مدلسازی و شبیه سازی یک شیار ذوزنقه ای از پمپ مولکولار ماشین سانتریفیوژ با حلگر مولکولی dsmcFoam

یوسفی‌نسب، صادق*(۱) -صفدری، سیدجابر(۱) -کریمی ثابت، جواد(۱)- خواجه نوری، مسعود(۲)- واحدی، حامد(۲)-امینی، الهام(۲)-محمد مهدی، شادمان(۲)

(۱) سازمان انرژی اتمی، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، پژوهشکده مواد و سوخت هسته ای

(۲) شرکت فناوری‌های پیشرفته ایران

چکیده

حفظ خلأ در فضای بین روتور و بدنه، در حین فرایند گازدهی و غنی‌سازی در کاهش مقدار توان اصطکاکی ماشین سانتریفیوژ حائز اهمیت است. به همین دلیل قطعه‌ای به نام پمپ مولکولار در قسمت بالایی بدنه متصل می‌شود. نسبت تراکم یک پمپ مولکولار با روش‌های تحلیلی و شبیه سازی مولکولی قابل محاسبه می‌باشد. به دلیل دقت بالاتر روش‌های مولکولی نسبت به روش‌های تحلیلی، در این مقاله به شبیه‌سازی یک پمپ مولکولار با شیار ذوزنقه‌ای با روش مولکولی پرداخته می‌شود. برای شبیه‌سازی مولکولی پمپ از حلگر dsmcFoam استفاده گردیده است و در انتها تغییرات فشار، سرعت برآیند و نسبت تراکم ایجاد شده توسط پمپ مولکولار فرضی محاسبه می گردد.

کلمات کلیدی: *پمپ مولکولار، OpenFoam، ماشین سانتریفیوژ، رژیم مولکولی، شیار ذوزنقه ای*

A trapezoidal groove modelling and simulating of a centrifuge machine molecular pump using molecular-based dsmcFoam solver

Yousefinasab, Sadegh*[1]; Safdari, Seyed-Jaber[1]; Karimi sabet, Javad[1]; Khajenoori, Masoud[2]; Vahedi, Hamed[2]; Amini, Elham [2]; Shadman, Mohammad mehdi[2]

[1]Atomic Energy Organization of Iran, Nuclear Science and Technology Research Institute, Material and Nuclear Fuel Research School

[2]Iran Advanced Technologies Company, Atomic Energy Organization of Iran

Abstract

Vacuum maintaining at the space between the rotor and casing during the gas-feeding and enriching process in decreasing the value of centrifuge machine friction power is of significant importance. Therefore, a piece named molecular pump is attached at the top part of casing. The simulation of molecular pump effect for compression ratio establishment is computable using molecular and analytical methods. Regarding the higher precision of molecular methods than analytical methods, the simulation of a molecular pump with trapezoidal groove using molecular method have been done in this paper. A dsmcFOAM solver for molecular simulation of the pump has

been used. At the end, it has been calculated the pressure changes, magnitude velocity and compression ratio established by hypothetical molecular pump.

Keywords: Molecular Pump, OpenFoam, Centrifuge Machine, Molecular Regime, trapezoidal groove

مقدمه

پمپ مولکولار تجهیزی دو سرباز مشتمل بر دو سیلندر هم‌محور یکی ثابت و دیگری متحرک است. در اثر چرخش عضو متحرک و وجود شیارهای مارپیچ روی جدار داخلی سیلندر ثابت، مولکول‌های گاز که دارای سرعت حرارتی می‌باشند با برخورد به سطح متحرک، مؤلفه سرعتی در جهت چرخش سیلندر در درون شیارها به خود می‌گیرند. در محل ورود لوله‌های گازرسانی به روتور، به دلیل آنکه لوله‌ها ثابت‌اند و روتور در حال دوران است، فاصله‌ای وجود دارد. با توجه به آنکه فضای بین روتور و بدنه، قبل از گازدهی خلأ می‌شود، تعدادی از مولکول‌ها با توجه به تمایل حرکت ذرات از فضای پرفشارتر به فضای کم فشارتر، از این فاصله عبور کرده، وارد فضای بین بدنه و روتور می‌شوند. همچنین به دلیل وجود نشتی در فضای بین روتور و بدنه، مولکول‌های هوا به این فضا نفوذ می‌کنند و باعث افزایش فشار آن می‌گردند. از طرفی حفظ خلأ مذکور در حین فرایند گازدهی و غنی‌سازی بسیار حائز اهمیت می‌باشد. به همین دلیل قطعه‌ای به نام پمپ مولکولار به انتهای بالایی بدنه متصل می‌شود. ایده پمپ مولکولار اولین بار توسط جائده[۱]در سال ۱۹۱۲ مطرح و توسعه یافت که شامل یک استوانه دوار با سرعت بالا درون یک محفظه ثابت بود. جائده علاوه برساخت پمپ مولکولار، یک تحلیل تئوری تقریبی از پمپ مولکولار نیز ارائه نمود. او نواحی مولکولی و پیوسته را در یک معادله ترکیب نموده و با استفاده از پدیده لغزش، این دو ناحیه را مدل نمود [۱]. هولویک در سال ۱۹۲۳، یک مدل بزرگتر دارای شیار مارپیچ حلزونی شکل در درون محفظه ثابت، طراحی نمود که مبنای طراحی پمپ‌های مولکولار امروزی می‌باشد [۲]. او نخستین کسی بود که به‌طور کامل به بررسی و اصلاح پمپ جائده پرداخت. در سال ۱۹۶۱، سیکافوس و همکارانش[۲]با استفاده از نتایج هولویک با در نظر گرفتن سه سطح مقطع برای یک شیار و با در نظر گرفتن سه جریان تأثیرگذار درحرکت جریان گاز درون شیار، رابطه ای را برای محاسبه مقدار نسبت تراکم در یک پمپ مولکولار ارائه کردند[۳]. سپس ماوریس[۳]یک مدل چند شیاره ابداع نمود که ضمن کاهش نشت داخلی (جریان برگشتی از بالای پمپ)، عملکرد پمپاژ را نیز افزایش می‌داد [٤].

[۱] Gaede

[۲] Sickafus et al.

[۳] Maurice

این پمپ فشار تخلیه و نسبت تراکم بالایی داشت، اما سرعت پمپاژ پایین، استفاده از این نوع پمپ‌ها را محدود می نمود. ماوریس در سال ۱۹۷٤ در طراحی پمپ مولکولار، محدودیت فشار طراحی ناشی از فشار بخار روان کار مُورداستفاده در قطعات جانبی روتور را مطرح نمود [٥]. روش‌های مختلفی مانند روش تحلیلی (معادلات ساوادا و سیکافوس) برای مدل‌سازی پمپ مولکولار استفاده‌شده است. استفاده از روش‌های تحلیلی به دلیل استفاده از فرضیات زیاد جهت رسیدن به رابطه مورد نظر، دارای خطاهای محاسباتی زیادی در رسیدن به مقدار نسبت تراکم نهایی می‌باشد. بنابراین استفاده از روش‌هایی بر مبنای لاگرانژین مانند روش مولکولی برای تحلیل جریان درون شیار پمپ مولکولار امری ضروری می‌باشد. یکی از روش‌های مولکولی برای تحلیل جریان گاز درون شیار پمپ مولکولار روش DSMC می‌باشد. با توجه به اینکه حلگر متن باز dsmcFoam قابلیت موازی‌سازی و شبیه سازی هندسه پیچیده پمپ مولکولار را دارد لذا در این مقاله برای تحلیل جریان درون پمپ مولکولار با روش مولکولی از این حلگر استفاده گردیده است.

تئوری

به دلیل بالا بودن عدد نادسن برای رژیم جریان روبروی پمپ مولکولار(از رژیم گذرا برای بالای پمپ مولکولار تا رژیم کاملا مولکولی در قسمت پایینی پمپ مولکولار) وهمچنین به دلیل پیچیدگی هندسه آن، حلگر dsmcFoam از نرم افزار متن بازOpenFoam می‌تواند به عنوان یک حلگر مناسب برای شبیه‌سازی پمپ مولکولار انتخاب گردد. امروزه با توجه به افزایش سرعت محاسباتی سیستم های کامپیوتری، روش های لاگرانژی مورد استفاده بیشتری قرار گرفته‌اند. در روش DSMC مولکول‌ها پس از موقعیت‌دهی و سرعت‌دهی اولیه شروع به حرکت می‌کنند و سپس مقادیر موقعیت و سرعت آن‌ها پس از برخوردشان با یکدیگر و با دیواره تغییر خواهد کرد. در انتها پس از رسیدن به پایداری، کمیت های ماکروسکوپیک بر اساس میانگین گیری از مقادیر میکروسکوپیک سرعت ذرات داخل هر شبکه قابل محاسبه می‌باشند. یک محاسبات DSMC خوب، باید دو شرط ۱- بازه زمانی(Δt) کوچک در مقایسه با میانگین زمان برخورد (τ) ۲- اندازه شبکه‌های کوچک در مقایسه با میانگین پویش آزاد (λ) را داشته باشد. در نتیجه در ادامه به نحوه محاسبه مقادیر صحیح تعداد شبکه و بازه زمانی در dsmcFoam پرداخته می شود. محا سبه تعداد شبکه، تعداد ذرات شبیه سازی، ضریب تکثیر و بازه‌زمانی برای شروع شبیه‌سازی به صورت زیر برای هر مساله‌ای قابل محاسبه می‌باشد[٦].

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \qquad (۱)$$

$$\lambda = \frac{kT}{\sqrt{2}\pi d^2 P}$$
$$P = nKT$$

با محاسبه مقدار میانگین پویش آزاد، طول هر شبکه را می‌توان با استفاده از روابط زیر محاسبه کرد:

$$\Delta x = \Delta y = \Delta z \simeq \frac{\lambda}{3-5} \quad (۲)$$

همچنین با محاسبه دانسیته عددی محیط شبیه‌سازی می‌توان تعداد واقعی مولکول در محدوده شبیه‌سازی را محاسبه کرد:

$$n = \frac{N}{V} \text{ ، } N_{Real} = nV \quad (۳)$$

تعداد شبکه‌ها در هر جهت:

$$N_x = \frac{L_x}{\Delta x}, N_y = \frac{L_y}{\Delta y}, N_z = \frac{L_z}{\Delta z} \quad (۴)$$

درنتیجه تعداد کل شبکه‌های موردنیاز در شبیه‌سازی را می‌توان از رابطه زیر محاسبه کرد:

$$N_S = N \times NPPC \quad (۵)$$

حال می‌توان ضریب تکثیر مورد استفاده در dsmcFoam را از طریق زیر محاسبه کرد:

$$F_N = \frac{N_{Real}}{N_S} \quad (۶)$$

میانگین زمان برخورد و بازه زمانی را می‌توان به صورت زیر محاسبه کرد:

$$\tau = \frac{\pi\mu}{4nkT} \quad (۷)$$

و در انتها بازه زمانی شبیه‌سازی به صورت زیر قابل محاسبه می‌باشد:

$$\Delta t = \frac{\tau}{3-5} \quad (۸)$$

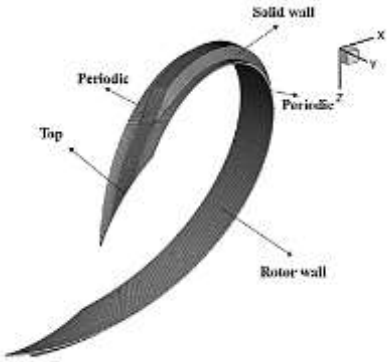
روش کار

در ابتدا هندسه یک شیار از پمپ مولکولار در نرم افزار گمبیت ترسیم و شبکه‌بندی می‌شود. به دلیل اینکه هندسه پمپ مولکولار یک هند سه متقارن می‌با شد، در نتیجه با انتخاب یک شیار و اعمال شرط مرزی آینه‌ای[۵] برای آن، می‌توان زمان و حجم محاسبات مورد نیاز برای شبیه‌سازی هندسه کامل از یک پمپ مولکولار را متناسب با تعداد شیارهای مورد استفاده در آن پمپ کاهش داد. برای این کار لازم است که نحوه تقسیم بندی هندسه در سطوحی که آینه‌ای تعریف می شوند، تا حد امکان یکسان با شند تا تلرانس شبکه ایجاد شده برای نرم افزارOpenFoam به حداقل ممکن برسد. پارامترهای هندسی و عملیاتی یک شیار ذوزنقه‌ای شکل از پمپ مولکولار فرضی در جدول زیر ارائه شده است.

جدول ۱. پارامترهای هندسی و عملیاتی برای یک شیار از پمپ مولکولار

فشار بالای پمپ مولکولار (Pa)	فاصله بین دو شیار (mm)	طول عملیاتی پمپ (mm)	عرض پایین شیار (mm)	عرض بالای شیار (mm)	عمق شیار (mm)	لقی (mm)	زاویه با محور افق (درجه)	جنس گاز
۱/۷	۹/۹۲۱	۱۷۰	۷	۱۳	۷	۱/۵	۲۷	هوا

شکل زیر نمونه‌ای از شیار ترسیم شده در نرم افزار گمبیت را با نامگذاری شرط مرزی‌های آن نشان می‌دهد.



شکل ۱.نمونه ای از هندسه و شبکه بندی یک شیار ذوزنقه ای شکل

[۵]Periodic boundary condition

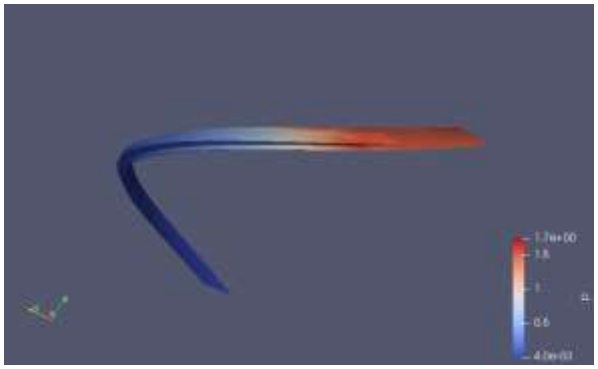
فایل هند سه و شبکه شیار مورد نظر به نرم افزار OpenFoam منتقل می‌گردد و تمامی شرط مرزی‌های منا سب برای شبیه سازی اثر پمپ مولکولار برای حلگر dsmcFoam تعریف می‌گردند. در شبیه سازی، مولکول‌های گاز واقع در بالای پمپ مولکولار به دلیل وجود اختلاف فشار بین بالا و پایین پمپ از فضای شیارها و لقی پمپ به سمت پایین پمپ حرکت می‌کنند. همچنین مولکول های قرار گرفته در فضای پایین پمپ مولکولار از طریق شرط مرزی پایین پمپ در داخل شیار قرار می‌گیرند. مقدار نشتی ورودی برای این شرط مرزی $۱۰^{-۱۰} \times ۵ \frac{mbarLit}{sec}$ در نظر گرفته شده است. روتور با چرخش خود باعث می‌شود مولکول‌هایی که در حال پایین رفتن از پمپ مولکولار می‌با شند با روتور برخورد کرده و با گرفتن یک مقدار مشخص سرعت چرخشی، از درون شیارها به سمت بالای پمپ مولکولار هدایت شوند.

نتایج

با توجه به مشخصات هندسی مطابق با جدول (۱)، برای یک فشار اولیه برابر با ۱ پاسکال، مقدار میانگین پویش آزاد (λ) برابر ۰/۰۰۶ متر، تعداد شبکه (N_S) ۲٤۰۰۰۰، تعداد ذرات شبیه سازی (N) ۸۰۰۰۰۰ و بازه زمانی ۲×۱۰^{-۵} ثانیه محاسبه و انتخاب گردیده است. همچنین نتایج بعد از ۱٤٤ ساعت با استفاده از یک سیستم با مشخصات پردازشی زیر نمونه گیری و محاسبه گردیده است.

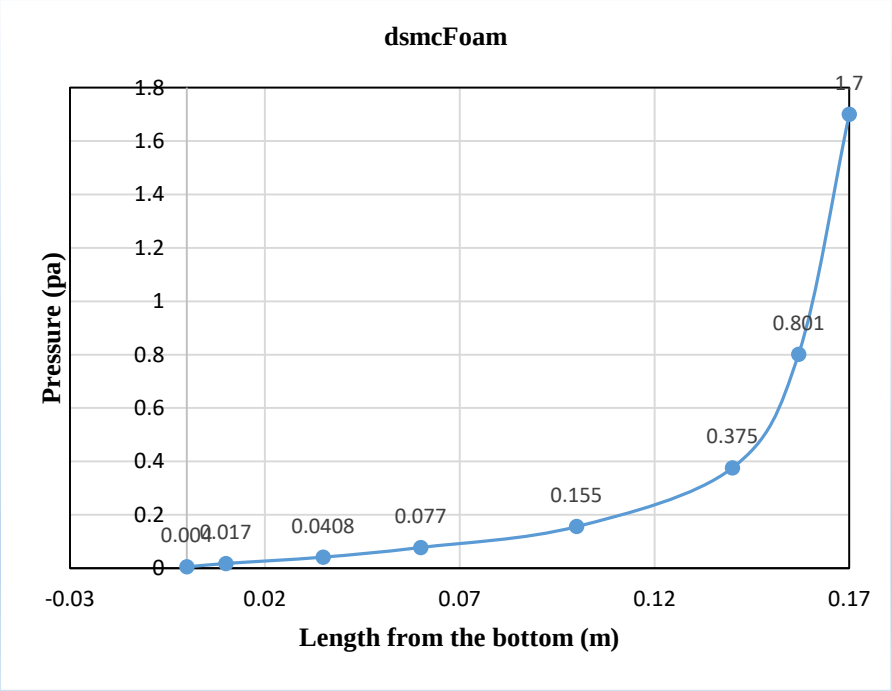
Intel (R) Core™ i7-2630QM CPU@2.00GHz 2.00GHz

شکل (۲) کانتور تغییرات فشار به دست آمده از حلگر dsmcFoam در راستای طول یک شیار را نشان می‌دهد. با توجه به شکل (۲) برای فشار بالای پمپ مولکولار برابر با ۱/۷ پاسکال، مقدار فشار در پایین پمپ مولکولار برای گاز هوا برابر با ۰/۰۰٤ پاسکال و نسبت تراکم برابر با ٤۲۵ به دست می‌آید.



شکل ۲. تغییرات فشار در طول یک شیار از پمپ مولکولار

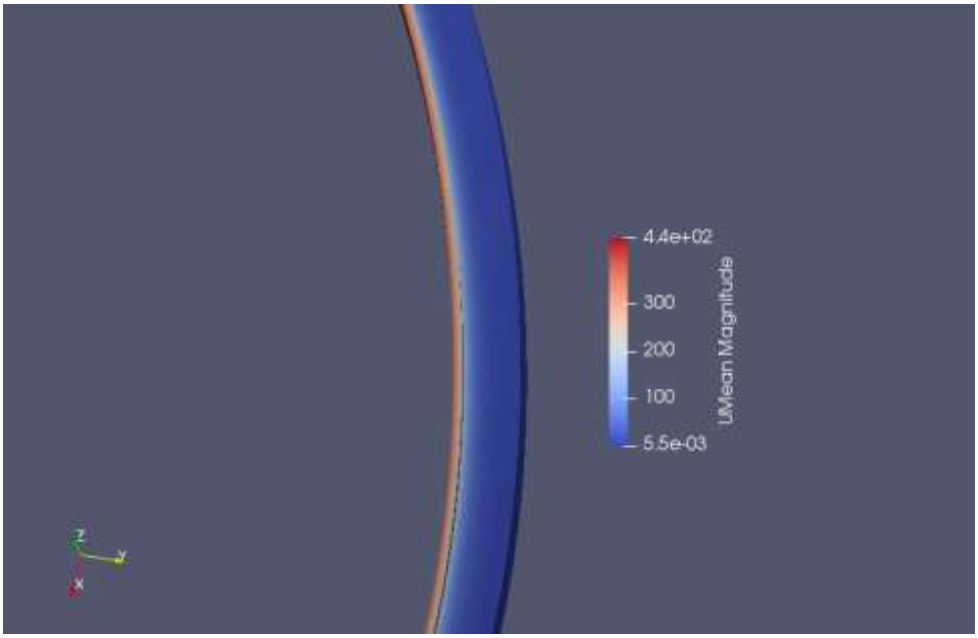
همچنین شکل (۳) تغییرات فشار در طول یک پمپ مولکولار را نشان می دهد. این شکل با ایجاد برش‌های افقی که در را ستای محوری از شیار پمپ مولکولار صورت گرفته ا ست حا صل شده ا ست. تغییرات فشار در پمپ مولکولار به صورت نمایی از بالای پمپ مولکولار تا پایین پمپ مولکولار کاهش می‌یابد. این بدان معنا می‌با شد که بیشترین نسبت تراکم در یک پمپ مولکولار در قسمت ابتدایی از پمپ اتفاق می‌افتد.



شکل ۳. تغییرات فشار در طول عمودی یک پمپ مولکولار

تغییرات شعاعی سرعت برآیند در یک شیار در شکل (٤) نشان داده شده است. به دلیل اینکه فشار در پایین یک شیار (از نوع رژیم جریان کاملاً آزاد) می‌با شد لذا مولکول‌ها بر اثر برخورد شان با دیواره چرخان، تمامی سرعت چرخشی دیواره را به خود نمی‌گیرند و بخشی از سرعت دیواره را می‌گیرند به عبارتی دیگر به علت حضور کم تعداد مولکول ها و در نتیجه پایین بودن تعداد برخورد بین مولکول های برگشت داده شده از دیواره روتور با مولکول های روبرویی خود، بر اثر میانگین گیری از مقدار سرعت مولکول های قرار گرفته در شبکه های واقع

شـــده در کنار روتور، مقدار ســـرعت برآیند از ســـرعت چرخشـــی روتور کمتر محاســـبه می گردد که این دیدگاه مولکولی مفهوم لغزش در رژیم جریان پیوسته-لغزشی می‌باشد.



شکل ٤. تغییرات سرعت چرخشی در یک شیار پمپ مولکولار

بحث ونتیجه گیری

در این مقاله به دلیل تقارن در هندسه یک پمپ مولکولار می‌توان یک شیار از پمپ مولکولار را انتخاب کرده و با اعمال شرط مرزی آینه‌ای به عنوان یک شرط مرزی تکرار شونده، به شبیه‌سازی مولکولی آن پرداخت. نتایج نشان دهنده یک توزیع نمایی برای موقعیت مولکول‌ها در شیار پمپ مولکولار می‌با شد که این امر باعث ایجاد گرادیان فشـــار یا دانســـیته جرمی در پمپ می‌گردد. همچنین به دلیل رژیم کاملاً مولکولی در طول یک پمپ مولکولار، مولکول‌های برخورد کننده با دیواره روتور چرخان فقط بخشی از سرعت روتور را به خود می‌گیرند. از آنجائیکه یکی از مهمترین خروجی‌های مورد نظر برای یک پمپ مولکولار به دســـت آوردن نســـبت تراکم پمپ می‌باشـــد،

نسبت تراکم ایجاد شده توسط این شبیه سازی برای یک پمپ مولکولار با شیارهای ذوزنقه‌ای و مشخصات هندسی و عملیاتی مطابق با جدول (۱) برابر ٤٢٥ بدست آمده است.

مراجع

[1] W. Gaede ″،Die molekularluflpumpe ″، Annalen der Physik 346(7),337-380,1913

[2] F. Holweck “,Pumpe molecular helicoid ale ”,Onde. Elect ,.p. 497, 1923.

[3]N. N. B. L. A. Sickafus, “The holweck type molecular pump,” university of virginia, 1961.

[4] L. Maurice ،"The location of the fluid pump in the cornea،" Journal of physiologhy221(1),43-54,1972

[5] L. Maurice, “Pivot for rotating molecular pump,” Jpn. Appl. Phys. Suppl , p. 21, 1974

[6] G.A. Bird, "Molecular gas dynamic and direct simulation monte carlo", Oxford Engineering Science Series,1976.