

«به نام خدا»



گروه دینامیک سیالات محاسباتی
دانشگاه صنعتی اصفهان

آشنایی با روش Dissipative Particle Dynamics (D.P.D.)

سروش خواجه پور

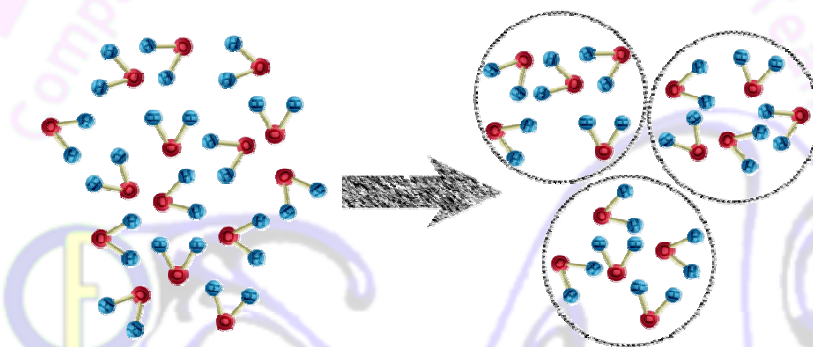
کلیه حقوق این کتاب الکترونیک متعلق به گروه دینامیک سیالات محاسباتی دانشگاه صنعتی اصفهان می باشد.

هرگونه چاپ، تکثیر و توزیع آن با ذکر منبع بلا مانع است.

<http://CFD.iut.ac.ir>

۱. آشنایی با روش DPD

روش DPD مبنا ذره‌ای است که فیزیک سیال در مقیاس مزوسکوپیک را شبیه سازی می‌کند. در این روش تعدادی از مولکول‌های (یا اتم‌های) سیال در کنار هم یک ذره^۱ DPD را تشکیل می‌دهند که بدان عمل درشت دانه‌ای^۲ می‌گویند (شکل ۱). این ذرات سیال با قوانین خاصی بر هم کنش دارند و آزادانه در دامنه محاسباتی حرکت خواهند کرد. در نتیجه‌ی درشت دانه کردن، جزییات مولکولی را از دست خواهیم داد اما در عین حال اطلاعات ارزشمند مقیاس مزوسکوپیک را می‌توانیم از سیستم کسب کنیم. در حقیقت DPD نسخه درشت دانه روش دینامیک مولکولی^۳ است که ما را قادر می‌سازد در مقیاس طولی و زمانی بزرگتری شبیه سازی کنیم.



شکل ۱: درشت دانه‌ای با در نظر گرفتن چندین مولکول به عنوان یک ذره انجام می‌گیرد.

این درشت دانه‌ای طبیعت هسته سخت^۴ را از بین می‌برد و پتانسیل هسته نرم^۵ را جایگزین می‌کند. هسته سخت بودن پتانسیل در روش دینامیک مولکولی ناشی از پتانسیل لنارد - جونز می‌باشد، زیرا که اگر فاصله بین دو اتم به حد قطر اتم برسد این پتانسیل به طور نامحدودی بزرگ خواهد شد (شکل ۲).

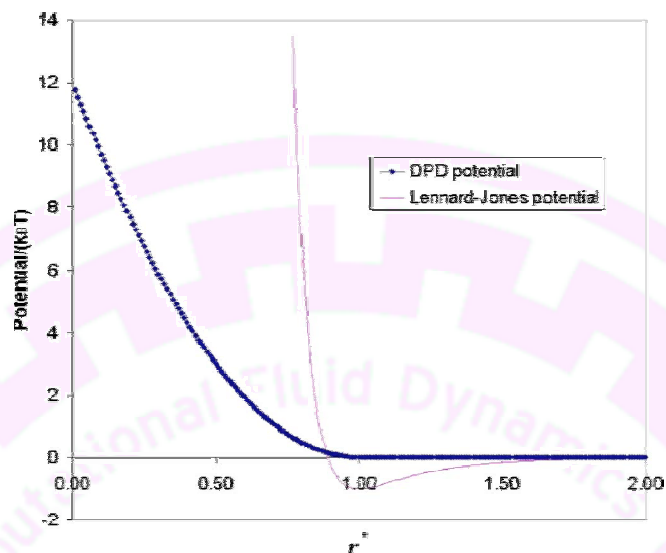
¹ Particle

² Coarse-graining

³ Molecular Dynamics

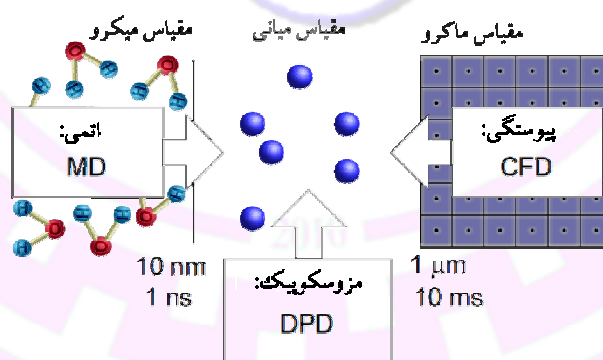
⁴ Hard-core

⁵ Soft-core



شکل ۲: مقایسه پتانسیل بین ذره‌ای MD و DPD

پس منظور از پتانسیل هسته نرم، پتانسیلی است که در نتیجه‌ی درشت دانه‌ای، کراندار باشد. هسته نرم بودن DPD این امکان را به ما می‌دهد که در زمان، چندین مرتبه بزرگتر از دینامیک مولکولی گام برداریم. هر چه درشت دانه کردن بیشتر باشد، منجر به افزایش مقیاس از مزوسکوپیک به سمت ماکروسکوپیک خواهد شد یعنی جایی که معادلات ناویر استوکس حاکم است (شکل ۳).



شکل ۳: روش DPD در مقیاس مزوسکوپیک قرار دارد.



۱-۱. نیروها در DPD

در روش دی پی دی معادلات حرکت نیوتنی N ذره را در زمان حل خواهیم کرد. نیروهای بین ذرات سه مولفه دارند: نیروی استهلاکی $\mathbf{F}^D$ ^۱، نیروی تصادفی $\mathbf{F}^R$ ^۲، نیروی کنسرواتیو $\mathbf{F}^C$ ^۳ نیروی استهلاکی سرعت نسبی بین دو ذره را کاهش می‌دهد بدین صورت اثرات ویسکوز را پدیدار می‌کند. به دلیل درشت دانه‌ای بودن سیستم، قسمتی از درجه آزادی سیستم را از دست خواهیم داد برای جبران درجات آزادی از دست داده شده از نیروی تصادفی استفاده می‌کنیم. برای شبیه سازی سیستم غیر ایده آل نیروی کنسرواتیو به نیروهای فوق اضافه می‌شود. سیستم غیر ایده آل سیستمی است که هیچ برهم کنشی بین ذرات آن وجود ندارد. پس هنگامی که یک گاز ایده آل را شبیه سازی می‌کنیم که هیچ برهم کنشی بین ذرات آن وجود ندارد (یعنی ذرات هیچ پتانسیلی ندارند که برهم نیرویی وارد کنند، تنها نیرویی که برهم وارد می‌کنند در نتیجه برخورد است). نیروی کنسرواتیو صفر خواهد بود.

نکته مهمی که در رابطه با این روش اهمیت دارد، کوتاه برد بودن نیروها است، یعنی نیروهای مربوط به هر ذره فقط تا یک شعاع موثر بر ذرات همسایه‌اش اعمال می‌گردد، این کوتاه برد بودن نیروها به ما کمک خواهد کرد تا هزینه محاسبات را کم کنیم. در ادامه نیروها و پارامترهای درگیر با آنها را تشریح خواهیم کرد. همانطور که در ابتدا بیان شد، نیروی استهلاکی $\mathbf{F}^D$ ، اثر ویسکوز را نشان می‌دهد. نیروی استهلاکی بین دو ذره i و j به صورت زیر می‌باشد:

$$\mathbf{F}_{ij}^D = -\gamma \omega^D(r_{ij})(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})\mathbf{e}_{ij} \quad (1-1)$$

که در آن γ ضریب نیروی استهلاکی، ω^D تابع وزنی نیرو استهلاکی، $\mathbf{e}_{ij}$ بردار یکه در جهت $\mathbf{r}_{ij}$ و $\mathbf{v}_{ij}$ سرعت نسبی بین ذره i و j ($\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$) می‌باشد. تابع وزنی به این صورت تعریف می‌شود:

$$\omega^D(r) = \begin{cases} \left(1 - \frac{r}{r_c}\right)^2 & r < r_c \\ 0 & r \geq r_c \end{cases} \quad (2-1)$$

¹ Dissipative force

² Random force

³ Conservative force



در این معادله r فاصله بین دو ذره است که با هم برهم کنش دارند، r_c شعاع موثر^۱ است که برد نیروی یک ذره را نشان می‌دهد. ضریب نیروی استهلاکی به ضریب نیروی تصادفی وابسته است که در بخش بعد به طور مختصر بررسی خواهد شد.

نیروی تصادفی به دلیل از دست دادن درجه آزادی سیستم در نتیجه درشت دانه‌ای اعمال می‌گردد. نیروی تصادفی سیستم را گرم می‌کند درمقابل، نیروی استهلاکی سیستم را سرد می‌کند، بنابراین این دو نیرو با هم در تعادل هستند. تعادل بین این دو نیرو با تئوری استهلاکی-نوسانی اعمال می‌شود. شکل نیروی تصادفی به صورت زیر است:

$$\mathbf{F}^R = \sigma \omega^R (r_{ij}) \zeta_{ij} \mathbf{e}_{ij} \quad (3-1)$$

که در آن σ ضریب نیروی تصادفی، ω^R تابع وزنی برای نیروی تصادفی، ζ_{ij} یک متغیر تصادفی با میانگین صفر و واریانس واحد می‌باشد، $\mathbf{e}_{ij}$ بردار واحدی است که همانند معادله (۱-۱) تعریف می‌شود.

گروت و وارن اثر تغییرات σ بر تعادل ذرات DPD در یک جعبه سه بعدی پیرویدیک بررسی کردند. سیستم در دمای خاصی تنظیم و اجازه داده می‌شد تا به تعادل برسد. آنها بازه σ بین ۱ تا ۸ را در $k_B T = 1$ بررسی کردند و دریافتند که در σ نزدیک ۱ زمان طولانی طی خواهد شد تا سیستم به تعادل برسد. σ نزدیک ۸ سیستم را به دمایی غیر از دمای مطلوب می‌رساند و برای مقادیر بزرگتر سیستم ناپایدار می‌شد. گروت و وارن برای یک شبیه‌سازی سریع و پایدار σ را حدود ۳ پیشنهاد کردند.

البته باید در نظر داشت که این عدد σ زمانی کاربرد دارد که پارامترهای شبیه‌سازی همانند پارامترهای مقاله آنها تنظیم شود. نیروی کنسراتیو مورد استفاده گروت و وارن چنین تعریف می‌شد:

$$\mathbf{F}_{ij}^C = \begin{cases} a_{ij} (1 - \frac{r_{ij}}{r_c}) \mathbf{e}_{ij} & r_{ij} < r_c \\ 0 & r_{ij} \geq r_c \end{cases} \quad (4-1)$$

a_{ij} ضریب نیروی بقای، r_{ij} فاصله بین دو ذره، $\mathbf{e}_{ij}$ بردار یکه در جهت $\mathbf{r}_{ij}$ و r_c شعاع موثر است. با برابر قرار دادن تراکم پذیری سیال DPD و سیال واقعی ضریب a_{ij} تعیین می‌شود. برای بدست آوردن تراکم پذیری سیال DPD به معادله حالت آن نیازمندیم. گروت و وارن با انجام یک سری شبیه‌سازی‌ها معادله حالت سیال DPD را به صورت زیر بدست آوردند:

¹ Cut-off radius

$$p = \rho k_B T + \alpha a \rho^2 \quad (\alpha = 0.101 \pm 0.001) \quad (5-1)$$

هنگامی که معادله حالت مشخص شد تراکم پذیری بدون بعد چنین تنظیم می‌شود:

$$\kappa^{-1} = \frac{1}{\rho k_B T \kappa_T} = \frac{1}{k_B T} \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T \quad (6-1)$$

که در آن ρ دانسیته عددی ذرات، k_B ثابت بولتزمن، T دمای سیستم، κ_T ترکم پذیری همدم و P فشار است. همانطور که در ابتدا بیان شد، نیروی بقایی در سیستمی وارد می‌شود که در آن سیستم بین ذرات غیر از برخورد، برهم کنش وجود داشته باشد، این امر زمانی میسر است که در سیستم پتانسیل بین ذره‌ای وجود داشته باشد. در آخر نکته‌ای که باید بدان توجه داشت این است که هر سه نیرو بین ذره‌ای از قانون سوم نیوتن پیروی می‌کنند پس قانون بقای مومنتوم در یک سیستم DPD برقرار خواهد بود. تا زمانی که تعداد ذرات سیستم ثابت باشد قانون بقای جرم نیز حاکم است. در نتیجه ما انتظار داریم که سیال DPD رفتار هیدرودینامیکی صحیحی از خود نشان دهد.

۱-۲ تئوری استهلاکی-نوسانی

در این بخش تئوری استهلاکی-نوسانی DPD را به طور مختصر تشریح می‌کنیم. طبق این تئوری رابطه بین نیروی استهلاکی و تصادفی، باید به گونه‌ای باشد که سیستم در دمای ثابت دلخواه به تعادل برسد. قبل از بررسی جزئیات، نیاز به یک دید کلی از پدیده براونی و معادله فوکر-پلانک^۱ احساس می‌شود.

نیروی استهلاکی و تصادفی به ترتیب برای اثرات ویسکوز و جبران درجات آزادی کم شده در نتیجه درشت دانه‌ای اعمال می‌شوند. به همین دلیل DPD به پدیده براونی بسیار نزدیک است چون در پدیده براونی حرکت یک ذره معلق در سیال بررسی می‌شود. این ذره معلق تحت برخوردهای زیادی با مولکول‌های (یا اتم‌ها) سیال قرار می‌گیرد، به همین دلیل تعیین مسیر حرکت این ذره به طور دقیق، امری غیر ممکن است. بنابراین برای تحلیل حرکت این گونه ذرات از روشهای تصادفی^۲ استفاده می‌کنیم که در مقابل روش‌های دقیق قرار دارند. این گونه روش‌های تصادفی شامل یک‌ترم نویز هستند که اثرات برخورد با سیال محیطی را نشان می‌دهند. سپس با یک متوسط گیری می‌توان حرکت ذره معلق را به صورت آماری مشخص نمود. مفهوم دانسیته احتمال^۳ که در این روش‌ها مطرح می‌شود، احتمال یافتن یک ذره در یک

¹ Fokker-Planck

² Stochastic

³ Probability density



مکان خاص با سرعت مشخص است. تکامل این دانسیته احتمال، حل معادله فوکر-پلانک می‌باشد. در حالت کلی برای مطالعه سیستم‌هایی که طبیعت تصادفی دارند، از معادلات فوکر-پلانک استفاده می‌شود. کاربرد این معادلات بسیار گسترده است و شامل مسایل فیزیک حالت جامد، کوانتوم اپتیک، شیمی فیزیک، بیولوژی تئوری و تئوری مدار است. اسپانول و وارن مکانیک آماری DPD را مطالعه کردند و معادله فوکر-پلانک را برای این روش نوشتند. سپس از تئوری استهلاکی-نوسانی برای بدست آوردن رابطه بین ضریب نیروی تصادفی و استهلاکی استفاده کردند. آنها محاسبات خود را با گسترش معادلات لانگوین^۱ در قالب معادلات دیفرانسیل تصادفی آغاز کردند. این مجموعه معادلات دیفرانسیل تصادفی به صورت زیر هستند:

$$d\mathbf{r}_i = \mathbf{v}_i dt$$

$$d\mathbf{v}_i = \left[\sum_{j \neq i} \mathbf{F}_{ij}^C(\mathbf{r}_{ij}) - \sum_{j \neq i} \gamma \omega^D(r_{ij})(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij}) \mathbf{e}_{ij} \right] dt + \sum_{j \neq i} \sigma \omega^R(r_{ij}) \mathbf{e}_{ij} dW_{ij} \quad (7-1)$$

که در آن $\mathbf{r}$ و $\mathbf{v}$ بیانگر مکان و سرعت، $\mathbf{F}_{ij}^C$ بیانگر نیروی بقایی، γ نشاندهنده ضریب نیروی استهلاکی، σ نشاندهنده ضریب نیروی تصادفی، $\mathbf{e}_{ij}$ بردار واحد در جهت $\mathbf{r}_{ij}$ ، ω تابع وزنی برای نیروی تصادفی و استهلاکی با بالانویس R و D ، dt گام زمانی و $dW_{ij} = dW_{ji}$ افزایش مستقل فرآیند^۲ است. در خط دوم معادله (۷-۱)، اولین ترم نیروی بقایی، ترم دوم نیروی استهلاکی و ترم سوم نشاندهنده نیروی تصادفی است. ترم dW_{ij} شکل زیر را به خود می‌گیرد:

$$dW_{ij} = \zeta_{ij} dt^{-1/2} \quad (8-1)$$

که ζ_{ij} یک عدد تصادفی با میانگین صفر و واریانس واحد می‌باشد و dt گام زمانی را نشان می‌دهد. گروت و وارن پدیدار شدن $dt^{-1/2}$ را چنین توجیه کردند که اگر یک ذره را بخواهیم در زمان t بررسی کنیم، ما می‌توانیم محور زمان را به N زیربازه تقسیم کنیم و یک زیربازه خاص را i بنامیم. اگر نیروی تصادفی که بر یک ذره اعمال می‌شود را با R نشان دهیم، متوسط نیروی تصادفی که بر ذره اعمال می‌شود صفر خواهد بود اما واریانس غیر صفری خواهد داشت، یعنی:

¹ Langevin

² Independent increments of Wiener process



$$\begin{aligned}\langle R_i \rangle &= 0, \\ \langle R_i^2 \rangle &= \sigma^2\end{aligned}\quad (9-1)$$

که σ^2 واریانس نیروی تصادفی می باشد و ما فرض می کنیم که این واریانس مستقل از انتخاب گام زمانی می باشد. حال اگر ذره ای را در نظر بگیریم که فقط نیروی تصادفی در لحظه t بدان اعمال می شود، انتگرال نیرو تغییرات مومنتوم ذره را محاسبه می کند. چون تغییرات مومنتوم به جابه جایی ذره وابسته است پس میانگین مربعات انتگرال این نیرو باید به میانگین مربعات جابه جایی وابسته باشد، یعنی:

$$\begin{aligned}\langle D^2 \rangle &= \left\langle \left(\int_0^t R(t') dt' \right)^2 \right\rangle, \\ &= \left\langle \left(\sum_{i=1}^N R_i \right)^2 \left(\frac{t}{N} \right)^2 \right\rangle, \\ &= \frac{\sigma^2 t^2}{N}, \\ &= t \sigma^2 dt\end{aligned}\quad (10-1)$$

که D جابه جایی ذره، R نیروی تصادفی، t زمان، N تعداد تقسیمات بازه زمانی تا t و σ^2 نشان دهنده واریانس می باشد. از معادله بالا نتیجه می گیریم که اگر تعداد تقسیمات بازه زمانی را افزایش دهیم متوسط مربعات جابه جایی کاهش خواهد یافت و در حد بی نهایت زیربازه ($N \rightarrow \infty$)، به صفر میل خواهد کرد ($\langle D^2 \rangle \rightarrow 0$). پس اگر واریانس مستقل از گام زمانی باشد با مشکل روبه رو خواهیم شد. حال اگر واریانس، عدد ثابتی با ضریب $dt^{-1/2}$ باشد با میل کردن تقسیمات بازه زمانی به بی نهایت، رفتاردرستی را مشاهده می کنیم. پس وجودترم $dt^{-1/2}$ در معادله (۸-۱) چنین توجیه می شود. با این فرضیات معادله فوکر-پلانک برای سیستم DPD قالب زیر را به خود می گیرد:

$$\partial_t \rho(r, v, t) \equiv L_C \rho(r, v, t) + L_D \rho(r, v, t) \quad (11-1)$$

که ρ تابع توزیع، r ، v و t نشاندهنده مکان، سرعت و زمان می باشند و اپراتورها چنین تعریف می شوند:



$$L_C \rho(r, v, t) \equiv - \left[\sum_i \mathbf{v}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_{i,j \neq i} \mathbf{F}_{ij}^C \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_i} \right] \rho(r, v, t)$$

$$L_D \rho(r, v, t) \equiv \sum_{i,j \neq i} \mathbf{e}_{ij} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_i} \left[\gamma \omega^D(r_{ij}) \mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij} + \frac{\sigma^2}{2} (\omega^R(r_{ij}))^2 \mathbf{e}_{ij} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_i} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_j} \right) \right] \times \rho(r, v, t) \quad (12-1)$$

در معادله بالا، L_C اپراتور لیوویل^۱ برای سیستم DPD با وجود نیروی بقای است. L_D اثرات نیروهای استهلاکی و تصادفی را در بر دارد و شامل مشتق مرتبه دوم است. نکته جالب این است که معادله (۲-۱۱)، معادله پیوستگی برای تابع توزیع ρ است.

سیستم DPD که قصد شبیه‌سازی آن را داریم سیستمی همدماست که نشان دهنده یک سیستم با تعداد ذره، حجم و دمای ثابت است. برای چنین سیستمی ما باید شرایطی را بررسی کنیم که تحت آن توزیع تعادل برای این سیستم متناظر توزیع گیبس باشد:

$$\rho^{eq}(r, v) = \frac{1}{Z} \exp \left[- \frac{\left(\sum_i \frac{v_i^2}{2} + V(r) \right)}{k_B T} \right] \quad (13-1)$$

که r و v مکان و سرعت، Z نشان دهنده تابع جداسازی^۲، انرژی پتانسیل k_B ثابت بولتزمن و T دمای سیستم است. وقتی که سیستم به حالت تعادل برسد بخش بقای سیستم $L_C \rho^{eq} = 0$ را نتیجه می‌دهد. چون سیستم در حالت تعادل باید شرط $L_D \rho^{eq} = 0$ را ارضا کند پس روابط زیر باید برقرار باشد:

$$\omega^D(r) = \left(\omega^R(r) \right)^2,$$

$$\gamma = \frac{\sigma^2}{2k_B T}. \quad (14-1)$$

¹ Liouville

² Partition function

این دو عبارت تئوری استهلاکی-نوسانی را برای سیستم DPD بیان می‌کنند. این تئوری ضرایب و تابع وزنی نیروهای استهلاکی و تصادفی را به هم وابسته می‌کند. سیستم تحت این شرایط در توزیعی که در معادله (۱-۱۳) داده شده، به حالت تعادل می‌رسد.

۳-۱ استخراج ویسکوزیته از سیال DPD

در این بخش رابطه‌ای برای بدست آوردن ویسکوزیته بیان می‌شود که گروت و وارن آن را ارایه کردند. ویسکوزیته سیال دو مولفه دارد؛ اولین مولفه به دلیل نیروی استهلاکی بین ذراتی است که در خط جریان‌های متفاوت حرکت می‌کنند و دومین مولفه با حل معادله لانگوین برای بدست آوردن ضریب خود دیفیوژن^۱ بدست می‌آید. باید توجه شود که ویسکوزیته‌ای که از این راه بدست می‌آید بدون در نظر گرفتن نیروی بقایی است؛ پس انحراف این معادله از ویسکوزیته سیستم با نیروی بقایی امری بدیهی است. وجود نیروی بقایی در تعیین تحلیلی ویسکوزیته امری بحث بر انگیز است چون استخراج خواص انتقالی بر اساس تئوری جنبشی است. یک فرض اساسی در بدست آوردن این نتایج، در نظر گرفتن فقط برخوردهای دوتایی است. اما وجود نیروهای بقایی منجر به ایجاد پتانسیل بین ذره‌ای می‌شود که فرض اولیه را نادیده می‌گیرد.

شرکت کردن نیروی استهلاکی در تانسور تنش به صورت زیر است:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \left\langle \sum_{i>j} r_{ij\alpha} \mathbf{F}_{ij\beta}^D \right\rangle \quad (15-1)$$

که اندیس‌های یونانی نماینده مولفه‌های فضایی (x, y, z) هستند. فرض می‌کنیم که سیال DPD تحت جریان برشی $v_\alpha = u_{\alpha\beta} r_\beta$ باشد. پس نیروی استهلاکی شکل زیر را به خود می‌گیرد:

$$\mathbf{F}_{ij\beta}^D = \gamma \omega^D(r_{ij}) \mathbf{e}_{ij\beta} \mathbf{e}_{ij\gamma} v_{ij\gamma} = \gamma \omega^D(r_{ij}) \mathbf{e}_{ij\beta} \mathbf{e}_{ij\gamma} u_{\gamma\delta} r_{ij\delta} \quad (16-1)$$

با فرض دانسیته یکنواخت و جایگزین کردن مجموع روی i و j با انتگرال، شکل معادله (۲-۱۵) چنین خواهد شد:

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta} &= \frac{\rho^2}{2} \int \gamma \omega^D(r) \mathbf{e}_\beta \mathbf{e}_\gamma u_{\gamma\delta} r_\delta d^3\mathbf{r} \\ &= \frac{2\pi\gamma\rho^2}{15} \int_0^\infty r^4 \omega^D(r) [u_{\alpha\beta} + u_{\beta\alpha} + \delta_{\alpha\beta} u_{\gamma\gamma}] d^3\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (17-1)$$

¹ Self-diffusion



با استفاده از عبارت بالا ویسکوزیته سینماتیکی سیال DPD از مولفه استهلاکی نتیجه می‌شود:

$$\nu_D = \frac{2\pi\gamma\rho}{15} \int_0^{r_c} r^4 \omega^D(r) dr. \quad (18-1)$$

این عبارت مقادیر مختلفی با تابع وزن‌های مختلف ω^D به خود می‌گیرد. برای بدست آوردن بخش جنبشی ویسکوزیته سیال ما با معادله لانگوین برای این سیستم شروع می‌کنیم، با نادیده گرفتن نیروهای بقایی در سیستم، معادله حرکت ذرات چنین شکلی به خود می‌گیرد:

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_{j \neq i} \mathbf{F}_{ij}^D + \sum_{j \neq i} \mathbf{F}_{ij}^R. \quad (19-1)$$

پس معادله لانگوین برای این ذرات به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} + \frac{\mathbf{v}_i}{\tau} = \mathbf{F}^R \quad (20-1)$$

$$\frac{1}{\tau} = \sum_{j \neq i} \gamma \omega^D(r_{ij}) \frac{\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{e}_{ij}}{3} \quad (21-1)$$

حل معادله لانگوین چنین عبارتی را برای ضریب خود-دیفیوژن^۱ نتیجه می‌دهد:

$$D = \tau k_B T = \frac{45k_B T}{2\pi\gamma\rho r_c^3}. \quad (22-1)$$

ویسکوزیته سینماتیکی متناسب با D است و ثابت تناسب برابر $\frac{1}{2}$ است. پس عبارت نهایی بخش جنبشی ویسکوزیته بدین صورت خواهد بود:

$$\nu_K = \frac{45k_B T}{4\pi\gamma\rho r_c^3} \quad (23-1)$$

پس ویسکوزیته سیال مجموع ویسکوزیته استهلاکی و جنبشی خواهد بود، که در معادلات (۱۸-۱) و (۲۳-۱) نشان داده شده است.

¹ Self-diffusion

۲. بکارگیری عددی DPD

در فصل قبل معادلات روش DPD را شرح دادیم، در مورد سه نیروی بین ذره‌ای در سیستم DPD بحث کردیم، معادلات دیفرانسیل که مکان‌ها و سرعت‌های همه ذرات DPD را به نیروهای بین ذره‌ای مرتبط می‌ساخت بدست آوردیم. حال برای حل این معادلات باید از آنها در زمان انتگرال‌گیری کنیم، که این امر نیازمند شرایط مرزی و اولیه مناسب می‌باشد. انجام همه این مراحل نیازمند بکارگیری DPD به صورت عددی است. موضوع بحث در این فصل شرح این بکارگیری است. در ادامه روش‌های انتگرال‌گیری که در DPD بکار می‌رود را بیان خواهیم کرد. در ادامه دو الگوریتم جستجوی ذرات را شرح خواهیم داد که هزینه محاسبات را بسیار کاهش خواهند داد. در پایان روش‌های اندازه‌گیری کشش سطحی و ویسکوزیته در روش DPD شرح داده می‌شوند.

۱-۲ روش‌های انتگرال‌گیری

در این بخش روش‌های انتگرال‌گیری را بررسی خواهیم کرد که برای انتگرال گرفتن از معادله حرکت در DPD کاربرد دارند و به مزایا و معایب هر کدام اشاره خواهیم کرد. قبل از بیان روش‌های انتگرال‌گیری ابتدا باید با معادله حرکت که نیاز به انتگرال‌گیری دارد آشنا شویم. معادله حرکت در DPD به صورت زیر می‌باشد:

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} &= \mathbf{v}_i, \\ \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} &= \mathbf{f}_i\end{aligned}\quad (1-2)$$

که $\mathbf{r}$ ، $\mathbf{v}$ و $\mathbf{f}$ نشان دهنده بردار مکان، سرعت و نیروی وارد بر ذره i هستند. همانطور که در بخش قبل عنوان شد، نیروی وارد بر هر ذره سه مولفه استهلاکی، تصادفی و بقایی دارد، پس عبارت $\mathbf{f}_i$ چنین است:

$$\mathbf{f}_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\left(-\gamma \omega_D(r_{ij}) (\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij}) \mathbf{e}_{ij} \right) + \left(\sigma \omega_R(r_{ij}) \zeta_{ij} \mathbf{e}_{ij} \right) + \mathbf{f}_{ij}^C \right] \quad (2-2)$$

که اولین ترم درست راست معادله، نیروی استهلاکی، دومین ترم نیروی تصادفی و سومین ترم نیروی بقایی، i شماره ذره، γ ضریب نیروی استهلاکی، σ ضریب تصادفی، ω^D و ω^R تابع وزنی برای نیروهای استهلاکی و تصادفی،



ذره‌ای است. $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$ و $\mathbf{e}_{ij} = (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) / r_{ij}$ ، فاصله بین دو ذره، κ_{ij} متغیر تصادفی با توزیع گوسی و $\mathbf{F}_{ij}^C$ نیروی بقایای بین

هوگربروک و کلمن از الگوریتم اوایلر برای انتگرال گیری از معادله حرکت (۱-۱) استفاده کردند. گام‌های الگوریتم اوایلر چنین هستند:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_i(t + \delta t) &= \mathbf{r}_i(t) + \delta t \mathbf{v}_i(t), \\ \mathbf{v}_i(t + \delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \delta t \mathbf{f}_i(t) \\ \mathbf{f}_i(t + \delta t) &= \mathbf{f}_i(\mathbf{r}(t + \delta t), \mathbf{v}(t + \delta t)). \end{aligned} \quad (3-2)$$

از آنجایی که این الگوریتم مرتبه اول دقت در زمان است، انباشته شدن خطای برشی منجر به افزایش خطا در محاسبه انرژی سیستم خواهد شد. مسئله دیگر بازگشت ناپذیر بودن الگوریتم اوایلر در زمان می‌باشد. زیرا طبیعت گسسته سازی این روش نامتقارن است. منظور از نامتقارن بودن این است که هنگامی که از زمان t به $t + \delta t$ پیش رویم به نیروی وارد بر ذره i احتیاج داریم که این نیرو وابسته به سرعت‌های زمان t است. اما اگر رو به عقب حرکت کنیم یعنی از زمان $t + \delta t$ به t برگردیم ما باید از سرعت‌های زمان $t + \delta t$ استفاده کنیم که منجر به نامتقارنی و بازگشت ناپذیری در زمان خواهد شد.

یک روش که در جهت بهبود روش بالا توسط پاگوناباراگا و همکارانش ارائه شد، روشی بود که وابسته به الگوریتم لیپ-فراگ^۱ بود. در این روش بردارهای سرعت و مکان ذرات به این صورت به روز می‌شوند:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_i(t + \delta t / 2) &= \mathbf{v}_i(t - \delta t / 2) + \delta t \mathbf{f}_i(t), \\ \mathbf{r}_i(t + \delta t) &= \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t) \delta t + \mathbf{f}_i(t) (\delta t)^2 / 2. \end{aligned} \quad (4-2)$$

که $\mathbf{r}$ ، $\mathbf{v}$ و $\mathbf{f}$ نشان دهنده بردار مکان، سرعت و نیرو، t نشان دهنده زمان، i شماره ذره است. مشخصه جالب این روش طبیعت متقارن آن است. منظور از تقارن این است که نیروی ذره i در زمان t به سرعت ذرات در زمان t وابسته است پس بازگشت پذیری در زمان امکان پذیر خواهد بود.

در DPD محاسبه نیروها نیازمند آگاهی داشتن از سرعت‌هاست بنابراین مقدار نیروها در هر زمان باید از سرعت‌های آن زمان بدست آید. پس سیستم باید در هر گام با انجام تکرارهایی به سرعت‌های درست همگرا شود. تکرارها

¹ Leap-frog



در هر گام زمانی، هزینه محاسباتی زیادی به همراه خواهد داشت، اما این عیب را می‌توان با افزایش گام زمانی جبران کرد.

الگوریتم دیگری که در بین محققان *DPD* بسیار محبوب است، الگوریتم سرعت ورله اصلاح شده^۱ می‌باشد. الگوریتم به این ترتیب است:

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_i(t + \delta t) &= \mathbf{r}_i(t) + \delta t \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{2}(\delta t)^2 \mathbf{f}_i(t), \\ \tilde{\mathbf{v}}_i(t + \delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \lambda \delta t \mathbf{f}_i(t) \\ \mathbf{f}_i(t + \delta t) &= \mathbf{f}_i(\mathbf{r}(t + \delta t), \tilde{\mathbf{v}}(t + \delta t)), \\ \mathbf{v}_i(t + \delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{2} \delta t (\mathbf{f}_i(t) + \mathbf{f}_i(t + \delta t)).\end{aligned}\quad (5-2)$$

همه پارامترها مانند الگوریتم‌های قبلی تعریف می‌شوند و λ یک پارامتر متغیر است. انتخاب $\lambda = 0.5$ منتهی به الگوریتم ورله استاندارد خواهد شد. $\tilde{\mathbf{v}}$ سرعت میانی است که به عنوان یک سرعت تخمینی برای محاسبه نیروها استفاده می‌شود. این سرعت‌ها در گام نهایی الگوریتم اصلاح خواهند شد. خواص سیستم مانند فشار و دما بعد از پایان آخرین گام الگوریتم محاسبه می‌شوند.

در این بخش در مورد سه الگوریتم موجود برای انتگرال‌گیری از معادلات حرکت *DPD* بحث کردیم. در این پروژه از الگوریتم سرعت ورله اصلاح شده استفاده خواهیم کرد. اگر چه این روش بازگشت پذیری در زمان را ارضا نمی‌کند اما روشی بسیار دقیق در انتگرال‌گیری از معادلات حرکت با کمترین هزینه محاسباتی است. با استفاده از این الگوریتم می‌توان گام‌های زمانی بزرگتری را برداشت بدون اینکه سیستم از تعادل خارج شود.

¹ Modified velocity verlet

۲-۲ شرایط مرزی

در این بخش شرایط مرزی را بررسی خواهیم کرد که در سیستم DPD با آن برخورد می‌کنیم. در ابتدا شرط مرزی پریودیک و بعد از آن شرط مرزی دیواره را بحث خواهیم کرد.

۲-۲-۱ شرط مرزی پریودیک

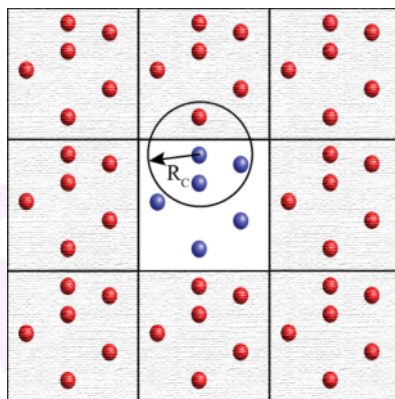
در موارد خاص نیازمندیم که خواص سیال با ابعاد بی نهایت را بدست آوریم. برای شبیه‌سازی چنین سیالی یکی از بهترین روش‌ها، استفاده از شرط مرزی پریودیک است. استفاده از این شرط مرزی به این معنی است که خواص سیال طبیعی پریودیک دارد و دامنه محاسباتی با تصاویر خود میل به بی نهایت دارد. ما در این بخش بکارگیری این شرط مرزی را در DPD بررسی خواهیم کرد. البته بحث شرط مرزی پریودیک، بحثی عمومی برای روش‌های مبنا ذره‌ای مانند MD و SPH ^۱ است.

شرط مرزی پریودیک از کوتاه برد بودن نیروها استفاده می‌کند. در شبیه‌سازی که طول دامنه محاسباتی L ، از دو برابر شعاع موثر r_c ، بزرگتر باشد می‌توان از قانون کمترین تصویر^۲ استفاده کرد. قانون کمترین تصویر بیان می‌کند که هر ذره در دامنه محاسباتی با نزدیکترین تصویر $N-1$ ذره دیگر بر هم کنش خواهد داشت، N تعداد کل ذرات سیستم است.

شکل ۲-۱ شرط مرزی پریودیک در یک سیستم دو بعدی را نشان می‌دهد، جعبه محاسباتی دارای ذرات آبی با تصاویر خودش، سلولهای قرمز، می‌تواند برهم کنش داشته باشد. با توجه به شکل، هر ذره آبی می‌تواند با ذرات همسایه که آبی و قرمز هستند بر هم کنش داشته باشد. طبق قانون کمترین تصویر، این ذره فقط می‌تواند با یک ذره بر هم کنش داشته باشد. بر هم کنش بین ذرات آبی و قرمز هیچ تفاوتی با بر هم کنش ذرات آبی با هم ندارد پس در یافتن لیست ذرات همسایه ذره آبی باید ذرات قرمز را هم به حساب آورد.

^۱ Smooth Particle Hydrodynamics

^۲ Minimum image convention



شکل ۲-۱: شرط مرزی پریودیک در یک سیستم دو بعدی؛ جعبه محاسباتی دارای ذرات آبی با تصاویر خودش، ذرات قرمز، می‌تواند برهم کنش داشته باشند.

۲-۲-۲ شرط مرزی جامد

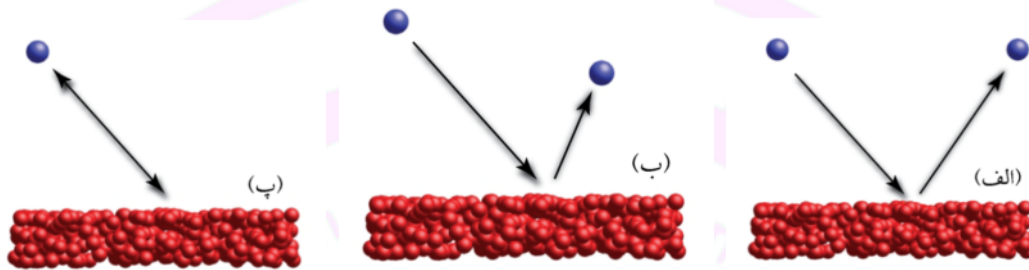
برای جامد کردن ذرات DPD ، می‌توان سرعت آنها را صفر کرد و از ورود آنها در الگوریتم انتگرال‌گیری جلوگیری کرد. بدین ترتیب DPD قادر خواهد بود مسایل برهم کنش جامد- سیال از جمله وجود جسم صلب درون سیال و دیواره جامد در کنار سیال، را براحتی شبیه‌سازی کند.

اما مشکلی که در DPD معمول به آن برمی‌خوریم این است که به دلیل نیروی هسته نرمی که بین ذرات DPD وجود دارد، اگر سرعت ذرات سیال زیاد باشد به راحتی می‌توانند به درون این دیواره جامد نفوذ کنند و شرط جامد بودن را زیر سوال ببرند. برای فایق آمدن بر این مشکل رونجا و همکارانش با قرار دادن یک دیواره تشکیل شده از ذرات جامد و در نظر گرفتن قوانین خاصی برای برخورد ذرات سیال با این دیواره، شرط مرزی جامد را ارایه کردند. در این قسمت روش رونجا و همکارانش را بیان خواهیم کرد.

رونجا و همکارانش بعد از جامد کردن ذرات سیال به عنوان دیواره برای برهم کنش بین سیال و دیواره سه حالت مختلف را در نظر گرفتند. این قوانین برخورد برای بازگرداندن ذراتی که به درون دیواره جامد نفوذ کرده اند، بکار می‌روند. برخورد آینه‌ای^۱ به گونه‌ای است که مولفه سرعت موازی دیواره بدون تغییر می‌ماند اما مولفه عمودی در جهت عکس اعمال خواهد شد. برخورد ماکسولی به گونه‌ای است که ذراتی که به دیواره نفوذ می‌کنند با توزیع ماکسولی

¹ Specular reflection

سرعت، حول سرعت دیوار به درون سیال باز می گردند. برخورد بنس یک به گونه ای است که ذره ای که به درون دیوار نفوذ می کند با عکس شدن هر دو مولفه سرعت، به درون سیال باز می گردد. حالت های گفته شده در **Error!** **Reference source not found.** نشان داده شده اند.



شکل ۲-۲: برخورد (الف) آینه ای، (ب) ماکسولی، (پ) بنس یک روش های بازگرداندن ذره نفوذی به دیوار هستند.

۳-۲ الگوریتم جستجوی ذرات

همانطور که در بخش نیروها بیان شد، نیروی بین ذرات DPD برد کوتاهی دارد. این خصوصیت این امکان را به ما می دهد تا بتوانیم هزینه محاسباتی جستجوی ذرات را کاهش دهیم. با یک دید ساده مجبور هستیم که برای یک ذره، مکان $N-1$ ذره دیگر را بدانیم، پس در کل هزینه محاسبات N^2 خواهد بود. در جهت کاهش این محاسبات از دو روش لیست همسایگی ورله ۲، ساختار سلولی و لیست زنجیره ای ۳ استفاده می شود که در زیر به تشریح آنها خواهیم پرداخت.

¹ Bounce-back

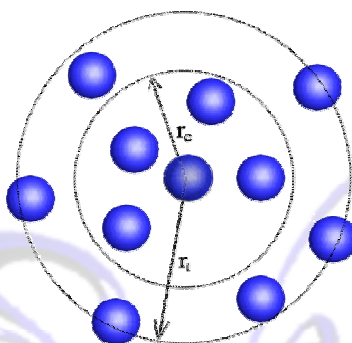
² Verlet neighbor list

³ Cell structure and Linked-list

۲-۳-۱ لیست همسایگی ورله

چون نیروها در DPD کوتاه برد هستند، هر ذره با تمامی ذرات سیستم بر هم کنش نخواهد داشت. پس اگر برای هر ذره لیستی را تهیه کنیم که شامل ذراتی است که با آنها برهم کنش دارد، می‌توانیم هزینه محاسبات جستجوی ذرات را کاهش دهیم. بر این اساس از جستجوی ذراتی که به دور از ذره مورد نظر هستند خودداری می‌کنیم. این ایده‌ای است که از آن ایجاد لیست همسایگی منشا گرفته است. در این بخش لیست همسایگی ورله، تشریح خواهیم کرد.

اگر یک کره حول یک ذره تصور کنیم که فقط شامل ذراتی است که ذره مورد نظر با آنها بر هم کنش دارد، شعاع این کره برابر شعاع موثر r_c خواهد بود. حال ذرات درون کره‌ای که کمی از کره شعاع موثر بزرگتر است، لیست ورله را تشکیل می‌دهد. این لیست به صورت دوره‌ای به روز خواهد شد. شکل ۲-۳ این مفهوم را نشان می‌دهد.



شکل ۲-۳: لیست ورله، ذرات درون دایره با شعاع r_l است.

شعاع برای ایجاد لیست ذرات همسایه r_l به گونه‌ای انتخاب می‌شود که ذراتی که قصد بر هم کنش با ذره مورد نظر را دارند قبل از به روز شده لیست در شعاع r_l از این ذره باشند. این امر میسر خواهد شد اگر r_l به گونه‌ای انتخاب شود که شرط زیر برقرار باشد:

$$(r_l - r_c) \geq v \delta t \times f \quad (۲-۶)$$

که v سرعت متوسط ذرات DPD است، δt بیانگر گام زمانی و f بسامدی است که در آن لیست دوباره ساخته خواهد شد. زمانی که از لیست همسایگی ورله استفاده کنیم هزینه محاسبات از $O(N^2)$ به $O(N) + \frac{1}{f}O(N^2)$ کاهش پیدا خواهد کرد. ظاهر شدن ترم $O(N^2)$ به این دلیل است که لیست ورله هر f سیکل به روز خواهد شد.

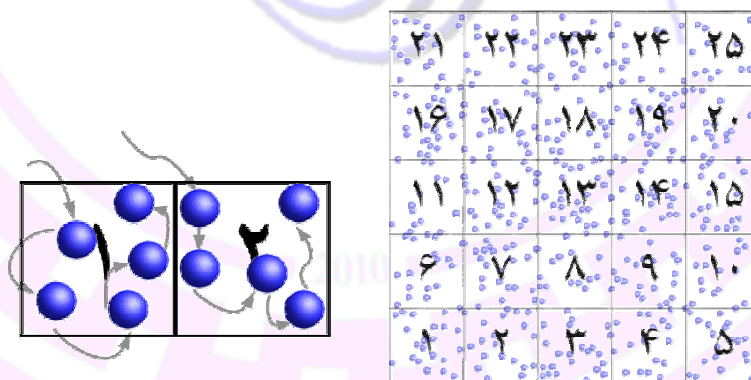
۲-۳-۲ ساختار سلولی و لیست زنجیره‌ای

در این روش برای جستجوی ذرات، دامنه محاسباتی به یک شبکه‌ی $M \times M \times M$ تقسیم می‌شود. نمای دو بعدی آن شکل ۲-۴ می‌باشد. این شبکه به گونه‌ای است که ابعاد هر سلول $l = L / M$ ، از شعاع موثر بزرگتر باشد. پس در شکل ۲-۴ همسایه‌های ذره‌ای که در سلول ۱۳ قرار دارد باید در سلول‌های ۷، ۸، ۹، ۱۲، ۱۳، ۱۴، ۱۷، ۱۸ و ۱۹ پیدا شوند. در یک سیستم دو بعدی در هر سلول تقریباً $N_c = N / M^2$ ذره و در سیستم سه بعدی $N_c = N / M^3$ ذره در هر سلول خواهیم داشت. پس در استفاده از ساختار سلولی فقط $9N_c$ جفت ذره (یا فقط $4.5NN_c$ ، اگر از مزایای قانون سوم نیوتن بهره گیریم) را جستجو خواهیم کرد که در مقابل N^2 کاهش چشم گیری در هزینه محاسبات داریم. اگر در سه بعد ساختار سلولی را بکار گیریم، $27NN_c$ (یا $13.5NN_c$ با در نظر گرفتن قانون سوم نیوتن) برخورد را باید بیابیم.

ساختار سلولی را معمولاً همراه با روش لیست‌های زنجیره‌ای بکار می‌گیرند؛ در مرحله اول سلول هر ذره مشخص خواهد شد. این عملیات بسیار سریع انجام می‌شود پس می‌توان در هر گام زمانی آن را تکرار کرد. در مرحله بعد در هر سلول آرایه‌ای تشکیل می‌شود که ذرات را به صورت زنجیر وار به هم متصل می‌کند، یعنی

ذره‌ای که بعد از i در زنجیر قرار دارد $Head(i) =$

در شکل ۲-۴ طرف راست جعبه محاسباتی نشان داده شده که به سلول‌های کوچکتری تقسیم شده است و در شکل چپ نمونه‌ای از لیست زنجیره‌ای درون یک سلول نشان داده شده است.



شکل ۲-۴: ساختار سلولی و لیست زنجیره‌ای

چون در روش DPD بر هم کنش‌ها از قانون سوم نیوتن پیروی می‌کنند، می‌توان از این خاصیت بهره گرفت به طوری که برهم کنش دو ذره فقط یکبار محاسبه شود؛ به این ترتیب که در مرحله اول همسایه‌های هر ذره را درون سلول خودش جستجو می‌کنیم بطوریکه با حرکت بر روی زنجیره‌ی ذرات آن سلول، در تشکیل لیست همسایه هر ذره، ذراتی

را که در زنجیر پشت سر گذاشته‌ایم به حساب نیایند. با این روند بر هم کنش بین ذره i و j فقط یکبار محاسبه می‌شود. در مرحله بعدی همسایه‌های ذره مورد نظر را در سلول‌های دیگر جستجو خواهیم کرد. در این مرحله نیز از قانون سوم نیوتن استفاده می‌کنیم به اینگونه که فقط سلول‌های بالا و راست سلول شامل ذره مورد نظر را جستجو خواهیم کرد. با اینکه سلول ۱۳ با ۱۲ همسایه است، فقط برهم کنش سلول ۱۳ را با سلول‌های ۹، ۱۴، ۱۸ و ۱۹ در نظر می‌گیریم. چون برهم کنش سلول ۱۳ با ۱۲ زمانی محاسبه شده است که تمرکز روی سلول ۱۲ بوده است. بنابراین کمال استفاده را از قانون سوم نیوتن در محاسبه نیروهای می‌بریم.

۴-۲ بکارگیری موازی DPD

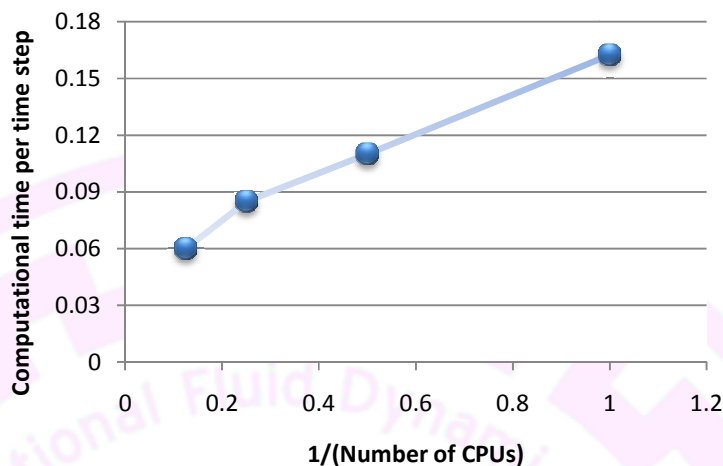
DPD یک روش درشت دانه‌ای است که از متوسط‌گیری از جزییات سطح مولکولی بدست می‌آید. با وجود درشت دانه بودن ذرات، تعداد ذرات مورد نیاز برای شبیه‌سازی DPD می‌تواند از $10^e + 2$ برای یک سیستم تعادلی ساده تا $10^e + 5$ برای ۱۰ ذره برای یک سیستم پیچیده تغییر کند. بنابراین اهمیت شبیه‌سازی موازی DPD در اجرای سنگین خود را نشان می‌دهد.

می‌توان برای موازی‌سازی کد سریال از الگوریتم دسته‌بندی اتم‌ها^۱ استفاده کرد. این الگوریتم با استفاده از OpenMP در محیط حافظه مشترک^۲ پیاده شده است. دلیل استفاده از این الگوریتم سادگی و انعطاف پذیری آن در بهره‌گیری از تعداد مختلف پردازنده است.

این الگوریتم تعداد N ذره را در بین P پردازنده تقسیم می‌کند. بار هر پردازنده N / P در نظر گرفته می‌شود تا تعادل بین همه بوجود آید. چون ممکن است به دلیل دبی ورودی تعداد ذرات تغییر نماید در ابتدای هر گام تقسیم ذرات بین پردازنده‌ها انجام می‌شود. این الگوریتم از قانون سوم نیوتن برای بدست آوردن بر هم کنش بین ذرات استفاده می‌کند. حال الگوریتم را بطور خلاصه شرح می‌دهیم.

^۱ Atom decomposition

^۲ Shared memory



شکل ۲-۵: هزینه محاسبات هر گام زمانی نسبت به تعداد پردازنده‌ها

سه قسمت اصلی برنامه که نیاز به موازی شدن دارند عبارتند از الگوریتم جستجو، الگوریتم محاسبه نیروها و الگوریتم انتگرال گیری. در بخش ۲ نشان داده شد که در الگوریتم جستجو دامنه محاسباتی به M^3 سلول کوچکتر تقسیم می‌شود. چون جستجوی ذرات همسایه یک سلول به طور مستقل از سلول‌های دیگر انجام می‌شود پس بررسی ذرات هر سلول به یک پردازنده اختصاص داده می‌شود. در ضمن چون حرکت سیال سطح آزاد موجب می‌شود تعدادی از سلول‌ها بدون ذره باقی بمانند و یک توزیع غیرهمگن ذرات وجود داشته باشد، هیچ پیش بینی برای توزیع سلول‌ها در بین پردازنده‌ها صورت نمی‌گیرد بلکه در حین جستجو، هر پردازنده که کار سلول خود را سریعتر از دیگران به پایان رساند، سلول بعدی را به انحصار می‌کشد، در حالی که می‌توانست در اختیار هر پردازنده دیگری باشد. در الگوریتم انتگرال گیری و محاسبه نیروها به راحتی اتم‌ها بین پردازنده‌ها تقسیم می‌شوند و در جایی که پردازنده‌ها رقابت برای دسترسی به خانه حافظه مشترک داشتند، از متغیر مجازی استفاده می‌شود. شکل افزایش سرعت محاسبات تابعی از تعداد پردازنده را نشان می‌دهد.

۵-۲ خواص سیال DPD

طراحی یک شبیه‌سازی جریان سیال نیازمند آگاهی به خواص سیال و شرایط ترمودینامیکی حاکم بر آن است. در روش های ماکروسکوپیک ویسکوزیته، کشش سطحی و فشار می‌توانند ورودی‌های مسئله باشند و در روش MD نیروهای بین ذرات که ورودی مسئله هستند از پیوندهای بین مولکولی استخراج می‌شوند و ذرات آن هر خصوصیت فیزیکی از خود نشان دهند، خود واقعیت فیزیکی خواهد بود. اما در DPD به دلیل نرم بودن نیروها و مجازی بودن آنها نمی‌توان مقادیر بعضی از این نیروها را از پیش تعیین کرد یا بعضی خواص سیال DPD را پیش از آزمایش (شبیه‌سازی) تعیین کرد. به عنوان مثال هیچ ایده‌ای وجود ندارد که قبل از شبیه‌سازی آب و روغن در تماس با یکدیگر، نیروی بقایای بین این دو در محل سطح مشترک چه مقدار باشد. به همین سبب تعیین خواص سیال (دانسیته، ویسکوزیته و کشش سطحی)، شرایط ترمودینامیکی آن (مانند فشار و دما) و سینماتیک جریان قبل از شبیه‌سازی و حین آن بحث این بخش را در بر می‌گیرد.

۶-۲ چگالی

در DPD تعداد ذرات بر واحد حجم را چگالی عددی می‌نامند و تا زمانی که جرم ذرات واحد در نظر گرفته شود، چگالی عددی و چگالی مفهوم یکسانی را می‌رسانند. چگالی کلی سیستم یک پارامتر ورودی محسوب می‌شود و با توجه به اندازه جعبه محاسباتی و تعداد ذراتی که درون آن قرار داده می‌شود قابل تعیین است.

سیال DPD به دلیل دافعه بین ذراتش، به سرعت تمام دامنه محاسباتی را پر خواهد کرد پس دانسیته این سیال را حجم دامنه محاسباتی مشخص می‌کند. اما گر سیال سطح آزاد دارای نیروی بقایای دافعه و جاذبه، در یک فضای محاسباتی بزرگی قرار داده شود، دانسیته‌ای متناظر با اندازه نیروهای بقایای خود بدست خواهد آورد که مستقل از اندازه جعبه محاسباتی می‌باشد.

با وجود اینکه دانسیته عددی ذرات در یک شبیه‌سازی DPD پارامتر دلخواهی است، اما در شبیه‌سازی های رایج، دانسیته در کمترین مقدار برابر ۳ در نظر گرفته می‌شود. دانسیته کمتر به معنی تعداد کمتر همسایه های هر ذره است و با توجه به آماری بودن روش DPD ، از دقت این روش کاسته می‌شود. شبیه‌سازی مایعات معمولاً با دانسیته حدود ۵



انجام می پذیرد. در DPD هر چه دانسیته عددی افزایش یابد هزینه محاسبات افزایش خواهد یافت. پس موازنه‌ای بین دقت شبیه‌سازی و دانسیته عددی وجود خواهد داشت.

همانطور که در بالا ذکر شد، دانسیته کلی سیستم براحتی قابل محاسبه شدن است، اما محاسبه دانسیته در یک نقطه خاص از فضای محاسباتی یا بدست آوردن توزیع دانسیته نیازمند به کار بستن روشی مناسب است. یک روش ساده اما کاربردی به این گونه است که فضای محاسباتی شبکه بندی شده و به سلول های کوچکتر تقسیم می‌شود. کمترین بعد هر سلول 0.2^r در نظر گرفته می‌شود، سلول های کوچکتر نوسانات دانسیته بیشتری را نشان می دهند. دانسیته هر سلول با توجه به ذرات درون آن محاسبه می‌شود. هنگامی که شرط پایداری حاکم باشد، تعداد ذرات ورودی به هر سلول در گام‌های زیادی جمع شده و بر تعداد گام‌ها و حجم سلول تقسیم می‌شود تا بدین گونه دانسیته هر سلول با دقت بیشتری محاسبه شود. لازم به ذکر است که از این روش برای استخراج توزیع سرعت نیز استفاده می‌شود.

۷-۲ فشار و دما

حرکت نوسانی ذرات در DPD آن را به روش های مولکولی شبیه می‌کند. در یک سیستم DPD انرژی جنبشی ذرات، دمای سیستم را تعریف می‌کنند:

$$\frac{d k_B T}{m} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N v_i^2$$

Error! No text of specified style in ۲)
(۱)-document.

که در آن k_B ثابت بولتزمن، T دمای سیستم، d ابعاد سیستم، m جرم هر ذره، N تعداد ذرات و v_i مقدار سرعت نوسانی هر ذره است. البته باید توجه داشت که هنگامی که سیال جریان دارد، جهت بدست آوردن سرعت نوسانی واقعی هر ذره باید سرعت توده سیال را از آن کم کرد. در یک شبیه‌سازی DPD دمای سیستم یک پارامتر ورودی است و با تنظیم ضریب نیروی استهلاکی و تصادفی، طبق تئوری استهلاکی-نوسانی معادله **Error! Reference source not found.** تعیین می‌شود.

فشار در یک سیستم DPD به صورت لحظه‌ای در حین شبیه‌سازی از معادله زیر محاسبه می‌شود:

$$p = \rho k_B T + \frac{1}{3V} \sum_i \sum_{j>i}^N \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{f}_{ij}$$
$$= \rho k_B T + \frac{1}{3V} \sum_i \sum_{j>i}^N \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{F}_{ij}^C$$

Error! No text of specified style in ۲)
(۲)-document.

که در آن f_{ij} چنین تعریف می شود:

$$f_{ij} = F_{ij}^R + F_{ij}^D + F_{ij}^C$$

Error! No text of specified style in)
(۳-document.

و ρ دانسیته و V حجم سیستم می باشد. البته در شبیه سازی می توان بجای f_{ij} از F_{ij}^C استفاده کرد، زیرا زمانی که توزیع بولتزمن در سیستم حاکم باشد فشار نیروی استهلاکی و نوسانی همدیگر را خنثی می کنند. پس نتیجه می گیریم که ترم اول معادله (۲-Error! No text of specified style in document.۲)، نشان دهنده فشار ایده آل سیستم است.

۸-۲ ویسکوزیته

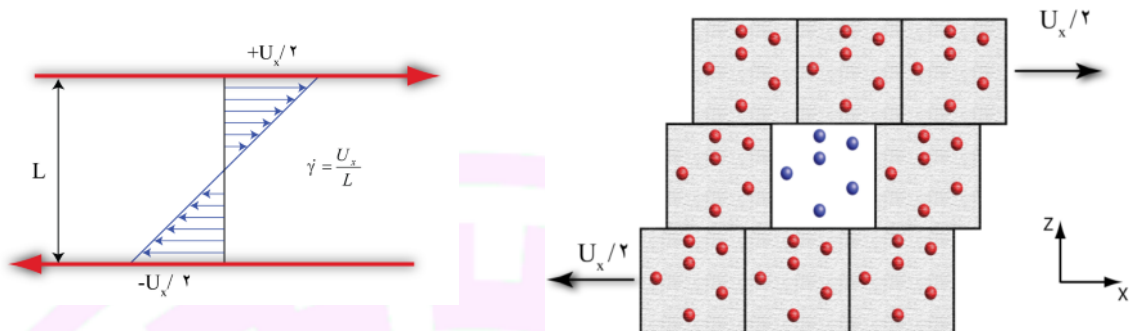
در بخش ۱-۳ ویسکوزیته سیال DPD را تابعی از γ استخراج کردیم، اما این نتیجه در غیاب نیروی بقایی بدست آمده و پیش بینی ویسکوزیته فقط در این شرایط صادق است. شبیه سازی سیال غیر ایده آل اعمال نیروی بقایی را به همراه دارد پس تنها راه باقی مانده استفاده از آزمایشاتی است که بتوان ویسکوزیته سیال را اندازه گرفت. ویسکوزیته سیال را می توان با دو آزمایش لیز-ادوارد^۱ و جریان پوازی^۲ بدست آورد که در ادامه بررسی می شوند.

روش لیز-ادوارد

این روش در سال ۱۹۷۲ برای مدل کردن جریان کوئت در روش MD ارائه شد. در این روش برای تولید دیواره ها از مرزهای پر یودیک متحرک استفاده می شود. با استفاده از این عمل دیگر نیازی به مدل کردن دیواره ها نمی باشد و اثرات نامطلوب دیواره مانند نوسانات کنار مرزها، خود به خود حذف می گردد. شماتیک این شرط مرزی در شکل نمایش داده شده است.

¹ Lees-Edward

² Poiseuille flow



شکل Error! No text of specified style in document. ۱- جعبه‌های پرپودیک در روش لیز- ۲- پروفیل سرعت خطی در روش لیز-ادوارد

جعبه‌های پرپودیک وسطی همگی ثابت بوده و جعبه‌های بالایی با سرعت $U_x/5$ به سمت راست و جعبه‌های پرپودیک پایینی با همان سرعت به سمت چپ در حرکت می‌باشند. در هنگام شبیه‌سازی تنها جعبه‌ی پرپودیک وسطی در نظر گرفته می‌شود و هنگامی که یک ذره از بالای جعبه خارج شود، هنگام بازگشت از پایین، مکان آن به اندازه‌ی $U_x \Delta t$ به سمت چپ انتقال داده شده و سرعت آن به اندازه‌ی U_x کاهش داده می‌شود. به همین ترتیب اگر ذره‌ای از پایین جعبه‌ی پرپودیک خارج شود، هنگام بازگشت از بالا، مکان آن به اندازه‌ی $U_x \Delta t$ به سمت راست انتقال داده شده و سرعت آن به اندازه‌ی U_x افزایش داده می‌شود. با این کار پروفیل سرعت تشکیل شده، مانند شکل Error! No text of specified style in document. ۲-۲، به صورت خطی خواهد شد. شیب این نمودار، نرخ برش را نشان می‌دهد. مقدار تنش برشی را نیز می‌توان از مولفه‌های غیر قطری تانسور تنش محاسبه کرد:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \left\langle \sum_i^N m_i \mathbf{u}_{i\alpha} \cdot \mathbf{u}_{i\beta} + \sum_i^N \sum_{j>i}^N \mathbf{r}_{ij\alpha} \cdot \mathbf{f}_{ij\beta} \right\rangle \quad \text{Error! No text of specified style in document. (۴-۲)}$$

در این رابطه m جرم ذرات، u سرعت نوسانی ذرات (سرعت ذره نسبت به سرعت توده سیال)، $\mathbf{r}$ فاصله‌ی میان ذرات i و j ، نیروی میان آنها و α و β جهت محورها می‌باشند. علامت $\langle \dots \rangle$ نشان‌دهنده‌ی میانگین‌گیری بر روی کل زمان اجرا می‌باشد. قسمت اول رابطه‌ی (Error! No text of specified style in document. ۴-۲) نشان‌دهنده‌ی تنش ناشی از مومنتم ذرات و قسمت دوم، نشان‌دهنده‌ی تنش ناشی از برخورد ذرات می‌باشد.

هنگامی که مقدار تنش و نرخ برش مشخص شود، لزجت به راحتی مشخص می‌گردد. به عنوان مثال با فرض اینکه برش در جهت x عمل کند و نرخ برش برابر $\dot{\gamma}$ باشد، آنگاه لزجت برابر است با:

$$\mu = \frac{\sigma_{zx}}{\dot{\gamma}}$$

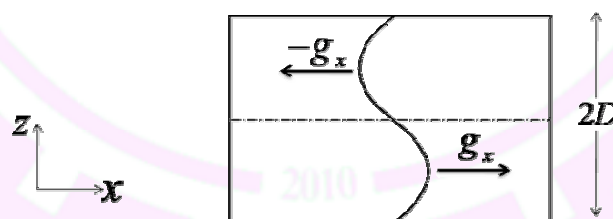
Error! No text of specified style in ۲)

(۵-document.

در این روش، نرخ برش در عرض کانال ثابت می‌باشد و بنابراین به کمک آن می‌توان لزجت سیالات غیرنیوتونی را نیز محاسبه کرد. لزجت سیالات غیرنیوتونی وابسته به نرخ برش می‌باشد.

روش جریان پوازی

یکی دیگر از راه‌های محاسبه لزجت، مدل کردن جریان در میان دو صفحه تخت می‌باشد. برای این نوع جریان جواب تحلیلی وجود دارد و اگر بتوان در شبیه‌سازی DPD یک مدل‌سازی دقیق از این جریان انجام داد، آنگاه می‌توان لزجت را محاسبه نمود. همانطور که توضیح داده شد، مدل‌سازی دیواره در DPD دارای مشکلات نوسان در کنار دیواره می‌باشد. در روش جریان پوازی پریودیک، از مزایای مرز پریودیک برای تولید مرزها در جریان پوازی استفاده می‌شود تا اثرات نامطلوب دیواره، مانند نوسانات در پروفیل دما و چگالی، حذف گردد. شماتیکی از مرزها و شکل جریان در شکل ۲۸ نشان داده شده است.



شکل ۲-۸: نمایی از جریان پوازی پریودیک

در روش DPD برای ایجاد جریان در راستای دلخواه، کافی است که به ذرات یک نیروی حجمی در آن راستا وارد گردد. در روش جریان پوازی پریودیک، دو جریان با جهت‌های متفاوت در یک جعبه پریودیک ایجاد می‌کنند. این جریان‌ها توسط دو نیروی حجمی که در راستاهای متفاوت عمل می‌کنند، ایجاد می‌شود. به دلیل وجود جریان‌های غیر همسو،

شرط عدم لغزش و عدم نفوذ به طور خودکار ارضا می گردد. پروفیل سرعت تحلیلی برای این جریان با استفاد از معادله ی ناویر-استوکس به دست می آید که به صورت زیر می باشد:

$$u_x(z) = \frac{\rho g_x (D - z^2)}{2\mu}$$

Error! No text of specified style in)
(document. ۶-۲)

که در آن g_x نیروی حجمی وارد شده به ذرات، D نصف عرض کانال ρ چگالی و μ لزجت می باشد. مقدار دبی حجمی نیز با انتگرال گیری از پروفیل سرعت در راستای عرض کانال به دست می آید:

$$Q = \frac{\rho g_x D^3}{12\mu}$$

(۷-۲)

حال کافی است که در روش DPD مقدار دبی به صورت عددی و با داشتن پروفیل سرعت، اندازه گیری شود و در رابطه ی (۷-۲) جایگذاری گردد. از آنجائیکه به غیر از لزجت، دیگر پارامترها مشخص می باشند، به راحتی می توان لزجت را به دست آورد.

در این روش برخلاف روش لیز-ادوارد نرخ برش در راستای کانال تغییر می کند و بنابراین تنها برای تعیین لزجت سیالات نیوتونی قابل استفاده می باشد. یکی از مزایای این روش، عدم نیاز به محاسبه ی تانسور تنش می باشد.

۹-۲ کشش سطحی

نیروی متفاوتی که ذرات دو سیال مختلف در تماس با یکدیگر به هم وارد می کنند، علت ایجاد کشش سطحی است. اما رابطه تحلیلی برای ارتباط دادن این نیرو در DPD به مقدار کشش سطحی وجود ندارد مگر اینکه آن را با آزمایش محاسبه کرد. این آزمایش بدین شکل است که دو سیال با حجم یکسان در کنار هم، در یک جعبه پرپودیک قرار داده می شوند (شکل). با فرض اینکه نیروی بقایای بین فازی به اندازه کافی بزرگ باشد، دو سیال بطور مخلوط نشدنی تشکیل سطح مشترک می دهند. سپس کشش سطحی بین دو سیال از رابطه ایروین-کرکوود^۱ محاسبه می شود:

$$\Gamma = \int \left[p_{zz} - \frac{1}{2}(p_{xx} + p_{yy}) \right] dz$$

Error! No text of specified style in)
(document. ۸-)

¹ Irving-Kirkwood



که در آن p_{xx} ، p_{yy} و p_{zz} مولفه های قطری تانسور تنش هستند و سطح مشترک دو سیال در صفحه xy و عمود بر محور z قرار دارد. به آسانی می توان نشان داد که:

$$\int p_{\alpha\beta}(\alpha, \beta = x, y, z) dz = L \langle p_{\alpha\beta} \rangle \quad (9-2)$$

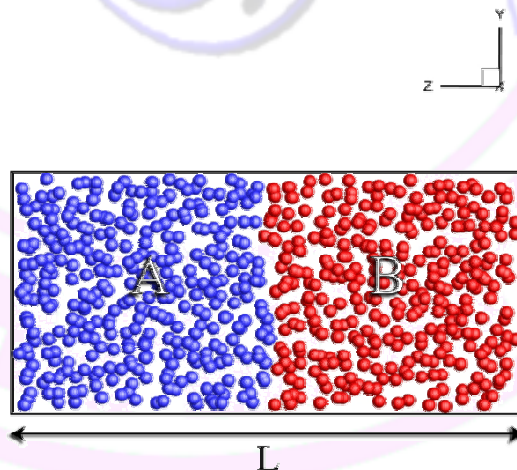
که ارتفاع جعبه پرئودیک است. براکت زاویه دار نشان دهنده متوسط گیری در حین شبیه سازی است. با استفاده از نتیجه معادله (9-2)، معادله (8-Error! No text of specified style in document.) چنین می شود:

$$\Gamma = \frac{L}{2} \left[\langle p_{zz} \rangle - \frac{1}{2} (\langle p_{xx} \rangle + \langle p_{yy} \rangle) \right] \quad \text{Error! No text of specified style in } (10\text{-document.})$$

وجود ۲ در مخرج به این دلیل است که در جعبه پرئودیک دو سطح مشترک وجود دارد. مولفه های فشار با استفاده از تئوری ویریال به صورت زیر محاسبه می شوند:

$$p_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} \rho k_B T + \frac{1}{V} \sum_i \sum_{j>i}^N \mathbf{r}_{ij\alpha} \mathbf{F}_{ij\beta} \quad \text{Error! No text of specified style in } (11\text{-document.})$$

که در آن $\mathbf{r}_{ij\alpha}$ مولفه α در جهت α و $\mathbf{F}_{ij\beta}$ مولفه β در جهت β است. شبیه سازی آنقدر ادامه می یابد تا مقادیر متوسط مولفه های فشار در زمان اجرا به دلیل نوسانات سیستم تغییر نکند. در نهایت بعد از محاسبه $\langle p_{\alpha\beta} \rangle$ ، کشش سطحی بین دو سیال از رابطه (10-Error! No text of specified style in document.) استخراج می شود.



شکل ۹-۲: برای محک زدن کشش سطحی، دو سیال با حجم یکسان در کنار هم در یک جعبه پرئودیک قرار داده می شوند.



CFD Team
Isfahan
University
of
Technology

در محاسبه کشش سطحی سیال سطح آزاد دقیقاً مراحل بالا طی می‌شود با این تفاوت که یک نیمه جعبه پریودیک خالی از ذره رها می‌شود.

