



دانشکده مهندسی مکانیک و مکاترونیک

پایان نامه کارشناسی ارشد مهندسی هوافضا-آیرودینامیک

شبیه‌سازی جریان بر روی ایرفویل در مقیاس میکرو با

روش دینامیک ذرات اتلافی

نگارنده: رخشاد دشتی گوهری

استاتید راهنما:

دکتر محمد محسن شاه‌مردان

دکتر رامین ذاکری

استاد مشاور:

دکتر محسن نظری

تیرماه ۱۴۰۰

شماره: ۲۰/۲۹۹/۱۸۷
تاریخ: ۱۴۰۰/۷/۲۰
ویرایش:

باسمه تعالی
فرمهای ارزشیابی پایان نامه کارشناسی ارشد
مربوط به ورودی‌های ۹۴ به بعد



مدیریت تحصیلات تکمیلی

فرم شماره (۳) صورتجلسه نهایی دفاع از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد

با نام و یاد خداوند متعال، ارزیابی جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد خانم رخشاد دشتی گوهری با شماره دانشجویی ۹۷۰۷۲۰۴ رشته مهندسی هوافضا گرایش آیرودینامیک تحت عنوان شبیه‌سازی جریان بر روی ایرفویل در مقیاس میکرو با روش دینامیک ذرات اتلافی که در تاریخ ۱۴۰۰/۴/۲۰ با حضور هیأت محترم داوران در دانشگاه صنعتی شاهرود برگزار شد به شرح ذیل اعلام می‌گردد:

<input type="checkbox"/> الف) درجه عالی: نمره ۲۰-۱۹	<input checked="" type="checkbox"/> ب) درجه خیلی خوب: نمره ۱۸/۹۹ - ۱۸
<input type="checkbox"/> ج) درجه خوب: نمره ۱۷/۹۹ - ۱۶	<input type="checkbox"/> د) درجه متوسط: نمره ۱۵/۹۹ - ۱۴
<input type="checkbox"/> ه) کمتر از ۱۴ غیر قابل قبول و نیاز به دفاع مجدد دارد	
نوع تحقیق: <input checked="" type="checkbox"/> نظری <input type="checkbox"/> عملی	

عضو هیأت داوران	نام و نام خانوادگی	مرتبه علمی	امضاء
۱- استاد راهنمای اول	دکتر محمد محسن شاه‌مردان	استاد	
۲- استاد راهنمای دوم	دکتر رامین ذاکری	استادیار	
۳- استاد مشاور	دکتر محسن نظری	دانشیار	
۴- استاد داور اول	دکتر محمود نوروزی	دانشیار	
۵- استاد داور دوم	دکتر مسلم صبوری	استادیار	
۶- نماینده تحصیلات تکمیلی	دکتر پوریا اکبرزاده	دانشیار	

نام و نام خانوادگی رئیس دانشکده: دکتر مهدی گردویی
تاریخ و امضاء و مهر دانشکده:
۱۴۰۰/۷/۲۰


تقدیم بہ

مقدس ترین واثرہ مادر لغت نامہ دلم، مادر مہربانم کہ زندگیم را دیون مہر و عطف آن می دانم

پدر، مہربانی مشفق، بردبار و حامی

خواهرم ہمراہ ہمیشگی و پشتوانہ زندگیم

شکر و قدردانی:

اکنون که به یاری پروردگار و راهبانی اساتید بزرگ، موفق به پایان این رساله شده‌ام و وظیفه خود دانسته که نهایت سپاسگزاری را از تمامی عزیزانی که در این راه مریاری نمودند به عمل آورم:

در آغاز از استاد بزرگوارم جناب آقای دکتر امین ذاکری به پاس زحمات بی‌شائبه‌شان در طی انجام این تحقیق سپاسگزاری می‌نمایم بدون شک انجام این پایان نامه بدون کمک و راهبانی‌های ارزنده ایشان امکان پذیر نبوده است و از اساتید راهبانی که انقدرم جناب آقایان دکتر محمد محسن شاه مردان و دکتر محسن نظری که ساگر دی محضرشان از بزرگترین افتخارات زندگی علمی ام می‌باشد کمال شکر را دارم. از داوران گرامی جناب آقایان دکتر نوروزی و دکتر صبوری که زحمت داوری و تصحیح این پایان نامه را به عهده داشتند کمال سپاس را دارم.

رشدادستی کوهری

تیرماه ۱۴۰۰

اینجانب رخشاد دشتی گوهری دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته مهندسی هوافضا گرایش آیرودینامیک دانشکده مهندسی مکانیک و مکاترونیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه شبیه سازی جریان بر روی ایرفویل در مقیاس میکرو با روش دینامیک ذرات اتلافی تحت راهنمایی جناب دکتر محسن شاه-مردان و جناب دکتر رامین ذاکری و جناب دکتر محسن نظری متعهد می شوم.

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
 - در استفاده از نتایج پژوهش های محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
 - مطالب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است.
 - کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد و مقالات مستخرج بانام «دانشگاه صنعتی شاهرود» و یا «*Shahrood University of Technology*» به چاپ خواهد رسید.
 - حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج 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 بافت های آن ها) 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.
- تاریخ
امضای دانشجو

مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه های رایانه ای، نرم افزارها و تجهیزات ساخته شده) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی باشد.

در این پایان‌نامه، از روش دینامیک ذرات اتلافی جهت شبیه‌سازی جریان حول ریزایرفویل استفاده شده است. در شاخص ریز همچون مقیاس میکرو رژیم جریانی، یک رژیم ناپیوسته می‌باشد. شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی مبتنی بر پیوستگی است و دامنه محاسباتی در ناحیه سیال محصور می‌باشد. در این پایان‌نامه از یک نوع روش مولکولی استفاده شده است. می‌توان روش‌های مولکولی را به روش دینامیک مولکولی، لتیس بولتزمن، مونت کارلو و دینامیک ذرات اتلافی تقسیم نمود. روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در شاخص میکرو هزینه‌های محاسباتی بالایی دارد و در روش لتیس بولتزمن درجات آزادی ذرات کاهش پیدا می‌کند که این باعث می‌شود از واقعیت دور شویم، در واقع شبیه‌سازی باید به واقعیت نزدیک باشد در نتیجه نیاز به نرم‌افزاری داریم تا به واقعیت نزدیک و با هزینه کم در رژیم ناپیوسته بتوان از آن استفاده نمود. در نتیجه در این پایان‌نامه از روش شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی توسط کدنویسی استفاده شد. برای اصلاح دینامیک سیالات محاسباتی یک مدل برای مرز جامد هر نوع هندسه پیچیده در این مطالعه پیشنهاد شده است. نتایج بدست آمده شامل بررسی پروفیل سرعت در هندسه ساده کانال و مقایسه شبیه‌سازی جریان در کانال به روش دینامیک ذرات اتلافی و دینامیک سیالات محاسباتی می‌باشد. خطای مقایسه پروفیل سرعت در کانال به کمک این دو روش ۶ درصد بدست آمد. در ادامه، جریان حول ایرفویل لوزی شکل شبیه‌سازی شده است. جریان شروع به گسترش حول ریزایرفویل می‌کند، الگوی خطوط جریان متقارن است. با اعمال این شرایط مرزی ذرات به تعادل می‌رسند. مهم‌ترین ویژگی شرایط مرزی اعمال شده در شبیه‌سازی به روش دینامیک ذرات اتلافی، نفوذ ناپذیری ذرات به داخل ریزایرفویل و همچنین بازگشت صحیح ذرات از دیواره ریزایرفویل می‌باشد. نتایج برای هندسه منحنی الخط ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زوایای ۰، ۳، ۶، ۹ و ۱۰ نیز گسترش داده شده است و می‌توان گسترش جریان حول ریز-ایرفویل را مشاهده نمود، همچنین تأثیر زاویه حمله و وتر بر ضرایب برا و پسا برای یک ایرفویل ناکا ۰۰۱۲

بررسی شده است. علاوه بر این مقایسه داده‌های به دست آمده از شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی با سایر کارهای تحقیقاتی، برای نسبت حداکثر ضرایب برا و پسا نیز صورت گرفته است سپس نمودار ضریب پسا و ضریب برا همچنین نمودار نسبت نیروی برا بر نیروی پسا بر حسب زاویه حمله با دو روش شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی و دینامیک سیالات محاسباتی مقایسه شده است. خطای مقایسه این دو روش کم‌تر از ۳ درصد محاسبه گردید. تغییر ویژگی‌های آیرودینامیکی به تغییرات ضرایب برا و پسا نسبت به زاویه حمله برای هر نسبت ابعادی مرتبط است. با مقایسه دو روش دینامیک ذرات اتلافی و دینامیک سیالات محاسباتی متوجه خواهیم شد نتایج بسیار نزدیک هم هستند اما دینامیک سیالات محاسباتی مرزهای دیوار و برخورد ذرات را صریحاً مدل‌سازی نمی‌کند. مزیت روش استفاده شده در این پایان‌نامه در واقع شبیه‌سازی واقعی جریان فیزیکی می‌باشد، همچنین روش مولکولی دینامیک ذرات اتلافی کمک می‌کند جواب‌های بدست آمده به واقعیت نزدیک‌تر باشد.

کلیدواژه‌ها: دینامیک ذرات اتلافی، دینامیک سیالات محاسباتی، ریزایرفویل، ناکا ۰۰۱۲، ضریب پسا، ضریب

برا

فهرست

فهرست جداول	س
فهرست اشکال	ش
فهرست علائم و نشانه‌ها	ع
فهرست نشانه‌های اختصار	غ
فصل اول: مقدمه	۱
۱-۱ مقدمه	۲
۲-۱ مروری بر آیرودینامیک	۳
۳-۱ روش‌های مولکولی	۴
۱-۳-۱ روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی	۵
۲-۳-۱ روش مستقیم مونت کارلو	۱۰
۳-۳-۱ روش شبیه‌سازی بولتزمن	۱۱
۴-۳-۱ روش دینامیک ذرات اتلافی	۱۲
۴-۱ اهداف تحقیق	۱۳
۵-۱ مروری بر کارهای انجام شده	۱۴
۶-۱ نوآوری و بیان ضعف کارهای گذشتگان	۱۹
۷-۱ معرفی فصل‌های پایان‌نامه	۲۰
فصل دوم: معادلات حاکم	۲۱

۲۲	۱-۲ مقدمه
۲۲	۲-۲ معادلات حاکم
۲۷	۳-۲ انتگرال عددی
۲۷	۱-۳-۲ طرح انتگرال مبتنی بر سرعت ورت
۲۸	۲-۳-۲ روش انتگرال گیری صریح اویلر
۲۹	۳-۳-۲ روش تقسیم بندی شاردلو
۲۹	۴-۳-۲ روش قانون تناوبی
۳۱	۴-۲ شرایط مرزی
۳۱	۱-۴-۲ انواع شرایط مرزی
۴۲	۵-۲ ضرایب آیرودینامیکی
۴۲	۱-۵-۲ ضریب پسا
۴۲	۲-۵-۲ ضریب برا
۴۳	۶-۲ محاسبه نیروهای آیرودینامیکی به کمک روش دینامیک ذرات اتلافی
۴۵	فصل سوم: بیان مسئله و نتایج حاصل از شبیه سازی
۴۶	۱-۳ تشریح مسئله
۴۶	۲-۳ هندسه مسئله
۴۷	۳-۳ بازتاب از دیواره پیچیده
۴۹	۴-۳ جریان در کانال
۵۰	۱-۴-۳ مقایسه جریان درون کانال
۵۳	۵-۳ اعتبار سنجی شبیه سازی جریان حول ایرفویل ناکا ۰۰۱۲
۵۴	۶-۳ جریان روی ایرفویل ساده با روش دینامیک ذرات اتلافی
۵۴	۱-۶-۳ حرکات ذرات بر روی ایرفویل لوزی شکل

۶۰	۷-۳ گسترش نتایج با ایرفویل ناکا ۰۰۱۲
۶۰	۱-۷-۳ شبیه‌سازی جریان حول ایرفویل صفر درجه به روش دینامیک ذرات اتلافی
۶۲	۲-۷-۳ شبیه‌سازی جریان حول ایرفویل سه درجه به روش دینامیک ذرات اتلافی
۶۴	۳-۷-۳ شبیه‌سازی جریان حول ایرفویل شش درجه به روش دینامیک ذرات اتلافی
۶۶	۴-۷-۳ شبیه‌سازی جریان حول ایرفویل نه درجه به روش دینامیک ذرات اتلافی
۶۸	۵-۷-۳ شبیه‌سازی جریان حول ایرفویل ده درجه به روش دینامیک ذرات اتلافی
۷۱	۸-۳ تعیین ضرایب آیرودینامیکی
۷۲	۱-۸-۳ ضرایب آیرودینامیکی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۰ درجه
۷۳	۲-۸-۳ ضرایب آیرودینامیکی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۳ درجه
۷۳	۳-۸-۳ ضرایب آیرودینامیکی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۶ درجه
۷۵	۴-۸-۳ ضرایب آیرودینامیکی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۹ درجه
۷۷	۵-۸-۳ ضرایب آیرودینامیکی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۱۰ درجه
۷۸	۹-۳ نتیجه و بحث
۸۵	فصل چهارم: نتیجه‌گیری و پیشنهادات
۸۶	۱-۴ نتیجه‌گیری
۸۸	۲-۴ پیشنهادات
۸۹	منابع

فهرست جداول

- جدول ۳-۱. پارامترهای مورد استفاده شده در روش دینامیک ذرات اتلافی برای مقایسه با روش تحلیلی ۵۲
- جدول ۳-۲. پارامترهای شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی ۵۴
- جدول ۳-۳. ابعاد هندسه ۵۴
- جدول ۳-۴. پارامترهای شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی برای ناکا ۰۰۱۲ در ۰ درجه ۷۲
- جدول ۳-۵. بدست آوردن ضرایب آیرودینامیکی در ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در ۰ درجه ۷۲
- جدول ۳-۶. پارامترهای شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی برای ناکا ۰۰۱۲ در ۳ درجه ۷۳
- جدول ۳-۷. بدست آوردن ضرایب آیرودینامیکی در ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در ۳ درجه ۷۳
- جدول ۳-۸. پارامترهای شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی برای ناکا ۰۰۱۲ در ۶ درجه ۷۴
- جدول ۳-۹. بدست آوردن ضرایب آیرودینامیکی در ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در ۶ درجه ۷۵
- جدول ۳-۱۰. پارامترهای شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی برای ناکا ۰۰۱۲ در ۹ درجه ۷۵
- جدول ۳-۱۱. بدست آوردن ضرایب آیرودینامیکی در ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در ۹ درجه ۷۷
- جدول ۳-۱۲. پارامترهای شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی برای ناکا ۰۰۱۲ در ۱۰ درجه ۷۷
- جدول ۳-۱۳. بدست آوردن ضرایب آیرودینامیکی در ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در ۱۰ درجه ۷۸
- جدول ۳-۱۴. ضریب برا بر حسب زاویه حمله ۸۰
- جدول ۳-۱۵. ضریب پسا بر حسب زاویه حمله ۸۰
- جدول ۳-۱۶. ضریب برا بر حسب زاویه حمله ۸۲

فهرست اشکال

- شکل ۱-۱. نزدیکترین ذرات در دستگاه کارتیزین ۹
- شکل ۱-۲. پتانسیل لنارد-جونز و پتانسیل نرم آن به طور متوسط ۲۴
- شکل ۲-۲. اجرای شرایط مرزی متقارن به صورت شماتیک توصیف شده است. (الف) پیکربندی ذرات دینامیک ذرات اتلافی و تصاویر نامرئی آنها ارائه شده است. لایه ذرات واقعی و لایه ذرات نامرئی مشخص شده‌اند. (ب) مکانیسم بازتاب ویژه برای به روزرسانی موقعیت ذرات سیال نشان داده شده است. (پ) مکانیزم به روزرسانی موقعیت ذرات نامرئی..... ۳۲
- شکل ۲-۳. نمایش شماتیک ذرات دینامیک اتلافی، انتقال و چرخش زاویه‌ای ذرات ۳۷
- شکل ۲-۴. هر ذره سیال در شعاع برش از دیواره جامد با ذرات منجمد آنی مربوطه خود در تعامل است. اندازه ذرات منجمد آنی از ذرات سیال است، سرعت زاویه‌های آن صفر و سرعت خطی آن از دیواره جامد است ۳۸
- شکل ۲-۵. مقایسه برخورد ذرات مایع و دیواره قسمت a روش مرز دیواره منجمد و قسمت b روش مرز آنی ۳۹
- شکل ۲-۶. نمودار تابع Ψ (rpw) ۴۰
- شکل ۲-۷. مقایسه طرح‌های جایگذاری مجدد ذرات سیالی که از دیواره جامد عبور می‌کنند ۴۰
- شکل ۳-۱. بخش عرضی دامنه محاسباتی برای شبیه‌سازی ایرفویل لوزی شکل ۴۷
- شکل ۳-۲. الف- برخورد ذره دامنه محاسباتی با نقاط هندسه ب- انعکاس ذره پس از برخورد ۴۹
- شکل ۳-۳. نمونه‌ای از شبکه که برای انجام مراحل آماری مورد استفاده قرار گرفت ۵۱
- شکل ۳-۴. مقایسه پروفیل سرعت در کانال به دو روش دینامیک سیالات محاسباتی و دینامیک ذرات اتلافی جهت شبیه‌سازی جریان درون کانال ساده در شرایط پایا ۵۲

- شکل ۳-۵. مقایسه پروفیل سرعت در کانال به دو روش تحلیلی و دینامیک ذرات اتلافی جهت شبیه‌سازی جریان درون کانال ساده در شرایط پایا ۵۳
- شکل ۳-۶. حرکت ذرات از روی هندسه، شماتیک (۱) مربوط به گام زمانی ۲۰۰ و شماتیک (۲) مربوط به گام زمانی ۳۴۰ می‌باشد. ۵۵
- شکل ۳-۷. حرکت ذرات از روی هندسه، شماتیک (۳) مربوط به گام زمانی ۴۲۰ و شماتیک (۴) مربوط به گام زمانی ۶۲۰ می‌باشد. ۵۵
- شکل ۳-۸. حرکت ذرات از روی هندسه، شماتیک (۵) مربوط به گام زمانی ۷۰۰ و شماتیک (۶) مربوط به گام زمانی ۷۴۰ می‌باشد. ۵۶
- شکل ۳-۹. حرکت ذرات از روی هندسه، شماتیک (۷) مربوط به گام زمانی ۷۸۰ و شماتیک (۸) مربوط به گام زمانی ۸۶۰ می‌باشد. ۵۶
- شکل ۳-۱۰. حرکت ذرات از روی هندسه، شماتیک (۹) مربوط به گام زمانی ۹۲۰ و شماتیک (۱۰) مربوط به گام زمانی ۱۰۰۰ می‌باشد. ۵۷
- شکل ۳-۱۱. خطوط جریان حول ایرفویل لوزی شکل ۵۷
- شکل ۳-۱۲. کانتور سرعت بدست آمده از شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی ۵۹
- شکل ۳-۱۳. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۰ درجه، شماتیک (۱) مربوط به گام زمانی ۱۰۰ و شماتیک (۲) مربوط به گام زمانی ۲۰۰ می‌باشد. ۶۱
- شکل ۳-۱۴. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۰ درجه، شماتیک (۳) مربوط به گام زمانی ۲۸۰ و شماتیک (۴) مربوط به گام زمانی ۵۸۰ می‌باشد. ۶۱

شکل ۳-۱۵. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۰ درجه، شماتیک (۵) مربوط به گام زمانی ۷۲۰ و شماتیک (۶) مربوط به گام زمانی ۱۰۰۰ می‌باشد. ۶۲

شکل ۳-۱۶. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۳ درجه، شماتیک (۱) مربوط به گام زمانی ۷۵ و شماتیک (۲) مربوط به گام زمانی ۱۷۵ می‌باشد. ۶۳

شکل ۳-۱۷. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۳ درجه، شماتیک (۳) مربوط به گام زمانی ۲۷۵ و شماتیک (۴) مربوط به گام زمانی ۶۱۵ می‌باشد. ۶۳

شکل ۳-۱۸. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۳ درجه، شماتیک (۵) مربوط به گام زمانی ۸۷۵ و شماتیک (۶) مربوط به گام زمانی ۱۰۰۰ می‌باشد. ۶۴

شکل ۳-۱۹. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۶ درجه، شماتیک (۱) مربوط به گام زمانی ۵۱۳ و شماتیک (۲) مربوط به گام زمانی ۷۱۳ می‌باشد. ۶۵

شکل ۳-۲۰. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۶ درجه، شماتیک (۳) مربوط به گام زمانی ۱۳۲۰ و شماتیک (۴) مربوط به گام زمانی ۹۲۰ می‌باشد. ۶۶

شکل ۳-۲۱. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۶ درجه، شماتیک (۵) مربوط به گام زمانی ۱۵۰۰ و شماتیک (۶) مربوط به گام زمانی ۲۰۰۰ می‌باشد. ۶۶

شکل ۳-۲۲. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۹ درجه، شماتیک (۱) مربوط به گام زمانی ۴۰۰ و شماتیک (۲) مربوط به گام زمانی ۶۰۰ می‌باشد. ۶۷

شکل ۳-۲۳. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۹ درجه، شماتیک (۳) مربوط به گام زمانی ۱۲۸۰ و شماتیک (۴) مربوط به گام زمانی ۱۵۳۰ می‌باشد. ۶۷

- شکل ۳-۲۴. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۹ درجه، شماتیک (۵) مربوط به گام زمانی ۲۰۰۰ می باشد ۶۸
- شکل ۳-۲۵. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۱۰ درجه، شماتیک (۱) مربوط به گام زمانی ۱۹۴ و شماتیک (۲) مربوط به گام زمانی ۵۹۴ می باشد. ۶۹
- شکل ۳-۲۶. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۱۰ درجه، شماتیک (۳) مربوط به گام زمانی ۷۰۰ و شماتیک (۴) مربوط به گام زمانی ۱۱۰۰ می باشد. ۶۹
- شکل ۳-۲۷. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۱۰ درجه، شماتیک (۵) مربوط به گام زمانی ۱۶۵۰ و شماتیک (۶) مربوط به گام زمانی ۲۰۰۰ می باشد. ۷۰
- شکل ۳-۲۸. ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ (در زاویه ۰ درجه) رسم شده در نرم افزار اکسل ۷۲
- شکل ۳-۲۹. ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ (در زاویه ۳ درجه) رسم شده در نرم افزار اکسل ۷۳
- شکل ۳-۳۰. (الف) ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ (در زاویه ۶ درجه) رسم شده در نرم افزار اکسل (ب) منحنی بالای ایرفویل (پ) منحنی پایین ایرفویل ۷۵
- شکل ۳-۳۱. (الف) ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ (در زاویه ۹ درجه) رسم شده در نرم افزار اکسل (ب) منحنی بالای ایرفویل (پ) منحنی پایین ایرفویل ۷۶
- شکل ۳-۳۲. (الف) ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ (در زاویه ۱۰ درجه) رسم شده در نرم افزار اکسل (ب) منحنی بالای ایرفویل (پ) منحنی پایین ایرفویل ۷۸
- شکل ۳-۳۳. مقایسه نمودار ضریب برا بر حسب زاویه حمله در روش های دینامیک سیالات محاسباتی و دینامیک ذرات اتلافی در زوایای ۰، ۳، ۶، ۹ و ۱۰ درجه ۸۱

شکل ۳-۳۴. مقایسه نمودار ضریب پسا بر حسب زاویه حمله در روش‌های دینامیک سیالات محاسباتی و دینامیک ذرات اتلافی در زوایای ۰، ۳، ۶، ۹ و ۱۰ درجه ۸۱

شکل ۳-۳۵. مقایسه نمودار ضریب پسا بر ضریب برا بر حسب زاویه حمله در روش‌های دینامیک سیالات محاسباتی و دینامیک ذرات اتلافی در زوایای ۰، ۳، ۶، ۹ و ۱۰ درجه ۸۲

شکل ۳-۳۶. مقایسه نمودار ضریب برا بر حسب زاویه حمله در روش‌های تئوری خطی و دینامیک ذرات اتلافی در زوایای ۰، ۳، ۶، ۹ و ۱۰ درجه ۸۳

فهرست علائم و نشانه‌ها

دافعه بین ذرات	a_{ij}
نیروی بقا	F^C
نیروی اتلافی	F^D
نیروی تصادفی	F^R
ثابت بولتزمن	k_B
جرم هر ذره	M
موقعیت هر ذره	r
شعاع برش	r_c
دما	T
سرعت هر ذره در جهت i	v_i
سرعت هر ذره در جهت j	v_j
علائم یونانی	
تابع وزنی	ω
ضریب نیروهای اتلافی	γ
چگالی سیال	ρ
ضریب نیروهای تصادفی	σ
متغیر تصادفی گوسی	ζ
تابع دلتا دیراک	$\delta(t)$

فهرست نشانه‌های اختصار

اندازه سیستم در راستای x	dl_x
اندازه سیستم در راستای y	dl_y
چگالی کل ذرات	ρ_0
مرحله به تعادل رسیدن سیستم	i_{steps}
مراحل زمانی پس از تعادل سیستم	$maxstp$

فصل اول: مقدمه

۱-۱ مقدمه

در سال‌های اخیر وسایل نقلیه هوایی بدون سرنشین^۱ مورد توجه قرار گرفته‌اند و تلاش جدی برای طراحی این نوع هواپیماها وجود دارد. در واقع این وسایل نقلیه هوایی در حیطه نظامی بسیار مورد استفاده قرار می‌گیرند. این وسایل نقلیه هوایی بدون سرنشین به دلیل استقرار سریع، قابلیت دسترسی به اطلاعات، سطح مقطع کم و ... یک گزینه بسیار مناسب برای استفاده نظامی می‌باشند [۱]. یکی از جنبه‌های جالب و کمتر کار شده در پروازهای مقیاس کوچک، آیرودینامیک جریان ناپیوسته سیال است. ترکیبی از مقیاس کوچک و سرعت کم در رژیم ناپیوسته سیال، منجر به یک رژیم پرواز با عدد رینولدز کم می‌شود [۲]. امروزه علوم نانو و شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای در مقیاس مولکولی، به یکی از پرتفدارترین موضوع‌های مورد مطالعه در دنیا مبدل شده است. در این-جا به خوبی می‌توان اهمیت علم آیرودینامیک را درک نمود زیرا هواپیما در سیال هوا حرکت می‌کند و تنها آیرودینامیک است که می‌تواند با تخمین و بدست آوردن نیروها و گشتاورهای آیرودینامیکی هواپیما باعث بهتر شدن عملکرد آن شود. جریان گاز در اطراف ساختارهای میکرو مقیاس، بخشی جدایی‌ناپذیر از بسیاری از برنامه‌های کاربردی میکروالکترومکانیکی^۲ از جمله میکرو توربو [۳]، سنسورهای شیمیایی [۴]، میکرو پمپ‌ها [۵-۷]، دستگاه‌های کنترل جریان است. وسایل نقلیه میکرو و نانو هواپیما به عنوان "سیستم‌های بسیار سبک وزن و سبک هوا" با طول حداکثر ۱۵ سانتی‌متر و وزن کمتر از ۲۰ گرم تعریف می‌شوند. انتظار می‌رود که پیشرفت‌های فناوری، عمدتاً مبتنی بر فناوری‌های میکرو و فناوری نانو، به شیوه‌ای تکاملی ادامه یابد تا قابلیت‌های وسایل نقلیه آینده نانومتری و نانومواد را بهبود بخشد همچنین زمان پرواز و زمان حمل بار نیز بهبود یابد. در ادامه به مروری بر مباحث آیرودینامیک و نیروهای موثر و همچنین به روش‌های شبیه‌سازی مولکولی جریان پرداخته شده است.

¹Unmanned aerial vehicle

²Micro-electro-mechanical-system

۱-۲ مروری بر آیرودینامیک

بنیادی‌ترین وجه تمایز بین جامدات، مایعات و گازها در سطح مولکولی و اتمی است. در گازها فاصله بین مولکولی بسیار بیشتر از مایعات و جامدات می‌باشد. بنابراین نفوذ نیروهای بین مولکولی خیلی ضعیف‌تر است و مولکول‌ها در گاز آزادانه حرکت می‌کنند. این آزادی حرکت مولکول‌ها در مایعات و گازها منجر به خواص فیزیکی مشابهی می‌شود اما تفاوت‌هایی نیز بین جریان مایعات و جریان گازها وجود دارد [۸]. از آنجا که آیرودینامیک مطالعه اجسام متحرک در هوا را برای ما میسر می‌کند، برای شبیه‌سازی جریان هوا به صورت مولکولی در اطراف یک ریزایرفویل نیازمند علم آیرودینامیک و قوانین حاکم بر آن می‌باشیم در نتیجه به طور خاص از دسته‌بندی مباحث دینامیک سیالات به حوزه آیرودینامیک پرداخته می‌شود.

آیرودینامیک علمی کاربردی است و کاربردهای عملی بسیاری در مهندسی دارد. صرف‌نظر از دقت یک نظریه آیرودینامیکی یا پیچیدگی ریاضی یک حل عددی و یا آزمایش آیرودینامیکی، هدف تمام این تلاش‌ها تخمین نیروها و گشتاورهای وارد بر مقاطع بال و ... می‌باشد. هدف اصلی در آیرودینامیک، سیال در حال حرکت است در نتیجه هم سرعت و هم جهت سرعت بسیار حائز اهمیت می‌باشد. تخمین نیروها و گشتاورهای جسم پرنده از مهم‌ترین دلایل استفاده از علم آیرودینامیک می‌باشد زیرا با بدست آوردن این نیروها می‌توان وسایل پرنده را به پرواز درآورد. نیروها و گشتاورهای آیرودینامیکی وارد بر بدنه از دو منبع اصلی توزیع فشار و توزیع تنش بر روی سطح سرچشمه می‌گیرد [۹]. صرف نظر از پیچیدگی شکل جسم، تمام نیروها و گشتاورهای آیرودینامیکی که بر آن عمل می‌کنند از این دو منبع سرچشمه می‌گیرد. در هر شکل و طرحی از مقطع بال، نیروی برا از طریق ایجاد فشار بزرگتری در زیر مقطع بال نسبت به بالای آن تولید می‌شود در واقع با بیشتر شدن تعداد مولکول‌های هوا در زیر مقطع بال که منجر به فشار بیشتر نسبت به قسمت فوقانی مقطع بال می‌شود منجر به ایجاد اختلاف فشار در مقطع می‌شود، همچنین نیروی دیگر حائز اهمیت نیروی پسا می‌باشد که در موازات جریان بوجود می‌آید. مطالعه تجربی جریان گاز در مقیاس میکروسکوپی به واسطه ابعاد فیزیکی

کوچک به طور ذاتی مشکل است و عمدتاً به جریان در کانال‌های ساده محدود شده است. مطالعات عددی اخیر صورت گرفته در مورد جریان‌های گاز، در میکرو کانال‌ها [۱۰-۱۵] وجود دارد. برای رژیم جریان ناپیوسته نیازمند روش مولکولی می‌باشیم که در بخش بعدی به آن پرداخته شده است.

۱-۳ روش‌های مولکولی

شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی مبتنی بر پیوستگی است و مرزهای دیوار و برخورد ذرات در این روش صریحاً مدل‌سازی نمی‌شود. با توجه به محدودیت روش‌های عددی پیوسته در شاخص ریز و اهمیت بررسی خواص آیرودینامیکی ریزایرفویل، ضرورت تحقیق در این شاخه آشکار می‌شود. در این مطالعه از روش مولکولی دانه درشت یا دینامیک ذرات اتلافی^۱ برای شبیه‌سازی ریزایرفویل استفاده خواهیم نمود. با توجه به وجود روش‌های مختلف مولکولی ضرورت انتخاب روش فوق، در این است که در شاخص ریز برخورد بین ذرات اهمیت دارد و روش دینامیک مولکولی^۲ در شاخص میکرو هزینه‌های محاسباتی بالایی دارد و در روش لتیس بولتزمن^۳ جریان در هشت یا به صورت کلی در جهات محدودی بررسی می‌شود در نتیجه درجات آزادی کم می‌باشد که این باعث می‌شود از واقعیت دور شویم. باید در نظر داشت شبیه‌سازی در سطح میکرو باید به واقعیت نزدیک باشد در نتیجه نیازمند نرم‌افزار قوی هستیم تا در رژیم ناپیوسته جوابگو باشد [۱۶]. با انتخاب شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی، جریان در تعداد جهات بیشتری نسبت به روش لتیس بررسی می‌شود همچنین هزینه کمی در بردارد. در این روش شاخص زمانی و طولی افزایش می‌یابد. با افزایش شاخص زمانی و طولی به واقعیت نزدیک شده و می‌توان به شبیه‌سازی فیزیک واقعی جریان دست یافت. پس از شبیه‌سازی جریان حول ریزایرفویل، تجزیه و تحلیل ویژگی‌های آیرودینامیکی ریزایرفویل‌ها امری بسیار مهم می‌باشد. برای تحلیل این ویژگی‌ها می‌توان به ضرایب آیرودینامیکی اشاره نمود. با بدست آوردن نمودار ضریب برا و پسا می‌توان به عملکرد ریزایرفویل‌ها دست یافت. در ادامه تئوری و روش‌های عددی برای شبیه‌سازی جریان گاز در سطح مزوسکوپ و اتمی مورد بحث قرار

¹Dissipative Particle Dynamics

²Molecular Dynamic

³Lattice Boltzmann Method

گرفته است. چنین توصیفی برای گازهای در حال گذار و رژیم‌های مولکولی آزاد لازم است. در ابتدا، ما روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و لتیس بولتزن و پس از آن شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو^۱ که یک رویکرد تصادفی مناسب برای گازهاست را ارائه و سپس در پایان این قسمت به روش دینامیک ذرات اتلافی، روش مورد استفاده در این پایان‌نامه پرداخته شده است.

۱-۳-۱ روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

دینامیک مولکولی یک روش شبیه‌سازی است که در آن سیستم دینامیکی ذرات با انتگرال معادلات حرکت عددی تحت مکانیک کلاسیک (یا نیوتنی)، توسط آلدرو و وینورایت [۱۷] بیان شد. تکامل زمان برای یک سیستم دینامیک مولکولی با معادلات حرکت توصیف می‌شود [۱۸].

$$\begin{cases} \frac{\partial r_i}{\partial t} = v_i \\ \frac{\partial v_i}{\partial t} = a_i \end{cases} \quad (۱-۱)$$

در فرمول بالا r_i ، v_i و a_i به ترتیب موقعیت، سرعت و بردار شتاب ذرات می‌باشند. شتاب a_i در این سیستم با قانون دوم حرکت نیوتن در فرمول زیر بیان شده است.

$$F_i = m_i a_i \quad (۲-۱)$$

جرم ذره‌ها (m_i) و نیرو (F_i) توسط پتانسیل (V) و با توجه به موقعیت ذرات داده می‌شوند:

$$F_i = -\nabla_{r_i} m_i V(r_i, \dots, r_N) \quad (۳-۱)$$

تابع V بیانگر انرژی بالقوه سیستم برای هر پیکربندی احتمالی ذرات $\{r_i, \dots, r_N\}$ است. در سال ۱۹۹۰ کارلسون [۱۹] از لحاظ مجموع فعل و انفعالات بدنه (یا به صورت زوج) تابع V را تعریف نمود. تابع V به عنوان مجموعه‌ای از فعل و انفعالات به صورت جفت $\Phi(r_{ij})$ در فرمول زیر نوشته شده است:

¹Monte Carlo Method

$$\begin{cases} V(r_i, \dots, r_N) = \sum_i \sum_{j>i} \phi(r_{ij}) \\ r_{ij} = |r_i - r_j| \end{cases} \quad (4-1)$$

در فرمول بالا، r_{ij} فاصله بین ذرات i و j است، شرط $j > i$ جمع داخلی را تضمین می‌کند که سهم هر جفت در پتانسیل، فقط یک بار در نظر گرفته می‌شود. در سال ۱۹۲۴ جان ادوارد لنارد-جونز [۲۰] یک نمونه متداول از پتانسیل‌های جفت، به نام پتانسیل لنارد-جونز را بیان نمود، که اساساً اتم‌های یک گاز خاص را در تعامل با مسافت طولانی از طریق جذب نیروهای وان‌دروالس، توصیف می‌کند. در فرمول ۱-۵ نیروهای دفع‌کننده ناشی از هم‌پوشانی مدارهای الکترون ارائه شده است:

$$\phi_{LJ}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \quad (5-1)$$

در فرمول بالا ϵ عمق پتانسیل جاذب است و σ فاصله‌ای که پتانسیل از صفر عبور می‌کند و تا بی نهایت مثبت ادامه می‌یابد را تعیین می‌کند و به طور موثر شعاع ذرات موجود در سیستم را تعیین می‌کند. رحمان [۲۱] در سال ۱۹۶۴ و ورت [۲۲] در سال ۱۹۶۷، پتانسیل لنارد جونز را در اولین شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی آرگون مایع مورد استفاده قرار دادند و هنوز هم در مطالعات اخیر متداول است.

بخش مهمی از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی انتخاب الگوریتم زمان است که برای انتگرال معادلات حرکت و ایجاد دینامیک سیستم مورد استفاده قرار می‌گیرد. این موارد با استفاده از روش تفاضل محدود، تقریب حل معادلات دیفرانسیل با استفاده از گسسته شدن زمان (با زمان کمی Δt) بدست می‌آید. در طول اجرای این شبیه‌سازی، محاسبات مستعد خطاهایی از قبیل گرد کردن می‌باشند. برای محاسبه پیشرفت در زمان یک سیستم در روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی از معادله اوپلر استفاده می‌شود. یکپارچه‌سازی معادله اوپلر:

[۲۳]

$$\begin{cases} r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + v_i(t)\Delta t + \frac{1}{2}a_i(t)\Delta t^2, \\ v_i(t + \Delta t) = v_i(t) + a_i(t)\Delta t, \\ a_i(t + \Delta t) = \frac{F_i(t+\Delta t)}{m_i} \end{cases} \quad (6-1)$$

خطای عددی $0(\Delta t^3)$ برای r_i و خطای عددی $0(\Delta t^2)$ برای v_i را ایجاد می‌کنند که بسیار بزرگ هستند. برای کاهش خطاهای مرتبط با زمان، طیف وسیعی از طرح‌های انتگرال در طی سالیان متمادی توسعه داده شده است و با طرح معروف به الگوریتم ولت به طور مکرر روبرو می‌شویم. برای انجام شبیه‌سازی‌های ارائه شده در بخش-های بعدی این پایان‌نامه، از الگوریتم سرعت ولت استفاده شده است. در سال ۱۹۸۲ این الگوریتم توسط برنس و ویلسون [۲۴] بیان گردید. در معادله ۷-۱ می‌توان این الگوریتم را مشاهده نمود.

$$\begin{cases} r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + v_i(t)\Delta t + \frac{1}{2}a_i(t)\Delta t^2 \\ v_i\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = v_i(t) + \frac{1}{2}a_i(t)\Delta t \\ a_i(t + \Delta t) = \frac{F_i(t+\Delta t)}{m_i} \\ v_i(t + \Delta t) = v_i\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{1}{2}a_i(t + \Delta t)\Delta t \end{cases} \quad (7-1)$$

هنگام عملی کردن الگوریتم یکپارچه‌سازی زمان، پتانسیل تعامل (دامنه نامحدودی دارد اما در مسافت‌های طولانی به صفر نزدیک می‌شود) تقریباً همیشه در یک فاصله شعاع برش برای رسیدن به ذخیره مناسب هزینه محاسباتی، با دقت انتخاب شده است. برای صرفه‌جویی در انرژی، باید مقادیر پتانسیل تعامل در شعاع برش به صفر برسد.

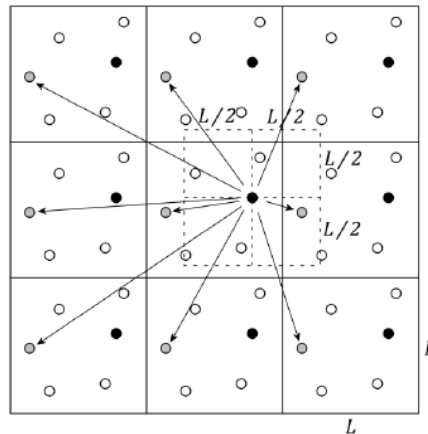
در فرمول ۸-۱، پتانسیل لنارد-جونز به صورت جفت $\Phi_{LJ}(r)$ آورده شده است. مقدار معمول فاصله برش استفاده شده برای پتانسیل لنارد-جونز $\sigma = 2/5$ است.

$$\Phi_{LJ}(r) = \begin{cases} \Phi_{LJ}(r) - \Phi_{LJ}(r_c) & \text{if } r \leq r_c \\ 0 & \text{if } r > r_c \end{cases} \quad (8-1)$$

به طور کلی موضوع مهم دیگر در اجرای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و سایر تکنیک‌های شبیه‌سازی ذرات، شرایط مرزی می‌باشد. در مطالعات به طور خاص در پدیده‌های سطحی مانند تجزیه و تحلیل کشش سطحی یا سیستم‌های چند فاز، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به طور کلی با استفاده از شرایط مرزی متناوب انجام می‌شود. با تعیین یک ناحیه محاسباتی، شبیه‌سازی انجام و همه ذرات آن به طرف مقابل برگردانده می‌شوند، به گونه‌ای که وقتی یک ذره با عبور از یک طرف ناحیه محاسباتی شبیه‌سازی، ناحیه محاسباتی را ترک کند، دوباره در طرف مقابل ظاهر می‌شود. ناحیه محاسباتی در شبیه‌سازی به طور نامحدود در تمام مسیرهای دکارتی تکثیر می‌شود و هر ذره در ناحیه محاسباتی یک مجموعه نامحدود از تصاویر خود را در هر یک از این ناحیه‌ها نشان می‌دهد. به طور موثر یک سیستم بی‌نهایت، فضا را به طور کامل پر می‌کند. این بدان معنی است که ذرات به اندازه کافی نزدیک (کمتر از شعاع برش) به یک مرز نه تنها با سایر ذرات موجود در ناحیه محاسباتی بلکه با تصاویر آن‌ها در نواحی همسایگی تعامل خواهند داشت. [۲۵]

راپاپورت [۲۶] در سال ۲۰۰۴، ساده‌سازی قابل توجهی را در این طرح ارائه داد، اگر تمام طول‌های جانبی ناحیه محاسباتی شبیه‌سازی از $2r_c$ بیشتر باشد، هر ذره در همسایگی ذره j نیز فاصله‌ای بیش از $2r_c$ دارد، به این معنی است که یک ذره با حداکثر یکی از این ذرات که در همسایگی خود قرار دارد می‌تواند در فاصله شعاع برش باشد. به عبارت دیگر، ذره j و یا ذره i تنها با نزدیکترین ذره در تعامل خواهند بود، به شرطی که تمام طول‌های ناحیه محاسباتی شبیه‌سازی از $2r_c$ بیشتر باشد. حتی اگر تکنیک فاصله شعاع برش در زمان محاسبات که توسط ارزیابی پتانسیل‌ها در یک مرحله زمانی شبیه‌سازی شده بود به میزان قابل توجهی بهبود یابد باز هم برای بررسی اینکه آیا فاصله کمتر از شعاع برش است یا خیر، ضرورت محاسبه فاصله بین همه جفت ذرات در هر مرحله زمانی وجود دارد. در سال ۱۹۶۷ یکی دیگر از تکنیک‌های متداول در اجرای شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی معرفی شد، برای هر ذره همسایه‌ای در نظر گرفته شد، ذراتی که در یک محدوده بودند، سرعت قابل توجهی داشتند. استفاده از ذرات و ذرات همسایه برای ارزیابی اثرات متقابل می‌باشد. این لیست

می‌تواند با فاصله زمانی دلخواه از مراحل تعیین شده از قبل به روز شود همچنین در سال ۱۹۹۲ دبننتی و چپالو [۲۷] بیان نمودند بطور پویا وقتی هر ذره مسافت بیشتری را از $\frac{1}{2}(r_n - r_c)$ جابجا کند هر ۱۰ تا ۲۰ مرحله زمان با r_n با دقت بیشتری انتخاب می‌شود.



شکل ۱-۱. نزدیک‌ترین ذرات در دستگاه کارترین [۲۷]

مشاهدات اصلی در شبیه‌سازی‌های کلاسیک دینامیک مولکولی خواص ترمودینامیکی ماکروسکوپی مانند فشار، انرژی، ظرفیت گرما و غیره است. ارتباط بین اندازه‌گیری‌های میکروسکوپی در ذرات شبیه‌سازی شده و این مشاهدات ماکروسکوپی توسط مکانیک آماری ارائه شده است. هر میانگین محاسبه شده فقط میانگین یک سیستم خواهد بود؛ درحالی که مشاهدات ترمودینامیکی از نظر میانگین گروه‌ها تعریف می‌شوند.

$$\langle A \rangle_{ensemble} = \langle A \rangle_{time} \quad (9-1)$$

در عمل، این بدان معنی است که اندازه‌گیری‌ها با افزایش مراحل زمانی دقیق‌تر می‌شوند. علاوه بر این، از آنجا که شبیه‌سازی‌ها در مدت زمان ثابت هستند، باید اطمینان حاصل کرد که شبیه‌سازی در طی مراحل زمانی به اندازه کافی زیاد انجام می‌شود تا مقدار کافی از فضای فاز نمونه‌برداری شود. مهم‌ترین محدودیت تکنیک دینامیک مولکولی هزینه‌های بالای محاسباتی در انجام شبیه‌سازی‌های اتمی مقیاس‌های مکانی و زمانی قابل دستیابی با این تکنیک را با توجه به میانگین منابع محاسباتی موجود امروز به شدت محدود می‌کند. در سال

۲۰۰۲ ساتمان [۲۸] مقیاس‌های طولی که اخیراً توسط شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی قابل دسترسی بوده- اند را به ترتیب 10^{-10} متر (یا 1\AA)، شبیه‌سازی مدت زمان 10^{-9} ثانیه (یا ۱ نانومتر) بیان نمود. در حالی که شبیه‌سازی‌های فراتر از ۱۰ ثانیه (یا ۱ میکرومتر) با الگوریتم‌های موازی توزیع شده و سخت افزار تخصصی رایانه امکان‌پذیر شده‌اند.

روش دینامیک مولکولی برای شبیه‌سازی حجم بسیار کم و به ترتیب با ابعاد خطی ۱۰۰ نانومتر یا کمتر و برای فواصل زمانی چند ده نانو ثانیه مناسب است و شاید تنها رویکرد دقیق در شبیه‌سازی جریان‌های برشی باشد که در آن ممکن است پیوستار یا فرضیه نیوتنی معتبر نباشد. برای ابعاد کمتر از ده مولکول، نمی‌توان از فرضیه پیوستار استفاده نمود و برای شبیه‌سازی رفتار اتمی چنین سیستمی باید از دینامیک مولکولی استفاده شود. با این حال، روش دینامیک مولکولی در حوزه‌های نسبتاً بزرگ به دلیل وجود فواصل بین مولکولی زیاد مانند شبیه‌سازی میکرو جریان‌های گاز، ناکارآمد است. دینامیک مولکولی مسیر ذراتی را که اتم‌های سیستم را مدل می‌کنند محاسبه می‌کند، زیرا آن‌ها از نیروی متقابل نسبتاً ساده شده حاصل می‌شوند. این محدودیت یکی از اصلی‌ترین انگیزه‌ها برای ادامه تحقیقات در مورد مدل‌های درشت دانه، مانند روش‌های مبتنی بر شبکه که به طور خلاصه در بخش ۲-۵ آورده شده است.

۱-۳-۲ روش مستقیم مونت کارلو

روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو، یک رویکرد تصادفی مناسب برای گازهاست [۲۹-۳۱]. محدودیت‌ها و خطاهایی در نسخه ثابت مونت کارلو وجود دارد. روش مستقیم مونت کارلو صدها هزار یا حتی میلیون‌ها مولکول "شبیه‌سازی شده" را تقلید می‌کند اما دقیقاً حرکت مولکول‌های واقعی را دنبال نمی‌کند. روش مستقیم مونت-کارلو بر اساس تقسیم حرکت مولکولی و برخوردهای بین مولکولی با انتخاب گام زمانی کوچک‌تر از میانگین زمان برخورد و تکامل فرآیند مولکولی در مکان و زمان است. در روش مستقیم مونت کارلو، فضا به سلول‌هایی مشابه روش حجم محدود تقسیم می‌شود. سلول‌های مونت کارلو متناسب با میانگین مسیر آزاد انتخاب می-

شوند. اوران و همکاران [۳۲] در سال ۱۹۹۸ به منظور حل جریان با ویسکوزیته واقعی، اندازه سلول Δx_c متوسط را حدود $\lambda/3$ تعیین نمودند. مقادیر مولکولی میانگین و زمان و سلول به عنوان مقادیر ماکروسکوپی در مراکز سلول ارائه می‌شود. روش مستقیم مونت کارلو شامل چهار مرحله اصلی است:

- حرکت ذرات
- نمایه‌سازی و برگشت متقابل ذرات
- شبیه‌سازی برخوردها
- نمونه‌برداری از خصوصیات ماکروسکوپی میدان جریان

اولین گام شامل حرکت مولکول‌های شبیه‌سازی شده در یک بازه زمانی Δt است. برای شبیه‌سازی‌های کوچک‌تر از میانگین، گام زمانی برای زمان برخورد Δt_c انتخاب می‌شود. هنگامی که مولکول‌ها در فضا پیشروی می‌کنند، برخی از آن‌ها از طریق برخورد دیواره‌ای و یا از طریق مرزهای خروجی از حوزه محاسباتی خارج شده‌اند. از این رو، شرایط مرزی باید در این سطح اعمال می‌شود و از خصوصیات ماکروسکوپی در امتداد سطوح جامد باید نمونه‌برداری شود.

۱-۳-۳ روش شبیه‌سازی بولتزمان

روش شبکه-بولتزمان مزایای بالقوه زیادی نسبت به روش‌های معمول برای شبیه‌سازی جریان‌های کم دارد. معادله بولتزمان می‌تواند برای گاز یا مایع و همچنین برای جریان‌های ذرات ریز مورد استفاده قرار گیرد. روش بولتزمان می‌تواند جریان بر روی هندسه‌های پیچیده را به روشی کاملاً ساده شبیه‌سازی کند و به نظر می‌رسد در رژیم‌هایی که مقیاس‌های کوچک در آن مورد بحث هستند، بسیار موثر است [۳۳ و ۳۴]. معادله بولتزمان بر روی یک شبکه گسسته حل می‌شود. در ابتدا فقط استفاده محدودی از این روش در جریان‌های رقیق وجود داشت و این مربوط به کاربرد اصلی آن در شبیه‌سازی جریان‌هایی با عدد رینولدز بالا می‌باشد. پس از گذشت چندین سال

بالاخره در سال ۲۰۰۰ شبکه بولتزمن بوجود آمد. در سطح اتمی، توصیفی توسط قانون نیوتن داریم که از موقعیت‌های مولکولی و سرعت‌های مولکولی استفاده می‌کند. این موضوع بر اساس پویایی مولکولی است.

۱-۳-۴ روش دینامیک ذرات اتلافی

مدل دینامیک ذرات اتلافی متشکل از ذراتی است که با ذرات دانه درشت مطابقت دارند، بنابراین خوشه‌های مولکولی را به جای اتم‌های فردی نشان می‌دهند. این ذرات از طریق مجموعه‌ای از نیروهای وارده و وابسته به سرعت به یکدیگر متصل می‌شوند. به طور خاص، سه نوع نیرو وجود دارد که روی هر ذره عمل می‌کنند.

- نیروی بقا کاملاً دفع کننده
- نیروی اتلافی که باعث کاهش اختلافات بین ذرات می‌شود،
- نیروی تصادفی در واقع حرکت ذرات، بر اثر برخورد به یکدیگرند.

نیروهای بقا باعث می‌شوند که ذرات سیال با فشارهای خاصی که بین آن‌ها وجود دارد به طور مساوی در فضا توزیع شوند. نیروهای اصطکاک نشان‌دهنده مقاومت لزجت بین قسمت‌های مختلف سیال است. سرانجام، نیروهای تصادفی بیانگر درجه‌ای از آزادی هستند که در طی فرآیند درشت‌زایی از بین رفته‌اند. دو نیروی آخر به طور موثری ترموستات را پیاده‌سازی می‌کنند، به طوری که تعادل حرارتی حاصل می‌شود. به همین ترتیب، دامنه این نیروها با قضیه نوسانات-اتلافی بیان می‌شود و تضمین می‌کند که در تعادل ترمودینامیکی سیستم یک توزیع کانونی خواهد داشت. هر سه نیرو توسط یک عملکرد وزن تعدیل می‌شوند که دامنه تعامل بین ذرات را مشخص و تعامل را محلی می‌کند. یکی از مهمترین مزایای روش دینامیک ذرات اتلافی پتانسیل آن در اتصال رژیم‌های میکرو و ماکرو به منظور مطالعه پدیده‌های بزرگ‌تر و طولانی‌تر است. مدل دینامیک ذرات اتلافی از ذخیره جرم و حرکت بهره می‌برد، که مسئولیت رفتار هیدرودینامیکی یک سیال در مقیاس‌های بزرگ را بر عهده دارند. همچنین، با تغییر فعل و انفعالات بقا بین ذرات مایع، می‌توان به راحتی مایعات پیچیده مانند

پلیمرها، کلوئیدها، آمفیفلها و مخلوطها را ساخت. به طور خلاصه، روش دینامیک ذرات اتلافی با شرایط زیر مشخص می‌شود:

- متغیرهای موقعیت و سرعت مانند شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بطور پیوسته‌اند، اما در مرحله زمانی همانند روش شبیه‌سازی لتیس بولتزن در مراحل گسسته به روز می‌شود.
- نیروهای بقا بین ذرات دینامیک ذرات اتلافی باعث دفع ذرات هستند و این باعث می‌شود تا شبیه‌سازی‌ها در مقیاس‌های طولانی‌تر در مقایسه با دینامیک مولکولی گسترش یابد.
- دینامیک ذرات اتلافی از مزایای استاندارد لتیس بولتزن برخوردار است.
- جرم و حرکت به صورت محلی حفظ می‌شوند، که منجر به اثرات جریان هیدرودینامیکی در مقیاس ماکروسکوپی می‌شود.
- زمان مشخصه در دینامیک ذرات اتلافی در مقایسه مقیاس زمانی دینامیک مولکولی بزرگ است.

یک تصویر مفهومی از دینامیک ذرات اتلافی این است که ذرات به طور تصادفی در اطراف حرکت می‌کنند اما به دنبال یک جهت مشخصی هستند که توسط نیروهای بقا بیان شده است. دینامیک ذرات اتلافی را می‌توان به عنوان یک تفسیر لاگرانژی در نظر گرفت.

۱-۴ اهداف تحقیق

با توجه به اهمیت ساخت وسایل پرنده میکرو و نانو، مطالعه و تحقیق در این زمینه بیش‌تر احساس می‌شود همچنین تاکنون در زمینه شبیه‌سازی آیرودینامیکی به روش مولکولی دینامیک ذرات اتلافی مقاله‌ای گزارش نشده است بنابراین بر آن شدیم جریان بر روی یک ریزایرفویل را به روش مولکولی دینامیک ذرات اتلافی شبیه‌سازی نموده و پارامترهای موثر بر این ریزایرفویل را بدست بیاوریم. اصلی‌ترین چالشی که با آن روبرو خواهیم بود بهبود شرایط مرزی می‌باشد در واقع ذرات باید به درستی نقاط ریزایرفویل را تشخیص داده و به صورت آینه-

ای از روی ایرفویل منعکس شوند. قاعدتا با انعکاس آینه‌ای ذرات، سرعت که یک پارامتر بسیار مهم می‌باشد به درستی توزیع می‌شود. در این پایان‌نامه به این اهداف دست خواهیم یافت.

۱-۵ مروری بر کارهای انجام شده

در ابتدا به بررسی کارهای انجام شده در حیطه جریان حول ایرفویل با انواع شبیه‌سازی مولکولی پرداخته شده است. در انتهای این بخش به مقاله شبیه‌سازی جریان ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ که در حوزه دینامیک ذرات اتلاfi وجود داشته اشاره شده است و پس از آن به بررسی اعمال شرایط مرزی در این روش شبیه‌سازی پرداخته شده است.

در سال ۲۰۱۸ جی دی ایلو و همکاران [۳۵] با استفاده از یک شبکه ترکیبی بولتزمن^۱، که ترکیبی از روش استاندارد شبکه بولتزمن با روش حجم محدود می‌باشد، جریان مایع در اطراف ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ شبیه‌سازی نمودند. هدف از این مطالعه ارزیابی عملکرد عددی و روش محاسباتی است. برای این منظور، پس از ارائه یک مطالعه همگرایی برای تخمین دقت کلی روش، حل عددی برای مقادیر مختلف زاویه حمله در یک عدد رینولدز برابر با 10^3 تجزیه و تحلیل شده است. پس از آن، میدان‌های جریان در اعداد رینولدز تا 10^4 برای ایرفویل در زاویه حمله صفر محاسبه می‌شوند. نتایج نشان می‌دهد برای دستیابی به دقت بالا در نزدیکی دیواره‌های منحنی جامد می‌توان از شبکه ترکیبی بولتزمن استفاده نمود.

در سال ۲۰۱۸ یانگ یو و همکاران [۳۶] یک مرز لغزش برای شبکه بولتزمن معرفی نمودند. ایده اصلی این روش تبدیل طول لغزش به سرعت لغزش با یک الگوریتم ساده است. با استفاده از این مدل، سرعت لغزش در مرز از طریق درون‌یابی نقاط سیال نزدیک به مرز بدست می‌آید و سپس در شرایط مرزی سرعت جایگزین می‌شود تا رابطه بین طول لغزش و میدان جریان ماکروسکوپی ایجاد شود. این قالب از محدودیت شرایط مرزی معرفی شده فقط در مرزهای مسطح قابل استفاده است. همچنین بر این محدودیت غلبه می‌کند که مرز لغزش فقط می‌تواند جریان‌ها را با طول لغزش کوچک شبیه‌سازی کند. شرایط مرزی لغزش فعلی برای شبکه بولتزمن

¹Hybrid Lattice Boltzmann Method (HLBM)

باتناگار-گروس-کروک^۱ اجرا شده است که در چندین مورد، از جمله جریان استوانه‌ای کوئت^۲ و جریان نامنظم پوآزی^۳ تأیید می‌شود. نتایج عددی به خوبی با تجزیه و تحلیل نظری موافق است. مرز لغزشی می‌تواند به طور مدام اثر کششی در ایرفویل را در عدد رینولدز پایین، کاهش دهد.

در سال ۲۰۱۸ ویلیام و همکاران [۳۷] در این مقاله، یک مدل دیوار صریح مبتنی بر قانون توان برای شبیه‌سازی جریان تراکم ناپذیر حول ایرفویل با عدد رینولدز بالا ارائه شده است. این مدل دیوار به ویژه برای اصلاح دیواره‌های موجود در شبکه‌های دکارتی مناسب است. علاوه بر این، برای تعیین سرعت اصطکاک به روشی تکراری احتیاج ندارد. اعتبارسنجی این مدل دیوار برای شبیه‌سازی جریان در اطراف یک ایرفویل دو بعدی با استفاده از روش شبکه بولتزمن همراه با مدل تلاطم اسپالارت-آلماراس^۴ ارزیابی می‌شود. نتایج خوبی برای پیش‌بینی ضرایب آیرودینامیکی و پروفیل فشار در دو عدد رینولدز و چندین زاویه حمله بدست آمده است. بنابراین قانون صریح کاملاً مناسب برای تصحیح دیواره در عدد رینولدز بالا با استفاده از شبکه‌های دکارتی است. علاوه بر این، موقعیت مرز لغزش بر روی ایرفویل نیز تأثیرات قابل توجهی در نسبت برا به پسا دارد.

در سال ۲۰۰۱ جینگ فن و همکارانش [۳۸] جریان‌های گاز رقیق را در اطراف ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ با استفاده از هر دو روش شبیه‌سازی روش مونت کارلو و روش مبتنی بر پیوستگی را با سه نوع جریان، مافوق صوت، زیر صوت و صوتی شبیه‌سازی نمودند. در هر جریان، معادلات ناویر استوکس را با یک شرط مرز لغزش در سطح ایرفویل حل نمودند. در این مطالعه روش شبیه‌سازی مستقیم روش مونت کارلو برای جریان‌های مافوق صوت و ترانسونیک مورد استفاده قرار گرفته است. به دلیل مشکلات ناشی از نوسانات آماری بیش از حد، روش شبیه‌سازی مستقیم روش مونت کارلو در شرایط زیر صوت استفاده نشد. در این مطالعه میدان‌های جریان چگالی

¹Lattice Bhatnagar-Gross-Krook Model

²Cylindrical Couette Flow

³Irregular Poiseuille Flow

⁴Spalart Allmaras

و سرعت محاسبه و با داده‌های آزمایشی مقایسه شده است و به طور کلی مطابقت خوبی دارند، همچنین برخی از ویژگی‌های جالب توجه در توزیع فشار سطح در ایرفویل برای جریان‌هایی با عدد رینولدز کم یافت شد.

در سال ۲۰۱۹ شیائو و همکارش [۳۹] مطالعات عددی حول موضوع جریان‌های گاز رقیق در اطراف ایرفویل توسط یک چارچوب ضمنی غیر ناویر-استوکس-فوریه^۱ نمودند. در واقع مدل هیدرودینامیکی تعمیم یافته^۲ را مورد بررسی قرار داده‌اند. یک اعتبار سنجی دقیق از جریان گاز رقیق حول ایرفویل شده است. علاوه بر این، روابط سازنده مدل هیدرودینامیکی تعمیم یافته یک توضیح واضح در مورد ویژگی‌های متمایز اثر گاز رقیق روی مشخصات آیرودینامیکی یک ایرفویل ارائه می‌دهد. با افزایش عدد نادسن^۳، پسا در مقایسه با برا به سرعت افزایش می‌یابد و این اثر منجر به کاهش شدید نسبت برا و پسا می‌شود. علاوه بر این، چارچوب معادله ناویر-استوکس-فوریه نسبت برا-پسا را برای موارد زیر صوت بیش از حد پیش‌بینی می‌کند و نسبت را برای موارد مافوق صوت در جریان گازهای رقیق با زوایای حمله مختلف در نظر گرفته، پیش‌بینی می‌کند. توضیحات معتبری برای محدودیت‌های چارچوب معادله ناویر-استوکس-فوریه در یک مطالعه عددی از اثرات نادرست، از جمله حالت تعادل، با توجه به روابط سازنده مدل هیدرودینامیکی تعمیم یافته ارائه شده است. در این مقاله نشان داده شده است که مدل هیدرودینامیکی تعمیم یافته موجود، یک ابزار عددی جدید برای بررسی اثر گاز رقیق روی خصوصیات آیرودینامیکی فراهم می‌کند.

روش دینامیک ذرات اتلافی یک روش دانه درشت قدرتمند برای شبیه‌سازی جریان پیچیده در مقیاس مزو است که توسط هوگربرگ و کولمن معرفی شده است [۴۰ و ۴۱]. گروت و وارن دامنه پارامترهای قابل استفاده را برای شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی بدست آورده‌اند [۴۲-۴۴]. در روش شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی مشکلات جریان‌های چند فازی [۴۵]، پلیمرها [۴۶-۵۰] و سطح [۵۱ و ۵۲] حل شده است.

¹Implicit non-Navier Stokes Fourier (NSF)

²Generalized Hydrodynamic Model (GH)

³Knudsen Number

همچنین جریان پوآزی در میکروکانال نیز با روش دینامیک ذرات اتلافی شبیه‌سازی شده است [۵۴ و ۵۳]. در تمام این مطالعات، حوزه محاسباتی دارای مرزهای متناوب است، بنابراین به راحتی قابل اجرا است، اما برای موقعیت‌هایی که حاوی مرز دیواره هستند، دینامیک ذرات اتلافی با برخی از مشکلات روبرو می‌شود. به دلیل پتانسیل‌های نرم استفاده شده در این روش، ذرات ممکن است به دیواره نفوذ کنند. تنها مطالعه‌ای در مورد شبیه‌سازی جریان حول ایرفویل به روش دینامیک ذرات اتلافی در سال ۲۰۱۱ توسط سعیدی و همکاران [۵۵] انجام گرفته است. در این مطالعه جریان روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ با زاویه حمله ۱۰ درجه شبیه‌سازی شده است. محدوده محاسباتی را $3 \times 80 \times 300$ و عدد رینولدز را ۲۰۰ و سرعت ورودی را $1/12$ و چگالی سیال را $0/03$ در نظر گرفتند همچنین ۲۵۰۰۰۰ گام زمانی برای این فرآیند که بعد از ۵۰۰۰۰ مرحله اول شروع می‌شود. اگر چه نتایج حاصله از این مطالعه به توانایی خوب این روش برای کاهش نوسانات نادرست چگالی و دما در مجاورت دیواره اشاره نموده است ولی یکی از مواردی که در کار آن‌ها نیاز به اصلاح دارد، اعمال شرایط مرزی ورودی و خروجی می‌باشد. همچنین در این مطالعه جریان بر روی سیلندر نیز شبیه‌سازی شده است. می‌توان از این روش برای شبیه‌سازی ریزایرفویل در سائز ریزتر در شرایطی که حل پیوسته جوابگو نیست، استفاده نمود. در روش دینامیک ذرات اتلافی شرایط مرزی بسیار حائز اهمیت می‌باشد در ادامه به تحقیقات پیرامون این موضوع در سال‌های اخیر می‌پردازیم. دونگ هونگ و همکاران [۵۶] مدل مرزی با دو لایه ذره ارائه نموده‌اند. دو مورد از مهم‌ترین پارامترهای موجود در این رویکردها تراکم دیواره و دامنه نیروی بقا بین دیواره و ذرات سیال است. نیروی بقا، نفوذپذیری دیوار بالا دامنه را تضمین می‌کند اما باعث نوسان چگالی زیادی در نزدیکی دیوار می‌شود. پارامتر چگالی دیواره اثر مشابه دارد.

پیوکین و کارنیاداکیس [۵۷] اثرات این دو پارامتر را با چندین شبیه‌سازی تشخیصی بررسی نموده‌اند. آن‌ها همچنین روش جدیدی را برای اجرای شرایط مرزی دیواره پیشنهاد دادند. در این مطالعه نیروی بقا که بر روی دیوار اعمال شده بود نیز محاسبه شده است. سپس ارتباطی برای نیروی بقا در مقابل چگالی دیواره به

دست آوردند که برای تغییرات چگالی دیواره بین ۳ تا ۲۵ کاربرد داشت. نشان داده شده است که این روش شرایط بدون لغزش را تقریباً تحمیل می‌کند، اما نوسان چگالی هنوز قابل توجه است، بنابراین آن‌ها یک مکانیزم کنترل برای به حداقل رساندن نوسان چگالی پیشنهاد کردند. دینگنی ژانگ و همکاران [۵۸] در سال ۲۰۱۸ بر روی یک سری شرایط مرزی ساده تحقیق کرده‌اند. یک مشکل چالش برانگیز در سیستم دینامیک ذرات اتلافی چگونگی اجرای یک شرایط مرزی ضد نفوذ، بدون لغزش و بدون اثر دیواره برای مرزهای جامد هندسه دلخواه می‌باشد. بعضی از شرایط مرزی مانند انعکاس، بازتاب‌های سخت احتمال بیشتری در ایجاد نوسانات نامناسب دما و چگالی در نزدیکی دیواره دارند. بر اساس بحث‌های فوق، لازم است که یک شرایط مرزی ایجاد شود که بتواند در سیستم‌ها به خوبی اعمال شوند. در این مقاله توزیع سرعت ذرات مایع و جامد بررسی شده است. این شرایط-مرزی باعث نفوذ و نگه‌داشتن خواص می‌شود ولی در عین حال در پیاده‌سازی بسیار خوب عمل می‌کند و قبل از پیاده‌سازی این شرایط مرزی، لازم نیست مرز مشخص شود.

سوییچ پال و همکاران [۵۹] در سال ۲۰۱۵ شرایط مرزی متقارن پیشنهاد دادند. در این مقاله از شرایط-مرزی دیوار استفاده شده است که توسط لایه‌های ذرات منجمد مدل‌سازی شده‌اند. این در حالی است که برخلاف مرز دیواره می‌باشد، مرز دیواره خارج از سیستم ذرات دینامیک ذرات اتلافی است. سطح متقارن، یک سطح داخلی است و ذره می‌تواند از مرز تقارن عبور کند. بنابراین از ذرات مرز سیال منجمد برای مرز داخلی متقارن نمی‌توان استفاده نمود. در مرز متقارن، یک لایه از ذرات فرضی را در نظر گرفتند. به این ترتیب، در این منطقه توزیع ذرات دقیقاً در هر دو طرف مرز، متقارن است. لایه ذرات سیال واقعی در بالای مرز متقارن، لایه ذرات واقعی نامیده می‌شود. در حالی که تصاویر نامرئی که آن را در زیر مرز قرار می‌دهد، لایه ذرات نامرئی می‌باشند. کومار رنجیت و همکاران [۶۰] در سال ۲۰۱۳ روی شرایط مرزی بدون لغزش دینامیک ذرات اتلافی تحقیق کردند. در این مقاله یک روش جدید برای اعمال لغزش پیشنهاد شده است. دیوار جامد به گونه‌ای

طراحی شده که ذرات مایع حضور یک دیوار مداوم و نه چندان منجمد در مدل‌های دیواره معمولی احساس می‌کند بنابراین برخورد ذرات مایع با دیواره‌ها برای کاهش نوسانات چگالی در این مقاله اصلاح شده است.

سه نوع شرایط مرزی که بررسی نموده‌اند عبارت‌اند از

- مرزهای مجازی
- مرزهای دیواره منجمد
- مرزهایی با دیواره تیز

یکی از مورد استفاده‌ترین شرایط مرزی، استفاده از دیواره منجمد می‌باشد با قرار دادن ذرات منجمد در مرز می‌توان به شکل موثر در هندسه‌های پیچیده‌ای نظیر سیلندر مربعی یا دایره‌ای استفاده نمود در این مقاله روش را اصلاح نمودند.

۱-۶ نوآوری و بیان ضعف کارهای گذشتگان

در تحقیقات پیشین، مطالعه‌ای پیرامون بررسی ضرایب آیرودینامیکی بر روی ایرفویل به روش دینامیک ذرات اتلافی صورت نگرفته و تنها در سال ۲۰۱۱ مقاله‌ای در مورد جریان بر روی یک ریزایرفویل گزارش شده است. در این مقاله کانتور سرعت ناکا ۰۰۱۲ تنها در زاویه حمله ۱۰ درجه با دینامیک سیالات محاسباتی مقایسه شده است و حرکت ذرات حول ایرفویل نمایش داده نشده است. به دلیل مشکل رایج در اعمال شرط مرزی و عدم بررسی آیرودینامیکی اجسام در این روش مولکولی برآن شدیم تا مطالعه در این حیطة را آغاز کنیم. در این مطالعه از شرایط مرزی دوره‌ای استفاده شده است. با اعمال این شرایط مرزی ذرات به تعادل رسیدند. مهم‌ترین ویژگی شرایط مرزی اعمال شده در شبیه‌سازی به روش دینامیک ذرات اتلافی، نفوذ ناپذیری ذرات به داخل ریز-ایرفویل و همچنین بازگشت صحیح ذرات از دیواره ریزایرفویل می‌باشد. ذرات زمانی که به دیواره دامنه محاسباتی برخورد می‌کنند، با روش بازتاب مکسول مجدداً به دامنه محاسباتی بازمی‌گردد. جریان به غیر از حول

ایرفویل لوزی شکل برای ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در ۵ زاویه حمله مختلف نیز بررسی شده است همچنین در انتها ضرایب آیرودینامیکی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در ۵ زاویه حمله بدست آمده و پس از آن روش دینامیک سیالات محاسباتی مقایسه شده است. تاکنون مقاله‌ای به این صورت، که تمام جوانب آیرودینامیکی در روش دینامیک ذرات ائتلافی بررسی شده باشد گزارش نشده است.

۱-۷ معرفی فصل‌های پایان‌نامه

این پایان‌نامه از چهار فصل تشکیل شده است. در فصل اول به مقدمه‌ای از موضوع مورد مطالعه و اهداف این تحقیق اشاره شده است، همچنین انواع شبیه‌سازی‌های مولکولی بیان شده و به کارهای ارزشمند گذشتگان در این حیطه پرداخته شده است. در فصل دوم معادلات حاکم در این روش و انواع شرایط مرزی بیان گردید. در فصل سوم به تشریح مسئله و مدل‌سازی هندسه و نتایج حاصل از شبیه‌سازی پرداخته می‌شود. در فصل چهارم به نتیجه‌گیری کلی این پایان‌نامه و ارائه پیشنهادها و توصیه‌هایی برای ارتقای سطح کیفی تحقیق حاضر و انجام مطالعه جامع‌تر در راستای موضوع این پایان‌نامه، خواهیم پرداخت

فصل دوم: معادلات حاکم

۱-۲ مقدمه

در این فصل معادلات حاکم بر روش دینامیک ذرات اتلافی ارائه شده و در مورد جزئیات انتگرال عددی و معادلات دیفرانسیل تصادفی حاکم نیز بحث شده است. پس از آن، در مورد چگونگی اجرای شرایط مرزی بحث خواهیم کرد و انواع شرایط مرزی به طور مفصل مطرح شده است.

۲-۲ معادلات حاکم

یک سیستم متشکل از ذرات N با جرم m ، موقعیت r_i و سرعت v_i در نظر گرفته شده است. تکامل زمانی موقعیت ها و سرعت ذرات دینامیک ذرات اتلافی بر اساس معادله نیوتن به شرح زیر محاسبه می شود:

$$\begin{cases} \frac{d\bar{r}_i}{dt} = \bar{v}_i \\ \frac{d\bar{v}_i}{dt} = \sum_{i \neq j} \bar{f}_{ij} + \bar{F}_e \end{cases} \quad (1-2)$$

در فرمول ۱-۲، \bar{F}_e نیروی خارجی^۱ و \bar{f}_{ij} نیروی بین ذره‌ای^۲ است که توسط ذره i بر روی ذره j اعمال می شود و شامل سه قسمت است:

$$\bar{f}_i = \sum_{i \neq j} f_{ij} = \sum_{i \neq j} (F_{ij}^C + F_{ij}^D + F_{ij}^R) \quad (2-2)$$

نیروی F_{ij}^C ، F_{ij}^D و F_{ij}^R به ترتیب نیروی بقا^۳، اتلافی^۴ و تصادفی^۵ می باشند که در فرمول های ۲-۳، ۲-۴ و ۲-۵ بیان شده است:

$$F_{ij}^C = F_{ij}^C(r_{ij})\hat{r}_{ij} \quad (3-2)$$

$$F_{ij}^D = -\gamma\omega^D(r_{ij})(v_{ij} \cdot \hat{r}_{ij})\hat{r}_{ij} \quad (4-2)$$

¹External Force

²Internal Force

³Conservative Force

⁴Dissipative Force

⁵Random Force

$$F_{ij}^R = \sigma \omega^R(\Gamma_{ij}) \xi_{ij} \hat{r}_{ij} \quad (5-2)$$

در فرمول ۶-۲ تعریف r_{ij} ، \hat{r}_{ij} و v_{ij} آورده شده است:

$$\begin{cases} r_{ij} = r_i - r_j \\ \hat{r}_{ij} = r_{ij} / r_{ij} \\ v_{ij} = v_i - v_j \end{cases} \quad (6-2)$$

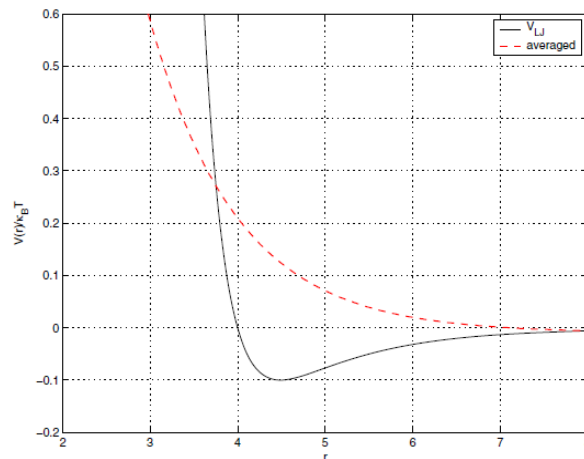
متغیرهای γ و σ در فرمول‌های ۴-۲ و ۵-۲ به ترتیب ضریب‌های نیروهای اتلافی و تصادفی را تعیین می‌کنند. همچنین، ξ_{ij} متغیر تصادفی گاوس متقارن می‌باشد و برای جفت‌های مختلف ذرات و در زمان‌های مختلف مستقل هستند. $\xi_{ij} = \xi_{ji}$ برای دستیابی به بقا در حرکت اعمال می‌شود.

به حرکت درآوردن ذرات در روش دینامیک ذرات اتلافی نیازمند یک نیروی خارجی می‌باشد. زمانی که هندسه ایرفویل یا هر هندسه دیگری را داخل محیط شبیه‌سازی قرار می‌دهیم در وهله اول باید جریانی برای حرکت ذرات بوجود آید. در این مسئله نیروی ثابت به عنوان یک نیروی خارجی در نظر گرفته می‌شود این نیروی خارجی همان اختلاف فشاری است که یک عدد ثابت در نظر گرفته می‌شود و به عنوان F_e تعریف می‌گردد. در شرایطی که این نیروی ثابت اضافه می‌شود ذرات به سمت جلو و فقط در راستای x حرکت می‌کنند هرچه این عدد افزایش یابد سرعت جریان نیز افزایش می‌یابد اما نباید از یک حدی این عدد بیشتر شود در صورت افزایش غیر منطقی پاسخ صحیحی نخواهد داد.

نیروی اتلافی، زمانی که ذرات با سطح برخورد می‌کنند باعث حفظ ممنتوم می‌شود. در واقع نیروی اتلافی متناسب با سرعت نسبی ذرات می‌باشد. نیروی بقا می‌تواند شامل نیروهای وان‌دروالس باشد، معمولاً این نیرو بین ذرات دافعه ایجاد می‌کند. نیروی بقا شبیه به فرمول دینامیک مولکولی است و می‌تواند شامل هرگونه افت فشار، تعامل الکترواستاتیک یا مغناطیسی و همچنین نیروهای وان‌دروالس باشد. این نیرو و همچنین دو نیروی دیگر در یک شعاع برش که مقیاس طول سیستم است، عمل می‌کنند. این موضوع مشابه پتانسیل تعامل نرم در شبیه‌سازی مطالعات پلیمرهاست که توسط فارست و ساتر [۴۶] در سال ۱۹۹۵ پیشنهاد شده است. با

میانگین پتانسیل‌های لنارد-جونز یا میدان مولکولی مربوطه بر حسب حرکت سریع نوسان اتم‌ها در بازه‌های زمانی کوتاه، میانگین پتانسیل مؤثر از فرم نشان داده شده در شکل ۱-۲ بدست می‌آید. تقریب این را می‌توان به صورت زیر شرح داد.

$$F_{ij}^C = \begin{cases} a_{ij}(1 - r_{ij})\hat{r}_{ij} & \text{for } r_{ij} \leq r_c = 1 \\ 0 & \text{for } r_{ij} > r_c = 1 \end{cases} \quad (۷-۲)$$



شکل ۱-۲. پتانسیل لنارد-جونز و پتانسیل نرم آن به طور متوسط [۱۶]

در فرمول بالا a_{ij} حداکثر دافع بین ذرات i و ذرات j است. بر خلاف پتانسیل لنارد-جونز، که در $r=0$ محدود نیست، پتانسیل نرم به کار رفته در دینامیک ذرات اتمی دارای مقدار محدود در $r=0$ برابر با a_{ij} است. این نشان‌دهنده این واقعیت است که احتمال محدود وجود اتمی در $r=0$ برای برخی از موارد وجود ندارد. برای آب، $a_{ij}=25 k_B T/\rho$ تعیین شده است، در حالی که برای مایعات دیگر این عدد $a_{ij}=75 k_B T/\rho$ می‌باشد. این مقادیر بدست آمده و با اجرای قابلیت فشرده‌سازی مناسب سیستم توسط فرمول زیر تعریف شده است

$$k^{-1} = \frac{1}{k_B T} \left. \frac{\partial p}{\partial n} \right|_T \quad (۸-۲)$$

در فرمول بالا n چگالی است. برای آب در دمای اتاق این تراکم‌پذیری بی‌بعد است ($k^{-1}=15/9835$) فشار به عنوان تابعی از چگالی بدست می‌آید، به عنوان مثال

$$P = \rho k_B T + \frac{1}{3V} \langle \sum_{j>i} (r_i - r_j) \cdot F_{ij}^C \rangle \quad (۹-۲)$$

در فرمول ۲-۹، V حجم است. همچنین چگالی یک پارامتر آزاد است و برای $\rho \geq 3$ به صورت سیال رفتار می‌کند. با این حال، در تعامل بین مقادیر ذرات بصورت خطی با تراکم، زمان محاسبات لازم در هر واحد حجم با مربع تراکم افزایش می‌یابد. بنابراین، در شبیه‌سازی‌ها کار با کمترین مقدار $\rho = 3$ برای راندمان محاسباتی کافی است. نیاز به توزیع نرمال دو شرط بر توابع وزن و دامنه نیروهای اتلافی و تصادفی تعیین می‌کند. به طور خاص به صورت زیر تعریف می‌گردد:

$$\omega^D(r_{ij}) = [\omega^R(r_{ij})]^2 \quad (10-2)$$

$$\sigma^2 = 2\gamma k_B T \quad (11-2)$$

در فرمول ۲-۱۱، دمای سیستم و ثابت بولتزمن به ترتیب با T و k_B مشخص شده است. تابع وزنی به صورت زیر تعریف می‌گردد.

$$\omega^R(r_{ij}) = \begin{cases} 1 - r_{ij}/r_c & \text{for } r_{ij} \leq r_c \\ 0 & \text{for } r_{ij} > r_c \end{cases} \quad (12-2)$$

در فرمول بالا شعاع برش با r_c مشخص شده است. این فرمول به سادگی یک مدل مناسب برای متمرکز کردن تعاملات است. در فرمولاسیون اولیه دینامیک ذرات اتلافی که توسط هوگربرگ و کولمن [۴۰] در سال ۱۹۹۲ ارائه نمودند با شرایط فوق رضایت بخش نبوده و انرژی نیز حفظ نمی‌شد. توسط اسپانول و وارن [۴۲] در سال ۱۹۹۵، راه‌حلهای معادله فوکر-پلانک^۱ را به کار گرفته شد و اصلاح نمودند. تابع توزیع $f(r_i, p_i, t)$ احتمال یافتن سیستم در حالتی که ذرات واقع در r_i دارای حرکتی p_i در زمان t را توصیف می‌کند. تکامل زمان این توزیع توسط معادله فوکر-پلانک بیان شده است:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = L^C f + L^D f \quad (13-2)$$

¹Fokker Plank Equation

در فرمول بالا L^C از اپراتور لیوویل^۱ سیستم همیلتون تعامل با نیروهای بقا F^C خبر می‌دهد. همچنین، L^D عبارات اتلافی و تصادفی را نشان می‌دهد. اگر آخرین ترم، صفر تنظیم شده باشد ما یک سیستم همیلتون^۲ را بدست می‌آوریم که توزیع معمولی گیبس-بولتزمن^۳ را به عنوان یک راه حل پذیرفته است.

یعنی $f^{eq}(r_i, p_i) = \exp(-\sum_i p_i^2 / 2mk_B T - U/k_B T)$ یک حل است:

$$\frac{\partial f^{eq}}{\partial t} = L^C f^{eq} = 0 \quad (14-2)$$

اما، در حضور دو نیروی بقا و اتلافی، توزیع تعادل با موارد فوق متفاوت خواهد بود، مگر اینکه شرط زیر برقرار باشد:

$$L^D f^{eq} = 0 \quad (15-2)$$

تکامل زمان ذرات در شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی توسط قانون نیوتون شرح داده شده است:

$$dr_i = v_i dt \quad (16-2)$$

$$dv_i = \frac{1}{m} (F_i^C dt + F_i^D dt + F_i^R \sqrt{dt}) \quad (17-2)$$

در فرمول‌های بالا $F_i^C = \sum_{i \neq j} F_{ij}^C$ کل نیروی بقا است که بر ذره i وارد می‌شود. F_i^D و F_i^R به طور مشابه تعریف می‌شوند. در فرمول نیروی تصادفی از \sqrt{t} به جای dt استفاده می‌شود که باعث افزایش سرعت است. این اصطلاح بیانگر حرکت براونی^۴ است، که توسط فرمول ۱۸-۳ بیان می‌شود:

$$R_{FF}(t_i, t_j) = e^{-\nu|t_i - t_j|} \quad (18-3)$$

¹Liouville Operator

²Hamiltonian System

³Gibbs Boltzmann

⁴Brownian Motion

بنابراین متوجه خواهیم شد که $(1/\gamma)$ طول مربوط به زمان برای این فرآیند تصادفی است.

۲-۳ انتگرال عددی

برخلاف معادلات دینامیک مولکولی، معادلات دینامیک ذرات اتلافی تصادفی هستند در نتیجه بیانگر درجه سختی معادلات این نوع روش می‌باشد. علاوه بر این، نیروی اتلافی به سرعت بستگی دارد و سرعت نیز بیانگر نیرو می‌باشد، بنابراین اتصال غیر خطی بوجود می‌آید [۶۱]. در ادامه به چند طرح انتگرال برای معادلات دینامیک ذرات اتلافی با درجات مختلف اشاره می‌کنیم.

۲-۳-۱ طرح انتگرال مبتنی بر سرعت ورلت^۱

در این طرح نیروی اتلافی در پایان هر مرحله زمانی دو بار محاسبه می‌شود تا رابطه ضمنی سرعت را محاسبه کند.

• در زمان t^{n+1} داریم:

$$\hat{v}_i = v_i + \frac{1}{2} \frac{1}{m_i} (F_i^C \Delta t + F_i^D \Delta t + F_i^R \sqrt{\Delta t}) \quad (۱۹-۲)$$

$$r_i^{n+1} = r_i^n + \hat{v}_i \Delta t \quad (۲۰-۲)$$

$$v_i^{n+1} = \hat{v}_i + \frac{1}{2} \frac{1}{m_i} (F_i^C \Delta t + F_i^D \Delta t + F_i^R \sqrt{\Delta t}) \quad (۲۱-۲)$$

• نیروی پراکندگی (F_i^D) محاسبه می‌شود.

• مقادیر فیزیکی محاسبه می‌شود.

فرمول ۲۱-۳ و محاسبات نیروی پراکندگی (F_i^D) فقط یک بار در طی یک مرحله زمانی انجام می‌شود و در اینجا نیروها در آخرین مرحله با \hat{v}_i و r_i^{n+1} ارزیابی می‌شوند.

¹Velocity-Verlet Method

۲-۳-۱-۱ سرعت ثابت در طرح انتگرال-ورلت

این الگوریتم که به طور اختصار به آن $SC-VV$ گفته می‌شود، سرعت‌ها و نیروهای اتلافی را به طور خودکار از طریق تکرار عملکردی تعیین می‌کند و همگرایی روند تکرار توسط دمای لحظه‌ای $k_B T$ کنترل می‌شود. اجرای این طرح بسیار ساده است و می‌توان این مسئله را به عنوان یک مزیت در نظر گرفت. مطالعه اخیر در مورد طرح انتگرال سرعت-ورلت تأیید کرده است که این یک روش امیدوار کننده برای تعامل سیستم‌های دینامیک ذرات اتلافی است. این امر خصوصاً در مورد خصوصیات ساختاری با استفاده از مراحل طولانی مدت در سیستم‌های متراکم اتفاق می‌افتد. این نوع روش انتگرال‌گیری در مقایسه با سایر روش‌ها هیچ مزیتی در کنترل دما ندارد.

۲-۳-۲ روش انتگرال‌گیری صریح اویلر^۱

روش انتگرال صریح اویلر به تنظیم الگوریتم‌های پیچیده و همچنین می‌توان به عنوان شروع کننده برای انتگرال‌های چند مرحله‌ای با درجه بالاتر باشد اما هرگز استفاده نمی‌شود. فرض می‌کنیم راه‌حل را در مرحله زمانی n می‌دانیم و می‌خواهیم راه حل را در مرحله زمان $n+1$ بدست آوریم. هم سرعت و هم موقعیت همه ذرات را به روشی ساده به روز می‌کنیم. هر سه نیرو در یک منطقه توسط شعاع برش به این روش کمک می‌کنند.

• در زمان t^{n+1} داریم

$$v_i^{n+1} = v_i^n + \frac{1}{m_i} (F_i^c \Delta t + F_i^D \Delta t + F_i^R \sqrt{\Delta t}) \quad (22-2)$$

$$r_i^{n+1} = r_i^n + v_i^n \Delta t \quad (23-2)$$

• مقادیر فیزیکی محاسبه می‌شود.

¹Explicit Euler Forward

۲-۳-۳ روش تقسیم‌بندی شاردلو^۱

شاردلو در سال ۲۰۰۳ روشی دیگر برای انتگرال‌گیری بیان نمود. این روش اغلب در دینامیک سیالات محاسباتی کلاسیک استفاده می‌شود. در واقع شاردلو ایده‌هایی را که معمولاً در حل معادلات دیفرانسیل به کار می‌رود را در مورد انتگرال‌گیری معادلات حرکت در دینامیک ذرات اتلافی به کار برد. در این روش فرآیند انتگرال‌گیری به گونه‌ای است که نیروهای بقا از نیروهای اتلافی و تصادفی به طور مجزا محاسبه شوند، در واقع ایده اصلی شاردلو چنین بود. بعد از این مجزاسازی، نیروی بقا را می‌توان با استفاده از روش دینامیک مولکولی حل نمود، در حالی که نیروی اتلافی و تصادفی به صورت جداگانه به عنوان معادله دیفرانسیل تصادفی حل می‌شود.

• در زمان t^{n+1} داریم

$$\hat{v}_i = v_i^n - \frac{1}{2} \frac{1}{m} \gamma \omega^2(r_{ij})(v_{ij}^n \cdot \hat{r}_{ij}) \hat{r}_{ij} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{1}{m} \sigma \omega \zeta_{ij} \hat{r}_{ij} \sqrt{\Delta t} \quad (24-3)$$

$$\hat{v}_j = v_j^n + \frac{1}{2} \frac{1}{m} \gamma \omega^2(r_{ij})(v_{ij}^n \cdot \hat{r}_{ij}) \hat{r}_{ij} \Delta t - \frac{1}{2} \frac{1}{m} \sigma \omega \zeta_{ij} \hat{r}_{ij} \sqrt{\Delta t} \quad (25-3)$$

$$\hat{\hat{v}}_i = \hat{v}_i + \frac{1}{2} \frac{1}{m} \sigma \omega(r_{ij}) \zeta_{ij} \hat{r}_{ij} \sqrt{\Delta t} - \frac{1}{2} \frac{1}{m} \frac{\gamma \omega^2(r_{ij}) \Delta t}{1 + \gamma \omega^2(r_{ij}) \Delta t} [(\hat{v}_{ij} \cdot \hat{r}_{ij}) \hat{r}_{ij} + \sigma \omega(r_{ij}) \zeta_{ij} \hat{r}_{ij} \sqrt{\Delta t}] \quad (26-3)$$

$$\hat{\hat{v}}_j = \hat{v}_j - \frac{1}{2} \frac{1}{m} \sigma \omega(r_{ij}) \zeta_{ij} \hat{r}_{ij} \sqrt{\Delta t} + \frac{1}{2} \frac{1}{m} \frac{\gamma \omega^2(r_{ij}) \Delta t}{1 + \gamma \omega^2(r_{ij}) \Delta t} [(\hat{v}_{ij} \cdot \hat{r}_{ij}) \hat{r}_{ij} + \sigma \omega(r_{ij}) \zeta_{ij} \hat{r}_{ij} \sqrt{\Delta t}] \quad (27-3)$$

$$\tilde{v}_i = \hat{\hat{v}}_i + \frac{1}{2} \frac{1}{m_i} F_i^C \Delta t \quad (28-3)$$

• مقادیر فیزیکی محاسبه می‌شود.

۲-۳-۴ روش قانون تناوبی^۲

این روش انتگرال‌گیری در سال ۱۹۹۹ توسط لو معرفی شد. این روش انتگرال‌گیری معادلات حرکت نیوتن را با گام زمانی t محاسبه می‌کند، سپس به سیستم حرارت داده می‌شود. برای همه جفت‌های ذره‌ای که برای آن‌ها

¹Sardlow's Splitting Method

²Lowe's Alternative Method

$r_j < r_c$ برقرار است، با احتمال $\Gamma \Delta t$ متوجه می‌شویم که یک سرعت نسبی جدید از یک توزیع ماکسول گرفته شده است.

- تمامی ذرات در یک محیط توسط r_c تعریف شده است. احتمال $0 < \Gamma \Delta t \leq 1$ را برای پیش‌بینی سرعت نسبی به روز شده از یک توزیع ماکسول در نظر گرفته شده است. بنابراین برای یک جفت خاص (ij) ابتدا سرعت نسبی $v_{ij}^0 \cdot e_{ij}$ را از توزیع $\sqrt{\frac{2k_B T}{m}}$ بدست می‌آید. که در آن ξ_{ij} یک متغیر تصادفی گوسی با میانگین صفر و با واریانس است.

به طور خاص، برای $\Gamma \Delta t = 0$ سیستم به ترموستات متصل نمی‌شود، در حالی که برای $\Gamma \Delta t = 1$ سرعت ذرات در هر مرحله از زمان حرارت داده می‌شوند. دو ویژگی به خصوص در این روش عبارتند از:

- ذخیره انرژی حتی در مراحل زمانی طولانی‌تر
- این نوع انتگرال‌گیری مشابه شبیه‌سازی ذرات واقعی می‌باشد.
- در زمان t^{n+1} داریم:

$$\hat{v}_i = v_i^n + \frac{1}{2} \frac{1}{m} F_i^C \Delta t \quad (29-3)$$

$$r_i = r_i^n + \hat{v}_i^n \Delta t \quad (30-3)$$

$$\hat{\hat{v}}_i = \hat{v}_i + \frac{1}{2} \frac{1}{m} F_i^C(r_j) \Delta t \quad (31-3)$$

- برای همه ذرات دوتایی $r_{ij} < r_c$ احتمال $\Gamma \Delta t$ انتخاب می‌شود، در نتیجه $v_{ij}^0 \cdot r_{ij}$ بدست می‌آید.

$$\Delta_{ij} = \frac{1}{2} \hat{r}_{ij} \cdot (v_{ij}^0 - \hat{\hat{v}}_{ij}) \cdot \hat{r}_{ij} \quad (32-3)$$

$$v_i^{n+1} = v_i^n + \Delta_{ij} \quad (33-3)$$

$$v_j^{n+1} = v_j^{n+1} - \Delta_{ij} \quad (34-3)$$

- مقادیر فیزیکی محاسبه می‌شود.

در این پایان‌نامه از انتگرال‌گیری سرعت ولت استفاده شده است.

۲-۴ شرایط مرزی

یکی از مهم‌ترین عوامل تعیین‌کننده صحت شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی، پیاده‌سازی دقیق شرایط مرزی فیزیکی است. تاکنون تحقیقات قابل توجهی در مورد پیاده‌سازی شرایط مرزی دیواره جامد در سیستم‌های جریان انجام شده است. معمولاً برای مدل‌سازی دیواره، یک لایه ذره منجمد در موقعیت دیواره قرار می‌گیرد. برای جلوگیری از ورود ذرات به دیواره، هر زمان که ذره‌ای از مرز دیواره عبور کند، یکی از چهار طرح شرط مرزی بازتابی اجرا می‌شود.

۲-۴-۱ انواع شرایط مرزی

در یک هندسه محدود با توجه به اینکه شرایط مرزی دیواره به صورت لغزشی است یا بدون لغزش باید با دقت مدل‌سازی شود. شرایط مرزی در دینامیک ذرات اتلافی معمولاً از دو روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و روش لئیس بولتزمن ایده گرفته شده است.

سه روش برای اعمال شرایط مرزی در شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی وجود دارد:

- روش لی ادوارد^۱ روشی مناسب برای مدل‌سازی غیرمستقیم مرز فیزیکی می‌باشد که در شبیه‌سازی لئیس بولتزمن نیز استفاده می‌شود.
- در جریان‌های میکرو ذرات یک دیواره سخت با مناطق منجمد را می‌توان نوع دیگر شرط مرزی در نظر گرفت
- روشی ترکیبی از انجماد با انعکاس که به آن انعکاس مکسول^۲ نیز گفته می‌شود.

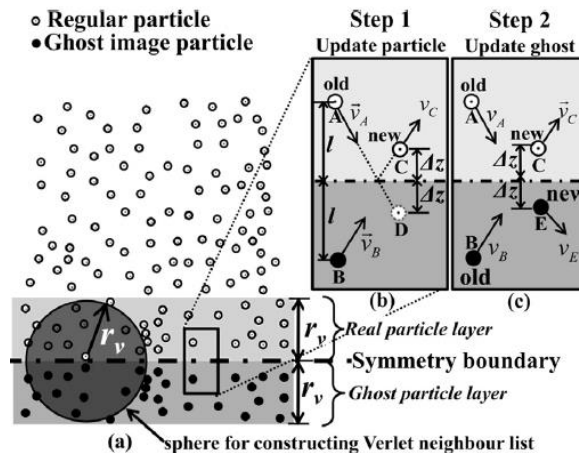
¹Lees Edwards

²Maxwel

در ادامه به شرایط مرزی نوع جدید دز شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی می‌پردازیم.

۲-۴-۱-۱ شرایط مرزی متقارن

یک شرایط مرزی بسیار متداول برای شبیه‌سازی سیستم‌های سیال، شرط مرزی متقارن^۱ است. استفاده از شرایط مرزی متقارن اجازه می‌دهد تا فقط بخشی از سیستم، مدل‌سازی شود، بنابراین نیاز به حافظه زیاد کامپیوتر نخواهیم داشت، همچنین زمان محاسبه به میزان قابل توجهی کاهش می‌یابد. از نظر ریاضی، در چنین صفحه متقارن، مقدار شیب نرمال ($\frac{\partial \phi}{\partial p} = 0$) به صفر می‌رسد. متغیرهای فشار، سرعت، تراکم، غلظت و ... تغییر می‌یابند. هیچ مطالعه سیستماتیک در مورد اجرای شرایط مرزی متقارن در دینامیک ذرات اتلافی وجود ندارد مگر برای طراحی یک میدان جریان متقارن، فقط از طرح بازتابی مخصوص استفاده می‌شود. شرایط مرزی متقارن، در واقع پیاده‌سازی شرایط مرزی دیواره‌ای با لایه‌های ذرات منجمد است که مبتنی بر بازتاب می‌باشد.



شکل ۲-۲. اجرای شرایط مرزی متقارن به صورت شماتیک توصیف شده است. (الف) پیکربندی ذرات دینامیک ذرات اتلافی و تصاویر نامرئی آن‌ها ارائه شده است. لایه ذرات واقعی و لایه ذرات نامرئی مشخص شده اند. (ب) مکانیسم بازتاب ویژه برای به روزرسانی موقعیت ذرات سیال نشان داده شده است. (پ) مکانیسم به روزرسانی موقعیت ذرات نامرئی. [۶۰]

¹Symmetric Boundary Condition

در این شرایط مرزی خلاف مرز دیواره ذرات می‌تواند از مرز عبور کنند. بنابراین، نمی‌شود از ذرات مرز مایع منجمد برای اجرای مرز داخلی متقارن استفاده کرد. دو سؤال اساسی در اجرای شرایط مرزی متقارن وجود دارد:

▪ چگونه می‌توان لایه‌ای از ذرات را که بطور جمعی به عنوان یک "مرز مایع" رفتار می‌کنند، ساخت؟

▪ چگونه می‌توان این ذرات "مرز سیال" را بدون حل معادلات حرکت آن‌ها حل کرد؟

پیاده‌سازی یک مرز متقارن به صورت شماتیک در شکل ۲-۲ نشان داده شده است. مرز متقارن لایه‌ای از ذرات نامرئی^۱ را در نظر می‌گیرد که در واقع تصاویر آینه‌ای از ذرات سیال واقعی^۲ بالاتر از مرز هستند. ذرات دینامیک ذرات اتلافی منظم و ذرات نامرئی به ترتیب در شکل ۲-۲ (الف) توسط دایره‌های خالی و دایره‌های سیاه جامد نشان داده می‌شوند. به این ترتیب، توزیع ذرات در منطقه از دو طرف مرز دقیقاً متقارن می‌شود و این مورد شرایط تقارن را تقویت می‌کند. ذرات سیال واقعی در بالای مرز متقارن، لایه ذرات واقعی نامیده می‌شود در حالی که لایه حاوی تصاویر نامرئی در زیر مرز، لایه ذرات نامرئی نامیده می‌شود. یک ذره واقعی در مرز متقارن می‌تواند با ذرات درون شعاع ارتباط برقرار کند، همان‌طور که در شکل ۲-۲ (الف) نشان داده شده است. بنابراین، ضخامت هر دو لایه ذرات واقعی و ذرات نامرئی، r_v است. ذرات موجود در لایه ذرات واقعی از طریق نیروی بقا و نیروهای اتلافی و تصادفی، با لایه ذرات نامرئی ارتباط پیدا می‌کنند. لایه ذرات نامرئی به عنوان مرز سیال عمل می‌کند که به اولین سؤال مطرح شده در بند فوق پاسخ می‌دهد. ذرات واقعی در لایه ذرات واقعی مجاز به عبور از مرز متقارن نیستند. در عوض، آن‌ها با استفاده از یک ذرات نامرئی ترکیبی و روش بازتاب^۳ دوباره تولید می‌شوند.

با استفاده از اصل تقارن می‌توان مکانیسم تکامل ذرات نامرئی را حل نمود. در هر زمان، مختصات ذرات

نامرئی به منظور حفظ تقارن لایه‌های ذرات واقعی و نامرئی به روز می‌شوند. این در دو مرحله در شکل ۲-۲

¹Ghost Particle Layer

²Real Particle Layer

³Combined Ghost Particle And Specular Reflection Method

(ب) و (پ) نشان داده می‌شود. در مرحله ۱، شکل ۲-۲ (ب)، موقعیت‌های جدید ذرات واقعی در لایه ذرات واقعی پس از ساخت همسایگی ورلت محاسبه می‌شود. ذره‌ای در لایه ذرات واقعی در نظر گرفته شده که موقعیت آن با نقطه A و تصویر نامرئی آن مشخص می‌شود. این تصویر نامرئی توسط نقطه B در شکل ۲-۲ (ب) مشخص شده است. اگر صفحه تقارن $z=0$ صفحه باشد، مختصات و اجزای سرعت ذرات در A و تصویر آن در B مربوط به:

$$\begin{cases} X_B = X_A; & Y_A = Y_B; & Z_B = -Z_A, \\ V_{x-B} = V_{x-A}; & V_{y-A} = V_{y-B}; & V_{z-B} = -V_{z-A} \end{cases} \quad (۳۵-۲)$$

در مرحله بعدی، اگر موقعیت جدید ذره A بالاتر از مرز متقارن باقی بماند، موقعیت جدید آن در نقطه C بدون هیچگونه رفتاری قرار می‌گیرد. اما اگر موقعیت جدید D آن که زیر مرز متقارن است شکل ۲-۲ (ب)، ذره A با استفاده از مکانیسم بازتابی دوباره به لایه ذرات مرئی در موقعیت جدید C برگردانده می‌شود. در مرحله ۲ شکل ۲-۲ (پ) ذره نامرئی در B ، که تصویر آینه A است، به یک موقعیت جدید E منتقل می‌شود. در اینجا E تصویر آینه C است. موقعیت و سرعت جدید ذرات نامرئی مانند زیر است:

$$\begin{cases} X_E = X_C, & Y_E = Y_C, & Z_E = -Z_C \\ V_{z-c} = V_{z-E}, & V_{y-c} = V_{y-E}, & V_{x-c} = V_{x-E} \end{cases} \quad (۳۶-۲)$$

در نتیجه، ذرات موجود در لایه ذرات نامرئی همیشه بعد از ادغام به عنوان تصویر آینه ذراتی که در لایه ذرات واقعی هستند باقی می‌مانند و شرط مرزی متقارن به طور دائمی حفظ می‌شود.

۲-۱-۴-۲ روش مرز آنی دیواره

در توصیف روش مرز آنی دیواره^۱ به شرایط جدید مرز جامد دیواره برای ذرات حاکم بر معادلات حرکت خواهیم پرداخت. مولفه نیروی بقا نزدیک دیواره در وهله اول اغتشاشات چگالی را کنترل می‌کند و مولفه دیواره مماسی نیروی اتلافی لغزشی را در نزدیکی مرز جامد تحمل نمی‌کند. در این روش تغییر نیروی دافعه مرکزی ذره دیواره

¹Instantaneous Wall Boundary Method

برای سرکوب اغتشاشات در نزدیکی دیواره و همچنین شرایط مرزی بدون لغزش با افزایش نیروی اتلافی و مماس به دیوار استفاده شده است. در روش مرز دیواره منجمد^۱ ذرات مایع در نزدیکی دیواره در شعاع برش با چند ذره جامد ثابت بسته به عدد چگالی دیواره تعامل دارند. مدل سازی مرز دیواره منجمد همچنین با قرار دادن ذرات منجمد ثابت بر روی دیوار قبل از محاسبه با تراکم از پیش تعیین شده انجام می شود. این روش های مدل سازی دیواره معایب کمی دارند.

در این بخش نیاز هست به حرکات زاویه ای نیز پرداخته شود. ذرات از طریق نیروی بقا در تعامل هستند. نیروهای بین ذره از نیروهای غیر بقا نیز تشکیل شده اند. حرکت ذرات توسط نیروی نیوتن کنترل می شود.

معادلات تعادل حرکت:

$$m_i \cdot \frac{dv_i}{dt} = f_i \quad (37-2)$$

و تعادل حرکت زاویه ای:

$$I_i \frac{d\omega_i}{dt} = \sum_{i \neq j} \lambda_{ij} r_{ij} \times f_{ij} \quad (38-2)$$

در فرمول بالا سرعت خطی v_i ، سرعت زاویه ای ω_i ، نیرو روی هر ذره f_i ، نیروی کل ذرات f_{ij} به دلیل وجود ذره i ، j می باشند. موقعیت بردار ذره i به نسبت ذره j ، $r_{ij} = r_i - r_j$ با اندازه $|r_{ij}|$ و بردار واحد توسط $e_{ij} = r_{ij} / |r_{ij}|$ بدست می آید. در این فرمول، نیروی مماس بین دو ذره عمل می کند. برای انتقال گشتاور بر روی ذرات، نسبت شعاع آن ها و در نتیجه $\lambda_{ij} = \frac{R_i}{R_i + R_j}$ که R_i و R_j مطابق شکل ۲-۳ شعاع ذرات i و j می باشد. همان طور که قبلاً ذکر شد، در دینامیک ذرات اتلافی، هر ذره خوشه ای، چندین مولکول در نظر گرفته می شود و از این رو نیروهای بین ذره از یک جزء نیروی بقا تشکیل شده اند که ممکن است به عنوان میانگین اثر نیروهای

¹Frozen Wall Boundary

بین اتمی، ناشی از اتلاف ذرات (ناشی از پراکندگی انرژی در بین تعداد زیادی مولکول‌های سازنده) و اجزای تصادفی باشد و یک جزء غیر بقایی محسوب شود. کل نیروی اعمال شده بر ذرات i توسط تمام ذرات همسایه آن در فرمول ۲-۲ آورده شده است، علاوه بر این، ممکن است یک نیروی خارجی نیز بر روی هر ذره عمل شود. به طور کلی فرض بر این است که نیروی بقا در امتداد خط مراکز ذرات عمل می‌کند در نتیجه به صورت زیر در نظر گرفته می‌شود:

$$F_{ij}^C = a_{ij}\Gamma(r_{ij})e_{ij} \quad (39-2)$$

در فرمول بالا a_{ij} پارامتر دافعه است و $\Gamma(r_{ij})$ یک تابع وزنی مناسب برای فاصله بین ذره‌ای است. این تابع وزنی در فواصل کوچک دافعه ایجاد می‌کند و در فواصل زیاد دافعه را از بین می‌برد. در شبیه‌سازی‌های دینامیک ذرات اتلاfi $\Gamma(r_{ij})$ به صورت فرمول زیر تعریف می‌شود:

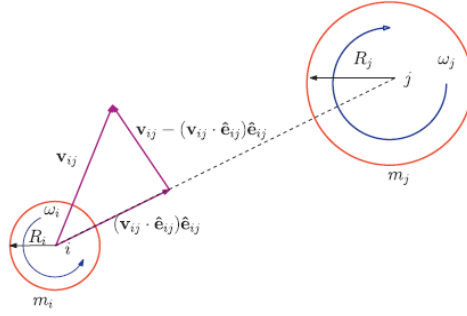
$$\Gamma(r_{ij}) = \begin{cases} 1 - \frac{r_{ij}}{r_c} & \text{if } r_{ij} < r_c \\ 0 & \text{if } r_{ij} > r_c \end{cases} \quad (40-2)$$

فرض بر این است که نیروهای اتلاfi و بقا از دو جز انتقالی^۱ و چرخشی^۲ تشکیل شده‌اند.

$$F_{ij}^D = F_{ij}^{Trans} + F_{ij}^{Rot} \quad (41-2)$$

¹Transitional force

²Rotational force



شکل ۲-۳. نمایش شماتیک ذرات دینامیک اتلافی، انتقال و چرخش زاویه‌ای ذرات [۶۰]

که به طور خاص می‌توان فرمول زیر را نوشت:

$$F_{ij}^{Trans} = -\gamma_{ij}^c \Gamma^2(r_{ij})(v_{ij} \cdot e_{ij})e_{ij} - \gamma_{ij}^s \Gamma^2(r_{ij})[v_{ij} - (v_{ij} \cdot e_{ij}) \cdot e_{ij}] \quad (42-2)$$

در فرمول بالا $v_{ij} = v_i - v_j$ سرعت نسبی است و γ_{ij}^c و γ_{ij}^s ضرایب اتلافی هستند.

$$F_{ij}^{Rot} = -\gamma_{ij}^s \Gamma^2(r_{ij})[r_{ij} \times (\omega_i \lambda_{ij} + \omega_j \lambda_{ij})] \quad (43-2)$$

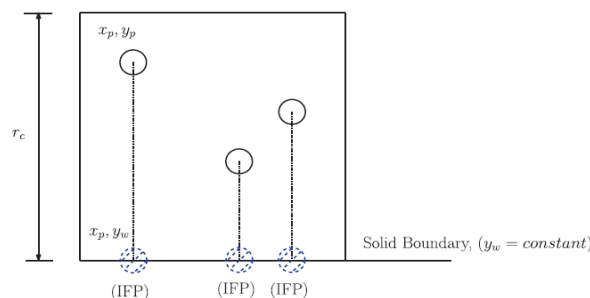
نیروی تصادفی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$F_{ij}^R \cdot \Delta t = \Gamma(r_{ij}) \left[\sigma_{ij}^c \cdot tr[dw_{ij}] \frac{1}{\sqrt{d}} + \sqrt{2} \sigma_{ij}^s dw_{ij}^A \right] \cdot \hat{e}_{ij} \quad (44-2)$$

$$\begin{cases} \sigma_{ij}^c = \sqrt{2k_B T \gamma_{ij}^c} \\ \sigma_{ij}^s = \sqrt{2k_B T \gamma_{ij}^s} \end{cases} \quad (45-2)$$

در ابتدا، ذرات مایع به جای یک دیوار پیوسته با ذرات ثابت ارتباط برقرار می‌کنند. برای مدل‌سازی یک دیوار پیوسته، هر ذره سیال در نزدیکی دیوار باید وجود دیواره را از طریق نیروهای بین ذره‌ای در کمترین فاصله احساس کند. این تنها در صورتی امکان پذیر است که ذرات دیواره ثابت باشند و تراکم دیواره $\rho_w = \infty$ باشد. به دلیل اثر دیواره عدد چگالی ذرات دیواره بالا و نوسانات چگالی سیال مورد توجه قرار می‌گیرد.

از آنجا که به دلیل ملاحظات عملی، تعداد محدودی از ذرات دیواره در روش مرز دیواره منجمد و مرز دیواره تیز^۱ استفاده می‌شود، ذرات سیال با سرعت بالا از درون دیوار عبور می‌کنند. این ذرات با استفاده از بازتاب‌های خاص یا ماکسول مجدداً به حوزه شبیه‌سازی وارد می‌شوند و این موضوع دلیل اصلی تغییرات خواص مواد در نزدیکی دیواره است. گسترش دامنه شبیه‌سازی فراتر از منطقه سیال درمرز دیواره منجمد به دلیل تعداد زیاد فعل و انفعالات سیال و جامد باعث افزایش هزینه محاسباتی می‌شود. علاوه بر این، روش‌های فوق در صورت لزوم تنظیم طول لغزش به‌سادگی انجام نمی‌شود. مدل مرز آنی دیواره، یک مدل برای مرز جامد است تا معایب دیواره ذرات منجمد را تصحیح کند. در روش مرز آنی دیواره، دارد اگر ذره‌ای در کمترین فاصله از ذرات مایع قرار داشته باشد، دیوار با هر ذره سیال به کمک شعاع برش درون محیط ارتباط برقرار می‌کند.



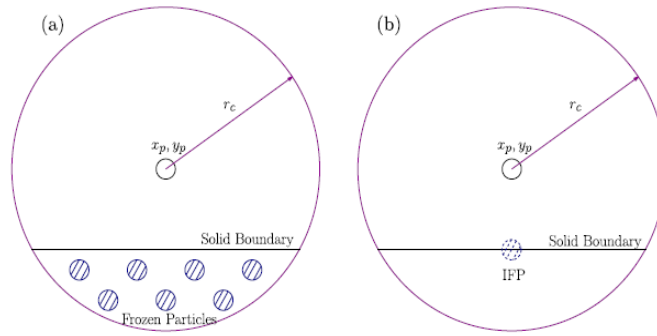
شکل ۲-۴. هر ذره سیال در شعاع برش از دیواره جامد با ذرات منجمد آنی مربوطه خود در تعامل است. اندازه ذرات منجمد آنی از ذرات سیال است، سرعت زاویه‌ای آن صفر و سرعت خطی آن از دیواره جامد است [۶۰]

همان‌گونه که در شکل ۲-۴ مشاهده می‌شود ذرات منجمد آنی^۲ دقیقاً در هر مرحله از زمان به صورت پویا در مرز ظاهر می‌شوند و پس از محاسبه تعامل آن‌ها با ذرات مایع ناپدید می‌شوند. بنابراین دیوار در این روش فراتر از دامنه سیال گسترش نمی‌یابد و از این جنبه شبیه به روش مرز دیواره تیز است. در واقع، ذرات دیواره مرز آنی همانند یک مرز جامد پیوسته عمل می‌کنند بنابراین چگالی دیواره به طور مؤثر $\rho_w = \infty$ است. تفاوت اصلی

¹Sharp Wall Boundary

²Instantaneous Frozen Particles

بین مدل پیشنهادی مرز دیواره منجمد یا مرز دیواره تیز در این است که هر ذره سیال تنها با یک مرز دیواره آبی در ارتباط است، در حالی که در روش‌های دیگر هر ذره با تمام ذرات منجمد که در شعاع برش قرار دارند ارتباط دارد که در شکل ۲-۵ نمایش داده شده است. این طرح دارای مزیت بی‌شماری همچون کنترل بهتر بر روی نیروی بقا سیال جامد است و به تبع آن، به طور موثری نوسانات چگالی را در نزدیکی دیوار سرکوب می‌شود. دامنه شبیه‌سازی در ناحیه سیال محدود می‌شود، بنابراین تعداد ذرات دیواره در نظر گرفته شده به طور موثر کوچک‌تر است و این اجازه را می‌دهد تا روش از نظر محاسباتی نیز کارآمدتر باشد.



شکل ۲-۵. مقایسه برخورد ذرات مایع و دیواره قسمت a روش مرز دیواره منجمد و قسمت b روش مرز آبی [۶۰]

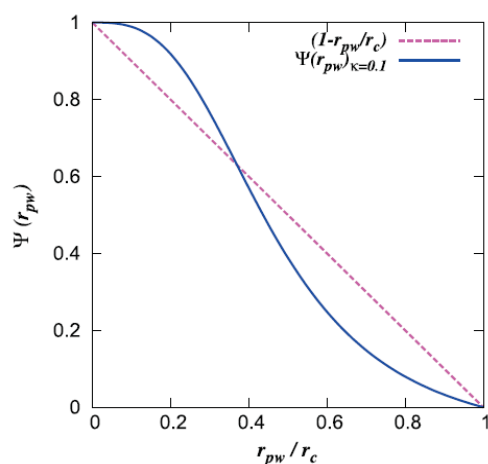
نیروی متقابل بقا بین یک ذره سیال و دیواره جامد به صورت زیر می‌باشد:

$$F_{pw}^C = a_{pw} \Psi(r_{pw}) e_{pw} \quad (46-2)$$

در فرمول بالا a_{pw} پارامتر دافع مرکزی سیال-جامد است، $r_{pw} = |r_{pw}|$ و بردار واحد $e_{pw} = r_{pw}^*/r_{pw}$ برای کنترل نوسانات چگالی در نزدیکی دیوار می‌باشد، لازم است تابع $\Psi(r_{pw})$ در نزدیکی دیوارها سفت شود. تابع مناسبی که این نیازها را برآورده سازد، انتخاب شده است:

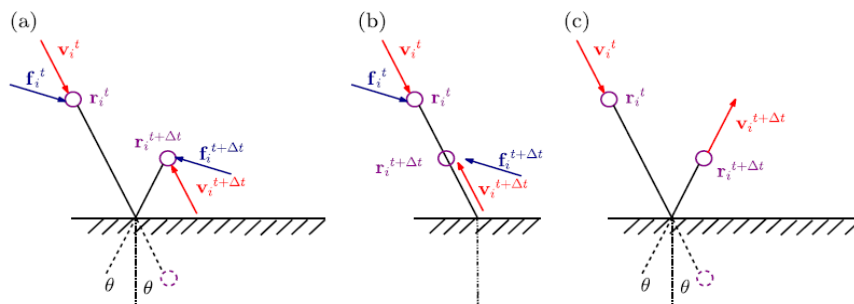
$$\Psi(r_{pw}) = \begin{cases} k \left(\frac{1 - (r_{pw}^*/r_c)^3}{k + (r_{pw}^*/r_c)^3} \right) & \text{if } r_{pw} < r_c \\ 0 & \text{if } r_{pw} > r_c \end{cases} \quad (47-2)$$

رسم تابع $\Psi(r_{pw})$ در k برابر $0/1$ در شکل ۶-۲ آورده شده است.



شکل ۶-۲: نمودار تابع $\Psi(r_{pw})$ [۶۰]

فرض می شود که برخورد ذرات مایع با یک دیوار، الاستیک و خاص که می توان در شکل ۷-۲ مشاهده نمود.



شکل ۷-۲. مقایسه طرح های جایگذاری مجدد ذرات سیالی که از دیواره جامد عبور می کنند [۶۰]

انعکاس ویژه در زیر به شرح زیر است:

$$d_s = 2(d_n \cdot d_i) \cdot d_n - d_i \quad (۴۸-۲)$$

در فرمول بالا d_i جهت برخورد را از سطح مشخص می کند، d_n واحد نرمال از نقطه بازتاب و d_s بردار واحد در راستای بردار منعکس شده است. در تغییر جهت غیر فیزیکی، دما در نزدیکی دیوار به ویژه در جهت مماس بر

دیواره تأثیر گذارد است [۶۰]. با افزایش نیروی اتلافی جانبی (اصطکاک) بین ذرات مایع و روش مرز آنی مربوطه، بدون لغزش تحمیل می‌کنیم. این کار با افزایش نیروی اتلافی مماس دیواره روی ذره سیال نزدیک به مرز با استفاده از افزایش ضریب اصطکاک جانبی انجام می‌شود. این افزایش در نیروی اتلافی عرضی باعث کاهش سرعت نسبی ذرات در جهت مماس به دیوار می‌شود. بنابراین این روش به تغییر پارامترهای تعامل بدنی متوسل می‌شود و برای کنترل این لغزش به سرعت و موقعیت‌های ذرات بازتولید شده تکیه نمی‌کند. نیروهای اتلافی جانبی بین یک ذره مایع و دیوار فرض می‌شود که بیشتر از نیروهای تعامل مایع-سیال است. با توجه به این نیروهای اتلافی جانبی بزرگتر است، از سرعت نسبی ذرات سیال مماس بر سطح دیوار کاسته می‌شود. فرض می‌کنیم ضریب اتلافی جانبی تابعی از فاصله از r_{pw} دیواره است و به همین ترتیب متفاوت است:

$$\gamma_{pw}^s = \begin{cases} \alpha(1 - r_{pw}/r_c)^2 \gamma_{pp}^s & \text{if } r_{pw} < r_c \\ 0 & \text{if } r_{pw} > r_c \end{cases} \quad (۴۹-۲)$$

در فرمول بالا α ضریب لغزش می‌باشد. فرم انتخاب شده γ_{pw}^s را تضمین می‌کند و اصطکاک جانبی بین ذرات مایع و جامد افزایش می‌یابد زیرا ذرات سیال نزدیک‌تر به دیوار حرکت می‌کنند. ضرایب اتلافی و تصادفی از طریق $\sigma_{pw}^s = \sqrt{2K_B T \gamma_{pw}^s}$ با هم در ارتباط هستند و از نوسانات دما به دلیل تغییر ضریب پسا جلوگیری می‌کند. ذرات مایع در نزدیکی دیوار به دلیل افزایش نیروهای جانبی مقاومت زیادی در برابر حرکت نسبی مماسی دارند و در نهایت ذرات نزدیک به دیوار به سرعت دیواره می‌رسند. اجرای این طرح آسان است و با تغییر پارامتر α می‌توان مرز لغزش جزئی را نیز به راحتی بدست آورد.

۲-۵ ضرایب آیرودینامیکی

ضرایب برا و پسا ایرفویل‌ها تابع زاویه حمله هستند، زاویه حمله زاویه بین وتر ایرفویل و بردار سرعت جریان آزاد می‌باشد. وتر خط مستقیمی است که لبه حمله و لبه فرار را بهم متصل می‌کند. ضرایب برا و پسا به‌طور جداگانه در بخش‌های زیر تعریف شده است.

۲-۵-۱ ضریب پسا

مولفه نیروی موثر بر یک جسم در امتداد موازی با جریان را پسا می‌گویند که در فرمول ۲-۵۰ بیان شده است:

$$F_D = \frac{1}{2} \rho V^2 C_D A \quad (۲-۵۰)$$

بر اساس فرمول بالا ضریب پسا به صورت زیر تعریف می‌گردد:

$$C_D = \frac{2F_D}{\rho V^2 A} \quad (۲-۵۱)$$

۲-۵-۲ ضریب برا

نیروی برا، نیروی وارد شده در راستای عمود بر حرکت سیال می‌باشد که به صورت زیر تعریف می‌گردد:

$$F_L = \frac{1}{2} \rho V^2 C_L A \quad (۲-۵۲)$$

بر اساس فرمول بالا ضریب برا به صورت زیر تعریف می‌گردد:

$$C_L = \frac{2F_L}{\rho V^2 A} \quad (۲-۵۳)$$

۲-۶ محاسبه نیروهای آیرودینامیکی به کمک روش دینامیک ذرات

اتلافی

در روش مولکولی دینامیک ذرات اتلافی چهار نیرو، نیروی اتلافی، تصادفی، بقا و نیروی خارجی به ذرات وارد می‌شود. با علم دانستن تعداد هر مولکول که به سطح برخورد می‌کند نیروهای وارده به هر مولکول را نیز در دست خواهیم داشت. با مجموع نیروهای وارد بر هر ذره نیروی کل بدست می‌آید. با نیروی کل در راستای x نیروی پسا و نیروی کل در راستای y نیروی برا بدست می‌آید. با قرار دادن نیروهای بدست آمده می‌توان با کمک فرمول ۲-۵۱ و ۲-۵۳ به ترتیب ضریب نیروی پسا و برا را بدست آورد.

فصل سوم: بیان مسئله و نتایج حاصل از شبیه سازی

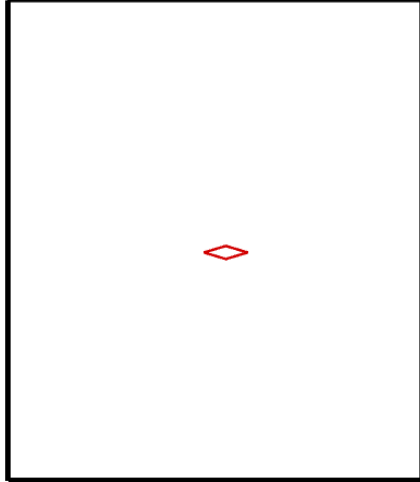
در فصل پیش رو به تشریح کامل مسئله و روش حل آن پرداخته می‌شود. پس از حل عددی مسئله به اعتبارسنجی نتایج حل عددی پرداخته می‌شود.

۳-۱ تشریح مسئله

موضوع پژوهش حاضر شبیه‌سازی جریان بر روی ایرفویل در مقیاس میکرو با روش دینامیک ذرات اتلافی می‌باشد. در قسمت اول این پژوهش برای اعتبارسنجی کد شبیه‌سازی به روش دینامیک ذرات اتلافی از کانال ساده بدون حضور جسم استفاده شده است. نتایج حاصله شامل پروفیل سرعت است که بررسی و اعتبارسنجی شده است. سپس درون کانال، مقطع بال لوزی شکل در زاویه حمله صفر درجه قرار داده شد. حرکت ذرات از روی ایرفویل لوزی شکل بررسی شده است پس از رسیدن به نتایج مطلوب بر روی مقطع بال لوزی شکل، این روش بر روی ناکا ۰۰۱۲ در زوایای حمله ۰، ۳، ۶، ۹ و ۱۰ امتحان شد. جریان بر روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ بررسی شد و پس از آن ضرایب پسا و برا بدست آمد و با حل دینامیک سیالات محاسباتی مقایسه گردید.

۳-۲ هندسه مسئله

در مسئله پیش رو، سیال نیوتنی در یک کانال 20×20 جریان دارد. این نوع جریان در صنعت دارای کاربرد فراوان بوده و همچنین می‌توان از آن به عنوان یک مدل کلی از جریان‌های داخلی سیال استفاده نمود. در جهت اصلی جریان x و در جهت عرضی y شرط مرزی، پریودیک فرض شده است. بر روی دیواره‌های بالا و پایین شرط مرزی دیواره عدم لغزش برقرار است. برای اعتبار سنجی کد شبیه‌سازی به روش دینامیک ذرات اتلافی از کانال استفاده شده است. در طرح اولیه یک ریزایرفویل ساده (مقطع بال لوزی شکل) در صفر درجه قرار داده شد تا حرکت ذره درون کانال بررسی شود و بتوان نتایج اولیه را برای اثبات اعتبار مدل پیشنهادی در نظر گرفت. هندسه جریان در شکل ۳-۱ نشان داده شده است.



شکل ۳-۱. بخش عرضی دامنه محاسباتی برای شبیه‌سازی ایرفویل لوزی شکل

۳-۳ بازتاب از دیواره پیچیده

در این پایان‌نامه یک مدل برای مرز جامد پیشنهاد می‌شود تا معایب دینامیک سیالات محاسباتی اصلاح شود. مرحله اول یافتن تقاطع ذرات دامنه محاسباتی با هندسه می‌باشد که امری ضروری است. با استفاده از شیب خط و عرض از مبدا برخورد مناسبی بدست‌آمد. به عبارت دیگر، برخورد ذره‌ای با مختصات (x_p, y_p) مکانی دامنه محاسباتی با نقاط هندسه مورد بررسی قرار داده شد. پس از نقطه برخورد، زاویه برخورد نیز با استفاده از روابط زیر بدست آمد:

$$theta = \sqrt{x^2 + y^2} \quad (۱-۳)$$

در رابطه بالا x و y به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$x = x_{collision} - x_{geometry} \quad (۲-۳)$$

$$y = y_{collision} - y_{geometry} \quad (۳-۳)$$

مسئله اصلی انعکاس صحیح ذرات از روی هندسه می‌باشد که با استفاده از تغییر مبدا مختصات و دوران و با استفاده از روابط زیر بدست آمد:

زمانی که نقاط برخورد در محدوده $x_{collision} > 0$ و $y_{collision} > 0$ باشد آنگاه خواهیم داشت:

$$x_{reflect} = (p \times \cos(\beta + \theta)) + x_{collision} \quad (4-3)$$

$$y_{reflect} = (p \times \sin(\beta + \theta)) + y_{collision} \quad (5-3)$$

زمانی که نقاط برخورد در محدوده $x_{collision} < 0$ و $y_{collision} < 0$ باشد آنگاه خواهیم داشت:

$$x_{reflect} = - \left(p \times \cos((3.141592654 - \beta) + (3.14159265 - \theta)) \right) + x_{collision} \quad (6-3)$$

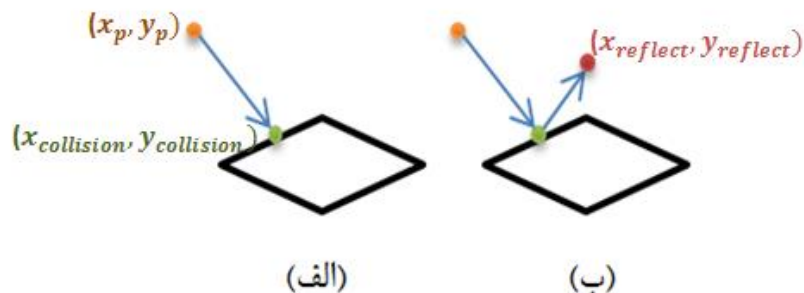
$$y_{reflect} = \left(p \times \cos((3.141592654 - \beta) + (3.14159265 - \theta)) \right) + y_{collision} \quad (7-3)$$

در روابط بالا p نشان‌دهنده طول پاره خط نقطه انعکاس محور مختصات اولیه است و زاویه β نیز از رابطه زیر بدست آمد:

$$\beta = \tan^{-1}(m) \quad (8-3)$$

در رابطه بالا m شیب خط مورد نظر می‌باشد.

همان‌طور که در بالا مشاهده می‌شود با استفاده از ریاضیات، انعکاس صحیح ذرات از روی دیواره بدست آمد که در شکل ۲-۳ می‌توان مشاهده نمود.



شکل ۳-۲. الف- برخورد ذره دامنه محاسباتی با نقاط هندسه ب- انعکاس ذره پس از برخورد

۳-۴ جریان در کانال

برای جریان آرام در حالت پایا و توسعه یافته در یک کانال، معادله ناویر استوکس به معادله زیر کاهش می‌یابد:

$$\frac{dp}{dx} = \mu \frac{d^2u}{dx^2} \quad (۹-۳)$$

معادله بالا دارای حل عمومی زیر می‌باشد:

$$U_x = \frac{1}{2\mu} \frac{dp}{dx} y^2 + C_1 y + C_2 \quad (۱۰-۳)$$

با در نظر گرفتن شرط عدم لغزش روی دیواره بالایی و پایینی می‌توان ثابت‌های انتگرال‌گیری C_1 و C_2 را تعیین نموده و توزیع سرعت زیر بدست می‌آید.

$$U_x = -\frac{1}{2\mu} \frac{dp}{dx} (h^2 - y^2) \quad (۱۱-۳)$$

برای اطمینان از آن‌که شرط مرزی بر روی دیواره‌ها به درستی در کد کامپیوتری اعمال شده، ابتدا جریان درون کانال توسعه یافته با اعمال شرایط مرزی بدون لغزش، به روش دینامیک ذرات اتلافی شبیه‌سازی می‌شود در

ادامه برای پی بردن به صحت حل عددی، پروفیل سرعت بدست آمده در روش دینامیک ذرات اتلافی را با دو روش تحلیلی و حل نرم افزار انسیس فلونت مقایسه شده است.

۳-۴-۱ مقایسه جریان درون کانال

در دو بخش متفاوت پروفیل سرعت در روش دینامیک ذرات اتلافی با روش های دینامیک سیالات محاسباتی و تحلیلی مقایسه شده است. تشابه جریانی و مقایسه، زمانی اتفاق می افتد که هر سه شرط تشابه هندسی، سینماتیکی و دینامیکی وجود داشته باشد. در این جا مدل و همچنین خطوط جریانی هر یک از مقایسه ها یکسان می باشد. در ابتدا به مقایسه پروفیل سرعت بدست آمده از دینامیک ذرات اتلافی با روش دینامیک سیالات محاسباتی پرداخته و پس از آن با روش تحلیلی مقایسه شده است.

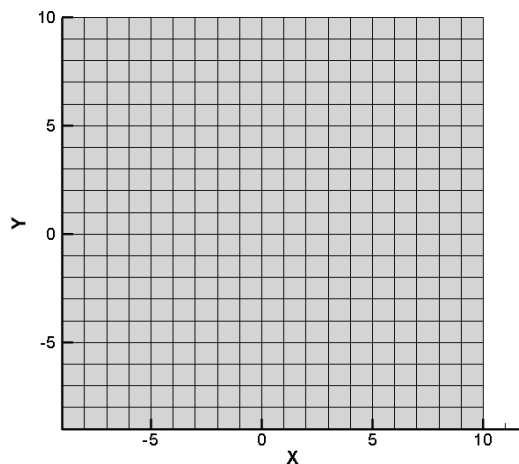
۳-۴-۱-۱ مقایسه جریان درون کانال با روش دینامیک سیالات محاسباتی و دینامیک

ذرات اتلافی

مسائل سیالاتی به کمک الگوریتم های عددی تجزیه و تحلیل می شوند. روش های اجزاء محدود، حجم محدود و تفاضل محدود جهت گسسته سازی معادلات دیفرانسیل در دینامیک سیالات محاسباتی مورد استفاده قرار می گیرند اما روش حجم محدود بیشترین کاربرد را بین سایر روش ها دارد. کانال با ابعاد 20×20 طراحی شده است و با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی مورد شبیه سازی عددی قرار گرفته است. کانال در محیط انسیس مدل سازی و برای تحلیل جریان، ناحیه مورد نظر به المان های کوچک تقسیم شده است. دامنه مسئله به تعداد زیادی اجزاء کوچک تقسیم و تمام ناحیه محاسباتی با سلول های چهار وجهی شبکه بندی شده است. دینامیک ذرات اتلافی یک روش لاگرانژی و در نتیجه روشی بدون شبکه است. این روش به هیچ وجه از شبکه استفاده نمی کند، اما برای محاسبه خواص ماکروسکوپی مانند چگالی، سرعت و غیره، باید یک فرآیند آماری انجام شود. بنابراین برای انجام این فرآیند از یک شبکه دکارتی استفاده می شود. یک شبکه نمونه در شکل ۳-۳ نشان داده شده است. مجدداً لازم به ذکر است که این شبکه دقیقاً برای اندازه گیری متوسط مورد استفاده قرار

می‌گیرد و با شبکه‌بندی که در المان محدود یا روش‌های حجم محدود مشاهده می‌شود متفاوت است. از یک شبکه با 20×20 سلول برای روند میانگین سرعت آماری استفاده شده است، ناحیه محاسباتی با شبکه مربعی، با طول و عرض ۱ در نظر گرفته شده است. به هر ذره نیروی جاذبه وارد می‌شود این نیروی جاذبه را به عنوان نیروی خارجی در نظر می‌گیریم: [۵۶]

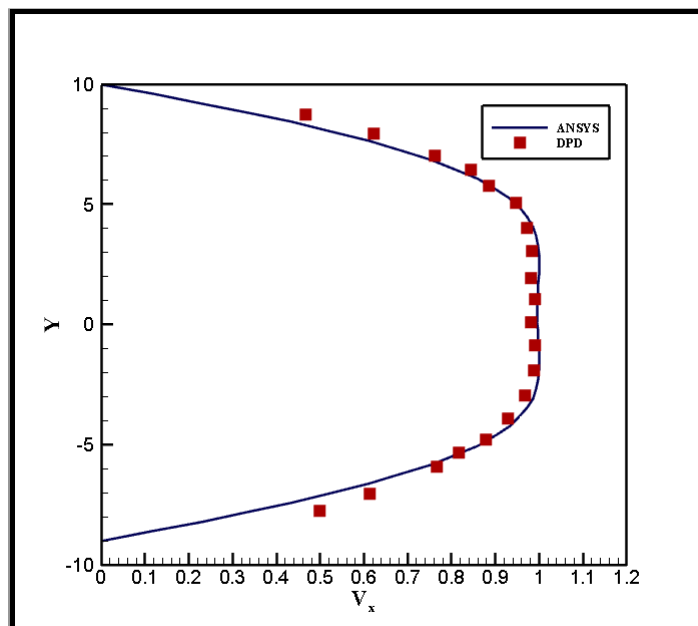
$$F_e = 0.01 \quad (12-3)$$



شکل ۳-۳. نمونه‌ای از شبکه که برای انجام مراحل آماری مورد استفاده قرار گرفت

مقایسه هر دو روش در شکل ۳-۴ آورده شده است. با توجه به فرمول ۳-۱۲ درصد خطا، ۴ می‌باشد.

$$\frac{100}{N} \sum \left(\frac{V_{DPD} - V_{FVM}}{V_{FVM}} \right) \quad (12-3)$$



شکل ۳-۴. مقایسه پروفیل سرعت در کانال به دو روش دینامیک سیالات محاسباتی و دینامیک ذرات اتلافی جهت شبیه‌سازی جریان درون کانال ساده در شرایط پایا

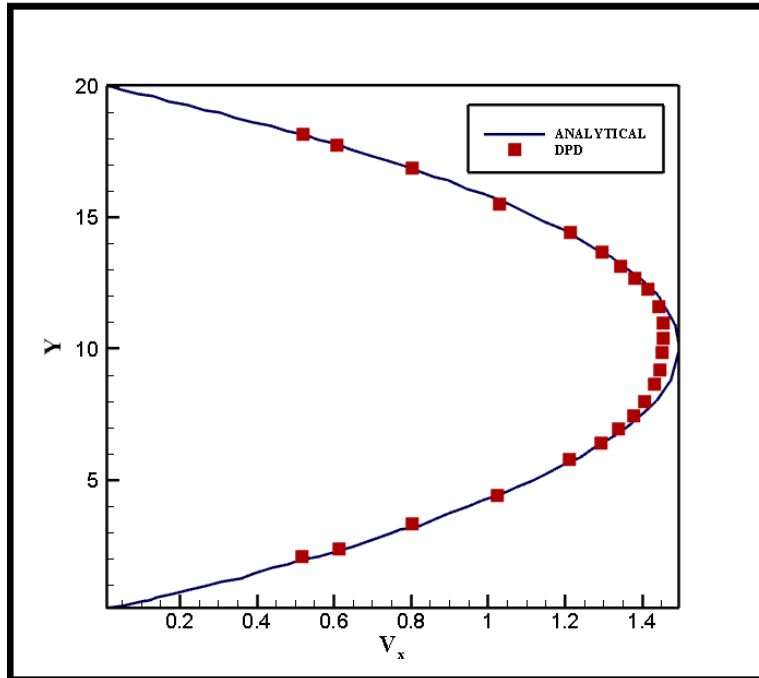
۳-۴-۱-۲ مقایسه جریان درون کانال با روش تحلیلی و دینامیک ذرات اتلافی

برای مقایسه جریان درون کانال با روش تحلیلی از مقاله گزارش شده توسط وقاص وحید و همکاران [۵۳] در سال ۲۰۱۸ استفاده شده است. برای دستیابی به نتایج مطلوب‌تر از پارامترهای موثر دینامیک ذرات اتلافی بیان شده در مقاله استفاده شده است. پارامترها در جدول ۳-۱ آورده شده است.

جدول ۳-۱ پارامترهای مورد استفاده شده در روش دینامیک ذرات اتلافی برای مقایسه با روش تحلیلی

پارامتر	dl_x	dl_y	dt	$k_B T$	σ	a_{ij}	γ	r_c	ρ
اندازه	۴۵	۲۰	۰/۰۵	۲	۳	۱۸/۷۵	۶/۷۵	۱	۴

جریان درون کانال با روش تحلیلی با توجه به پارامترهای استفاده شده در مقاله مورد نظر مقایسه شد. مقایسه این دو روش تحلیلی و دینامیک ذرات اتلافی در شکل ۳-۵ آورده شده است. با توجه به فرمول ۳-۱۲ درصد خطا کم‌تر از ۳ درصد محاسبه گردید.



شکل ۳-۵. مقایسه پروفیل سرعت در کانال به دو روش تحلیلی و دینامیک ذرات اتلافی جهت شبیه‌سازی جریان درون کانال ساده در شرایط پایا

۳-۵ اعتبار سنجی شبیه‌سازی جریان حول ایرفویل ناکا ۰۰۱۲

در این بخش یک مقایسه‌ای از روش انتخابی این پایان‌نامه با تنها مقاله گزارش شده ارائه شده است. جریان حول ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ توسط سعیدی و همکاران [۵۵] در سال ۲۰۱۱ به روش دینامیک ذرات اتلافی شبیه‌سازی و گزارش شده است. در مقاله ارائه شده ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ با طول کورد ۵۰ و ضخامت ۰/۱۲ و با ابعاد دامنه ۸۰×۳۰۰ در نظر گرفته شده است. در مقاله عدد رینولدز، ۲۰۰ در نظر گرفته شده است.

در کد نوشته شده ابعاد ایرفویل و همچنین دامنه محاسباتی همانند مقاله در نظر گرفته شد رینولدز را با توجه به فرمول ۳-۱۳ و با در نظر گرفتن ویسکوزیته هوا ۲۰۰ به دست آمد.

$$Re = \frac{V_{in} c}{\mu} \quad (۳-۱۳)$$

در هر دو شبیه‌سازی ضرایب دینامیک ذرات اتلافی $a=25$ ، $\sigma=3$ و $k_B T=1$ یکسان در نظر گرفته شده و پس از آن ضرایب برا و پسا مقایسه گردید. ضرایب برا و پسا در مقاله به ترتیب $0/36$ و $0/38$ و در کد نوشته شده به ترتیب $0/32$ و $0/365$ بدست آمد.

۳-۶ جریان روی ایرفویل ساده با روش دینامیک ذرات اتلافی

ما یک مدل منظم برای شرایط مرزی دیوار پیچیده در شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی ارائه داده‌ایم. این روش مبتنی بر نمایش دیوار با استفاده از یک شبکه مربعی است. نتایج در نرم‌افزار تک‌پلات رسم شده است.

۳-۶-۱ حرکات ذرات بر روی ایرفویل لوزی شکل

در این بخش، به بررسی نتایج شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی پرداخته شده است. شرایط شبیه‌سازی با در نظر گرفتن 8000 ذره می‌باشد. در جدول ۳-۲ پارامترهای شبیه‌سازی شده در دینامیک ذرات اتلافی آورده شده است. عدد رینولدز کم‌تر از 10 در نظر گرفته است.

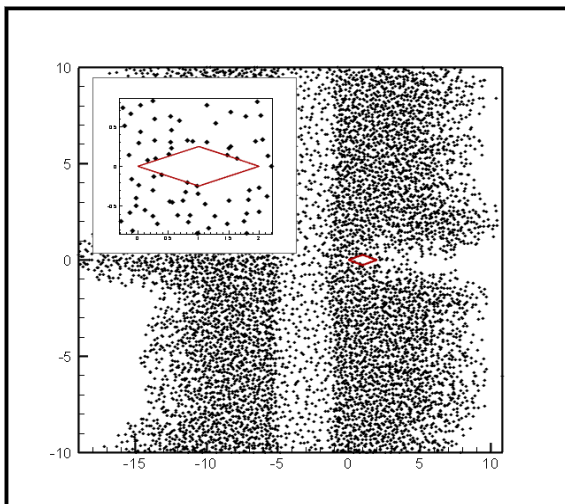
جدول ۳-۲. پارامترهای شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی

پارامتر	dl_x	dl_y	$Rho0$	dt	$isteps$	$maxstp$	$k_B T$	σ	a_{ij}	γ	r_c
اندازه	۲۰	۲۰	۲۰	۰/۰۱	۱۰۰	۱۰۰۰	۱	۳	۲۵	۴/۵	۱

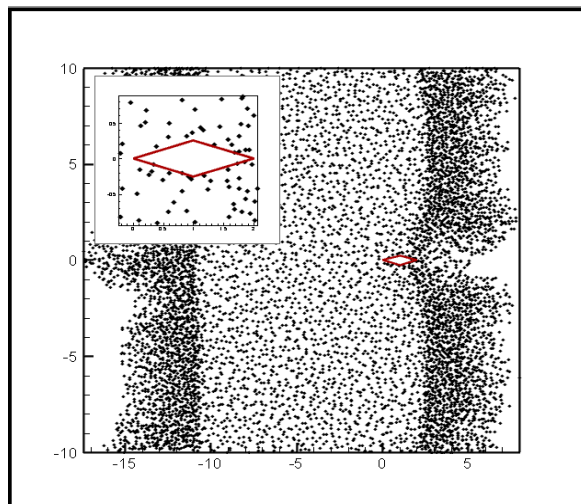
در این پایان‌نامه یک مدل برای شرایط مرزی دیوار پیچیده در شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی ارائه شده است. این روش مبتنی بر نمایش دیوار با استفاده از یک شبکه مربعی است. با توجه به نتایج حاصله از شبیه‌سازی عددی میدان جریان حول ریزایرفویل گسترش می‌یابد. در جدول ۳-۳ ابعاد هندسه آورده شده است. حرکت ذرات تا گام زمانی 1000 در شکل ۳-۶، ۳-۷، ۳-۸، ۳-۹، ۳-۱۰ در نرم‌افزار تک‌پلات به نمایش درآمده است.

جدول ۳-۳. ابعاد هندسه

ابعاد ایرفویل	(۱،-۰/۲۵)	(۲،۰)	(۱،۰/۲۵)	(۰،۰)
---------------	-----------	-------	----------	-------

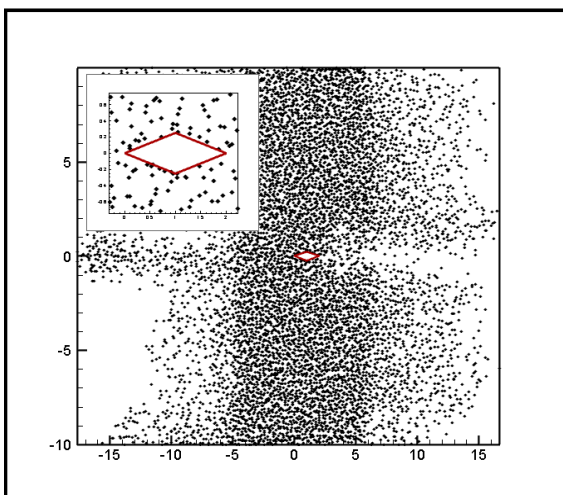


(۲)

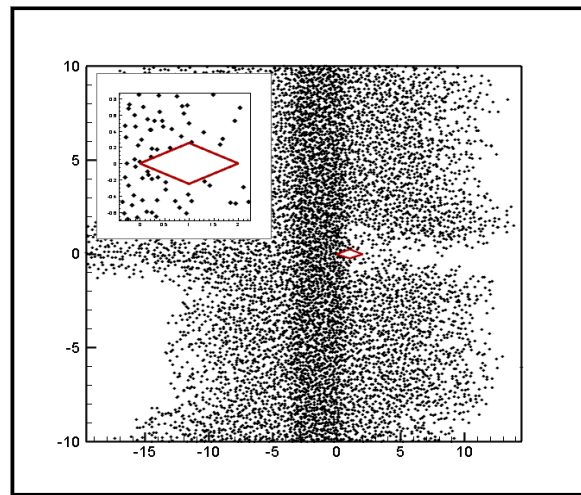


(۱)

شکل ۳-۶. حرکت ذرات از روی هندسه، شماتیک (۱) مربوط به گام زمانی ۲۰۰ و شماتیک (۲) مربوط به گام زمانی ۳۴۰ می باشد.

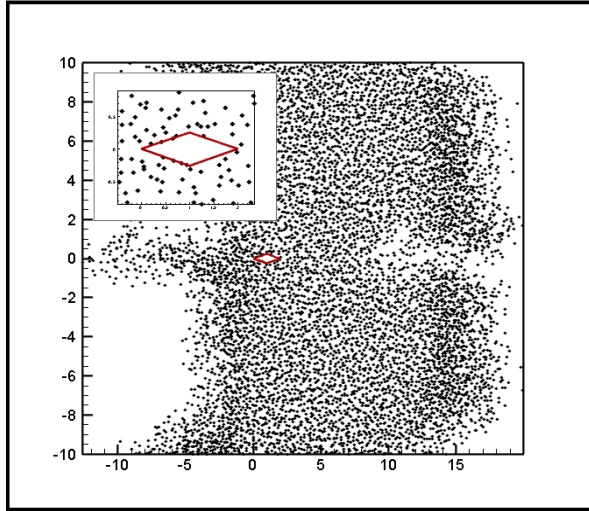


(۴)

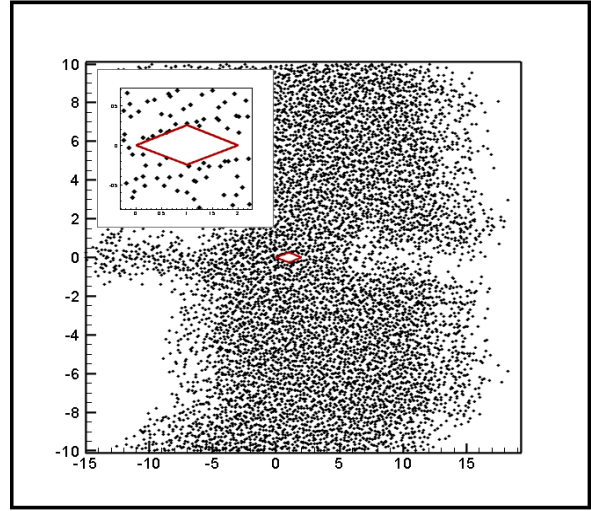


(۳)

شکل ۳-۷. حرکت ذرات از روی هندسه، شماتیک (۳) مربوط به گام زمانی ۴۲۰ و شماتیک (۴) مربوط به گام زمانی ۶۲۰ می باشد.

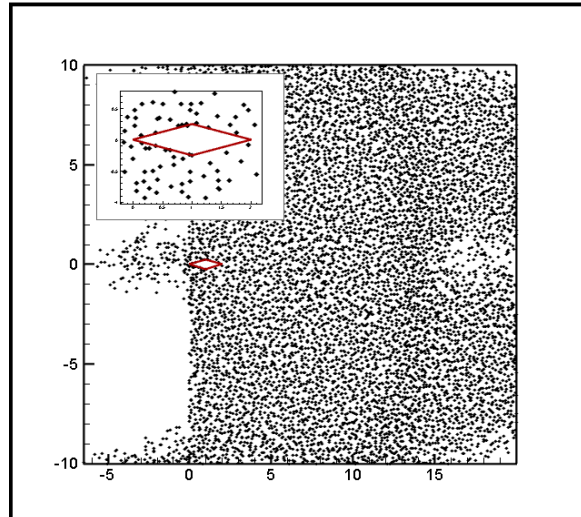


(۶)

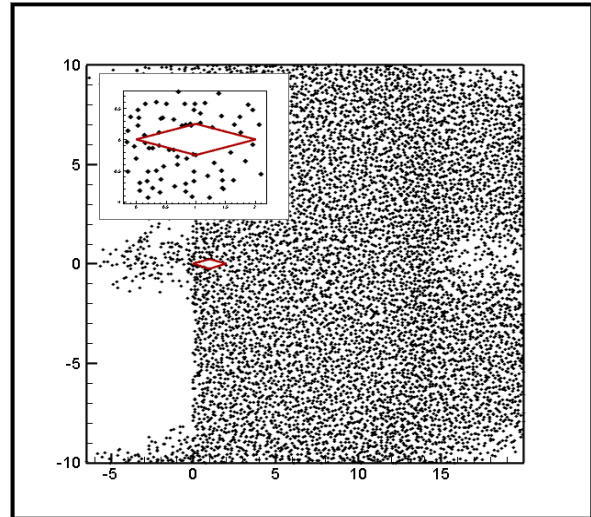


(۵)

شکل ۳-۸. حرکت ذرات از روی هندسه، شماتیک (۵) مربوط به گام زمانی ۷۰۰ و شماتیک (۶) مربوط به گام زمانی ۷۴۰ می باشد.

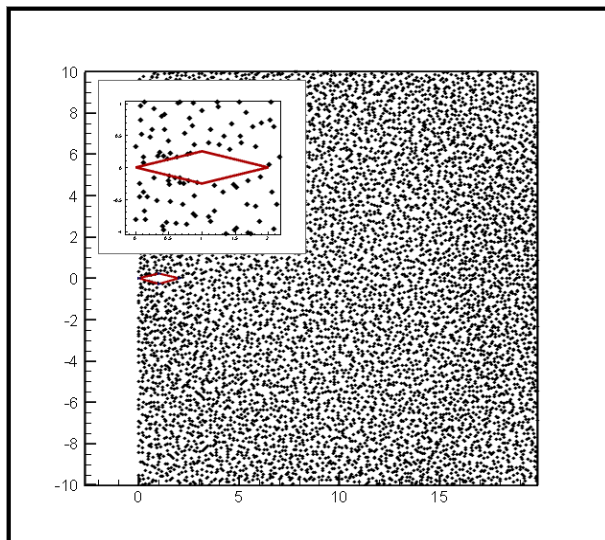


(۸)

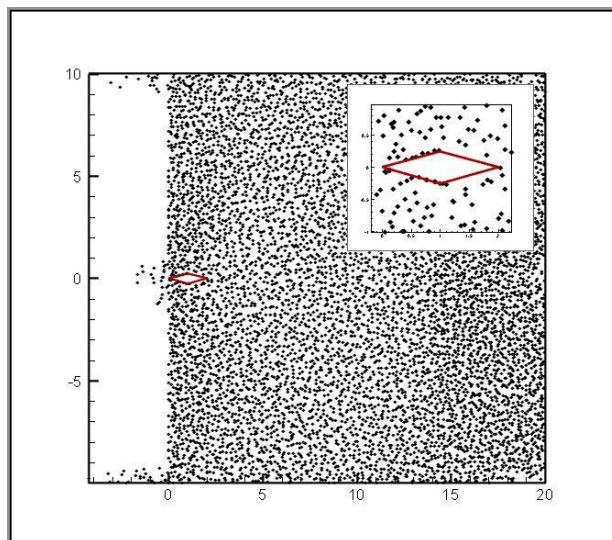


(۷)

شکل ۳-۹. حرکت ذرات از روی هندسه، شماتیک (۷) مربوط به گام زمانی ۷۸۰ و شماتیک (۸) مربوط به گام زمانی ۸۶۰ می باشد.

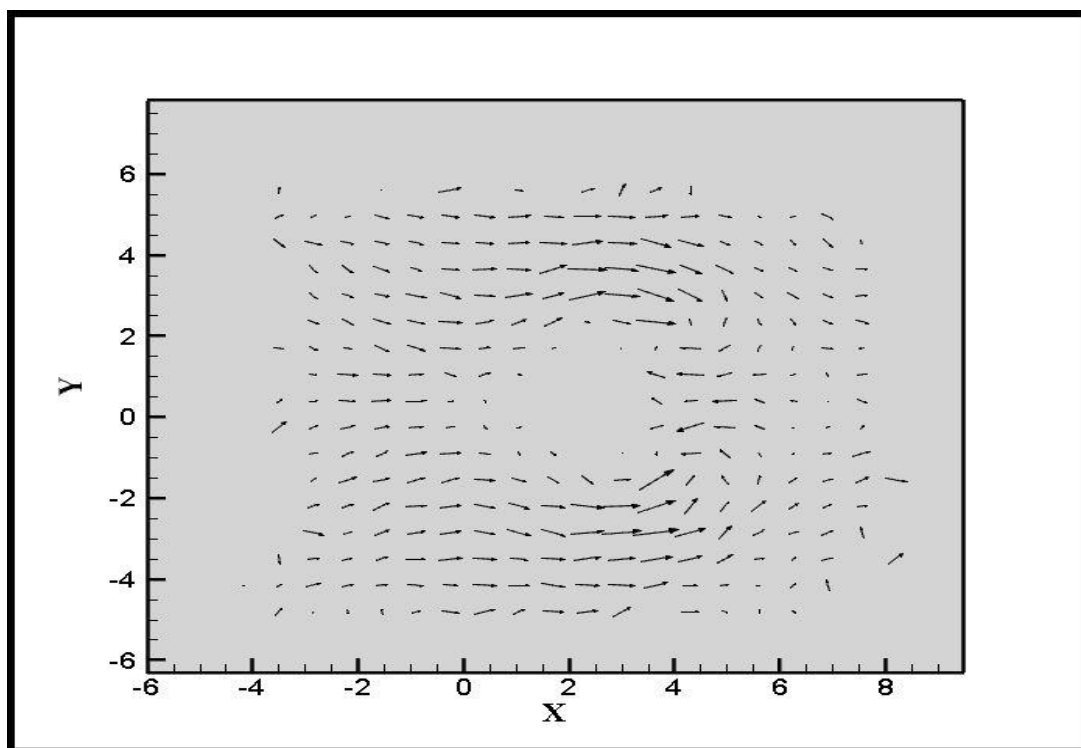


(۱۰)



(۹)

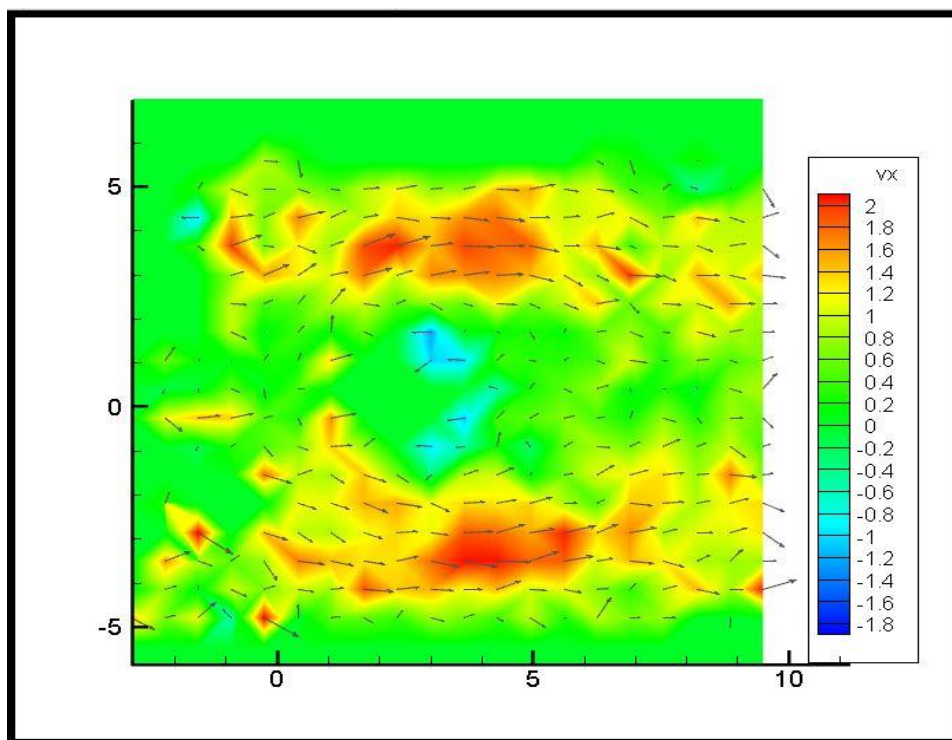
شکل ۳-۱۰. حرکت ذرات از روی هندسه، شماتیک (۹) مربوط به گام زمانی ۹۲۰ و شماتیک (۱۰) مربوط به گام زمانی ۱۰۰۰ می- باشد.



شکل ۳-۱۱. خطوط جریان حول ایرفویل لوزی شکل

در ابتدا جریان بر روی یک ریزایرفویل ساده به شکل لوزی، به روش دینامیک ذرات اتلافی شبیه‌سازی شده است. جریان شروع به گسترش حول ریزایرفویل می‌کند، همان‌گونه که در شکل‌های ۳-۶ تا ۳-۱۰ دیده می‌شود. با توجه به شکل‌های ۳-۶ تا ۳-۱۰ در نزدیکی سطح ریزایرفویل ($n=0$) حرکت ذرات ثابت است و با افزایش n سرعت ذرات افزایش می‌یابد. سرعت و حرکت ذرات از نیروی اصطحکاک بین سطح و سیال ناشی می‌شود که دارای شیب $\frac{\partial v}{\partial n}$ است. (n معرف مختص قائم بر سطح می‌باشد). الگوی خطوط جریان متقارن است همچنین در شکل ۳-۱۱ نشان داده شده است.

در آغاز، جریان در پایین دست لبه حمله آرام است اما پس از طی مسافتی معین، ناپایداری‌هایی در جریان آرام بروز می‌کند این ناپایداری‌ها سریعاً رشد کرده باعث گذار به جریان مغشوش می‌شود که این نشان-دهنده رعایت قانون مساحت در این شکل است زیرا در قانون مساحت با تغییرات تدریجی سطح مقطع روبرو هستیم که در این صورت سرعت به صورت ملایم از صفر (نزدیک سطح) تا افزایش حرکت ذرات در بالای ایرفویل پیش می‌رود. با توجه به روند حرکت ذرات در شکل‌های ۳-۶ تا ۳-۱۰ در قسمت لبه فرار جدایش جریان اتفاق افتاده است در نتیجه اغتشاش بیش‌تر شده و باعث ایجاد گردابه در منطقه جدا شده می‌شود. در شکل ۳-۱۲ کانتور سرعت حول ایرفویل لوزی شکل را نشان می‌دهد.



شکل ۳-۱۲. کانتور سرعت بدست آمده از شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی

در این شبیه‌سازی به دلیل تناوبی بودن جریان از شرایط مرزی دوره‌ای استفاده شده است. همچنین برای به حداقل رساندن اثرات لبه از این شرایط مرزی استفاده می‌کنیم. در این نوع شرایط مرزی ذرات با عبور از یک مرز مجدداً با سرعت و موقعیت‌های اصلاح شده در مرز مقابل ظاهر می‌شوند. با اعمال این شرایط مرزی ذرات به تعادل رسیدند. شرایط مرزی دوره‌ای برای دستیابی به هندسه‌های که ورودی و خروجی آن‌ها یک اندازه نیست، قابل استفاده نیست. مهم‌ترین ویژگی شرایط مرزی اعمال شده در شبیه‌سازی به روش دینامیک ذرات اتلافی، نفوذ ناپذیری ذرات به داخل ریزایرفویل و همچنین بازگشت صحیح ذرات از دیواره ریزایرفویل می‌باشد. در نزدیکی دیواره نیروهای وارد بر ذرات ممکن است نامتعادل باشند در نتیجه نوساناتی در نزدیکی دیواره به دلیل الگوی نامتعادل میدان نیرو ظاهر می‌شود. برای ذره‌ای که با دیواره فاصله‌ای کوچک‌تر از شعاع برش دارد بخشی از دیواره نادیده گرفته می‌شود و این قسمت هیچ‌گونه نیرویی را روی ذره اعمال نمی‌کند. ذرات زمانی که به دیواره دامنه محاسباتی برخورد می‌کند و با روش بازتاب مکسول مجدداً به دامنه محاسباتی باز می‌-

گردد. در این پایان نامه به گسترش نتایج با هندسه انتخابی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ پرده شده است، در بخش ۳-۷ به آن پرداخته شده است.

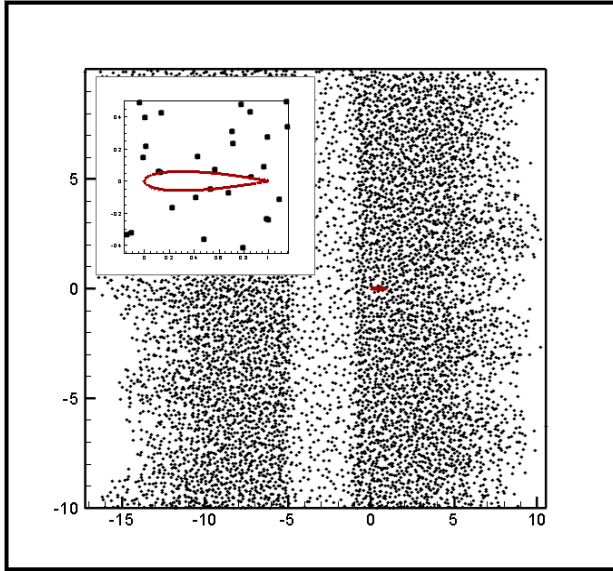
۳-۷ گسترش نتایج با ایرفویل ناکا ۰۰۱۲

در ابتدا بر روی یک ایرفویل ساده به شکل لوزی، جریان به روش دینامیک ذرات اتلافی شبیه سازی گردید سپس جریان حول ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زوایای ۰، ۳، ۶، ۹ و ۱۰ به روش دینامیک ذرات اتلافی شبیه سازی شده است.

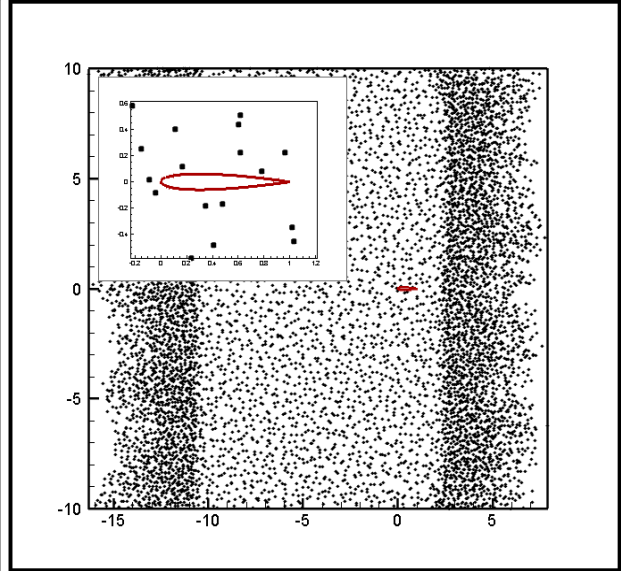
۳-۷-۱ شبیه سازی جریان حول ایرفویل صفر درجه به روش دینامیک ذرات

اتلافی

جریان بر روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه صفر درجه به روش دینامیک ذرات اتلافی شبیه سازی شده است. چند نمونه از حرکت ذرات را در گام های زمانی متفاوت در شکل های ۳-۱۳، ۳-۱۴، ۳-۱۵ آورده شده است.

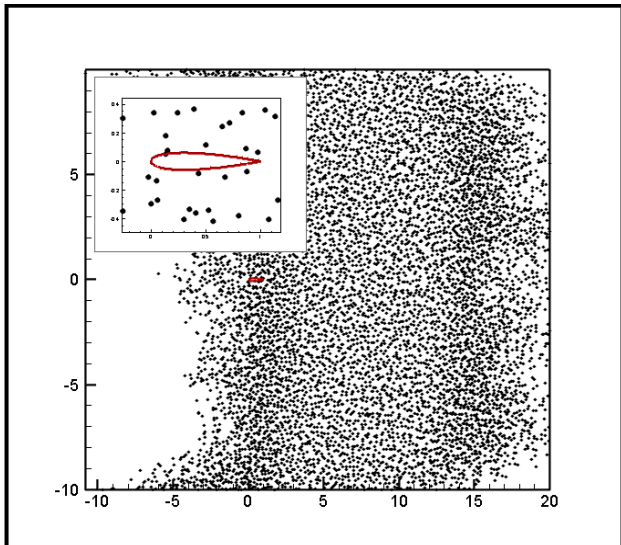


(۲)

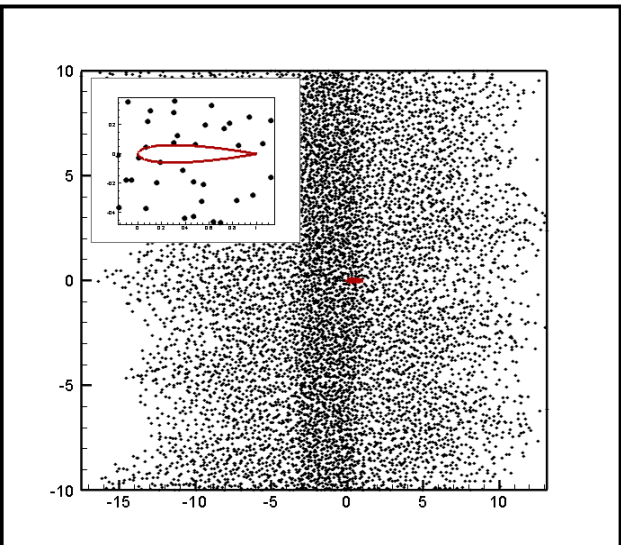


(۱)

شکل ۳-۱۳. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۰ درجه، شماتیک (۱) مربوط به گام زمانی ۱۰۰ و شماتیک (۲) مربوط به گام زمانی ۲۰۰ می‌باشد.

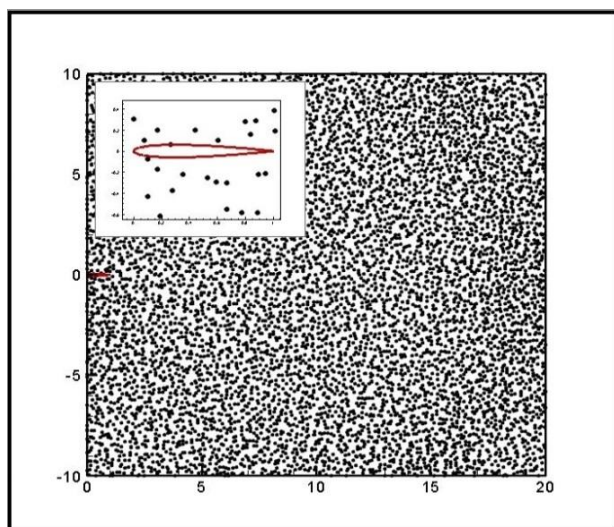


(۴)

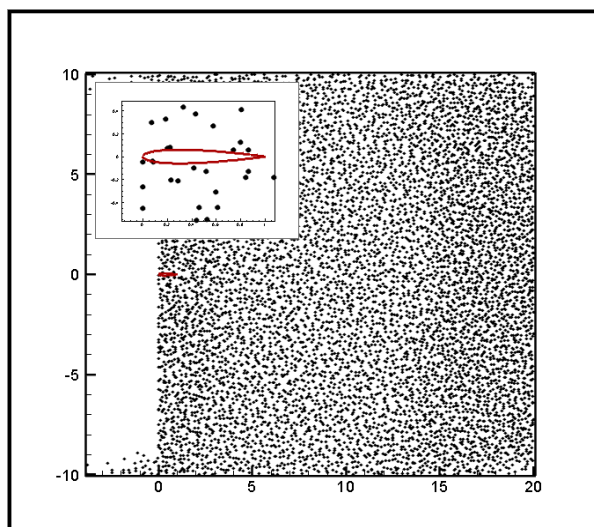


(۳)

شکل ۳-۱۴. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۰ درجه، شماتیک (۳) مربوط به گام زمانی ۲۸۰ و شماتیک (۴) مربوط به گام زمانی ۵۸۰ می‌باشد.



(۴)



(۵)

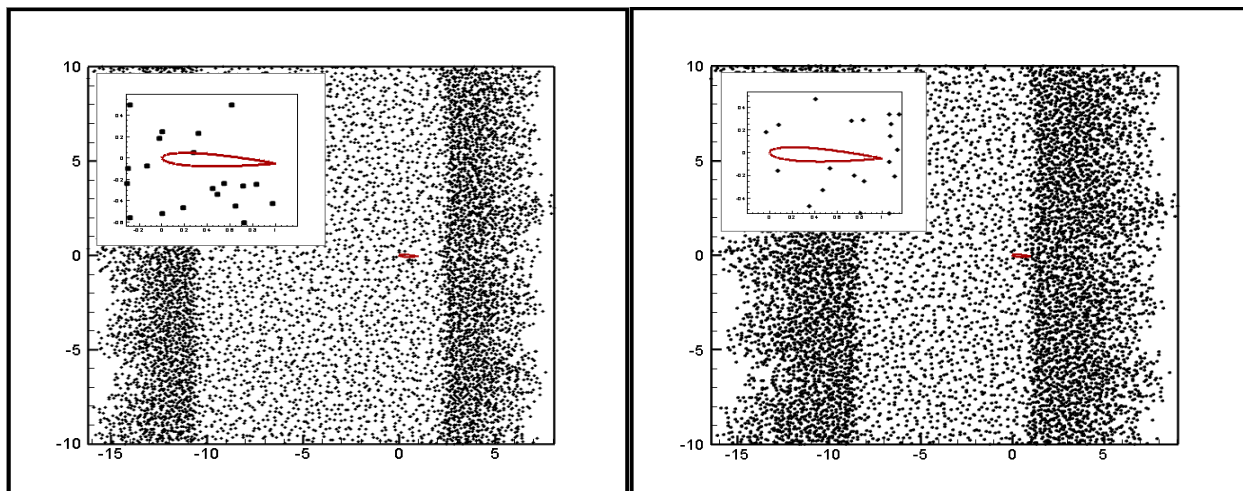
شکل ۳-۱۵. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۰ درجه، شماتیک (۵) مربوط به گام زمانی ۷۲۰ و شماتیک (۴) مربوط به گام زمانی ۱۰۰۰ می‌باشد.

همان‌گونه که در شکل‌های بالا مشاهده می‌شود تعداد ذرات در بالا و پایین ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه حمله صفر درجه تقریباً به طور یکسان توزیع شده‌اند و جریان حول ایرفویل هموار می‌باشد.

۳-۷-۲ شبیه‌سازی جریان حول ایرفویل سه درجه به روش دینامیک ذرات

اتلافی

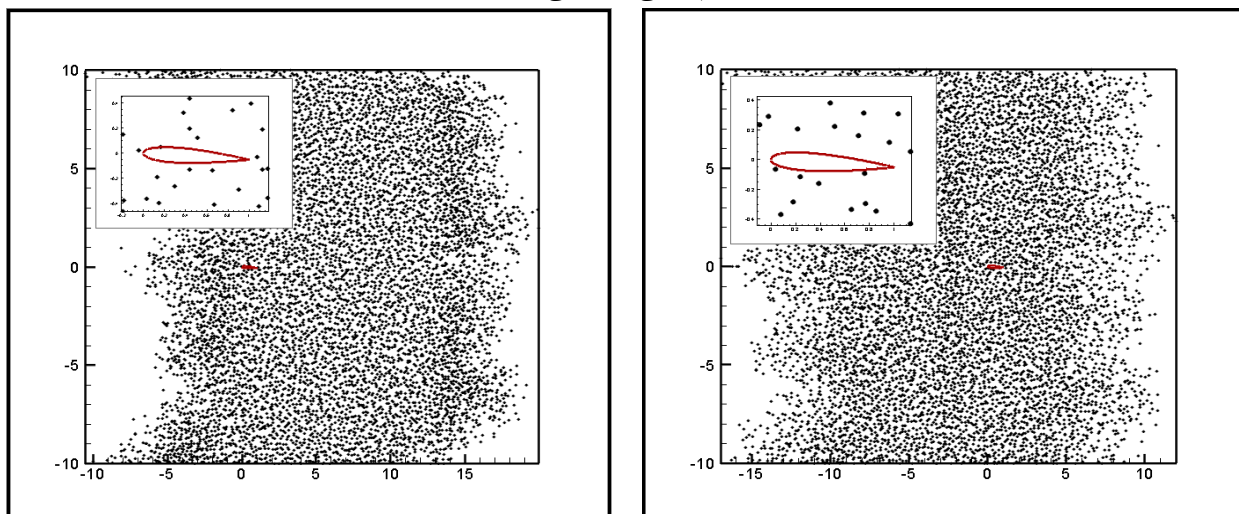
جریان بر روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه سه درجه به روش دینامیک ذرات اتلافی شبیه‌سازی شده است. چند نمونه از حرکت ذرات را در گام‌های زمانی متفاوت در شکل‌های ۳-۱۶، ۳-۱۷، ۳-۱۸ آورده شده است. در شکل‌های زیر می‌توان مشاهده کرد تعداد ذرات در لبه فرار و بالای ایرفویل نسبت به زاویه صفر درجه کاهش یافته است و این نشان‌دهنده جدایش بسیار کم جریان است که در این زاویه اتفاق می‌افتد.



(۲)

(۱)

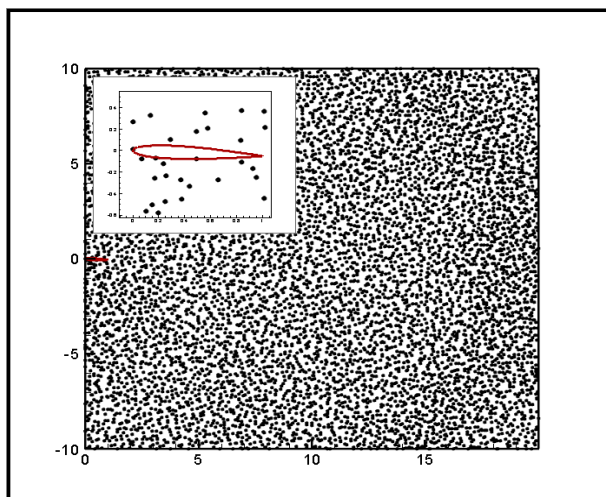
شکل ۳-۱۶. حرکت ذرات از روی ایرفوایل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۳ درجه، شماتیک (۱) مربوط به گام زمانی ۷۵ و شماتیک (۲) مربوط به گام زمانی ۱۷۵ می باشد.



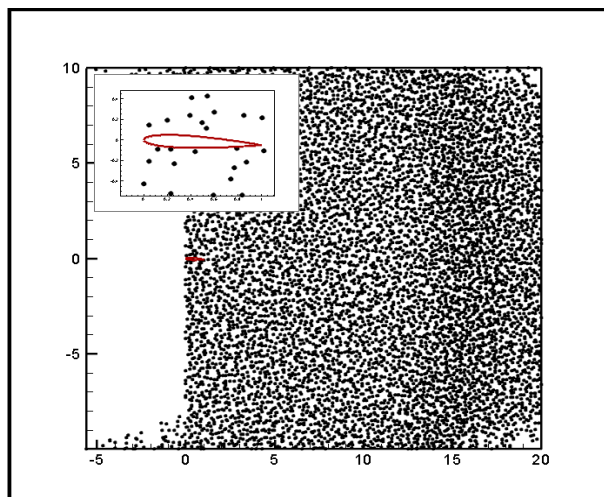
(۴)

(۳)

شکل ۳-۱۷. حرکت ذرات از روی ایرفوایل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۳ درجه، شماتیک (۳) مربوط به گام زمانی ۲۷۵ و شماتیک (۴) مربوط به گام زمانی ۶۱۵ می باشد.



(۶)



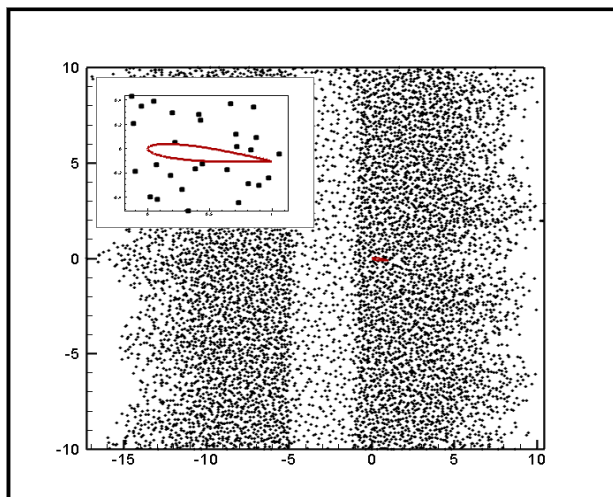
(۵)

شکل ۳-۱۸. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۳ درجه، شماتیک (۵) مربوط به گام زمانی ۸۷۵ و شماتیک (۶) مربوط به گام زمانی ۱۰۰۰ می باشد.

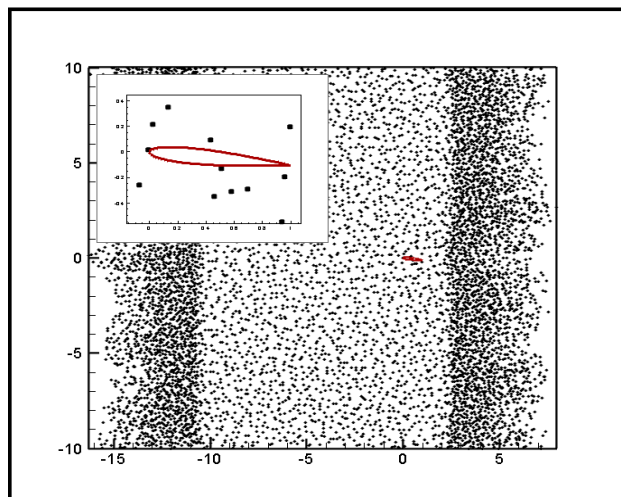
۳-۷-۳ شبیه سازی جریان حول ایرفویل شش درجه به روش دینامیک ذرات

اتلافی

جریان بر روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه شش درجه به روش دینامیک ذرات اتلافی شبیه سازی شده است. چند نمونه از حرکت ذرات را در گام های زمانی متفاوت در شکل های ۳-۱۹، ۳-۲۰، ۳-۲۱ آورده شده است. در شماتیک ۳-۱۹ به وضوح می توان خطوط جدایش جریان را در لبه فرار مشاهده نمود.

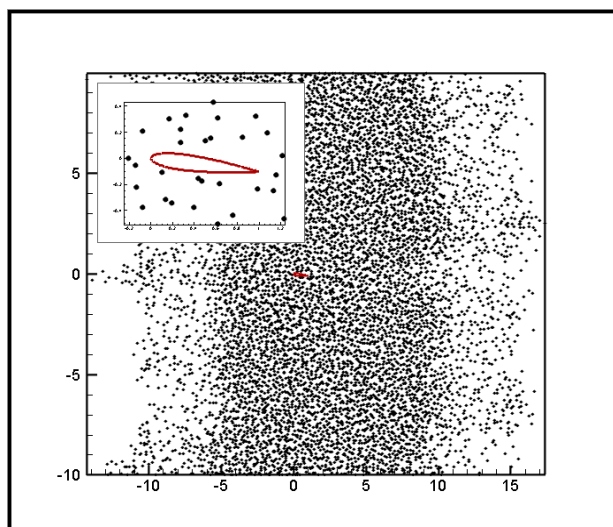


(۲)

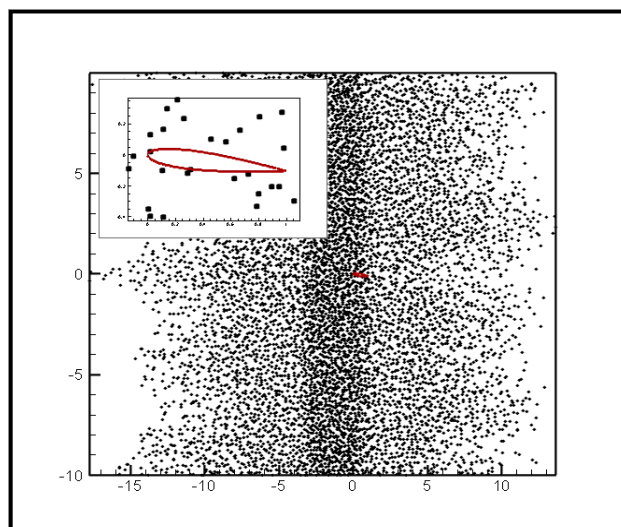


(۱)

شکل ۳-۱۹. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۶ درجه، شماتیک (۱) مربوط به گام زمانی ۵۱۳ و شماتیک (۲) مربوط به گام زمانی ۷۱۳ می باشد.

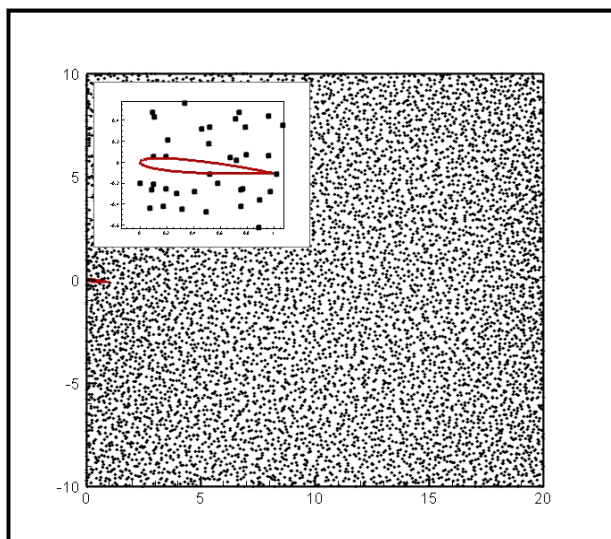


(۴)

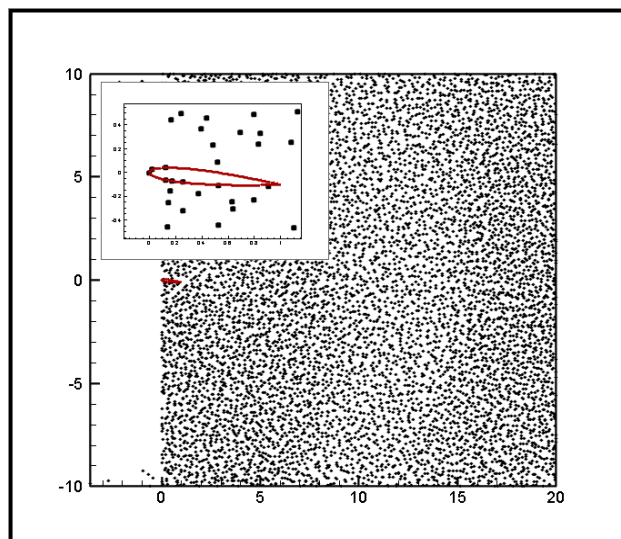


(۳)

شکل ۳-۲۰. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۶ درجه، شماتیک (۳) مربوط به گام زمانی ۱۳۲۰ و شماتیک (۴) مربوط به گام زمانی ۹۲۰ می باشد.



(۴)



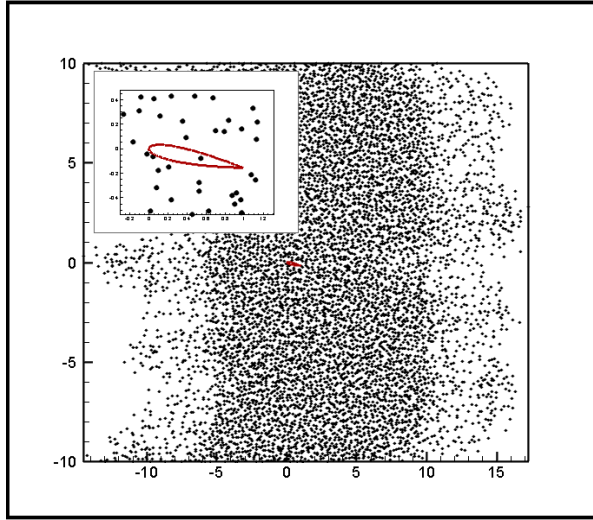
(۵)

شکل ۳-۲۱. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۶ درجه، شماتیک (۵) مربوط به گام زمانی ۱۵۰۰ و شماتیک (۴) مربوط به گام زمانی به ۲۰۰۰ می‌باشد.

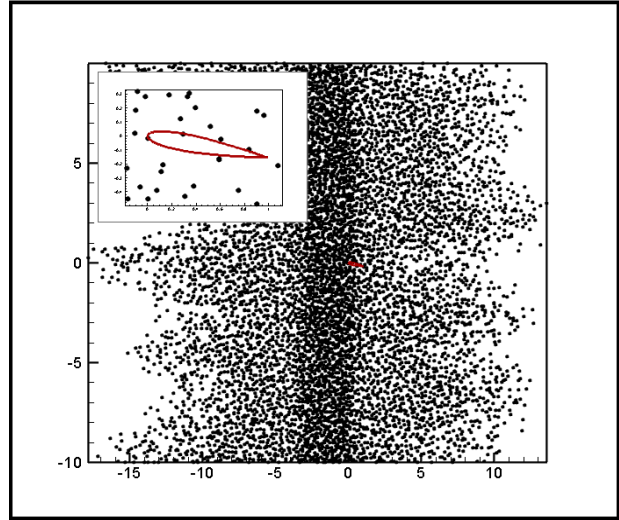
۳-۷-۴ شبیه‌سازی جریان حول ایرفویل نه درجه به روش دینامیک ذرات

اتلافی

جریان بر روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه نه درجه به روش دینامیک ذرات اتلافی شبیه‌سازی شده است. چند نمونه از حرکت ذرات را در گام‌های زمانی متفاوت در شکل‌های ۴-۲۲، ۴-۲۳، ۴-۲۴ آورده شده است.

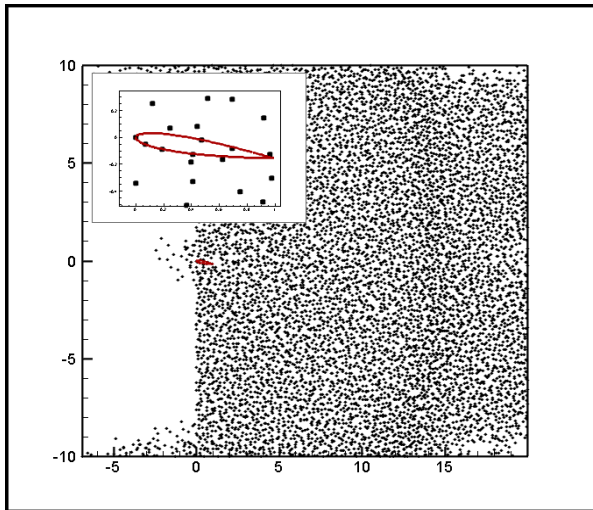


(۲)

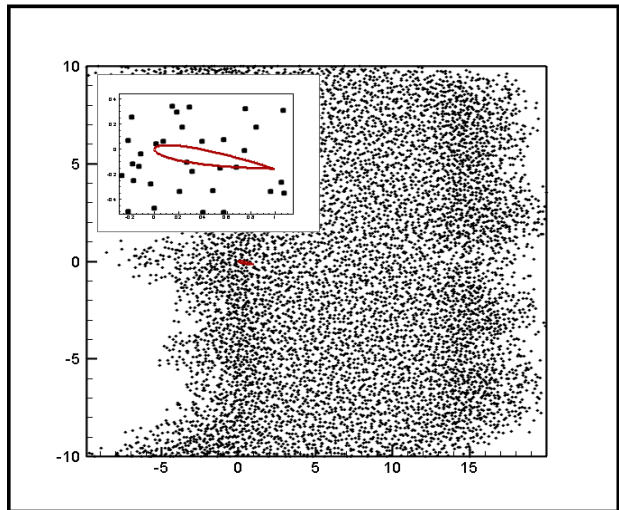


(۱)

شکل ۳-۲۲. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۹ درجه، شماتیک (۱) مربوط به گام زمانی ۴۰۰ و شماتیک (۲) مربوط به گام زمانی ۶۰۰ می باشد.

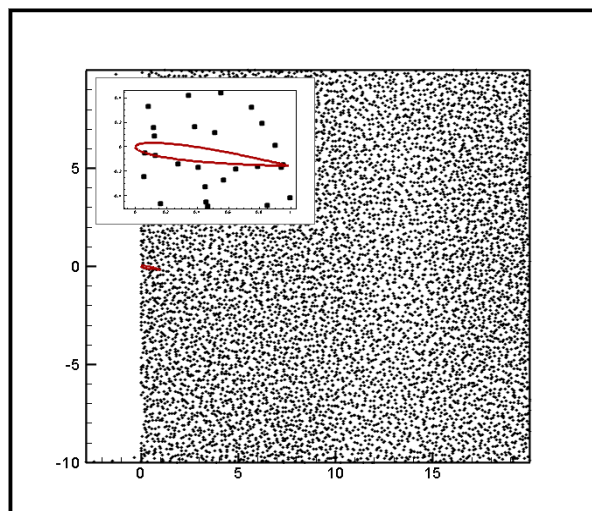


(۴)



(۳)

شکل ۳-۲۳. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۹ درجه، شماتیک (۳) مربوط به گام زمانی ۱۲۸۰ و شماتیک (۴) مربوط به گام زمانی ۱۵۳۰ می باشد.



(۵)

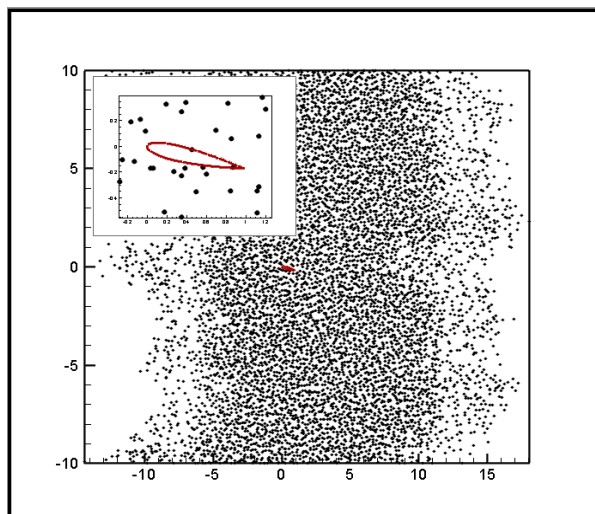
شکل ۳-۲۴. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۹ درجه، شماتیک (۵) مربوط به گام زمانی ۲۰۰۰ می باشد

در زاویه حمله نه درجه همانگونه که در شکل های بالا مشخص است تعداد ذرات بالا از پایین در لبه فرار بسیار کم تر است و این موضوع در زاویه حمله نه درجه از چهار زاویه دیگر بیشتر مشخص است در نتیجه می توان گفت با افزایش زاویه حمله جدایش جریان از سطح بالایی ایرفویل بیشتر می شود و دنباله نسبتا بزرگی از هوای مرده در پشت ایرفویل بوجود می آورد.

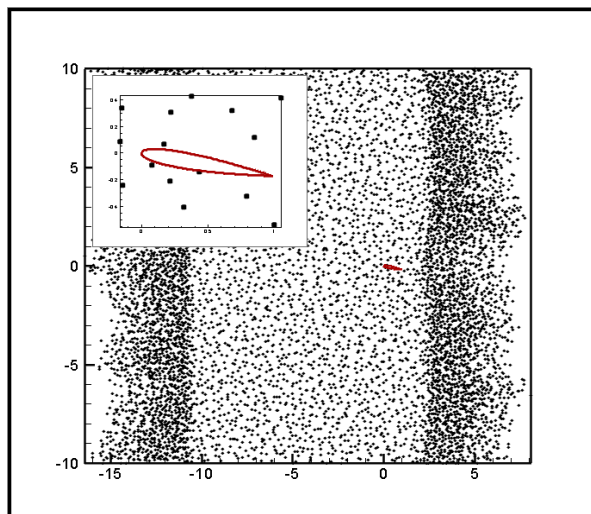
۳-۷-۵ شبیه سازی جریان حول ایرفویل ده درجه به روش دینامیک ذرات

اتلافی

جریان بر روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه صفر درجه به روش دینامیک ذرات اتلافی شبیه سازی شده است. چند نمونه از حرکت ذرات را در گام های زمانی متفاوت در شکل های ۳-۲۵، ۳-۲۶، ۳-۲۷ آورده شده است.

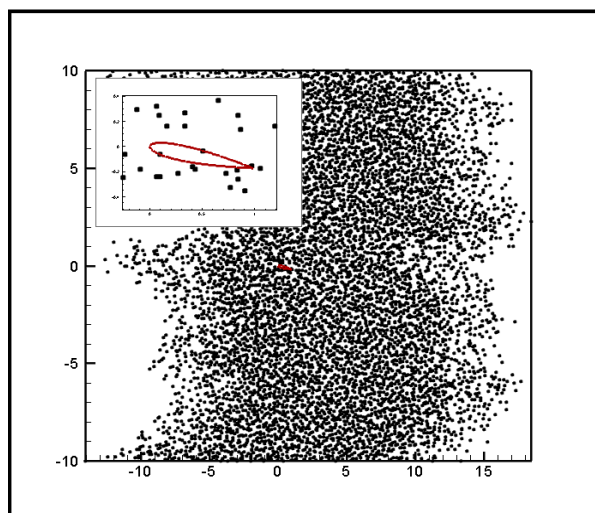


(۲)

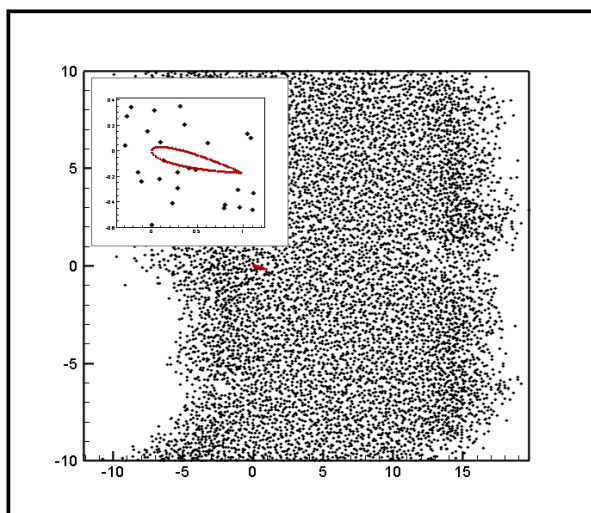


(۱)

شکل ۳-۲۵. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۱۰ درجه، شماتیک (۱) مربوط به گام زمانی ۱۹۴ و شماتیک (۲) مربوط به گام زمانی ۵۹۴ می باشد.

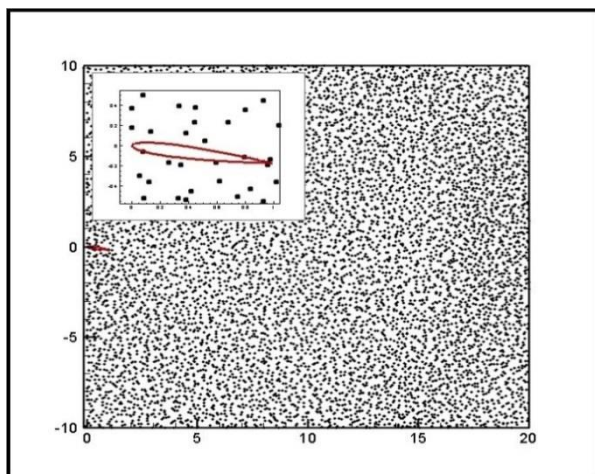


(۴)

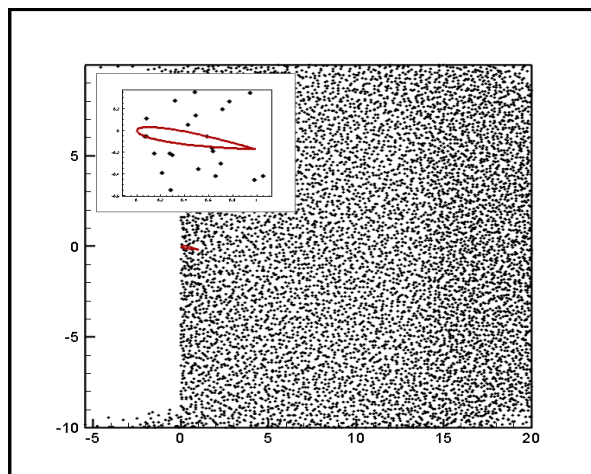


(۳)

شکل ۳-۲۶. حرکت ذرات از روی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۱۰ درجه، شماتیک (۳) مربوط به گام زمانی ۷۰۰ و شماتیک (۴) مربوط به گام زمانی ۱۱۰۰ می باشد.



(۶)



(۵)

شکل ۳-۲۷. حرکت ذرات از روی ایرفوایل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۱۰ درجه، شماتیک (۵) مربوط به گام زمانی ۱۶۵۰ و شماتیک (۶) مربوط به گام زمانی ۲۰۰۰ می‌باشد.

با مقایسه شماتیک‌های گسترش جریان حول ایرفوایل ناکا ۰۰۱۲ مربوط به زوایای ۰، ۳، ۶، ۹ و ۱۰ متوجه خواهیم شد با افزایش زاویه حمله تعداد ذرات در بالا و پایین ایرفوایل افزایش یافته در نتیجه اختلاف فشار بین این سطوح افزایش یافته است. با آغاز جریان حول ریزایرفوایل، گرادیان‌های زیاد سرعت در منطقه لبه فرار منجر به ایجاد ناحیه‌ای از چرخش شدید در پایین دست جریان می‌شود. گردابه‌های ایجاد شده در جهت پادساعتگرد می‌باشند در نتیجه به‌عنوان یک واکنش مساوی و مخالف، گردشی در جهت ساعتگرد در پیرامون مقطع بال بوجود می‌آید. همچنین با مقایسه جریان حول ایرفوایل ناکا ۰۰۱۲ در هر پنج زاویه حمله متوجه خواهیم شد با افزایش زاویه حمله جریان تمایل بیشتری به جدایش از سطح بالایی پیدا می‌کند.

دو ایرفوایل ناکا ۰۰۱۲ و مقطع لوزی شکل در شرایط یکسان روبروی جریان هوا قرار گرفته‌اند. در مقطع لوزی شکل به دلیل ملایم نبودن شیب سطحی، ذرات هوا با شدت بیشتری به سطح برخورد کرده و در نتیجه تراکم و فشار مقطع لوزی در بالا دست جریان بیشتر است اما در ایرفوایل ناکا ۰۰۱۲ تمام تغییرات به دلیل

دوکی شکل بودنش به صورت آهسته تغییر می‌کنند. در حقیقت خط جریان در لوزی با شیب زیاد تغییر کرده اما در ناکا ۰۰۱۲ با شیب کم تغییر می‌کند.

۳-۸ تعیین ضرایب آیرودینامیکی

در این پایان‌نامه تأثیر زاویه حمله و وتر بر اساس عدد رینولدز بر ضرایب برا و پسا برای یک ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ بررسی شده است. در روش مولکولی دینامیک ذرات اتلافی با ذره سر و کار داریم. به هر ذره نیروی وارد می‌شود. تعداد ذراتی که به سطح برخورد می‌کنند هر کدام نیرویی دارند این نیرو متشکل از نیروی داخلی و خارجی می‌باشد. نیروی داخلی به‌طور مجزا به سه نیروی بقا، اتلافی و تصادفی تقسیم شده و در فصل سوم به‌طور کامل به آن پرداخته شده است. لازمه حرکت ذرات اعمال نیروی خارجی می‌باشد. نیروی خارجی وارد بر ذرات همان نیروی جاذبه‌ای است که باعث اختلاف فشار و در نهایت باعث حرکت ذرات می‌شود. در اینجا نیروی خارجی برابر $0/01$ در واحد دینامیک ذرات اتلافی در نظر گرفته شده است. هر ذره‌ای که به سطح برخورد می‌کند با توجه به راستای نیروی کل به دو قسمت افقی و عمودی تقسیم می‌شود برای بدست آوردن ضریب برا در کد کامپیوتری اختلاف ذرات در بالا و پایین ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ را بدست آوردیم چون تعداد ذرات در پایین ایرفویل بیش از تعداد آن در بالای ایرفویل می‌باشد. این اختلاف بین تعداد برخورد ذرات در بالا و پایین ایرفویل در واقع نیرویی است که به سطح وارد و باعث اختلاف فشار و در نتیجه نیروی برا ایجاد می‌شود. با داشتن نیروی برا و با استفاده از فرمول ۳-۱۴ ضریب برا بدست آمد.

$$C_L = \frac{2F_L}{\rho V^2 A} \quad (14-3)$$

نیروی کل بدست آمده در راستای افقی همان مجموع نیروهای وارده به ذرات در بالا و پایین ایرفویل می‌باشد و با داشتن نیروی پسا و با استفاده از فرمول ۳-۱۵ ضریب پسا بدست آمد.

$$C_D = \frac{2F_D}{\rho V^2 A} \quad (15-3)$$

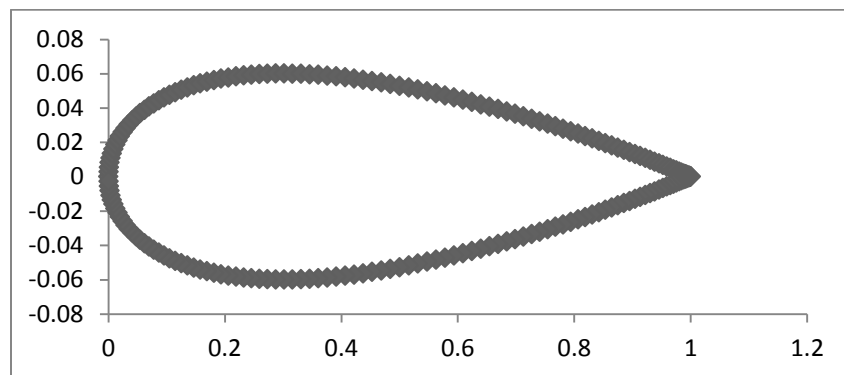
در بخش‌های بعدی به‌طور مجزا برای زوایای ۰، ۳، ۶، ۹ و ۱۰ ضرایب برا و پسا بدست آمده و در انتها نمودار نتایج حاصله به کمک نرم‌افزار تک پلات رسم شد و در شکل ۳-۳۳ با حل دینامیک سیالات محاسباتی مقایسه شده است.

۳-۸-۱ ضرایب آیرودینامیکی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۰ درجه

برای بدست آوردن نتایج مطلوب پارامترهای شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی همان‌گونه که در جدول ۳-۴ آمده است، اصلاح گردید. در شکل ۳-۲۸ ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در ۰ درجه آمده همچنین در جدول ۳-۵ معادله مورد استفاده برای بدست آوردن تعداد برخورد ذرات در بالا و پایین ایرفویل می‌باشد.

جدول ۳-۴. پارامترهای شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی برای ناکا ۰۰۱۲ در ۰ درجه

پارامتر	dl_x	dl_y	$Rho0$	dt	$isteps$	$maxstp$
اندازه	۲۰	۲۰	۲۰	۰/۰۱	۱۰۰	۱۰۰۰



شکل ۳-۲۸. ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ (در زاویه ۰ درجه) رسم شده در نرم‌افزار اکسل

جدول ۳-۵. بدست آوردن ضرایب آیرودینامیکی در ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در ۰ درجه

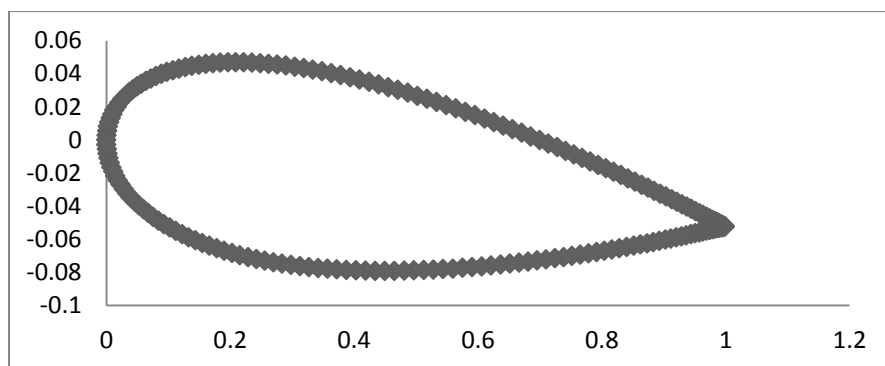
ضریب پسا	ضریب برا	زاویه حمله	معادله
۰/۰۰۸	۰/۰۰۳۶۴	۰	$Y = 2e - 16x^2 - 2e - 16x + 3e - 17$

۳-۸-۲ ضرایب آیرودینامیکی ایرفویل ناکا۰۱۲ در زاویه ۳ درجه

برای بدست آوردن نتایج مطلوب پارامترهای شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی همان‌گونه که در جدول ۳-۶ آمده است، اصلاح گردید. در شکل ۳-۲۹ ایرفویل ناکا۰۱۲ در ۳ درجه آمده همچنین در جدول ۳-۷ معادله مورد استفاده برای بدست آوردن تعداد برخورد ذرات در بالا و پایین ایرفویل می‌باشد.

جدول ۳-۶. پارامترهای شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی برای ناکا۰۱۲ در ۳ درجه

پارامتر	dl_x	dl_y	$Rho0$	dt	$isteps$	$maxstp$
اندازه	۲۰	۲۰	۲۰	۰/۰۱	۷۵	۱۰۰۰



شکل ۳-۲۹. ایرفویل ناکا۰۱۲ (در زاویه ۳ درجه) رسم شده در نرم‌افزار اکسل

جدول ۳-۷. بدست آوردن ضرایب آیرودینامیکی در ایرفویل ناکا۰۱۲ در ۳ درجه

معادله	زاویه حمله	ضریب برا	ضریب پسا
$Y = -0.0029x^2 - 0.0489x - 0.0007$	۳	۰/۳۱	۰/۰۰۹۹

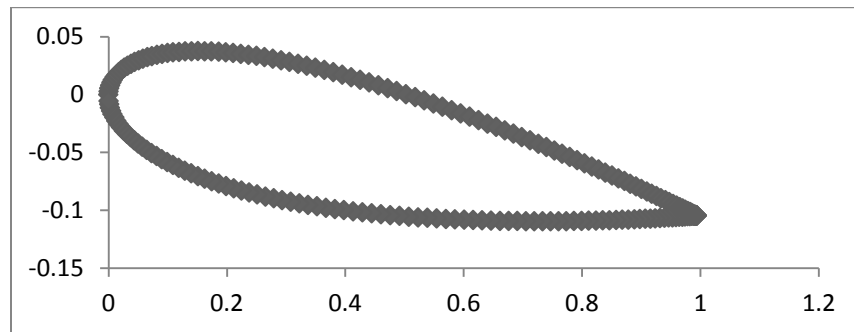
۳-۸-۳ ضرایب آیرودینامیکی ایرفویل ناکا۰۱۲ در زاویه ۶ درجه

برای بدست آوردن نتایج مطلوب پارامترهای شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی همان‌گونه که در جدول ۳-۸ آمده است، اصلاح گردید. در شکل ۳-۳۰ الف ایرفویل ناکا۰۱۲ در ۶ درجه آمده است در کد کامپیوتری از

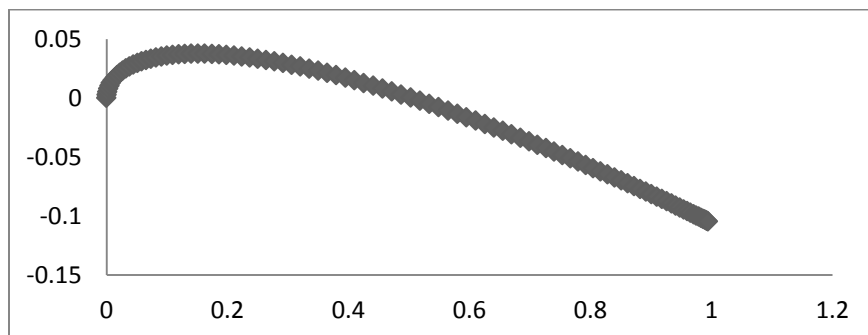
فرمول انحنای بالا و پایین ایرفویل استفاده شده است به همین دلیل برای گویا بودن مسئله در شکل ۳-۳۰-ب و ۳-۳۰-پ به طور جداگانه آورده شده است. همچنین در جدول ۳-۹ معادله مورد استفاده برای بدست آوردن تعداد برخورد ذرات در بالا و پایین ایرفویل می‌باشد.

جدول ۳-۸. پارامترهای شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی برای ناکا ۰۰۱۲ در ۶ درجه

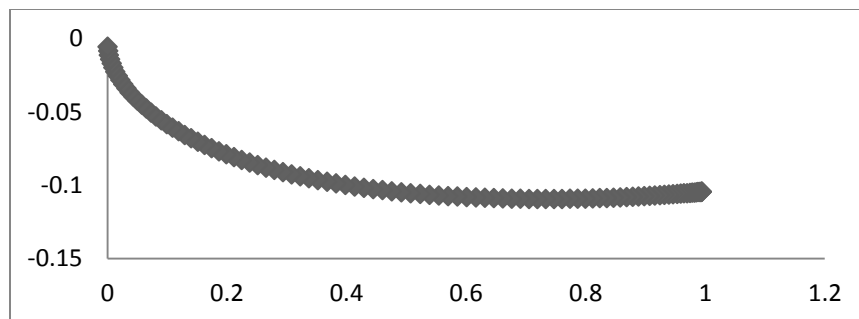
پارامتر	dl_x	dl_y	$Rho0$	dt	$isteps$	$maxstp$
اندازه	۲۰	۲۰	۲۰	۰/۰۱	۱۳۳	۲۰۰۰



(الف)



(ب)



(پ)

شکل ۳-۳۰. الف) ایرفوایل ناکا ۰۰۱۲ (در زاویه ۶ درجه) رسم شده در نرم‌افزار اکسل (ب) منحنی بالای ایرفوایل (پ) منحنی پایین ایرفوایل

جدول ۳-۹. بدست آوردن ضرایب آیرودینامیکی در ایرفوایل ناکا ۰۰۱۲ در ۶ درجه

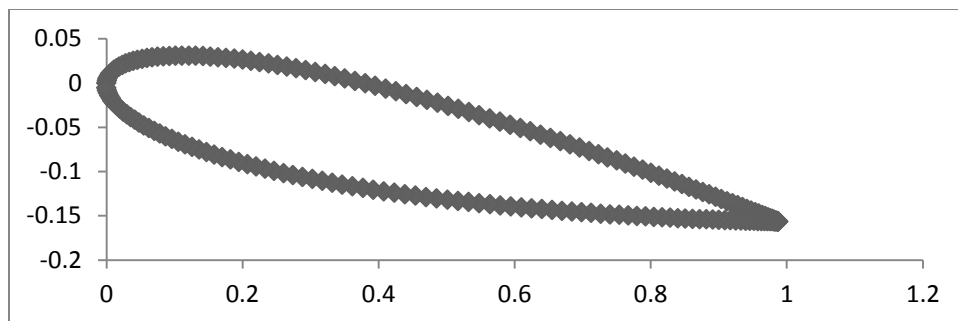
ضریب پسا	ضریب برا	زاویه حمله	معادله
۰/۰۱۶	۰/۶۴۵	۶	$Y = -0.1924x^2 + 0.0573x + 0.0234$
			$Y = 0.1834x^2 - 0.2561x - 0.0261$

۳-۸-۴ ضرایب آیرودینامیکی ایرفوایل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۹ درجه

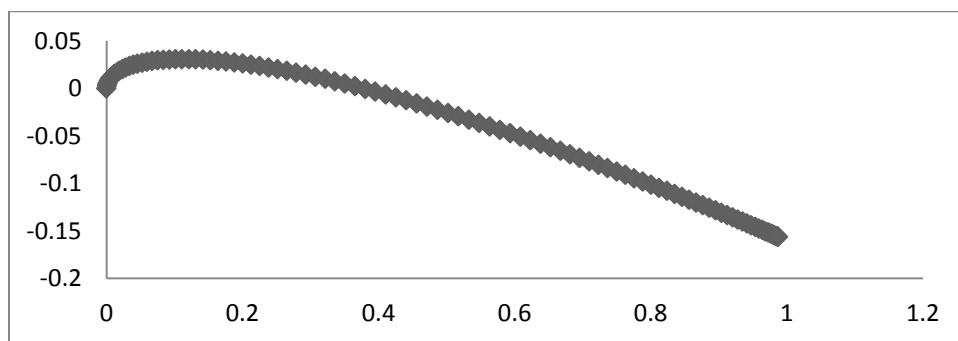
برای بدست آوردن نتایج مطلوب پارامترهای شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی همان‌گونه که در جدول ۳-۱۰ آمده است، اصلاح گردید. در شکل ۳-۳۱ الف ایرفوایل ناکا ۰۰۱۲ در ۹ درجه آمده است در کد کامپیوتری از فرمول انحنای بالا و پایین ایرفوایل استفاده شده است به همین دلیل برای گویا بودن مسئله در شکل ۳-۳۱ ب و ۳-۳۱ پ به طور جداگانه آورده شده است. همچنین در جدول ۳-۱۱ معادله مورد استفاده برای بدست آوردن تعداد برخورد ذرات در بالا و پایین ایرفوایل می‌باشد

جدول ۳-۱۰. پارامترهای شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی برای ناکا ۰۰۱۲ در ۹ درجه

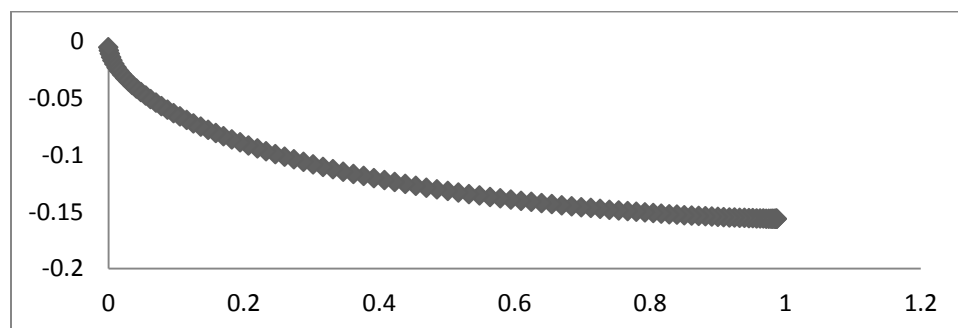
پارامتر	dl_x	dl_y	$Rho0$	dt	$isteps$	$maxstp$
اندازه	۲۰	۲۰	۲۰	۰/۰۱	۱۹۵	۲۰۰۰



(الف)



(ب)



(پ)

شکل ۳-۳۱. (الف) ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ (در زاویه ۹ درجه) رسم شده در نرم افزار اکسل (ب) منحنی بالای ایرفویل (پ) منحنی پایین ایرفویل

جدول ۳-۱۱. بدست آوردن ضرایب آیرودینامیکی در ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در ۹ درجه

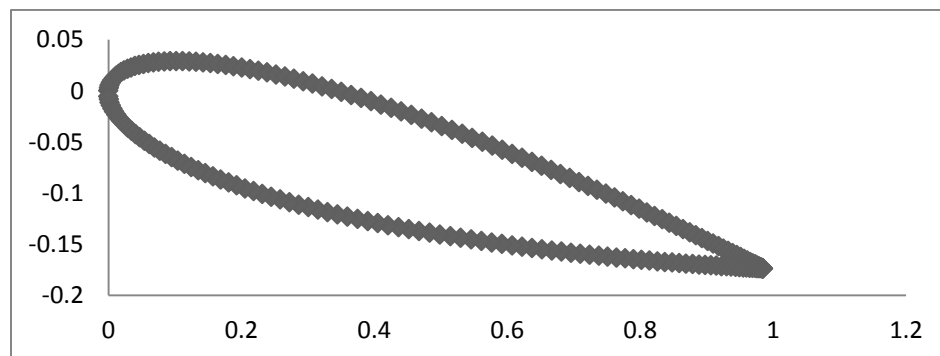
ضریب پس	ضریب برا	زاویه حمله	معادله
۰/۰۲۴	۰/۹۵۲	۹	$Y = -0.1975x^2 + 0.0077x + 0.0232$
			$Y = 0.1861x^2 - 0.31x - 0.0266$

۳-۸-۵ ضرایب آیرودینامیکی ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زاویه ۱۰ درجه

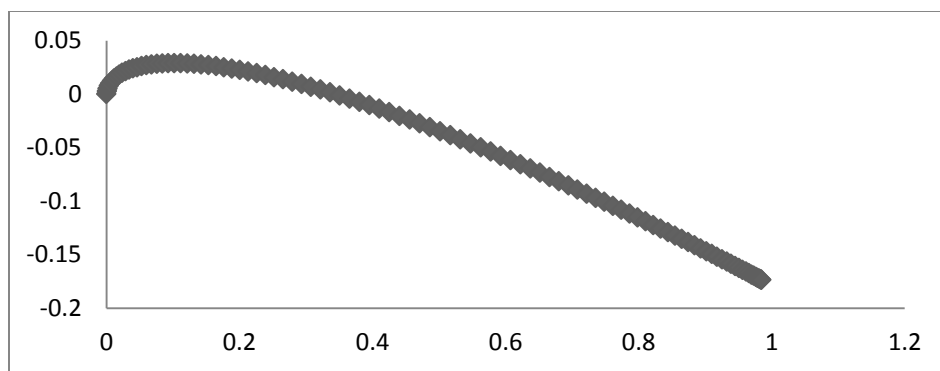
برای بدست آوردن نتایج مطلوب پارامترهای شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی همان‌گونه که در جدول ۳-۱۲ آمده است، اصلاح گردید. در شکل ۳-۳۲ الف ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در ۱۰ درجه آمده است در کد کامپیوتری از فرمول انحنای بالا و پایین ایرفویل استفاده شده است به همین دلیل برای گویا بودن مسئله در شکل ۳-۳۲ ب و ۳-۳۲ پ به طور جداگانه آورده شده است. همچنین در جدول ۳-۱۳ معادله مورد استفاده برای بدست آوردن تعداد برخورد ذرات در بالا و پایین ایرفویل می‌باشد.

جدول ۳-۱۲. پارامترهای شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی برای ناکا ۰۰۱۲ در ۱۰ درجه

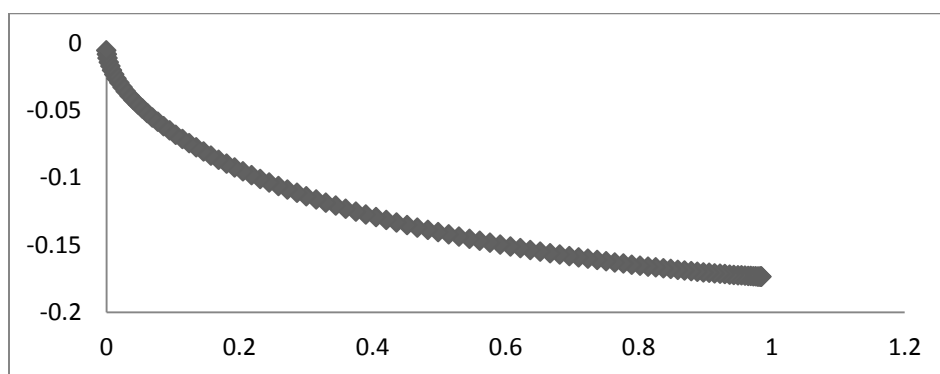
پارامتر	dl_x	dl_y	$Rho0$	dt	$isteps$	$maxstp$
اندازه	۲۰	۲۰	۲۰	۰/۰۱	۱۹۴	۲۰۰۰



(الف)



(ب)



(پ)

شکل ۳-۳. الف) ایرفوایل ناکا ۰۰۱۲ (در زاویه ۱۰ درجه) رسم شده در نرم افزار اکسل (ب) منحنی بالای ایرفوایل (پ) منحنی پایین ایرفوایل

جدول ۳-۱۳. بدست آوردن ضرایب آیرودینامیکی در ایرفوایل ناکا ۰۰۱۲ در ۱۰ درجه

ضریب پسا	ضریب برا	زاویه حمله	معادله
۰/۰۲۶۹	۱/۰۳	۱۰	$Y = -0.1996x^2 - 0.0087x + 0.0232$
			$Y = 0.1873x^2 - 0.3283x - 0.0268$

۳-۹ نتیجه و بحث

در این پایان نامه مقایسه داده‌های به دست آمده از شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتمالی با سایر کارهای تحقیقاتی، برای نسبت حداکثر ضرایب برا و پسا صورت گرفته است. این اطلاعات برای اعتبارسنجی شبیه‌سازی‌های عددی

در آینده بسیار مفید است. علاوه بر این، مشاهده می‌شود که تغییر در ویژگی‌های آیرودینامیکی به تغییرات شیب خطی ضرایب برا و پسا به عنوان عملکرد زاویه حمله برای هر نسبت ابعادی مرتبط است. اختلاف تعداد ذرات بر روی سطوح بالا و پایین سبب تولید نیرو و در نتیجه سبب اختلاف فشار می‌شود و به دنبال آن تولید نیروی برا می‌شود. ضریب برا با توجه به فرمول ۳-۱۴ بدست آمد در واقع بر اساس محاسبه نیروی منتقل شده بر سطح بالا و پایین است که ناشی از برخورد تعداد ذرات بر سطوح می‌باشد. نیروی پسا نیز از مجموع نیروی تعداد ذرات در بالا و پایین ایرفویل بدست آمد و با جایگذاری در فرمول ۴-۱۵ ضریب پسا بدست آمد.

در ادامه دو روش دینامیک سیالات محاسباتی و دینامیک ذرات اتلافی با یکدیگر مقایسه شده‌اند. برای در نظر گرفتن تشابه باید عدد رینولدز دو روش یکسان باشند. فرمول ۳-۱۶ عدد رینولدز را نشان می‌دهد:

$$Re = \frac{VC}{\mu} \quad (۱۶-۳)$$

با توجه به فرمول بالا در روش دینامیک ذرات اتلافی μ ضریب لزجت و ρ چگالی هوا در نظر گرفته شد و سرعت متوسط به دست آمده در این روش در واحد دینامیک ذرات اتلافی قرار داده شد و رینولدز بدست آمده با رینولدز شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی یکسان در نظر گرفته شد.

با توجه به توضیحات بیان شده در زوایای ۰، ۳، ۶، ۹ و ۱۰ که در بخش قبلی مورد بررسی قرار داده شد در جدول ۳-۱۴ ضریب برا بر حسب زاویه حمله آورده شده است. ضریب برا برای ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در شکل ۳-۳۳ با مرجع [۶۲] و [۶۳] مقایسه شده است و در نرم‌افزار تک‌پلات ترسیم شده است.

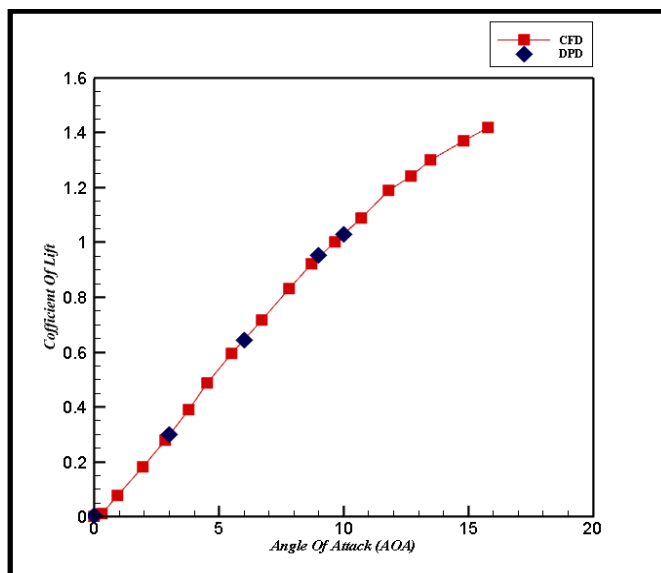
جدول ۳-۱۴. ضریب برا بر حسب زاویه حمله

ضریب برا	زاویه حمله
۰/۰۰۳۶۴	۰
۰/۳۱	۳
۰/۶۴۵	۶
۰/۹۵۲	۹
۱/۰۳	۱۰

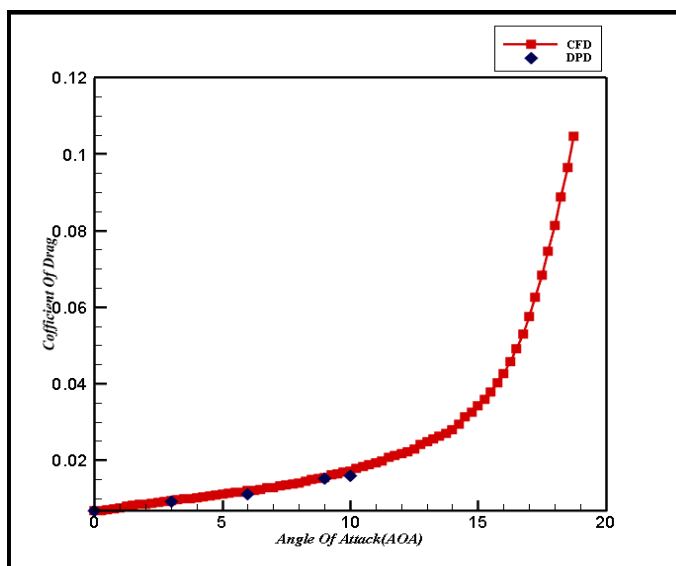
در جدول ۳-۱۵ ضریب پسا بر حسب زاویه حمله آورده شده است همان گونه که در شکل ۳-۳۴ مشاهده می-شود، نمودار ضریب پسا بر حسب زاویه حمله با روش دینامیک سیالات محاسباتی با مرجع [۶۲] و [۶۳] مقایسه شده و در نرم افزار تک پلات ترسیم شده است.

جدول ۳-۱۵. ضریب پسا بر حسب زاویه حمله

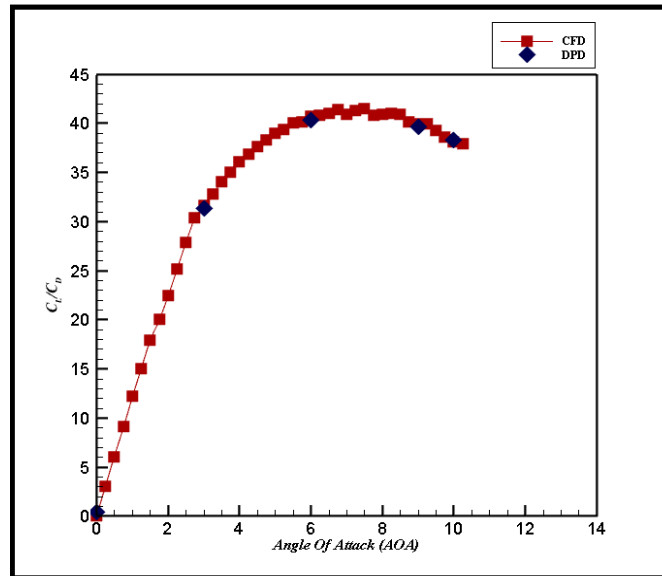
ضریب پسا	زاویه حمله
۰/۰۰۸	۰
۰/۰۰۹۹	۳
۰/۰۱۶	۶
۰/۰۲۴	۹
۰/۰۲۶۹	۱۰



شکل ۳-۳۳. مقایسه نمودار ضریب برآ بر حسب زاویه حمله در روش‌های دینامیک سیالات محاسباتی و دینامیک ذرات اتلافی در زوایای ۰، ۳، ۶، ۹ و ۱۰ درجه



شکل ۳-۳۴. مقایسه نمودار ضریب پسا بر حسب زاویه حمله در روش‌های دینامیک سیالات محاسباتی و دینامیک ذرات اتلافی در زوایای ۰، ۳، ۶، ۹ و ۱۰ درجه
درصد خطای مقایسه این دو روش کم‌تر از ۳ درصد می‌باشد.

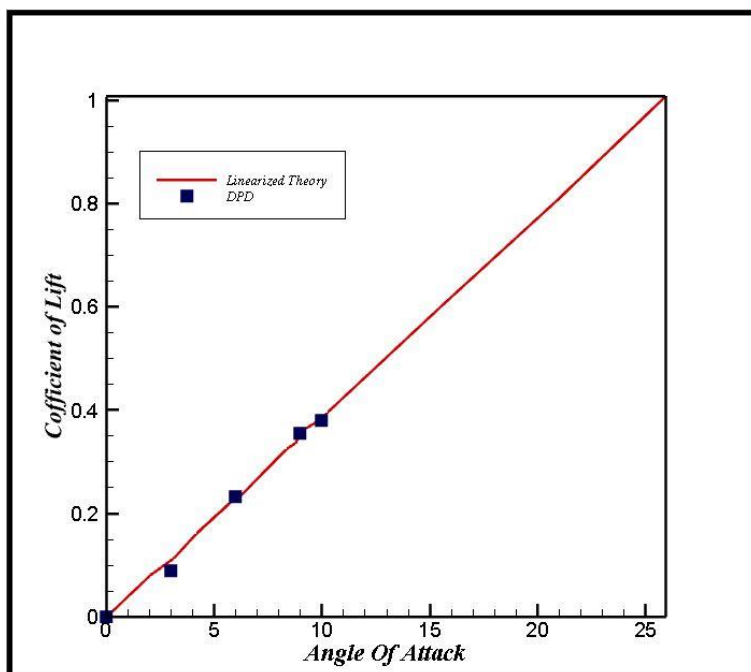


شکل ۳-۳۵. مقایسه نمودار ضریب پسا بر ضریب برا بر حسب زاویه حمله در روش‌های دینامیک سیالات محاسباتی و دینامیک ذرات اتلافی در زوایای ۰، ۳، ۶، ۹ و ۱۰ درجه

نمودار ضریب برا بر حسب زاویه حمله ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ بر اساس تئوری خطی توسط احمد شجاعی و همکاران [۶۴] در سال ۲۰۱۴ گزارش شده است. در نتیجه برآن شدیم نمودار ضریب برا بر حسب زاویه حمله بر اساس تئوری خطی و شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی در این پایان‌نامه نیز مقایسه کنیم. در جدول ۳-۱۶ ضرایب برا در زوایای ۰، ۳، ۶، ۹ و ۱۰ آورده شده است. همچنین نمودار مقایسه در شکل ۳-۳۶ آورده شده است.

جدول ۳-۱۶. ضریب برا بر حسب زاویه حمله

ضریب برا	زاویه حمله
۰/۰۰۳	۰
۰/۰۸۸	۳
۰/۲۳۳	۶
۰/۳۵۵	۹
۰/۳۷۹	۱۰



شکل ۳-۳۶. مقایسه نمودار ضریب برآ بر حسب زاویه حمله در روش‌های تئوری خطی و دینامیک ذرات اتلافی در زوایای ۰، ۳، ۶، ۹ و ۱۰ درجه

فصل چہارم: نتیجہ گیری و پیشہادات

۴-۱ نتیجه گیری

در این پایان نامه، در ابتدا نتایج بدست آمده شامل بررسی پروفیل سرعت در کانال مربعی شکل به روش دینامیک ذرات اتلافی می باشد. پس از آن پروفیل سرعت در کانال در نرم افزار فلوئنت نیز شبیه سازی گردید و این دو روش مقایسه شدند اختلاف این دو روش حدود ۶ درصد محاسبه گردید. در این پایان نامه یک مدل برای شرایط مرزی دیوار پیچیده در شبیه سازی دینامیک ذرات اتلافی معرفی شده است. این روش مبتنی بر نمایش دیوار با استفاده از یک شبکه مربعی است. ایرفویل لوزی شکل در ابتدا برای شبیه سازی جریان به روش دینامیک ذرات اتلافی انتخاب شد. جریان شروع به گسترش حول ایرفویل می کند و الگوی خطوط جریانی به صورت متقارن است. در نزدیکی سطح ایرفویل ($n=0$) حرکت ذرات ثابت است و با افزایش n سرعت ذرات افزایش می یابد. سرعت و حرکت ذرات از نیروی اصطحکاک بین سطح و سیال ناشی می شود که دارای شیب $\frac{\partial v}{\partial n}$ است. (n) معرف مختص قائم بر سطح می باشد. در آغاز، جریان در پایین دست لبه حمله آرام است اما پس از طی مسافتی معین، ناپایداری هایی در جریان آرام بروز می کند این ناپایداری ها سریعاً رشد کرده باعث گذار به جریان مغشوش می شود که این نشان دهنده رعایت قانون مساحت در این شکل است زیرا در قانون مساحت با تغییرات تدریجی سطح مقطع روبرو هستیم که در این صورت سرعت به صورت ملایم از صفر (نزدیک سطح) تا افزایش حرکت ذرات در بالای ایرفویل پیش می رود. با توجه به روند حرکت ذرات در قسمت لبه فرار جدایش جریان اتفاق افتاده است در نتیجه اغتشاش بیش تر شده و باعث ایجاد گردابه در منطقه جدا شده می شود. در این شبیه سازی به دلیل تناوبی بودن جریان از شرایط مرزی دوره ای استفاده شده است. همچنین برای به حداقل رساندن اثرات لبه از این شرایط مرزی استفاده می کنیم. در این نوع شرایط مرزی ذرات با عبور از یک مرز مجدداً با سرعت و موقعیت های اصلاح شده در مرز مقابل ظاهر می شوند. با اعمال این شرایط مرزی ذرات به تعادل رسیدند. شرایط -مرزی دوره ای برای دستیابی به هندسه های پیچیده قابل استفاده نیست. میدان جریان حول ایرفویل لوزی شکل گسترش می یابد و کد دینامیک ذرات اتلافی انعکاس ذرات بازتابی از روی ایرفویل را به درستی محاسبه

نموده است. همچنین نتایج برای ایرفویل ناکا ۰۰۱۲ در زوایای حمله ۰، ۳، ۶، ۹ و ۱۰ نیز گسترش داده شد و جریان به کمک روش دینامیک ذرات اتلافی شبیه‌سازی شد. با مقایسه جریان حول ایرفویل در پنج زاویه متوجه خواهیم شد هر چه زاویه حمله افزایش یابد جریان تمایل بیشتری به جدایش از سطح بالایی ایرفویل پیدا می‌کند. در انتهای فصل چهارم به مقایسه ضرایب برا و پسا دو روش دینامیک سیالات محاسباتی و دینامیک ذرات اتلافی پرداخته شد. به هر ذره در روش دینامیک ذرات اتلافی نیروی وارد می‌شود. هر ذره‌ای که به سطح برخورد می‌کند دارای نیرویی است این نیرو متشکل از نیروی داخلی و خارجی می‌باشد. نیروی کل وارده به سطح در راستای افقی توسط ذرات نیروی پسا و در راستای عمودی نیروی برا را نتیجه می‌دهد. با بدست آوردن اختلاف تعداد ذرات در بالا و پایین ایرفویل اختلاف فشار ایجاد شده و در نتیجه نیروی برا بدست آمد. سپس با کمک فرمول، ضریب برا و نمودار ضریب برا بر حسب زاویه حمله با روش دینامیک سیالات محاسباتی مقایسه شد. همچنین با بدست آوردن مجموع نیروی کل وارده به سطح بالا و پایین ایرفویل توسط ذرات نیروی پسا و نمودار ضریب پسا بر حسب زاویه حمله بدست آمده دینامیک سیالات محاسباتی مقایسه شد. خطای مقایسه این دو روش کم‌تر از ۳ درصد محاسبه گردید. هر دو روش محاسباتی بر اساس رینولدز یکسان و تشابه هندسی مقایسه شده‌اند. با مقایسه دو روش دینامیک ذرات اتلافی و دینامیک سیالات محاسباتی متوجه خواهیم شد نتایج بسیار نزدیک هم هستند. دینامیک سیالات محاسباتی مرزهای دیوار را صریحاً مدل‌سازی نمی‌کند. روش دینامیک ذرات اتلافی فیزیک جریان را به طور واقعی شبیه‌سازی می‌کند و در رژیم ناپیوسته معتبر است. این مطالعه نشان داد می‌توان در حوزه آیرودینامیک از شبیه‌سازی دینامیک ذرات اتلافی نیز استفاده نمود و جواب‌های صحیحی بدست آورد.

۴-۲ پیشنهادات

۱- استفاده از روش ترکیبی دینامیک سیالات محاسباتی با دینامیک ذرات اتلافی جهت شبیه‌سازی هندسه‌های بزرگتر ریزایرفویل

۲- استفاده از روش ترکیبی لتیس بولتزمان با دینامیک ذرات اتلافی جهت شبیه‌سازی هندسه‌های بزرگتر ریزایرفویل

۳- شبیه‌سازی کامل یک جسم میکرو پرنده بال ثابت به روش دینامیک ذرات اتلافی و محاسبه و کاهش پسا

۴-

- [1] Ward, Thomas A., et al. "A bibliometric review of progress in micro air vehicle research." *International Journal of Micro Air Vehicles* 9.2 (2017): 146-165.
- [2] Mueller, Thomas J., ed. *Fixed and flapping wing aerodynamics for micro air vehicle applications*. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2001
- [3] Meng, Guang, et al. "Micro-rotor dynamics for micro-electro-mechanical systems (MEMS)." *Chaos, Solitons & Fractals* 40.2 (2009): 538-562
- [4] Benkstein, Kurt D., et al. "Integration of nanostructured materials with MEMS microhotplate platforms to enhance chemical sensor performance." *Journal of Nanoparticle Research* 8.6 (2006): 809-822
- [5] Akcakoca, Mehmet, et al. "A simulation-based development and verification architecture for micro uav teams and swarms." *AIAA Scitech 2019 Forum*. 2019
- [6] Vetrella, Amedeo Rodi, et al. "Cooperative UAV navigation based on distributed multi-antenna GNSS, vision, and MEMS sensors." *2015 International Conference on Unmanned Aircraft Systems (ICUAS)*. IEEE, 2015.
- [7] He, Chenglong, Baoguo Yu, and Qingwu Yi. "A Cooperative Positioning Method for Micro UAVs in Challenge Environment." *2020 3rd International Conference on Unmanned Systems (ICUS)*. IEEE, 2020
- [8] Houghton, Edward Lewis, and Peter William Carpenter. *Aerodynamics for engineering students*. Elsevier, 2003.
- [9] Anderson, Dale, Ian Graham, and Brian Williams. "Aerodynamics." *Flight and Motion*. Routledge, 2015. 14-19.
- [10] Cercignani, Carlo, Maria Lampis, and Silvia Lorenzani. "Variational approach to gas flows in microchannels." *Physics of Fluids* 16.9 (2004): 3426-3437.
- [11] Graur, I. A., J. G. Méolans, and D. E. Zeitoun. "Analytical and numerical description for isothermal gas flows in microchannels." *Microfluidics and Nanofluidics* 2.1 (2006): 64-77.
- [12] White, Craig, et al. "A DSMC investigation of gas flows in micro-channels with bends." *Computers & Fluids* 71 (2013): 261-271.
- [13] Ewart, T., et al. "DSMC simulation: Validation and application to low speed gas flows in microchannels." *Journal of fluids engineering* 131.1 (2009).
- [14] Yovanovich, M. M., and W. A. Khan. "Slip Flow Models for Gas Flows in Rectangular, Trapezoidal, and Hexagonal Microchannels." *AIAA Journal* 58.5 (2020): 2147-2155
- [15] Keaveny, Eric E., et al. "A comparative study between dissipative particle dynamics and molecular dynamics for simple-and complex-geometry flows." *The Journal of chemical physics* 123.10 (2005): 104107.
- [16] Karniadakis, George, Ali Beskok, and Narayan Aluru. *Microflows and nanoflows: fundamentals and simulation*. Vol. 29. Springer Science & Business Media, 2006.
- [17] Alder, Berni Julian, and Thomas Everett Wainwright. "Phase transition for a hard sphere system." *The Journal of chemical physics* 27.5 (1957): 1208-1209.
- [18] Yin, Zongjun, et al. "Molecular dynamics simulations of single water nanodroplet impinging vertically on curved copper substrate." *Microgravity Science and Technology* 31.6 (2019): 749-757
- [19] Carlsson, A. E. "Beyond pair potentials in elemental transition metals and semiconductors." *Solid state physics*. Vol. 43. Academic Press, 1990. 1-91.
- [20] Jones, J. E. "The Equation of State of a Gas." *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*. Vol. 22. No. 2. Cambridge University Press, 1924
- [21] Rahman, Aneesur. "Correlations in the motion of atoms in liquid argon." *Physical review* 136.2A (1964): A405.
- [22] Verlet, Loup. "Computer" experiments" on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules." *Physical review* 159.1 (1967): 98.
- [23] Giordano, Nicholas J., and Hisao Nakanishi. "Molecular Dynamics." *Computational Physics*. Pearson Education, Inc., Upper Saddle River, NJ, (2006): 270.
- [24] Swope, William C., et al. "A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: Application to small water clusters." *The Journal of chemical physics* 76.1 (1982): 637-649
- [25] Seaton, M. A., and W. Smith. "DI Meso User Manual." (2016)

- [26] Rapaport, Dennis C. *The art of molecular dynamics simulation*. Cambridge university press, 2004.
- [27] Chialvo, Ariel A., and Pablo G. Debenedetti. "An automated Verlet neighbor list algorithm with a multiple time-step approach for the simulation of large systems." *Computer physics communications* 70.3 (1992): 467-477
- [28] Sutmann, Godehard. "Classical molecular dynamics." *Quantum simulations of complex many-body systems: from theory to algorithms* 10 (2002): 211-254.
- [29] Fede, Pascal, and Olivier Simonin. "Direct Simulation Monte-Carlo predictions of coarse elastic particle statistics in fully developed turbulent channel flows: Comparison with deterministic discrete particle simulation results and moment closure assumptions." *International Journal of Multiphase Flow* 108 (2018): 25-41.
- [30] Zakeri, Ramin, Ramin Kamali-Moghadam, and Mahmoud Mani. "A new approach for chemical reaction simulation of rarefied gas flow by DSMC method." *Computers & Fluids* 140 (2016): 111-121
- [31] Tsirkunov, Yu M., and D. A. Romanyuk. "Computational fluid dynamics/Monte Carlo simulation of dusty gas flow in a "rotor-stator" set of airfoil cascades." *Progress in Propulsion Physics* 8 (2016): 427-444.
- [32] Oran, E. S., C. K. Oh, and B. Z. Cybyk. "Direct simulation Monte Carlo: recent advances and applications." *Annual Review of Fluid Mechanics* 30.1 (1998): 403-441
- [33] Dieste, M., and Gwénaél Gabard. "Random particle methods applied to broadband fan interaction noise." *Journal of Computational Physics* 231.24 (2012): 8133-8151.
- [34] Hainaut, Thomas, et al. "Aerodynamic and Aeroacoustic Numerical Investigation of an Axial Fan using Lattice Boltzmann Methods." *2018 AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference*. 2018
- [35] Di Ilio, Giovanni, et al. "Fluid flow around NACA 0012 airfoil at low-Reynolds numbers with hybrid lattice Boltzmann method." *Computers & Fluids* 166 (2018): 200-208.
- [36] Wang, Kai, et al. "Influence of slip boundary on the hydrofoil with a curved slip boundary condition for the lattice Boltzmann method." *Physics of Fluids* 30.12 (2018): 123601.
- [37] Wilhelm, Sylvia, Jérôme Jacob, and Pierre Sagaut. "An explicit power-law-based wall model for lattice Boltzmann method–Reynolds-averaged numerical simulations of the flow around airfoils." *Physics of Fluids* 30.6 (2018): 065111.
- [38] Fan, Jing, et al. "Computation of rarefied gas flows around a NACA 0012 airfoil." *AIAA journal* 39.4 (2001): 618-625.
- [39] Xiao, H., and D. H. Wang. "Rarefied airfoil aerodynamics based on the generalized hydrodynamic model." *Aerospace Science and Technology* 92 (2019): 148-155.
- [40] Hoogerbrugge, P. J., and J. M. V. A. Koelman. "Simulating microscopic hydrodynamic phenomena with dissipative particle dynamics." *EPL (Europhysics Letters)* 19.3 (1992): 155.
- [41] Koelman, J. M. V. A., and P. J. Hoogerbrugge. "Dynamic simulations of hard-sphere suspensions under steady shear." *EPL (Europhysics Letters)* 21.3 (1993): 363.
- [42] Espanol, Pep, and Patrick Warren. "Statistical mechanics of dissipative particle dynamics." *EPL (Europhysics Letters)* 30.4 (1995): 191.
- [43] Groot, Robert D., and Patrick B. Warren. "Dissipative particle dynamics: Bridging the gap between atomistic and mesoscopic simulation." *The Journal of chemical physics* 107.11 (1997): 4423-4435
- [44] Warren, P. B. "Vapor-liquid coexistence in many-body dissipative particle dynamics." *Physical Review E* 68.6 (2003): 066702
- [45] Liu, Moubin, Paul Meakin, and Hai Huang. "Dissipative particle dynamics simulation of pore-scale multiphase fluid flow." *Water resources research* 43.4 (2007).
- [46] Forrest, Bruce M., and Ulrich W. Suter. "Accelerated equilibration of polymer melts by time-coarse-graining." *The Journal of chemical physics* 102.18 (1995): 7256-7266
- [47] Padding, J. T., and Willem J. Briels. "Systematic coarse-graining of the dynamics of entangled polymer melts: the road from chemistry to rheology." *Journal of Physics: Condensed Matter* 23.23 (2011): 233101
- [48] Darbandi, Masoud, Ramin Zakeri, and Gerry E. Schneider. "Simulation of Polymer Chain Driven by DPD Solvent Particles in Nanoscale Flows." *International Conference on Nanochannels, Microchannels, and Minichannels*. Vol. 54501. 2010
- [49] Darbandi, Masoud, Ramin Zakeri, and Gerry E. Schneider. "Simulation of Polymer Chain Driven by DPD Solvent Particles in Nanoscale Flows." *International Conference on Nanochannels, Microchannels, and Minichannels*. Vol. 54501. 2010.

- [50] Padding, J. T., and Willem J. Briels. "Systematic coarse-graining of the dynamics of entangled polymer melts: the road from chemistry to rheology." *Journal of Physics: Condensed Matter* 23.23 (2011): 233101
- [51] Wang, Yuxiang, and Shuo Chen. "Droplets impact on textured surfaces: mesoscopic simulation of spreading dynamics." *Applied Surface Science* 327 (2015): 159-167.
- [52] Zhao, Jiayi, Shuo Chen, and Yang Liu. "Dynamical behaviors of droplet impingement and spreading on chemically heterogeneous surfaces." *Applied surface science* 400 (2017): 515-523.
- [53] Waheed, Waqas, et al. "Simulation of Fluid Flow in a Microchannel at Low Reynolds Number Using Dissipative Particle Dynamics." *ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition*. Vol. 52156. American Society of Mechanical Engineers, 2018.
- [54] Zakeri, Ramin, et al. "Investigation of Magneto Hydro-Dynamics Effects on a Polymer Chain Transfer in Micro-Channel Using Dissipative Particle Dynamics Method." *Symmetry* 12.3 (2020): 397
- [55] Mehboudi, A., and M. S. Saidi. "A systematic method for the complex walls no-slip boundary condition modeling in dissipative particle dynamics." *Scientia Iranica* 18(6) :1253-1260 ,(2011)
- [56] Duong-Hong, Duc, Nhan Phan-Thien, and Xijun Fan. "An implementation of no-slip boundary conditions in DPD." *Computational mechanics* 35.1 (2004): 24-29.
- [57] Pivkin, Igor V., and George Em Karniadakis. "A new method to impose no-slip boundary conditions in dissipative particle dynamics." *Journal of Computational Physics* 207.1 (2005): 114-128.
- [58] Zhang, Dingni, Qianqian Shangguan, and Yuxiang Wang. "An easy-to-use boundary condition in dissipative particle dynamics system." *Computers & Fluids* 166 (2018): 117-122.
- [59] Pal, Souvik, et al. "Symmetry boundary condition in dissipative particle dynamics." *Journal of Computational Physics* 292 (2015): 287-299.
- [60] Ranjith, S. Kumar, B. S. V. Patnaik, and Srikanth Vedantam. "No-slip boundary condition in finite-size dissipative particle dynamics." *Journal of Computational Physics* 232(1) 174-188,(2013)
- [61] Nikunen, Petri, Mikko Karttunen, and Ilpo Vattulainen. "How would you integrate the equations of motion in dissipative particle dynamics simulations?." *Computer Physics Communications* 153.3 (2003): 407-423.
- [62] Nikunen, Petri, Mikko Karttunen, and Ilpo Vattulainen. "How would you integrate the equations of motion in dissipative particle dynamics simulations?." *Computer Physics Communications* 153.3 (2003): 407-423
- [63] Sadikin, Azmahani, et al. "A comparative study of turbulence models on aerodynamics characteristics of a NACA0012 airfoil." *International Journal of Integrated Engineering* 10.1 (2018).
- [64] Shoja-Sani, Ahmad, et al. "Investigation of aerodynamic characteristics of rarefied flow around NACA 0012 airfoil using DSMC and NS solvers." *European Journal of Mechanics-B/Fluids* 48 (2014): 59-74.

Abstract:

In this dissertation, the method of dissipation particle dynamics is used to simulate the flow around the micro-airfoil. To simulate the flow around the micro-airfoil, we will actually encounter the microscale structure. At the micro scale, the flow regime is a discontinuous regime. Simulation of computational fluid dynamics is based on continuity and the computational range is confined to the fluid region. Unfortunately, computational fluid dynamics is valid only for the continuous regime, so a kind of molecular method is used in this dissertation. Molecular methods can be divided into molecular dynamics, Lettis Boltzmann, Monte Carlo and dissipative particle dynamics. The molecular dynamics simulation method has high costs in the micro index and in the Letis Boltzmann method the degrees of freedom are reduced, which makes us move away from reality, In fact, simulation must be close to reality, so we need software to be close to reality. And it can be used at a low cost in a discontinuous regime. As a result, in this dissertation, the dynamic particle dynamics simulation method was used. To modify the computational fluid dynamics, a model for the solid boundary of any complex geometry is proposed in this study. The results include the study of velocity profiles in simple channel geometry and the comparison of flow simulations in channels by dissipative particle dynamics and computational fluid dynamics. The results include the study of velocity profiles in simple channel geometry and the comparison of flow simulations in channels by dissipation particle dynamics and computational fluid dynamics. The error of comparing the velocity profile in the channel with the help of these two methods was 6%. In the following, the results are simulated to investigate the flow around the diamond airfoil. The flow begins to propagate around the fine airfoil, the pattern of flow lines being symmetrical. By applying these boundary conditions, the particles reach equilibrium. The most important feature of the boundary conditions applied in the simulation by the method of dissipative particle dynamics is the impermeability of the particles into the micro-airfoil and also the correct return of the particles from the micro-airfoil wall. The results for the geometry curve of Naca 0012 airfoil are also extended at angles 0, 3, 6, 9, 10 and the flow expansion around the airfoil can be seen, as well as the effect of angle of attack and chord on lift and drag coefficients for an airfoil. Naca

0012 has been reviewed. In addition, the data obtained from the simulation of dissipation particle dynamics with other research works have been done for the ratio of maximum lift and drag coefficients. It is compared with two simulation methods of dissipated particle dynamics and computational fluid dynamics. The comparison error of these two methods was less than 3%. We observe that the change in aerodynamic properties is related to the linear slope changes of lift and drag coefficients as the function of the angle of attack for each dimensional ratio. By comparing the two methods of dissipative particle dynamics and computational fluid dynamics, we will find that the results are very close, but computational fluid dynamics do not explicitly model wall boundaries. The advantage of the method used in this dissertation is actually simulation of physical flow also this molecular method helps to reach more accurate answers that are close to reality.

Keywords

Dissipative particle dynamics, computational fluid dynamics, micro airfoil, naca 0012, coefficient of drag coefficient of lift



Shahrood University of Technology

Faculty of Mechanical and Mechatronics Engineering

M.Sc. Thesis in Aerospace Engineering

Flow simulation on micro airfoil with dissipative particle dynamics

By: Rokhshaad Dashti Gohari

Supervisors:

Dr. Mohammad Mohsen Shahmardan

Dr. Ramin Zakeri

Dr. Mohsen Nazari

JUNE 2021