شبیه‌سازی سه‌بعدی فضای بالای پمپ مولکولار یک ماشین سانتریفیوژ با حلگر مولکولی dsmcFoam و محاسبه توان اصطکاکی

یوسفی‌نسب، صادق*(۱) -صفدری، سیدجابر(۱) -کریمی ثابت، جواد(۱)- خواجه نوری، مسعود(۲)- - داودی، مهرداد(۲)-قربانپور، علی اصغر(۱)-امینی، الهام(۲)

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

(۲) شرکت فناوری‌های پیشرفته ایران

چکیده:

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 بالای یک پمپ مولکولار با استفاده از این حلگر پرداخته می‌شود و در انتها مقادیر توان اصطکاکی ایجاد شده بر روی کپ بالایی روتور با استفاده از روش‌های مولکولی محاسبه می‌گردد.

کلمات کلیدی: *حل مولکولی، فضای بالای پمپ مولکولار، توان اصطکاکی*، dsmcFoam

Three-dimensional simulation of molecular pump top space of a centrifuge machine using dsmcFoam molecular solver and friction power calculation

Yousefinasab, Sadegh*[1]; Safdari, Seyed-Jaber[1]; Karimi sabet, Javad[1]; Khajenoori, Masoud[2]; Davoudi, Mehrdad[2]; Ghorbanpour, Ali asghar[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:

In this paper, dsmcFoam solver 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. It has been done the top space three-dimensional simulation of

a molecular pump using this solver. At the end, friction power values established on the rotor top cap using molecular methods have been calculated.

Keywords: *Molecular Solving, Molecular Pump Top Space, Friction Power, dsmcFoam*

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 ۲۰۱٦ 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 [۳]. 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[٤]. وایت در سال ۲۰۱۵ از تکنیک سلول‌بندی انطباقی[۱](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 [۵]. جرم مولکولی گاز می‌تواند تاثیرات چشم‌گیری در نتایج شبیه‌سازی و همچنین مقادیر توان اصطکاکی داشته باشد. در این مقاله بر اساس انتخاب شرط مرزی‌های مناسب برای هندسه فضای بالای پمپ

[۱] Adaptive Mesh Refinement

مولکولار، به شبیه سازی سه بعدی آن پرداخته شده است و تغییرات فشار و سرعت برای دو حالت گاز هوای خالص و ترکیب یکسان از گازهای هوا و اورانیم هگزافلوراید مورد بررسی قرار می‌گیرند تا بتوان تاثیر جرم مولکولی گاز را بر نتایج شبیه‌سازی مشاهده کرد.

۲- تئوری

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. 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 یکی از حلگرهای موجود در نرم افزار متن باز OpenFoam می‌باشد. این حلگر تحت OpenFoam نسخه *1.5* توسط مکفرسن[۲] و اسکانلن[۳] از دانشگاه استراکلاید توسعه یافت و دارای قابلیت‌های زیر می‌باشد:

- ✓ شبیه‌سازی جریان پایا و گذرا توسط پیشروی از طریق بازه‌های زمانی کوچک؛
- ✓ توانایی شبیه‌سازی هندسه‌های دوبعدی و سه‌بعدی پیچیده (هندسه‌های دلخواه)
- ✓ توانایی تعریف صفحه متقارن و مرزهای دوره‌ای[۴]؛
- ✓ قابلیت اضافه کردن انواع گونه‌های گازی (گازهای چندجزئی) در شبیه‌سازی؛
- ✓ امکان موازی‌سازی با روش MPI با تعداد هسته‌های نامحدود؛
- ✓ امکان حل مسائل با سرعت پایین یا سرعت بالای دیواره؛
- ✓ امکان تغییر و توسعه کدها و حلگر؛

dsmcFoam با موفقیت مورد تست قرار گرفته است و نتایج آن انطباق خوبی با حل‌های تحلیلی و کدهای DSMC هم‌ردیف خود دارد. ترتیب هر مرحله از الگوریتم حلگر dsmcFoam مانند الگوریتم DSMC عمل می‌کند. الگوریتم

---

[۲] *Graham Macpherson*

[۳] *Tom Scanlon*

[3] *Cyclic Boundary*

روش DSMC شامل ۵ مرحله ۱-موقعیت دهی اولیه، ۲-حرکت، ۳-شاخص بندی، ٤-برخورد ذرات با یکدیگر و با دیواره و ۵-نمونه گیری از نتایج و محاسبه مقادیر کمیت‌های ماکروسکوپیک می‌باشد.

در نتیجه با توجه به قابلیت‌های مذکور، این حلگر جهت شبیه‌سازی رفتار گاز فضای بالای پمپ مولکولار انتخاب گردیده است.

۲-۲- توان اصطکاکی

توان اصطکاکی را می‌توان از حاصلضرب گشتاور اصطکاکی در سرعت زاویه‌ای سطح در حال چرخش محاسبه کرد که در آن گشتاور اصطکاکی را نیز می‌توان از حاصلضرب نیرو در فاصله تا محور چرخش سطح بدست آورد. نکته‌ای که اینجا وجود دارد در نحوه محاسبه مقدار نیروی ایجاد شده توسط مولکول‌های گازی در رژیم جریانی مختلف می‌باشد. نیروی برشی را می‌توان از حاصلضرب تنش برشی در سطح برخوردی مولکول محاسبه کرد. مقدار نیروی عمودی اعمال‌شده توسط مولکول‌های گاز به یک سطح را می‌توان از حاصلضرب فشار در مساحت سطح تعیین کرد. تنش برشی در ناحیه با رژیم جریانی پیوسته غیرلغزشی و لغزشی را می‌توان از رابطه زیر محاسبه کرد:

$$\tau_{xy} = \mu \frac{\partial u}{\partial y} \qquad (۱)$$

و از رابطه زیر می‌توان مقدار تنش برشی در رژیم جریانی گذرا و پیوسته را از دیدگاه مولکولی محاسبه کرد [۲]:

$$\tau_{xy} = -n\overline{muv} \qquad (۲)$$

در این رابطه n دانسیته عددی، m جرم مولکول، u سرعت محیطی و v سرعت شعاعی می‌باشد. در واقع با دانستن مقدار دانسیته عددی، سرعت‌های محیطی و شعاعی و همچنین مشخص بودن جنس گاز می‌توان مقدار تنش برشی در محدوده کناری سطح مورد نظر را از دیدگاه مولکولی محاسبه کرد. در نتیجه برای به دست آوردن توان اصطکاکی از دیدگاه مولکولی، ابتدا نیاز به یک شبیه سازی مولکولی می‌باشد.

۳- نتایج

۱-۳- شبیه‌سازی فضای بالای پمپ مولکولار

مشخصات هندسی و عملیاتی مربوط به فضای بالای پمپ مولکولار یک ماشین فرضی در جدول (۱) آورده شده است. بر اساس مشخصات ذکر شده در این جدول، شبیه‌سازی فضای بالای پمپ مولکولار صورت گرفته است و پس از به تعادل رسیدن جریان، پروفایل‌های تغییرات شعاعی فشار و سرعت برای آن‌ها با استفاده از حلگر dsmcFoam به دست آمده است.

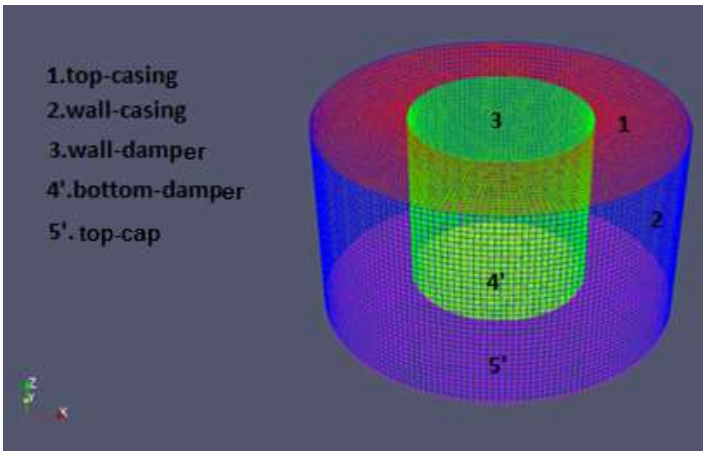
جدول ۱. پارامترهای هندسی و عملیاتی برای هندسه بالایی پمپ مولکولار ماشین فرضی

قطر مولکولی هوا (m)	ویسکوزیته هوا در فشار استاندارد (pa.s)	گاز مورد مطالعه	شعاع کپ بالایی روتور(m)	شعاع بدنه ماشین(m)	شعاع بیرونی روتور (m)
۳/۱۰-۱۰×۷۸	۱/۵-۱۰×۷۸	هوا	۰/۱۱۱۲	۰/۱۱۲۷	۰/۱۱۱۲
دمای گاز بین روتور و بدنه (K)	**ثابت بولتزمن (J/K)**	**جرم مولکولی هوا (gr/grmol)**	**فشار متوسط(Pa)**	**لقی کپ بالا تا دمپر(m)**	**سرعت محیطی روتور (m/s)**
۳۰۰	۱/۲۳-۱۰×۳۸	۲۸	۱/۸	۰/۰۲	۷۰۰
جرم مولکول اورانیم هگزافلوراید (Kg)	**قطر مولکولی اورانیم هگزافلوراید (m)**	**ویسکوزیته اورانیم هگزافلوراید در فشار استاندارد (pa.s)**	**جرم مولکولی اورانیم هگزافلوراید (gr/grmol)**	**فشار متوسط (Pa)**	**دمای کپ بالایی روتور (K)**
۲۸-۱۰×۵۸٤	۱۰-۱۰×٦	۱/۵-۱۰×۹٦	۳۵۲	۱/۸	۳۳۰

هندسه مورد شبیه‌سازی همانطوری که در شکل (۱) نشان داده شده است شامل کپ بالایی روتور، دیواره‌های بدنه و دمپر بالایی موجود در ماشین سانتریفیوژ می‌باشد. تعداد شبکه به کار رفته ۳۲۰۰۰۰، مدت زمان شبیه سازی ۱٦۸ ساعت و مشخصات پردازشگر مورد استفاده جهت شبیه سازی به صورت زیر می باشد:

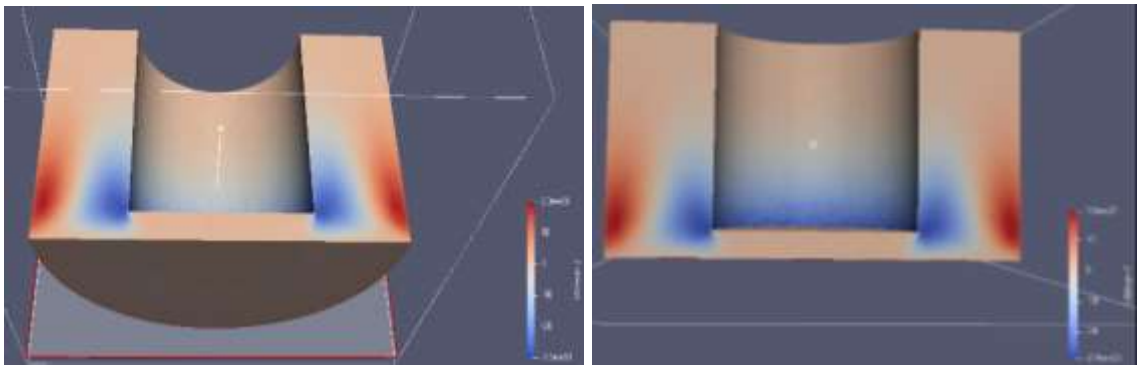
Intel (R) Core™ i7-2630QM CPU@2.00GHz 2.00GHz

اعداد پریم‌دار نشان‌دهنده شرط مرزی می‌باشد که از دید مقابل قابل مشاهده نمی‌باشند و در واقع زیر تصویر قرار دارند.

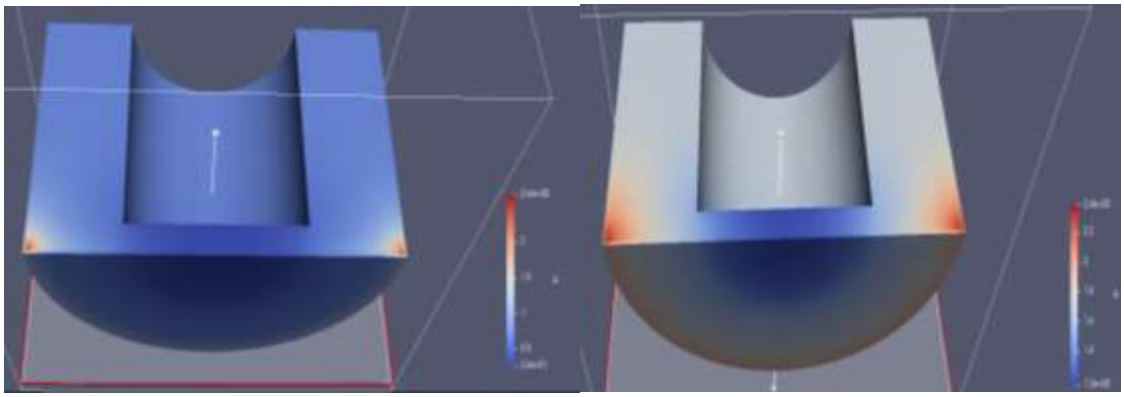


شکل ۱. هندسه و شبکه بندی ایجاد شده توسط نرم افزار گمبیت برای فضای بالای پمپ مولکولار

کانتورهای فشار و سرعت تشکیل‌شده در فضای بالایی پمپ مولکولار در ادامه آورده شده است. همانطوری که در نتایج مشاهده می‌گردد به دلیل حرکت چرخشی روتور یک گرادیان شعاعی فشار در بالای کپ ایجاد می‌گردد که این گرادیان شعاعی با ایجاد فاصله محوری از کپ اثر خود را از دست می‌دهد. همچنین به دلیل برخورد مولکول‌های گاز با بدنه روتور به دلیل ایجاد نیروی گریز از مرکز حاصل از چرخش کپ بالایی روتور، یک حرکت رفت و برگشتی ایجاد می‌گردد که شامل یک جریان با سرعت مثبت در کنار بدنه و یک جریان با سرعت منفی در کنار دمپر می‌باشد (شکل (۲)). با توجه به اینکه جنس گاز می‌تواند در نتایج مربوط به شبیه‌سازی و محاسبه توان اصطکاکی بسیار تأثیرگذار باشد، در این مقاله شبیه‌سازی بر اساس دو شرایط عملیاتی گاز هوا و ترکیب یکسان از گاز هوا و گاز اورانیم هگزافلوراید صورت گرفته است. با توجه به اینکه مولکول‌های اورانیم هگزافلوراید دارای جرم مولکولی و سطح مقطع برخورد بزرگتری نسبت به مولکول‌های گاز هوا می‌باشد، در شبیه‌سازی با ترکیب یکسان از گازهای هوا و اورانیم هگزافلوراید (به دلیل احتمال برخورد بیشتر با کپ بالایی روتور)، تغییرات فشار شدیدتری نسبت به گاز هوای خالص ایجاد می‌گردد (شکل (۳)).



شکل ۲. پروفایل تغییرات محوری سرعت برای فضای بالایی پمپ مولکولار ماشین فرضی با حضور گاز هوا (سمت چپ) با حضور ترکیب یکسان از گاز هوا و اورانیم هگزافلوراید (سمت راست)



شکل ۳. پروفایل تغییرات شعاعی فشار برای فضای بالایی پمپ مولکولار ماشین فرضی با حضور گاز هوا (سمت چپ) با حضور ترکیب یکسان از گاز هوا و اورانیم هگزافلوراید (سمت راست)

۲-۳- نتایج مربوط به محاسبات توان اصطکاکی در فضای بالای پمپ مولکولار ماشین فرضی

بر اساس نتایج بدست آمده از حل مولکولی فضای بالای پمپ مولکولار، می‌توان دانسیته عددی، سرعت چرخشی و سرعت شعاعی شبکه‌های کناری کپ بالای روتور را محاسبه کرد و سپس با استفاده از رابطه محاسبه توان اصطکاکی رژیم جریانی گذرا، مقدار توان را محاسبه کرد. همچنین نیروی مماسی وارد شده توسط مولکول‌ها بر کپ را با حاصلضرب تنش هر شبکه کناری کپ بالا در مساحت آن شبکه می‌توان بدست آورد. نیروی عمودی اعمال شده بر سطح کپ بالایی را می‌توان از حاصلضرب فشار در هر شبکه در سطح مقطع آن شبکه محاسبه کرد. پس از آن مقدار گشتاور ایجاد شده توسط مولکول‌ها بر سطح کپ را می‌توان با حاصلضرب نیروی ایجاد شده در هر شبکه در فاصله آن شبکه تا محور در حال چرخش برای آن شبکه بدست آورد. در انتها مقدار توان اصطکاکی ایجاد شده از برخورد مولکول‌های سطح بالایی کپ را می‌توان از حاصلضرب گشتاور ایجاد شده در هر شبکه در

سرعت زاویه‌ای کپ در حال چرخش بدست آورد. پس از شبیه‌سازی مولکولی جریان بالای پمپ مولکولار و استفاده از رابطه (۲) مقدار توان اصطکاکی برای گاز هوا برابر با ۳ وات محاسبه می‌گردد. با توجه به اینکه جرم گاز اورانیم هگزافلوراید تقریباً ۱۲ برابر گاز هوا می‌باشد، اگر گاز انتخابی به نسبت یکسانی از گاز هوا و هگزافلوراید اورانیوم انتخاب گردد مقدار توان اصطکاکی برابر با ۱۰/۲ وات بدست می‌آید. در جدول زیر مقادیر نیروی مماسی، نیروی عمودی و توان اصطکاکی برای فشار ۱/۸ پاسکال برای فضای بیرونی کپ بالایی روتور آورده شده است:

جدول ۲. مقادیر نیروی مماسی و عمودی در فضای بالای پمپ مولکولار برای فشار متوسط ۱/۸ پاسکال

جنس گاز	P = 1.8 Pa		
	نیروی مماسی (Dyne)	نیروی عمودی (Dyne)	توان اصطکاکی (Watt)
هوا	٦٢٠	١٠٠٠٠	٣
٪۵۰ هوا+٪۵۰ اورانیم هگزافلوراید	٢١٠٠	٨٧٠٠	١٠/٢

همانطوری که از نتایج مشاهده می‌گردد با توجه به این که تغییرات فشار در لایه بالایی کپ، در حالت استفاده از گاز هوای خالص، کمتر از حالتی است که از ترکیب گازهای هوا و اورانیم هگزافلوراید استفاده گردد، لذا مقدار نیروی عمودی (حاصلضرب فشار در سطح مقطع هر شبکه) برای حالتی که از گاز هوای خالص استفاده گردد نسبت به حالتی که از ترکیب آن با اورانیم هگزافلوراید استفاده گردد بیشتر می‌گردد.

٤- 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 بالای پمپ مولکولار را مورد بررسی قرار داد. با تغییر در جنس گاز، فشار و در نتیجه توان اصطکاکی بدست آمده از آن فشار به شدت قابل تغییر می‌باشد به گونه‌ای که برای کپ بالایی روتور در صورت حضور گاز سبک گرادیان شعاعی فشار در لایه نزدیکی کپ شدید نمی‌باشد ولی در صورت حضور ترکیب یکسانی از گازهای هوا و اورانیم هگزافلوراید ، گرادیان شعاعی فشار شدیدی در لایه نزدیک کپ ایجاد می‌گردد. که این پروفایل شکل‌گیری فشار می‌تواند در مقدار توان اصطکاکی محاسبه‌شده با روش‌های مولکولی نیز تأثیرگذار باشد.

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] Kevin.,G ,"A Hybrid CFD-DSMC Model Designed to Simulate Rapidly Rarefying Flow Fields and its Application to Physical Vapor Deposition" ,Journal of Mechanical Engineering, , pp.5-8,2015.

[5]White,.C, "Adaptive Mesh Refinement for an Open Source DSMC Solver", Hypersonic Systems and Technologies, pp.1-4,2015.