شبیه‌سازی سه‌بعدی پمپ مولکولار یک ماشین سانتریفیوژ با شیارهای مختلف با حلگر مولکولی dsmcFoam

مسعود خواجه نوری[۱*]، سیدجابر صفدری[۱و۲]، صادق یوسفی نسب[۱و۲]، محمد حسن ملاح[۱و۲]، محمد حسین عسکری[۱]

۱. شرکت فناوری‌های پیشرفته ایران، سازمان انرژی اتمی، صندوق پستی :۵۹۳۱-۱۴۳۹۹۵، تهران- ایران

۲. پژوهشکده مواد و سوخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی، صندوق پستی :۸۴۸۶-۱۱۳۶۵، تهران- ایران

چکیده:

پمپ مولکولار قطعه ثابت در فضای خارجی روتور یک سانتریفیوژ می‌باشد. پمپ مولکولار دارای شیارهایی است که وقتی ذرات در حال حرکت با آن برخورد می‌کنند با توجه به جهت شیارها، به صورتی منحرف می‌شوند که مجدداً به درون روتور برمی‌گردند. یکی از روش‌های مولکولی برای تحلیل جریان گاز درون شیار پمپ مولکولار، روش DSMC می‌باشد. در این مقاله از حلگر dsmcFoam برای شبیه‌سازی فضای بالای پمپ مولکولار یک ماشین سانتریفیوژ استفاده گردیده است. با توجه به متن باز بودن حلگر dsmcFoam و قابلیت اصلاح و تغییر کد، می‌توان شرایط خاص موردنظر برای حل مسئله را از طریق کدنویسی در این حلگر اعمال کرد. حلگر dsmcFoam توانایی شبیه‌سازی تمام هندسه‌های دوبعدی و سه‌بعدی را برای هندسه‌های مختلف دارد. در این مقاله، به شبیه‌سازی سه‌بعدی فضای یک پمپ مولکولار با شیارهای ذوزنقه ای، نیم دایره ای و نیم بیضی با استفاده از این حلگر پرداخته می‌شود و در انتها نسبت تراکم ایجاد شده با هندسه های مختلف مورد مقایسه قرار می گیرد.

کلیدواژه‌ها: حل مولکولی، فضای پمپ مولکولار، نسبت تراکم، dsmcFoam

Three-dimensional simulation of molecular pump a centrifuge machine for different geometries using dsmcFoam molecular solver

Masoud khajenoori[*1], Jaber safdari[1, 2], Sadegh Yousefi-Nasab[1, 2], Mohammad Hassan Mallah[1, 2], Mohammad Hossein Askari[1]

1. Iran Advanced Technologies Company, Atomic Energy Organization of Iran
2. Material and Nuclear Fuel Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Atomic Energy Organization of Iran

Abstract:

The molecular pump of the fixed part outside the rotor is a centrifuge. The molecular pump has grooves that deviate when moving particles due to the direction of the grooves, so that they return to the rotor. One of the molecular methods for analyzing the gas flow inside the molecular pump groove is DSMC method. In this paper, dsmcFoam has been used for simulating the molecular pump top space of a centrifuge machine. Regarding the open source, code improvement and change capability, it could be applied in this solver the relating specific conditions to solve the problem using programming. dsmcFoam has the ability to simulate the all two-dimensional and three-dimensional geometries for different geometries. In this paper, a three-dimensional simulation of the space of a molecular pump with trapezoidal, semi-circular and semi-oval grooves using this solver is performed and finally the compression ratio created with different geometries is compared.

Keywords: Molecular Solving, Molecular Pump Space, compression ratio, dsmcFoam

Email: khajenoori1390@gmail.com

۱. مقدمه

در سال‌های اخیر شبیه‌سازی جریان داخل یک ماشین سانتریفیوژ با استفاده از روش DSMC مورد توجه قرار گرفته است. از جمله پرادهان و کوماران در سال ۲۰۱۱ و ۲۰۱۶ به بررسی شار جرمی محوری بر اساس ترم بی‌بعد در راستای شعاعی با استفاده از روش DSMC پرداختند [۲،۱]. استفاده از روش‌های بر پایه مولکولی مثل DSMC به دلیل اینکه می‌بایستی مسیر حرکت و برخورد هر ذره با یکدیگر و با دیواره به طور جداگانه مورد بررسی قرار گیرد، روشی زمانبر محسوب می‌شوند به همین دلیل با گذشت زمان نیاز به نرم‌افزارهایی که قابلیت اجرای موازی کدهای DSMC را داشته باشند رو به افزایش می‌باشد. در کنار نرم‌افزارهای تجاری مانند Fluent و CFX که به حل جریان سیال به روش عددی می‌پردازد، نرم‌افزارهای متن باز نیز در این شاخه ارائه شده‌اند که مهمترین مزیت آن‌ها دسترسی به متن کد می‌باشد. در نتیجه می‌توان حلگر و شرایط مرزی مورد نظر را مطابق با مسئله تغییر داد و نزدیک‌ترین شرایط شبیه‌سازی را برای هندسه مورد نظر به دست آورد [۴-۲]. یکی از مهمترین نرم‌افزارهای متن باز، OpenFoam می‌باشد که امکان حل گسترده‌ای از پدیده‌های فیزیکی همچون جریان‌های قابل‌تراکم و غیرقابل‌تراکم، جریان‌های بر پایه مولکولی، جریان دوفازی، جریان در مواد متخلخل، دینامیک گازها، احتراق، توربوماشین و ... را دارا می‌باشد. در این مقاله حلگر dsmcFoam برای شبیه‌سازی جریان مولکولی گاز در فضای بالای پمپ مولکولار یک ماشین سانتریفیوژ انتخاب گردیده است. این حلگر برای جریان‌های خارجی مورد استفاده قرار می‌گیرد به همین دلیل مطالعه جریان گاز فضای بالای پمپ مولکولار با حلگر dsmcFoam تاکنون مورد بررسی قرار نگرفته است ولی در سال ۲۰۱۳ کوین گت و همکارانش اولین بار جریان داخلی را با استفاده از این حلگر برای یک اتاقک PVD مورد استفاده قرار دادند[۲]. وایت در سال ۲۰۱۵ از تکنیک سلول‌بندی انطباقی (AMR) برای یک هندسه دلخواه با ایجاد تغییر در عدد نادسن جریان آن برای حلگر dsmcFoam اصلاح‌شده استفاده کرد و به نتایج خوبی دست پیدا کرد [۲ و۶-۷]. جرم مولکولی گاز می‌تواند تاثیرات چشم‌گیری در نتایج شبیه‌سازی و همچنین مقادیر توان اصطکاکی داشته باشد. در این مقاله بر اساس انتخاب شرط مرزی های مناسب برای هندسه پمپ مولکولار، به شبیه سازی سه بعدی آن با شیارهای مختلف پرداخته شده است و تغییرات فشار و سرعت برای دو حالت گاز هوای خالص و ترکیب یکسان از گازهای هوا و هگزافلوراید اورانیم پرداخته می‌شود تا بتوان تاثیر جرم مولکولی گاز را بر نتایج شبیه‌سازی مشاهده کرد.

۲. روش کار

۲. ۱. معرفی حلگر dsmcFoam

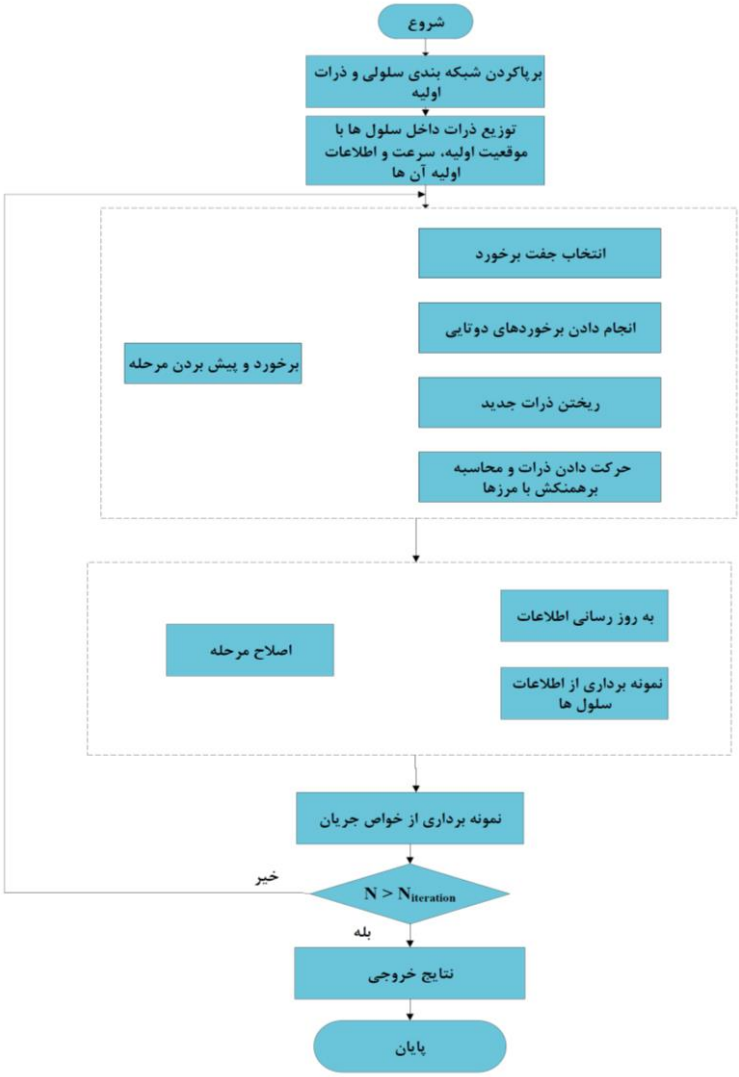
با توجه به اینکه روش انتخابی برای شبیه‌سازی فضای بالای پمپ مولکولار روش DSMC می‌باشد، یکی از نرم‌افزارهای مورد استفاده، نرم‌افزار متن باز OpenFoam می‌باشد که قابلیت شبیه‌سازی تمامی رژیم‌های جریانی را دارا می‌باشد که این امر می‌تواند آن را تبدیل به یک نرم‌افزار بسیار قدرتمند سازد. حلگر dsmcFoam یکی از حلگرهای موجود در نرم افزار متن باز OpenFoam می‌باشد. این نرم‌افزار، یکی از محدود نرم‌افزارهای کد باز در زمینه CFD و روش‌های لاگرانژی است که به دلیل امکان مشاهده و ویرایش معادلات و همچنین افزودن معادلات و مدل‌های جدید به آن، در بسیاری از پروژه‌های دانشگاهی، مورد استفاده قرار می‌گیرد. حلگر dsmcFoam که تحت OpenFoam نسخه 1.5 توسط مکفرسن[۱] و اسکانلن[۲] از دانشگاه استراکلاید توسعه یافت و دارای قابلیت‌های زیر می‌باشد:

- ✓ شبیه‌سازی جریان پایا و گذرا توسط پیشروی از طریق بازه‌های زمانی کوچک؛

[1] Graham Macpherson
[2] Tom Scanlon

- ✓ توانایی شبیه‌سازی هندسه‌های دوبعدی و سه‌بعدی پیچیده (هندسه‌های دلخواه) (که این مزیت خود باعث دشوار شدن نمونه‌گیری از سلول‌ها می‌شود)؛
- ✓ توانایی تعریف صفحه متقارن و مرزهای دوره‌ای (Cyclic Boundary)؛
- ✓ قابلیت اضافه کردن انواع گونه‌های گازی (گازهای چندجزئی) در شبیه‌سازی؛
- ✓ امکان موازی‌سازی با روش MPI با تعداد هسته‌های نامحدود؛
- ✓ امکان محاسبه انرژی ارتعاشی مورد استفاده در برخوردهای غیرالاستیک؛
- ✓ امکان شبیه‌سازی واکنش‌های شیمیایی با استفاده از مدل (Q-K (Quantum-Kinetic؛
- ✓ امکان تغییر و توسعه کدها و حلگر؛
- ✓ توانایی سنجش خواص جدید میدان با روش‌های جدید؛
- ✓ ایجاد کد DSMC با استفاده از الگوریتم‌های موجود برای دادن مقادیر اولیه به کد MD و همچنین مسیریابی ذرات در مش‌های بدون ساختار؛
- ✓ dsmcFOAM با موفقیت مورد تست قرار گرفته است و نتایج آن انطباق خوبی با حل‌های تحلیلی و کدهای DSMC هم‌ردیف خود دارد.

در نتیجه با توجه به قابلیت‌های این حلگر، جهت شبیه‌سازی رفتار گاز در فضای پمپ مولکولار انتخاب گردیده است. شکل (۳) الگوریتم روش DSMC را نشان می‌دهد.



شکل ۱. الگوریتم روش DSMC

به طور کلی روش DSMC شامل مراحل: مقدار دهی اولیه، شبکه بندی ناحیه محاسباتی، حرکت دادن ذرات و برخورد با سطح، برخورد ذرات با یکدیگر، نمونه‌گیری از خواص میکروسکوپیک می باشد.

۳. نتایج

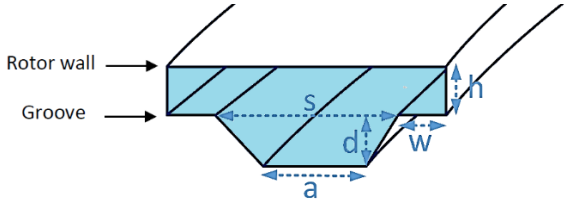
۳. ۱. شبیه‌سازی فضای پمپ مولکولار

مشخصات هندسی و عملیاتی مربوط به پمپ مولکولار یک ماشین فرضی در جدول زیر آورده شده است. بر اساس مشخصات ذکر شده در این جدول، شبیه‌سازی پمپ مولکولار صورت گرفته است و پس از به تعادل رسیدن جریان، پروفایل‌های توزیع فشار برای آن‌ها با استفاده از حلگر dsmcFoam به دست آمده است.

جدول ۱. لیست پارامترهای بهینه پمپ مولکولار ماشین.

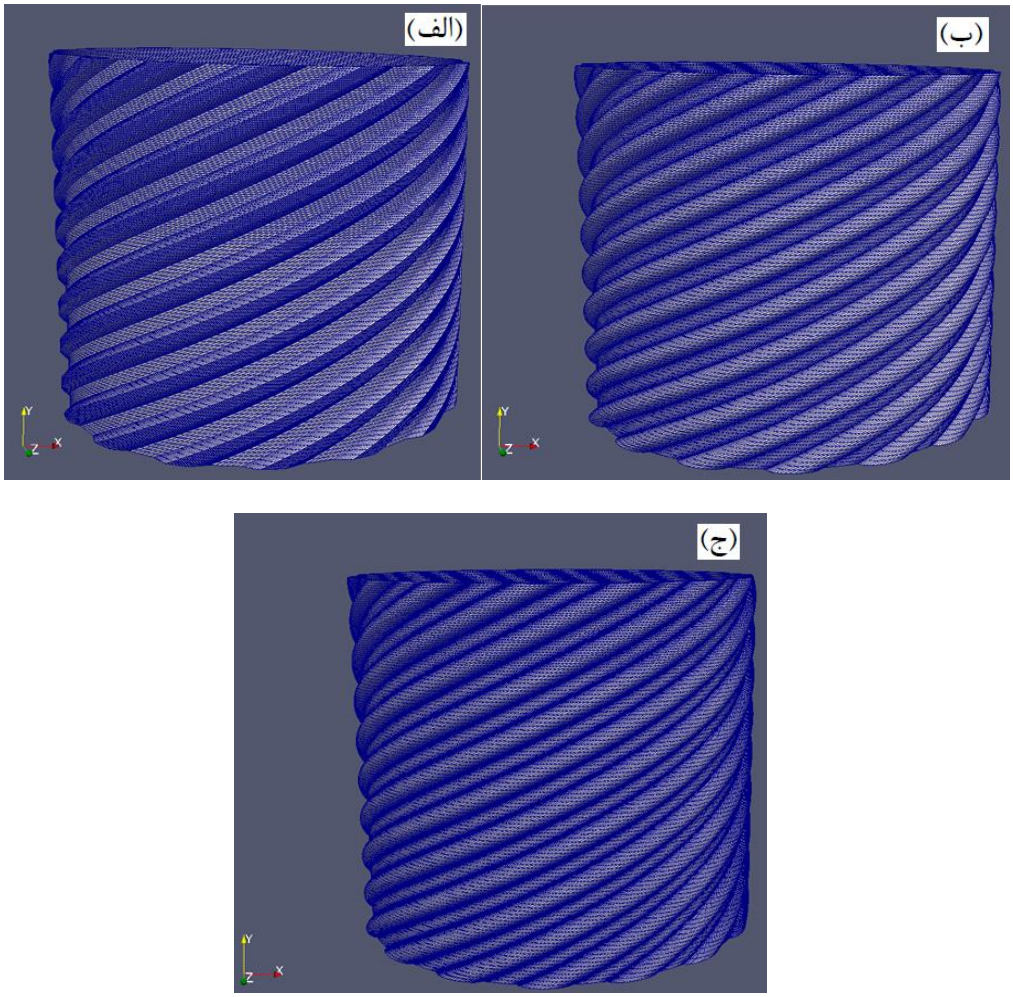
طول عملیاتی پمپ (mm)	عرض پایین شیار (mm)	عرض بالای شیار (mm)	عمق شیار (mm)	لقی (mm)	زاویه با محور (درجه)	تعداد شیار
۲۵	۷/۱	۱۵	۵/۱	۲	۳۶	۱۳

در این مقاله توسط حلگر dsmcFoam جریان حاصل از شبیه سازی با انتخاب مقدار بازه زمانی ۱×۱۰^{-۵} ثانیه پس از ۱/۰۰۰/۰۰۰ تکرار با سیستم پردازش موازی به پایداری رسیده است. برای حداقل شدن خطای آماری، تعداد ذرات شبیه-سازی باید به اندازه کافی زیاد باشد. تعداد کل مولکول‌ها بر واحد حجم که به طور یکنواخت در محیط شبیه سازی قرار می‌گیرند برابر $۱/۴۰۶ \times ۱۰^{۲۱}$ انتخاب گردیده است و مقدار ضریب تکثیر (نسبت تعداد مولکول‌های واقعی به ذرات شبیه‌سازی شده) برابر $۲/۸۱۲ \times ۱۰^{۱۵}$ در نظر گرفته شده است در نتیجه تعداد ذرات شبیه‌سازی در این تحقیق برابر ۵۰۰/۰۰۰ می‌باشد. جهت استفاده از برخوردهای همسایه در مرحله برخورد ذرات با یکدیگر، از تکنیک زیرشبکه استفاده شده است و تعداد زیرشبکه‌های مورد استفاده در هر شبکه برابر ۴ در نظر گرفته شده است. دمای اولیه مولکول‌های گاز و دمای تمامی دیواره‌ها ۳۰۰ کلوین در نظر گرفته شده است. جهت بررسی اثر سطح مقطع شیار، شبیه سازی سه بعدی پمپ مولکولار برای شیار ذوزنقه‌ای، نیم‌بیضی و نیم‌دایره‌ای برای گاز هوا با نرم افزار گمبیت ترسیم و یکنواخت شبکه‌بندی شده است. به عنوان نمونه سطح مقطع شیار ذوزنقه ای در شکل زیر بصورت شماتیک نشان داده شده است. جهت مقایسه سطوح مقطع نیم دایروی و نیم بیضی مساحت سطح مقطع آنها با شیار ذوزنقه ای یکسان در نظر گرفته شده است.



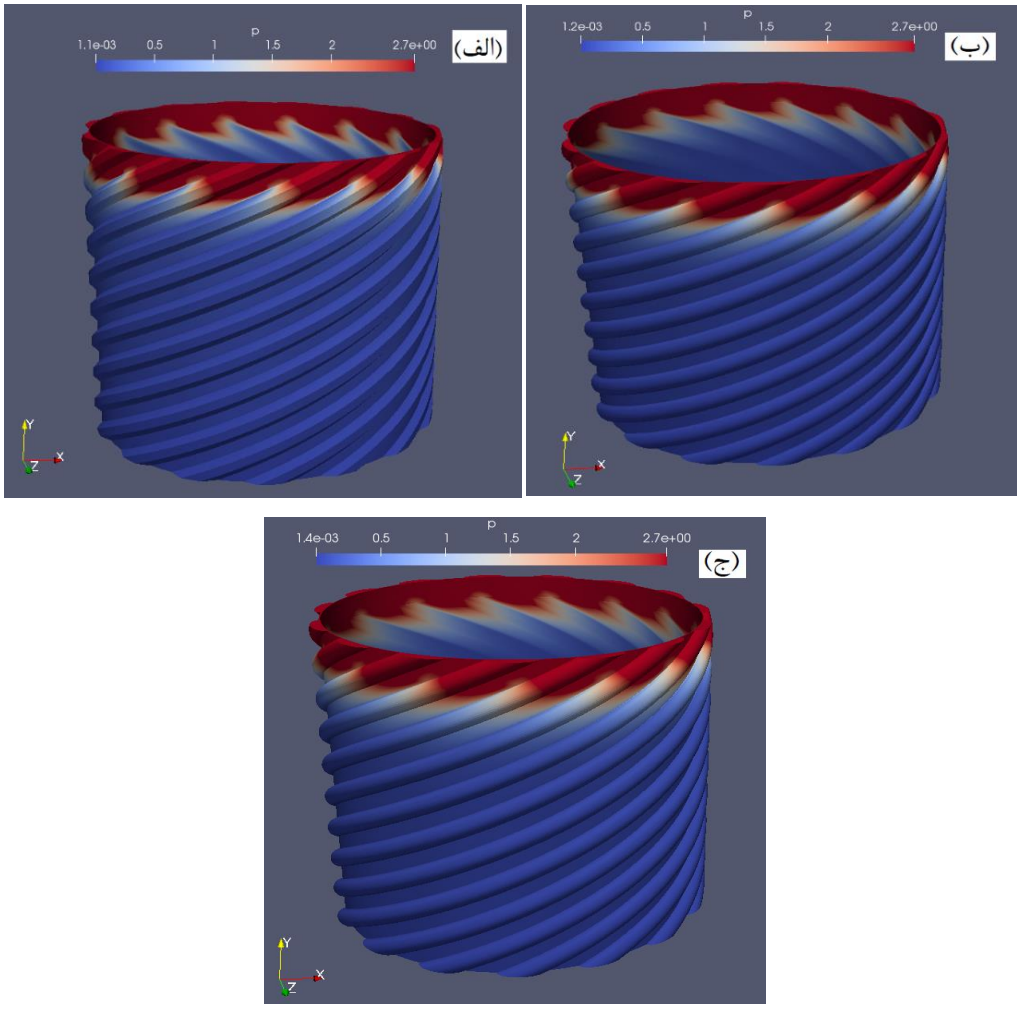
شکل ۲. هندسه یک شیار با سطح مقطع ذوزنقه‌ای

در شکل زیر هندسه شبکه بندی شده برای پمپ مولکولار با شیار ذوزنقه‌ای، نیم‌بیضی و نیم‌دایره‌ای آورده شده است. لازم به ذکر است تعداد شبکه‌های هندسه با شیار ذوزنقه‌ای، نیم‌بیضی و نیم‌دایره‌ای به ترتیب ۲۹۰۰۰۰، ۴۳۹۰۰۰ و ۳۱۵۰۰۰ می‌باشد.



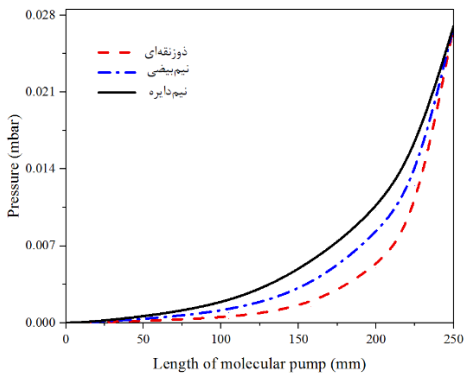
شکل ۳. هندسه شبکه بندی شده پمپ مولکولار با (الف) شیار ذوزنقه‌ای، (ب) نیم‌دایره‌ای و (ج) نیم‌بیضی.

پروفایل‌های فشار برای پمپ مولکولار با شیار ذوزنقه‌ای، نیم‌بیضی و نیم‌دایره‌ای در شکل زیر آورده شده است.



شکل ۴. پروفایل های فشار در طول پمپ مولکولار برای (الف) شیار ذوزنقه‌ای، (ب) نیم‌بیضی و (ج) نیم‌دایره‌ای.

نمودار توزیع فشار در طول پمپ مولکولار برای پمپ مولکولار با شیار ذوزنقه‌ای، نیم‌بیضی و نیم‌دایره‌ای در شکل زیر آورده شده است. با توجه به شکل زیر توزیع فشار در طول پمپ مولکولار برای شیار نیم‌دایره‌ای بیشتر از شیار نیم‌بیضی و شیار نیم‌بیضی بیشتر از ذوزنقه‌ای می‌باشد. از آنجائیکه در شیار نیم بیضی عمق شیار مدیریت شده و مقدار ماند ذرات گاز درون شیار نسبت به شیار نیم‌دایره‌ای کمتر می‌باشد لذا نمودار فشار گاز در طول پمپ شیار نیم‌دایره‌ای بیشتر از شیار با سطح نیم‌بیضی می‌باشد.



شکل ۵. نمودار فشار در طول پمپ برای پمپ مولکولار با شیارهای مختلف.

نتایج شبیه‌سازی پمپ مولکولار با شیارهای مختلف برای گاز هوا در جدول زیر آورده شده است. با توجه به جدول زیر با ثابت نگه‌داشتن فشار در بالای پمپ مولکولار فشار در پایین پمپ برای شیار با سطح مقطع ذوزنقه‌ای کمترین مقدار و برای شیار نیم‌دایره‌ای بیشترین مقدار می‌باشد، در نتیجه نسبت تراکم پمپ مولکولار با شیار ذوزنقه‌ای نسبت به دو شیار نیم‌بیضی و نیم‌دایره‌ای بیشترین نسبت تراکم دارد.

جدول ۲. فشار و نسبت تراکم پمپ مولکولار با شیارهای مختلف.

نوع شیار	فشار بالای پمپ (pa)	فشار پایین پمپ (pa)	نسبت تراکم
ذوزنقه‌ای	۲/۵	۰/۰۰۱۳	۲۴۶۸/۶۸
نیم دایره‌ای	۲/۵	۰/۰۰۱۲	۱۹۲۹
نیم بیضی	۲/۵	۰/۰۰۱۱	۲۲۵۰

۴. بحث ونتیجه‌گیری

به دلیل این که روش‌های مولکولی قابلیت مدلسازی تمامی رژیم‌های جریان (ناحیه مولکولی و پیوسته) را دارند و همچنین در ناحیه مولکولی، معادلات ناویراستوکس چه به صورت خطی‌شده و چه غیرخطی فاقد اعتبار می‌باشند، حلگر بر پایه مولکولی dsmcFoam از نرم‌افزار OpenFoam انتخاب شده است که بتوان با استفاده از آن، رفتار گاز در فضای پمپ مولکولار را مورد بررسی قرار داد. نتایج نشان داد با ثابت نگه‌داشتن فشار در بالای پمپ مولکولار فشار در پایین پمپ برای شیار با سطح مقطع ذوزنقه‌ای کمترین مقدار و برای شیار نیم‌دایره‌ای بیشترین مقدار می‌باشد، در نتیجه نسبت تراکم پمپ مولکولار با شیار ذوزنقه‌ای نسبت به دو شیار نیم‌بیضی و نیم‌دایره‌ای بیشترین نسبت تراکم دارد.

مراجع

*[1] 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. 140-142, (2011).*
*[2] Pradhan, S," **The generalized Onsager model for a binary gas mixture with swirling feed**" 14th International Energy Conversion Engineering Conference, (2016).*
*[3] Scanlon, T.J., Roohi, E., and White, C.,"**An open source, parallel DSMC code for rarefied gas flow in arbitrary geometries**," Mech. Rev. E 72, pp.3-7,(2010).*
*[4] P. Bahukudumbi, J. Park and A. Jae Hyun Beskok, "**A Unified Engineering Model For Steady And Quasi-Steady Shear-Driven Gas Microflows**" Mechanical Engineering Department, pp. 291-314, 2003.*
*[5] Veijola and M. Turowski, "**Compact Damping Models For Laterally Moving Microstructures With Gas-Rarefaction Effects**," Microelectromech, vol. 10, p. 263–273, 2001.*
*[6] Y. Sone, Takata and TOhwada, "**Nunerical Analysis Of The Plane Couette Flow Of A Rarefied Gas On The Basis Of The Linearized Boltzmann Equation For Hard Sphere Molecules**," Eur.J.Mech., vol 9,pp.273-288,1990.*
*[7] G.A. Bird," **Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulationof Gas Flows**" Oxford Science Publications, Midsomer Norton, Avon, UK,1994*