تابع وزن برای نیروی اتلافی است. و نکته مهمی که در
اینجا باید متذکر شد این است که رابطه نیـروی اسـتهلاکی بـا سـرعت نسـبی ذرات \mathbf{v}_{ij} ارتبـاط دارد.
ویژگی بارز دیگری که این روش را از دینامیک ملکولی متمایز مـیکنـد. تـابع وزن w_{D} بصـورت زیـر
تعریف میشود:

$$w^{D}(r) = \begin{cases} \left(1 - \frac{r_{ij}}{d_{c}}\right)^{2}, & r_{ij} \leq d_{c} \\ 0, & r_{ij} > d_{c} \end{cases}$$
(۶-۲)
izges realised in the second second

$$\mathbf{F}_{ij}^{R} = \sigma w_{R}(r_{ij}) \theta_{ij} \mathbf{e}_{ij},$$
 (۲ – ۲)
در این معادله σ بزرگی نیروی تصادفی و w_{R} تابع وزن این نیـرو اسـت. θ_{ij} متغیـر تصـادفی
نوسان گاوسی با خصوصیات زیر میباشد:

(۸ – ۲)
(۸ – ۲)
(۸ – ۲)
(
$$\delta_{ij}(t) = 0$$
($\delta_{ij}(t) \theta_{kl}(t') >= (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \delta(t - t').$
iz, $\mathbf{F}^{\mathbf{C}}$

گروت و وارن [۷۴] به مطالعه اثر تغییر در مقدار σ بر تعادل سیستم ذرات، در یک میدان سه بعدی پرداختند. آنها اجازه دادند تا سیستم در یک دمای مشخص به تعادل برسد. آنها σ را در دامنه ۱ تا ۸ مورد مطالعه قرار دادند. مشخص شد که هرچه مقدار عددی σ به عـدد ۱ نزدیکتر میشود، مدت زمان بیشتری طول می کشد تا سیستم به نقطه تعادل برسد. در حالی که هرچه ایان مقادار به عدد ۸ نزدیکتر میشود سیستم در دمایی متفاوت از دمای مورد نظر به تعادل میرسد. در حقیقت هرچه این مقدار بالاتر می رود، شبیه سازی کارایی خود را از دست می دهد. برپایه این پژوهش، گروت و وارن [۷۴] نشان دادند که مقدار عددی نزدیک به ۳ برای σ موجب افزایش سرعت و ثبات شبیه سازی میشود. شایان ذکر است همه این یافته ها تنها در مورد پارامترهای مطالعه شده در تحقیق ایشان میشود. شایان ذکر است همه این یافته ها تنها در مورد پارامترهای مطالعه شده در تحقیق ایشان

هر سه جزء نیروی موجود، از قانون سوم نیوتون پیروی میکنند. این بدین معناست که مومنتم سیستم ثابت نگه داشته میشود. پایستاری جرم نیز با توجه به ثابت ماندن تعداد ذرات به صورت بدیهی برقرار است. به همین جهت، انتظار داریم که روش DPD بتواند رفتار هیدرودینامیک را به خوبی به نمایش بگذارد.

۲-۲-۲ قضیه نوسان-استهلاک'

در این بخش گزاره نوسان⊣ستهلاک هنگام اعمال در روش دینامیک ذره استهلاکی تشریح میشود. به طور کوتاه، این گزاره موجب بوجود آمدن حالت تعادل بین نیروهای استهلاکی و تصادفی در روش DPD میگردد که یک سیستم همدما را ایجاد میکند.

همانطور که پیش از این بحث شد، اجزای استهلاکی و تصادفی در روش DPD لحاظ می-شوند تا خواصی مشابه تاثیرات لزجت و درجات آزادی از دست رفته به علت درشت بافت بودن ذرات

¹ Fluctuation-Dissipation theorem

را اعمال کند. بهدلیل وجود نیروهای تصادفی، دینامیک ذره استهلاکی با پدیده براونی رابطه نزدیکی دارد. حرکت براونی یک ذره بر اثر برخورد مولکولها و یا اتمهای سیال مجاور ایجاد میشود. به همین خاطر امکان تعیین مسیر دقیق یک چنین ذره ای میسر نخواهد شد. بدین ترتیب، بایـد بـرای تحلیـل حرکت ذرات بهجای استفاده از روشهای جبری به روشهای آماری متوسل شـد. ایـن گونـه روشهـا دارای یک پارامتر مخصوص برای اغتشاش هستند که به علـت برخوردهـای نامشخص مولکولهـای سیال با ذره ایجاد میشود. سپس با میانگین گیری از تکرار حرکت ذرات در موقعیـت مشـابه، مسـیر مورد استفاده قرار می مشخص میشود. به همین دلیل در ایـن روش مفهـوم چکـالی احتمـال^۱ رابئه میدهد. چگالی احتمال مشخص میشود. به همین دلیل در ایـن روش مفهـوم چکـالی احتمـال^۱ ارابئه میدهد. چگالی احتمال معمولا از حل معادلات مرسوم به فوکر ـپلانک به دسـت میآیـد. بط ور کلی، معادلات فوکر ـپلانک برای مطالعه سیستمهایی مورد استفاده قرار می گیرند که به لحاظ ماهیتی آماری بوده و در معرض نیروهایی قرار گرفته باشند که تعیین مقدارشان مقدور نباشـد. معـادلات یاد

اسپانول و وارن [۷۵] به مطالعه خصوصیات مکانیک آماری DPD پرداخته و اقدام به فرموله کردن معادله فوکر-پلانک برای این روش کردند. سپس از گزاره نوسان پراکنش برای بدست آوردن یک رابطه میان اندازه نیروهای اتلافی و تصادفی بهره گرفتند. مرحله استخراج معادلات از بست معادلات لانگوین^۲ در قالب معادلات اتفاقی^۳ آغاز گردید که به ترتیب زیر هستند:

$$\mathrm{d}\mathbf{r}_{\mathrm{i}} = \mathbf{v}_{\mathrm{i}}dt,\tag{9-7}$$

¹ Probability density

² Langevin equation $\frac{3}{2}$

³ Stochastic equation

$$\begin{aligned} \mathrm{d}\mathbf{v}_{\mathbf{i}} &= \left[\sum_{i\neq j} \mathbf{F}_{ij}^{\mathrm{C}}(r_{ij}) - \sum_{i\neq j} \gamma w_{D}(r_{ij}) (\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij}) \mathbf{e}_{ij}\right] dt \\ &+ \sum_{i\neq j} \sigma w_{R}(r_{ij}) \mathbf{e}_{ij} dW_{ij} \\ \mathrm{e}_{ij} dW_{ij} \end{aligned}$$
c. List is the set of the equation of t

$$dw_{ij} = \zeta_{ij} dt^{-1/2}$$

$$(1 - 1)$$

$$c_{ij} = \zeta_{ij} dt^{-1/2}$$

$$c_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{2} \frac{1}{2}$$

گروت و وارن [۷۴] برای وجود $dt^{-1/2}$ در معادله بالا توجیهاتی ارائه دادند که در ادامه خواهد آمد. همانطور که میدانیم نیروی تصادفی موجب حرکت براونی ذرات میشود. برای تحلیل ذره در زمان t، زمان را به N قسمت تقسیم شده و هر قسمت را با i نمایش داده میشود. اگر نیروی تصادفی R باشد، در این صورت مقدار میانگین نیروی تصادفی که بر روی ذره عمل میکند صفر خواهد بود، اما واریانس آن مقداری غیر صفر است. به عبارت دیگر:

$$\langle R_i \rangle = 0,$$

 $\langle R_i^2 \rangle = \sigma^2$
در اینجا σ^2 ، واریانس نیروی تصادفی بوده و فرض میشود که واریانس مسقل از گام زمانی
است. اکنون اگر فرض شود که ذره تنها در معرض نیروی تصادفی قرار گرفته باشـد میـزان تغییـر در
مومنتم در زمان *i* با انتگرال نیروی وارد بر این ذره در این زمان برابر خواهد بود. از آنجا که این تغییر
ممنتوم به جابجایی ذره مربوط میشود، میانگین مقدار مربع ایـن نیـرو مـی.بایـد بـه میـانگین مقـدار
جابجایی مربوط شود. به عبارت دیگر:

$$\langle D^2 \rangle = \langle \left(\int_0^t R(t') dt' \right)^2 \rangle = \langle \left(\sum_{i=1}^N R_i \right)^2 \left(\frac{t}{N} \right)^2 \rangle = \frac{\sigma^2 t^2}{N} = t\sigma^2 dt \qquad (17 - 7)$$

در اینجا D جابجایی ذره، R نیروی تصادفی، t زمان، N تعداد بازههای زمان و² واریانس میباشد. از معادله بالا میتوان دریافت که با افزایش تعداد بازههای زمانی، میانگین مربع جابجایی کاهش مییابد و با افزایش بازهها اندازهی این مقدار به صفر میل میکند.

این مسئله نشان میدهد که این فرضیه با مشکلاتی روبروست. پس اگر به جای واریانس ثابت، واریانس در عبارت $dt^{-1/2}$ ضرب شود، میانگین مربع جابجایی با افزایش بازهها به سـمت صفر میل نمی کند. بدین ترتیب، وجود جمله $dt^{-1/2}$ در معادله (۲– ۱۰) را میتوان توجیه کرد و با ایـن تفاسیر نیروی تصادفی (۲– ۷) را بدین صورت میتوان بیان نمود:

$$\mathbf{F}_{ij}^{R} = \sigma w_R(r_{ij}) \zeta_{ij} dt^{-1/2} \mathbf{e}_{ij}. \tag{17-7}$$

در نهایت اسپانول و وارن [۷۵] با استفاده از معادله فوکر-پلانک روابطه زیر را بدست آوردند: $w^{D}(r) = [w^{R}(r)]^{2}$

$$\gamma = \frac{\sigma^2}{2k_B T} \tag{14-7}$$

این عبارات معروف به قضیه نوسان-استهلاک برای یک سیستم DPD هستند و عملا بزرگی و توابع وزنی نیروهای استهلاکی و تصادفی را به یکدیگر مربوط میسازد. و به صورت یک ترموستات برای ثابت نگه داشتن دمای سیستم عمل میکند.

۲-۳ مدلسازی ذرات مغناطیسی

یک ذره مغناطیسی ایده آل کرهای است ساخته شده از آهن و یا سایر فلزات فرومغناطیسی با مرکز

دوقطبی و یک لایه پوششی (یا سورفکتنت) در اطراف آن که از لخته شدن و تهنشینی ذرات جلوگیری می کند [۷۶]. برای مدلسازی این ذرات از مدل مغناطش ذره استفاده شده است. در این معادلات قطر هسته جامد d_s ضخامت لایه پوششی δ و بطور کلی قطر هر ذره (d_s+2d) می باشد. انرژی پتانسیل بین ذرات i و $u_{ij}^{(m)}$ و بین ذرات و میدان مغناطیسی، $u_{ij}^{(H)}$ و تعامل انرژی در اثر همپوشانی لایه، $u_{ij}^{(V)}$ پوششی هست [۴۱].

$$u_{ij}^{(m)} = \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \{ \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j - 3(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{t}_{ij})(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{t}_{ij}) \}$$
(1Δ-7)

$$u_{ij}^{(H)} = -\mu_0 \boldsymbol{m}_i \cdot \mathbf{H} \tag{19-7}$$

$$u_{ij}^{(V)} = k_B T \lambda_V \left\{ 2 - \frac{\frac{2r_{ij}}{d_s}}{t_\delta} \ln\left(\frac{d}{r_{ij}}\right) - 2\frac{\frac{r_{ij}}{d_s} - 1}{t_\delta} \right\}$$
(1Y-Y)

که
$$\mu_0$$
 نفوذپذیری فضای خالی، \mathbf{m}_i گشتاور مغناطیسی ($|\mathbf{m}_i| = |\mathbf{m}_i|$)، t_{ij} بردار یک داده
شده در جهت مرکز دو ذره مغناطیسی، **H** میدان مغناطیسی اعمال شده و t_{δ} نسبت لایه پوششی بـه
شعاع قسمت جامد، که برابر است با $2\delta/d_s$. پارامتر بدون بعد λ_v بیانگر شدت برهم کنش بـین لایـه
پوششی و سایر ذرات نسبت به انرژی گرمایی است و بصورت $\lambda_v = \pi d_s^2 n_s/2$ بیان میشـود. n_s نیـز
تعداد مولکولهای سورفکتانت بر واحد سطح بر روی ذرات جامد است.

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{ij}^{(m)} &= -\frac{3\mu_0}{4\pi r_{ij}^4} \Big[-(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j) \mathbf{t}_{ij} + 5(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{t}_{ij}) (\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{t}_{ij}) \mathbf{t}_{ij} \\ &- \{ (\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{t}_{ij}) \mathbf{m}_i + (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{t}_{ij}) \mathbf{m}_j \} \Big] \end{aligned} \tag{14-7} \\ \mathbf{F}_{ij}^{(V)} &= \frac{k_B T \lambda_V}{\delta} \cdot \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}} \ln \left(\frac{d}{r_{ij}} \right) \qquad (d_s \leq d_{ij} \leq d) \end{aligned} \tag{19-7} \\ m_m \mathcal{M}_m \mathcal{M}_s \neq 1$$

وارد می شوند. علاوه بر این نیروها، نیرویی از طرف ذرات DPD نیز بر ذرات مغناطیسی اعمال می شود که در بخش بعدی توضیح داده خواهد شد.

DPD مدلسازی برهم کنش بین ذرات مغناطیسی و ذرات

در مطالعات پیشین برای مدلسازی ذرات معلق در سیال از دسته ذرات DPD استفاده شده است. آنها یک گروه از ذرات DPD را در کنار یکدیگر ثابت نگه داشته تا با آن رفتار ذرات کلوئیدی در تقابل با ذرات سیال را مدل کنند. آنها از معادلات معمول DPD استفاده کرده و در بعضی از شرایط حداکثر نیروی دافعه جدیدی را تعریف کردهاند.

در این تحقیق میبایست که ذرات دارای خاصیت دو قطبی مغناطیسی را مدلسازی نمود، به همین سبب باید روشی کارآمدتر از آنچه که در بالا ذکر شد استفاده \mathcal{Z} ردد. ساتو و چنترل [۴۱] دو مدل پتانسیل معمول را بهجای روشهای قدیمی پیشنهاد دادند. اولین طرح، سادهترین مدل ممکن، یعنی مدل کره سخت^۱ است که یک برخورد الاستیک کامل بین ذرات جامد و سیال را اعمال می کند. دومین پیشنهاد ،پتانسیل لنارد-جونز که در جهت خط مرکزی هر ذره مغناطیسی و سیال اعمال می-شود. پیشنهاد دوم روشی منطقی تر و واقعی تر است و به نسبت مدل کره سخت دارای رفتاری نیرم تر میباشد. انرژی برهم کنش بین ذره سیال q و ذره مغناطیسی i به صورت زیر تعریف می شود، بین

$$u_{ip} = 4\varepsilon \left\{ \left(\frac{d_c}{r_{ip}}\right)^n - \left(\frac{d_c}{r_{ip}}\right)^n \right\}$$
در اینجا *z* یک عدد ثابت و بیانگر شدت برهم کنش است. *r_{ip}* اندازه فاصله بین ذره سیال *p* و
ذره مغناطیسی *i* میباشد. چندین انتخاب بـرای (m,n) وجـود دارد، بـرای مثـال (۱۲،۶), (۱۸،۴) و ...،
ساتو و چنترل [۴۱] در این باره بحث کرده و در نهایت (۱۲،۶) را پیشنهاد دادنـد. کـه ایـن پیشـنهاد
یادآور پتانسیل معروف لنارد-جونر(۱۲،۶) است.

¹ Hard sphere model

از گرادیان معادله انرژی برهمکنش (۲ – ۲۰)، نیروی جفتی اعمال شده برروی ذره مایع p و ذره منابع i و ذره مغناطیسی i بدست میآید، $\mathbf{F}_{ip}^{(int)}$:

$$\mathbf{F}_{ip}^{(int)} = 4n\varepsilon \left\{ \frac{m}{n} \left(\frac{d_c}{r_{ip}} \right)^m - \left(\frac{d_c}{r_{ip}} \right)^n \right\} \frac{\mathbf{e}_{ip}}{r_{ip}} \tag{(1-7)}$$

۵-۲ روشهای یکپارچهسازی معادلات:

در بخش قبل معادلات حاکم بر دینامیک ذره استهلاکی استاندارد و همچنین معادلات لازم برای مدلسازی ذرات مغناطیسی بیان شد. حال برای حل این معادلات نیاز به یکپارچه ساختن آنها در امتداد زمان هست تا مکان و سرعت ذرات در هر گام زمانی بدست آید. در ادامه چندین روش یکپارچهسازی را بیان کرده و درباره محاسن و معایب آنها بحث می شود.

در این روش حرکت تمامی ذرات تحت قانون دوم نیوتون صورت می گیرد، و ما بایـد آنهـا را یکپارچه کنیم:

$$\frac{d\mathbf{r}_{i}}{dt} = \mathbf{v}_{i}, \qquad m \frac{d\mathbf{v}_{i}}{dt} = \mathbf{f}_{i}, \tag{(YY - Y)}$$
$$m \frac{d\mathbf{v}_{i}}{dt} = \mathbf{f}_{i} = \mathbf{f}_{i}^{\text{int}} + \mathbf{f}_{i}^{\text{ext}}, \tag{(YY - Y)}$$

 m_m در اینجا m جرم ذره است که برای ذرات DPD از m_d و برای جرم ذرات مغناطیسی از m_m استفاده می شود. f_i^{ext} نیروی کل، f_i^{int} نیروی حاصل از برهمکنش ذرات و f_i^{ext} نیروی خارجی است که بر ذره i ام وارد می شود.

¹ Inregration methods

۲–۵–۱ روش اویلر^۱

سادهترین روش یکپارچهسازی روش اویلر است که برای اولین بار هوگربراگ و کوئلمن [۴۲] برای یکپارچه سازی معادلات دینامیک ذره استهلاکی از آن استفاده کردند. بطوریکه مکان و سرعت ذرات در زمان $t + \Delta t$ بدست میآید.

$$\mathbf{r}_{i}(t + \Delta t) = \mathbf{r}_{i}(t) + \Delta t \mathbf{v}_{i}(t)$$
((1) ((1) - 1))

$$\mathbf{v}_{\mathbf{i}}(t + \Delta t) = \mathbf{v}_{\mathbf{i}}(t) + \Delta t \mathbf{f}_{\mathbf{i}}(t)$$
(Ya - Y)

نیرو در گام $t+ extsf{d} t$ با استفاده از مکان و سرعتی که از معادلات بالا بدست آمدهاند، محاسـبه

مىشود:

۲-۵-۲ الگوريتم ورله

روشی دیگر الگوریتم ورله است. این روش فقط از مکان ذرات در گام زمانی جدید برای محاسبه نیرو-های بین ذرهای استفاده می کند. همچنین برای محاسبه مکان در زمان $t + \Delta t$ از مکان در زمانهای $t = \Delta t$ بهره می برد.

¹ Euler's method

² Verlet algorithm

$$\mathbf{r}_{\mathbf{i}}(t + \Delta t) = 2\mathbf{r}_{\mathbf{i}}(t) + \mathbf{r}_{\mathbf{i}}(t - \Delta t) + \frac{1}{m}(\Delta t)^{2}\mathbf{f}_{\mathbf{i}}(t)$$
(YV-Y)
$$\mathbf{f}_{\mathbf{i}}(t + \Delta t) = \mathbf{f}_{i}(\mathbf{r}_{\mathbf{i}}(t + \Delta t))$$
(YA-Y)
$$\mathbf{f}_{\mathbf{i}}(t - \Delta t) = \mathbf{f}_{i}(\mathbf{r}_{\mathbf{i}}(t + \Delta t))$$
(YA-Y)
$$\mathbf{f}_{\mathbf{i}}(t - \Delta t) = \mathbf{f}_{i}(\mathbf{r}_{\mathbf{i}}(t + \Delta t))$$
(YA-Y)

در این طرح سرعت محاسبه نمی شود و نیرو فقط تابع مکان است. به همین دلیل، ایـن روش برای مدلسازی DPD که سرعت در تعین نیروها حیاتی است، مناسب نمی باشد.

۲-۵-۲ الگوریتم سرعت-ورله'

روش سرعت-ورله یک بسط از الگوریتم ورله است که برای پیشبینی سرعت ذرات در مکان جدیـد از سرعت در زمان t و نیروهای محاسبه شده استفاده می کند. برای محاسبه نیروها فقط از مکان جدید استفاده می کند و به دلیل وابسته نبودن نیروها به سرعت، همانند روش الگوریتم ورله برای مدلسازی DPD مناسب نمی باشد.

$$\mathbf{r}_{\mathbf{i}}(t + \Delta t) = \mathbf{r}_{\mathbf{i}}(t) + \Delta t \mathbf{v}_{\mathbf{i}}(t) + \frac{1}{2} (\Delta t)^2 \frac{1}{m} \mathbf{f}_{\mathbf{i}}(t)$$
(Y9-Y)

$$\mathbf{f}_{\mathbf{i}}(t + \Delta t) = \mathbf{f}_{\mathbf{i}}(\mathbf{r}_{\mathbf{i}}(t + \Delta t)) \tag{(\mathcal{v} - \mathcal{v})}$$

$$\mathbf{v}_{\mathbf{i}}(t + \Delta t) = \mathbf{v}_{\mathbf{i}}(t) + \frac{1}{2}\Delta t \frac{1}{m} [\mathbf{f}_{\mathbf{i}}(t) + \mathbf{f}_{i}(t + \Delta t)]$$
(٣١-٢)

DPD الگوریتم سرعت–ورله اصلاح شده⁷ برای $F = 0^{-5}$

گروت و وارن [۷۴] با ایجاد تغییرات در الگوریتم سرعت-ورله روش جدیدی را برای یکپارچهسازی معادلات DPD ارائه دادند که الگوریتم سرعت-ورله اصلاح شده نام گرفت. آنها با افزودن یک مرحله

¹ Velocity-Verlet Algorithm ² Modified Velocity-Verlet

برای پیش بینی سرعت و استفاده از سرعت پیش بینی شده در محاسبه نیروها روشی کار آمد برای محاسبه معادلات DPD در امتداد زمان بدست آوردند. محاسبه سرعت در دو مرحله نتایج دقیق تری را از این متغیر بدست می دهد که در نتیجه دقت محاسبه نیروها و سایر متغیرها را در پی دارد. در ادامه معادلات حاکم بر این روش را ملاحظه می کنید:

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + \Delta t v_i(t) + \frac{1}{2} (\Delta t)^2 \frac{1}{m} f_i(t)$$
(\mathcal{T} - \mathcal{T})

$$\widetilde{v}_i(t + \Delta t) = v_i(t) + \lambda \frac{1}{m} f_i(t)$$
(٣٣ -٢)

$$f_i(t + \Delta t) = f_i(r_i(t + \Delta t), \widetilde{\nu}_i(t + \Delta t))$$
(3.14)

$$v_i(t + \Delta t) = v_i(t) + \frac{1}{2}\Delta t \frac{1}{m} [f_i(t) + f_i(t + \Delta t)]$$
(radius)

در معادله (۲– ۳۳) Λ یک متغیر تجربی است که گروت و وارن [۷۴] در پرژوهش خود به مقدار بهینه ۰٫۶۵ برای آن دست یافتند. این مقدار بالاترین گام زمانی ممکن با حفظ دقت مورد قبول را برای آنها بدست آورد. اگر 0.5 = Λ باشد، الگوریتم مشابه الگوریتم سرعت-ورله استاندارد میشود. در الگوریتم بالا \tilde{y} سرعت تخمین زده شده برای محاسبه نیروهاست. سرعتهای نهایی در انتهای الگوریتم محاسبه می گردند. اگر نیروی تصادفی و اتلافی وجود نداشت این الگوریتم در 0.5 = Λ دقیقا دقتی از مرتبه دوم می داشت، اما به دلیل طبیعت اتفاقی این فرآیند، مرتبه الگوریتم ناواضح است. خواص سیستم مانند دما و سرعتهای میدانی در آخرین مرحله الگوریتم محاسبه می شوند. روشهای

در این بخش چندین نمونه از روشهای یکپارچهسازی معرفی شد، روشهای دیگری نیز برای این امر وجود دارند. اما بدلیل دقت مناسب و هزینه محاسباتی پایین الگوریتم سرعت-ورله اصلاح شده از مقبولیت خوبی برخوردار است. در این تحقیق نیز از این الگوریتم محاسبه شده است.

فصل سوم:

روشهای کاربردی در دینامیک ذره استهلاکی

۱-۳ پیشگفتار

شبیهسازی هر مسئلهای علاوه بر یک روش نظاممند نیاز به شرایط اولیه و مرزی منطبق با فیزیک مسئله دارد. همچنین بدست آوردن خواص در روشهای ذرهای مانند DPD خود نیازمند روشهای دیگری است که در این فصل مرور میشوند. همچنین به دلیل بالا بودن هزینه یمحاسباتی روشهای ذرهای شیوههایی کارآمد برای پایین آوردن هزینههای محاسباتی ابداع شده است که در انتهای این فصل به آنها پرداخته خواهد شد.

۲-۳ شرایط اولیه

۳-۲-۲ مکان اولیه

ذرات موجود در شبیه سازی را می توان بصورت تصادفی در محیط محاسباتی قرار داد که البته باید مواظب همپوشانی غیر فیزیکی آن ها بود. روش های منظمی نیز برای قرار دادن ذرات وجود دارد که می توان از شبکه مکعبی ساده'، شبکه مکعبی مرکز -صفحه^۲ و شبکه مکعبی مرکز -جسم^۳ نام برد. این ساختار های سهبعدی را می توان برای حالت دوبعدی نیز به کار برد [۳۹].

در این مدلسازی برای شرایط اولیه ذرات سیال (ذرات DPD) از چیدمان تصادفی استفاده شده است اما جهت رفع مشکل همپوشانی زمان مناسب برای به تعادل رسیدن سیستم در نظر گرفته شده است. بدلیل وجود دافعه نرم در روش DPD همپوشانی ذرات موجب واگرا شدن سیستم نمیشود و ذرات به آرامی از یکدیگر فاصله گرفته و در مکان مناسب قرار می گیرند.

اما برای تعیین مکان اولیه ذرات مغناطیسی با توجه به شرایط مسئله از شبکه مکعبی ساده

¹ Simple cubic lattice

² Face-centered cubic lattice

³ Body-centered cubic lattice

استفاده شده است. همانطور که در شکل۳– ۱ مشاهده می شود، در این ساختار ذرات با فاصله 'a' از یکدیگر جدا شدهاند. برای یک سیستم با N ذره، تعداد ذرات می بایست برابر مربع یک عدد طبیعی باشد-مانند:۱و۴و۹و... .چگالی عددی ذرات با تقسیم تعداد ذرات بر مساحت ناحیه محاسباتی بدست می آید.



شکل۳- ۱- ساختار شبکه مکعبی ساده [۳۹]

۲-۲-۳ سرعت اولیه

سرعت اولیه ذرات سیال و ذرات مغناطیسی به صورت تصادفی و با استفاده از توزیع ماکسولی^۱ تعین می شود. این توزیع، سرعت را با متوسط صفر ارائه می دهد و یک سیستم با دمای ثابت T بوجود می -آورد [۳۹]:

$$g(\mathbf{v}_i) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} exp\left\{-\frac{m}{2k_B T}\left(v_{ix}^2 + v_{iy}^2 + v_{iz}^2\right)\right\}$$
(1- \mathbf{v})

g در اینجا $\mathbf{v_i} = \left(v_{ix}, v_{iy}, v_{iz}
ight)$ جرم هر ذره، m جرم $\mathbf{v_i}$ بردار سرعت و k_B

¹ Maxwellian distribution

تابع توزیع چگالی احتمال سرعت ذره i است. در شکل۳-۲ این تابع توزیع برای دو دمای متفاوت رسم شده است.



شکل۳- ۲- توزیع سرعت در حالت تعادلی [۳۹]

با توجه به نوع سیستم میتوان از چندین روش برای اعمال شرایط مرزی بر ناحیه محاسباتی و بدست آوردن خواص فیزیکی سیستم استفاده کرد.

۳-۲-۳ شرط مرزی پریودیک'

یک سیستم به اندازه یک مول، شامل ۲^{۳۳} ۲۰×۶ ذره است. اما خوشبختانه برای مدلسازی این سیستم نیاز به شبیه سازی رفتار تمام این ذرات نیست (در حقیقت این امری غیر ممکن است). استفاده از شرط مرزی پریودیک این امکان را فراهم می سازد تا با یک سیستم نسبتا کوچک شامل ۱۰۰ تا ۱۰۰۰۰ ذره، نتایج منطقی و با دقت مناسب از شبیه سازی بدست آورد. این روش تنها محدود به DPD نبوده و برای سایر روش های ذره ای مانند دینامیک مولکولی نیز کاربرد دارد.

¹ Periodic boundary condition

شکل۳– ۳ بصورت شماتیکی مفهوم شرط مرزی پریودیک را برای یک سیستم دو بعدی نشان میدهد. مربع وسط ناحیه شبیهسازی و مربعهای اطراف نواحی شبیهسازی مجازی هستند. که با تکرار ناحیه شبیهسازی اصلی بوجود آمدهاند. در استفاده از شرط مرزی پریودیک دو روش خاص نیاز است، اولین مورد برخورد با ذراتی که از مرز ناحیه محاسباتی اصلی خارج می شوند و دومی محاسبه برهم کنش انرژی و یا نیروها با ذرات مجازی که در نواحی محاسباتی اطراف قرار دارند.





همانطور که در شکل۳-۳ می بینید یک ذره که از مرز سمت چپ خارج می شود باید از ناحیه مجازی سمت راست وارد شود. این رفتار را می توان با کد متلب ^۱ زیر بیان کرد:

if $r(i,1) \ge Lx$

r(i,1)=r(i,1)-Lx;

¹ MATLAB®

elseif $r(i,1) \le 0$

$$r(i,1) = r(i,1) + Lx;$$

end

این کد برای حالتی است که مبدا مختصات بر روی منتهی الیه پایین سمت چپ ناحیه محاسباتی واقع شده باشد و r(i,1) موقعیت x ذره *i*ام باشد. این کد برای جهتهای دیگر نیز قابل اعمال می باشد.

البته در این مدلسازی برای بالا بردن سرعت محاسباتی از روش ماتریسی زیر استفاده شده است:

r(:,1)=r(:,1)-(r(:,1)>Lx)*(Lx)+(r(:,1)<0)*(Lx);

با اجتناب از حلقه ها و استفاده از معادلات ماتریسی در متلب می توان زمان محاسبات را کاهش داد و سرعت اجرای کد را بالا برد.

علت آنکه شرط مرزی پریودیک در روش DPD قابل اعمال میباشد این حقیقت است که DPD دارای نیروهایی با دامنه اثر محدود است. برای شبیه سازی سیستمهایی که اندازه آنها دو برابر شعاع قطع نیروها بیشتر میباشد شرط حداقل تصویر ⁽، قابل اعمال است [۷۷]. شرط حداقل تصویر بدین گونه است که هر ذره موجود در دامنه حل تنها با نزدیکترین تصویر سایر ذرات موجود در دامنه حل برهم کنش نشان میدهد. کد مطلب این شرط بصورت زیر است:

if diffr(i,1) > Lx/2

diffr(i,1)=diffr(i,1)-Lx;

elseif diffr(i,1) < (-Lx/2)

diffr(i,1)=Lx - abs(diffr(i,1));

¹ Minimum image

در اینجا (i,1) فاصله مرکز به مرکز ذره i تا ذره j است.

۳–۲–۴ شرط مرزی لیز –ادواردز

شرط مرزی پریودیک برای شبیهسازی مولکولی سیستمهایی در تعادل ترمودینامیکی کاملا مناسب میباشد، اما این شرط مرزی برای وضعیت غیرتعادلی کارآمد نیست. در بررسی خواص دینامیکی یک سیستم غیرتعادلی، اساسیترین و مهمترین جریان، جریان برشی ساده است. همانطور که در شکل۳-۴ مشاهده میشود، پروفیل سرعت با استفاده از حرکت سطوح در طرفین ناحیه محاسباتی ایجاد می-شود. صفحه سمت راست با سرعت U و صفحه سمت چپ با همین سرعت در خلاف جهت حرکت کرده و برش را بر سیال اعمال میکنند.



شکل۳-۴-جریان برشی ساده [۳۹]

برای ایجاد جریان برشی ساده در یک شبیهسازی مولکولی واقعی، نواحی مجازی تکرار شده در اطراف ناحیه محاسباتی اصلی در خلاف جهت یکدیگر و با سرعت ثابت معین شدهای بـه حرکـت درمیآیند. به این شرط مرزی پریودیک برشی، "شرط مرزی لیز-ادواردز" گفته میشود [۷۸] . شکل۳- ۵ مفهوم این شرط مرزی را بصورت شماتیکی نشان میدهد. نواحی تکراری طرفین در جهت خودشان با فاصله ΔY نسبت به ناحیه اصلی میلغزند. اگر ذرهای از مرزهای عمودی ناحیه شبیهسازی خارج شوند از مرز دیگر در سمت مقابل وارد میشوند و این فرایند دقیقا مشابه شرط مرزی پریودیک است. مهمترین بخش شرط مرزی لیز-ادواردز عبور ذرات از مرزهای عمودی و یا همان دیوارهای متحرک است. تعیین مولفه X ذرات خروجی از دیوارههای متحرک براساس همان شرط مرزی پریودیک صورت میگیرد، اما مولفه Y ذره نمونه شکل۳- ۵ باید از Y به (ΔY) تغییر کند. علاوه بر این، مولفه Y سرعت راید به (U-y) تغییر کند اما x نیاز به اصلاح ندارد. فرایند گفته شده در بالا بصورت کد متلب در ادامه میآید:

if $r(i,1) \ge Lx$ r(i,2) = r(i,2) - delY;if r(i,2) <= 0 r(i,2) = r(i,2) + Ly;end

chu

$$v(i,2) = v(i,2)-U;$$

elseif $r(i,1) \le 0$

r(i,2)=r(i,2)+delY;

if $r(i,2) \Rightarrow Ly$

$$r(i,2) = r(i,2)-Ly;$$

end

$$v(i,2) = v(i,2) + U;$$

end

همچنین می توان از روش ماتریسی برای بالابردن سرعت محاسباتی در متلب استفاده کرد: u(:,2)=u(:,2)-((r(:,1)>.Lx)*(U))+((r(:,1)<0);

r(:,2)=r(:,2)-(r(:,1)>Lx)*(delY)+(r(:,1)<0)*(delY);

r(:,2)=r(:,2)-(r(:,2)>Ly)*(Ly)+(r(:,2)<0)*(Ly);

سایر جهتهای مختصات طبق شرط مرزی پریودیک رفتار کرده و نیازی به اصلاح سرعت ندارند.



شکل۳- ۵- شرط مرزی لیز-ادواردز [۳۹]

۳-۲-۳ شرط مرزی جریان پوازیه پریودیک

یکی از حالتهای غیر تعادلی در مطالعه سیالات، جریان از میان دو صفحه موازی و ثابت یا همان جریان پوازیه است. در روش DPD راههای متفاوتی برای اعمال این شرط مرزی وجود دارد که می-توان آنها را به دو دسته بدون دیواره و دارای دیواره تقسیم کرد. بِیکر ^۱ و همکارانش [۲۹] با استفاده از روشی هوشمندانه توانستند بدون استفاده از دیواره شرط مرزی پوازیه را با دقت خوبی مدلسازی کنند. آنها محیط محاسباتی را به دوقسمت مساوی تقسیم کرده و دو نیروی برابر اما در خلاف جهت یکدیگر به سیال وارد ساختند. با این کار توانستند دو جریان پوازیه در کنار یکدیگر ایجاد کنند. شماتیک این طرح را میتوان در شکل۳- ۶ مشاهده کرد.



شکل۳- ۶- شرط مرزی جریان پوازیه پریودیک [۷۹]

کاربرد اصلی این روش در بدست آوردن لزجت سیالات نیوتنی و یکنواخت است که در آینده درباره آن توضیح داده خواهد شد. در ضمن میتوان با ترکیب این روش با شرط مرزی لیز ادواردز حالت ترکیبی را نیز برای سیال مدلسازی کرد.

۳-۳ محاسبه خواص سیال

اغلب روشهای عددی در مقیاس ماکرو و مزو برای شبیهسازی نیازمند دریافت خواص سیال مورد مطالعه نظیر معادله حالت، لزجت، دما و رسانایی حرارتی در ورودی برنامه هستند. اما روش DPD در علاوه بر نمایش جزئیات قابلیت ارائه این خواص را در خروجی دارد. ویژگی که میتواند ایس روش را

¹ Backer

بهعنوان یک مکمل برای پژوهشهای آزمایشگاهی مطرح کند.

شاید مورد توجهترین خاصیت در میان سیالات لزجت باشد که در روش دینامیک ذره استهلاکی چندین شیوه برای محاسبه آن وجود دارد. بطور کلی این روشها را میتوان به دو دسته تقسیمبندی کرد. دسته اول با استفاده از تعریف میکروسکوپی تنش^۱ و دسته دوم روش برازش عددی^۲ که در ادامه به توضیح آنها پرداخته میشود [۸۰].

۳-۳-۱ تعریف میکروسکوپی تنش

در دسته اول با داشتن نیروهای بین ذرات و سرعت هرکدام از آنها میتوان تانسور تنش یک سیستم DPD را بدست آورد. در ابتدا ناحیه محاسباتی را تقسیم بندی کرده و داده های هر قسمت در یک بسته جمع آوری می شود. در این حالت تانسور تنش با استفاده از رابط ه ایروین گ^۳ - کرکود^۴ [۸۱] محاسبه می گردد:

$$\mathbf{S} = -\frac{1}{V} \langle \sum_{i} m \mathbf{u}_{i} \mathbf{u}_{i} + \sum_{i} \sum_{j>i} \mathbf{r}_{ij} \mathbf{F}_{ij} \rangle \tag{(7-7)}$$

 V_i که در آن u_i سرعت ویژه ذره *i* ام است و به صورت (\mathbf{r}_i – $\mathbf{u}(\mathbf{r}_i)$ تعریف میشود، \mathbf{u}_i در آن i سرعت ذره *i* و (\mathbf{r}_i) سرعت ذره *i* و (\mathbf{r}_i) سرعت ذره *i* و (\mathbf{r}_i) سرعت ذره میان در موقعیت \mathbf{r}_i است. \mathbf{r}_i نیروی برهم کنش میان ذرات *i e j* می-باشد. براکت شکسته (...) در معادله (\mathbf{r} – \mathbf{r}) نشان دهنده میانگین مجموعه در طول زمان است. اولین جمله موجود در سمت راست این معادله معرف سهم تنش ذرات از طریق انتقال مومنتم بوده و دومین جمله معرف نیروهای بین ذره ای است. اگر ذره *i* یک عنصر از یک جزء پیچیده سیال باشد، مقدار نیروی کل موجود در دومین جمله سمت راست معادله باید شامل نیروهای قیدی نیـز باشد. فشـار

¹ Microscopic definition of stress

² Numerical fitting procedure

³ Irving

⁴ Kirkwood

متشکله میتواند از طریق اثر ^۱ تانسور تنش محاسبه شود:

$$p = -\frac{1}{3}tr(\mathbf{S}) \tag{(7-7)}$$

همچنین لزجت برشی سیال با تقسیم مولفه S_{12} تانسور تنش به نرخ برش بدست میآید:

$$\eta = \frac{S_{12}}{\dot{\gamma}} \tag{(f-\tilde{\gamma})}$$

از دیگر خواصی که با استفاده از این روش به دست میآید میتوان اختلاف تنش نرمال اول (N_1) و اختلاف تنش نرمال دوم (N_2) را نام برد:

$$N_1(\dot{\gamma}) = S_{11} - S_{22} \tag{(a - 7)}$$

$$N_2(\dot{\gamma}) = S_{22} - S_{33} \tag{(7-7)}$$

$$\eta = \frac{45k_BT}{4\pi\gamma} + \frac{2\pi\rho^2\gamma}{1575} \tag{(Y-T)}$$

این معادله برای یک سیال DPD بدون درنظر گرفتن نیروی پایستار بدست آمده که با این فرض سیال را به یک سیال تراکم پذیر تبدیل کرده است و با ماده مورد مطالعه تحقیق حاضر متفاوت

¹ Trace

² First normal stress difference

³ Second normal stress difference
میباشد، اما میتوان به کمک این معادله تاثیر نسبی متغیرهای متفاوت بر لزجت سیال را سنجید [۸۰]. جمله اول در سمت راست معادله (۳– ۲) نشان از تاثیر دما بر لزجت داشته بگونهای که افزایش دما افزایش لزجت را نیز در پی دارد و این مشخصه یادآور ارتباط دما با لزجت گازها میباشد. اما با افزایش پارامتر استهلاکی γ جمله دوم سمت راست معادله نقش اساسی در تعیین لزجت سیال ایفا خواهد کرد. همچنین افزایش چگالی عددی *م* ذرات DPD تاثیر زیادی بر روی لزجت این سیال خواهد داشت. بخش دوم معادله به ویسکوزیته مایعات مرتبط است.

۳-۳-۲ روش برازش عددی

در حالی که اندازه گیری تنش یک راه مرسوم برای بدست آوردن لزجت در شبیهسازی های دینامیک مولکولی به حساب می آید، برازش عددی نیز روش دیگری برای تحقق این امر است. یکی از این روش های برازش عددی، جریان پوازیه پریودیک است. همانطور که در بخش ۳–۲–۵ بیان شد بِیکر و همکارانش [۸۳] با ارائه روش جریان پوازیه پریودیک این نوع از جریان را به وجود آوردند. آن ها با انطباق پروفیل سرعت بدست آمده از مدل سازی DPD و نتایج حل تحلیلی معادلات ناویر است. اما لزجت سیال لزجت سیال لزجت سیال وست. این روش موا برای سرعت بدست آمده از مدل سازی DPD و نتایج حل تحلیلی معادلات ناویر است. اما لزجت سیال DPD را بدست آوردند. این روش نسبت به روشهای دیگر دارای دقت بالایی است. اما لزجت سیال DPD را بدست آوردند. این روش سرفا برای سیالاتی با رفتار نیوتنی و ساختاری یکنواخت کاربرد دارد. از این رو نمی توان از این روش در مدل سازی پیشرو بهرمند شد. به همین دلیل از همان تعریف میکروسکوپی تنش در پژوهش در مدل سازی است. است.

۴-۳ روشهای کاهش زمان محاسباتی

زمان محاسباتی یک عامل مهم در موفقیت یک شبیهسازی دینامیک مولکولی محسوب می شود. در بعضی از موارد بدلیل هزینه بر بودن شبیهسازی، سیستم در ابعاد کوچک و دوبعدی مدلسازی می- شود. در روشهای دینامیک مولکولی بیشترین زمان برای محاسبه نیروهای برهم کنش بین ذرات صرف می شود. برای یک سیستم دارای *N* ذره در هر گام زمانی نیاز به 2/(*I-N*) محاسبه لازم است. بنابراین درصورت کاهش تعاملات جفتی بین ذرات، زمان محاسبات کاهش چشمگیری خواهد داشت. خوشبختانه پتانسیلهای بین ذرهای زیادی وجود دارند که دارای برد کوتاه هستند، که با دور شدن دو ذره از یکدیگر فقط به اندازه چند برابر قطر آنها، برهمکنش بین ذرات کاهش چشمگیری خواهد داشت. داشت. این روشها برای نیروهای بردبلند مانند نیروی مغناطیسی و نیروی الکتروستاتیک قابل

۳-۴-۲ فاصله برش

یک مفهوم مهم در روش شبیه سازی، تعیین یک محدوده مشخص برای محاسبه برهمکنش انرژی یا نیروهای بین ذرات برای کاهش زمان شبیه سازی است. برای درک بهتر این مفهوم می توان از برهم-کنش بین ذرات و یا منحنی های پتانسیل استفاده کرد. برای مثال پتانسیل لنارد - جونز به این صورت بیان می شود:

$$U_{LJ} = 4\varepsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right\}$$
 (A - \mathcal{V})

در این رابطه σ قطر ذره، و r فاصله بین ذرات است. شکل ۲ – ۷ منحنی پتانسیل لنارد – جونز را نشان میدهد که U_{LJ} و r با استفاده از z و σ بیبعد شدهاند. این منحنی در فاصله $\sigma > r$ یک شیب تند را نشان میدهد که حاکی از نیروی دافعه قوی بین ذرات در این فاصله است و مانع همپوشانی آنها با یکدیگر میشود. همچنین نیروی جاذبه بین ذرات در دامنه $\sigma < r$ وجود دارد اما به سرعت کاهش مییابد. این منحنی پتانسیل نشان میدهد که میتوان از برهمکنش انرژی بعد از فاصله $T = 3\sigma$

¹ Cutoff Distance

و می توان این فاصله را فاصله برش d_c یا همان شعاع برش r_{coff} برای محاسبه این نیرو در نظر گرفت، DPD که در این پژوهش نیز اینگونه بوده است. در مورد نیروهای DPD فاصله برش مطابق روش dp می استاندارد برابر واحد در نظر گرفته شده و تمام طولها در این شبیه سازی بر واحد فاصله برش d_c می باشند.



شکل۳-۷- پتانسیل لنارد-جونز [۳۹]

اما باید توجه داشت که تعریف شعاع برش به تنهایی کاهش چشم گیری در هزینه محاسباتی ایجاد نخواهد کرد، زیرا باز هم باید N(N-1)/2 محاسبه به منظور بدست آوردن فاصله بین ذرات انجام داد. بنابراین روش شاخص سلول و یا روش لیست همسایگی ورله که در ادامه خواهد آمد در کنار روش فاصله برش برای کاهش زمان محاسباتی استفاده خواهد شد.

۲-۴-۳ روش شاخص سلول'

اگر بتوان با استفاده از روشی نام هر ذره که در محدوده برش ذرهای دیگر قرار دارد را بدست آورد، دیگر نیازی به محاسبه فاصله بین ذرات در تمام گامهای نیست. چندین روش برای دستیابی به نام

¹ Cell index method

ذرات ابداع شده است که در ابتدا روش شاخص سلولی در این بخش معرفی می شود. همانطور که در شکل ۳– ۸ مشاهده می شود، ناحیه محاسباتی دو بعدی با ابعاد (L_x,L_y) به (Q_x,Q_y) قسمت در هر شکل ۳– ۸ مشاهده می شود. ناحیه محاسباتی دو بعدی با ابعاد (L_x,L_y) به (Q_x,Q_y) قسمت در هر جهت تقسیم بندی می شود. هر سلول کوچک دارای ابعاد ($Q_x, Q_x / Q_x / Q_x / Q_x)$) می باشد که باید از شرط جهت تقسیم بندی می شود. هر سلول کوچک دارای ابعاد ($Q_x, Q_y / Q_x / Q_x / Q_x / Q_x)$) می باشد که باید از شرط جهت تقسیم بندی می شود. هر سلول کوچک دارای ابعاد ($Q_x, Q_y / Q_x / Q_x / Q_x / Q_x)$ می باشد که باید از شرط در d_c اید ($Q_x / Q_x > Q_x / Q_x$) می باشد که باید در شرط در d_c اید ($Q_x / Q_x > Q_x / Q_x > Q_x > Q_x$) می باند در ات در آن برای مثال سلول ۱۵ م در شکل ۳– ۸، فقط با سلول های همسایه در ارت است، ذرات قرار گرفته در آن، برای مثال سلول ۱۵ م در شکل ۳– ۸، فقط با سلول های همسایه در ار تباط است، که در اینجا سلول های ۸م، ۱۹م، ۱۹م، ۱۴م، ۱۶ م، ۱۰م، و ۲۲ مه هستند. ذرات دیگر سلول ها دور تر از ناحیه برش خواهند بود و دیگر نیازی به محاسبه فاصله بین آن ذرات نخواهد بود. در این روش باید ذرات متعلق به هر سلول را به حافظه سپرد. در این شبیه سازی از این روش برای بالا بردن سرعت محاسبات استفاده شده است. روش شاخص سلولی برای برنامه نویسی به سبک پردازش بردن سرعت محاسبات استفاده شده است. روش شاخص سلولی برای برنامه نویسی به سبک پردازش موازی مناسب نیز مناسب گزینه مناسبی می باشد که می توان هر بخش از ناحیه محاسباتی را به یک هم توان هر بخش از ناحیه محاسباتی را به یک هم توان هر بخش از ناحیه محاسباتی را به یک مرداز می می مرد در این شبیه می برای بر داز می بردان سرحای محاسبات استفاده شده است. روش شاخص می والی برای برنامه نویسی به سبک پر دازش

L _y	31	32	33	34	35	36	
	25	26	27	28	29	30	
	19	20	21	22	23	24	
	13	14	15	16	17	18	
	7	8	9	10	11	12	
	, 1	2	3	4	5	6	
·	L_x						

شکل۳- ۸- روش شاخص سلول برای بدست آوردن همسایگی ذرات [۳۹]

۳-۴-۳ روش فهرست همسایگی ورله'

در روش فهرست همسایگی ورله، یک فاصله *r* که بلندتر از شعاع برش *r*_{coff} است، تعیین میشود، و هر ذره نام ذراتی را که در این ناحیه قرار دارند نگه میدارد. روشن است که ذرات درون دامنه *r r*_{coff} مطمئنا درون ناحیه *r r r* قرار دارند و دیگر نیازی به محاسبه فاصله بین ذرات برای تمامی گامهای زمانی نیست. بنابراین اگر لیست همسایگی ذرات بصورت دورهای (برای مثال هر ۱۰ گام زمانی) بهروز شود. حجم قابل توجهی از محاسبات کاسته شده و زمان آن کاهش مییابد. باید توجه داشت شعاع فهرست همسایگی به اندازه کافی بزرگ بوده و همچنین فاصله بین بهروز رسانیها زیاد نباشد زیرا که باعث ایجاد خطا در محاسبات میشود. این روش برای دینامیک مولکولی و دینامیک ذره استهلاکی قابل استفاده است.



شکل۳- ۹- روش لیست همسایگی ورله [۳۹]

¹ Verlet neighbor list method

فصل چهارم:

نتايج و بحث

۱-۴ مدلسازی

همانطور که بیان شد هدف از این پژوهش بررسی رفتار سیال مگنورئولوژیکال با استفاده از روش دینامیک ذره استهلاکی است. در ابتدا نتایج شبیهسازی این سیال تحت برش و در حالت دوبعدی ارائه میشود که این امر بر اساس پروپوزال مصوب تحقق یافته است. سپس این پژوهش فراتر رفته و سیال در شرایط جریان پوازیه و جریان ترکیبی شبیهسازی شده است.

کدنویسی با استفاده از نرمافزار متلب انجام شده است. دلیل این انتخاب وجود توابع کاربردی در این نرمافزار، سرعت بالای کد نویسی و همچنین قابلیت بالای آن در تصویرسازی نتایج بوده است. در این نرمافزار، سرعت بالای کد نویسی و همچنین قابلیت بالای آن در منتهی الیه پایین سمت ناحیه شبیه سازی در ابعاد 20 $L_x = L_y = 20$ تعیین شده و مبدا مختصات در منتهی الیه پایین سمت چپ این ناحیه قرار دارد. در ادامه بطور خلاصه ویژگیهای این کد بیان می شود:

۱ - استفاده از نیروهای DPD برای مدلسازی سیال
۲ - به کار بردن ترموستات DPD برای کنترل دمای سیستم
۳ - بهره بردن از مدل مغناطش ذره جهت مدلسازی برهم کنش ذرات مغناطیسی
۴ - استفاده از نیروی لنارد - جونز ما بین ذرات مایع و ذرات مغناطیسی
۵ - تعیین مکان اولیه ذرات مغناطیسی با استفاده از یک شبکه مربعی، جهت ایجاد سیال همگن.
۶ - تعیین مکان اولیه ذرات مایع با رعایت عدم همپوشانی با ذرات مغناطیسی.
۸ - استفاده از توزیع مکسول - بولتزمن برای سرعت اولیه.
۸ - الگوریتم یکپارچهسازی سرعت - ورله اصلاح شده.
۹ - شرط مرزی پریودیک در جهت y (دیوارههای افقی)
۱۰ - شرط مرزی لیز - ادواردز در جهت x (برای حالت برش)

۲-۴ پارامترهای شبیهسازی

شبیهسازی دینامیک ذره استهلاکی یک روش درشت دانه است که در کنار مزایا و امکانات خود، در حال حاضر دارای نواقصی نیز هست. یکی از این مسائل متغیرهای متعددی هست که برای آنها مقادیری تعریف نشده است. محققان تعدادی از متغیرهای سیال DPD را استاندارسازی کردهاند اما با این وجود در مسائل پیچیده نظیر تحقیق پیشرو همچنان مجهولات زیادی وجود دارد که میبایست با آزمایش و بررسی نتایج، مقادیری منطقی برای آنها بدست آید.

$$a_{ij} = \frac{75k_BT}{\rho d_c^4}$$
 (۱ – ۴)
آنها همچنین برای شدت نیروی تصادفی مقادیر ۱ تـا ۸ را آزمـایش کردنـد کـه در نهایـت،
مقدار بهینه 3 = σ را پیشنهاد دادند. سپس با استفاده از قضیه نوسـان–اسـتهلاک $\gamma = 4.5$ بدسـت
میآید.

از سویی دیگر برای تعیین متغیرها در معادلات نیرویی ذرات مغناطیسی و نیروهای مابین ذرات سیال و ذرات جامد، مقادیر استاندارد معرفی نشده و از آنجایی که ارتباط مستقیمی بین واحدهای DPD و واحدهای فیزیکی وجود ندارد، میبایست تا با کمک پژوهش ساتو و چنترل [۴۱] و تعداد زیادی آزمایش به مقادیری مناسب و منطقی برای این متغیرهای مجهول دست یافت. که در جدول زیر مقادیر این پارامترها مشاهده میشود:

مقدار	نماد	نام پارامتر
٢۵	m _m	جرم ذره مغناطیسی
١	d	قطر ذره مغناطیسی
۰,۷	d_s	قطر قسمت جامد ذره مغناطیسی
۰,۱۵	δ	ضخامت لایه پوششی
۲۵	m_0	گشتاور مغناطیسی ذرات مغناطیسی
•,14	μ_0	نفوذپذیری خلاء
١	λ_V	شدت برهم کنش بین لایه پوششی و سایر ذرات
۰,۰۳۳	ε	شدت برهم کنش بین ذرات مایع و جامد

جدول۴- ۱- متغیرهای نیروی برهمکنش ذارت جامد-جامد و جامد-مایع

برای هر حالت از مدلسازی ۱۰۰،۰۰۰ گام زمانی محاسبه صورت گرفته است که هر گام زمانی $\Delta t = ...$ بوده است به عبارتی ۱۰۰۰ $\Delta t. N = 0$ واحد زمانی هر شبیه ازی به طول انجامیده است. برای به تعادل رسیدن سیستم وتشکیل زنجیرهها ۱۵۰ واحد زمانی (۱۵۰۰۰ گام زمانی) محاسبه انجام می شود، سپس جریان به سیستم اعمال شده و ۱۵۰ واحد زمانی محاسبه صورت می گیرد تا از پایستگی پاسخ اطمینان حاصل شود، و در نهایت ۲۰۰ گام زمانی حل صورت می گیرد و اطلاعات از این مرحله بهدست می آید. هر ۲۵ گام زمانی برداشت اطلاعات صورت می گیرد. شایان ذکر است برای اطمینان از پایستگی مومنتم سیستم، هر ۱۰۰ گام زمانی مومنتم در جهتهای x, y برابر صفر قرار داده می شود.

۴-۳ صحت سنجی

در مطالعات عددی برای اطمینان از درستی شبیهسازی نیاز به مقایسه نتایج با نتایج تایید شده می-باشد. در این پژوهش نیز مانند سایر موارد نیاز به بررسی صحت شبیهسازی وجود دارد. روش این صحتسنجی وابسته به نوع پژوهش و اطلاعات در دسترس برای این امر است که میتواند شامل مطالعات معتبر آزمایشگاهی، تحلیلی و عددی باشد و از دیدگاه کمی و کیفی مورد مطالعه قرار گیرد.

DPD سیال DP-۴

۴–۳–۱–۱ جریان برشی ساده



شکل۴-۱-نمودار لزجت سیال پایه بر حسب نرخ برش

نیوتنی بودن سیال DPD تحت برش بدین معناست که، این ماده پروفیلی کاملا خطی از خود نشان خواهد داد و با حل تحلیلی جریان کوئت تطابق خواهد داشت. پروفیلهای سرعت برای نرخهای برش ۰٫۱ تا ۰٫۴ در شکل۴- ۲ نشان داده شده است، و با حل تحلیلی جریان کوئت مقایسه شده است. معادله این حل با توجه به هندسه بهصورت زیر میباشد:

$$v_{y} = \frac{v_{w}}{L_{x}} (2x - L_{x})$$
(7-4)
$$v_{y} = \frac{v_{w}}{L_{x}} (2x - L_{x})$$
(7-4)

همانطور که در بخش ۳–۲–۴ درباره شرط مرزی جریان برشی ساده توضیح داده شد، دو صفحه در سمت چپ و راست ناحیه محاسباتی با سرعتی برابر و در خلاف جهت یکدیگر به حرکت در آمده و جریان برشی را بر سیال اعمال میکند. سرعت دیواره بر اساس نرخ برش اعمال شده بر سیال بصورت زیر محاسبه می شود:

$$v_w=\pmrac{\dot{\gamma}L_x}{2}$$
 (۳ - ۴)
میزان انحراف از حل تحلیلی کمتر از ۵٪ است که خطای قابل قبولی میباشد.



شکل۴-۲- نمودار سرعت برای سیال DPD تحت جریان برشی

۴-۳-۱-۲ جریان پوازیه

در گامی دیگر برای صحتسنجی این مدلسازی، سیال DPD تحت شرط مرزی جریان پوازیه پریودیک قرار گرفته است. در شکل۴- ۳ نتیجه این کار با حل تحلیلی جریان پوازیه مقایسه شده است. این شرط مرزی دارای دو ناحیه متقارن است که برای بررسی سادهتر نیمی از آن با پاسخ تحلیلی انطباق داده شده است. سرعتهای هر دو روش بصورت بیبعد و بر مبنای سرعت متوسط گزارش شده است.

$$\frac{v_y}{\bar{v}} = 6\frac{x}{L_x} \left(1 - \frac{x}{L_x}\right) \tag{(f-f)}$$



شکل۴- ۳- نمودار سرعت سیال DPD در جریان پوازیه

۲-۳-۴ سیال مگنتورئولوژیکال در شرایط تعادلی

در این بخش سیال DPD حاوی ذرات مغناطیسی تحت یک میدان مغناطیسی قوی در جهت x قرار می گیرد. طبق مشاهدات پیشین، ذرات مغناطیسی در جهت میدان به یکدیگر متصل شده و زنجیره تشکیل می دهند. ساتو و چنترل [۴۱] در پژوهش خود سیال مغناطیسی را با استفاده از روش DPD در شرایط تعادلی بررسی کردند. آنها شبیه سازی خود را با نتایج شبیه سازی مونت کارلو، دینامیک براونی و دینامیک استوکسی مقایسه کرده و از صحت آن اطمینان حاصل کردند. نتایج این پژوهش در حالتی مشابه با نتایج عددی پیشین مقایسه می شود. در کنار روش های مختلف عددی برای اطمینان بیشتر از رفتار درست شبیه سازی، نتایج بدست آمده با عکس حاصل از مطالعات آزمایشگاهی مقایسه می شود. تمامی این نتایج در حالت اشباع مغناطیسی سیال مگنتورئولوژیکال ارائه شده اند.



شکل۴-۴- سیال مغناطیسی تحت میدان خارجی(الف) شبیهسازی در پژوهش حاضر (ب) عکس از سیال مگنتورئولوژیکال [۸۴] (پ) شبیهسازی با استفاده از روش DPD (ت) شبیهسازی با استفاده از روش مونت-کارلو (ث) شبیه سازی با روش دینامیک براونی (ج) شبیهسازی با استفاده از روش دینامیک استوکسی [۴۱].

۴-۴ مراحل به تعادل رسیدن سیال MR تحت میدان

در بخش قبل صحت شبیه سازی این پژوهش در حالت تعادلی سیال مگنتور ئولوژیکال با مقایسه مطالعات پیشین مسجل شد. حال بصورت دقیق تر و گام به گام مراحل به تعادل رسیدن این سیال در طی زمان ارائه می شود. برای این منظور از دو سیال با کسرهای حجمی ۱۹٫۶٪ و ۳۳٫۲٪ جهت نمایش مراحل تشکیل زنجیره ها استفاده شده است.

همانطور که در شکلهای ۴-۵ و ۴-۶ بهترتیب برای سیالاتی با کسر حجمی ۱۹٫۶٪ و ۳۳٫۲٪ نشان داده شده است، با افزایش کسر حجمی طبیعتا تعداد ذرات مغناطیسی افزایش یافته و بر همین اساس زنجیرههای بیشتری از این ذرات بوجود میآید. این اتفاق باعت میشود سیال شباهت بیشتری به حالت جامد داشته و همین اتفاق به معنی افزایش تنش تسلیم سیال مگنتورئولوژیکال است. از سوی دیگر با بررسی تصاویر زیر مشاهده میشود سیال ۶۹٫۶٪ در محدوده زمانی ۱۹۰۰–۱۵۰ به حالت به معنی افزایش تنش تسلیم سیال مگنتورئولوژیکال است. از سوی دیگر با بررسی تصاویر زیر مشاهده میشود سیال ۶۹٫۶٪ در محدوده زمانی ۱۴۰–۱۵۰ به حالت نوای یا با درسی تصاویر زیر مشاهده میشود سیال ۱۹٫۶٪ در محدوده زمانی ۱۴۰–۱۵۰ به حالت نهایی خود از نظر تشکیل زنجیره میرسد، در حالی که این امر برای سیال با کسر حجمی باعث می شود زمانی کمتر و در محدوده باعث می افتد. به عبارت دیگر افزایش کسر حجمی باعث می شود پاسخ گویی سیال به میدان مغناطیسی و رسیدن به حداکثر تنش تسلیم تسریع شود.



ب) ۱۰



الف) زمان أغازين

00 0000 000 000 00 00 000 00000 000 00

0⁰⁰ 00 00 00 00 00 000 00000 000 0 00 00 000 00 00 000 000 000 000

ت) ۳۰

00 00 0 00 000000000 00

00000000

00 000 0000 0000 0

000000 000000 00000

0000 000 000 000 -000 000 000













00 0 0 0 - 000 **000000** 000000 000000 ۹۰(১ خ) ۸۰ 0 0 0 0 0 00000000 00000000 0 000 00000 ۱۱۰(, ذ) ۱۰۰ 000000000 00000000 000 000000000

0 00000

ژ) ۱۳۰

17.(;





س)۱۴۰

شکل۴- ۵- مراحل به تعادل رسیدن یک سیال MR با کسر حجمی ۱۹٫۶٪ (بر اساس واحد زمانی)



ت) ۳۰

پ) ۲۰











شکل۴-۶- مراحل به تعادل رسیدن یک سیال MR با کسر حجمی ۳۳٫۲٪ (بر اساس واحد زمانی)

۵-۴ سیال MR تحت جریان برشی

پس از اطمینان از صحت کد نوشته شده برای سیال نیوتنی تحت برش و همچنین سیال مگنتورئولوژیکال در حالت تعادلی، این سیال هوشمند تحت جریان برشی قرار می گیرد. بدین وسیله رفتار سیال در این حالت و همچنین خواص رئولوژیکال آن بررسی میشود. از این رو سیال MR تحت نرخهای برشی ۲٫۰ تا ۲٫۰ قرار داده شده است. انتخاب نرخ برشی ۲٫۰ برای حداقل برش به این جهت بوده که، مقادیر کمتر بهجهت هم مرتبه شدن سرعت برشی اعمال شده بر سیال با سرعت نوسان ذرات میزان خطای شبیهسازی را افزایش میدهد. همچنین در نرخهای برشی بالاتر از ۲٫۰ میزان خطای دمایی سیستم از حد قابل قبول فراتر رفته و نتایج اعتبار خود را از دست میدهند به همین متفاوت ۲٫۵۱٪، ۲۹٫۴٪، ۲۸٫۳٪، ۲۸٫۳٪و ۲٫۸۵٪ در حالت اشباع مغناطیسی صورت گرفته متفاوت ۱۵٫۹٪، ۱۹٫۶٪، ۲۲۸٫٪، ۲۸٫۳٪و ۲۵٫۸۵٪ در حالت اشباع مغناطیسی صورت گرفته است. پروفیل سرعت برای کسرهای حجمی گفته شده در نرخ برش ثابت ۲٫۰ در شکل۶– ۷ نشان داده شده است. با توجه به عرض کانال اندازه حداکثر سرعت دیواره در این نرخ برشی برابر ۲ میباشد.

همانطور که در شکل۴- ۷ مشاهده می شود، در کسرهای حجمی بیشتر سیال در قسمت میانی کانال، سرعتی نزدیک به صفر دارد که این امر نشان از عدم تسلیم سیال در این ناحیه است. اما با کاهش کسر حجمی سیال مگنتورئولوژیکال زودتر تسلیم می شود و ذرات در ناحیه میانی نیز شروع به حرکت می کنند.

شکل۴– ۸ پروفیل سرعت را برای یک نمونه از سیال در نرخهای برشی ۰٫۱ تـا ۰٫۴ نمایش میدهد. در نرخ برش ۰٫۱ ناحیه تسلیم نشده تقریبا از 2=X تا X=18 را پوشش میدهد که با افزایش سرعت دیوارهها این ناحیه کوچکتر میشود. در واقع سیال مگنتورئولوژیکال تسلیم شده و از حالت جامد به مایع میل میکند. شایان ذکر است پروفیلهای سرعت کـه در شـکلهـای ۴-۷ و ۴-۸ ارائـه شدهاند، مراحل تحول این ماده هوشمند از جامد به مایع را نشان میدهند، برای اولین بار در این پژوهش ارائه شده و نویسنده در هیچ پژوهشی نمونهای مشابه مشاهده نکرده است.



شکل۴- ۸- پروفیل سرعت سیال مگنتورئولوژیکال در کسر حجمی ۳۳٬۲٪ و نرخهای برشی متفاوت

یکی دیگر از معیارهای بررسی وضعیت ماده در حالت برشی، نرخ برش در عرض کانال می-باشد. بهطوری که مقادیر نرخ برش کم نشان از حالت شبه جامدِ ماده دارد. شکل۴- ۹ این نمودار را برای کسر حجمی۲۳۳٫۲ نمایش میدهد. مشاهده میشود که با افزایش نرخ برش اعمال شده بر سیستم ناحیهی مرکزی که دارای نرخ برشی نزدیک به صفر است کوچکتر میشود. برای کسر حجمی ۱۹٫۶٪ این فرایند بهصورت شکل۴- ۱۰ روی میدهد. همانطور که مشهود است در کسرحجمی کمتر ماده با نیروی کمتری شروع به تسلیم شدن میکند. ناحیه جامد ماده برای نرخ برش ۱۹٫۶ با نام Plug ماده با نیروی کمتری شده است. این ناحیه با افزایش نرخ برش اعمال شده از بین می رود.



شکل۴- ۹- نمودار نرخ برش برحسب X سیال مگنتورئولوژیکال با کسر حجمی ۳۳٫۲٪



شکل^۴ - ۱۰- نمودار نرخ برش برحسب X سیال مگنتورئولوژیکال با کسر حجمی ۱۹٫۶٪ برای مقایسه بهتر تاثیر کسر حجمی بر روی پروفیل نـرخ بـرش، مقایسـه دو کسـر حجمـی متفاوت در نرخ برش ۴٫۰ شکل۴– ۱۱ آورده شده است. همانطور که مشاهده میشود سـیال بـا کسـر حجمی بالاتر دارای نرخ برش کمتری در ناحیه مرکزی است. که این نشـان از مقاومـت بیشـتر آن در مقابل جریان برشی است.



شکل۴- ۱۱- مقایسه پروفیل نرخ برش برای دو کسر حجمی متفاوت

حال بهتر است تا با پارامترهای کمی رفتار این سیالات مورد مطالعه قرار گیرد. از این رو نمودار لزجت η بر اساس نرخ برش $\dot{\gamma}$ سیالات مگنتورئولوژیکال در کسرهای حجمی متفاوت به همراه سیال حامل نیوتنی در شکل β - ۱۲ ارائه شده است.

با افزایش کسر حجمی ذرات مغناطیسی، لزجت سیال مگنتورئولوژیکال افزایش مییابد که این پدیده به دلیل افزایش زنجیره های ذرات مغناطیسی در جهت عمود بر جریان سیال صورت می-پذیرد. در نرخ برشی ۰٫۱ سیال لزجتی به مراتب بالاتر از نرخهای برشی بیشتر دارد این اختلاف نشان دهنده وجود رفتار رقیق شوندگی برشی در این سیال است. البت در کسرهای حجمی کم، نظیر ۱۵٫۶٪ و ۱۹٫۶٪ این رفتار نمود زیادی ندارد. اما این ویژگی با افزایش کسر حجمی مقدار چشم-گیرتری پیدا می کند. البته با افزایش کسر حجمی در مقادیر بالا نظیر ۳۳٫۲٪ و ۳۸٫۵٪ این رشد تنش تسلیم، آهنگ کندتری پیدا می کند. با افزایش نرخ برش سیال بیش از پیش تسلیم شده و رفتار سیال از حالت جامد به یک مایع نیوتنی میل می کند. این فرایند در کسرهای حجمی پایین تر زودتر اتفاق میافتد. بطور کلی می توان رفتار رقیق شوندگی برشی را از این سیال شبیه سازی شده مشاهده کرد، رفتاری که در پژوهشهای پیشین نیز گزارش شده است.



شکل۴- ۱۲- نمودار لزجت بر اساس نرخ برش برای شش کسر حجمی متفاوت و سیال پایه نیوتنی

منحنی لزجت بر حسب کسرحجمی در شکل^۴ – ۱۳ نشان داده شده است. این شکل نشان میدهد که لزجت با کسرحجمی رابطه خطی دارد. همانطور که در شکل بالا نیز نشان داده شد افزایش نرخ برش کاهش شدید لزجت را درپی دارد، بگونهای که حتی کسر حجمی تاثیر چشمگیری بر روی لزجت ندارد. جهت پیشبینی رفتار سیال، رابطه لزجت بر حسب نرخ برش و کسرحجمی بصورت زیر بدست آمده:

$$\eta = \left(\left(6.828 \phi_v \right) - 0.9975 \right) \left(\dot{\gamma}^{-1.514} \right) \tag{$\Delta - $}$$



شکل۴- ۱۳- نمودار لزجت بر حسب کسر حجمی

در نمودار بعدی اختلاف تنش نرمال اول N₁ سیالات مگنتورئولوژیکال ارائه شده است. با افزایش نرخ برش اختلاف تنش نرمال اول سیالات مگنتورئولوژیکال کاهش مییابد و این نتیجه نیز گواه دیگری بر میل سیال به رفتار نیوتنی با افزایش نرخ برش میباشد. همچنین با افزایش کسر حجمی اختلاف تنش نرمال اول نیز افزایش مییابد که نتیجه بدست آمده منطقی و فیزیکی است.



شكل ۴- ۱۴- نمودار اختلاف تنش نرمال اول بر حسب نرخ برش

MR تاثیر مغناطیس پذیری فاز جامد بر لزجت سیال MR

مواد دارای مغناطیس پذیری متفاوتی هستند که این ویژگی در حالت اشباع مغناطیسی ارتباطی مستقیم با گشتاور مغناطیسی m₀ دارد. در این بخش با تغییر گشتاور مغناطیسی مواد تاثیر این پارامتر بر لزجت سیال مگنتورئولوژیکال بررسی شده است.

در شکل۴– ۱۵ لزجت برحسب نرخ برش برای سه سیال با مواد مغناطیسی متفاوت اما در کسر حجمی یکسان ۳۳٫۲٪ بهدست آمده است. برای مقایسه صحیحتر تاثیر نیروی دافعه پوشش ذرات مغناطیسی بصورت برابر درنظر گرفته شده است. همانطور که مشاهده میشود با کاهش ۲۰٪ گشتاور مغناطیسی (۲۰=0m) لزجت در نرخ برش ۰٫۱ در حدود ۸۵٪ کاهش نشان داده و این امر با کاهش ۴۰٪ گشتاور مغناطیسی (۱۵=0m) به حدود ۹۷٪ رسیده است. عملا تاثیر این ماده در ۱۵>0m بر لزجت صرفا بهدلیل حضور فیزیکی ذرات جامد بوده و نشانی از اثر مگنتورئولوژیکال^۱ ندارد. همچنین با کاهش گشتاور مغناطیسی تنش تسلیم نیز بهتدریج ماهیت خود را از دست خواهد داد.

¹ Magnetorheological effect



شکل۴- ۱۵- نمودار ویسکوزیته بر حسب نرخ برش برای سه ماده با گشتاور مغناطیسی متفاوت

MR تاثیر لزجت سیال پایه بر سیال ۲-۴

یکی از پارامترهای تاثیر گذار بر سیال MR، خواص سیال پایه میباشد. استفاده از سیالاتی با لزجت-های متفاوت میتواند یک سیال MR جدید و با کاربردی نو عرضه کند. در این پژوهش نیز با تغییر چگالی عددی ذرات DPD، سیالات جدیدی ایجاد گردیده است که نمودار لزجت آنها در شکل۴- ۱۶ ارائه شده است. حال با ثابت نگه داشتن کسر حجمی ذرات مغناطیسی و تغییر سیال پایه این پارامتر مهم بررسی میشود.

در ابتدا برای کسر حجمی ۱۹٫۶٪ از ذرات مغناطیسی در دو سیال با چگالی عددی ۴ و ۶، نمودار لزجت بر حسب نرخ برش رسم میشود. برای یادآوری نمودار هر دو سیال پایه نیز ارائه شده است. همانطور که در شکل۴– ۱۶مشاهده میشود، در نرخ برشی ۰٫۱ لزجت سیال MR با چگالی سیال پایه ۴ بیشتر از نوع دیگر است، که این امر به دلیل بالا بودن لزجت سیال با چگالی عددی ۶ بوده بهطوریکه این امر مانع تشکیل زنجیرههای ذرات مغناطیسی میشود. تشکیل نشدن رنجیرهها به میزان کافی باعث افت تنش تسلیم شده است، اما با افزایش نرخ برش لزجت دو سیال به یک مقدار تقریبا برابر میل می کند. این پدیده به دلیل شکسته شدن زنجیرهها در هر دو سیال بوده به شکلی که ذرات مغناطیسی تاثیر خود را بر لزجت سیال از دست داده و لزجت سیال پایه نقش پررنگ تری بازی می کند.



شکل۴-۱۶-نمودار لزجت سیال MR برای دو سیال پایه متفاوت در کسر حجمی ۱۹۰۶٪ این بررسی برای کسر حجمی ۳۸٫۵٪ ذرات مغناطیسی نیز صورت گرفته است. سیالات پایه با چگالی عددی ۴ و ۶ استفاده شدهاند و نتایج این مدلسازی در شکل۴- ۱۷ به تصویر درآمده است. در نرخ برش ۱٫۰ لزجت سیال MR که سیال پایه با چگالی عددی ۶ دارد بیشتر از سیال MR دیگر است. این پدیده بر خلاف کسر حجمی ۱۹٫۶٪ روی داده و دلیلش مقدار کافی ذرات جامد در سیال برای تشکیل زنجیره است. هرچند که تفاوت زیادی بین لزجت سیال MR با چگالی عددی ۶ و ۶ در نرخ برش ۱٫۰ وجود ندارد اما با افزایش نرخ برش این تفاوت آشکارتر شده و سیال پایه تسلط خود را بر تعین لزجت سیال MR نشان میدهد.



شکل۴- ۱۷- نمودار لزجت سیال MR برای دو سیال پایه متفاوت در کسر حجمی ۳۸٫۵٪

۸-۴ مدلسازی جریان پوازیه

یکی دیگر از حالتهای حرکتی سیال، جریان پوازیه است. کاربرد این حالت در بعضی از میراگرها و شیرهای کنترلی بیشتر به چشم میخورد. در شکل۴– ۱۸ یک نوع از میراگرهای مگنتورئولوژیکال که تحت این نوع از جریان عمل میکند نشان داده شده است. به همین جهت پژوهش حاضر فراتر از پروپوزال رفته و این شرط مرزی را نیز مدلسازی نموده است.

به منظور شبیه سازی این حالت از جریان، شرط مرزی جریان پوازیه پریودیک که در بخش ۳–۲–۵ تشریح شده، به کار رفته است. این شرط مرزی بر روی دو کسر حجمی متفاوت اعمال شده که برای هر سیال شش نیروی خارجی \mathbf{F}_{ext} از ۰٫۱ تا ۰٫۸ آزمایش شده است.



شکل۴- ۱۸- میراگر مگنتورئولوژیکال در حالت جریان پوازیه

در شکل۴– ۱۹ جریان پوازیه بر سیالی با کسر حجمی ۱۹٫۶٪ اعمال شده است که می توان در نیروهای خارجی پایین، نظیر 0.1 Fext عدم تسلیم کامل سیال را مشاهده کرد. در ناحیـه میانی این پروفیل، سرعت ثابت بوده و مشتق آن نسبت به X صفر است. در پژوهشهای پیشین وجود چنین ناحیهای با نام ناحیه پلاگ^۱ گزارش شده است [۳۲ و ۳۳]. که تصویر آن بصورت شماتیک در شکل۴– ۱۲ آمده، ناحیه پلاگ با δ نمایش داده شده است (این ناحیه بخشی از سیال مگنتورئولوژیکال که هنوز تسلیم نشده است را نشان میدهد). با افزایش کسر حجمی به ۳۳٫۲٪ شاهد این پدیده با شـدت بیشتری خواهیم بود، شکل۴– ۲۰، بطوری که سیال بهوسیله نیروی خارجی بیشتری تسلیم می شود و

¹ Plug region



شکل۴- ۱۹- پروفیل سرعت جریان پوازیه سیال مگنتورئولوژیکال با کسر حجمی ۱۹٫۶٪



شکل۴- ۲۰- پروفیل سرعت جریان پوازیه سیال مگنتورئولوژیکال با کسر حجمی ۳۳٫۲٪



شکل۴- ۲۱- پروفیل سرعت پوازیه و ناحیه پلاگ [۱]

۹-۴ مدلسازی جریان ترکیبی

در بعضی از کاربردهای سیال MR یک حالت مشخص مانند برش و یا جریان پوازیه اعمال نمی شود و ترکیبی از این دو بر سیال حکم فرماست که حالت ترکیبی نامیده می شود (شکل ۱ – ۱ – پ). حال در این پژوهش قابلیت روش DPD در شبیه سازی جریان ترکیبی نیز بررسی می شود. برای تحقق این امر دو روش لیز –ادواردز و جریان پوازیه پریودیک بصورت هم زمان استفاده شده اند.

در شکل۴- ۲۲ سیال MR با کسر حجمی ۱۹٫۶٪ و تحت نیروی خارجی Fext ۹٫۱ و چهار نرخ برش ۱٫۰ تا ۴٫۰ قرار گرفته و پروفیل سرعت آنها با حالت نرخ برشی صفر مقایسه شده است. در شکل۴- ۲۳ همین شرایط با کسر حجمی بیشتر (۳۳٫۲٪) آزموده شده است. بهدلیا افزایش کسر حجمی ذرات مغناطیسی نسبت به حالت اول، ناحیه کوچکتری از ماده تسایم شده است. در شکل نهایی این بخش کسر حجمی ثابت نگه داشته شده ولی نیروی خارجی افزایش پیدا کرده است (۲٫۰ -F =ext). با افزایش نیروی اعمال شده، سیال رو به تسلیم میآورد. نکته مشترک در بین تمامی نتایج این



شکل۴- ۲۲- پروفیل سرعت سیال MR در حالت ترکیبی برای کسر حجمی ۱۹٫۶٪ (F_{ext}=0.1)



شکل۴- ۲۳- پروفیل سرعت سیال MR در حالت ترکیبی برای کسر حجمی ۳۳٫۲٪ (F_{ext}=0.1)


شکل۴- ۲۴- پروفیل سرعت سیال MR در حالت ترکیبی برای کسر حجمی ۳۳٫۲٪ (F_{ext}=0.2)

فصل پنجم:

نتيجه گيرى

در این پژوهش با استفاده از روش دینامیک ذره استهلاکی و با کمک نیروی لنارد-جونز و مدل مغناطش ذره، سیال مگنتورئولوژیکال مدلسازی شد. لزجت این سیال با افزایش نرخ برش، کاهش مییابد و در واقع رفتار رقیق شوندگی برشی را از خود نشان میدهد، که این امر به دلیل شکست زنجیرههای ذرات مغناطیسی است. با افزایش کسر حجمی میزان ذرات مغناطیسی در سیال افزایش یافته و زنجیرههای بیشتری تشکیل میشود. این ویژگی باعث بالا رفتن تنش تسلیم و لزجت سیال مگنتورئولوژیکال میشود.

یکی دیگر از پارامترهای مهم در سیالات مگنتورئولوژیکال، گشتاور مغناطیسی ذرات جامد است که بیانگر مغناطیس شوندگی این ذرات میباشد. مدلسازیها نشان داد که کاهش میزان این پارامتر در ذرات مغناطیسی باعث افت شدید تنش تسلیم و همچنین لزجت میشود.

سیال مگنتورئولوژیکال در حالت جریان پوازیه نیز قرار گرفت و ناحیه پلاگ که در پژوهش-های پیشین هم پیش بینی شده بود مشاهده شد. البته با افزایش نیروی خارجی این ناحیه رفته رفته از بین میرود، و یک پروفیل سرعت یکنواخت ایجاد می شود.

بطور کلی مشاهده شد که روش دینامیک ذره استهلاکی روشی کارآمد برای مدلسازی سیال مگنتورئولوژیکال میتواند باشد. روشی که علاوه بر نمایش جزئیات رفتار ذرات سازنده این سیال، می-تواند پیش بینی خوبی از خواص آن داشته باشد. روش DPD این امکان را ایجاد میکند تا با کاستن از هزینههای آزمایشگاهی هنگفت و با صرف زمان کمتر پیش بینی مناسبی از رفتار سیال مگنتورئولوژیکال داشت.

۱-۵ **ییشنهادات**

این پژوهش نخستین گام برای مدلسازی غیرتعادلی سیال مگنتورئولوژیکال با استفاده از

روش DPD محسوب می شود و امید است گامهای مفیدی در پی آن برداشته شود. نویسنده پیشنهاداتی نیز در این زمینه دارد.

- ۱- این پژوهش را می توان در حالت سهبعدی و همچنین سایر دستگاه های مختصات ارائه
 داد.
- ۲- با استفاده از روش های نوین DPD می توان در آینده به حل حرارتی این مسئله در کنار
 حل سیالاتی پرداخت.
- ۳- مشکلی کلی که در اکثر قریب به اتفاق تحقیقات DPD وجود دارد عدم ارتباط معنا دار میان واحدهای DPD و واحدهای فیزیکی است که با رفع این نقیصه میتوان نتایج کاربردی تری از شبیه سازی های DPD گرفت.
- ۴- همچنین محققان میتوانند از دیوارههای جامد برای ایجاد شرایط مرزی استفاده کنند که البته این موضوع باید با حساسیت و دقت زیادی اعمال شود زیرا که روشهای ایجاد دیواره متنوع و احتمال دریافت پاسخ نادرست زیاد است.
- ۵- میتوان برای شبیه سازی بهتر سیال MR از ذرات جامدی با اندازه های متفاوت استفاده
 کرد. این شرط به فیزیک مسئله نزدیک تر است.

منابع:

- S. A. Mazlan, "THE BEHAVIOUR OF MAGNETORHEOLOGICAL FLUIDS IN SQUEEZE MODE," Dublin City University, 2008.
- [2] S. Genç and P. P. Phulé, "Rheological properties of magnetorheological fluids," *Smart Mater. Struct.*, vol. 11, no. 1, pp. 140–146, 2002.
- [3] J. Wang, G. Meng, N. Feng, and E. J. Hahn, "Dynamic performance and control of squeeze mode MR fluid damper-rotor system," *Smart Mater. Struct.*, vol. 14, no. 4, pp. 529–539, 2005.
- [4] J. H. Park, B. D. Chin, and O. O. Park, "Rheological Properties and Stabilization of Magnetorheological Fluids in a Water-in-Oil Emulsion.," *J. Colloid Interface Sci.*, vol. 240, no. 1, pp. 349–354, Aug. 2001.
- [5] J. Claracq, J. Sarrazin, and J. P. Montfort, "Viscoelastic properties of magnetorheological fluids," *Rheol. Acta*, vol. 43, pp. 38–49, 2004.
- [6] G. Song and M. Zeng, "A thin-film magnetorheological fluid damper/lock," Smart Mater. Struct., vol. 14, no. 2, pp. 369–375, 2005.
- [7] M. Hagenbüchle and J. Liu, "Chain formation and chain dynamics in a dilute magnetorheological fluid.," *Appl. Opt.*, vol. 36, pp. 7664–7671, 1997.
- [8] T. Shiraishi, S. Morishita, and H. P. Gavin, "Estimation of Equivalent Permeability in Magnetorheological Fluid Considering Cluster Formation of Particles," J. Appl. Mech., vol. 71, no. 2, p. 201, 2004.
- [9] G. Bossis, S. Lacis, a. Meunier, and O. Volkova, "Magnetorheological fluids," J. Magn. Magn. Mater., vol. 252, no. 1–3 SPEC. ISS., pp. 224–228, 2002.
- [10] Y. Rabbani, M. Ashtiani, and S. H. Hashemabadi, "An experimental study on the effects of temperature and magnetic field strength on the magnetorheological fluid stability and MR effect.," *Soft Matter*, vol. 11, no. 22, pp. 4453–4460, Jun. 2015.

- [11] J. de Vicente, D. J. Klingenberg, and R. Hidalgo-Alvarez, "Magnetorheological fluids: a review," *Soft Matter*, vol. 7, no. 8, p. 3701, 2011.
- F. Gordaninejad and S. P. Kelso, "Magneto-rheological fluid shock absorbers for HMMWV," *Smart Struct. Mater. 2000 Damping Isol.*, vol. 3989, no. 2000, pp. 266–273, 2000.
- [13] J. W. Gravatt, "Magneto-Rheological Dampers for Super-sport Motorcycle Applications by Virginia Polytechnic Institute and State University in partial fulfillment of the requirements for the degree of Masters of Science In Mechanical Engineering Approved : Magneto-Rheolog," Virginia Polytechnic Institute and State University, 2003.
- [14] E. O. Ericksen and F. Gordaninejad, "A magneto-rheological fluid shock absorber for an off-road motorcycle," *Int. J. Veh. Des.*, vol. 33, no. 1/2/3, p. 139, 2003.
- [15] F. Ahmadkhanlou, "Design, Modeling and Control of Magnetorheological Fluid-Based Force Feedback Dampers for Telerobotic Systems," The Ohio State University, 2008.
- [16] D. Carlson, B. Marjoram, J. Toscano, and D. Leroy, "Magneto-Rheological Technology and Applications," 2007.
- [17] J. Liu, G. A. Flores, and R. Sheng, "In-vitro investigation of blood embolization in cancer treatment using magnetorheological fluids," *J. Magn. Magn. Mater.*, vol. 225, no. 1–2, pp. 209–217, 2001.
- [18] J. K. Oh and J. M. Park, "Iron oxide-based superparamagnetic polymeric nanomaterials: Design, preparation, and biomedical application," *Prog. Polym. Sci.*, vol. 36, no. 1, pp. 168–189, Jan. 2011.
- [19] W. Kordonski and S. Jacobs, "Model of Magnetorheological Finishing," J. Intell. Mater. Syst. Struct., vol. 7, pp. 131–137, 1996.
- [20] M. R. Jolly, J. W. Bender, and J. D. Carlson, "Properties and applications of commercial magnetorheological fluids," J. Intell. Mater. {...}, vol. 149, p. 12044,

Feb. 1999.

- [21] F. D. Goncalves, "Characterizing the behavior of magnetorheological fluids at high velocities and high shear rates," no. January, p. 114, 2005.
- [22] J. L. Viota, J. de Vicente, J. D. G. Durán, and A. V Delgado, "Stabilization of magnetorheological suspensions by polyacrylic acid polymers," *J. Colloid Interface Sci.*, vol. 284, no. 2, pp. 527–541, 2005.
- [23] N. M. Wereley, "Bidisperse Magnetorheological Fluids using Fe Particles at Nanometer and Micron Scale," J. Intell. Mater. Syst. Struct., vol. 17, no. 5, pp. 393–401, 2006.
- [24] a. Roszkowski, M. Bogdan, W. Skoczynski, and B. Marek, "Testing Viscosity of MR Fluid in Magnetic Field," *Meas. Sci. Rev.*, vol. 8, no. 3, pp. 58–60, 2008.
- [25] J. Zhang, Z. Jin-qiu, and J. Jin-feng, "Characteristic analysis of magnetorheological fluid based on different carriers," J. Cent. South Univ. Technol. (Engl. Ed.), vol. 15, no. 6, pp. 830–834, 2008.
- [26] R. Turczyn and M. Kciuk, "Preparation and study of model magnetorheological fluids," J. Achiev. Mater. Manuf. Eng., vol. 27, no. 2, pp. 131–134, 2008.
- [27] M. S. Kim, Y. D. Liu, B. J. Park, C. Y. You, and H. J. Choi, "Carbonyl iron particles dispersed in a polymer solution and their rheological characteristics under applied magnetic field," *J. Ind. Eng. Chem.*, vol. 18, no. 2, pp. 664–667, 2012.
- [28] N. M. Wereley, J. U. Cho, Y. T. Choi, and S. B. Choi, "Magnetorheological dampers in shear mode," *Smart Mater. Struct.*, vol. 17, no. 1, p. 15022, Feb. 2008.
- [29] S. R. Hong, N. M. Wereley, Y. T. Choi, and S. B. Choi, "Analytical and experimental validation of a nondimensional Bingham model for mixed-mode magnetorheological dampers," *J. Sound Vib.*, vol. 312, no. 3, pp. 399–417, May 2008.

- [30] M. R. Jolly, "Properties and Applications of Magnetorheological Fluids," MRS Proc., vol. 604, 1999.
- [31] N. M. Wereley and L. Pang, "Nondimensional analysis of semi-active electrorheological and magnetorheological dampers using approximate parallel plate models," *Smart Mater. Struct.*, vol. 7, no. 5, pp. 732–743, Oct. 1998.
- [32] C.-I. Chen, C.-K. Chen, and Y.-T. Yang, "Unsteady unidirectional flow of Bingham fluid between parallel plates with different given volume flow rate conditions," *Appl. Math. Model.*, vol. 28, no. 8, pp. 697–709, Aug. 2004.
- [33] M. Yu, S. Wang, J. Fu, and Y. Peng, "Unsteady analysis for oscillatory flow of magnetorheological fluid dampers based on Bingham plastic and Herschel-Bulkley models," *J. Intell. Mater. Syst. Struct.*, vol. 24, no. 9, pp. 1067–1078, Feb. 2013.
- [34] K. Esteki, A. Bagchi, and R. Sedaghati, "Dynamic analysis of electro- and magneto-rheological fluid dampers using duct flow models," *Smart Mater. Struct.*, vol. 23, no. 3, p. 35016, Mar. 2014.
- [35] K. P. Gertzos, P. G. Nikolakopoulos, and C. a. Papadopoulos, "CFD analysis of journal bearing hydrodynamic lubrication by Bingham lubricant," *Tribol. Int.*, vol. 41, no. 12, pp. 1190–1204, Dec. 2008.
- [36] F. Omidbeygi and S. H. Hashemabadi, "Experimental study and CFD simulation of rotational eccentric cylinder in a magnetorheological fluid," *J. Magn. Magn. Mater.*, vol. 324, no. 13, pp. 2062–2069, Jul. 2012.
- [37] D. a. Wolf-Gladrow, "Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models - An Introduction," *PoLAR*, p. 308, 2000.
- [38] A. A. Mohammed, *Lattice Boltzmann Method: Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes.* London: Springer London, 2012.
- [39] A. Satoh, Introduction to Practice of Molecular Simulation. Elsevier, 2011.
- [40] K. Han, Y. T. Feng, and D. R. J. Owen, "Three-dimensional modelling and

simulation of magnetorheological fluids," *Int. J. Numer. Methods Eng.*, vol. 84, no. 11, pp. 1273–1302, 2010.

- [41] A. Satoh and R. W. Chantrell, "Application of the dissipative particle dynamics method to magnetic colloidal dispersions," *Mol. Phys.*, vol. 104, no. 20–21, pp. 3287–3302, 2006.
- [42] P. J. Hoogerbrugge and J. M. V. A. Koelman, Simulating Microscopic Hydrodynamic Phenomena with Dissipative Particle Dynamics., vol. 19, no. June. 1992.
- [43] N. Phan-Thien, *Understanding Viscoelasticity*, Second. Berlin: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2013.
- [44] R. C. Ball and J. R. Melrose, "A simulation technique for many spheres in quasistatic motion under frame-invariant pair drag and Brownian forces," *Phys. A Stat. Mech. its Appl.*, vol. 247, no. 1–4, pp. 444–472, 1997.
- [45] E. S. Boek, P. V Coveney, H. N. W. Lekkerkerker, and P. van der Schoot, "Simulating the rheology of dense colloidal suspensions using dissipative particle dynamics," *Phys. Rev. E*, vol. 55, no. 3, pp. 3124–3133, 1997.
- [46] J. M. V. A. Koelman and P. J. Hoogerbrugge, "Dynamic Simulations of Hard-Sphere Suspensions Under Steady Shear," *Europhys. Lett.*, vol. 21, no. 3, pp. 363–368, 1993.
- [47] E. S. Boek, P. V Coveney, and H. N. W. Lekkerkerker, "Computer simulation of rheological phenomena in dense colloidal suspensions with dissipative particle dynamics," *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 8, no. 47, p. 9509, 1996.
- [48] E. S. Boek and P. van der Schoot, "Resolution effects in Dissipative Particle Dynamics simulations," *Int. J. Mod. Phys. C*, vol. 9, no. 8, pp. 1307–1318, 1998.
- [49] M. Doi, S. F. S. F. Edwards, M. Doi, and S. F. S. F. Edwards, *The theory of polymer dynamics*. Newyork: Oxford University Press, 1986.
- [50] M. Whittle and E. Dickinson, "On Simulating Colloids by Dissipative Particle

Dynamics: Issues and Complications," *J. Colloid Interface Sci.*, vol. 242, no. 1, pp. 106–109, Oct. 2001.

- [51] J. B. Gibson, K. Chen, and S. Chynoweth, "Simulation of particle adsorption onto a polymer-coated surface using the dissipative particle dynamics method," *J. Colloid Interface Sci.*, vol. 206, no. 2, pp. 464–474, 1998.
- [52] F. M. van der Kooij, E. S. Boek, and A. P. Philipse, "Rheology of Dilute Suspensions of Hard Platelike Colloids.," *J. Colloid Interface Sci.*, vol. 235, no. 2, pp. 344–349, 2001.
- [53] J. M. Kim and R. J. Phillips, "Dissipative particle dynamics simulation of flow around spheres and cylinders at finite Reynolds numbers," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 59, no. 20, pp. 4155–4168, 2004.
- [54] S. Chen, N. Phan-Thien, X.-J. Fan, and B. C. Khoo, "Dissipative particle dynamics simulation of polymer drops in a periodic shear flow," *J. Nonnewton. Fluid Mech.*, vol. 118, no. 1, pp. 65–81, 2004.
- [55] J. R. Darias, M. Quiroga, E. Medina, P. J. Colmenares, and V. R. Paredes, "Simulation of suspensions in constricted geometries by dissipative particle dynamics," *Mol. Simul.*, vol. 29, no. 6–7, pp. 443–449, 2003.
- [56] V. Pryamitsyn and V. Ganesan, "A coarse-grained explicit solvent simulation of rheology of colloidal suspensions.," J. Chem. Phys., vol. 122, no. 10, p. 104906, 2005.
- [57] P. De Palma, P. Valentini, and M. Napolitano, "Dissipative particle dynamics simulation of a colloidal micropump," *Phys. Fluids*, vol. 18, no. 2, p. 27103, 2006.
- [58] N. S. Martys, "Study of a dissipative particle dynamics based approach for modeling suspensions," J. Rheol. (N. Y. N. Y)., vol. 49, no. 2, pp. 401–424, 2005.
- [59] W. Dzwinel, D. a. Yuen, and K. Boryczko, "Mesoscopic dynamics of colloids simulated with dissipative particle dynamics and fluid particle model," *J. Mol. Model.*, vol. 8, pp. 33–43, 2002.

- [60] W. Dzwinel and D. a Yuen, "A Two-Level, Discrete-Particle Approach for Simulating Ordered Colloidal Structures.," *J. Colloid Interface Sci.*, vol. 225, no. 1, pp. 179–190, 2000.
- [61] K. E. Novik and P. V Coveney, "USING DISSIPATIVE PARTICLE DYNAMICS TO MODEL BINARY IMMISCIBLE FLUIDS," Int. J. Mod. Phys. C, no. 2, pp. 1–10, 1997.
- [62] A. Tiwari and J. Abraham, "Dissipative-particle-dynamics model for two-phase flows," *Phys. Rev. E*, vol. 74, no. 5, p. 56701, 2006.
- [63] D. C. Visser, H. C. J. Hoefsloot, and P. D. Iedema, "Modelling multi-viscosity systems with dissipative particle dynamics," *J. Comput. Phys.*, vol. 214, no. 2, pp. 491–504, 2006.
- [64] R. Heldele, M. Schulz, D. Kauzlaric, J. G. Korvink, and J. Haußelt, "Micro powder injection molding: process characterization and modeling," *Microsyst. Technol.*, vol. 12, no. 10–11, pp. 941–946, 2006.
- [65] M. Liu, P. Meakin, and H. Huang, "Dissipative particle dynamics with attractive and repulsive particle-particle interactions," *Phys. Fluids*, vol. 18, no. 1, p. 17101, 2006.
- [66] M. Liu, P. Meakin, and H. Huang, "Dissipative particle dynamics simulation of multiphase fluid flow in microchannels and microchannel networls," *Water Resour. Res.*, vol. 43, no. August 2006, pp. 1–14, 2007.
- [67] M. Liu, P. Meakin, and H. Huang, "Dissipative particle dynamics simulation of pore-scale multiphase fluid flow," *Water Resour. Res.*, vol. 43, no. 4, pp. 1–14, 2007.
- [68] Y. Kong, C. W. Manke, W. G. Madden, and A. G. Schlijper, "Effect of solvent quality on the conformation and relaxation of polymers via dissipative particle dynamics," *J. Chem. Phys.*, vol. 107, no. 2, p. 592, 1997.
- [69] A. Maiti, J. Wescott, and P. Kung, "Nanotube–polymer composites: insights from Flory–Huggins theory and mesoscale simulations," *Mol. Simul.*, vol. 31, no.

2-3, pp. 143-149, 2005.

- [70] M. Fermeglia and S. Pricl, "Multiscale modeling for polymer systems of industrial interest," *Prog. Org. Coatings*, vol. 58, no. 2–3, pp. 187–199, 2007.
- [71] G. Scocchi, P. Posocco, A. Danani, S. Pricl, and M. Fermeglia, "To the nanoscale, and beyond!," *Fluid Phase Equilib.*, vol. 261, no. 1–2, pp. 366–374, 2007.
- [72] G. Scocchi, P. Posocco, M. Fermeglia, and S. Pricl, "Polymer-clay nanocomposites: a multiscale molecular modeling approach.," *J. Phys. Chem. B*, vol. 111, no. 9, pp. 2143–2151, 2007.
- [73] A. Satoh and T. Majima, "Comparison between theoretical values and simulation results of viscosity for the dissipative particle dynamics method.," J. Colloid Interface Sci., vol. 283, no. 1, pp. 251–266, 2005.
- [74] R. D. Groot and P. B. Warren, "Dissipative particle dynamics: Bridging the gap between atomistic and mesoscopic simulation," *J. Chem. Phys.*, vol. 107, no. 11, p. 4423, 1997.
- [75] P. Espanol, P. Warren, M. Road, P. Sunlight, and Q. R. East, "Statistical Mechanics of Dissipative Particle Dynamics.," *EPL (Europhysics Lett.*, vol. 30, no. May, pp. 191–196, 1995.
- [76] M. Ashtiani, S. H. Hashemabadi, and A. Ghaffari, "A review on the magnetorheological fluid preparation and stabilization," *J. Magn. Magn. Mater.*, vol. 374, pp. 716–730, 2015.
- [77] M. P. Allen and D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, vol. 38. Oxford, 1988.
- [78] A. W. Lees and S. F. Edwards, "The computer study of transport processes under extreme conditions," *J. Phys. C Solid State Phys.*, vol. 5, pp. 1921–1929, 1972.
- [79] J. a. Backer, C. P. Lowe, H. C. J. Hoefsloot, and P. D. Iedema, "Poiseuille flow to measure the viscosity of particle model fluids," *J. Chem. Phys.*, vol. 122, pp.

1-6, 2005.

- [80] A. Boromand, S. Jamali, and J. M. Maia, "Viscosity measurement techniques in Dissipative Particle Dynamics," *Comput. Phys. Commun.*, no. 0, p. --, 2015.
- [81] J. H. Irving and J. G. Kirkwood, "The statical mechanical theory of transport Processes. IV. The equations of hydrodynamics," *J. Chem. Phys.*, vol. 18, no. 6, p. 817, 1950.
- [82] C. Marsh, G. Backx, and M. Ernst, "Static and dynamic properties of dissipative particle dynamics," *Phys. Rev. E*, vol. 56, no. 2, pp. 1676–1691, 1997.
- [83] J. a. Backer, C. P. Lowe, H. C. J. Hoefsloot, and P. D. Iedema, "Combined length scales in dissipative particle dynamics," *J. Chem. Phys.*, vol. 123, no. 11, p. 114905, 2005.
- [84] A. Spaggiari, "Properties and applications of Magnetorheological fluids," Frat. ed Integrit{à} Strutt., vol. 23, pp. 57–61, 2013.
- [85] S. Mohammadi, "Design and fabrication of smart damper with hydraulic oil based magnetorheological fluid," Shahrood University of Thechnology, 1393.

Abstract:

Magnetorheological Fluid (MRF) is a smart material that made by dispersion of magnetizable particles in a base fluid. Because of controllable yield stress and viscosity, there are many applications for MRFs. Some of the applications are in dampers, clutches, medical equipments and stuff.

Most of researches in MRF field are including experimental tests, but expensive materials and tools are problem of this kind of researches. In other hand, analytical models can't present complete and closed answer. Moreover, structural information helps us to know better this material but both of those models can't present any information about that.

The particle-based methods can introduce useful structural information. One of these methods is Dissipative Particle Dynamics (DPD), that model fluid by special forces. DPD is a coarse grained method proportion to molecular dynamics (MD), and that is a meso-scale method. Polymers, multiphase fluids, bio and suspensions are some of applications of DPD method.

In the present study, the behavior of magnetorhological fluid is modeled by dissipative particle dynamics method. For modeling of base fluid the forces of DPD and for modeling of magnetic particles, particle magnetization model are used. The interaction between DPD particles and magnetic particles is modeled by Lennard-Jones potential. The MRF is simulated under simple shear flow by Lees-Edwards boundary condition. The velocity profile in transmit mode from solid to fluid is presented for the first time. The properties of the fluid are achieved by the tensor of stress. The effects of volume fraction and magnetization of magnetic particles are obtained, growth of these parameters increase the viscosity of the MRF. The effect of viscosity of base fluid is investigated, too. Furthermore approved proposal, the fluid in flow mode is modeled by periodic Poiseuille flow (PPF). In addition, the mixed-mode is showed by mixing simple shear flow and Poiseuille flow. The result of simulations are according to the past researches.

Keywords: Magnetorheological fluids, Dissipative Particle Dynamics, Coarse grained method, Bingham-plastic, Shear thinning



Shahrood University of Technology

School of Mechanical Engineering

Magnetorheological fluid shear flow modeling by using dissipative particle dynamics method

Student:

Arash Jafari Gharibvand

Dissertation directors:

Dr. Mahmood Norouzi

Dr. Mohammad Mohsen Shahmardan

The dissertation for degree of Master of science

February 2016