بدست آوردن پروفایل تغییرات دمایی دیواره یک سانتریفیوژ با استفاده از روش DSMC

صادق یوسفی نسب*[۱]،عبدالحمید مینوچهر[۲]، احمدرضا ذوالفقاری[۳]، علی نوروزی اقباش[٤]

دانشگاه شهید بهشتی، دانشکده مهندسی هسته‌ای، گروه چرخه سوخت

چکیده

روش عددی DSMC به شبیه‌سازی یک سیستم با توجه به معادلات بولتزمن پرداخته و با استفاده از روابط احتمال، به محاسبه مقادیر مورد نیاز می‌پردازد. گاز تزریق شده به یک سانتریفیوژ بصورت عددی و با استفاده از روش DSMC برای شرایط گاز رقیق شده (عدد نادسن از ۰/۰۰۲ تا ۱۰) مورد بررسی قرار می‌گیرد. به دلیل اینکه در ناحیه خلأ، معادلات ناویراستوکس اعتبار خود را از دست می‌دهند لذا از روش DSMC با استفاده از معادلات بولتزمن در این ناحیه استفاده می گردد. با استفاده از این روش پروفایل چگالی عددی، شار جرمی محوری و پروفایل تغییرات دما در حالتی که یک گرادیان خطی دما روی دیواره در حال چرخش اعمال گردد مورد بررسی و تحلیل قرار می‌گیرد.

واژه‌های کلیدی: *روش عددی، DSMC، گرادیان خطی دما، اعداد تصادفی*

مقدمه

در برخی از رژیم‌های جریان، معادلات ناویراستوکس برای تخمین رفتارهای دینامیک گاز و طبیعت ذرات فاقد اعتبار می‌گردد. یکی از این رژیم‌ها، جریان‌های گاز رقیقی که متوسط پویش آزادی برابر با یا حتی بزرگتر از مشخصه طول جریان داشته باشد می‌باشد. معادلات بولتزمن بطور کلی معادلات حاکم بر کلیه رژیم‌های جریان را در نظر می‌گیرد. ولی حل تحلیلی و عددی معادلات بولتزمن برای جریان‌های مورد استفاده بسیار مشکل می‌باشد. به همین دلیل 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 شبیه‌سازی می‌شود. اساس ایده DSMC برای جریان گاز، از طریق مکانیزم‌های برخورد از طریق یک روش احتمالاتی می‌باشد. این روش بطور متعددی از اعداد تصادفی استفاده می‌نماید. در انتها کمیت‌های ماکروسکوپیک از قبیل سرعت متوسط و دما بعد از نمونه‌گیری از سلول‌بندی‌های صورت گرفته و میانگین‌گیری از آن‌ها قابل محاسبه می‌باشند[۲]. 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 می‌گردد. به همین دلیل، تجزیه و تحلیل چنین جریان ثانویه بوجود آمده در

راستای ارتفاع استوانه، علی‌رغم جریان چرخشی بوجود آمده از چرخش استوانه بسیار مهم است. در سال ۲۰۰۸ پور محمود به بررسی تشکیل جریان‌های چرخشی در سیلندرهای چرخان با مقادیر مختلف نسبت طول به قطر استوانه پرداخت [۳]. Pradhan و Kumaran به بررسی فلاکس جرمی محوری و گرادیان دمایی بر اساس ترم بی‌بعد در راستای شعاعی در سال ۲۰۱۱ 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]. در این مقاله چگونگی تغییرات دمایی روی دیواره سانتریفیوژ و تاثیرپذیری تغییرات دمایی بر چگالی عددی و ماکزیمم مقدار شار جرمی محوری بطور تحلیلی مورد بررسی قرار گرفته است.

تئوری

در مسائلی که دمای دیواره یکسان نمی‌باشد، دمای گاز توسط شرایط منعکس شدن گاز از دیواره تنظیم می‌گردد. بصورتی که مولکول‌های منعکس شده تقریباً همان دمای دیواره را دارا می‌باشند. در نتیجه، دمای متوسط مولکول‌های گاز بعد از برخورد با دمای دیواره برابر است، اما میانگین دمای مولکول‌های قبل از برخورد، با دمای دیواره برابر نمی‌باشد. متوسط دمای یک مولکول منعکس شده از دیواره برابر با T_W می‌باشد. متوسط دمای یک مولکول برخورد کرده با دیواره بستگی به دما در موقعیت شعاعی که در آن، مولکول برخورد اخیر آن رخ داده است دارد. به منظور رسیدن به این هدف، ما احتمال توزیع ($P_0(r)$) را مشخص می‌کنیم، که بصورتی تعریف می‌گردد که $P_0(r)dr$ برابر است با احتمال اینکه مولکول با دیواره برخورد می‌کند بشرطی که در فاصله dr و در محدوده مکانی r برخورد اخیرش رخ داده باشد. میانگین دمای مولکول‌های برخورد کرده به دیواره برابر است با:

$$T_i = \int_0^R P_0(r)T(r)dr \qquad (۱)$$

دمای گاز در دیواره T_{gw}، برابر با میانگین دمای مولکول‌های برخورد کرده و منعکس شده می‌باشد یعنی:

$$T_{gw} = \frac{T_i + T_W}{2} \qquad (۲)$$

روش عددی

Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) یک روش شبیه‌سازی می‌باشد که بصورت متغیر با زمان تعریف می‌گردد و تعداد زیادی مولکول‌های شبیه‌سازی شده به طور همزمان در کامپیوتر دنبال می‌گردند و علاوه بر برخورد مولکول با سطح،

روابط برخوردهای بین مولکولی نیز محاسبه می‌شوند. ذرات درون هر شبکه سلولی به طور متوالی در امتداد یک مسیر خطی پیشروی می‌کنند و سپس برای برخورد با دیواره و سپس برخورد با یکدیگر چک می‌شوند. درجه رقیق بودن گاز با عدد بی‌بعد نادسن که نسبت فاصله آزاد مولکولی به یک بعد مشخصه می‌باشد یعنی بصورت $kn = \frac{\lambda}{h}$، بیان می‌شود. شبیه‌سازی DSMC شامل زیربرنامه‌های Move، Collide، Reflect و Sample می‌باشد. در زیربرنامه اول که مربوط به حرکت دادن ذرات می‌باشد در ابتدا به ذرات یک مقداردهی مکانی و سرعتی اولیه داده می‌شود:

$$r = \sqrt{Rand} \times r_{max} \quad , \; Z = Z_{max} \times Rand \quad , \quad \theta = ۲\pi \times Rand \qquad (۳)$$

برای سرعت‌های اولیه ذرات، سرعتی متناظر با سرعت مولکول‌های گاز واقعی، با توزیع ماکسولین به ذرات گازی داده می‌شود و سپس برای حرکت دادن ذرات از معادله خطی حرکت یعنی $x_{i+1} = x_i + vt_i$ استفاده خواهد شد:

$$V_i = C_{mp}\sqrt{-Ln(Rand)}\sin(۲\pi Rand) \qquad (۴) \quad , \quad C_{mp} = \sqrt{\frac{۲KT}{M}} \qquad (۵)$$

در زیربرنامه برخورد ذرات با یکدیگر(Collide)، سه روش HS، VHS و VSS در شبیه‌سازی مذکور استفاده شده است. تشخیص اینکه از کدام یک از روش‌های برخورد می‌توان استفاده کرد بر اساس قدرت ویسکوزیته (ω) می‌باشد که برای مدل HS این مقدار کوچکتر مساوی ۰/۵ و برای مدل VHS این مقدار بین ۰/۵ تا یک و برای مدل VSS این مقدار برابر یک می‌باشد. همچنین در این مقاله از تکنیکی استفاده شده است که می‌توان بهترین بازه‌زمانی را بدست آورده و مورد استفاده قرار داد[۶] .

در زیربرنامه Reflect ذرات با دیواره برخورد می‌کنند و با توجه به سه شرط مرزی نفوذی، طیفی و دوره‌ای منعکس می‌گردند. در شرط مرزی نفوذی ذرات مستقل از سرعت اولیه برخورد کرده با دیواره عمل می‌کنند و با یک توزیع نیمه‌گوسین متناسب با دمای دیواره مطابق روابط زیر مقداردهی می‌شوند:

$$t_{rem} = \frac{(r - r_{max})}{V_r} \qquad (۶)$$

t_{rem} مقدار زمان باقی‌مانده بعد از برخورد تا رسیدن به بازه‌زمانی مورد نظر است.

$$v_{r_new} = -C_{mp} \times \sqrt{-log(Rand)} \quad , \quad v_{\theta_new} = V_W + Randn \times C_{sd}$$

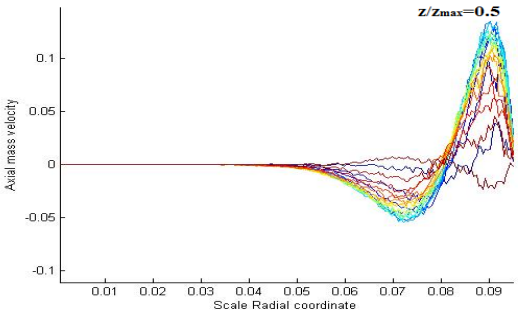
$$v_{z_{new}} = Randn \times C_{sd} \qquad (۷) \quad , \; r_{new} = r_{max} + t_{rem} \times v_{r_{new}} \; , \quad C_{sd} = \sqrt{\frac{kT}{m}} \qquad (۸)$$

بنابراین بیشترین استفاده مدل انتشار وقتی است که مولکول‌های ورودی و بازتاب شده دارای اختلاف دما باشند. در حالت طیفی ذرات با سرعتی برابر سرعت برخورد با دیواره ولی در جهت عکس آن مقداردهی می‌شوند و در حالت دوره‌ای ذرات با شرایطی مثل شرایط مرزی طیفی ولی با تغییر مکان ذره به مکان روبرویی آن دیواره مقداردهی می‌گردند. بعد از تکرار فرآیندهای حرکت، آدرس‌دهی و بررسی برخورد، عمل نمونه‌برداری آماری در زیربرنامه 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 و این خروجی تا رسیدن به تعدادی مشخصی تکرار، اصلاح می‌گردد. شبیه‌سازی استفاده شده جریان گاز را در یک صفحه متقارن (R-Z) در دو بعد مورد شبیه‌سازی قرار می‌دهد.

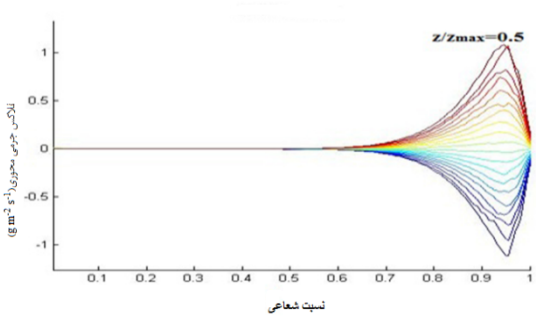
نتایج شبیه سازی

کد نوشته شده توسط روش DSMC، برای هر ۱۰۰ بازه‌زمانی نمونه‌گیری شده و نتایج بعد از گذشت ۷۲۰ ساعت فایل‌های بروزرسانی شده بدست آمده‌اند. همچنین هر ذره شبیه‌سازی شده نماینده ۳×۱۰^{۱۶} مولکول واقعی (F_N) و تمام بدنه استوانه دارای شرایط مرزی نفوذی می‌باشد. شعاع استوانه ۹/۴۹ سانتیمتر و ارتفاع آن ۱۸۵ سانتیمتر در نظر گرفته شده است. این شبیه‌سازی انجام گرفته معادل ۸/۹ ثانیه تحلیل یک استوانه دوار در حالت واقعی می‌باشد که این مدت زمانی، فرصت کافی برای به حالت پایدار رسیدن جریان را فراهم می‌سازد. بین بالا و پایین استوانه یک اختلاف دمای ۲۰ درجه وجود دارد بطوریکه دمای پایین استوانه۳۰۰ درجه کلوین و دمای بالای آن ۳۲۰ درجه کلوین می‌باشد. در شکل ۱ نمودار شعاعی سرعت محوری دور از کلاهک‌های انتهایی ترسیم شده است. در اینجا، دو ناحیه به علت تغییر دمای اعمال شده مشاهده می‌شود: 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 بازگردش جریان در لایه نزدیک به دیواره استوانه و شار بازگردشی، که بسیار قابل توجه‌تر از شار در هسته بوده می‌باشد. همچنین حالت سینوسی بدست آمده نشانگر اینست که جریان ناهمسو در یک لایه جریان رو به بالا و یک لایه جریان رو به پایین رخ می‌دهد. همانطوری که در شکل ۱ مشاهده می‌شود سرعت جرمی محوری در مرکز یعنی جایی که نسبت $\frac{Z}{Z_{max}} = ۰/۵$ می‌باشد ماکزیمم مقدار خود را پیدا خواهد کرد. تاثیر اعمال این تغییر دمایی در حالت بدون اعمال این گرادیان دمایی روی دیواره و فقط با وجود جریان‌های خروجی از دو طرف سانتریفیوژ و یک جریان ورودی از میانه آن در شکل ۲ نشان داده شده است. همانطوری که مشاهده می‌گردد در این حالت جریانی سینوسی به چشم نمی‌خورد و فقط نشان دهنده دو جریان رو به بالا و پایین بطور همزمان در نیمه‌های بالایی و پایینی استوانه چرخان به طرف موقعیت خروجی ذرات در

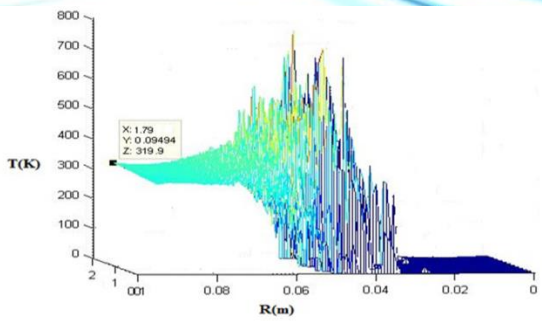
نسبت ارتفاع‌های مختلف می‌باشد. تغییرات پروفایل دمایی حاصل از شبیه‌سازی در شکل‌های ۳ و ۴ نشان داده شده است. همانطوری که از شکل مشخص است تغییرات دمایی در هر سلول در مرکز استوانه دارای نوسانات دمایی می‌باشد و با نزدیک شدن به دیواره، یک رفتار خطی مطابق با دمای دیواره را به خود می‌گیرد. شکل ۳ رفتار دما در بالای استوانه و شکل ۴ رفتار دمای ذرات در پایین استوانه را نشان می‌دهد که اثر ۲۰ درجه اختلاف دمای اعمال شده بین بالا و پایین استوانه به کمک برنامه DSMC کاملا به چشم می‌خورد که این موضوع میزان دقت و ظرافت این روش را نشان می‌دهد. نوسانات بوجود آمده در قسمت میانی، به دلیل دانسیته پایین در سلول‌های مربوطه می‌باشد بطوریکه دقت نمونه‌برداری را پایین می‌آورد و نتایج دقیقی را بدست نمی‌آورد. دانسیته پایین، بدلیل اعمال نیروی گریز از مرکز در این قسمت بوجود می‌آید که ذرات را به سمت دیواره حرکت می‌دهد و باعث ایجاد دانسیته پایین در قسمت میانی می‌گردد. نمودارهای چگالی عددی در اولین فایل نمونه‌گیری شده و در آخرین فایل بروزرسانی در شکل‌های ۵ و ۶ آمده است. همانطور که ملاحظه می‌گردد چگالی عددی در ابتدا تراکم زیادی روی دیواره نداشته و ذرات گاز شبیه‌سازی شده در محیط، پراکندگی بیشتری دارند (شکل ۵) و با گذشت زمان و اعمال نیروی گریز از مرکز، باعث تراکم ذرات شبیه‌سازی شده به سمت دیواره روتور می‌گردد(شکل ۶). علت ایجاد شیب ایجاد شده بر روی محور ارتفاع استوانه، وجود گرادیان دمای اعمال شده می‌باشد، به آن دلیل که جایی که دما بیشتر است انرژی جنبشی ذرات در آن ناحیه بیشتر می‌گردد و باعث تحرک ذرات از آن ناحیه و کاهش چگالی عددی آن می‌گردد.



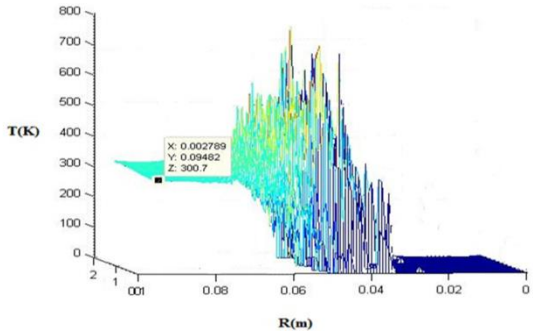
شکل ۱. نمودار سرعت جرمی محوری بر حسب شعاع با اعمال تغییرات دمایی



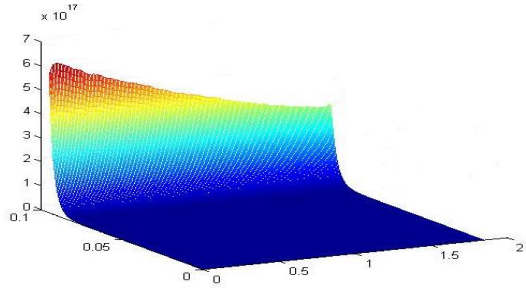
شکل ۲. نمودار شار جرمی محوری بر حسب ξ بدون اعمال تغییرات دمایی $\left(\xi = \mathcal{A}^2\left(1-\frac{r^2}{R^2}\right)\right)$



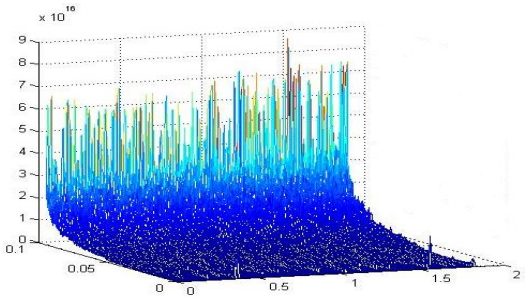
شکل۳. پروفایل دما و نشان دادن اثر دما در بالای دیواره استوانه (دمای ۳۲۰درجه کلوین)



شکل ٤. پروفایل دما و نشان دادن اثر دما در پایین دیواره استوانه (دمای ۳۰۰درجه کلوین)



شکل ٥. نمودار چگالی عددی در اولین مرحله نمونه‌برداری



شکل٦. نمودار چگالی عددی بعد از آخرین مرحله بروزرسانی فایل نمونه‌برداری

مراجع

[1] Bird, G.A.," Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows," Oxford Univ. Press, New York, 1994.

[2] 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.

[3] Pourmahmoud, N.,“Rarefied Gas Flow Modeling inside circular cylinder,” American J. of Engineering and applied sciences, vol. 1,pp.62-65, 2008.

[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.

[۶] یوسفی نسب،ص.، مینوچهر، ع.ح و نوروزی،ع. ، " مقایسه روش‌های مختلف برای محاسبه مقدار ماکزیمم پله زمانی در محاسبات DSMC برای یک سانتریفیوژ در ابعاد واقعی،" نخستین کنفرانس دوسالانه تخصصی چرخه سوخت و مواد هسته ای ایران،۴-۵ دی ماه ۱۳۹۲.