

RAFAŁ LESZEK OSSOWSKI

Zakład Konstrukcji Stalowych

Wydział Budownictwa, Architektury i Inżynierii Środowiska

Politechniki Łódzkiej

MARCIN KAMIŃSKI

Zakład Konstrukcji Stalowych

Wydział Budownictwa, Architektury i Inżynierii Środowiska

Politechniki Łódzkiej

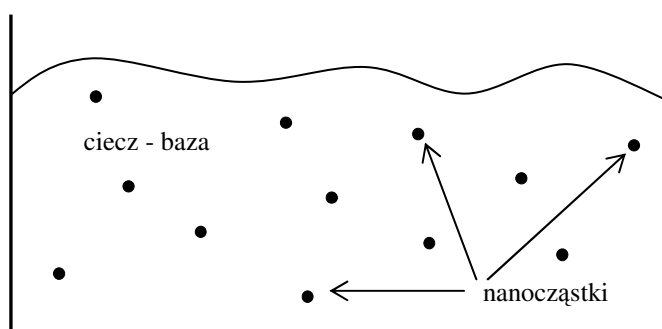
**SYMULACJA KOMPUTEROWA
FIZYCZNYCH WŁASNOŚCI PŁYNÓW
Z NANOCZĄSTKAMI**Opiniodawca: **prof. dr hab. inż. Paweł Śniady**

W artykule przedstawiono porównanie metod probabilistycznej i statystycznej, zastosowanych do analizy numerycznej fizycznych właściwości efektywnych płynów zawierających nanocząstki. Wyniki otrzymane metodą probabilistyczną, opartą na Uogólnionej Metodzie Perturbacji (GPM) zostały porównane ze statystyczną metodą Monte-Carlo. W obu przypadkach przetestowane zostały cztery wielkości fizyczne – ciepło właściwe mieszaniny, lepkość, przewodnictwo cieplne oraz gęstość, które mają niebagatelne znaczenie w procesach technologicznych. Podczas analizy numerycznej problemu procentowa zawartość nanostruktur w cieczy bazowej została przyjęta jako wejściowy parametr losowy, podlegający rozkładowi Gaussa. Wszystkie eksperymenty komputerowe przeprowadzono w środowisku MAPLE, a otrzymane rezultaty wykazują dużą zgodność z danymi doświadczalnymi i zbieżność obydwu metod numerycznych.

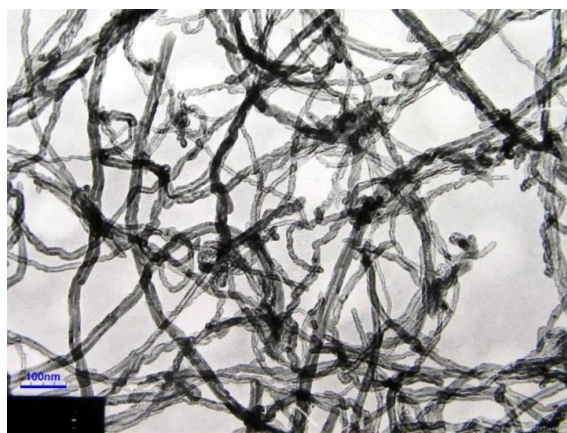
1. Wprowadzenie

Określanie wartości efektywnych dla kompozytów powstałych z połączenia faz stałych, jak również mieszanin wielofazowych jest przedmiotem badań teorii homogenizacji [1, 4]. Od prawie stu lat opracowywane są modele matematyczne,

obliczeniowe oraz, od niedawna, eksperymentalne, oparte chociażby na Metodzie Elementów Skończonych w tej dziedzinie [3]. Wraz z rozwojem mikroskopii elektronowej i tunelowej, oprócz skali mikro i mezo, zaczęto się interesować również skalą nano-, gdzie dużą rolę odgrywają oddziaływania między cząsteczkami. W tym przypadku można w stosunkowo łatwy sposób sprawdzić poprawność homogenizacji z prognoz opartych na badaniach eksperymentalnych. Nanociecze to kolejny krok w kierunku zmiany, ulepszenia i projektowania właściwości fizycznych takich jak gęstość, przewodnictwo cieplne, lepkość i pojemność cieplna dla najczęściej używanych cieczy. Nanociecze składają się z płynnej bazy z domieszką stałą w postaci nanocząstek, czyli takich, których wielkość jest mniejsza niż 100 nm. Zawartość domieszki zwykle nie przekracza 4% całkowitej objętości otrzymanej mieszaniny.



Rys. 1. Budowa schematyczna nanocieczy
Fig. 1. A structure of the nanofluid



Rys. 2. Nanorurki węglowe – obraz ze Skaningowego Mikroskopu Elektronowego (SEM)
Źródło – Chengdu Alpha Nano Technology Co., Ltd – www.diytrade.com
Fig. 2. The carbon nanotubes – SEM image

Wspomnianą bazę może stanowić dowolna ciecz organiczna lub woda, a do najczęściej używanych domieszek należą cząsteczki metali (*Au*, *Cu*), tlenków (*CuO*, *Al₂O₃*, *SiO₂*, *ZrO₂*) oraz nanorurki węglowe.

Procesy wzbogacania cieczy za pomocą cząstek stałych w celu zmiany ich właściwości są znane od ponad 100 lat. Prekursorem idei był najprawdopodobniej J. C. Maxwell (druga połowa XIX w.), ale dopiero gwałtowny rozwój mikroskopii wspomaganą komputerowo w latach 80. XX w. pozwolił na weryfikację eksperymentalną śmiałych założeń teoretycznych.

Mając na uwadze podejście deterministyczne zaprezentowane w [6], przeprowadzona zostanie analiza podstawowych własności efektywnych nanociecz w oparciu o model probabilistyczny i statystyczny. Za główny parametr losowy Gaussa przyjęto w tym rozważaniu udział objętościowy nanocząstek w całej mieszaninie. W modelu probabilistycznym wykorzystano uogólnioną metodę perturbacji, a otrzymane wyniki zweryfikowano przy użyciu klasycznej metody Monte-Carlo, w której parametrem wejściowym do analizy jest wielkość frakcji nanocząstek. W obu przypadkach policzone zostaną właściwości fizyczne takie, jak przewodnictwo cieplne, lepkość, ciepło właściwe, a także gęstość masy w homogenizowanym materiale, które w późniejszej fazie mogą być z powodzeniem wykorzystywane do rozwiązywania niektórych problemów z zakresu mechaniki płynów (Computational Fluid Dynamics – CFD) opisywanych równaniami Naviera-Stokesa. W rozważaniach założono liniową zależność analizowanych właściwości fizycznych od temperatury w celu uniknięcia niepożądanych fluktuacji termicznych w zależności od czasu.

2. Podstawowe parametry efektywne dla nanociecz

Ze względu na fakt, iż badania w tej dziedzinie mają ciągły charakter wstępny, ograniczymy się do przedstawienia wzorów analitycznych opisujących własności efektywne cieczy z nanocząstkami. Wzory takie były przedmiotem wielu analiz dotyczących tradycyjnych materiałów kompozytowych [5]. Zasadnicza różnica jest jednak taka, iż o ile w odniesieniu do tradycyjnych kompozytów jedna teoria matematyczna opisywała własności efektywne dla struktury o określonej mikrogeometrii i całego spektrum własności materiałowych, o tyle w obecnie analizowanej teorii homogenizacji rozpatrywana formuła algebraiczna odnosi się do mieszaniny konkretnych substancji. Zmienia to całkowicie sposób zastosowania i formułowania tradycyjnej teorii homogenizacji.

2.1. Gęstość

Wyznaczenie gęstości efektywnej dla nanociecz jest relatywnie proste. Traktując nanociecz jako mieszaninę ciągłej i płynnej bazy f (*fluid*)

z pojedynczymi elementami ciała stałego w postaci cząstek p (*particles*), możemy stworzyć model dający zadowalającą zgodność z danymi eksperymentalnymi

$$\rho_e = \left(\frac{m}{V} \right)_e = \frac{m_f + m_p}{V_f + V_p} = \frac{\rho_f V_f + \rho_p V_p}{V_f + V_p} = (1 - \varphi) \rho_f + \varphi \rho_p \quad (1)$$

Dla typowych mieszanin, w których domieszka nanocząstek oscyluje w granicach 1% objętości całkowitej, można zaobserwować zmianę gęstości efektywnej nie przekraczającą 5%.

2.2. Ciepło właściwe

W podobny sposób wyznaczamy zależność na pojemność cieplną dla otrzymanej nanocieczki

$$\begin{aligned} (\rho C_p)_e &= \rho_e \left(\frac{Q}{m \Delta T} \right)_e = \rho_e \frac{Q_f + Q_p}{(m_f + m_p) \Delta T} = \rho_e \frac{(m C_p)_f \Delta T + (m C_p)_p \Delta T}{(m_f + m_p) \Delta T} = \\ &= \rho_e \frac{(\rho C_p)_f V_f + (\rho C_p)_p V_p}{\rho_f V_f + \rho_p V_p} = (1 - \varphi) (\rho C_p)_f + \varphi (\rho C_p)_p \end{aligned} \quad (2)$$

dokonyując prostego przekształcenia, możemy zapisać

$$C_{pe} = \frac{(1 - \varphi) (\rho C_p)_f + \varphi (\rho C_p)_p}{(1 - \varphi) \rho_f + \varphi \rho_p} = \frac{(1 - \varphi) (\rho C_p)_f + \varphi (\rho C_p)_p}{\rho_e} \quad (3)$$

Stosując równanie (3) można przewidzieć zmiany wartości ciepła właściwego zakładając równomierne rozmieszczenie cząsteczek domieszki w ciekłej bazie. Przykładowo, dodając 3% tlenku aluminium Al_2O_3 (*alumina*) do wody, otrzymujemy w przybliżeniu ośmioprocentowy spadek wartości efektywnej pojemności cieplnej w porównaniu do wartości ciepła właściwego dla samej wody.

2.3. Przewodnictwo cieplne

Zgodnie z danymi eksperymentalnymi, pochodzącymi z raportu Argonne National Laboratory (ANL), aż osiem parametrów ma znaczący wpływ na wartość przewodnictwa cieplnego w nanocieczkach. Należą do nich:

- koncentracja objętościowa nanocząstek – zgodnie z oczekiwaniami, wzrost koncentracji cząsteczek w mieszaninie (przykładowo Al_2O_3 w wodzie lub Cu w wodzie) powoduje wzrost przewodności cieplnej nanocieczy;
- rozmiar nanocząsteczek – brak jednoznacznych wyników doświadczalnych. W wielu przypadkach wzrost rozmiaru cząsteczek przekłada się wprost na wzrost przewodności cieplnej. Takie zjawisko ma miejsce przy domieszkowaniu wody tlenkiem aluminium (Al_2O_3), niemniej znane są doświadczenia, gdzie efekt jest zgoła odwrotny;
- właściwości materiałowe nanocząstek – przewodność cieplna zdaje się wzrastać szybciej dla nanocieczy domieszkowanych metalami niż tlenkami metali;
- właściwości materiałowe cieczy bazowej – doświadczenia przeprowadzane na różnych cieczach bazowych – wodzie, oliwie oraz glikolu etylowym wykazały wzrost przewodności cieplnej przy wzroście zawartości objętościowej nanocząstek φ ;
- kształt nanocząstek – na przykładzie cząstek węgla krzemowego (SiC) zaobserwowano, że dla cząstek wydłużonych, wzrost przewodnictwa cieplnego jest większy niż dla cząstek sferycznych;
- temperatura – wzrost temperatury przekłada się na wzrost wartości współczynnika przewodnictwa cieplnego dla nanocieczy;
- dodatki – substancje dodawane do cieczy bazowej w celu wyeliminowania niepożądanych efektów sklejanania się cząstek – Cu w glikolu etylowym. Wzbogacenie bazy dodatkami powoduje wzrost współczynnika przewodnictwa cieplnego dla nanocieczy;
- wartość pH – dostęp do informacji na temat wpływu „zakwaszenia” cieczy bazowej na zmianę współczynnika przewodnictwa cieplnego jest ograniczony. Niemniej z dostępnych danych wynika, że wzrostowi pH cieczy bazowej towarzyszy wzrost przewodnictwa cieplnego otrzymanej nanocieczy – dane dostępne dla mieszaniny Al_2O_3 z wodą.

Tworząc model matematyczny do wyznaczania wartości efektywnej współczynnika przewodnictwa cieplnego dla nanocieczy, można zacząć od prostej formuły, zawierającej jedynie informacje o objętościowej zawartości poszczególnych komponentów φ

$$k_e = k_{nf} = (1 - \varphi)k_f + \varphi k_p . \quad (4)$$

Jest on oparty na teorii potencjałów Maxwella, w którym nanocząstki traktowane są jako nieoddziałujące między sobą jednorodne sfery, umieszczone w cieczy Newtonowskiej o stałej lepkości bez pęcherzyków powietrza. Przy takich założeniach równanie na efektywny współczynnik przewodnictwa cieplnego ma postać

$$k_e = k_{nf} = k_f + \frac{3(k_p - k_f)\varphi}{\left(\frac{k_p}{k_f} + 2\right) - \left(\frac{k_p}{k_f} - 1\right)\varphi}. \quad (5)$$

Stosuje się również model uwzględniający ruchy Browna (dane do tego równania otrzymywane są z innego modelu numerycznego symulującego ruchy Browna) [7]

$$k_e = k_{nf} = \left(1 + ARe^m Pr^{0,333} \Phi\right) \frac{(k_f + 2k_p) + 2\Phi(k_f + k_p)}{\left(1 + 2\frac{k_p}{k_f}\right) + \varphi\left(1 + \frac{k_p}{k_f}\right)}. \quad (6)$$

2.4. Lepkość

Podobnie jak w przypadku współczynnika przewodnictwa cieplnego, wraz z pojawieniem się nanocząstek w cieczy bazowej obserwuje się wzrost lepkości powstałej nanocieczy. Lepkość efektywną można opisać równaniem zaproponowanym przez Einsteina

$$\mu_e = \mu_{nf} = (1 + 2.5\varphi)\mu_f \quad \text{gdy} \quad \varphi < 0.05. \quad (7)$$

Otrzymane tu rezultaty są poprawne, gdy zawartość objętościowa nanocząstek φ nie przekracza 5%. Modyfikację umożliwiającą stosowanie przybliżenia w szerszym zakresie zaproponował Brinkman. Otrzymana zależność na lepkość efektywną ma postać

$$\mu_e = \mu_{nf} = \frac{\mu_f}{(1 - \varphi)^{2.5}}. \quad (8)$$

Dobrym przykładem może być 3% wzbogacenie wody nanocząstkami tlenu aluminium Al_2O_3 , które efektywnie przyniosło około trzydziesto procentowy wzrost lepkości powstałej nanocieczy w stosunku do lepkości samej wody H_2O .

3. Uogólniona metoda perturbacji

Teoria perturbacji jest ważnym i stosowanym od ponad 100 lat z powodzeniem narzędziem w mechanice i matematyce technicznej. Metody perturbacyjne wykorzystuje się do analizy zachowania rozbudowanego problemu, przyglądając się jakie zmiany w znanym rozwiązaniu powoduje wprowadzenie, na początku nieznacznego zaburzenia – parametru perturbacyjnego. Zaczniemy od równania opisującego własność efektywną $H(b)$ nanocieczy (którym może być np. gęstość, ciepło właściwe, przewodność czy lepkość) w funkcji parametru fizycznego $b(\omega)$. Po rozwinięciu w szereg Taylora względem parametru losowego otrzymujemy

$$H(b) = H^0(b^0) + \varepsilon \frac{\partial H(b^0)}{\partial b} \Delta b + \dots + \frac{\varepsilon^n}{n!} \frac{\partial^n H(b^0)}{\partial b^n} (\Delta b)^n + O(\varepsilon^{n+1}). \quad (9)$$

Klasycznie zdefiniowana wartość oczekiwana w tym przypadku ma postać

$$\begin{aligned} E[H(b)] &= \int_{-\infty}^{+\infty} H(b) p(b) db = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(H^0(b^0) + \sum_{k=1}^n \frac{\varepsilon^k}{k!} \frac{\partial^k H(b^0)}{\partial b^k} + O(\varepsilon^{n+1}) \right) p(b) db = \\ &= H^0(b^0) + \dots + \frac{\varepsilon^n}{n!} \frac{\partial^n H(b^0)}{\partial b^n} \int_{-\infty}^{+\infty} (\Delta b)^n p(b) db + R(\varepsilon^{n+1}) \end{aligned} \quad (10)$$

gdzie elementy dalszej części rozwinięcia (łącznie z resztą) są relatywnie małe w porównaniu z sumą początkowych wyrazów. Przy założeniu, że $b = b(\omega)$ jest zmienną Gaussa można w uproszczeniu zapisać, iż

$$E[H(b)] = H^0(b^0) + \frac{\varepsilon^2}{2} \frac{\partial^2 H(b^0)}{\partial b^2} \mu_2(b) + \dots + \frac{\varepsilon^{2l}}{(2l)!} \frac{\partial^{2l} H(b^0)}{\partial b^{2l}} \mu_{2l}(b) \quad (11)$$

przy czym $\mu_{2l}(b)$ jest centralnym momentem rzędu $2l$ zmiennej losowej b . Kolejno znajdujemy wariancję

$$\begin{aligned}
\text{Var}(H(b)) &= \\
&\cong \varepsilon^2 \mu_2(b) \left(\frac{\partial H(b^0)}{\partial b} \right)^2 + \varepsilon^4 \mu_4(b) \left(\frac{1}{4} \left(\frac{\partial^2 H(b^0)}{\partial b^2} \right)^2 + \frac{2}{3!} \frac{\partial H(b^0)}{\partial b} \frac{\partial^3 H(b^0)}{\partial b^3} \right) + \\
&+ \varepsilon^6 \mu_6(b) \left(\left(\frac{1}{3!} \right)^2 \left(\frac{\partial^3 H(b^0)}{\partial b^3} \right)^2 + \frac{1}{4!} \frac{\partial^4 H(b^0)}{\partial b^4} \frac{\partial^2 H(b^0)}{\partial b^2} + \frac{2}{5!} \frac{\partial^5 H(b^0)}{\partial b^5} \frac{\partial H(b^0)}{\partial b} \right)
\end{aligned} \tag{12}$$

oraz odchylenie standardowe

$$\sigma(H(b)) = \sqrt{\text{Var}(H(b))}. \tag{13}$$

Zazwyczaj parametr perturbacyjny przyjmuje wartość $\varepsilon = 1$ oraz rozpatruje się tylko kilka pierwszych wyrazów rozwinięcia. Analogicznie możemy wyznaczyć momenty centralne probabilistyczne wyższych rzędów i tak np. trzeci moment ma postać

$$\mu_3(H(b)) \cong \frac{3}{2} \varepsilon^4 \mu_4(b) \left(\frac{\partial H(b^0)}{\partial b} \right)^2 \frac{\partial^2 H(b^0)}{\partial b^2} + \frac{1}{8} \varepsilon^6 \mu_6(b) \left(\frac{\partial^2 H(b^0)}{\partial b^2} \right)^3, \tag{14}$$

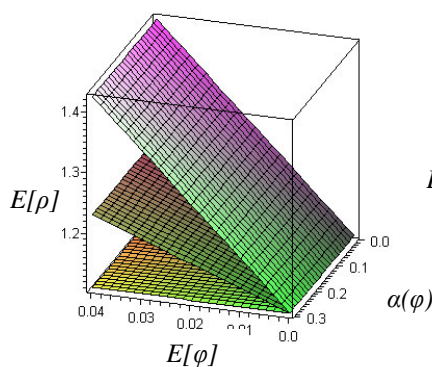
a czwarty można przedstawić następująco:

$$\begin{aligned}
\mu_4(H(b)) &\cong \varepsilon^4 \mu_4(b) \left(\frac{\partial H(b^0)}{\partial b} \right)^4 + \frac{3}{2} \varepsilon^6 \mu_6(b) \left(\frac{\partial H(b^0)}{\partial b} \frac{\partial^2 H(b^0)}{\partial b^2} \right)^2 \\
&+ \frac{1}{16} \varepsilon^8 \mu_8(b) \left(\frac{\partial^2 H(b^0)}{\partial b^2} \right)^4
\end{aligned} \tag{15}$$

4. Eksperymenty numeryczne

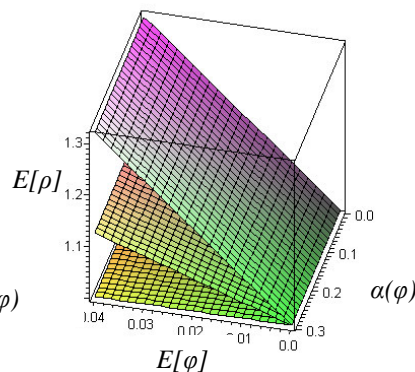
Wszystkie symulacje komputerowe własności efektywnych zostały przeprowadzone w symbolicznym środowisku obliczeniowym MAPLE. We wszystkich przypadkach φ – procentowa zawartość objętościowa nanocząstek jest traktowana jako gaussowska zmienna losowa. Przyjęcie $\varphi = 0$ jest wystarczające do otrzymania rozwiązania deterministycznego. Najczęściej spotykane w literaturze domieszkowanie waha się od jednego do czterech procent objętości mieszaniny. Analizie uogólnioną metodą perturbacji zostały poddane cztery własności

efektywne – gęstość, ciepło właściwe, przewodnictwo cieplne według modelu Maxwella oraz lepkość według modelu Brinkmana. Na kolejnych rysunkach przedstawiono wyniki otrzymane za pomocą metody perturbacji. Na rysunkach 3 i 4 obserwujemy wzrost wartości oczekiwanej gęstości efektywnej, opisywanej zależnością (1) dla glikolu etylowego oraz wody domieszkowanych odpowiednio tlenkiem glinu (płaszczyzna nachylona pod mniejszym kątem) oraz miedzią (płaszczyzna nachylona pod większym kątem) w odniesieniu do gęstości samych cieczy (płaszczyzna pozioma).



Rys. 3. Wartości oczekiwane gęstości efektywnej – $(Al_2O_3)+(Cu)+(C_2H_4(OH)_2)$

Fig. 3. Expected values of the effective mass density – $(Al_2O_3)+(Cu)+(C_2H_4(OH)_2)$



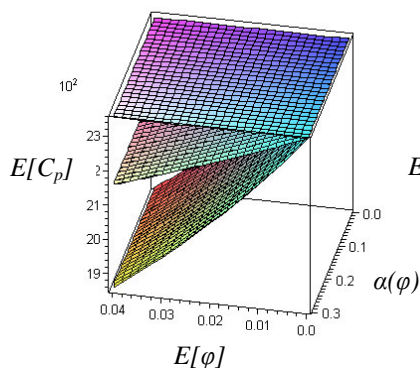
Rys. 4. Wartości oczekiwane gęstości efektywnej – $(Al_2O_3)+(Cu)+(H_2O)$

Fig. 4. Expected values of the effective mass density – $(Al_2O_3)+(Cu)+(H_2O)$

Podobnie jak w doświadczeniu [6], możemy zaobserwować wyraźny wzrost gęstości przy wzroście parametru φ dla obu typów nanocząstek – dla zawartości cząstek ok. 4% otrzymujemy 30-40% wzrost efektywnej gęstości mieszaniny. Jak należało się spodziewać, współczynnik wariacji nie ma żadnego wpływu na uzyskaną wartość oczekiwaną.

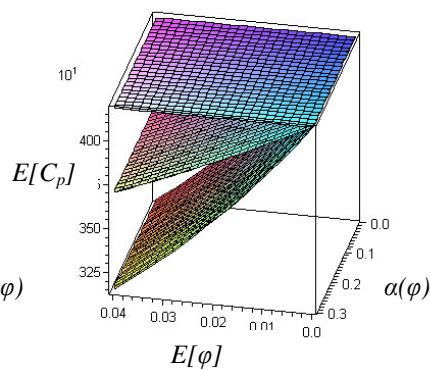
Rysunki od 5 do 8 przedstawiają zmianę efektywnego ciepła właściwego obliczanego według zależności (2) w kontekście podstawowych momentów probabilistycznych. Dodanie nanocząstek tlenku glinu czy miedzi powoduje zmniejszenie efektywnego ciepła właściwego dla analizowanych cieczy (glikol $C_p = 2385,6 J/kg \cdot K$ oraz woda $C_p = 4189,9 J/kg \cdot K$ w warunkach pokojowych). Na wykresach pozioma płaszczyzna obrazuje wartość ciepła właściwego cieczy bez nanostruktur, nachylona pod mniejszym kątem to nanociecz z tlenkiem glinu (alumina to 94% tlenek glinu $C_p = 880 J/kg \cdot K$, a pod większym kątem – z miedzią, $C_p = 380 J/kg \cdot K$). Podobnie, jak poprzednio, wartości oczekiwane nie są wrażliwe na zmiany rozproszenia losowego zawartości nanocząstek w mieszaninie.

Nieco inną zależność można zaobserwować w przypadku charakterystyk drugiego rzędu – wartości odchyleń standardowych i wariancji wzrastają wraz ze wzrostem wejściowego współczynnika wariancji, ale również wraz ze wzrostem wartości oczekiwanej parametru φ . Wzrost odchyleń standardowych w stosunku do cieczy nie zawierającej nanocząstek jest prawie pięciokrotny.



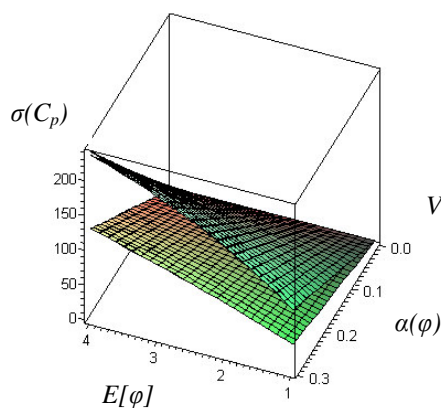
Rys. 5. Wartości oczekiwane dla efektywnego ciepła właściwego – $(\text{Al}_2\text{O}_3)+(\text{Cu})+(\text{C}_2\text{H}_4(\text{OH})_2)$

Fig. 5. Expected values of the effective heat capacity – $(\text{Al}_2\text{O}_3)+(\text{Cu})+(\text{C}_2\text{H}_4(\text{OH})_2)$



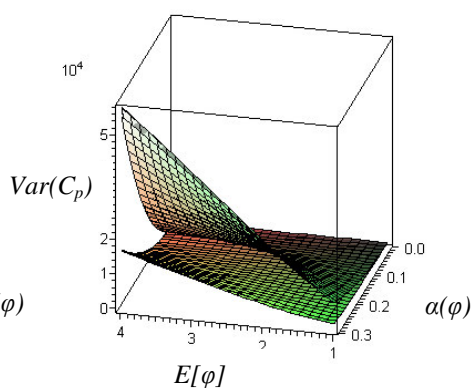
Rys. 6. Wartości oczekiwane dla efektywnego ciepła właściwego – $(\text{Al}_2\text{O}_3)+(\text{Cu})+(\text{H}_2\text{O})$

Fig. 6. Expected values of the effective heat capacity – $(\text{Al}_2\text{O}_3)+(\text{Cu})+(\text{H}_2\text{O})$



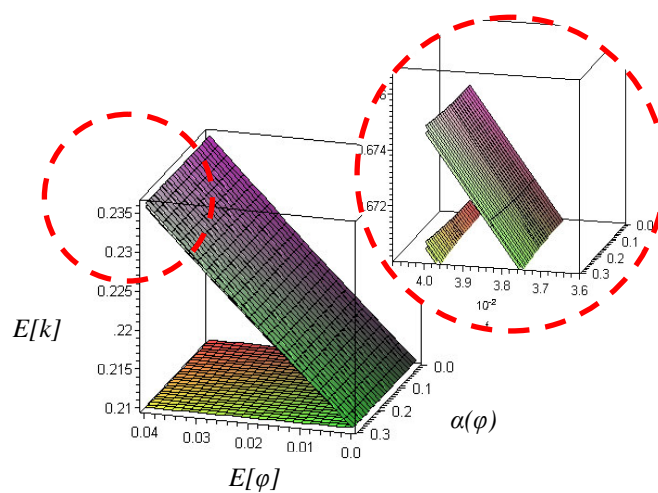
Rys. 7. Odchylenie standardowe efektywnego ciepła właściwego – $(\text{Al}_2\text{O}_3)+(\text{Cu})+(\text{H}_2\text{O})$

Fig. 7. Standard deviations of the effective heat capacity – $(\text{Al}_2\text{O}_3)+(\text{Cu})+(\text{H}_2\text{O})$



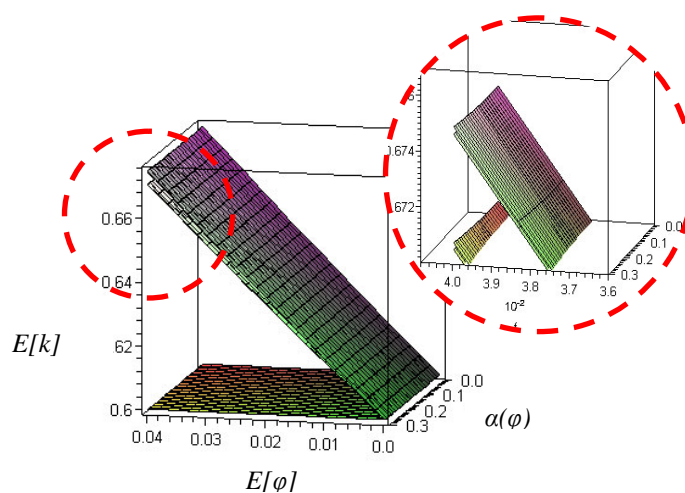
Rys. 8. Wariancja efektywnego ciepła właściwego – $(\text{Al}_2\text{O}_3)+(\text{Cu})+(\text{H}_2\text{O})$

Fig. 8. Variances of the effective heat capacity – $(\text{Al}_2\text{O}_3)+(\text{Cu})+(\text{H}_2\text{O})$



Rys. 9. Wartości oczekiwane efektywnej przewodności cieplnej – $(\text{Al}_2\text{O}_3)+(\text{Cu})+(\text{C}_2\text{H}_4(\text{OH})_2)$

Fig. 9. Expected values of the effective heat conductivity – $(\text{Al}_2\text{O}_3)+(\text{Cu})+(\text{C}_2\text{H}_4(\text{OH})_2)$

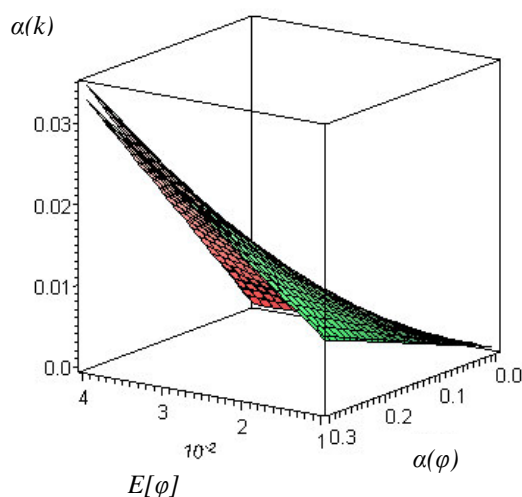


Rys. 10. Wartości oczekiwane efektywnej przewodności cieplnej – $(\text{Al}_2\text{O}_3)+(\text{Cu})+(\text{H}_2\text{O})$

Fig. 10. Expected values of the effective heat conductivity – $(\text{Al}_2\text{O}_3)+(\text{Cu})+(\text{H}_2\text{O})$

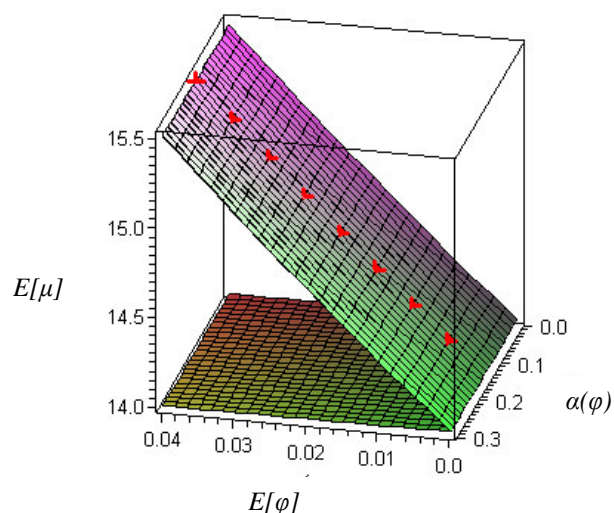
Rysunki 9 i 10 pokazują wzrost wartości oczekiwanej efektywnej przewodności cieplnej, obliczonej na podstawie zależności (5) dla glikolu ($k = 0,21 \text{ W/m}\cdot\text{K}$ w temperaturze 300 K) oraz wody ($k = 0,58 \text{ W/m}\cdot\text{K}$ w temperaturze 300 K) – poziome płaszczyzny, pod wpływem wzrostu zawartości nanocząstek tlenku glinu ($k_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 18 \text{ W/m}\cdot\text{K}$) oraz miedzi ($k_{\text{Cu}} = 401 \text{ W/m}\cdot\text{K}$). Różnice pomiędzy wartościami efektywnymi otrzymanymi dla obydwu cieczy są mało widoczne w skali zmienności obydwu parametrów, tak więc zostały przedstawione w powiększeniu w dodatkowym oknie, a wartości te są niezależne od losowego rozrzutu parametru wejściowego.

Powierzchnie przedstawione na rysunku 11 dowodzą wyraźnie, że wartość oczekiwana zawartości nanocząstek ma większy wpływ na współczynnik wariacji efektywnej przewodności cieplnej niż rozrzut losowy tej zawartości. Różnice pomiędzy poszczególnymi mieszaninami są nieco wyraźniejsze niż dla wartości oczekiwanych, szczególnie dla maksymalnych wartości parametrów wejściowych. Pod względem probabilistycznym analizowana zależność algebraiczna ma silne własności tłumiące, gdyż wejściowy współczynnik powoduje 10-krotnie mniejszy rozrzut losowy efektywnego przewodnictwa cieplnego. Oczywiście wzrost wejściowych parametrów losowych jest równoznaczny ze wzrostem studiowanego parametru efektywnego.

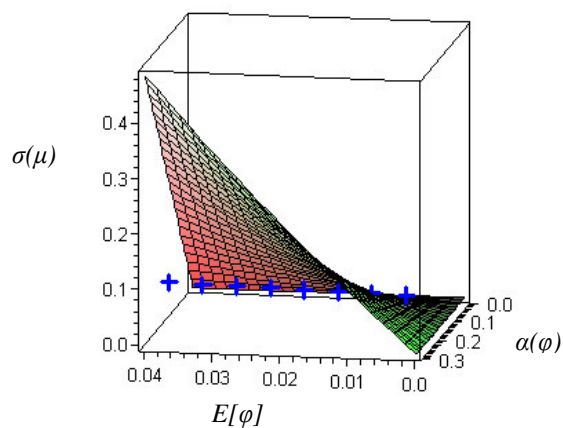


Rys. 11. Współczynnik wariacji efektywnej przewodności cieplnej – $(\text{Al}_2\text{O}_3)+(\text{Cu})+(\text{H}_2\text{O})$

Fig. 11. Coefficient of variation for the effective heat conductivity – $(\text{Al}_2\text{O}_3)+(\text{Cu})+(\text{H}_2\text{O})$



Rys. 12. Wartość oczekiwana lepkości – (Cu)+(C₂H₄(OH)₂),
25°C, MCM “+” vs. GPM
Fig. 12. Expected values of the effective viscosity – (Cu)+(C₂H₄(OH)₂),
25°C, MCM “+” vs. GPM



Rys. 13. Odchylenie standardowe lepkości – (Cu)+(C₂H₄(OH)₂),
25°C – MCM “+” vs. GPM
Fig. 13. Standard deviations of the effective fluid viscosity – (Cu)+(C₂H₄(OH)₂),
25°C – MCM “+” vs. GPM

Kolejne wykresy (rys. 12 i 13) przedstawiają wartości oczekiwane oraz odchylenia standardowe dla efektywnej lepkości cieczy z nanocząsteczkami, których wartość oczekiwana i współczynnik wariacji udziału objętościowego w miesza-

ninie są parametrami. Jak należało oczekiwać, wartość średnia lepkości jest niezależna od rozrzutu losowego parametru wejściowego, a zależność od wartości oczekiwanej – liniowa. Dla odchylenia standardowego różnica jest taka, że zależność od obydwu parametrów jest liniowa. Każdorazowo wzrost dowolnych parametrów wejściowych prowadzi do zwiększenia się wartości średniej i odchylenia lepkości efektywnej. Na rysunkach 12 i 13 płaszczyzny nachylone pod kątem to wyniki otrzymane uogólnioną metodą perturbacji z na niesionymi w postaci krzyżyków wynikami otrzymanymi przy zastosowaniu techniki symulacji Monte-Carlo. Porównanie zbieżności wyników otrzymanych metodą MC oraz GPM przy wyznaczaniu efektywnej lepkości na bazie glikolu etylowego z nanocząstkami Al_2O_3 i Cu prowadzi do wniosku, że rezultaty obydwu metod są bardzo zbliżone do siebie.

Tabela 1. Zestawienie właściwości fizycznych materiałów
Table 1. Physical properties of the component materials

Własność fizyczna	Tlenek glinu Al_2O_3	Miedź Cu	Glikoletylowy $\text{C}_2\text{H}_4(\text{OH})_2$	Woda H_2O
Gęstość d	3,95 g/cm ³	8,94 g/cm ³	1,1132 g/cm ³	1,0 g/cm ³
Lepkość μ , $T = 273\text{K}$, $p = 1013\text{hPa}$	-	-	$14 \cdot 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{s}$	$1,79 \cdot 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{s}$
Ciepło właściwe C_p , $T = 273\text{K}$, $p = 1013\text{hPa}$	930 J/kg*K	385 J/kg*K	2385,6 J/kg*K	4190 J/kg*K
Przewodność k , $T = 300\text{K}$	40 W/m*K	401 W/m*K	0,21 W/m*K	0,58 W/m*K

5. Uwagi końcowe

Omawiana w powyższym artykule uogólniana metoda perturbacji została z powodzeniem wykorzystana do wyznaczenia wartości efektywnych właściwości fizycznych cieczy wzbogacanych nanostrukturami. Opisany model jest pewnym przybliżeniem, które chociażby w przypadku współczynnika przewodnictwa cieplnego – mając na uwadze złożoność zagadnienia – może być niewystarczające. W pozostałych przypadkach metoda perturbacyjna daje zadawalające wyniki zweryfikowane alternatywną metodą statystyczną i zbliżone do otrzymanych drogą eksperymentalną. Obserwowane od kilku lat szerokie zastosowanie materiałów z nanostrukturami w budownictwie, przemyśle chemicznym, kosmetycznym oraz medycynie wymaga dużej ilości informacji zarówno o gotowych produktach, jak i o półproduktach w fazie projektu. Zaprezentowana metoda zdaje się być skutecznym i szybkim narzędziem, umożliwiającym zdobycie informacji o podstawowych efektywnych właściwościach fizycznych. Względna prostota podejścia daje możliwość zaimplementowania metody do różnych środowisk

obliczeniowych jak *MatLab*, *MathCad* czy *Mathematica*, natomiast możliwości oferowane przez te programy umożliwiają dalsze studia numeryczne z zakresu wrażliwości i losowości własności efektywnych [2] nanostruktur.

Literatura

- [1] **Christensen R.M.:** *Mechanics of Composite Materials*. Wiley 1979.
- [2] **Kamiński M.:** Sensitivity and randomness in homogenization of periodic fiber-reinforced composites via the response function method. *Int. J. Sol. & Struct.* 46, 2009, s. 923-937.
- [3] **Kamiński M., Carey G.F.:** Stochastic perturbation-based finite element approach to fluid flow problems. *Int. J. Num. Meth. Heat Fluid Flow.* 15(7), 2005, s. 671-697.
- [4] **Kamiński M., Kleiber M.:** Numerical homogenization of n-component composites including stochastic interface defects. *Int. J. Num. Meth. Engrg.* Vol. No. 47, 2000, s. 1001-1027.
- [5] **Milton G.W.:** *The Theory of Composites*. Oxford, Oxford University Press 2002.
- [6] **Vasu V., Krishna K.R., Kumar A.C.S.:** Analytical prediction of thermophysical properties of fluids embedded with nanostructured materials. *Int. J. Nanoparticles.* Vol. No. 1(1), 2008, s. 32-49.
- [7] **Seok P.J., Choi, S.U.S.:** Role of Brownian motion in the enhanced thermal conductivity of nanofluid. *Applied Physics Letters.* Vol. No. 84(24), 2004, s. 4316-4318.

COMPUTER SIMULATION OF THE PHYSICAL PROPERTIES FOR THE FLUIDS WITH RANDOM NANOPARTICLES

Summary

A comparison of the perturbation and simulation-based probabilistic methods for a determination of the physical properties for the fluids with nanoparticles is the main purpose of this work. The perturbation method is based on the Taylor expansion of a priori given order and is applied for both random volumetric ratio of the nanoparticles and the resulting homogenized multiphase fluid parameters. The effective heat capacity, fluid viscosity, heat conductivity and overall density are examined here, which have a paramount importance in both technological processes and computational fluid dynamics. The existing theoretical models of those parameters for deterministic nanofluidics are contrasted first and then, they are randomized using the dual approach in the computer algebra system MAPLE. The results show the very good agreement in-between the two methods applied.