



بیست و یکمین کنفرانس هشتای ایران

۷ و ۶ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

بررسی شبیه سازی دو سانتیریفیوژ در حالت های اعمال گرادیان دمایی روی دیواره آن و ایجاد جریان های ورودی و خروجی به آن با استفاده از روش DSMC

صادق یوسفی نسب: عبدالحمید مینوچهر: احمدرضا ذوالفقاری: علی نوروزی
دانشگاه شهید بهشتی، دانشکده مهندسی هسته ای، گروه راکتور

چکیده

به دلیل اینکه در ناحیه خلأ، معادلات ناویراستوکس اعتبار خود را از دست می دهند لذا می بایستی به دنبال تکنیکی برای تحلیل رفتار گاز در این ناحیه رفت. یکی از روش های متداول در مکانیک سیالات برای مدل سازی جریان گازهای رقیق استفاده از روش DSMC می باشد. در این مقاله جریان شعاعی گاز ورودی و سپس تجزیه در دیواره به دو جریان، یکی رفتن به سمت بالا در امتداد نیمه بالایی و دیگر رفتن رو به پایین در طول نیمه پایینی مورد بررسی قرار می گیرد و سپس به بررسی پروفایل دانسیته، سرعت محوریو سرعت شعاعی دو سانتیریفیوژ در حالت اعمال گرادیان دمایی روی دیواره آن و تاثیر پذیری گرادیان دمایی بر چگالی عددیو حالت فقط ایجاد جریان های ورودی و خروجی به آن با استفاده از روش DSMC پرداخته خواهد شد.

مقدمه

یکی از رژیم های جریانی که معادلات ناویراستوکس برای تخمین رفتارهای دینامیک گاز فاقد اعتبار می گردد، جریان های گاز رقیقی است که متوسط پویش آزادی برابر با یا حتی بزرگتر از مشخصه طول جریان داشته باشند. معادلات بولتزمن بطور کلی معادلات حاکم بر کلیه رژیم های جریان را در نظر می گیرد، ولی حل تحلیلی و عددی معادلات بولتزمن برای جریان های مورد استفاده بسیار مشکل می باشد. به همین دلیل روش دیگری به نام شبیه سازی مستقیم مونت کارلو (DSMC) توسط Bird ارائه گردید [۱]. در این روش به جای اینکه معادله بولتزمن حل شود، این معادله، بطور عددی شبیه سازی می شود. وجود یک گرادیان دما در امتداد چرخشی سطح استوانه و ایجاد اختلاف درجه حرارت بین بالا و پایین آن، باعث ایجاد یک جریان ثانویه در سیلندر می شود. به همین دلیل، تجزیه و تحلیل چنین جریان ثانویه بوجود آمده در راستای ارتفاع استوانه، علی رغم جریان چرخشی بوجود آمده از چرخش استوانه بسیار مهم است. Wood و Sanders روی قرار دادن دبی ورودی به یک سیلندر و مکان دهی به آن نتایج خود



بیست و یکمین کنفرانس هشتای ایران

۷ و ۶ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

را با معادلات Carrier-Maslen Generalized و Model Onsager مورد مقایسه قرار دادند [۲]. Mikami با تکنیک غیر پایدار مطلق به بررسی جریانات ورودی و خروجی در یک استوانه پرداخت [۳]. Pradhan و Kumaran نیز در سال ۲۰۱۱ به بررسی اثر اعمال جریان ورودی و خروجی بر روی سرعت های محوری و شعاعی در یک استوانه و همچنین به بررسی فلاکس جرمی محوری بر اساس ترم بی بعد در راستای شعاعی پرداختند و نتایج خود را با نتایج Generalized Onsager Model مقایسه نمودند و به نتایج مشابهی دست یافتند [۴]. Lahargue و Soubbaramayer نیز به بررسی سرعت محوری بر حسب مختصات شعاعی پرداختند [۵].

روش عددی DSMC

Nanbu اثبات کرد که بصورت ریاضی، روش DSMC با حل معادلات بولتزمن برای تعداد زیاد ذرات شبیه سازی شده برابری می کند [۶]. اساس ایده DSMC برای جریان گاز، یک روش احتمالاتی مکانیزم های برخورد می باشد. هر دو برخورد بین مولکولی و برخورد مولکول ها با دیواره صلب بصورت احتمالی محاسبه خواهد شد. این روش بطور متعددی از اعداد تصادفی استفاده می نماید. در انتها کمیت های ماکروسکوپی از قبیل سرعت متوسط و دما بعد از نمونه گیری از سلول بندی های صورت گرفته و میانگین گیری از آن ها قابل محاسبه می باشند [۷]. در این روش هر مولکول مدل، بیانگر تعداد زیادی از مولکول های واقعی است. بطور کلی روش DSMC از ۵ زیر برنامه تشکیل می گردد که در ادامه به اختصار به توضیح مراحل آن پرداخته خواهد شد [۱].

زیر برنامه حرکت (MOVE)

فضای مسئله به قطعات کوچکی تقسیم بندی می شود و ذرات سیال بر حسب شبکه بندی داخل این سلولها قرار می گیرند. در ابتدا برای ذرات یک موقعیت تصادفی اختیار می گردد. سرعت، مختصات مکانی و انرژی درونی هر یک از مولکول ها در کامپیوتر ذخیره می شود و با حرکت مولکول ها در طی زمان عوض می شود. پس در این زیر برنامه با توجه به سرعت هر مولکول و اندازه گام زمانی، مقدار جابجایی ذرات و در نتیجه مختصات جدید آنها بدست می آید.

زیر برنامه راهنما (INDEX)

در کل سعی بر آن است که در یک اندازه گام زمانی، مولکول ها از سلول خود خارج نشوند اما این امر اجتناب ناپذیر است و پس از حرکت، با توجه به موقعیت جدید مولکول ها، شماره سلول و زیر سلول حاوی هر مولکول در زیر برنامه INDEX تعیین می گردد.

زیر برنامه برخورد (COLLIDE)



بیست و یکمین کنفرانس هسته‌ای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

در این زیربرنامه برخورد بین مولکول‌ها بر اساس مدل مناسبی بررسی می‌شود و در صورت وجود برخورد، سرعت و مکان مولکول برخورد کننده اصلاح و تنظیم می‌شود. مدل‌های برخورد استفاده شده در این مقاله روش‌های برخورد VSS، VHS و HS می‌باشد. که در یک مدل برخورد HS، احتمال جفت برخوردی پذیرفته خواهند شد که شرط رابطه ۱ را ارضا کنند و در مدل‌های برخورد VHS و HS احتمال جفت برخوردی پذیرفته خواهند شد که شرط رابطه ۲ را ارضا کنند [۸،۹]:

$$\frac{g}{g_{max}} > Rand()$$

که در روابط بالا g سرعت نسبی بین دو ذره و σ_T سطح مقطع کلی برخورد و Rand تولید اعداد تصادفی با توزیع نرمال می‌باشد.

زیر برنامه بازتاب (REFLECT)

بعد از آنکه موقعیت جدید ذرات بعد از حرکت دادن خطی آن‌ها و برخورد نمودن ذرات با یکدیگر در هر گام زمانی مشخص گردید با توجه به دانستن موقعیت سطوح جسم و موقعیت اولیه هر ذره، می‌توان مشخص کرد که آیا ذره با سطح برخورد داشته یا نه و اگر داشته در چه موقعیتی با سطح مورد نظر برخورد کرده است. سپس با توجه به مدل انتخاب شده برای برخورد ذره با سطح (شرایط مرزی)، ذره از سطح بازتاب و موقعیت آن اصلاح می‌شود. در مدل انتشار (Diffuse) ذره مستقل از سرعت اولیه برخورد کرده با دیواره عمل می‌کند و دوباره با یک توزیع نیمه-گوسین سرعت می‌گیرد. در مدل طیفی (Specular) ذرات با سرعتی برابر سرعت برخورد با دیواره ولی در جهت عکس آن مقداردهی می‌شوند و در مدل دوره‌ای (periodic) ذرات با شرایطی مثل حالت طیفی ولی با تغییر مکان ذره به مکان روبرویی آن دیواره مقداردهی می‌گردد.

زیر برنامه نمونه‌گیری (SAMPLE)

بعد از تکرار فرآیندهای حرکت، آدرس‌دهی و بررسی برخورد، عمل نمونه‌برداری آماری در زیر برنامه Sample انجام می‌شود که به محاسبه مقادیر $\sum u$ ، $\sum v$ ، $\sum w$ ، $\sum u^2$ ، $\sum v^2$ و $\sum w^2$ در هر سلول که بیانگر کمیت‌های ماکروسکوپی هستند می‌پردازد و بعد از تعداد مشخص نمونه‌برداری خروجی برنامه تهیه می‌شود و این خروجی تا رسیدن به تعدادی مشخصی تکرار، اصلاح می‌گردد.

نتایج

در شبیه‌سازی DSMC انجام گرفته، نتایج بعد از ۷۲۰ ساعت فایل‌های بروزرسانی شده بدست آمده است. و در راستای Z-تعداد سلول‌بندی‌ها 200×200 از نوع دینامیک، مقدار بازه‌زمانی برابر 10^{-7} ، دمای گاز ورودی 300 درجه کلونین و نسبت تعداد مولکول‌های واقعی به شبیه‌سازی شده برابر 3×10^{16} می‌باشد. در جدول ۱ و ۲ مشخصات دو سانتریفیوژ برای دو حالت شبیه‌سازی شده آورده شده است. این شبیه‌سازی انجام گرفته معادل $8/9$ ثانیه تحلیل یک



بیست و یکمین کنفرانس هسته‌ای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

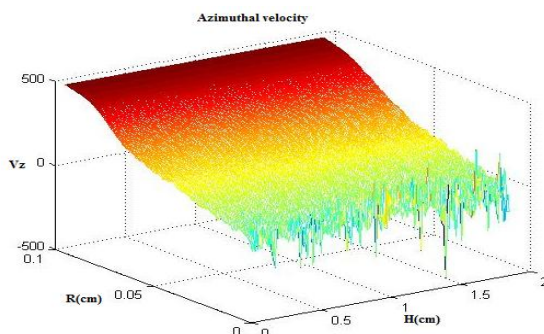
استوانه دوار در حالت واقعی می‌باشد که این مدت زمانی، فرصت کافی برای به حالت پایدار رسیدن جریان را فراهم می‌سازد. همچنین گاز مورد استفاده در شبیه‌سازی ترکیب یکسان از گازهای He و Ar می‌باشد.

جدول ۱ مشخصات سانتریفیوژ با اعمال گرادیان دمایی

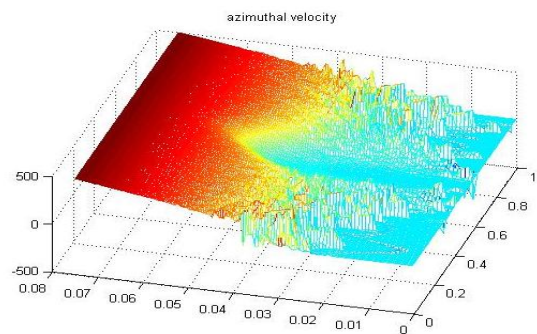
جریان ورودی و خروجی به آن

نرخ خوراک ورودی ($\frac{mg}{sec}$)	ارتفاع سانتریفیوژ (cm)	شعاع سانتریفیوژ (cm)	گرادیان دمایی دیواره	ارتفاع سانتریفیوژ (cm)	شعاع سانتریفیوژ (cm)
۲۰	۱۰۰	۷/۵	۲۰	۱۸۵	۹/۴۹

اگر سانتریفیوژ با ایجاد جریان ورودی و خروجی به آن را حالت یک و سانتریفیوژ با اعمال گرادیان دمایی به آن، حالت دو نامگذاری گردد آنگاه با توجه به قرار دادن نرخ خوراک ورودی و اعمال تصادفی برای خروج ذرات از بالا و پایین استوانه دوار در حالت یک، شکل ۱ نمودار سرعت چرخشی بر حسب شعاع را نشان می‌دهد. به علت وجود یک خوراک در مرکز استوانه، ذرات گازی با ذرات روبرویی خود که دارای سرعت چرخشی می‌باشند برخورد کرده و تا حدودی سرعت چرخشی آنها را کم می‌کنند لذا همانطوری که در شکل مشخص می‌باشد در مرکز، یعنی جایی که خوراک وارد محیط شبیه‌سازی می‌گردد، یک افت سرعت مشاهده می‌گردد. در حالت دو (شکل ۲)، سرعت چرخشی تا سرعت دیواره یعنی 500 m/s افزایش پیدا کرده است و دارای یک رفتار خطی در ناحیه مترام (نزدیک دیواره) استوانه چرخان می‌باشد که این رفتار خطی در ناحیه نزدیک به دیواره چرخان، می‌تواند ادعای ثابت فرض کردن سرعت چرخشی در معادلات دیفرانسیل مرتبه ششم در مختصات شعاعی پنکیک را اثبات نماید.



شکل ۲. نمودار سرعت چرخشی بر



شکل ۱. نمودار سرعت چرخشی بر حسب شعاع در حالت یکبا

حسب شعاع با در حالت دوبا اعمال

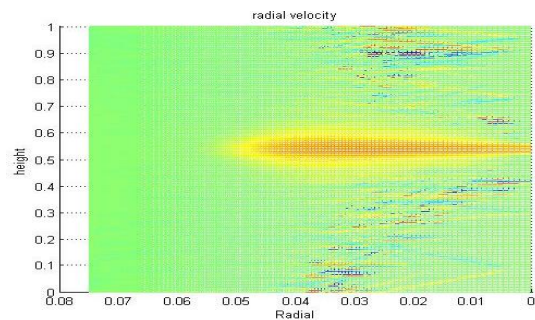
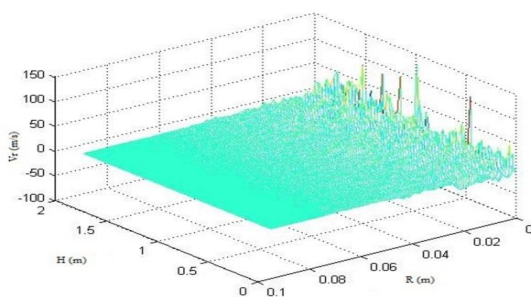
اعمال سرعت چرخشی 500 m/s به دیواره سرعت 500 m/s به دیواره



بیست و یکمین کنفرانس هسته‌ای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

شکل ۳ مربوط به نمودار سرعت شعاعی حالت اول می باشد بطوریکه جریان خوراک از مرکز استوانه وارد محیط می گردد، که باعث افزایش سرعت شعاعی در آن محدوده می گردد. در حالت دو (شکل ۴)، در محدوده مرکز سانتریفیوژ به دلیل دانسیته پایین ذرات، مقدار سرعت شعاعی برابر صفر نخواهد شد و نویزهایی در آن محدوده بوجود خواهد آمد ولی در سایر نقاط، مقدار سرعت شعاعی برابر صفر خواهد شد یعنی ذرات موجود در سلولها در راستای شعاعی سرعتی ندارند. شکل ۵ نمودار چگالی عددی مربوط به حالت یک را نشان می دهد. مشخص می باشد که در مرکز محور، یک افزایش چگالی به دلیل وجود نرخ خوراک ورودی وجود دارد و در دیواره، در دو قسمت پایین و بالای دیواره، چگالی عددی به دلیل وجود خروجی های تعبیه شده در آن موقعیت ها، افت می کند ولی در مرکز دیواره، بیشترین مقدار خود را دارا می باشد. شکل ۶ نمودار چگالی عددی مربوط به حالت دوم را نشان می دهد که با گذشت زمان و اعمال نیروی گریز از مرکز، باعث تراکم ذرات شبیه سازی شده به سمت دیواره می گردد. علت ایجاد شیب ایجاد شده بر روی محور ارتفاع استوانه، وجود گرادیان دمای اعمال شده می باشد، به آن دلیل که جایی که دما بیشتر است انرژی جنبشی ذرات در آن ناحیه بیشتر می گردد و باعث تحرک ذرات از آن ناحیه و کاهش چگالی عددی آن می گردد.



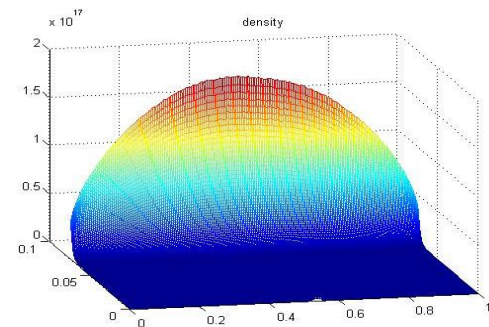
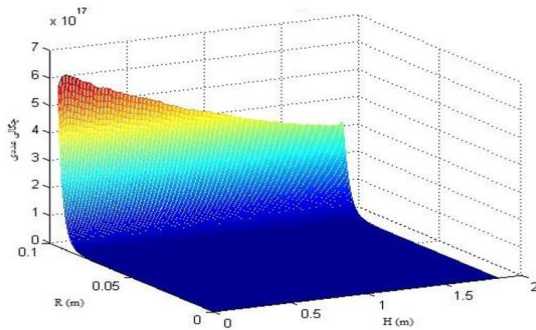
شکل ۳. نمودار سرعت شعاعی بر حسب مختصات شعاعی در حالت یک شکل ۴. پروفایل سرعت شعاعی بر حسب

مختصات شعاعی در حالت دو



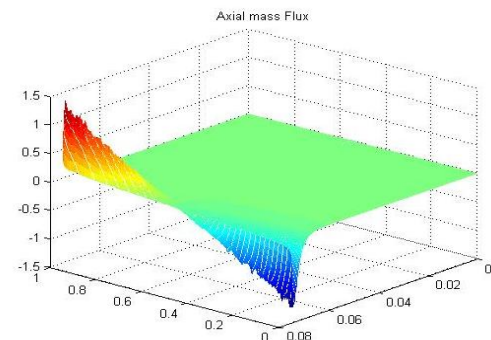
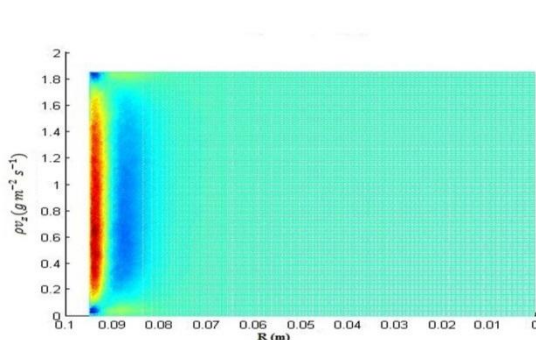
بیست و یکمین کنفرانس هسته‌ای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان



شکل ۵. نمودار دانسیته با وجود تاثیر نرخ جریان ورودی و خروجی
شکل ۶. نمودار چگالی عددی با وجود اعمال گرادیان دمایی روی دیواره

نمودار شار جرمی محوری در روی دیواره کاملاً مشخص کننده یک جریان خروجی در دو موقعیت پایین و بالای استوانه در حالت اول خواهد بود که به صورت خطی تا مرکز کاهش پیدا می کند (شکل ۷). در حالت دوم، (شکل ۸) پروفایل شعاعی سرعت محوری دور از کلاهک‌های انتهایی ترسیم شده است. در اینجا، دو ناحیه مشاهده می شود: یکی هسته استوانه که در آن سرعت یک علامت ثابت دارد و دوم، ناحیه نزدیک به دیواره جانبی که در آن، یک لایه با سرعت مثبت و یک لایه با سرعت منفی وجود دارد همچنین این نمودار یاد آور پدیده‌های بسیار مهم باز گردش جریان در لایه نزدیک به دیواره استوانه و شار باز گردشی، که بسیار قابل توجه تر از شار در هسته بوده می باشد. که نشاندهنده جریان ناهمسو در یک لایه جریان رو به بالا و یک لایه جریان رو به پایین می باشد که به دلیل اختلاف خطی دمایی روی دیواره بوجود می آید و علت آن وابسته بودن سرعت به دما می باشد و در این حالت بدون حضور گرادیان دمایی جریانی هم در راستای Z بوجود نخواهد آمد.



شکل ۷. نمودار فلاکس جرمی محوریدر حالت یک شکل ۸. نمای سه بعدی از شار جرمی محوری بر حسب شعاع در حالت دو

بحث و نتیجه گیری



بیست و یکمین کنفرانس هسته‌ای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

روش DSMC، روشی بسیار کارآمد در مدل سازی یک سانتریفیوژ، برای بدست آوردن پروفایل های سرعت شعاعی، شار جرمی محوری، دانسیته و دما با استفاده از یک روش شبیه سازی به جای حل های تحلیلی می باشد. نتایج به کارگیری مدل های مولکولی در روش DSMC نشان داده که این روش در مقابل روش های متداول کلاسیک سابق بسیار ارزشمند می باشد. در این روش که در سال های اخیر با توجه به توسعه سرعت محاسبات رایانه ای و کاهش هزینه های آن مورد توجه ویژه ای قرار گرفته، جریان غیر خطی گازها در مقیاس مولکولی با دقت خوبی مورد آنالیز قرار می گیرد.

مراجع

- [1] Bird, G.A., "Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows," Oxford Univ. Press, New York, pp. 2-45, 219-256, 1994.
- [2] WOOD, H. G. and SANDERS, G., "Rotating compressible flows with internal sources and sinks," J. Fluid Mech. 127, pp. 299-311, 1983.
- [3] MIKAMI, H., "Rotating supersonic flow about scoop inlet using an unsteady implicit technique," In The Proceedings of Fourth Workshop on Gases in Strong Rotation, Oxford (ed. E. Ratz). pp. 94-112, 1981.
- [4] Pradhan, S, and Kumaran, V., "The generalized Onsager model for the secondary flow in a high-speed rotating cylinder," J. Fluid Mech., vol. 686, pp. 140-141, 2011.
- [5] Lahargue, J.P, and Soubbaramayer., "Comput. Methods Appl," Mech. Eng. 15, pp. 259-273, 1978.
- [6] Nanbu, K., "Theoretical basis on the direct Monte Carlo method, in: V. Boffi, C. Cercignani (Eds.), Rarefied Gas Dynamics," vol. 1, Teubner, Stuttgart, 1986.
- [7] Jong-Shinn Wu, Kun-Chang Tseng, Fu-Yuan Wu, "Parallel three-dimensional DSMC method using mesh refinement and variable time-step scheme," Department of Mechanical Engineering, accepted 3 July 2004.
- [8] Macrossan, M. N. "MATLAB codes for the DSMC calculation of Couette flow, using the variable-hard-sphere (VHS) collision model," University of Queensland, Department of Mechanical Engineering Report No. 2009/02, 2009.
- [9] Prasanth, P.S. and Kakkassery, J. K., "Molecular models for simulation of rarefied gas flows using direct simulation Monte Carlo method," Department of Mechanical Engineering, pp. 233-252, 2008.