فرم طرح تحقیق

درخواست تصویب موضوع پایان‌نامهٔ کارشناسی ارشد

عنوان تحقیق :
شبیه سازی جریان درون نانو کانال‌های متخلخل با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی

رشته : مهندسی مکانیک گرایش تبدیل انرژی

مقطع : کارشناسی ارشد

باسمه تعالی

این قسمت توسط حوزه معاونت پژوهشی دانشگاه پر می‌شود

شماره :
تاریخ :
پیوست :

فرم طرح تحقیق

کارشناسی ارشد ☑ دکترای حرفه‌ای ☐

درخواست تصویب موضوع پایان‌نامهٔ کارشناسی ارشد و دکترای حرفه‌ای

توجه : این فرم با مساعدت و هدایت استاد راهنما تکمیل شود.

عنوان تحقیق به فارسی :

شبیه سازی جریان درون نانو کانال‌های متخلخل با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی

عنوان تحقیق به انگلیسی :

Simulation of Flow in Porous Nano-Channel by Using Molecular Dynamics Simulation Method

۴. اطلاعات مربوط به پایان‌نامه

۱ـ الف : عنوان پایان‌نامه :

شبیه سازی جریان درون نانو کانال‌های متخلخل با استفاده از روش شبیه سازی دینامبک مولکولی

فارسی ■ غیرفارسی : □

ب : نوع کار تحقیقاتی: بنیادی □ نظری□ کاربردی ■ عملی □

پ : تعداد واحد پایان‌نامه :

ت : موضوع اصلی تحقیق(مساله تحقیق) :

در این پژوهش هدف آن است که با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی به بررسی خواص سیال درون نانو کانال‌های حاوی محیط متخلخل مختلف بپردازیم و خواص مختلف جریان از قبیل پروفیل سرعت، فشار و سرعت لغزش و طول لغزش را به دست آوریم.

۱- **تحقیق بنیادی**: پژوهشی است که به کشف ماهیت اشیاء، پدیده ها و روابط بین متغیرها، اصول، قوانین و ساخت یا آزمایش تئوری ها و نظریه ها می پردازد و به توسعهٔ مرزهای دانش رشتهٔ علمی کمک می نماید.

۲- **تحقیق نظری**: نوعی پژوهش بنیادی است و از روش های استدلال و تحلیل عقلانی استفاده می کند و بر پایهٔ مطالعات کتابخانه ای انجام می شود.

۳- **تحقیق کاربردی**: پژوهشی است که با استفاده از نتایج تحقیقات بنیادی به منظور بهبود و به کمال رساندن رفتارها، روش ها، ابزارها، وسایل، تولیدات، ساختارها و الگوهای مورد استفادهٔ جوامع انسانی انجام می شود.

۴- **تحقیق عملی**: پژوهشی است که با استفاده از نتایج تحقیقات بنیادی و با هدف رفع مسائل و مشکلات جوامع انسانی انجام می شود.

۵. بیان مساله(تشریح ابعاد، حدود مساله، معرفی دقیق مساله، بیان جنبه های مجهول و مبهم و متغیرهای مربوط به پرسش های تحقیق، منظور تحقیق)

امروزه علوم نانو و شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای در مقیاس مولکولی، به یکی از پرطرفدارترین موضوع‌های مورد مطالعه در دنیا مبدل شده است. یکی از روش‌های عددی حل سیستم‌ها در مقیاس نانو و میکرو، روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی است، که این روش، معین‌ترین روشِ حل سیستم‌های مولکولی، از بین روش‌های موجود است.

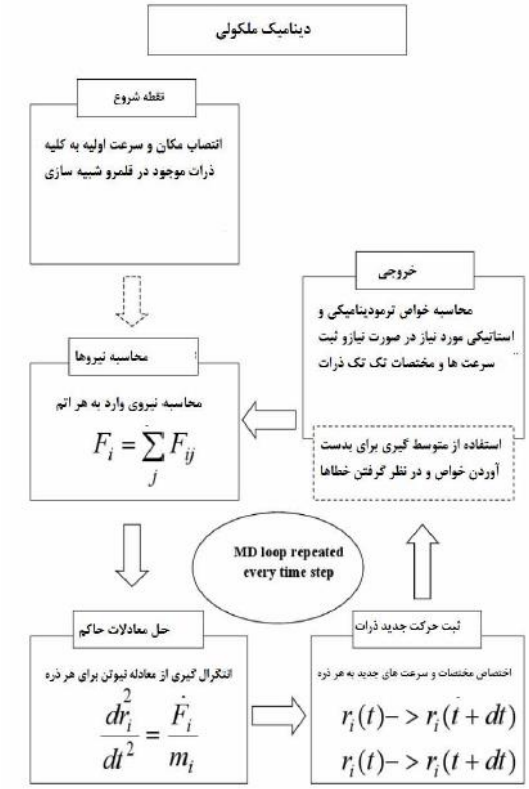
از آنجا که امروزه تجزیه و تحلیل نظری سیستم‌ها به طور وسیع توسط مدل‌سازی یا شبیه‌سازی و یا هر دو انجام می‌شود، دانستن تفاوت بین این دو، مدل‌سازی و شبیه‌سازی، بسیار مهم خواهد بود. مدل‌سازی و شبیه‌سازی، روش‌هایی هستند که میزان درک ما را از برهم‌کنش بین قسمت‌های مختلف، از یک سو و کل سیستم از سوی دیگر، افزایش می‌دهد. اطلاعاتی که از این دو روش به دست می‌آیند به ندرت از روش‌های دیگر قابل حصول هستند. یک سیستم، موجودیت خود را از طریق برهم‌کنش بین قسمت‌های مختلف تشکیل دهنده‌اش حفظ می‌کند و یک مدل نمایش ساده‌ای از یک حالت واقعی است که در جهت افزایش میزان درک ما از سیستم مورد نظر به کار می‌رود. از آنجایی که همه مدل‌ها، نمایش ساده‌ای از واقعیت هستند، لذا باید در میزان جزئیاتی که در هر یک از مدل‌های یک سیستم در نظر می‌گیریم، توازن وجود داشته باشد. به این معنا که اگر فقط جزئیات بسیار ساده‌ای را در مدل لحاظ کنیم،

ممکن است برخی از برهم‌کنش‌های مهم و مرتبط را از دست دهیم و مدل ایجاد شده به افزایش درک ما از سیستم کمکی نکند. از طرف دیگر، اگر جزئیات زیادی را در مدل وارد کنیم، مدل بسیار پیچیده‌ای خواهد شد و مجدداً کمکی به درک ما از سیستم نخواهد کرد.

در واقع، شبیه‌سازی رایانه‌ای یک برنامه رایانه‌ای است و هدف آن، شبیه‌سازی مدل ایجاد شده از سیستم مورد نظر است. طبق قرارداد، مدل‌سازی سیستم‌ها توسط مدل‌های ریاضی انجام می‌شود، مدل‌هایی که هدف آن‌ها یافتن راه حل تحلیلی برای مسائلی است که قادر به پیش‌گویی رفتار سیستم به کمک مجموعه‌ای از متغیرها و شرایط اولیه نیستند. امروزه شبیه‌سازی به صورت یک فناوری توانمند در مطالعات نانو در آمده و فناوری محاسباتی نانو[1] نامیده می‌شود. مسئله مهم در علم و فناوری نانو این است که بینش کنونی ما در زمینه قالب‌های ساختاری بنیادی و ساختارهای دربرگیرنده این سیستم بسیار اندک است.

دینامیک مولکولی، روشی برای شبیه‌سازی رفتار ترمودینامیکی مواد در سه فاز جامد، مایع و گاز با استفاده از نیرو، سرعت و مکان ذرات است. در بین این عوامل، مهم‌ترین عامل نیرو است. در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی کلاسیک، نیرو از یک پتانسیل به دست می‌آید. پتانسیل، تابعی از مکان مولکول‌ها یا هسته آنهاست و به موقعیت الکترون‌ها و ذرات زیراتمی (پروتون و نوترون) در مولکول‌ها وابسته نیست. شبیه سازی دینامیک مولکولی۲ روشی بر پایه مکانیک آماری، برای به دست آوردن یک مجموعه از پیکربندی های توزیع شده بر اساس یک مجموع آماری۳، است. روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی یک روش محاسباتی است، که رفتار وابسته به زمان یک سیستم مولکولی را ارزیابی می‌کند و با انتگرال‌گیری از معادلات حرکت، مسیر اتم ها را می‌توان به دست آورد. این روش محاسباتی با محاسبه رفتار وابسته به زمان یک سیستم، اطلاعات جزئی در سطح نانو، در مورد مکان و سرعت اتم‌ها می‌دهد. سپس با استفاده از مکانیک آماری و متوسط‌گیری از این نتایج میکروسکوپی، خواص ماکروسکوپی از قبیل سرعت، فشار، چگالی، انرژی، تنش برشی و... به دست می‌آید. شکل (۱) فلوچارت این روش را نشان می‌دهد.

[1] Computational nano technology
[2] Molecular Dynamics (MD)
[3] Statistical Ensemble



شکل ۱- فلوچارت و روند اجرای کد روش دینامیک مولکولی

در حقیقت روش دینامیک مولکولی تصویری از حرکت ذرات یا مولکول‌ها را بنا می‌نهد که در این تصویر، حرکت مستقیم مولکول ها و برخورد انها با دیواره و یکدیگر و ... لحاظ می شوند. در این روش چنانچه مجموعه‌ای از شرایط اولیه به همراه معادله تقابل بین ذرات در دسترس باشد، رفتار بعدی سیستم مولکولی قابل پیش بینی خواهد بود. این روش از نظر فیزیکی، روشی مبتنی بر قانون دوم نیوتن است که با انتگرال‌گیری از این معادله، مسیر حرکت ذرات به دست می‌آید. با به دست آوردن مسیر حرکت ذرات، مکان و سرعت ذرات مدل شده مشخص می‌گردند. سپس با متوسط‌گیری از خواص محاسبه شده، می‌توان خواص ماکروسکوپی سیستم را به دست آورد. علت معین بودن روش دینامیک مولکولی این است که با تعیین مکان و سرعت هر مولکول در زمان فعلی، وضعیت سیستم مولکولی در زمان‌های قبل و بعد قابل حصول خواهد بود.

یکی از توابع پتانسیل معروف و ساده‌ای که برهم‌کنش میان دو مولکول را تشریح می‌کند، تابع پتانسیل لنارد – جونز است که برای شبیه‌سازی مایعات ساده و جامدات استفاده قرار می‌گیرد. این تابع پتانسیل برای اولین بار توسط لنارد و جونز در سال ۱۹۲۴ معرفی شد. نیروی وارد به ذرات با مشتق‌گیری از تابع پتانسیل به دست می‌آید. این تابع پتانسیل به صورت رابطهٔ (۱) بیان می‌شود:

$$\phi(r_{ij}) = \left\{ k\,\varepsilon\left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^n - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^m\right)\right\}, r_{ij} < r_c \qquad (۱)$$

نیروی وارد بر ذرات با مشتق گیری از تابع پتانسیل بالا به صورت رابطه (۲) محاسبه می‌شود.

$$F(r_{ij}) = \frac{d\phi(r_{ij})}{dr_{ij}} = \frac{d}{dr_{ij}}\left\{4\varepsilon(((\frac{\sigma}{r_{ij}})^{12} - (\frac{\sigma}{r_{ij}})^{6}))\right\} \rightarrow \quad (۲)$$

در یک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی انتخاب شرایط مرزی تأثیر چشمگیری بر روی خواص سیستم می‌گذارد. ذراتی که بر روی مرزها قرار دارند، شرایط و نیروهای مختلفی را تجربه می‌کنند. به‌طور کلی یک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی محدود به یک جعبه محاسباتی به ابعاد چندین نانومتر است.

در نزدیکی هر کدام از سطوح این جعبه محاسباتی تعداد زیادی ذره وجود دارد که اگر دیواره‌های جامد نیز بدان اضافه شود، مدل‌سازی سیال را مشکل خواهد کرد. همچنین اگر دیواره جامدی در مرزها وجود نداشته باشد، ذرات به دلیل سرعت و انرژی از مرزها خارج شده و باعث خطا در مدل‌سازی می‌گردد. به همین دلیل استفاده از شرط مرزی متناوب[4]می‌تواند، یک روش عام و مفید برای در نظر نگرفتن اثرات سطح باشد.

این شرط مرزی دارای دو خصوصیت بارز است، که عبارتند از:

۱- مولکول‌هایی از یک وجه جعبه محاسباتی خارج می‌شوند از وجه مقابل با همان خواص وارد دامنه حل می‌شوند.

۲- مولکول‌هایی که فاصله آن‌ها با مرزهای جعبه محاسباتی در محدوده شعاع قطع است با ذرات نزدیک وجه مقابل جعبه برهم‌کنش می‌کنند.

کد موازی که برای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در این پژوهش استفاده می‌شود **Large-scale Atomic Molecular Massively Parallel Simulator** نام دارد که به اختصار **LAMMPS** نامیده می‌شود. این کد دارای قابلیت‌های زیر است:

- اجرا بر روی یک یا چند پردازشگر
- اجرای بعضی از کدها بر روی پردازشگرهای کارت گرافیک
- استفاده از کتابخانهٔ **MPI**
- استفاده از زبان برنامه نویسی پیشرفتهٔ **C++**
- قابلیت آسان جهت توسعه کد
- پاسخگویی روزانهٔ سؤالات از طریق پست الکترونیکی
- شبیه‌سازی اتم‌ها، مولکول‌ها، پلیمرها، فلزات، ذرات دانه‌ای و ذرات دانه درشت.
- دارای انواع پتانسیل:
  - توابع پتانسیل دو ذره‌ای : **LJ, Morse, Backingham, Yukawa,point dipole, soft**
  - توابع پتانسیل دو ذره‌ای باردار: **Columbic, point-dipole**
  - توابع پتانسیل بین ذره‌ای: **EAM, EAM finnis/Sinclair, Stillinger Weber,**

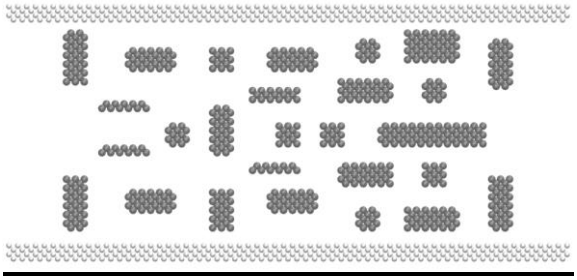
[4] Periodic Boundary Condition

AIREBO, Teresoff

- توابع پتانسیل دانه درشت :**DPD, GayBern, REsquared, colloidal**
- توابع پتانسیل پلیمرها: **all-atom, united-atom, bead-spring, breakable**

- انجام شبیه‌سازی‌های دو و سه بُعدی
- دارای هنگردهای **NVT** و **NPH** و **NVE** و **NPT**
- دارای ترموستات‌های متنوع
- انواع شرایط مرزی
- دینامیک مولکولی تعادلی و غیر تعادلی
- الگوریتم سرعت ورله
- محاسبه کمیت‌های وابسته به هر اتم نظیر انرژی و تنش و ...
- میانگین‌گیری زمانی و مکانی متغیرهای موجود
- خروجی کمیت‌های مختلف با قالب‌ها و پسوندهای متنوع

در ابتدا نانو کانالی را جهت صحت سنجی جریان پوازیه در نظر می‌گیریم و با صحت سنجی کد نوشته شده، به ادامه کار می‌پردازیم. نانو کانال های مختلف با محیط‌های متخلخل متفاوت معرفی می‌شود و سپس جریان پوازیه درون آن شبیه سازی شده و خواص جریان درون نانو کانال استخراج می‌شود. نمونه‌ای از این نانو کانال با محیط متخلخل در شکل (۱) قابل ملاحظه است.



شکل ۱: نانو کانال دارای محیط متخلخل

دیواره‌های نانو کانال و محیط متخلخل از جنس پلاتین و مس خواهند بود و سیال داخل کانال آرگون می‌باشد.

استخراج نتایج بعد از پایداری سیستم یا حالت تعادل سیستم انجام می‌گیرد. نکته قابل ذکر است که در شبیه سازی از روش شبیه سازی تعادلی استفاده می‌کنیم. از جمله پارامترهایی که در این شبیه سازی‌ها قابل تغییر هستند می‌توان به نیروی اعمال شده به دامنه حل و نسبت تخلخل‌های متفاوت اشاره نمود که خود طیف وسیعی از داده‌های متنوع را نتیجه می‌دهد.

مجهولات و یا نتایج این پژوهش می‌توان به کانتور و پروفیل‌های سرعت و فشار در مقاطع مختلف نانوکانال در حالت‌های مختلف اشاره نمود.

۶. سوابق مربوط (بیان مختصر سابقهٔ تحقیقات انجام شده دربارهٔ موضوع و نتایج به دست آمده در داخل و خارج از کشور، نظرهای علمی موجود دربارهٔ تحقیق)

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

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

۷. فرضیه ها (هر فرضیه به صورت یک جمله خبری نوشته شود)

۱-نانو کانال با ابعاد تخلخل مختلف در نظر گرفته می‌شود.

۲-نیروهای مختلف به دامنه حل وارد می‌شوند.

۳-ذرات تک اتمی مانند آرگون درون نانو کانال برای بررسی خواص استفاده می‌شود.

۴-دماهای مختلف به دامنه حل اعمال می‌گردد.

۵-جریان درون نانو کانال در اعداد نادسن مختلف درون آن در نظر گرفته می‌شود.

۸. اهداف تحقیق(شامل اهداف علمی ۱، کاربردی۲ و ضرورت های ۳ خاص انجام تحقیق)

۱-محاسبه خواص جریان درون نانو کانال‌های متخلخل

۲-میزان و چگونگی وابستگی نتایج به پارامرتهای طراحی مانند نیرو و ابعاد تخلخل‌ها

۳-دقت روش دینامیک مولکولی در محاسبه خواص کانال‌های حاوی محیط مختلخل و مقایسه با روش شبکه بولتزمن

۹. در صورت داشتن هدف کاربردی بیان نام بهره وران (اعم از موسسات آموزشی و اجرایی و غیره):

۱۰. جنبهٔ نوآوری و جدید بودن تحقیق در چیست؟(این قسمت توسط استاد راهنما تکمیل شود.)

تاکنون تحقیقی در زمینه محاسبه خواص درون نانوکانال‌های حاوی محیط متخلخل با استفاده از روش دینامیک مولکولی انجام نشده است. با انجام این پژوهش می‌توان نتایج استخراج شده با این روش را با دیگر روش‌ها مانند روش شبکه بولتزمن مقایسه نمود.

۱۱. روش کار

الف: تجزیه و تحلیل اطلاعات **با استفاده از استدلال‌ها، واقعیت‌ها و قوانین علم سیالات و انتقال حرارت**
ب: روش گردآوری اطلاعات(میدانی، کتابخانه ای و غیره): **مقالات مجلات خارجی از طریق اینترنت و پایان نامه های موجود در زمینهٔ روش دینامیک مولکولی**
پ: ابزار گردآوری اطلاعات(پرسشنامه، مصاحبه، مشاهده، آزمون، فیش، جدول، نمونه برداری، تجهیزات آزمایشگاهی و بانک های اطلاعاتی و شبکه های کامپیوتری و ماهواره ای و غیره): **اینترنت و رایانه**
ت: روش تجزیه و تحلیل اطلاعات: **با استفاده از نمودارهای استخراج شده از حالات مختلف جریان درون نانوکانال‌های متخلخل**

۱۲. جدول زمان‌بندی مراحل انجام دادن تحقیق از زمان تصویب تا دفاع نهایی

تاریخ تصویب	از تاریخ	تا تاریخ
مطالعات کتابخانه‌ای	۹۳/۲/۱	۹۳/۳/۱
جمع‌آوری اطلاعات	۹۳/۳/۱	۹۳/۴/۱
تجزیه و تحلیل داده‌ها	۹۳/۴/۱	۹۳/۶/۱
نتیجه‌گیری و نگارش پایان‌نامه	۹۳/۶/۱	۹۳/۸/۱
تاریخ دفاع نهایی	توسط معاونت پژوهشی مشخص می گردد	
طول مدت اجرای تحقیق : **۶ماه**		

۱۳. فهرست منابع و مأخذ (فارسی و غیر فارسی) مورد استفاده در پایان‌نامه به شرح زیر:

(به ترتیب حروف الفبا تنظیم شود)

کتاب : نام خانوادگی،نام، سال نشر،عنوان کتاب،مترجم، جلد ، محل انتشار، ناشر

مقاله : نام خانوادگی، نام، عنوان مقاله، عنوان نشریه، سال، دوره،شماره،صفحه

تعدادی از منابع

Chang, W., Lee, T.Y., molecular dynamics simulation of gas permeation phenomena in a microporous silica membrane, Chemical Engineering Science, 61 (12), 3974-3985,2006.

Chang, W., Lee, T.Y., Observation of adsorption and permeation phenomena in silica membrane system through molecular dynamics simulation, Computers & Chemical Engineering, 29 (1), 209-216, 2004.

Pohl, P. I., Heffelfinger, G. S., Massively parallel molecular dynamics simulation of gas permeation across porous silica membranes, J. Membrane Science, 155 (1), 1-7 ,1999.

Zhang, H., Zhang, B. J., Liang, S., Lu, Y., Hu, W., Jin, Z., Shear viscosity of simple fluids in porous media: molecular dynamic simulations and correlation models, Chemical Physics Letters, 350 (3–4), 247-252, 2001.

Jianhui Yang, Edo S. Boek, A comparison study of multi-component Lattice Boltzmann models for flow in porous media applications, Journal of Computers and Mathematics with Applications, 65 (2013) 882–890 , 2013.

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

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

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

Hung Kim Bo, Beskok Ali, Cagin Tahir, "Viscous heating in nanoscale shear driven liquid flows", Microfluid Nanofluid Vol. 9:31–pp. 40-53, 2010.

Rahman, A, Correlations in the motion of atoms in liquid argon, Physical Review, Vol.136, 1964.

Alder, B. J., and Wainwright, T. E., Studies in molecular dynamics, general method, Journal of Chemical physics, Vol. 31, pp. 431–459, 1959.

Hail, J. M., molecular dynamics Simulation, Elementry methods, John Wiley & Sons, INC, 1992.